Modélisation astro-chimique

J. Le Bourlot^a

Observatoire de Paris & Université Paris-Diderot Paris 7, France

Abstract. The chemical processes at work in the Interstellar Medium are extremely varied. Some typical models are presented to illustrate some of the chemical routes, in the light of specific examples of astrophysical media.

Résumé. Les mécanismes chimiques à l'œuvre dans le Milieu Interstellaire sont remarquablement variés. Quelques modèles typiques sont présentés qui permettent d'illustrer ces mécanismes sur des exemples caractéristiques.

1. INTRODUCTION

On trouve des molécules partout dans l'Univers, y compris dans des environnements où les conditions physiques semblent particulièrement défavorables. Le satellite Planck n'a pas encore livré les secrets de l'Univers primordial, mais nous montre déjà des images saisissantes de notre Galaxie (Figure (1)) : il y a du gaz partout !

Ce gaz n'est pas seulement ionisé ou atomique, mais peut contenir de nombreuses molécules. Le satellite Herschel nous ouvre en ce moment l'accès à une large fenêtre sur le ciel infrarouge avec une sensibilité encore jamais atteinte (Figure (2)).

Ici, nous nous limiterons au domaine traditionnel de l'étude du Milieu Interstellaire (MIS). Nous ne parlerons donc pas des atmosphères d'étoiles, ni des nuages intergalactiques ni de planètes. Mais même en se restreignant de la sorte, la variété des conditions physiques rencontrées et des problèmes à résoudre reste d'une richesse considérable.

Figure 1. La Galaxie vue par Planck.

^ae-mail: Jacques.Lebourlot@obspm.fr

Figure 2. Forêt de raies moléculaires observée dans Orion.

1.1 Les Milieux Moléculaires

Dans le MIS, les molécules qui parviennent à se former et à survivre en assez grand nombre pour être observables depuis la Terre se retrouvent dans des environnements très variés. On donne ici quelques illustrations rapides et purement qualitatives avant de préciser un peu mieux les conditions physiques typiques que l'on peut rencontrer.

– Cœurs sombres pré-stellaires.

Ce sont des nuages de gaz éloignés de toute étoile chaude et suffisamment denses pour que le rayonnement ultraviolet ambiant de la Galaxie n'y pénètre pas. Les molécules y sont à l'abri des processus de destruction les plus violents ce qui permet la formation d'espèces inhabituelles sur Terre telles les cyanopolynes (e.g. HC_9N). A droite, le, « Sac de charbon » (image D. Kodama, Tivoli farm, Namibia).

– Régions de photo-dissociation.

Ces régions sont exposées directement au rayonnement ultraviolet des étoiles et sont à la limite entre le gaz ionisé des régions « H II » et les régions sombres. Ce sont les plus actives chimiquement du fait de l'apport d'énergie radiative par le rayonnement. Ce sont aussi les régions les plus brillantes et donc les plus faciles à observer. A gauche la région H II RCW 120 émergeant du gaz moléculaire (Anderson et al. [1]).

Le terme de PDR est souvent réservé (par abus de langage) aux zones situées à proximité directe d'une source de rayonnement intense (étoile jeune ou noyau actif de galaxie par exemple).

– Nuages diffus.

Ces régions sont aussi dominées par les photons, mais situées dans des environnements beaucoup moins tourmentés. Ce sont typiquement les « cirrus » interstellaires observés en absorption dans le spectre d'étoiles chaudes^a, ou en émission à grande longueur d'onde (quelques centaines de μm) grâce à leurs poussières froides. A droite, la région de Polaris vue par Herschel (Miville-Deschênes et al. [2]).

^a Les étoiles les plus chaudes, de type O ou B ont relativement peu de raies dans leur spectre. Les très fines raies d'absorption interstellaires sont alors plus faciles à détecter et mesurer. De plus, ces étoiles intrinsèquement brillantes permettent d'observer du gaz plus lointain. Elles ont en revanche le défaut d'être rares.

– Interactions jet-milieu moléculaire.

Les objets pré-stellaires associent à la proto-étoile en train de se former un disque d'accrétion (par où la matière s'accumule sur l'objet central) et un jet de matière (qui permet « d'évacuer » le moment cinétique du gaz). Cette matière éjectée interagit avec les restes du nuage moléculaire ayant donné naissance à l'étoile. On y observe des molécules très excitées, dans des états fortement hors d'équilibre. L'influence du rayonnement est bien plus faible que celle des collisions, ce qui permet souvent de négliger les effets de transfert de rayonnement. Ci dessous HH 111.

– Disques.

Enfin, dans les disques d'accrétion eux-mêmes – qui peuvent se trouver autour d'étoiles jeunes comme aux cœurs des Noyaux Actifs de Galaxies – la matière peut être suffisamment protégée pour permettre la formation de molécules. La densité est alors beaucoup plus forte que dans les nuages interstellaires, et les sources de rayonnement plus violentes (et mal connues). A gauche, un « proplyd » (étoile en formation) dans Orion vu par le HST (Hubble Space Telescope).

1.2 Conditions physiques

On voit que les conditions physiques régnant dans ces milieux sont très variées. Le tableau (1) propose quelques ordres de grandeur. D'autres quantités, plus difficiles à classer, sont discutées dans les paragraphes qui suivent (champs magnétiques, temps caractéristiques, ...).

Irradiation. Dans ce tableau, l'irradiation provient de sources extérieures au milieu qui injectent de l'énergie dans le gaz. On distingue le rayonnement électromagnétique et les rayons cosmiques.

Tableau 1. Conditions typiques dans le Milieu Interstellaire.

	Cœurs sombres	PDR - Nuages diffus	Jets - Chocs	Disques
Densité n_H (cm ⁻³)	10 ³ –10 ⁶	10 ² –10 ⁴	10 ² –10 ⁶	10 ⁴ –10 ¹²
Température T (K)	8–15	80–10 ³	10 ² –10 ⁴	10–100
Irradiation	très faible	forte	faible	très faible à forte

Photons. L'apport principal est le rayonnement ultraviolet moyen provenant de l'ensemble des étoiles proches de l'objet (jusqu'à la coupure de Lyman à 912 Å). Il peut être intense au voisinage d'étoiles jeunes et massives, mais est atténué rapidement par les poussières présentes dans le milieu. Le « champ moyen interstellaire » reste mal connu ; un bon modèle est celui de Mathis et al. [3], même si la partie infrarouge doit être profondément revue. Dans les cœurs sombres ou les couches les plus profondes des disques d'accrétion l'essentiel du rayonnement extérieur a été absorbé. Seules quelques sources indirectes maintiennent un fond résiduel de photons ionisants (« photons secondaires », ci-dessous). Dans les régions de formation d'étoiles intense, ce rayonnement ultraviolet est absorbé et ré-émis par les poussières dans l'infrarouge, qui peut constituer une source secondaire importante d'énergie. Enfin, le rayonnement X joue aussi un rôle près de certaines sources particulières (notamment les noyaux actifs de galaxies – AGN).

