

---

# EMISSION MICRO-ONDE ANORMALE

## Sommaire

---

<b>4.1</b>	<b>L'émission anormale . . . . .</b>	<b>63</b>
4.1.1	Qu'est-ce que l'émission anormale ? . . . . .	63
4.1.2	Les explications proposées . . . . .	65
<b>4.2</b>	<b>Modèles de rotation précédents . . . . .</b>	<b>69</b>
4.2.1	Le modèle de Ferrara et Dettmar (1994) . . . . .	69
4.2.2	Le modèle de Rouan et al. (1992/1997) . . . . .	69
4.2.3	Le modèle de Draine et Lazarian (1998b) . . . . .	70
4.2.4	Pourquoi un nouveau modèle ? . . . . .	71

---

## 4.1 L'émission anormale

### 4.1.1 Qu'est-ce que l'émission anormale ?

La mesure des fluctuations du fond diffus cosmologique (CMB pour *Cosmologic Microwave Background*, corps noir à 2.7 K) permet de connaître les conditions initiales de la formation de l'Univers et de déterminer la valeur des paramètres cosmologiques (constante de Hubble, densités de matière brillante et sombre, ...). Depuis les premières mesures faites avec le satellite COBE<sup>1</sup> en 1992, la sensibilité et la résolution angulaire des instruments d'observation au sol (CBI<sup>2</sup>, TOCO<sup>3</sup>...), en vols ballon (BOOMERanG<sup>4</sup>, Maxima<sup>5</sup>, Archeops<sup>6</sup>...) ou dans l'espace (WMAP<sup>7</sup>...) n'ont cessé de s'améliorer. L'étude de ces fluctuations ne peut se faire qu'après la soustraction,

---

<sup>1</sup>Cosmic Background Explorer, <http://aether.lbl.gov/www/projects/cobe/>

<sup>2</sup>Cosmic Background Imager, <http://www.astro.caltech.edu/~tjp/CBI/>

<sup>3</sup>Du nom du mont Chilien El Toco situé à proximité de l'instrument, <http://www.physics.princeton.edu/cosmology/mat/>

<sup>4</sup>Balloon Observations Of Millimetric Extragalactic Radiation ANd Geophysics, [http://www.astro.caltech.edu/~lgg/boomerang\\_front.htm](http://www.astro.caltech.edu/~lgg/boomerang_front.htm)

<sup>5</sup>Millimeter Anisotropy eXperiment IMaging Array, <http://cosmology.berkeley.edu/group/cmb/>

<sup>6</sup><http://www.archeops.org/>

<sup>7</sup>Wilkinson Microwave Anisotropy Probe, <http://lambda.gsfc.nasa.gov/product/map/current/>

aussi précise et réaliste que possible, des avant-plans Galactiques. Ces avant-plans Galactiques sont les suivants : l'émission synchrotron, le rayonnement de freinage (ou free-free), l'émission thermique des gros grains et "l'émission anormale".

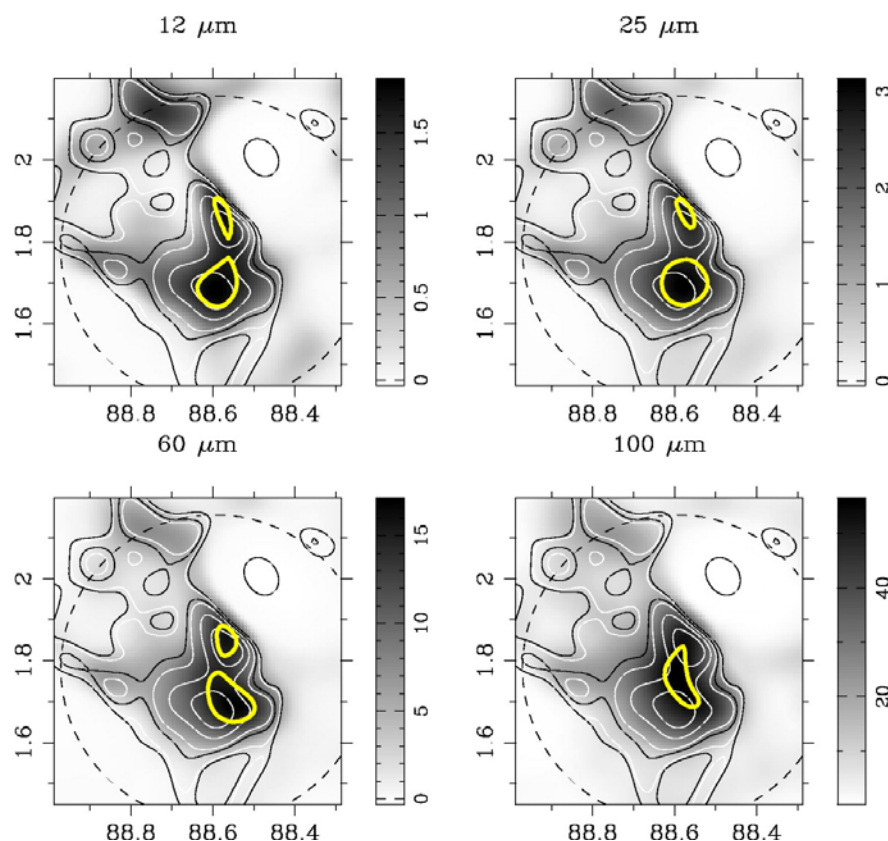
Ce dernier avant-plan a été découvert par Kogut *et al.* (1996) à l'aide des données à 4 ans de l'instrument DMR (Differential Microwave Radiometer) de COBE. Il s'agit d'un excès inattendu (d'où le terme "anormale") d'émission Galactique entre 30 et 90 GHz, corrélé aux cartes DIRBE<sup>8</sup> dans l'IR lointain mais pas avec l'émission synchrotron Galactique. Un an plus tard, Leitch *et al.* (1997) à l'Observatoire radio de la vallée Owens confirmèrent l'existence de cet excès (dans deux bandes d'observation : 14.5 et 32 GHz), et montrèrent sa corrélation avec l'émission des gros grains dans la bande à 100  $\mu\text{m}$  des données du satellite IRAS<sup>9</sup>. de Oliveira-Costa *et al.* (1997) ont quant à eux détecté cet excès en bandes Ka (33 GHz) et Q (41 GHz) avec des données Saskatoon<sup>10</sup>. Ils ont confirmé sa corrélation avec l'émission thermique des gros grains dans les bandes DIRBE à 100, 140 et 240  $\mu\text{m}$  et ont également montré que cet excès n'est pas corrélé avec l'émission synchrotron à 408 MHz (Haslam *et al.* 1981) et 1420 MHz (Reich et Reich 1988). Par la suite, Draine et Lazarian (1998a); de Oliveira-Costa *et al.* (2002); Banday *et al.* (2003) ont montré que cette émission ne pouvait être expliquée par les mécanismes d'émission classiques connus dans cette gamme de fréquences : en effet, elle n'est pas corrélée avec le synchrotron, et est bien trop brillante pour être expliquée par l'émission free-free tracée à l'aide de la transition H $\alpha$ . Entre temps, des observations à basses fréquences (de 8 à 15 GHz) ont montré que l'émission anormale a un spectre croissant dans cette gamme de fréquence (de Oliveira-Costa *et al.* 1999; Banday *et al.* 2003; Finkbeiner *et al.* 2004; Davies *et al.* 2006) ; les données WMAP montrent qu'elle a un spectre décroissant au-delà de 20 GHz, avec un maximum d'émission entre 20 et 30 GHz (Gold *et al.* 2008). Ces résultats rendent toute explication à l'aide des émissions free-free et synchrotron impossible. A ce stade, toutes les observations disponibles semblent indiquer que l'émission anormale est liée à la poussière interstellaire. La communauté a donc cherché à savoir à quel type de grains elle est plus particulièrement liée. Lagache (2003) a ainsi montré que l'émission anormale décroît quand la densité de colonne de l'hydrogène  $N_{HI}$  croît, contrairement à l'émission de la poussière dans l'IR lointain qui reste relativement constante. Cela indique que l'émission anormale n'est vraisemblablement pas associée à l'émission des gros grains. En revanche, cette décroissance est caractéristique du comportement de l'émission des plus petits grains dans les nuages interstellaires denses. D'autre part, Casassus *et al.* (2006a) ont mené une étude sur un nuage dense, LDN 1622. Ceux-ci ont montré que l'émission anormale à 31 GHz mesurée par l'instrument CBI (Cosmic Background Imager) est mieux corrélée avec l'émission dans les bandes IRAS à 12 et 25  $\mu\text{m}$  qu'avec l'émission à 60 et 100  $\mu\text{m}$  (Fig. 4.1). Ces deux études suggèrent donc que l'émission anormale n'est pas liée aux gros grains mais plutôt aux très petits, i.e. aux PAH interstellaires ou aux VSG.

Par ailleurs, l'émission anormale est aujourd'hui aussi bien observée à grande échelle sur tout le ciel qu'à petite échelle dans des nuages interstellaires dont les caractéristiques physiques sont variées : elle est détectée aussi bien dans des régions HII (Dickinson *et al.* 2006a, 2007) que dans des nuages denses et froids (Watson *et al.* 2005; Casassus *et al.* 2006b) ou bien encore dans des nébuleuses planétaires (Casassus *et al.* 2004, 2007). Le tableau 4.1 donne un aperçu des données disponibles aujourd'hui. Dans les cas où ces valeurs sont disponibles, on constate que l'émission anormale est corrélée spatialement à l'émission des poussières (la plupart de ces études ont été

<sup>8</sup>Diffuse Infrared Background Experiment, [http://lambda.gsfc.nasa.gov/product/cobe/dirbe\\_overview.cfm](http://lambda.gsfc.nasa.gov/product/cobe/dirbe_overview.cfm)

<sup>9</sup>InfraRed Astronomical Satellite, <http://lambda.gsfc.nasa.gov/product/iras/>

<sup>10</sup>Du nom de la ville où est localisé le télescope, <http://www.physics.princeton.edu/cosmology/sk/>



**Figure 4.1** - Comparaison de l'émission anormale à 31 GHz avec l'émission des poussières interstellaires dans les bandes IRAS à 12, 25, 60 et 100  $\mu\text{m}$  (Casassus *et al.* 2006a). Toutes les intensités sont en  $\text{MJy.sr}^{-1}$ . L'échelle grisée représente l'émission IR et les contours noirs l'émission à 31 GHz. Les contours jaunes épais montrent les bandes IRAS pour un certain pourcentage de l'intensité maximale : 89% pour la bande à 12  $\mu\text{m}$ , 85% à 25 et 60  $\mu\text{m}$ , et 95% à 100  $\mu\text{m}$ .

menées avec la bande IRAS à 100  $\mu\text{m}$ ) et que son taux de polarisation est faible ( $< 5\%$ ). Cette corrélation de l'émission anormale avec l'émission des gros grains à 100  $\mu\text{m}$  n'est cependant pas une preuve que c'est à ces grains là qu'elle est liée. La recherche de corrélations avec l'émission des petits grains (12-25  $\mu\text{m}$ ) n'a été que rarement menée : en effet, la contribution de la lumière zodiacale à ces fréquences est importante (émission thermique des poussières interplanétaires piquant à 25  $\mu\text{m}$ ). Cela rend difficile l'extraction de la contribution des petits grains.

### 4.1.2 Les explications proposées

Devant la nécessité de comprendre cette nouvelle composante de l'émission Galactique, Draine et Lazarian (1998, 1999) ont proposé deux mécanismes différents pour expliquer l'émission anormale : l'émission dipolaire électrique de très petits grains en rotation (1998) et l'émission dipolaire magnétique de gros grains ayant des propriétés magnétiques (1999).

#### ♣ Emission dipolaire magnétique (Draine et Lazarian 1999)

Aux fréquences IR et optique, il est courant de négliger les propriétés magnétiques des grains quand on modélise leur absorption et/ou leur émission. Ceci est justifié dans la mesure où la plu-

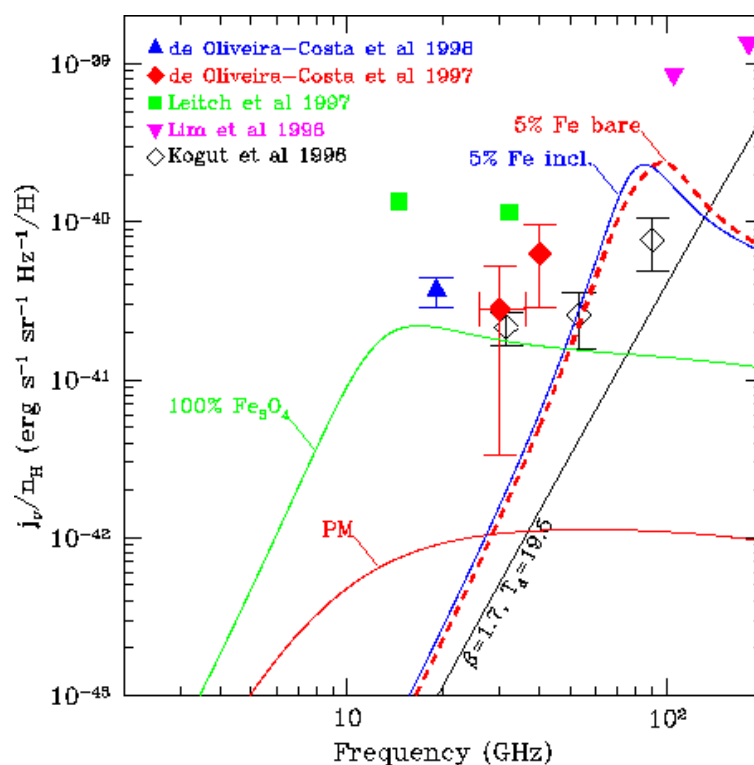
**Tableau 4.1** - Aperçu des données disponibles. Pour chaque région, on donne l'émissivité, les facteurs de corrélation avec les bandes IRAS à 12 et 100  $\mu\text{m}$ , le taux de polarisation et les auteurs. Les instruments avec lesquels ces données ont été obtenues sont : CBI (Cosmic Background Imager) à 31 GHz, WMAP (Wilkinson Anisotropy Probe) à 23 GHz, COSMOSOMAS (COSMOlogical Structures On Medium Angular Scales) de 10 à 15 GHz, SIMBA (Sest Imaging Bolometer Array sur le télescope SEST) à 1.2 mm.