Photons secondaires. La longueur de pénétration des rayons cosmiques est élevée (10²⁴ cm⁻² typiquement). L'ensemble du milieu est donc baigné de ce fond de rayonnement ionisant constant. La plupart des électrons arrachés le sont à de l'hydrogène, soit atomique, soit moléculaire (en particulier au sein des nuages sombres).

Typiquement, les électrons libérés par ce processus d'ionisation directe ont une énergie de l'ordre de 30 eV, ce qui est très supérieur à l'énergie cinétique moyenne des molécules dans un gaz ne dépassant pas quelques dizaines de kelvin.

Les électrons vont donc progressivement se thermaliser par collision avec les molécules du gaz, en très grande majorité du H₂. C'est le principal processus de chauffage au cœur des nuages denses.

Ces collisions sont suffisamment énergétiques pour pouvoir exciter des niveaux électroniques de H₂ (essentiellement les niveaux électroniques B et C – bandes de Lyman et de Werner). Compte tenu de la faible densité, la désexcitation est principalement radiative, la molécule retournant à son état électronique fondamental en émettant un photon ultraviolet d'une dizaine d'électron-volt en moyenne.

Ces photons UV participent activement à l'ionisation du gaz dans les régions internes, et on a pu calculer que les photons secondaires ainsi créés sont environ mille fois plus efficaces pour ioniser C ou S ou bien dissocier CO que ne le sont les rayons cosmiques directs. Il s'agit donc d'un processus essentiel pour la chimie des régions sombres.

Rayons cosmiques. Leur flux est beaucoup moins intense en bord de nuage que celui des photons, mais leur longueur de pénétration est en moyenne mille fois supérieure. Ils fournissent donc une source d'ionisation s'étendant de façon uniforme jusqu'au plus profond des objets étudiés. On peut joindre à ces particules ionisées (principalement des protons de grande énergie) un éventuel rayonnement gamma.

Composition. En ordre de grandeur, le gaz est constitué de 90 % d'hydrogène et de 10 % d'hélium (en nombre de particules). Si la gravitation domine, c'est tout ce qu'il suffit de savoir. Mais dans la plupart des cas les éléments « lourds » (c'est-à-dire à partir du lithium) jouent un rôle fondamental dans l'équation d'état du gaz, principalement en contrôlant les processus de refroidissement. Dans ce cas, deux effets principaux sont à prendre en compte :

- L'abondance totale de « métaux ». Elle est typiquement de 10⁻⁴ en nombre par rapport à l'hydrogène dans le voisinage solaire. Les principaux éléments présents sont l'oxygène, le carbone et l'azote, suivis par le soufre, le silicium et quelques autres.

- Le rapport d’abondance entre l’oxygène et le carbone. Dans les milieux où peuvent se former des molécules saturées, une part importante de C et O sont « piégés » sous forme de CO et CO₂ (éventuellement sous forme de glaces à la surface des grains, et en ajoutant alors H₂O). Il reste dans le gaz une partie de l’élément le plus abondant, ce qui donne lieu à une chimie dominée par l’oxygène (cas le plus fréquent) ou dominée par le carbone (cas – par exemple – de certaines enveloppes d’étoiles jeunes).

Champ magnétique. Le champ magnétique moyen dans le milieu diffus est de l’ordre de 6 μG au voisinage solaire et environ 4 à 5 fois plus important vers le centre galactique. Dans les nuages moléculaires plus denses, on a une relation d’échelle approximative :

$$B \propto n_H^{1/2}.$$

Les mesures sont difficiles, mais des progrès importants ont été faits récemment. On se reportera à Heiles & Crutcher [4] pour le milieu neutre de notre Galaxie, et à Beck [5] pour les galaxies en général.

Temps caractéristiques. Suivant les régions, les temps caractéristiques mis en jeu sont très différents. En pratique, une analyse au cas par cas est nécessaire avant de se lancer dans une modélisation détaillée, et il est essentiel d’y réfléchir en fonction de la question que l’on se pose (inutile de suivre le détail d’une évolution temporelle si on n’est intéressé que par l’état stationnaire par exemple). On peut cependant examiner un cas particulier qui donne une idée de la difficulté des problèmes rencontrés, celui de la formation de l’hydrogène moléculaire.

Le cœur des nuages est moléculaire. Il faut donc que toute destruction d’une molécule d’hydrogène soit contrebalancée par sa reformation. Le principal processus de destruction est l’ionisation par les rayons cosmiques :

Le taux moyen de cette réaction est de $k_1 = 5 \cdot 10^{-17} \text{ s}^{-1}$, ce qui donne un temps caractéristique de l’ordre de 600 Millions d’années.

Sans rentrer dans les détails, la formation de H₂ est un processus catalytique à la surface des grains qui nécessite que des atomes d’hydrogène adsorbés se déplacent de sites en sites pour se rencontrer. Ce déplacement se fait avec une fréquence typique de 10^{10} s^{-1} .

On voit donc que le rapport des temps les plus extrêmes mis en jeu est d’environ 10^{27} ! Heureusement, on peut intégrer ces processus élémentaires pour calculer un taux moyen de formation de H₂ (voir Le Petit et al. [6]). Au bord de PDR intenses, comme S140 par exemple, on trouve un temps caractéristique de l’ordre de 20 h en calculant le rapport

$$\tau = \frac{n(\text{H}_2)}{\left. \frac{dn(\text{H}_2)}{dt} \right|_{\text{form}}}$$

où $\left. \frac{dn(\text{H}_2)}{dt} \right|_{\text{form}}$ est le taux de formation de H₂ total (principalement sur les grains).

2. MODÉLISATION DES PDR

L’expérimentation directe étant impossible, il faut recourir à l’utilisation de modèles pour :

- Tenter d’interpréter les observations (utilisation d’un code comme outil d’inversion).
- Réaliser de l’expérimentation « in silico » (utilisation d’un code pour tester de la physique).

Pour les régions de photodissociation plusieurs équipes disposent d’outils performants. Un certain nombre d’entre eux sont décrits dans Roellig et al. [7]. En France, notre équipe de l’Observatoire

Figure 3. La nébuleuse de la Rosette vue par Herschel. <http://www.herschel.fr/>.

de Paris a développé un code disponible sur demande et décrit dans Le Petit et al. [8], Goicoechea & Le Bourlot [9], Gonzalez Garcia et al. [10], Le Petit et al. [6].