Sources	Emissivité $\mu\text{K}(\text{MJy}/\text{sr})^{-1}$	Corrél. (100 $\mu\text{m}$ )	Corrél. (12 $\mu\text{m}$ )	Taux de polar.	Référence
<b>Tout le ciel</b>					
Tout le ciel (WMAP)	10.9±1.1	-	-	-	Davies <i>et al.</i> (2006)
<b>Régions HII</b>					
6 régions (CBI)	3.3±1.7	“bonne”	-	<0.6%	Dickinson <i>et al.</i> (2007)
LPH96 (CBI)	5.8±2.3	0.9	-	-	Dickinson <i>et al.</i> (2006a)
<b>Nuages moléculaires</b>					
5 régions (WMAP)	11.2±1.5	0.9	-	-	Davies <i>et al.</i> (2006)
LDN 1622 (CBI)	24.1±0.7	0.62	0.78	-	Casassus <i>et al.</i> (2006a)
G159.6-18.5 (Cosmosomas)	17.8±0.3	“bonne”	-	3.4 <sup>+1.5%</sup> <sub>-1.9%</sub>	Watson <i>et al.</i> (2005)
<b>Nébuleuse planétaire</b>					
Hélice (SIMBA, WMAP, CBI)	4.8 ? mJy	“bonne”	-	-	Casassus <i>et al.</i> (2004)
40 régions (CBI)	18-2578	-	-	≲ 10%	Casassus <i>et al.</i> (2007)

part des matériaux ont une réponse magnétique négligeable quand ils sont soumis à des champs magnétiques oscillant à des fréquences supérieures à 100 GHz. En effet, le magnétisme est dû à l'organisation des spins des électrons et la fréquence maximale pour laquelle le spin des électrons s'oriente est la fréquence de précession d'un électron dans le champ local : elle n'excède jamais 20 GHz. Les champs électriques ont eux une influence sur la distribution de charges des électrons pour des fréquences d'oscillation allant jusqu'à  $10^{16}$  Hz (dans l'UV). Aux fréquences micro-ondes qui nous intéressent, les champs électrique et magnétique ont une influence sur l'absorption et l'émission des grains ( $\sigma_{abs} = \sigma_{dip\grave{o}le\ \acute{e}lectrique} + \sigma_{dip\grave{o}le\ magn\acute{e}tique}$ ). L'émission dipolaire magnétique provient ainsi des fluctuations thermiques de la magnétisation des grains (autrement dit du changement de direction de leur moment magnétique). L'intensité de ces fluctuations dépend des propriétés magnétiques du matériau considéré : Draine et Lazarian (1999) considèrent les cas de matériaux paramagnétiques, superparamagnétiques, ferromagnétiques et ferrimagnétiques (voir Annexe 7.5). Lors du calcul de l'émission dipolaire magnétique, la dépendance aux propriétés magnétiques des matériaux va apparaître dans la susceptibilité magnétique  $\chi$  ou la perméabilité magnétique  $\mu = \mu_1 + i\mu_2 = 1 + 4\pi\chi$ . Draine et Lazarian (1999) montrent que l'émissivité par atome d'hydrogène du dipôle magnétique pour un grain (avec  $V$  le volume par atome d'hydrogène) est :

$$\frac{j_\nu}{n_H} = \frac{n_{gr}}{n_H} \sigma_{abs}^{dm} B_\nu(T) = \frac{n_{gr}}{n_H} \frac{V}{c^3} \frac{4\pi}{\exp(h\nu/kT) - 1} \frac{h\nu^4}{(\mu_1 + 1)^2 + \mu_2^2} \quad (\text{en erg.s}^{-1}.\text{sr}^{-1}.\text{Hz}^{-1}/\text{H}) \quad (4.1)$$

avec  $T$  la température des grains et  $n_{gr}$  leur densité. Les spectres d'émission dipolaire magnétique résultants sont présentés sur la Fig. 4.2. Draine et Lazarian (1999) concluent que si une grande partie du fer interstellaire est incluse dans les grains alors il est possible qu'une partie de l'émission anormale soit expliquée par l'émission dipolaire magnétique. En effet la composante anormale ne



**Figure 4.2** - Prédications pour l'émission dipolaire magnétique dans le cas de : (1) grains de silicate paramagnétiques contenant 100% du Fe, du Mg et du Si (courbe rouge en trait plein); (2) grains de  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  contenant 100% du Fe (matériau ferrimagnétique, courbe verte); (3) 5% du Fe, métallique, est présent dans les grains sous forme d'inclusions (matériau superparamagnétique, courbe bleue) ou sous forme de billes de Fe (matériau ferrimagnétique, courbe rouge en pointillés). L'émission vibrationnelle des gros grains est également montrée avec un indice spectral de 1.7 (courbe noire). Les observations sont issues des données de Kogut *et al.* (1996), losanges vides ; de de Oliveira-Costa *et al.* (1997), losanges pleins ; de Leitch *et al.* (1997), carrés pleins ; de Lim *et al.* (1996), triangles roses. D'après Draine et Lazarian (1999).

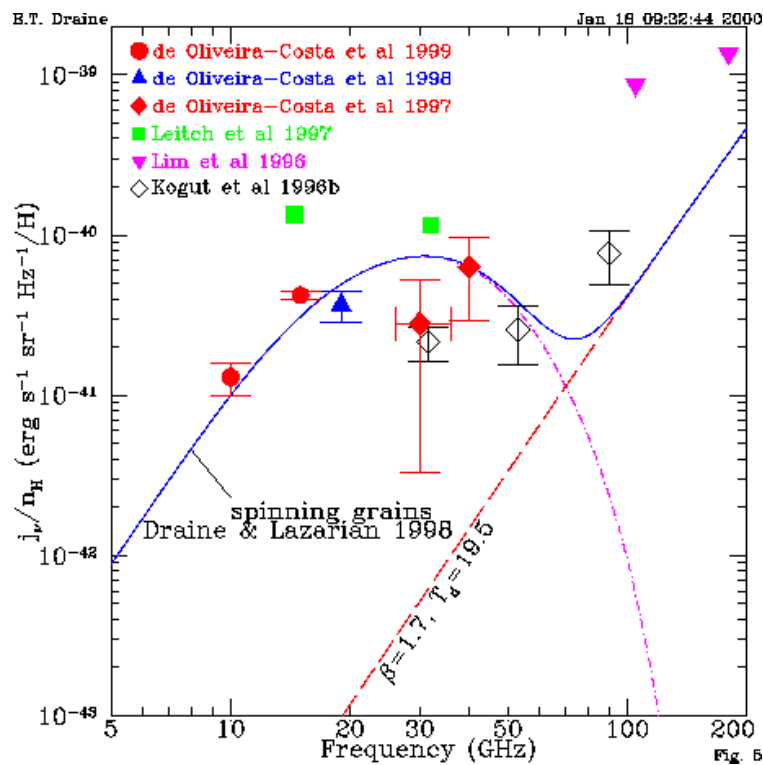
peut être totalement expliquée par ce processus. Si on considère le cas des inclusions de Fe ou de billes de Fe, la forme du spectre n'est pas satisfaisante puisque ce dernier est piqué autour de 70 GHz et décroît très rapidement pour les fréquences plus courtes. Ensuite les candidats matériaux contenant 100 % du Fe produisent des spectres de forme compatible avec l'émission anormale, cependant leur émissivité dipolaire magnétique n'est pas assez grande pour rendre compte des observations.

Par ailleurs, Draine et Lazarian (1999) montrent que si les grains interstellaires ont des propriétés magnétiques telles que celles décrites précédemment, ils devraient être capables de s'aligner avec le champ magnétique Galactique. L'émission dipolaire magnétique doit donc être polarisée, le taux de polarisation dépendant de la fréquence. Draine et Lazarian (1999) ont modélisé les cas ferromagnétiques et superparamagnétiques : ils montrent que ces grains magnétiques doivent être à l'origine d'une signature en polarisation de forme complexe, cette forme dépendant d'une part de la manière dont les grains sont magnétisés et d'autre part de leur forme. Draine et Lazarian (1999) montrent que le taux de polarisation peut atteindre 30 %.

### ♣ Emission dipolaire électrique de grains en rotation rapide

La deuxième explication avancée par Draine et Lazarian pour rendre compte de l'émission anormale est l'émission dipolaire électrique de grains en rotation rapide. Les détails concernant ce modèle sont donnés au §4.2.3 et on peut voir les spectres correspondants sur la Fig. 4.3. La forme du spectre semble être mieux reproduite avec le modèle de rotation qu'avec le modèle d'émission dipolaire magnétique. De plus, le moment dipolaire électrique étant plus grand que le moment dipolaire magnétique, l'émission anormale pourrait être dominée par l'émission dipolaire électrique de très petits grains en rotation. Cependant, la présence d'émission dipolaire magnétique ne peut être exclue pour l'instant. Lazarian et Draine (2000) ont estimé le taux de polarisation attendu pour l'émission dipolaire électrique : il ne devrait pas excéder 7 % à 2 GHz, 5 % à 10 GHz et 0.5 % au-delà de 30 GHz. Avec les missions Planck LFI et HFI, il devrait être possible de quantifier dans quelle mesure ces deux mécanismes interviennent dans l'émission micro-onde et si l'émission dipolaire magnétique est effectivement marginale. Bien que le domaine spectral de Planck ne soit pas optimal pour l'observation de l'émission anormale, son apport devrait être double pour la connaissance de cette composante : la polarisation et une résolution angulaire deux fois meilleure à 30 GHz qu'avec les données WMAP.

Dans toute la suite de ce manuscrit, nous allons donc concentrer notre attention sur la modélisation de l'émission dipolaire électrique de petits grains en rotation. L'analyse des données exposée dans les chapitres suivants sera faite à l'aide de cette dernière.



**Figure 4.3** - Emissivité par atome d'hydrogène dans le cas du milieu neutre et froid (CNM, courbe tirets- pointillés rose). La courbe bleue est la somme de cette composante et de l'émissivité vibrationnelle des gros grains (courbe tirets rouges). Les observations sont des données Tenerife (cercles rouges), COBE DMR (losanges vides), Saskatoon (losanges rouges), observatoire radio de la vallée Owens (carrés verts) et MAX5 (Microwave Anisotropy Experiment, triangles roses).



## 4.2 Modèles de rotation précédents

### 4.2.1 Le modèle de Ferrara et Dettmar (1994)

De nombreuses galaxies spirales, par exemple la Voie Lactée, possèdent un disque d'émission  $H\alpha$  dans leur plan (Franco *et al.* 1991; Keppel *et al.* 1991). Ferrara et Dettmar (1994) ont modélisé l'émission de rotation des grains chargés présents dans cette couche de gaz ionisé. La vitesse de rotation  $\omega_B$  des grains est évaluée en supposant que ces derniers ont un mouvement Brownien :

$$\frac{3}{2}kT_{eff} = E_{rot} = \frac{1}{2}I\omega_B^2 \quad (4.2)$$

avec  $T_{eff}$  la température caractéristique du mouvement et  $I$  le moment d'inertie du grain. En moyenne  $E_{rot}$  est répartie équitablement dans les trois degrés de liberté rotationnels :  $\omega_x^2 I_x = \omega_y^2 I_y = \omega_z^2 I_z$ . Le moment angulaire tend à s'aligner avec l'axe de plus grand moment d'inertie ; en effet, si  $I_x < I_y < I_z$  alors  $L_x < L_y < L_z$ . On obtient alors :  $\omega_B = \sqrt{3kT_{eff}/I}$ . Si les seuls processus capables d'exciter la rotation des grains étaient les collisions avec les atomes du gaz suivies de l'évaporation de ces mêmes atomes, alors  $T_{eff}$  serait la moyenne de la température de la poussière et de la température d'évaporation. En réalité des contributions non thermiques interviennent : l'effet photoélectrique, l'émission et l'absorption de photons et la formation de  $H_2$  à la surface des grains. Ferrara et Dettmar (1994) ont montré que  $T_{eff} \sim T_e/2$  avec  $T_e$  la température des électrons.

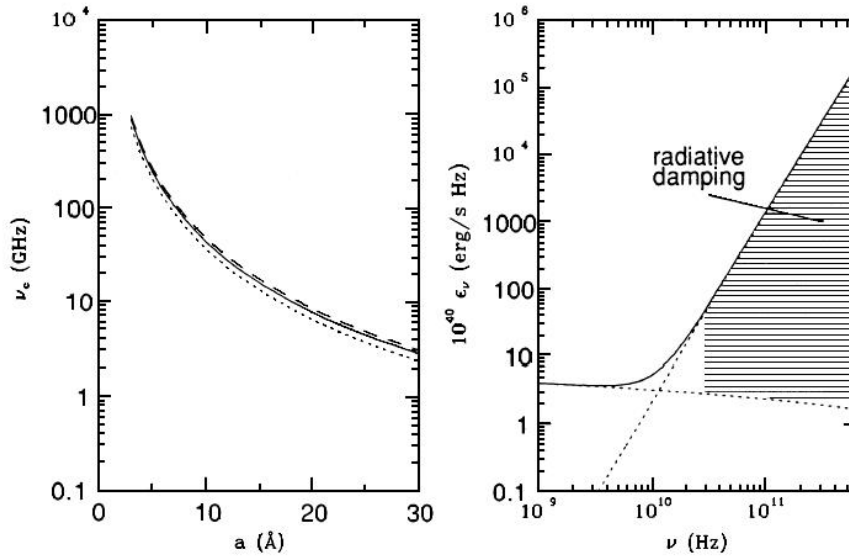
Ferrara et Dettmar (1994) ont montré que dans le cas d'un gaz chaud et peu dense, avec des grains de  $3 \text{ \AA}$  à  $0.25 \text{ \mu m}$ , l'émission de rotation est produite dans l'intervalle de  $3.1 \times 10^4 \text{ Hz}$  à  $620 \text{ GHz}$ . La coupure à haute fréquence  $\nu_C$  dépend directement de la plus petite taille de grains présente dans le milieu. Cependant, leur modèle présente une limitation : n'ayant pas inclus le refroidissement radiatif dans leurs calculs, le spectre de rotation qu'ils obtiennent est donc toujours croissant en fonction de la fréquence. En effet ce sont les plus petits grains qui émettent à plus haute fréquence et c'est pour eux que le refroidissement radiatif est le plus important : le ralentissement radiatif domine le ralentissement collisionnel pour  $a \lesssim 10 \text{ \AA}$ . Ce modèle a cependant été la première tentative pour montrer que l'émission de rotation des grains interstellaires est détectable et utile pour contraindre les propriétés de la poussière.

### 4.2.2 Le modèle de Rouan *et al.* (1992/1997)

Les travaux de Rouan *et al.* (1992) ont pour but de modéliser la physique de la rotation des PAH interstellaires dans des environnements interstellaires variés. Ils examinent d'un point de vue statistique toutes les interactions entre les PAH et leur environnement donnant lieu à un échange de moment angulaire  $\Delta J$ . Les processus considérés sont : les collisions gaz-grains et l'émission de photons IR.