2.1 Région de Photodissociation

Modèles 1D ou non ? Dans l'idéal, les modèles devraient tenir compte explicitement de la grande complexité de structure immédiatement évidente sur les observations. Comme on peut le voir sur la figure (3), cela exigerait des modèles à 3 dimensions et une structure en densité probablement fractale (Elmegreen [11]). Dans la pratique, il n'est alors plus possible de décrire correctement le détail de la micro-physique et l'ensemble des phénomènes couplés. On est donc le plus souvent contraint de se contenter de modèles à une dimension, n'ayant qu'un rapport lointain avec la réalité géométrique, et qui ont donc un statut analogue – pour prendre une analogie mécanique – à une éprouvette métallique de laboratoire sur laquelle on tire de façon contrôlée par rapport à la réaction d'un carter cylindre lors d'un « crash test ».

Modèles stationnaires ou non ? De la même façon, il faudrait aussi considérer que le milieu interstellaire est très loin de l'équilibre et que des phénomènes violents s'y déroulent en permanence. Des modèles dépendant du temps semblent donc s'imposer.

Dans certains cas cependant, une évaluation fine des temps caractéristiques permet de voir qu'un bon nombre de processus ont pu relaxer durant la durée de vie de l'objet étudié. Dans ce cas, un modèle stationnaire permet de décrire l'état asymptotique vers lequel l'objet réel est en train d'évoluer et dont il est – on peut l'espérer – raisonnablement proche.

Là encore, l'économie de ressources de calcul peut être réinvestie dans une meilleure description de la physique.

Choix imposé par le transfert de rayonnement. Une «PDR» est par construction une région dominée par les photons. On ne peut donc pas faire l'impasse sur le transfert de rayonnement. Or c'est un problème lourd, complexe et surtout «non local». Des régions spatialement éloignées du gaz se retrouvent couplées physiquement si la profondeur optique entre elles est de l'ordre de l'unité. Dans ce cas en effet, l'énergie radiative émise en un point est absorbée à l'autre. De plus, dans un milieu très dilué comme celui-ci cette énergie radiative est émise principalement dans des raies atomiques et moléculaires et pas seulement dans le continu. Le problème est donc redoutable.

En pratique, c'est donc d'abord le choix de l'effort fait pour résoudre les problèmes de transfert de rayonnement qui décidera du type de modèle et de la sophistication du reste de la physique. Un transfert solide impose un modèle 1D et stationnaire si l'on veut aussi pouvoir étudier de près la chimie du milieu et donc connaître son équation d'état.

2.2 Chimie en phase gazeuse

Par comparaison avec des conditions de laboratoire, le milieu est extrêmement dilué. Typiquement, le temps moyen entre deux collisions est de l'ordre de la semaine. . . Il ne peut donc se produire que des collisions binaires. De plus, la température cinétique chute brutalement dès que le rayonnement extérieur est écranté. Les seules réactions possibles dans ces conditions résultent donc de réactions exothermiques sans barrière d'activation. Près du bord de la nébuleuse, où la température peut atteindre plusieurs centaines de degrés, une chimie plus riche peut se développer.

A titre d'exemple, nous considérerons ici le cycle de formation de l'eau en phase gazeuse, dans une région «proche» du bord du nuage, mais où l'hydrogène est déjà sous forme moléculaire.

Le flux de rayons cosmiques et les photons UV résiduels maintiennent un degré d'ionisation du gaz très faible mais non nul; mettons de l'ordre de 10^{-5} . Dans ces conditions, il y a toujours une certaine quantité d'ions H^+ présents dans le milieu. On peut alors par échange de charge ioniser l'oxygène :

Cette réaction est en effet quasi-résonnante¹ (par hasard), avec une barrière d'activation de seulement 232 K. Dès qu'il est formé, l'ion oxygène va réagir avec l'hydrogène moléculaire ambiant pour former l'ion H_3O^+ :

Toutes ces réactions sont rapides et sans barrières.

L'ion H_3O^+ peut alors se recombiner avec un électron et donner soit le radical OH, soit la molécule H_2O :

Les rapports de branchement de cette recombinaison dissociative sont encore discutés, mais semblent donner entre un quart et un tiers d'eau par électron. Ce mécanisme, postulé depuis longtemps, a été magnifiquement confirmé par les observations récentes de l'instrument HIFI à bord du satellite

¹ Les potentiels d'ionisation de l'hydrogène et de l'oxygène atomique sont en effet respectivement de 13.598 eV et de 13.618 eV.

Figure 4. Observations de spectres en absorption de OH^+ et H_2O^+ par Herschel (Gérin et al. [12]).

Herschel qui vient de détecter les ions OH^+ et H_2O^+ dans le milieu interstellaire (Gérin et al. [12]), voir Figure (4).

Ce mécanisme global est très général. Sous l'action de l'environnement extérieur, un élément réactif est créé dans le gaz, en général un ion. Une chaîne de réactions se produit ensuite jusqu'à ce que l'ion soit perdu par une recombinaison. Deux grands types de chimie sont alors possibles :

- Par transfert de charges, qui favorise plutôt la présence de radicaux
- Par transfert de protons (via l'ion moléculaire H_3^+) qui favorise plutôt la formation de molécules saturées.

2.3 Bistabilité

2.3.1 Principe

Le type de chimie dominant dépend du degré d'ionisation du milieu. En effet, la perte d'un électron est beaucoup moins rapide avec l'ion H^+ qu'avec l'ion H_3^+ :

La première réaction a un taux de $3.5 \cdot 10^{-12} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ à 300 K alors que la deuxième a un taux de $7.2 \cdot 10^{-8} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$. Si le degré d'ionisation est (relativement) élevé (« HIP »: High Ionisation Phase), l'ion moléculaire est détruit avant d'avoir pu jouer un rôle significatif et les échanges de charges dominent. S'il est bas (« LIP » Low Ionisation Phase) l'échange de proton domine.

Il se trouve que pour certaines conditions physiques les deux types de chimie peuvent exister. Dit de façon plus rigoureuse, les équations différentielles d'évolution thermo-chimiques qui décrivent l'état du gaz admettent plusieurs points fixes. En fonction des conditions initiales du gaz, et pour un **même** environnement la chimie peut alors évoluer vers l'un ou l'autre de deux états stationnaires stables. Dans un nuage étendu, on peut même rencontrer de façon générique des régions dans un état en contact avec d'autres régions dans l'autre état (Le Boulbot et al. [13]).

Figure 5. Mécanismes réactionnels de la bistabilité interstellaire.

L'observateur (qui intègre l'ensemble de l'émission du rayonnement le long de la ligne de visée) voit alors un mélange des deux états qu'il n'est pas du tout facile d'inverser. De plus, la région de séparation des deux états (la frontière) donne lieu à des phénomènes de réaction-diffusion (l'état le plus stable l'emportant progressivement sur le moins stable) où des espèces normalement très peu abondantes peuvent survivre pendant un temps considérable.