Rouan *et al.* (1992) montrent que le processus dominant pour la rotation est l'émission rovibrationnelle IR et que c'est l'asymétrie des probabilités d'émission avec  $\Delta J = +1$  ou  $-1$  qui limite la croissance du moment angulaire. Ils concluent également que le moment angulaire précède autour du champ magnétique local (précession de Larmor) mais qu'il n'y a pas d'alignement par le mécanisme de Davis-Greenstein : la modification du moment angulaire par émission de photons IR est plus rapide. Les hypothèses simplificatrices faites par Rouan *et al.* (1992) sont les suivantes :

- la branche Q ( $\Delta J = 0$ ) des transitions rovibrationnelles est négligée alors que leur probabilité de transition n'est pas négligeable devant celle des branches P et R ( $\Delta J = \pm 1$ )



**Figure 4.4** - *A gauche* : dépendance de la fréquence de coupure  $\nu_C$  en fonction de la plus petite taille de grains  $a_0$  présente dans la distribution de taille. Les valeurs de  $\nu_C$  sont représentées pour différentes températures :  $T_{eff} = 10^4$  K (courbe en trait plein),  $T_{eff} = 7000$  K (pointillés),  $T_{eff} = 1.2 \times 10^4$  K (tirets). *A droite* : comparaison entre l'émission free-free (courbe en pointillés de faible pente) produite par un gaz avec  $T_{eff} = 10^4$  K et  $n_e = 0.1 \text{ cm}^{-3}$  et l'émissivité des poussières par atome d'H (forte pente). La courbe en trait plein est la somme des deux. La région hachurée montre la gamme de fréquences pour laquelle le spectre est modifié par le ralentissement radiatif non inclus ici.

- ils supposent que les photons IR émis ont la même longueur d'onde effective, égale à  $20 \mu\text{m}$
- les énergies des transitions vibrationnelles sont supposées très grandes devant celles des transitions rotationnelles

Par ailleurs, un certain nombre d'interactions importantes avec le gaz sont négligées (Draine et Lazarian 1998b).

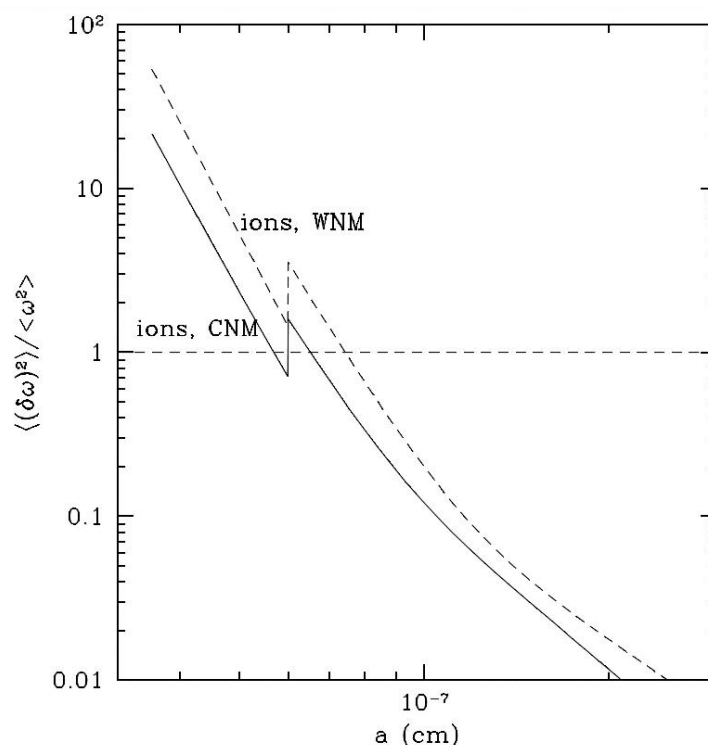
### 4.2.3 Le modèle de Draine et Lazarian (1998b)

Après la découverte de l'émission anormale, Draine et Lazarian (1998b) ont construit un nouveau modèle de rotation des grains interstellaires. Leur apport principal est d'avoir décrit de manière détaillée les interactions gaz-grains. Les processus pris en compte sont :

- les collisions avec les atomes neutres et ionisés du gaz
- l'entraînement dû au plasma interstellaire
- l'effet photoélectrique
- la formation de  $\text{H}_2$
- l'émission de photons IR

Leurs résultats montrent que les processus dominant l'excitation rotationnelle sont les collisions avec les ions et l'entraînement du plasma. Ils supposent par ailleurs que la distribution de la vitesse rotationnelle  $\omega$  est Maxwellienne et obtiennent ainsi  $\langle \omega^2 \rangle$ . Cette hypothèse est vraie uniquement dans le cas où l'émission dipolaire électrique et les moments suprathermiques sont négligeables. Elle est fautive pour les plus petits grains pour lesquels on doit tenir compte de la nature impul-





**Figure 4.5** - Valeur moyenne de  $\delta\omega$  au carré (avec  $I\delta\omega$  le moment angulaire d'un ion impactant) relativement à la valeur moyenne du moment angulaire du grain,  $\omega$ , au carré, en fonction de la taille du grain dans le cas du CNM et du WNM. On voit que le processus d'excitation rotationnelle peut être traité de manière continue pour  $a \geq 10\text{\AA}$  mais que pour les plus petits grains, l'impact d'un seul ion peut modifier le moment angulaire de manière importante. Pour ces petits grains, la distribution du moment angulaire sera donc significativement différente d'une distribution Maxwellienne. D'après Draine et Lazarian (1998b).

sionnelle de l'excitation rotationnelle (Fig. 4.5). Ali-Haïmoud et Hirata (communication privée) ont repris le modèle de Draine et Lazarian (1998b) et entrepris de résoudre l'équation de Fokker-Planck au lieu de supposer une distribution Maxwellienne. Ils montrent que pour la distribution de tailles utilisée par les auteurs précédents, le spectre de rotation final est alors peu affecté ( $\sim 2$  GHz vers le bleu).

#### 4.2.4 Pourquoi un nouveau modèle ?

On voit donc qu'il existe différents modèles décrivant l'excitation rotationnelle et/ou l'émission associée. Chacun d'entre eux fait appel à des hypothèses simplificatrices qui conduisent à des résultats contradictoires lorsqu'on veut les comparer. Les raisons pour lesquelles nous avons décidé de construire un nouveau modèle de rotation des PAH au cours de ma thèse sont détaillées ici.

- 1) Le premier constat lorsqu'on compare les modèles de Draine et Lazarian (1998b) et Rouan *et al.* (1992) est que ces auteurs obtiennent des résultats contradictoires quant à la nature des processus dominants pour l'excitation rotationnelle des grains. Pour les premiers, ce sont les collisions avec les atomes du gaz (neutres et ionisés) qui dominant l'excitation alors que pour

les seconds, c'est l'émission de photons IR rovibrationnels. Il était donc important de construire un nouveau modèle dans le but de lever cette contradiction.

- 2) Rouan *et al.* (1992) font l'hypothèse qu'il est possible de faire les calculs d'émission IR en considérant que la température des grains est constante et très élevée. Ils justifient ce raisonnement en disant que la majorité des photons IR émis le sont quand les PAH ont une température élevée et que par conséquent il est licite de négliger les périodes où le grain est froid. Mais nous avons montré au §3.4.3 que si les photons émis pendant les courtes périodes où les PAH sont très excités sont les plus énergétiques, ils ne sont en revanche pas les plus nombreux. Lorsqu'on s'intéresse à la rotation des molécules, c'est le nombre de photons émis qui compte et pas leur énergie. Le nouveau modèle que nous avons construit devait donc prendre en compte de manière précise les émissions pendant les périodes où les PAH ont une énergie interne très faible.
- 3) Face à ce constat, nous avons fourni un formalisme général pour dériver l'émission des PAH dans l'IR lointain et traiter de manière pertinente et cohérente les émissions rovibrationnelle et rotationnelle (voir le chapitre 3). Par ailleurs, notre modèle apporte également des améliorations quant à la section efficace dans l'IR proche et moyen : Draine et Lazarian (1998b) utilisent la section efficace du graphite et Rouan *et al.* (1992) une unique bande à  $20 \mu\text{m}$ <sup>11</sup>. Nous avons utilisé pour les PAH une section efficace plus récente, déduite des observations ISO et Spitzer (voir §3.2.2).
- 4) Dans les modèles précédents, les transitions rovibrationnelles obéissant à la règle de sélection  $\Delta v = -1$  et  $\Delta J = 0$  ont été négligées. Bien qu'elles ne modifient pas le nombre quantique rotationnel de la molécule, notre modèle montre que leur taux de transition est aussi élevé que celui des transitions  $\Delta J = \pm 1$ . Nous avons inclus ces transitions dans notre modèle.
- 5) Enfin, il nous semblait essentiel de fournir à la communauté un modèle de rotation des PAH qui soit directement comparable aux données observationnelles. Nous avons étudié les variations de l'émission de rotation en fonction des conditions astrophysiques (intensité du champ de rayonnement §5.3.3, densité d'hydrogène §5.3.4), des propriétés des grains (distribution de tailles Fig. 5.12, section efficace §5.3.2, taille minimale des PAH, abondance, moment dipolaire électrique) et comment on peut les retrouver à partir des observations (voir chapitre 7).

---

<sup>11</sup>Cette bande effective à  $20 \mu\text{m}$  est la longueur d'onde moyenne des photons IR émis après absorption d'un photon UV dans le cas d'un PAH avec 90 atomes. Cette valeur est obtenue à partir de la section efficace décrite par Léger *et al.* (1989) qui comprend 5 bandes à 3.3, 6.2, 7.7, 8.6 et  $11.3 \mu\text{m}$ , et ils modélisent la section efficace dans l'IR lointain par trois bandes à 25, 60 et  $100 \mu\text{m}$ .

# EMISSION ROTATIONNELLE DES PAH INTERSTELLAIRES

## Sommaire

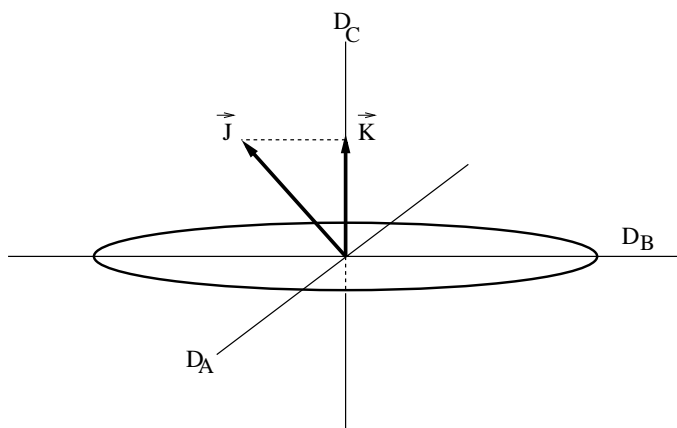
<b>5.1</b>	<b>Un nouveau modèle de rotation des PAH interstellaires</b>	<b>73</b>
5.1.1	Description de la rotation	74
5.1.2	Transitions radiatives	75
5.1.3	Moment dipolaire électrique des PAH	76
5.1.4	Marche au hasard	78
<b>5.2</b>	<b>Processus contribuant à l'excitation rotationnelle</b>	<b>79</b>
<b>5.3</b>	<b>Moment angulaire le plus probable <math>J_0</math></b>	<b>88</b>
5.3.1	Influence de l'environnement	89
5.3.2	Influence de la section efficace d'absorption	89
5.3.3	Influence du champ de rayonnement incident	90
5.3.4	Influence de la densité du gaz $n_H$	92
5.3.5	Influence du moment dipolaire électrique $\mu$	93
<b>5.4</b>	<b>Distribution du moment angulaire <math>n(J)</math></b>	<b>94</b>
<b>5.5</b>	<b>Température rotationnelle</b>	<b>96</b>
<b>5.6</b>	<b>Emission rotationnelle résultante</b>	<b>96</b>
<b>5.7</b>	<b>Comparaison avec les modèles précédents</b>	<b>102</b>
<b>5.8</b>	<b>Conclusions</b>	<b>104</b>

## 5.1 Un nouveau modèle de rotation des PAH interstellaires

Toutes les grandeurs utiles pour la réalisation d'un modèle de rotation des PAH interstellaires répondant au cahier des charges défini au §4.2.4 sont décrites ici. Cela passe dans un premier temps par la définition de tous les opérateurs utiles pour décrire la rotation et par l'énoncé des hypothèses simplificatrices que nous faisons. Dans un second temps les règles de sélection pour les transitions rovibrationnelles et rotationnelles qui nous intéressent sont données. Dans un troisième temps, le moment dipolaire électrique des PAH interstellaires  $\vec{\mu}$  est estimé, l'émission de photons

rotationnels étant proportionnelle à  $\mu^2$ . Finalement, nous décrivons la façon dont tous les processus excitant ou ralentissant la rotation sont pris en compte pour le calcul de la distribution du moment angulaire  $n(J)$ .

### 5.1.1 Description de la rotation



**Figure 5.1** - Définition des axes et opérateurs de rotation d'un PAH :  $D_A$ ,  $D_B$  et  $D_C$  sont les axes principaux d'inertie et  $\vec{J}$  est le moment angulaire total de la molécule avec  $\vec{K}$  sa projection sur  $D_C$ .

Pour décrire la rotation d'une molécule, l'opérateur pertinent est le moment angulaire total  $\vec{J}$  qui inclut la contribution des électrons et des noyaux sans le spin. On considère que les PAH sont des molécules planes de forme "toupie symétrique", c'est-à-dire des disques fins. Ceci est une bonne approximation pour des molécules très symétriques comme le coronène ou l'ovalène. Le mouvement du PAH va donc être la combinaison de la rotation autour de l'axe de la molécule et de la précession de cet axe autour du vecteur du moment angulaire total. On note  $D_A$ ,  $D_B$  et  $D_C$  les axes principaux d'inertie avec  $D_C$  perpendiculaire au plan de la molécule et parallèle à  $Oz$ .  $I_C$  est le moment d'inertie associé à  $D_C$  et  $I_A$  et  $I_B$  ceux associés à  $D_A$  et  $D_B$  respectivement, avec  $D_A$  et  $D_B$  parallèles à  $Ox$  et  $Oy$  (voir Fig. 5.1). L'hamiltonien de rotation pour un rotateur rigide s'écrit alors :

$$H = \frac{J_x^2}{2I_A} + \frac{J_y^2}{2I_B} + \frac{J_z^2}{2I_C} \quad (5.1)$$

où  $J_x$ ,  $J_y$  et  $J_z$  sont les projections de  $\vec{J}$  suivant les trois axes d'inertie. Nous supposons ici que les PAH sont des disques uniformes donc  $I_A = I_B = \frac{Ma^2}{4} = \frac{I_C}{2}$  avec  $M$  la masse de la molécule. En choisissant  $D_C = Oz$ , on a :

$$H = \frac{J^2}{2I_B} + J_z^2 \left( \frac{1}{2I_C} - \frac{1}{2I_B} \right) \quad (5.2)$$

L'énergie rotationnelle est alors :  $E_{rot} = BJ(J+1) + (C-B)K^2$ , où  $B/hc = \hbar/4\pi cI_B = 6.9 N_C^{-2} \text{ cm}^{-1}$  et  $C$  sont les constantes rotationnelles<sup>1</sup> associées à  $D_B$  et  $D_C$ . Le nombre quantique  $K$  est la valeur absolue des valeurs propres de  $J_z$  ( $K = -J, \dots, +J$ ).

<sup>1</sup>En négligeant la contribution des atomes d'hydrogène qui représente moins de 5 % du total.