Ce mécanisme est l'un de ceux permettant d'expliquer certaines observations déroutantes au premier abord : en effet dans l'état HIP le carbone se partage entre C et CO assez équitablement (rapport C/CO de quelques dixièmes) et l'oxygène est exclusivement sous forme de O , alors que dans l'état LIP CO l'emporte par plus de trois ordres de grandeur sur C et l'oxygène est sous forme de O_2 . Or, contrairement à ce que prédisaient de nombreux modèles, il se trouve que O_2 est extraordinairement difficile à observer (voire complètement absent dans la plupart des objets) et que l'on trouve des quantités importantes de carbone atomique même au sein des nuages moléculaires.

On peut proposer comme explication que le taux d'ionisation du gaz interstellaire est sensiblement plus élevé qu'on ne l'a d'abord estimé, maintenant une fraction significative de gaz dans l'état HIP.

2.3.2 Bistabilité - schéma réactionnel

Un réseau très simplifié permet de comprendre l'essentiel du mécanisme réactionnel menant à la bistabilité interstellaire. Toutes les conditions physiques (paramètres de contrôle) sont fixes (densité, température, flux ionisant, etc.).

L'essentiel de l'ionisation est donné, directement ou indirectement, par les rayons cosmiques (voir la figure 5). La production de H^+ et de H_3^+ se fait donc à un taux constant. Le taux de destruction, lui, dépend du degré d'ionisation. Si ce dernier est élevé (HIP), H^+ domine, sinon H_3^+ est abondant (LIP).

Le flux résiduel de photons secondaires (voir section 1.2) assure également un taux de destruction constant de la molécule CO , et ce sont ses mécanismes de reformation qui font la différence. Dans tous les cas également, l'abondance de l'oxygène atomique reste grande (c'est le réservoir de l'élément, du fait de sa plus grande abondance que celle du carbone dans la plupart des milieux).

LIP. H_3^+ réagit rapidement avec O pour former des ions moléculaires OH^+ , H_2O^+ et H_3O^+ après réaction avec H_2 . Par recombinaison dissociative, on a donc une production abondante de OH (et de H_2O). Ce radical réagit facilement avec C et O pour donner CO et O_2 . Ce dernier redonne également CO par réaction avec C.

On a donc un milieu où le carbone atomique ne peut survivre ; le rapport C/CO est donc faible. En revanche, l'abondance de O_2 est élevée.

HIP. Du fait de l'abondance d'électrons, H_3^+ est détruit rapidement. La voie de reformation de CO par réactions neutre-neutre ci-dessus est donc fermée. Le carbone peut alors survivre un certain temps. Cela permet son ionisation par les photons secondaires à un taux faible mais significatif. Dès que cette nouvelle charge a été créée, le C^+ réagit avec les atomes métalliques «M» (au sens astrophysique du terme) présents (S, Si, Fe, Mg, etc.) et la charge positive se retrouve piégée sur des espèces pour lesquelles la recombinaison électronique est de plus en plus difficile. Cela contribue à maintenir un degré d'ionisation élevé.

On a donc un rapport C/CO élevé, et simultanément une abondance de O_2 très faible, faute de voie de formation efficace.

D'autres espèces sont également très sensibles à la bistabilité, en particulier dans la chimie du soufre (rapport CS/SO par exemple). Les processus de deutération et d'enrichissement isotopiques, qui sont très sensibles à de faibles variations de température, subissent aussi des variations importantes. Les mécanismes peuvent s'analyser suivant la même logique à partir de celui-ci ; le couplage entre la chimie et le bilan thermique offrant un degré de liberté supplémentaire.

Notons que ce mécanisme est très sensible au degré d'ionisation du milieu. Si des processus de neutralisation (par collision avec les grains par exemple) sont efficaces, la zone de bistabilité peut être déplacée dans des domaines peu pertinents, mais inversement, des taux d'ionisation (par les rayons cosmiques par exemple) plus importants peuvent renforcer l'effet.

2.4 Deutération

L'abondance cosmique du Deutérium est d'environ $1.5 \cdot 10^{-5}$ par rapport à l'hydrogène. On pourrait donc s'attendre à ce que l'abondance des molécules deutérées soit dans la même proportion par rapport à la molécule hydrogénée correspondante. Or on observe très couramment des rapports très largement supérieurs, allant parfois jusqu'à la parité.

On a même détecté des espèces multi-deutérées. Ainsi, tous les substitués de l'ammoniac ont été observés (voir Figure (6) et Roueff et al. [14]). L'efficacité de cet enrichissement isotopique est liée à la différence de point zéro des espèces isotopées intervenant dans la formation. Ici, l'agent d'enrichissement est encore une fois l'ion H_3^+ . Les substitués les plus lourds ont un niveau fondamental d'énergie plus bas (voir la Figure (7)). Ainsi, la réaction

a une exothermicité de 232 K^2 . Dès qu'un atome de deutérium se trouve piégé dans une molécule d'hydrogène (ce qui est le sort ultime de l'essentiel d'entre eux dans les régions moléculaires) il va progressivement être transféré et concentré dans des ions de plus en plus lourds. Finalement, les molécules sont elles mêmes enrichies via des réactions du type :

Les proportions exactes de chaque substitué dépendent de façon très fine des conditions physiques dans le milieu ambiant. On dispose ainsi d'une sonde très précise de température (principalement) et de densité au cœur des nuages sombres.

² Une description complète des réactions de deutération peut être trouvée dans Roueff et al. [14].

Figure 6. Détection de ND_3 (tiré de Lis et al. [15]).

Figure 7. Substitués isotopiques de H_3^+ (tiré de Phillips & Vastel [16]).

2.5 Un exemple : M82

La modélisation de la chimie peut aider à comprendre la structure et l'évolution d'objets parfois complexes. Un bon exemple est la galaxie Messier 82 (Figure 8), galaxie à forte flambée d'étoiles qui présente une activité importante et donc où le flux de rayonnement ultraviolet et celui de rayons cosmiques sont nettement plus importants que dans notre galaxie (environ d'un facteur 100 à 1000).

Figure 8. Image composite de M82 (HST + Spitzer + Chandra).

Le débat est encore ouvert pour savoir si la seule formation d'étoiles suffit à expliquer les observations ou s'il faut faire appel également à une contribution du noyau de la galaxie.

Une analyse purement chimique, sans apporter de réponse définitive, permet de mieux connaître la répartition de la masse du gaz dans la galaxie. En effet, on y a détecté de nombreuses molécules, et notamment les ions moléculaires CO^+ , HCO^+ et HOC^+ (voir Fuente et al. [17]). Le rapport d'abondance observé de $\text{HCO}^+/\text{HOC}^+$ est largement supérieur à 1. A priori, on aurait pu penser que les processus chimiques de formation et de destruction ne différencient pas les deux isomères ; ce n'est pas le cas. En effet, pour HCO^+ deux voies de formation distinctes sont possibles :

- Une première est efficace dans les régions chaudes et ionisées, proches de la surface des nuages.
- Une deuxième, plus lente mais significative, produit également HCO^+ au cœur des nuages.

Il se trouve que cette deuxième voie est fermée pour HOC^+ . Les rapports d'abondance observés exigent donc qu'il existe un grand nombre de nuages de faible taille présentant un rapport surface sur volume important et permettant d'expliquer l'abondance observée de HOC^+ . Ces zones de surface produisent également du HCO^+ en quantité grossièrement équivalente. Pour expliquer la surabondance de ce dernier, il faut en plus supposer l'existence de quelques nuages très massifs, présentant des régions sombres importantes où HCO^+ seul peut se former.

Le mécanisme est le suivant ; le calcul est fait pour une PDR dense ($4 \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$) et épaisse (atténuation totale de 50 magnitudes) :

- En bord de nuage, le gaz est chaud (plus de 1000 K) et (relativement) ionisé (quelques 10^{-4}). Une chimie « neutre-neutre » active peut se développer. H_2O et OH sont abondants et réagissent rapidement avec le C^+ majoritaire (il y a encore beaucoup de rayonnement UV) pour former CO^+ . Celui-ci réagit rapidement avec H_2 pour donner indifféremment HCO^+ et HOC^+ . La destruction (rapide également) se fait par recombinaison dissociative.

- En pénétrant plus profondément dans le nuage, la température diminue fortement. Beaucoup de réactions « neutre-neutre » avec barrière d'activation sont donc inhibées³, ce qui coupe le chemin ci-dessus. Le degré d'ionisation reste élevé; les électrons détruisent H_3^+ , bloquant la mise en place d'une chimie « sombre ». L'abondance de HCO^+ et HOC^+ est faible.
- Enfin, au cœur du nuage les photons ont complètement disparu et le degré d'ionisation a baissé suffisamment pour que H_3^+ survive. Les réactions par échange de proton sont donc actives, formant CO rapidement à partir de O_2 , OH, CH, C_2 , etc. CO réagit alors très efficacement avec H_3^+ pour donner HCO^+ . Il se trouve que le rapport de branchement en faveur de ce dernier est 10 fois plus grand qu'en faveur de HOC^+ . Le déséquilibre isomérique est ainsi créé.

Fuente et al. [17] en déduisent que la formation d'étoile intense dans M82 est déjà ancienne puisque la plupart des complexes moléculaires supermassifs ont déjà été « consommés ».

2.6 Problèmes

Certaines espèces sont observées très couramment dans pratiquement tous les milieux et résistent aux modèles que nous venons de décrire. L'exemple le plus célèbre est celui de CH^+ , une des premières molécules observées dans le Milieu Interstellaire. La seule voie de formation est :

Malheureusement, cette réaction est endothermique avec une barrière de 4640 K. Elle est donc très inhibée dans la plupart des milieux. On peut éventuellement envisager d'utiliser une partie de l'énergie interne de la molécule d'hydrogène pour « passer » la barrière (suivant un mécanisme dont le détail reste à déterminer), mais le gain éventuel est au maximum d'un ordre de grandeur sur l'abondance calculée alors qu'il en faut trois. D'autres mécanismes plus énergétiques doivent donc intervenir.

Deux mécanismes sont couramment proposés pour fournir l'énergie nécessaire :

- Les chocs : en effet, les estimations de vitesses typiques dans le Milieu Interstellaire donnent des valeurs largement supersoniques. On s'attend donc à ce qu'une partie au moins de l'énergie cinétique injectée dans le gaz soit dissipée par des chocs, éventuellement MHD (du fait de la présence d'un champ magnétique ambiant).
- La dissipation de la turbulence : les nombres de Reynolds typiques estimés dans les nuages peuvent dépasser 10^{10} , et de nombreuses preuves du caractère turbulent du gaz existent (voir Section 4). La dissipation intermittente de cette turbulence est aussi une source potentielle d'énergie à l'échelle microscopique.

Ces deux propositions ne sont d'ailleurs pas contradictoires, et il est très probable que la dissipation de la turbulence se fasse par l'intermédiaire de chocs à très petite échelle dans le gaz. Dans les deux cas l'énergie cinétique supplémentaire disponible lors d'une collision, et provenant soit d'augmentations très locales de la température, soit de la présence de distributions de vitesses non-gaussiennes, soit encore d'une différence de vitesse entre fluides neutres et ionisés faiblement couplés, peut être utilisée pour passer les barrières d'activation ou les endothermicités de certaines réactions clés.

Nous allons passer rapidement en revue ces deux phénomènes dans les deux sections suivantes.

³ De nombreuses mesures de laboratoire ont montré récemment qu'un certain nombre de réactions « neutre-neutre » importantes n'avaient pas de barrière d'activation à très basse température, contrairement à ce qu'on pensait il y a une trentaine d'années. C'est le cas en particulier de la réaction $C + O_2$ (Chasting et al. [18]).

3. MODÉLISATION DES CHOCS

Le Milieu Interstellaire étant ionisé (degré d'ionisation typique de 10^{-4} à 10^{-7}) et magnétisé (champ typique de $10 \mu\text{G}$ dans le milieu diffus), des ondes d'Alfvén et magnéto-soniques peuvent s'y propager. Si une perturbation se propage également à une vitesse supérieure à celle du son, mais inférieure à celle de ces ondes de plasma une information sur la présence de la perturbation peut se propager en amont de celle-ci et bouleverser la structure de l'onde de choc.

3.1 Chocs interstellaires

En général, du fait de la faible densité du milieu, les fluides neutres et ionisés sont faiblement couplés. Les ions vont donc réagir rapidement aux ondes d'Alfvén alors que les neutres ne les « sentent » pas. Par collisions avec les ions le fluide neutre va cependant également être perturbé avant l'arrivée de la perturbation. Deux cas peuvent alors se produire (Le Bourlot et al. [19]).

- La vitesse du choc est suffisamment faible et/ou le champ magnétique suffisamment fort pour que les ions et les neutres aient le temps de se coupler totalement avant l'arrivée de la perturbation. Dans ce cas, les profils de température et de densité ne montrent pas de discontinuité. Le choc est **continu** (type C). La compression du gaz post-choc peut être importante, mais l'excursion de température maximale est limitée (quelques milliers de kelvin au plus).
- Les deux fluides n'ont pas le temps de se coupler totalement. Il y a alors une « vraie » discontinuité à la position du choc (type J pour **jump**). La zone de transition est plus courte et les temps caractéristiques plus rapides. Les valeurs maximales de température atteintes sont aussi plus élevées.