Le modèle de rotation décrit dans ce chapitre a pour but de fournir des résultats comparables aux observations disponibles. Ces dernières étant des observations en bande large, nous faisons ici deux hypothèses simplificatrices :

- 1) On considère que la constante rotationnelle  $B$  est la même pour tous les niveaux vibrationnels  $\nu$  ( $B = B_{\nu}$ ). En réalité, la constante rotationnelle diffère légèrement de sa valeur à l'équilibre  $B_{\nu} = h/8\pi^2 c I_B$  (Herzberg 1968ab; Townes et Schawlow 1975) :

$$B(\nu) = B_{\nu} - \alpha_e \left( \nu + \frac{1}{2} \right) + \gamma_e \left( \nu + \frac{1}{2} \right)^2 \dots \quad (5.3)$$

Les constantes  $\alpha_e$  et  $\gamma_e$  sont négligeables comparées à  $B_{\nu}$  car la variation de la distance internucléaire due aux vibrations est très faible comparée à la distance internucléaire elle-même. Ceci est d'autant plus vrai que la fréquence du mode de vibration est élevée, signe d'une liaison rigide qui s'allongera moins sous l'effet de la force centrifuge.

- 2) On néglige les termes de distorsion centrifuge dans l'équation de l'énergie rotationnelle qui sont petits pour les grosses molécules (Herzberg 1968ab; Lovas *et al.* 2005). Si on prend en compte l'effet de la distorsion centrifuge, on peut écrire pour l'énergie rotationnelle :

$$E_{rot} = BJ(J+1) + (C-B)K^2 - D_J J^2(J+1)^2 - D_{JK} J(J+1)K^2 - D_K K^4 \quad (5.4)$$

avec les constantes de distorsion centrifuge  $D_J$ ,  $D_{JK}$  et  $D_K$  proportionnelles à  $B^2/\omega$  où  $\omega$  est la fréquence de vibration de la molécule. Les constantes de distorsion sont donc très petites devant les constantes rotationnelles  $B$  et  $C$ .

## 5.1.2 Transitions radiatives

Lors de l'absorption ou de l'émission d'un photon par un PAH, un quantum  $\hbar$  de moment angulaire est échangé. Dans le milieu interstellaire cet échange se fait au cours de transitions électroniques, rovibrationnelles<sup>2</sup> ou rotationnelles qui peuvent modifier le nombre quantique rotationnel  $J$ . Les transitions électroniques (qui ont surtout lieu en absorption) sont beaucoup moins nombreuses que les rovibrationnelles : nous les négligerons pour l'excitation rotationnelle<sup>3</sup>. Nous discutons donc dans la suite les règles de sélection pour les transitions rovibrationnelles et rotationnelles.

Pour une toupie symétrique, les règles de sélection dipolaires électriques rovibrationnelles sont :

$$\begin{cases} \Delta J = 0, \pm 1 \\ \Delta K = 0, \pm 1 \end{cases}$$

en supposant que le moment dipolaire électrique vaut  $\vec{\mu} = \vec{\mu}_z + \vec{\mu}_B$  avec  $\vec{\mu}_z$  la composante sur l'axe de la molécule  $D_C$  et  $\vec{\mu}_B$  la composante perpendiculaire à  $D_C$  (Townes et Schawlow 1975).

On distingue deux types de transitions : les transitions parallèles avec  $\Delta K = 0$  pour lesquelles le changement du moment dipolaire électrique est parallèle à  $D_C$  lors de la transition et les transitions perpendiculaires avec  $\Delta K = \pm 1$  pour lesquelles le changement du moment dipolaire est perpendiculaire à  $D_C$ . Les transitions parallèles correspondent ainsi à des vibrations hors du plan de la

<sup>2</sup>Voir chapitre 3.

<sup>3</sup>Conservation de l'énergie :  $E_{abs}N_{abs} = E_{em}N_{em} \Rightarrow N_{em}/N_{abs} \sim 40$  dans le cas où le PAH est soumis à l'ISRF.

molécule et les transitions perpendiculaires à des vibrations dans le plan. Pour les 18 bandes ro-vibrationnelles décrites dans le chapitre 3, le caractère parallèle ou perpendiculaire des transitions est indiqué dans les Tab. 3.1 et 3.2.

La partie angulaire des moments de transition est décrite par les facteurs de Hönl-London que nous donnons ci-dessous avec les fréquences des transitions vibrationnelles correspondantes (Herzberg 1968ab; Townes et Schawlow 1975). La fréquence centrale de la transition  $i$  est notée  $\nu_{i0}$  (voir Tab. 3.1, 3.2) :

- pour  $\Delta J = 0, \pm 1$  et  $\Delta K = 0$  (transitions parallèles ou hors du plan) :

$$\begin{cases} A_{KJ^+} = \frac{2((J+1)^2 - K^2)}{(J+1)(2J+1)^2} \\ \nu_i^+ = \nu_{i0} - 2B(J+1) \end{cases}$$

$$\begin{cases} A_{KJ^-} = \frac{2(J^2 - K^2)}{J(2J+1)^2} \\ \nu_i^- = \nu_{i0} + 2BJ \end{cases}$$

$$\begin{cases} A_{KJ^0} = \frac{2K^2}{J(J+1)(2J+1)} \\ \nu_i^0 = \nu_{i0} \end{cases}$$

- pour  $\Delta J = 0, \pm 1$  et  $\Delta K = \pm 1$  (transitions perpendiculaires ou dans le plan) :

$$\begin{cases} A_{KJ^+} = \frac{(J+2 \pm K)(J+1 \pm K)}{2(J+1)(2J+1)^2} \\ \nu_i^+ = \nu_{i0} - 2B(J+1) + (B-C)(1 \pm 2K) \end{cases}$$

$$\begin{cases} A_{KJ^-} = \frac{(J-1 \mp K)(J \mp K)}{2J(2J+1)^2} \\ \nu_i^- = \nu_{i0} + 2BJ + (B-C)(1 \pm 2K) \end{cases}$$

$$\begin{cases} A_{KJ^0} = \frac{(J+1 \pm K)(J \mp K)}{2J(J+1)(2J+1)} \\ \nu_i^0 = \nu_{i0} + (B-C)(1 \pm 2K) \end{cases}$$

Les facteurs de Hönl-London donnés ici sont normalisés de telle sorte que :  $\sum A_{KJ}(\Delta K = 0) = 1$  et  $\sum A_{KJ}(\Delta K = \pm 1) = 1$ . En effet, ces facteurs sont les poids assignés à chaque type de transition rotationnelle (parallèle ou perpendiculaire) dans un même mode de vibration.

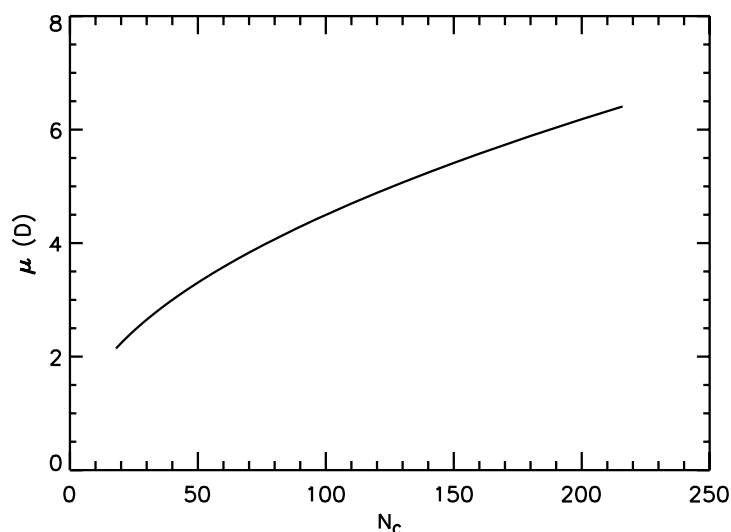
### 5.1.3 Moment dipolaire électrique des PAH

L'émission de rotation des PAH dépend de leur moment dipolaire électrique permanent,  $\vec{\mu}$ . Un PAH symétrique, neutre et totalement hydrogéné aurait un moment dipolaire électrique nul. Les



Espèces		$\mu$ (D)	
Naphtalène	$C_{10}H_7^+$	0.82-0.93	perte d'un H
Anthracène	$C_{14}H_9^+$	0.76-0.98	"
Pyrène	$C_{16}H_9^+$	0.86-1.05	"
Coronène	$C_{24}H_{11}$	0.92	"
	$C_{24}H_{10}$	2.1	perte de deux H
Ovalène	$C_{32}H_{13}$	0.85	perte d'un H
	$C_{31}H_{14}N$	0.07	un N au centre
	$C_{31}H_{14}N^+$	1.55	"

**Tableau 5.1** - Moments dipolaires calculés pour quelques PAH (T. Pino, communication privée). Dans le cas de la perte d'un atome d'hydrogène, les valeurs sont données pour l'éloignement minimum et maximum entre le centre de masse de la molécule et la liaison C-H brisée. Pour le coronène,  $\mu$  est également donné dans le cas de la perte de 2 atomes d'H adjacents. L'effet d'une substitution azote/hydrogène à une position proche du centre de masse est donné pour l'ovalène.



**Figure 5.2** - Moment dipolaire électrique des PAH ( $1 \text{ D} = 3.33564 \times 10^{-30} \text{ C.m} = 10^{-18} \text{ c.g.s.}$ ) en fonction du nombre d'atomes de carbone.

analyses spectroscopiques de l'émission IR des PAH suggèrent qu'ils peuvent être ionisés, partiellement hydrogénés (Le Page *et al.* 2003) voire substitués (Peeters *et al.* 2002, 2004). Pour des tailles de 10 à 30 atomes de carbone, un PAH ayant perdu un atome d'hydrogène a un moment dipolaire de quelques dixièmes de Debye à 1 D. Un PAH sous forme cationique où un atome de carbone est substitué par un atome d'azote aurait  $\mu \sim 1$  à 2 D (voir la table 5.1.3). De plus, Moutou *et al.* (2000) ont proposé que des PAH non plans contenant des cycles pentagonaux pourraient exister dans le milieu interstellaire : de telles espèces possèdent également un moment dipolaire. Lovas *et al.* (2005) ont mesuré le moment dipolaire électrique du corannulène<sup>4</sup> ( $C_{20}H_{10}$ ) : ils obtiennent 2 D. Le moment dipolaire électrique dépendant très fortement de la géométrie et de la composition

<sup>4</sup>Le corannulène est une espèce non-plane composée d'un cycle pentagonal en son centre, entouré de 5 cycles benzéniques.

chimique des molécules, il est très difficile d'en faire une estimation pour les PAH interstellaires. Dans la suite de cette thèse, on suppose que le moment dipolaire électrique d'un PAH peut être décomposé en une partie intrinsèque (due à la géométrie de la molécule) et en une partie due à l'état de charge du grain. On peut alors écrire :

$$\mu = \mu_i + \epsilon a Z e \quad (5.5)$$

où  $\mu_i$  est la partie intrinsèque,  $Z$  est la charge du grain et  $\epsilon a$  est le déplacement entre le centre de masse et le centre de charge. En accord avec Draine et Lazarian (1998b), on adopte  $\epsilon = 0.01$ , soit un déplacement de 1% entre le centre de masse et le centre de charge. Quant au moment dipolaire électrique intrinsèque, on peut considérer qu'un PAH est constitué d'un réseau d'atomes de carbone sur lequel sont placés aléatoirement des atomes d'hydrogène. Plus le réseau est grand, plus le moment dipolaire est grand. De même, la liaison C-H ayant un moment dipolaire non nul (0.4 D), le moment dipolaire peut augmenter avec le nombre d'atomes d'hydrogène disséminés sur le squelette carboné. Un PAH peut être représenté comme un ensemble de  $n$  dipôles orientés aléatoirement, le nombre de dipôles étant proportionnel au nombre total d'atomes dans la molécule. Si on considère que la molécule n'est pas ordonnée, mais plutôt constituée d'un ensemble de sous-structures disposées de manière aléatoire, on peut alors considérer que le moment dipolaire électrique augmente en suivant une marche au hasard et écrire :  $\mu_i = m \sqrt{N_{at}}$ , où  $m$  est une constante positive et  $N_{at}$  le nombre d'atomes dans la molécule. On rappelle que  $N_{at} = N_C + N_H = N_C + \sqrt{6N_C}$  pour les molécules du groupe  $D_{6h}$ . En accord avec Rouan *et al.* (1992) et Draine et Lazarian (1998b), on utilisera dans la suite de ce chapitre  $m = 0.4$  D (moment dipolaire électrique d'une liaison C-H). On obtient alors pour le moment dipolaire électrique (Fig. 5.2) :

$$\mu = 0.4 \sqrt{N_{at}} + 4.3 \times 10^{-2} \sqrt{N_C} Z \quad (\text{en Debye}) \quad (5.6)$$

Il est à noter que tous les résultats concernant l'émission rotationnelle des PAH présentés dans la suite de cette thèse dépendent de  $\mu$ . Il sera un paramètre libre à ajuster lorsqu'on voudra comparer le modèle aux observations. On peut également remarquer que le moment dipolaire électrique des PAH est dominé par sa composante intrinsèque dans tous les environnements interstellaires ( $\mu_i \gg \epsilon a Z e$ ). Les ajustements seront donc obtenus en faisant varier la constante  $m$  (chapitre 7). D'après le Tab. 5.1.3, cette constante devrait être comprise entre  $\sim 0.1$  et  $\sim 0.6$  D pour  $N_C \leq 50$ .

#### 5.1.4 Marche au hasard

La distribution du moment angulaire des PAH interstellaires s'établit grâce aux interactions avec les photons (absorption/émission) et avec les atomes du gaz. Dans le cas du milieu interstellaire diffus, où le champ de rayonnement est l'ISRF (Mathis *et al.* 1983), un PAH composé de 50 atomes de carbone absorbe en moyenne un photon UV/visible tous les 70 jours. Ce temps est comparable au temps moyen entre deux émissions de photons purement rotationnels et au temps entre deux collisions PAH-hydrogène (pour une densité et une température du gaz de  $100 \text{ cm}^{-3}$  et 100 K respectivement). Cependant les photons UV/visible ne contribuent que peu à la modification du moment angulaire. En effet, ces photons conduisent au maximum à l'échange d'un moment angulaire  $\hbar$  alors que les photons IR émis à chaque absorption d'un seul photon UV/visible sont nombreux et dominant complètement l'influence du photon absorbé (cf §5.1.2). Pour estimer la distribution du moment angulaire, les processus suivants sont pris en compte :

- émission de photons IR rovibrationnels (excitation et freinage)

- émission de photons purement rotationnels (freinage)
- formation de H<sub>2</sub> à la surface des PAH (excitation)
- collisions avec les atomes et les ions du gaz (excitation et freinage)
- entraînement par les ions H<sup>+</sup> et C<sup>+</sup> du plasma (excitation et freinage)
- effet photoélectrique (excitation)

Tous ces processus sont décrits au §5.2 et conduisent à un changement du moment angulaire du PAH. Rouan *et al.* (1997) ont montré que la construction de la distribution du moment angulaire  $n(J)$  peut être traitée comme une marche au hasard stationnaire dans un puits de potentiel avec un minimum pour  $J = J_0$  (moment angulaire le plus probable). Quand  $J = J_0$ , le taux de changement de  $J$  est nul<sup>5</sup> :

$$\left[ \sum_i (\tau^{-1} \Delta J)_i \right]_{J=J_0} = 0 \quad (5.7)$$

où  $\Delta J$  est la variation de  $J$  produite par le processus  $i$  et  $\tau$  est le temps moyen entre deux évènements  $i$  successifs. Dans le paragraphe suivant (§5.2), les taux de variation du moment angulaire  $(\tau^{-1} \Delta J)_i$  sont estimés pour tous les processus décrits précédemment.