On voit ainsi que le paramètre principal à prendre en compte est le couplage entre les fluides neutres et ionisés. Des modèles de chocs stationnaires sophistiqués existent. Ils permettent même de reconstruire le processus d'évolution allant d'un choc J au déclenchement de la perturbation à un choc C asymptotiquement si le milieu est suffisamment étendu pour qu'il puisse se développer. Ce sont des modèles 1D, dont le principal défaut est de ne pas prendre en compte le transfert radiatif complet entre les différentes zones du choc. Leur domaine d'application en est réduit, mais ils décrivent bien, par exemple, l'interaction d'un jet provenant d'une étoile jeune avec le milieu moléculaire au sein duquel s'est formée l'étoile.

Le modèle que je décrirai ici est celui de Flower & Pineau des Forêts [20], qui a une longue histoire et rassemble les contributions de nombreux chercheurs. C'est un modèle à une dimension stationnaire.

3.2 Effets hors d'équilibre

Qualitativement, suivre les effets de la chimie dans un choc n'est pas très différent de la démarche adoptée pour un nuage à l'état stationnaire. Dans les deux cas il faut une bonne description des conditions aux limites du problème, faire un choix de processus modélisés, et donc – en ce qui concerne la chimie – d'un mécanisme réactionnel. La principale différence est qu'une fois les équations de bilan écrites, on résout le système d'équations différentielles résultant ($\dot{X} = F(X)$) à partir de conditions initiales données au lieu de calculer directement l'état stationnaire ($F(X) = 0$) par un algorithme de Newton-Raphson par exemple.

Techniquement, ça n'est pas rien. Le rapport des temps caractéristiques les plus extrêmes à prendre en compte est de 10^{27} (rapport du temps de déplacement d'un atome d'hydrogène sur un grain de

Figure 9. Répartition de l'énergie dans un choc (Flower et al. [22]).

poussière par le temps caractéristique de destruction de H_2 par les rayons cosmiques). Les équations sont donc extrêmement raides (« stiff ») et il faut faire appel à des algorithmes spécialisés⁴.

Une bonne illustration est l'évolution de l'abondance de H_2 dans un tel choc. Pour des injections initiales d'énergie « intermédiaires » les effets dynamiques deviennent prépondérants. Dans l'exemple illustré sur les figures (9) et (10) (vitesse du choc : 15 km s^{-1} , densité du gaz pré-choc 10^5 cm^{-3} , champ magnétique nul) la durée du choc (environ un an) est très courte non seulement par rapport aux temps caractéristiques de la chimie, mais même par rapport aux temps de collision de H_2 dans le milieu. On voit qu'il n'y a pas du tout équipartition de l'énergie entre l'énergie cinétique des particules dans le référentiel du choc (« thermal ») et l'énergie interne (« internal », principalement grâce aux niveaux ro-vibrationnels de H_2). Du coup, comme les populations de H_2 sont loin de l'équilibre thermodynamique local, il faut suivre leur évolution en fonction du temps individuellement ; en effet celles-ci jouent un rôle considérable sur les fonctions de refroidissement du gaz. On constate également que l'essentiel de l'hydrogène moléculaire est dissocié dans le choc, et il faut quelques centaines d'année pour qu'il soit reformé.

Pendant tout ce temps, le gaz peine à se refroidir, ce qui se traduit par la présence d'un « plateau » dans l'évolution de la température du gaz post-choc. Ce gaz reste à plusieurs milliers de degrés, ce qui permet à une chimie chaude de démarrer.

On trouve ainsi dans le gaz situé immédiatement derrière le front de choc des molécules caractéristiques d'une chimie chaude, comme CH^+ . De tels événements peuvent donc participer à la production de ces molécules. Cependant, le passage d'un choc s'accompagne de signatures spectrales (dans les profils de raies, ou le décalage de position des raies moléculaires en fonction de la zone où les molécules sont formées) que l'on ne trouve pas souvent dans les observations. Un autre mécanisme est donc nécessaire, probablement la dissipation de la turbulence.

⁴ Le plus performant est dérivé de celui de Gear [21], tel qu'il est mis en place dans la routine publique VODE par exemple (voir <http://www.netlib.org/ode/>) par Brown, Byrne and Hindmarsh.

Figure 10. Abondance dans le même choc (Flower et al. [22]). Noter les échelles de temps logarithmiques à gauche et linéaires à droite permettant de mieux visualiser.

3.3 Couplage gaz-grains

La dynamique du choc dépend de façon critique du couplage entre le gaz neutre et le gaz ionisé. Or, la masse présente dans chaque fluide ne dépend pas seulement des molécules et ions moléculaires. La poussière présente peut également être chargée, et suivant leur taille et leur état de charge, ces poussières réagissent différemment au précurseur magnétique d'une part et aux collisions avec le gaz neutre de l'autre.

Ce processus a été étudié en détail par Guillet et al. [23] et [24]. Ces auteurs ont montré que la distribution de charge était variable suivant la taille des grains et au cours du temps, ce qui interdit pratiquement toute évaluation qualitative des phénomènes. Les contre-réactions complexes observées ne peuvent se résoudre qu'à l'aide d'une modélisation détaillée des différents processus et de leurs couplages. La figure (11) montre que le couplage entre le gaz neutre et les grains est très différent en fonction de la taille de ceux-ci. Cela se traduit par des effets d'érosion par exemple sensiblement différents, observables via l'émission de molécules comprenant des éléments réfractaires. Les raies de SiO peuvent être intenses ou complètement invisibles suivant que le « sputtering⁵ » des grains par le gaz est ou non suffisamment efficace pour libérer une partie du silicium piégé sous forme de silicates.

4. CHIMIE TURBULENTE

Il est très difficile d'estimer un nombre de Reynolds (Re) dans un nuage interstellaire⁶. Nous sommes dans un milieu qui n'a pas de bord, donc une taille totale (et donc une échelle de longueur L) mal définie, et dont la structure en densité est probablement fractale (Falgarone et Phillips [25]) ce qui

⁵ Le mot français correspondant : « pulvérisation » ne rend pas compte de la forte dépendance temporelle du processus.

⁶ Le « Reynolds », $Re = \frac{Lu_L}{\nu}$ où L est une taille caractéristique de l'écoulement, u_L une vitesse caractéristique à cette échelle et ν la viscosité cinématique du fluide, mesure le rapport des « forces d'inertie » sur les « efforts visqueux » dans l'écoulement. Lorsqu'il est grand, le temps caractéristique est court par rapport au temps de dissipation de l'énergie cinétique et des mouvements complexes ont le temps de se développer.

Figure 11. Trajectoire et vitesse relative de 3 grains de taille différente au passage d'un choc (d'après Guillet et al. [24]).

rend difficile l'évaluation d'une viscosité cinématique typique⁷. En revanche, la dispersion de vitesse à grande échelle, évaluée à partir des largeurs de raies d'émission observées est raisonnablement connue. Cependant, même une évaluation grossière donne des valeurs de Re extrêmement grandes, typiquement dans la « fourchette » $10^8 - 10^{12}$. Le fluide est donc très vraisemblablement turbulent.

Il s'agit bien évidemment de turbulence compressible et magnétisée, domaine pour lequel on ne dispose que de peu d'expériences en laboratoire et de pas du tout de théorie satisfaisante. On peut quand même évaluer quelques comportements typiques à partir des observations existantes. Tout d'abord, il semble que les « modes solénoïdaux » dominent; la partie compressible du champ de vitesse se dissipant assez vite dans des chocs. Si l'on fait l'approximation que le champ magnétique ne joue pas un rôle

⁷ Bien que la viscosité d'un gaz ne dépende pas de la pression.

Tableau 2. Relations typiques en turbulence développée.

Échelles	Reynolds	Longueur	Vitesse	Temps
Intégrale	R_L	L	u_L	$t_L = L/u_L$
Taylor	$R_\lambda = 4 R_L^{1/2}$	$\lambda = \sqrt{15} R_L^{-1/2} L$	$u_\lambda = (\epsilon \lambda)^{1/3}$	$t_\eta = \lambda/u_\lambda$
Dissipation	$R_\eta = 1$	$\eta = R_L^{-3/4} L = (\nu^3/\epsilon)^{1/4}$	$u_\eta = R_L^{-1/4} u_L = (\nu \epsilon)^{1/4}$	$t_\eta = R_L^{-1/2} t_L$

Tableau 3. Applications numériques au Milieu Interstellaire des relations de la Table (2).

$\epsilon_{obs} = 0.1 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-3}$	Reynolds	Longueur	Vitesse	Temps
Intégrale	$R_L = 10^9$	$L \simeq 3 \text{ pc} \simeq 10^{19} \text{ cm}$	$u_L \simeq 10^6 \text{ cm s}^{-1}$	$t_L \simeq 0.3 \text{ Myr}$
Taylor	$R_\lambda = 1.2 \cdot 10^5$	$\lambda \simeq 1 \cdot 10^{15} \text{ cm} \simeq 80 \text{ UA}$	$u_\lambda \simeq 5 \cdot 10^4 \text{ cm s}^{-1}$	$t_\lambda \simeq 1.6 \cdot 10^4 \text{ yr}$
Dissipation	$R_\eta = 1$	$\eta \simeq 2 \cdot 10^{12} \text{ cm} \simeq 0.1 \text{ UA}$	$u_\eta = 6 \cdot 10^3 \text{ cm s}^{-1}$	$t_\eta = 10 \text{ yr}$

critique à l'ordre zéro, on peut utiliser les résultats sur la turbulence incompressible dans un fluide ordinaire.

Pour fixer les idées, on donne dans la Table (2) quelques grandeurs typiques des longueurs, vitesses et temps caractéristiques en turbulence développée ; ces résultats peuvent se retrouver par exemple dans Davidson [26]. ν est la viscosité cinématique⁸, et ϵ est le taux de dissipation de l'énergie cinétique par unité de masse (Rappel, à une échelle l donnée, on a $\epsilon = u_l^3/l$ où u_l est la vitesse typique à l'échelle l ⁹). L'échelle intégrale est la plus grande taille caractéristique de l'écoulement (et on suppose généralement que l'énergie est injectée dans le fluide à cette échelle), l'échelle de Taylor est celle à laquelle la viscosité commence (tout juste) à se faire sentir, et l'échelle de dissipation est celle à partir de laquelle ses effets dominent.

Appliquons ces résultats à un cas astrophysique typique. Le nombre de Reynolds associé à un nuage à $T = 100 \text{ K}$ et $n_H = 10^4 \text{ cm}^{-3}$ est :

$$Re = \frac{L u_L}{\nu} \simeq 10^{-16} L u_L$$

On trouve alors les valeurs de la Table (3).

On voit que la dissipation se passe à des échelles très petites. Les observations montrent également son caractère intermittent. La figure (12) montre les fonctions de distribution des incréments de centroïdes de vitesse évalués à partir d'observations de raies de la molécule CO pour différents écarts de position projetée sur le plan du ciel. Pour les grands écarts, ces fonctions de distributions sont quasi-gaussiennes, alors que des ailes non gaussiennes se développent lorsque l'écart de position diminue.

À très petite échelle la probabilité d'avoir des écarts de vitesse importants traduit la présence de très forts gradients de vitesse associés à la dissipation d'énergie. Ceux-ci sont aussi visibles directement grâce aux observations radio à l'aide d'interféromètres (les antennes de l'IRAM au plateau de Bure aujourd'hui et bientôt l'instrument ALMA au Chili).

⁸ Pour un gaz dilué, $\nu \simeq \ell \bar{u}$, où ℓ est le libre parcours moyen ($\ell = 1/\sigma n_H$) et $\bar{u}$ la vitesse moyenne d'agitation thermique. En utilisant une section efficace typique de l'ordre de 10^{-15} cm^2 (section géométrique) et $\bar{u} = \sqrt{3kT/2m_H} \simeq 10^4 \sqrt{T}$ pour l'hydrogène, on obtient $\nu \simeq 10^{19} \sqrt{T}/n_H \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$.

⁹ Le modèle de « cascade turbulente », bien vérifié expérimentalement aux grands nombres de Reynolds dit que ϵ est invariant de l'échelle intégrale L à l'échelle de dissipation η .

Figure 12. Incréments de centroïdes de vitesse dans la région de Polaris (Hily-Blant et al. [27]).

La figure (13) montre l'intensité de l'émission de CO le long d'une coupe dans un filament moléculaire en fonction de la vitesse du gaz telle que l'on peut la déduire du décalage Doppler. On observe un décrochement très net au voisinage de l'offset 400'', trace d'un gradient de vitesse intense.

L'énergie est ainsi déposée de façon très localisée dans le gaz, par bouffées intenses. Certaines réactions chimiques endothermiques peuvent donc se produire à un taux élevé pendant la faible durée nécessaire à l'égalisation de la température. Les réactants ainsi produits vont ensuite réagir plus lentement avant le retour à l'état stationnaire chimique antérieur. On a donc localement des phénomènes dépendant du temps irréductibles, mais les zones spatiales concernées sont distribuées au hasard dans un volume de gaz bien plus grand qui lui reste à l'état stationnaire.