## 5.2 Processus contribuant à l'excitation rotationnelle

Les différents processus intervenant dans la construction de la distribution du moment angulaire  $n(J)$ , soit en l'excitant soit en le désexcitant, sont décrits dans les paragraphes qui suivent. Les interactions entre les grains et les atomes du gaz dépendent de la structure et de l'état chimique des PAH, paramètres encore mal connus aujourd'hui. Dans le but d'obtenir des valeurs quantitatives des  $(\tau^{-1} \Delta J)$  pour chaque processus, nous faisons des hypothèses simplificatrices. Dans le cas de la formation du dihydrogène, nous dérivons uniquement une limite supérieure. Les résultats concernant les collisions avec les atomes du gaz et l'entraînement par le plasma sont directement obtenus à partir des calculs de Draine et Lazarian (1998b).

### 1) Emission rovibrationnelle IR

Comme nous l'avons discuté précédemment dans le §5.1.1, les règles de sélection pour l'émission IR rovibrationnelle sont :  $\Delta v = -1$ ,  $\Delta J = 0, \pm 1$  et  $\Delta K = 0, \pm 1$  si on considère que les PAH interstellaires sont de forme "toupie symétrique". L'émission IR peut donc être un processus exciteur ( $\Delta J = +1$ ) ou désexciteur ( $\Delta J = -1$ ) pour la rotation. On appelle  $W^+$ ,  $W^-$  et  $W^0$  les taux de transitions pour  $\Delta J = +1$ ,  $\Delta J = -1$  et  $\Delta J = 0$  respectivement. Pour une transition rovibrationnelle  $(v, J, K) \rightarrow (v-1, J+\Delta J, K+\Delta K)$ , le taux est proportionnel au coefficient d'Einstein d'émission spontanée  $A_{if} \propto \nu^3 A_{KJ}$  où les  $A_{KJ}$  sont les coefficients de Hönl-London donnés au paragraphe 5.1.1. On exprime les taux de transitions en terme de section efficace :

$$A_{if} = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} B_{if}$$

$$\text{or } B_{if} = \frac{c}{h\nu} (\sigma \Delta \nu) \quad \Rightarrow \quad A_{if} = 8\pi c E^2 (\sigma \Delta \nu) \quad (5.8)$$

avec  $E$  en  $\text{cm}^{-1}$ . Si on appelle  $P(h\nu)$  le nombre de photons émis à la fréquence  $\nu$  (voir §3.4.1), on

<sup>5</sup>Cette équation est résolue avec la fonction `zbrent` décrite dans au §9.1, du livre *Numerical Recipes*, intitulé *Root Finding and Nonlinear Sets of Equations : Bracketing and Bisection* (Press *et al.* 1992).

peut écrire :

$$W_i^{\pm/0} = 8\pi c (\sigma \Delta \nu)_i \sum_{K=0}^J (v_i^{\pm/0})^2 A_{KJ}^{\pm/0} P(h\nu_i^{\pm/0}) \quad (\text{en s}^{-1}) \quad (5.9)$$

$$\text{avec } P(h\nu_i^{\pm/0}) = \left[ \sum_u P_u \sum_{l=0}^{u-1} \frac{g_l}{g_u} \Delta E_u G_{l \rightarrow u}(h\nu_i^{\pm/0}) + \sum_u P_u \left( 1 - \frac{h\nu_i^{\pm/0}}{\Delta E_u} \right) \right] \quad (5.10)$$

où les  $W_i^{\pm/0}$  sont les taux de transition pour  $\Delta J = 0, \pm 1$  et pour la transition numéro  $i$  de fréquence  $\nu_i^{\pm/0}$  (voir §5.1.1). Comme les termes dépendant de  $J$  et de  $K$  dans l'expression de  $\nu_i^{\pm/0}$  sont toujours beaucoup plus petits que  $\nu_i^0$ , on les néglige et on considère donc que  $P(\nu_i^{\pm/0}) \sim P(h\nu_i^0)$ . Les taux de transitions totaux sont obtenus en sommant sur toutes les bandes :  $W^{\pm/0} = \sum_{i=1}^{18} W_i^{\pm/0}$ . Finalement, le taux de variation du moment angulaire dû à l'émission IR rovibrationnelle est :

$$(\tau^{-1} \Delta J)_{IR} = W^+(J) - W^-(J) \quad (\text{en s}^{-1}) \quad (5.11)$$

## 2) Emission purement rotationnelle

L'émission spontanée de photons purement rotationnels modifie le moment angulaire des PAH. Les règles de sélection pour ce type de transitions sont  $\Delta J = -1$  et  $\Delta K = 0$  (Townes et Schawlow 1975). En effet, en raison de la symétrie de la molécule considérée, il ne peut pas y avoir de moment dipolaire électrique perpendiculairement à l'axe de symétrie. Aucun moment n'est donc appliqué le long de cet axe par le champ électrique du rayonnement. Le principe de correspondance indique donc que le moment angulaire le long de l'axe de symétrie de la molécule ne peut pas changer quand un photon rotationnel est émis ( $\Leftrightarrow \Delta K = 0$ ). Le moment dipolaire électrique de la molécule est parallèle à l'axe de symétrie de la molécule qui précède autour du moment angulaire, de direction fixée<sup>6</sup>. Le taux de transition est simplement le coefficient d'émission spontanée  $A_{J,J-1}$  et on peut donc écrire :

$$(\tau^{-1} \Delta J)_{rot} = -1 \times A_{J,J-1} \quad (5.12)$$

$$A_{J,J-1} = \frac{512\pi^4}{3h^4c^3} B^3 J^3 \sum_K |\mu_{J,J-1}|^2 \quad (5.13)$$

$$\begin{aligned} \sum_K |\mu_{J,J-1}|^2 &= \mu^2 \sum_K A_{KJ-} \\ &= \mu^2 \sum_{K=0}^J \frac{2(J^2 - K^2)}{J(2J+1)^2} \\ &= \mu^2 \frac{(2J+1)^2 - (J+2)}{3(2J+1)^2} \end{aligned} \quad (5.14)$$

où  $\mu$  est le moment dipolaire électrique de la molécule et  $A_{KJ-}$  est le facteur de Hönl-London correspondant aux règles de sélection données précédemment. Finalement, le taux de variation du moment angulaire dû à l'émission purement rotationnelle est<sup>7</sup> :

$$(\tau^{-1} \Delta J)_{rot} = -1.8 \times 10^{-14} \left( \frac{N_C}{50} \right)^{-6} \left( \frac{\mu}{1 \text{ D}} \right)^2 \times J^3 \frac{(2J+1)^2 - (J+2)}{(2J+1)^2} \quad (\text{en s}^{-1}) \quad (5.16)$$

<sup>6</sup>On voit donc que si aucun autre effet n'est pris en compte (comme l'étirement centrifuge), alors la fréquence de rotation de la molécule ne dépend pas de  $K$  ou du moment d'inertie  $I_C$ .

<sup>7</sup>On peut par ailleurs se demander si le principe de correspondance est respecté, c'est-à-dire si on retrouve l'expression classique dans le cas où  $J \gg 1$ . Pour un oscillateur harmonique classique, Rybicki et Lightman (1979) montrent

### 3) Interactions gaz-grains

Nous traitons les collisions exactement comme Draine et Lazarian (1998b). On suppose qu'une espèce qui arrive à la surface d'un PAH plan, avec un moment angulaire nul en moyenne, s'y colle avant d'être évaporée sous forme neutre, quelle qu'ait été sa forme initiale, à partir du même point que son point d'arrivée. Les collisions résultent donc en une contribution qui freine la rotation et en une contribution qui l'accélère. On considère que toutes les espèces impactantes ont une distribution de vitesse Maxwellienne  $f_i(v)$  telle que :

$$f_i(v) = \left( \frac{m_i}{2\pi k_B T_{gaz}} \right)^{3/2} \exp\left( -\frac{m_i v^2}{2k_B T_{gaz}} \right) \quad \text{et} \quad \langle v \rangle = \sqrt{\frac{8k_B T_{gaz}}{\pi m_i}} \quad (5.17)$$

Dans la suite, nous considérons trois cas : premièrement les collisions des PAH avec des atomes neutres, deuxièmement avec des ions et enfin, nous considérons dans un troisième temps l'influence des rencontres non collisionnelles avec des ions (interactions électromagnétiques entre le dipôle et les ions passant à proximité). On va donc estimer dans cette partie l'influence des couples  $\vec{\mathcal{M}}_i$  appliqués par les particules du gaz interstellaire sur le moment angulaire des PAH. Les contributions des différents types d'interactions sont additives. On utilise le théorème du moment cinétique pour estimer le moment angulaire emporté par les particules qui quittent la surface du grain :

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \sum_i \vec{\mathcal{M}}_i \quad \text{où} \quad \|\vec{L}\| = I\omega = \hbar J \quad \text{est le moment cinétique du grain} \quad (5.18)$$

Ce taux est directement proportionnel au taux auquel les espèces impactantes arrivent sur le grain. Draine et Lazarian (1998b) normalisent leurs calculs par le couple appliqué par la collision avec un atome d'hydrogène neutre divisé par  $\omega$ . La probabilité  $P$  de quitter la surface du grain avec un angle  $\theta$  est détaillée au §4 qui traite de la formation de  $H_2$ . Ce couple s'exprime comme :

$$\begin{aligned} \vec{\mathcal{M}}_H &= \tau_H^{-1} (\vec{r} \wedge \vec{p}) && \text{où } \tau_H^{-1} \text{ est le taux de collisions par seconde} \\ &= n_H v_H \sigma (a \times m_H a \omega \langle P(\theta) \sin(\theta) \rangle) \\ &= n_H \left( \frac{8k_B T_{gaz}}{\pi m_H} \right)^{1/2} \pi a^2 \times a m_H a \omega \times \frac{2}{3} \Rightarrow \vec{\mathcal{M}}_H = n_H \left( \frac{8k_B T_{gaz}}{\pi m_H} \right)^{1/2} \pi a^2 m_H \frac{2a^2}{3} \omega \end{aligned} \quad (5.19)$$

que la puissance émise par un dipôle tournant est :

$$P = \frac{2\omega^4 \mu^2 \sin^2 \theta}{3c^3} = \frac{4}{9} \frac{\mu^2 \omega^4}{c^3} \quad (5.15)$$

où  $\theta$  est l'angle entre la vitesse angulaire  $\omega$  et le moment dipolaire  $\vec{\mu}$ . Si on suppose que l'orientation de  $\vec{\mu}$  n'est pas corrélée avec  $\omega$  alors  $\langle \sin^2 \theta \rangle = 2/3$  et on obtient le membre de droite. Par ailleurs, l'expression exacte de la mécanique quantique pour exprimer le coefficient d'Einstein d'émission spontanée de l'état supérieur  $j$  à l'état inférieur  $i$  est :

$$A_{ji} = \frac{64\pi^4 \nu^3}{3hc^3} \sum_K |\mu_{j,j-1}|^2$$

ce qui donne pour la puissance émise :  $P = A_{ji} \times h\nu = \frac{4}{3} \frac{\mu^2 \omega^4}{c^3} \sum_K A_{Kj-} \rightarrow \frac{4}{9} \frac{\mu^2 \omega^4}{c^3}$  quand  $J \gg 1$ .

L'expression quantique est donc bien analogue à l'expression classique pour les nombres quantiques rotationnels élevés.

Ainsi la contribution au freinage d'une particule  $i$  ayant une vitesse  $v$  et arrivant avec un paramètre d'impact  $b \leq b_{max}(v)$  est :

$$F_i \propto \int_0^\infty 4\pi v^2 dv f_i(v) v \left[ \frac{b_{max}(v)}{a} \right]^2 \quad (5.20)$$

Le facteur  $F_i$  est égal à 1 dans le cas d'un grain neutre dans un gaz composé uniquement d'hydrogène atomique neutre. D'autre part, on utilise la variation d'énergie cinétique rotationnelle du grain pour estimer la contrepartie excitatrice (par collage et évaporation) :

$$\frac{dE_c}{dt} = \frac{d}{dt} \left( \frac{1}{2} I \omega^2 \right) = \sum_i \vec{\mathcal{M}}_i \cdot \vec{\omega} \implies \frac{dL^2}{dt} = 2 \sum_i \vec{\mathcal{M}}_i \cdot \vec{L} \quad (5.21)$$

La normalisation est faite en considérant un atome d'hydrogène neutre quittant la surface avec une température  $T_{gaz}$  et on obtient alors :

$$2\vec{\mathcal{M}}_H \cdot \vec{L} = n_H \left( \frac{8k_B T_{gaz}}{\pi m_H} \right)^{1/2} 4\pi a^4 m_H k_B T_{gaz} \quad (5.22)$$

Et alors, la contribution à l'excitation des particules qui arrivent à la surface du grain est :

$$G_i \propto \int_0^\infty 4\pi v^2 dv f_i(v) v^3 \left[ \frac{b_{max}(v)}{a} \right]^4 \quad \text{car } k_B T_{gaz} \propto v^2 \quad (5.23)$$

et celle des particules qui repartent (évaporation) avec une température  $T_{év}$  est :

$$G_i^{év} \propto F_i \frac{\int_0^\infty 4\pi v^2 dv f_i^{év}(v) v^3 \left[ \frac{b_{max}^{év}(v)}{a} \right]^4}{\int_0^\infty 4\pi v^2 dv f_i^{év}(v) v \left[ \frac{b_{max}^{év}(v)}{a} \right]^2} \quad (5.24)$$

où Draine et Lazarian (1998b) considèrent que les particules qui s'évaporent doivent avoir la même distribution de moment angulaire que si elles arrivaient avec une température égale à la température d'évaporation. Le paramètre à déterminer pour chaque type de collisions est donc le paramètre d'impact maximal  $b_{max}$  pour lequel la collision a lieu.

Avant d'entrer dans le détail des divers processus, les facteurs de conversion entre le formalisme de Draine et Lazarian (1998b) et le nôtre sont donnés, ainsi que la façon dont la charge des PAH est estimée.