Pour l'observateur au sol qui reçoit l'ensemble du rayonnement situé dans le lobe de son instrument intégré le long de la ligne de visée, les quantités de gaz chaud, ou en cours de relaxation ou au repos restent donc constantes. On peut ainsi expliquer les observations paradoxales mentionnées plus haut (Section 2.6). « Un peu » de CH^+ (entre autres) est produit en permanence dans une faible fraction du gaz (mettons quelques pour-cent) dispersée au hasard dans l'ensemble du volume. Ces traces de gaz excité, cumulées, sont suffisamment importantes pour être observées. Un premier calcul réaliste est proposé par Godard et al. [29] basé sur la chimie simplifiée illustrée Figure (14). Le schéma réactionnel de base illustré sur la partie *a* est enrichi pendant le dépôt d'énergie dû à la turbulence (partie *b*). La géométrie proposée dans l'article est encore grossière, mais la piste proposée est probablement la plus sérieuse actuellement pour résoudre un problème vieux de plus de soixante ans.

5. CONCLUSION

La chimie interstellaire est contre-intuitive comparée aux expériences réalisables sur Terre. Mais en nous obligeant à analyser en détail les processus moléculaires à l'œuvre elle fournit un outil inestimable pour sonder les conditions physiques extrêmement variées existant dans les milieux astrophysiques.

La qualité des observations proposées s'améliore à un rythme effréné ; les modèles ont du mal à suivre. Mais les progrès dans la compréhension sont réels et ont bouleversé la vision que nous avions de l'histoire de la matière dans l'Univers et du cycle de vie des étoiles et du gaz auquel elles sont intimement liées. Les nombreux défis qui restent à résoudre n'attendent que l'ingéniosité des futurs jeunes astronomes.

Figure 13. Coupe position-vitesse le long d'une structure à petite échelle dans Polaris (Hily-Blant & Falgarone [28]).

Figure 14. Chimie simplifiée de O et C d'après Godard et al. [29]. a) Chimie dominée par l'UV, b) Chimie turbulente.

Références

- [1] Anderson, L. D., Zavagno, A., Rodon, J. A., Russeil, D., Abergel, A., Ade, P., Andre, P., Arab, H., Baluteau, J. -P., Bernard, J. -P., and 34 coauthors, “The physical properties of the dust in the RCW 120 HII region as seen by Herschel”, 2010arXiv1005.1565A (A&A special issue, 2010)
- [2] Miville-Deschênes, M. -A., Martin, P. G., Abergel, A., Bernard, J. -P., Boulanger, F., Lagache, G., Anderson, L. D., André, P., Arab, H., Baluteau, J. -P., and 35 coauthors, “Herschel-SPIRE observations of the Polaris flare: structure of the diffuse interstellar medium at the sub-parsec scale”, 2010arXiv1005.2746M (A&A special issue, 2010)
- [3] Mathis, J. S., Mezger, P. G., Panagia, N., A&A **128**, (1983) 212
- [4] Heiles, C. Crutcher, R., Lect. Notes Phys. **664**, (2005) 137
- [5] Beck, R., Lect. Notes Phys. **664**, (2005) 41
- [6] Le Petit, F., Barzel, B., Biham, O., Roueff, E., Le Bourlot, J., A&A **505**, (2009) 1153
- [7] Roellig, M., Abel, N. P., Bell, T., Bensch, F., Black, J., Ferland, G. J., Jonkheid, B., Kamp, I., Kaufman, M. J., Le Bourlot, J., and 14 coauthors, A&A **467**, (2007) 187
- [8] Le Petit, F., Nehmé, C., Le Bourlot, J., Roueff, E., ApJS **164**, (2006) 506
- [9] Goicoechea, J. R., Le Bourlot, J., A&A **467**, (2007) 1
- [10] Gonzalez Garcia, M., Le Bourlot, J., Le Petit, F., Roueff, E., A&A **485**, (2008) 127
- [11] Elmegreen, B.G., ApJ **564**, (2002) 773
- [12] Gérin, M. et 52 co-auteurs, “Interstellar OH⁺, H₂O⁺ and H₃O⁺ along the sight-line to G10.6-0.4”, 2010arXiv1005.5653G (A&A special issue, 2010)
- [13] Le Bourlot, J., Pineau des Forêts, G., Roueff, E., A&A **297**, (1995) 251
- [14] Roueff, E., Lis, D.C., van der Tak, F.F.S., Gérin, M., Goldsmith, P.F., A&A **438**, (2005) 585
- [15] Lis, D. C., Roueff, E., Gerin, M., Phillips, T. G., Coudert, L. H., van der Tak, F. F. S., Schilke, P., ApJ **571**, (2002) L55
- [16] Phillips, T.G., Vastel, C., “Future Millimeter/Submillimeter Instrumentation and Science Opportunities: The Example of Deuterated Molecules”, *Chemistry as a diagnostic of star formation* (Curry & Fich Eds, Waterloo, Canada, 2003)
- [17] Fuente, A., Garcia-Burillo, S., Usero, A., Gerin, M., Neri, R., Faure, A., Le Bourlot, J., Gonzalez-Garcia, M., Rizzo, J.R., Alonso-Albi, T., Tennyson, J., A&A **492**, (2008) 675
- [18] Chastaing, D., Le Picard, S., Sims, I. R., J. Chem. Phys. **112**, (2000) 8466
- [19] Le Bourlot, J., Pineau des Forêts, G., Flower, D.R., Cabrit, S., MNRAS **332**, (2002) 985
- [20] Flower, D.R., Pineau des Forêts, G., MNRAS **343**, (2003) 390
- [21] Gear, C.W., *Numerical Initial Value Problems in Ordinary Differential Equations* (Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1971)
- [22] Flower, D., Le Bourlot, J., Pineau des Forêts, G., Cabrit, S., MNRAS **341**, (2003) 70
- [23] Guillet, V., Pineau Des Forêts, G., Jones, A. P., A&A **476**, (2007) 263
- [24] Guillet, V., Jones, A.P., Pineau des Forêts, G., A&A **497**, (2009) 145
- [25] Falgarone, E., Phillips, T.G., ApJ **472**, (1996) 191
- [26] Davidson, P.A., *Turbulence, An introduction for Scientists and Engineers*, (Oxford University Press, 2004)
- [27] Hily-Blant, P., Falgarone, E., Pety, J., A&A **481**, (2008) 367
- [28] Hily-Blant, P., Falgarone, E., A&A **500**, (2009) L29
- [29] Godard, B., Falgarone, E., Pineau des Forêts, G., A&A **495**, (2009) 847