### ♣ Facteurs de conversion

Dans le cas des collisions avec les atomes neutres et ionisés du gaz interstellaire et dans le cas de l'entraînement par le plasma, nous avons décidé d'utiliser les calculs faits par Draine et Lazarian (1998b). Leur formalisme fait appel à des grandeurs sans dimension, normalisées au taux de collisions avec les atomes d'hydrogène neutres, pour décrire les différents processus participant à la construction de  $n(J)$  : les constantes  $F_i$  pour les processus qui ralentissent la rotation et les constantes  $G_i$  pour ceux qui l'excitent. Pour la partie freinage, Draine et Lazarian (1998b) écrivent :

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\omega} \frac{d}{dt} (I\omega) &\propto F \Leftrightarrow \frac{dJ}{dt} \propto -\frac{J}{I} \times F \quad \text{avec } I\omega = \hbar J \\ \Rightarrow (\tau^{-1} \Delta J) &= -J \times F \times 4.1 \times 10^{-10} \sqrt{\frac{T_{gaz}}{100 \text{ K}}} \left( \frac{n_H}{100 \text{ cm}^{-3}} \right) \quad (\text{en s}^{-1}) \quad (5.25) \end{aligned}$$



et pour la contrepartie excitatrice :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(I\omega)^2 &\propto G \Leftrightarrow \frac{dJ}{dt} \propto \frac{1}{J} \times G \\ \Rightarrow (\tau^{-1}\Delta J) &= \frac{1}{J} \times G \times 3.1 \times 10^{-5} \left(\frac{T_{\text{gaz}}}{100 \text{ K}}\right)^{3/2} \left(\frac{n_H}{100 \text{ cm}^{-3}}\right) \left(\frac{N_C}{50}\right) \quad (\text{en s}^{-1}) \quad (5.26) \end{aligned}$$

où les constantes  $F$  et  $G$  peuvent être trouvées dans l'Annexe B de Draine et Lazarian (1998b).

#### ♣ Charge moyenne des grains

Pour étudier les processus de collisions et l'effet photoélectrique, il est nécessaire de connaître la charge des grains. La charge des grains est le résultat de l'équilibre entre l'éjection d'électrons par effet photoélectrique, la recombinaison avec des ions positifs ( $\text{H}^+$  et  $\text{C}^+$  essentiellement) et la recombinaison d'électrons sur les grains. La charge des grains fluctue donc au cours du temps, mais nous ne prendrons pas cet aspect en compte. Au lieu d'utiliser une distribution de charges, nous allons calculer la charge moyenne pour chaque taille de grain considérée. D'après Draine et Sutin (1987), on peut exprimer la charge moyenne des grains comme :

$$\langle Z \rangle = Z_g = -\frac{1}{1 + \sqrt{\tau_0/\tau}} + \psi\tau \quad (5.27)$$

où  $\tau_0$  est la température caractéristique du gaz et  $\tau$  sa température réduite :

$$\tau = \frac{akT_{\text{gaz}}}{e^2} = 3.8 \times 10^{-4} \sqrt{\frac{N_C}{50}} \left(\frac{T_{\text{gaz}}}{100 \text{ K}}\right) \quad (5.28)$$

Ensuite, on définit  $m_{eff}$  la masse effective des ions :  $m_{eff} = \left(\frac{n_e s_e}{n_i}\right)^2 \left(\frac{m_i}{m_p}\right)$

avec  $n_e$  et  $n_i$  les densités d'électrons et d'ions,  $m_i$  et  $m_p$  les masses des ions et des protons et  $s_e$  le coefficient de collage des électrons qui atteignent la surface des grains. Dans le cas de grains plans, Umebayashi et Nakano (1980) ont montré que  $s_e \sim 1$  et on obtient alors  $\tau_0 = 1.39 \times 10^{-3} m_{eff}^{-1}$ . Cette température caractéristique  $\tau_0$  est la température réduite pour laquelle le taux de collisions entre les ions et un grain de charge  $Z = -1$  est égale au taux de collisions entre les électrons et un grain neutre. Ainsi, pour  $\tau = \tau_0$ , les probabilités d'avoir un grain dans l'état neutre ou avec une charge  $Z = -1$  sont égales. Pour  $\tau < \tau_0$ , la forte attraction coulombienne amène à une neutralisation rapide des grains ayant  $Z = -1$  et l'état de charge dominant est  $Z = 0$ . Dans le cas où  $\tau > \tau_0$ , l'état de charge dominant est  $Z < 0$ . Si on se place dans le cas d'un plasma composé d'électrons et de protons ( $m_{eff} = 1$ ), Draine et Sutin (1987) montrent que le facteur  $\psi$  vaut  $-2.5$ . On peut ainsi estimer la charge moyenne des grains en fonction de leur taille. Pour un PAH avec 50 atomes de carbone, on trouve  $Z_g = -0.3$  dans le cas du CNM et  $Z_g = -0.5$  dans le cas de la Barre d'Orion<sup>8</sup>.

<sup>8</sup>Ces valeurs négatives pour la charge des PAH sont en contradiction avec les PAH cations utilisés pour reproduire le spectre IR du milieu interstellaire au chapitre 3. Elles proviennent du coefficient de collage des électrons utilisé dans le modèle de Draine et Sutin (1987). Nous avons choisi de conserver cette valeur élevée de  $s_e$  dans le but de faire une comparaison simple avec le modèle de Draine et Lazarian (1998b).

### ♣ Collisions avec les ions

Pour estimer le paramètre d'impact  $b_{max}(v)$  dans le cas d'une collision proche PAH/ion, où  $v$  est la vitesse de l'ion à l'infini, on commence par écrire la conservation de l'énergie en considérant que le grain est statique :

$$\frac{1}{2}m_i v^2 = \frac{L^2}{2m_i a^2} + \frac{Z_i Z_g e^2}{a} \quad (5.29)$$

et la conservation du moment angulaire :  $L = L_\infty = b_{max}(v) m_i v$ . On obtient alors l'expression suivante pour le paramètre d'impact :

$$b_{max}(v) = \begin{cases} 0 & \text{si } \frac{1}{2}m_i v^2 < \frac{Z_i Z_g e^2}{a} \\ a \left(1 - \frac{2Z_i Z_g e^2}{a m_i v^2}\right)^{1/2} & \text{si } \frac{1}{2}m_i v^2 > \frac{Z_i Z_g e^2}{a} \end{cases} \quad (5.30)$$

Dans le cas où  $b_{max}(v) = 0$ , la collision n'a pas lieu car l'énergie cinétique de l'ion n'est pas suffisante pour lui permettre de surmonter la barrière coulombienne et de s'approcher du grain. La contribution des collisions avec les ions au ralentissement de la rotation est alors (voir Eq. 5.25 et 5.26) :

$$(\tau^{-1} \Delta J)_i = -J \times 4.1 \times 10^{-10} \left(\frac{n_i}{100 \text{ cm}^{-3}}\right) \left(\frac{T_{gaz}}{100 \text{ K}}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{m_i}{m_H}} \times g_1(x) \quad (\text{en s}^{-1}) \quad (5.31)$$

et la contribution à l'excitation est :

$$(\tau^{-1} \Delta J)_i = \frac{1}{J} \times 1.6 \times 10^{-5} \left(\frac{n_i}{100 \text{ cm}^{-3}}\right) \left(\frac{T_{gaz}}{100 \text{ K}}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{m_i}{m_H}} \left(\frac{N_C}{50}\right)^2 \times \left[ g_2(x) + 11.6 g_1(x) \left(\frac{E_{éj}}{0.1 \text{ eV}}\right) \left(\frac{T_{gaz}}{100 \text{ K}}\right)^{-1} \frac{e^{-Z_g^2 \epsilon_i^2} + Z_g \epsilon_H \sqrt{\pi} \text{erf}(|Z_g| \epsilon_i)}{e^{-Z_g^2 \epsilon_e^2} + Z_g \epsilon_e \sqrt{\pi} \text{erf}(|Z_g| \epsilon_e)} \right] \quad (\text{en s}^{-1}) \quad (5.32)$$

$$\text{où } g_1(x) = \begin{cases} 1 - x & \text{si } x < 0 \\ e^{-x} & \text{si } x > 0 \end{cases}$$

$$\text{et } g_2(x) = \begin{cases} 1 - x + x^2/2 & \text{si } x < 0 \\ e^{-x} & \text{si } x > 0 \end{cases} \quad \text{avec } x = 261.9 \times Z_i Z_g \left(\frac{N_C}{50}\right)^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{T_{gaz}}{100 \text{ K}}\right)^{-1}$$

où l'on prend en compte les collisions des PAH avec les ions  $H^+$  et  $C^+$ . La polarisabilité de l'atome de carbone est  $\alpha_C = 1.76 \text{ \AA}^3$  (Furukawa et Douglas 1972). La fonction  $g_1$  est obtenue par intégration de l'Eq. 5.20,  $g_2$  par intégration de l'Eq. 5.23 et les fonctions d'erreur de Gauss (erf) dans le second terme de la partie excitatrice sont dues au fait que les intégrations sont tronquées dans l'Eq. 5.24.

### ♣ Collisions avec les neutres

Dans le cas d'une collision entre un atome neutre du gaz et un PAH chargé, une force de Debye<sup>9</sup> s'exerce, c'est-à-dire qu'il y a une interaction entre un dipôle permanent (le PAH) et un dipôle induit (l'atome). La polarisabilité  $\alpha$  de l'atome résulte de la déformation de son nuage électronique par le champ électrique créé par le grain. Le potentiel d'interaction s'exprime alors de la façon suivante (Osterbrock 1961) :

$$U(r) = -\frac{1}{2} \alpha \frac{Z_g^2 e^2}{r^4} \quad (5.33)$$

<sup>9</sup>La force de Debye est une des forces de Van der Waals, celle qui exprime l'induction.

où  $r$  est la distance entre le PAH et l'atome. La trajectoire d'une particule dans un potentiel en  $r^{-4}$  est hyperbolique. Osterbrock (1961) montre si le paramètre d'impact  $b$  de la collision est inférieur à une certaine valeur  $b_0$  alors le potentiel  $U$  est perturbé et la trajectoire de l'atome aura une forme de spirale. Finalement, on obtient pour le paramètre d'impact :

$$b_{max}(v) = \begin{cases} \left( \frac{4Z_g^2 e^2 \alpha}{mv^2} \right)^{1/4} & \text{si } v \leq \left( \frac{Z_g^2 e^2 \alpha}{ma^4} \right)^{1/2} \\ a \left( 1 + \frac{Z_g^2 e^2 \alpha}{ma^4 v^2} \right)^{1/2} & \text{si } v \geq \left( \frac{Z_g^2 e^2 \alpha}{ma^4} \right)^{1/2} \end{cases} \quad (5.34)$$

On en déduit la contribution des collisions des PAH avec les atomes neutres du gaz au ralentissement de la rotation (Eq. 5.25 et 5.26) :

$$\begin{aligned} (\tau^{-1} \Delta J)_H &= -J \times 10^{-10} \sqrt{\frac{T_{gaz}}{100 \text{ K}}} \left( \frac{n_H}{100 \text{ cm}^{-3}} \right) \times \left[ \exp \left( -5.42 Z_g^2 \left( \frac{T_{gaz}}{100 \text{ K}} \right)^{-1} \left( \frac{N_C}{50} \right)^{-2} \right) \right. \\ &\quad \left. + 2.33 \sqrt{\pi} \left( \frac{T_{gaz}}{100 \text{ K}} \right)^{-\frac{1}{2}} \left( \frac{N_C}{50} \right)^{-1} |Z_g| \operatorname{erf}(|Z_g| \epsilon_H) \right] \quad (\text{en s}^{-1}) \end{aligned} \quad (5.35)$$

et la contribution à l'excitation :

$$\begin{aligned} (\tau^{-1} \Delta J)_H &= \frac{1}{J} \times 1.6 \times 10^{-5} \left( \frac{T_{gaz}}{100 \text{ K}} \right)^{\frac{3}{2}} \left( \frac{n_H}{100 \text{ cm}^{-3}} \right) \left( \frac{N_C}{50} \right)^2 \times \left[ e^{-Z_g^2 \epsilon_H^2} + 2Z_g^2 \epsilon_H^2 + \right. \\ &\quad \left. \frac{e^{-Z_g^2 \epsilon_H^2} + Z_g \epsilon_H \sqrt{\pi} \operatorname{erf}(|Z_g| \epsilon_H)}{e^{-Z_g^2 \epsilon_e^2} + Z_g \epsilon_e \sqrt{\pi} \operatorname{erf}(|Z_g| \epsilon_e)} \times \left( e^{-Z_g^2 \epsilon_e^2} + 2\epsilon_e^2 \right) \left( \frac{E_{\acute{e}j}}{0.1 \text{ eV}} \right) \left( \frac{T_{gaz}}{100 \text{ K}} \right)^{-1} \right] \quad (\text{en s}^{-1}) \end{aligned} \quad (5.36)$$

$$\text{avec } \epsilon_H = \sqrt{\frac{e^2 \alpha_H}{2a^4 k T_{gaz}}} \quad \text{et} \quad \epsilon_e = \sqrt{\frac{e^2 \alpha_H}{2a^4 k T_{\acute{e}v}}} \quad (5.37)$$

où  $T_{\acute{e}v}$  est la température de l'atome neutre qui s'évapore de la surface et  $\alpha_H$  la polarisabilité de l'atome d'hydrogène,  $\alpha_H = 0.67 \text{ \AA}^3$  (Furukawa et Douglas 1972).

### ♣ Entraînement par le plasma

On considère ici le couple exercé par le champ électrique créé par les ions du gaz interstellaire sur le moment dipolaire électrique des PAH :  $\vec{M} = \vec{\mu} \wedge \vec{E}$ . C'est ce qu'on appelle l'entraînement par le plasma. En accord avec Anderson et Watson (1993) et Draine et Lazarian (1998b), cet entraînement peut ralentir ou exciter la rotation. Pour un PAH avec  $N_C$  atomes de carbone et le paramètre d'impact  $b$ , la contribution qui ralentit la rotation est :

$$\begin{aligned} (\tau^{-1} \Delta J)_p &= -J \times 2 \times 10^{-8} \left( \frac{N_C}{50} \right)^{-2} \left( \frac{n_i}{100 \text{ cm}^{-3}} \right) \sqrt{\frac{m_i}{m_H}} Z_i^2 \left( \frac{T_{gaz}}{100 \text{ K}} \right)^{-\frac{3}{2}} \left( \frac{\mu}{1 \text{ D}} \right)^2 \\ &\quad \times \left[ \ln \left( \frac{b_\omega}{a} \right) + \frac{1}{3} \ln \left( \frac{\min(b_q, \lambda_D)}{b_\omega} \right) \right] \quad (\text{en s}^{-1}) \end{aligned} \quad (5.38)$$

et sa contrepartie excitatrice :

$$\begin{aligned} (\tau^{-1} \Delta J)_p &= \frac{1}{J} \times 1.5 \times 10^{-3} \left( \frac{n_i}{100 \text{ cm}^{-3}} \right) \sqrt{\frac{m_i}{m_H}} Z_i^2 \left( \frac{T_{gaz}}{100 \text{ K}} \right)^{-\frac{1}{2}} \left( \frac{\mu}{1 \text{ D}} \right)^2 \\ &\quad \times \left[ \ln \left( \frac{b_\omega}{a} \right) + \frac{1}{3} \ln \left( \frac{\min(b_q, \lambda_D)}{b_\omega} \right) \right] \quad (\text{en s}^{-1}) \end{aligned} \quad (5.39)$$

où  $n_i$ ,  $m_i$  et  $Z_i$  sont la densité, la masse et la charge des ions considérés ( $H^+$  et  $C^+$ ).  $\lambda_D$  est la longueur de Debye, longueur au-delà de laquelle la charge de l'ion est écrantée :  $\lambda_D = \sqrt{kT / 4\pi n_e e^2}$ . Ensuite, pour un PAH qui tourne sur lui-même avec la fréquence  $\omega$  et un ion ayant la vitesse thermique  $v_i$ , si le paramètre d'impact  $b$  est plus grand que  $b_\omega = v_i/\omega$ , alors on ne peut plus considérer que la rencontre est lente. Le grain tourne suffisamment vite pour que le moment moyen appliqué tende vers 0. Enfin, d'après Draine et Lazarian (1998b), comme l'excitation rotationnelle est quantifiée, on s'attend à ce que l'interprétation classique de la rencontre ne soit plus valable quand la fréquence caractéristique de variation du champ électrique de l'ion ( $\sim v_i/b$ ) est inférieure à la fréquence de la transition rotationnelle. Cela donne la coupure quantique  $b_q$  pour le paramètre d'impact :  $b_q \sim I v_i / \hbar$ .

Récemment, Ali-Haïmoud et Hirata (communication privée) ont recalculé les trajectoires des ions. En effet Draine et Lazarian (1998b), dont nous utilisons les résultats ici, considèrent que la trajectoire des ions lors de la rencontre avec un grain chargé est rectiligne. Hali-Hamoud et Hirata considèrent la forme hyperbolique de cette trajectoire et estiment l'excitation associée. Cette amélioration n'est pas prise en compte dans nos travaux : ces auteurs ont en effet démontré que ce raffinement ne modifie pas de manière significative les résultats.

#### 4) Formation de $H_2$

La formation du dihydrogène  $H_2$  à la surface des grains est un phénomène qui affecte la densité, la température et l'évolution chimique du milieu interstellaire (Combes et Pineau Des Forets 2000). Bien que le mécanisme de formation de  $H_2$  soit mal connu dans les milieux dilués comme le milieu interstellaire ( $n_H < 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ ), il est établi que  $H_2$  se forme à la surface des grains et pas en phase gazeuse (Gould et Salpeter 1963; Hollenbach et Salpeter 1971). Si cette molécule se forme préférentiellement par chimisorption sur des sites distribués de manière asymétrique à la surface du grain, Rouan *et al.* (1992) ont montré que l'éjection du  $H_2$  formé peut produire une excitation rotationnelle du grain non négligeable et engendrer un moment "systématique" (le moment appliqué au grain a une direction constante). Dans la suite, on suppose que  $H_2$  est éjecté à partir du bord des PAH suivant une loi en cosinus avec la probabilité  $dP$  de quitter la surface dans l'angle solide  $d\Omega$  :

$$dP(\theta) = \frac{d\Omega}{\pi} \cos \theta \quad (5.40)$$

En considérant que le taux d'éjection est égal à 1 lorsque la molécule est déjà formée, le taux de formation de  $H_2$  est exprimé de la façon suivante :

$$R_f = v_H \pi a^2 \times (1 - f_H) \times \text{constante} \quad (5.41)$$

où  $n_H$  et  $v_H$  sont la densité et la vitesse du gaz interstellaire,  $a$  le rayon du PAH,  $f_H$  sa fraction de déshydrogénation et la *constante* est ajustée d'après les travaux de Jura (1975) qui montre que le taux de formation de  $H_2$  est  $R_f (\text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}) = 3 \times 10^{-17} (T_{\text{gaz}}/70 \text{ K})^{1/2}$ . En effet, toutes les collisions ne conduisent pas à la formation de  $H_2$ . On suppose par ailleurs que tout le  $H_2$  interstellaire est formé sur les PAH. On considère que le PAH a une asymétrie d'un site et que ce site est toujours situé au même endroit sur la molécule. Une limite supérieure est donc dérivée de toutes ces hypothèses et la variation du moment angulaire pour une éjection de  $H_2$  est :

$$(\Delta J)_{pe} = a p_{H_2} \times \langle P(\theta) \sin \theta \rangle \quad (5.42)$$

où  $\vec{p}_{H_2}$  est la quantité de mouvement de la molécule éjectée. Cette réaction est exothermique et libère 4.5 eV qui se répartissent entre l'excitation vibrationnelle et rotationnelle de  $H_2$ , le chauffage

du grain et l'énergie cinétique de la molécule éjectée. On supposera que l'énergie est partagée équitablement entre ces trois canaux, soit  $E_{\dot{j}} = 1.5$  eV quel que soit l'environnement interstellaire considéré. On obtient finalement pour le taux de variation du moment angulaire :

$$(\tau^{-1} \Delta J)_{H_2} = 3.4 \times 10^{-8} \left( \frac{N_C}{50} \right)^{\frac{3}{2}} \left( \frac{n_H}{100 \text{ cm}^{-3}} \right) \sqrt{\frac{T_{\text{gaz}}}{100 \text{ K}}} \sqrt{\frac{E_{\dot{j}}}{1.5 \text{ eV}}} (1 - f_H) \quad (\text{en s}^{-1}) \quad (5.43)$$

### 5) Effet photoélectrique

Les photons UV provenant des étoiles peuvent arracher des électrons des grains. Les photo-électrons émis emportent une partie non négligeable de l'énergie des grains sous forme d'énergie cinétique de l'ordre de 1 eV. On appelle rendement photoélectrique la probabilité qu'un électron soit éjecté après l'absorption d'un photon UV. On distingue deux cas d'éjections : l'éjection photoélectrique d'électrons de la couche de valence et le photodétachement d'électrons en excès sur le grain.

Pour les éjections dites photoélectriques, quand  $Z_g > 0$  ( $Z_g$  est la charge moyenne du grain), le niveau de plus haute énergie occupé est proche de la bande de valence puisque le nombre d'électrons qui ont été arrachés est petit comparé au nombre total d'électrons dans le grain. Ainsi, l'énergie seuil  $h\nu_{pe}$  pour qu'il y ait émission photoélectrique pour  $Z_g > 0$  est le potentiel d'ionisation :  $h\nu_{pe} = IP_Z$ . Dans le cas où  $Z_g < -1$ ,  $h\nu_{pe} > IP_Z$  car l'électron doit surmonter la barrière coulombienne répulsive avant de pouvoir quitter le grain. On suppose que la probabilité de surmonter cette barrière par effet tunnel devient non négligeable quand l'énergie de l'électron dépasse le potentiel à l'infini d'un facteur  $E_{min} = -(Z_g + 1)e^2/a$  (Weingartner et Draine 2001; Bakes et Tielens 1994) :

$$h\nu_{pe} = \begin{cases} IP_Z(Z_g, N_C) & \text{si } Z_g \geq -1 \\ IP_Z(Z_g, N_C) + E_{min}(Z_g, N_C) & \text{si } Z_g < -1 \end{cases} \quad \text{et } IP_Z \text{ (eV)} = 4.4 + \left( Z_g + \frac{1}{2} \right) \frac{25.1}{\sqrt{N_C}} \quad (5.44)$$

où la valeur 4.4 eV est celle valable dans le cas d'une feuille de graphite infinie et  $IP_Z$  est calculé dans le cas d'un PAH plan. Cette relation reflète le fait que plus la charge du grain est élevée plus la barrière coulombienne augmente ( $IP_Z$  élevé) et donc plus la probabilité d'éjection de photoélectrons diminue.

Pour les éjections dites de photodétachement, quand  $Z_g < 0$ , les  $Z_g$  électrons attachés occupent les niveaux d'énergie au-dessus de la couche de valence si cette dernière est remplie à l'état neutre. L'énergie seuil  $h\nu_{pdt}$  pour qu'un électron soit photodétaché est donc :

$$h\nu_{pdt}(Z < 0) = -AE(Z + 1, N_C) + E_{min}(Z, N_C) \quad (5.45)$$

où  $AE(Z + 1, N_C)$  est l'affinité électronique du grain (Weingartner et Draine 2001) , c'est-à-dire l'énergie libérée par le grain lorsqu'il capte un électron. C'est donc le processus inverse de l'arrachage d'électrons et on peut alors écrire :  $-AE(Z + 1, N_C) = IP(Z + 1, N_C)$ .

Les valeurs seuils en énergie pour lesquelles on a éjection d'électrons étant connues, on peut exprimer le taux d'émission photoélectrique comme (en électrons par seconde) :

$$\tau_{pe}^{-1} = \int_{\nu_{pet}}^{\nu_{max}} Y(Z_g, N_C, \nu) \sigma_{abs}(N_C, \nu) \frac{c u_\nu}{h\nu} d\nu + \int_{\nu_{pdt}}^{\nu_{max}} Y(Z_g, N_C, \nu) \sigma_{abs}(N_C, \nu) \frac{c u_\nu}{h\nu} d\nu \quad (5.46)$$

où la première intégrale prend en compte les émissions dites photoélectriques et la seconde les émissions dites de photodétachement (ce terme n'apparaît que dans le cas où  $Z_g < 0$ ) ;  $\nu_{max}$  est la

fréquence de Lyman et la fonction  $Y(Z_g, N_C, \nu)$  est le rendement photoélectrique. Draine (1978) a déterminé une expression semi-empirique pour  $Y$  :

$$Y(Z_g, N_C, \nu) = Y_\infty \left(1 - \frac{IP_Z}{h\nu}\right) f_y(N_C) \quad (5.47)$$

où  $Y_\infty$  est une constante et  $f_y$  un facteur qui exprime le fait que le rendement est meilleur pour les petits grains<sup>10</sup>. La forme de cette relation reproduit l'augmentation rapide du rendement pour des énergies proches de l'énergie d'ionisation et le fait que le rendement reste constant pour des énergies supérieures. Bakes et Tielens (1994) ont déterminé les valeurs de  $Y_\infty$  et  $f_y$  qui permettent de reproduire les mesures expérimentales faites sur le coronène (Verstraete *et al.* 1990) : soit  $Y_\infty = 0.14$  et  $f_y = 11$ . On obtient ainsi  $\tau_{pe}^{-1} = 1.6 \times 10^{-8} \text{ s}^{-1}$  pour  $N_C = 50$  dans le cas du milieu neutre et froid.

Le taux d'émission de photoélectrons étant maintenant connu, il reste à calculer la variation du moment angulaire induite par l'arrachage d'un électron. Le moment appliqué au grain quand l'électron quitte la surface est :  $\Delta J = (2\pi/h) \|\vec{r} \wedge \vec{p}_e\|$  où  $\vec{r}$  est la distance entre l'axe d'inertie et le point de la surface d'où part l'électron et  $\vec{p}_e$  est sa quantité de mouvement. On montre que pour un disque, la valeur moyenne de  $r$  est  $2a/3\pi$  avec  $a$  le rayon du disque. Par ailleurs,  $p_e = \sqrt{2m_e E_e}$  où  $m_e$  est la masse de l'électron et  $E_e$  son énergie cinétique. La fonction de partition de l'énergie cinétique des photoélectrons  $g(N_C, IP_Z)$ , définie comme la fraction d'énergie du photon incident convertie en énergie cinétique du photoélectron, est donnée par Bakes et Tielens (1994) :

$$g(N_C, IP_Z) = \frac{1}{2} \left( \frac{h\nu - IP_Z}{h\nu} \right) \quad (5.48)$$

Bakes et Tielens (1994) remarquent que cette valeur reste incertaine malgré quelques mesures expérimentales la confortant. On peut donc maintenant exprimer l'énergie moyenne des électrons éjectés :

$$\langle E_e \rangle = \frac{1}{2} \frac{\int_{IP_Z}^{\nu_{max}} (h\nu) \times Y(Z_g, N_C, \nu) \sigma_{abs} g(N_C, IP_Z) \frac{\nu_{I\nu}}{\nu} d\nu}{\int_{IP_Z}^{\nu_{max}} Y(Z_g, N_C, \nu) \sigma_{abs} g(N_C, IP_Z) \frac{\nu_{I\nu}}{\nu} d\nu} \quad (5.49)$$

Soit  $\langle E_e \rangle \sim 2 \text{ eV}$  pour  $N_C = 50$  dans le cas où le grain est soumis à l'ISRF (Mathis *et al.* 1983). En supposant que les électrons sont éjectés dans des directions suivant une loi en cosinus (Eq. 5.40), on obtient finalement pour le taux de variation du moment angulaire :

$$(\tau^{-1} \Delta J)_{pe} = \tau_{pe}^{-1} \times 0.15 \sqrt{\frac{N_C}{50}} \sqrt{\frac{E_e}{1 \text{ eV}}} \quad (\text{en s}^{-1}) \quad (5.50)$$

### 5.3 Moment angulaire le plus probable $J_0$

La contribution de tous les processus participant à l'excitation rotationnelle des PAH interstellaires est maintenant connue. Il est donc possible de résoudre l'Eq. 5.7 pour déterminer le moment angulaire le plus probable  $J_0$ . Dans la suite, les variations de  $J_0$  en fonction des différents paramètres qui peuvent l'influencer sont décrites : le milieu dans lequel sont plongés les grains (densité et température du gaz), la forme de la section efficace d'absorption, l'intensité et la forme spectrale du champ de rayonnement incident. Les environnements interstellaires et le champ de rayonnement sont définis dans le chapitre 1 (Tab. 1.1 et Fig. 1.4).

<sup>10</sup>Dans le cas des gros grains, qu'on ne peut plus considérer plans, le photoélectron peut perdre toute son énergie par collisions avec les atomes de carbone avant d'atteindre la surface.



### 5.3.1 Influence de l'environnement

La Fig. 5.3 montre le moment angulaire le plus probable  $J_0$  en fonction de la taille des PAH dans le cas du milieu diffus (CNM, WNM et WIM), de la Barre d'Orion et des nuages moléculaires. On constate que  $J_0$  augmente avec la taille des PAH dans tous les environnements considérés. En effet, la section efficace augmentant avec la taille, le nombre d'événements dans la marche au hasard augmente également. Pour le milieu diffus, les cas du CNM, du WNM et du WIM donnent des résultats très proches. A champ de rayonnement constant ( $G_0 = 1$ ), une variation de la densité n'a que peu d'influence sur  $J_0$  ( $n_H = 0.1$  à  $30 \text{ cm}^{-3}$ ). Par ailleurs, dans les cas de la Barre d'Orion et des nuages moléculaires, où la densité et/ou l'intensité du champ de rayonnement sont beaucoup plus importantes, le moment angulaire est plus élevé que pour le milieu diffus. Cela illustre à nouveau l'augmentation du nombre d'événements dans la marche au hasard.

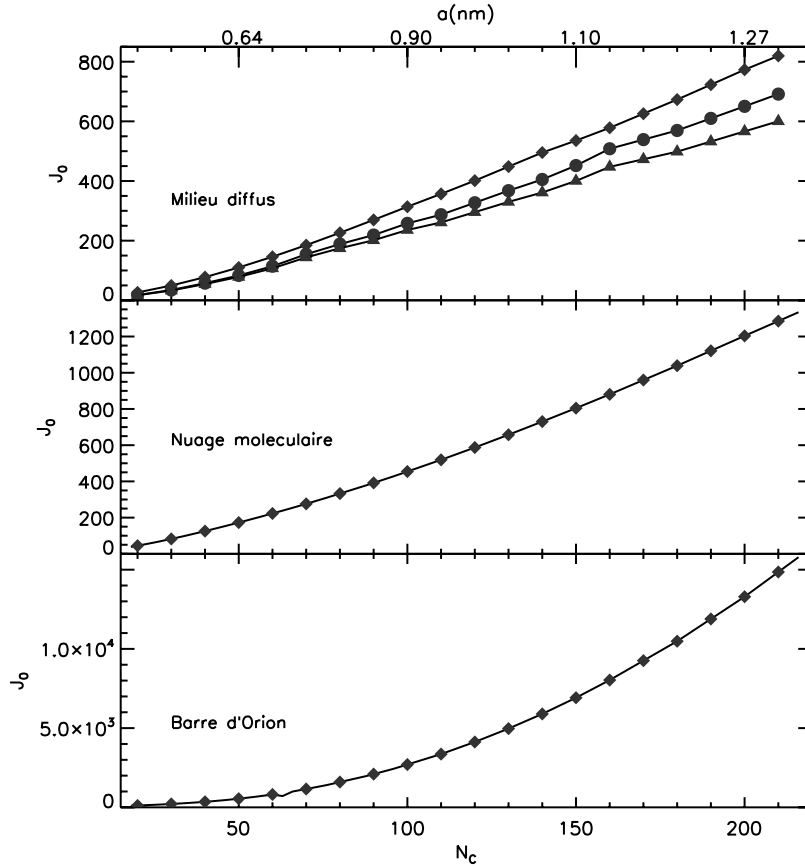
D'autre part, la Fig. 5.4 présente  $|\tau^{-1}\Delta J|_i$  à  $J = J_0$  en fonction de  $N_C$ , pour tous les processus discutés précédemment. Dans tous les cas, les émissions rotationnelle et IR sont des processus ralentisseurs très efficaces pour atteindre l'équilibre. La contrepartie excitatrice est dominée soit par les collisions, soit par l'effet photoélectrique. Cette prépondérance est fonction de l'environnement et de la taille des grains.

Un des buts de la réalisation de ce nouveau modèle de rotation des PAH était de comprendre les différences entre les résultats de Rouan *et al.* (1992) et de Draine et Lazarian (1998b). Nos résultats montrent que les processus radiatifs (rotation et IR) et les interactions avec le gaz sont d'importance comparable. Il semble donc que Rouan *et al.* (1992) aient sous-estimé l'influence de ces dernières. En outre, un des processus de freinage dominant est ici l'émission rotationnelle qui est un terme strictement proportionnel au moment dipolaire électrique au carré. La valeur de  $J_0$  n'est donc pas indépendante de  $\mu$ . Diminuer  $\mu$  revient à augmenter la valeur de  $J_0$  et le processus dominant pour le ralentissement est alors l'émission IR. Il semble donc qu'on ne puisse pas apporter de réponse définitive pour lever la contradiction entre les résultats de Rouan *et al.* (1992) et Draine et Lazarian (1998b). Le freinage est assuré par l'émission IR dans le cas où le moment dipolaire est faible et/ou dans le cas où  $G_0$  est grand. Il est assuré en grande partie par l'émission rotationnelle autrement.

### 5.3.2 Influence de la section efficace d'absorption

Les observations dans l'IR des PAH interstellaires montrent qu'ils peuvent être présents sous forme neutre ou ionisée. Les sections efficaces d'absorption de ces deux types d'espèces étant très différentes, les variations de  $J_0$  en fonction de  $N_C$  dans les deux cas sont représentés sur la Fig. 5.5. Les paramètres du gaz sont ceux du CNM. On constate que les valeurs de  $J_0$  sont très peu affectées par l'état d'ionisation de la molécule. La différence est inférieure à 1% quelle que soit la taille considérée. Cette figure montre également l'influence de la position du premier mode vibrationnel sur  $J_0$ . Les différences sont négligeables pour  $N_C < 100$  et restent inférieures à 10% pour les tailles supérieures. Par ailleurs, la position des deux autres modes de vibration dans l'IR lointain n'a pas d'effet sur les valeurs de  $J_0$  quelle que soit la taille considérée (dans la mesure où ceux-ci restent positionnés dans les groupes d'énergie définis au §3.2.2).

Les profils de Lorentz que nous utilisons pour les bandes vibrationnelles varient en  $\lambda^{-2}$  à grande longueur d'onde. Le moment angulaire le plus probable doit donc dépendre de la forme du profil de bande adoptée pour la section efficace d'absorption. Pour tester cette influence, nous avons calculé



**Figure 5.3** - Moment angulaire le plus probable  $J_0$  en fonction de la taille des PAH. *En haut* : les losanges représentent le cas du CNM, les disques celui du WIM et les triangles celui du WIM. *Au milieu* : les losanges représentent le cas des nuages moléculaires. *En bas* : les losanges représentent le cas de la Barre d'Orion.

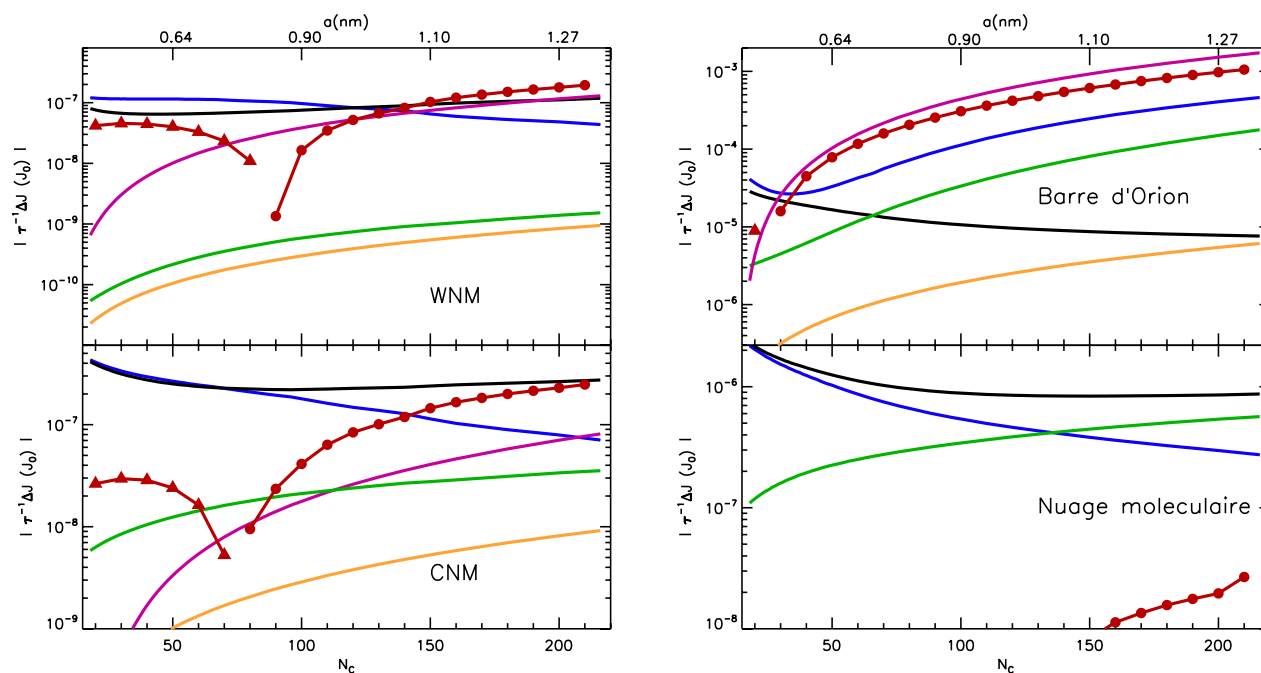
le moment angulaire le plus probable  $J_0$  en prenant comme profil de bande (voir Eq. 3.1) :

$$\frac{E_0}{E} D(E, E_0, \Delta E) = \frac{E_0 E \Delta E^2}{(E^2 - E_0^2)^2 + (E \Delta E)^2} \quad (5.51)$$

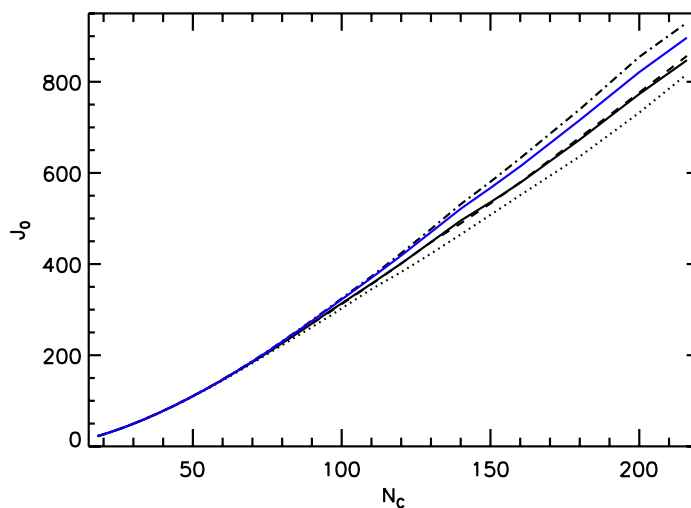
ce qui donne une variation en  $\lambda^{-1}$  à grande longueur d'onde. Les valeurs de  $J_0$  correspondantes sont représentées par la courbe bleue sur la Fig. 5.5. On constate que pour  $N_C < 100$ , il n'y a aucune différence entre les deux modèles et que pour les tailles supérieures la variation ne dépasse pas 6%. Le choix du profil des bandes d'émission IR n'est donc pas critique pour la détermination de  $J_0$ .

### 5.3.3 Influence du champ de rayonnement incident

On examine dans cette partie l'influence de l'intensité et de la couleur du champ de rayonnement sur le moment angulaire des PAH. On a vu au chapitre 1 que modifier le champ de rayonnement modifie les paramètres du gaz ( $n_H, T_{gaz}, n_e$ ). Les valeurs utilisées pour ces paramètres dans la suite de ce paragraphe sont celles calculées à l'équilibre thermique dans le §1.7.



**Figure 5.4** - Valeurs absolues du taux de changement du moment angulaire (à  $J = J_0$ ) pour tous les processus en fonction de  $N_C$ . La courbe bleue montre la contribution de l'émission rotationnelle, les cercles et les triangles rouges le freinage et l'excitation par l'émission IR respectivement, la courbe orange représente la contribution de la formation de  $H_2$ , la courbe noire l'excitation par collisions et entraînement par le plasma, la courbe verte l'excitation par collisions et entraînement par le plasma.



**Figure 5.5** - Influence de la section efficace IR des PAH dans le cas du CNM : le cas des PAH cations est représenté par la courbe en trait plein et celui des neutres par les tirets. Les cas extrêmes pour la position du premier mode vibrationnel  $1596/N_C$  et  $2970/N_C \text{ cm}^{-1}$  sont représentés par la courbe en pointillés et la courbe en tirets-pointillés respectivement (Fig. 3.2). La courbe bleue représente le cas où l'on a remplacé le profil de Lorentz des bandes par des profils de Lorentz divisés par  $\nu$ .

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

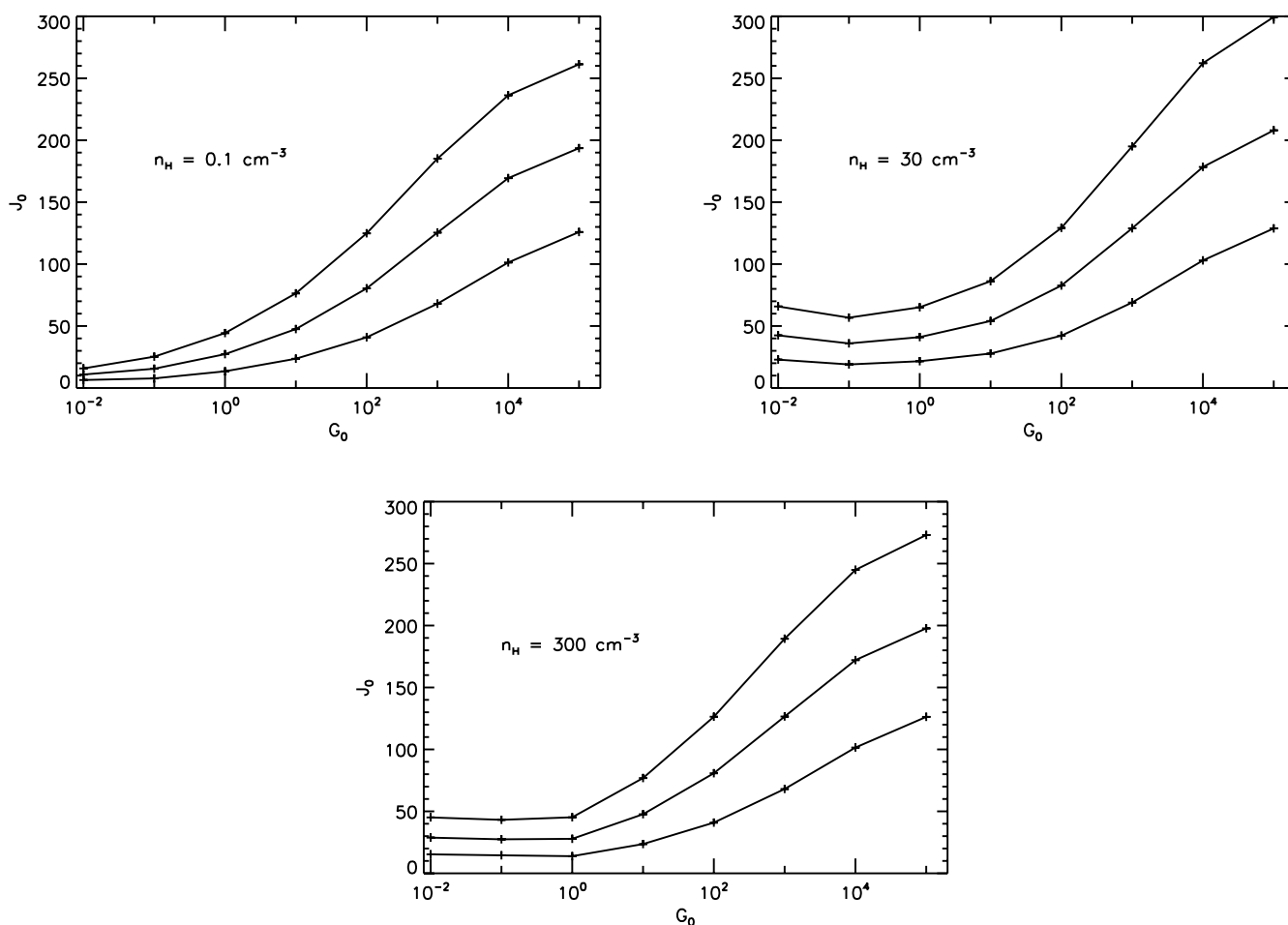
On examine ici l'influence de l'intensité du champ de rayonnement incident sur l'excitation rotationnelle des PAH. Le champ utilisé est un corps noir de température effective égale à 22 000 K qui a été normalisé de telle sorte que  $G_0$  varie de  $10^{-2}$  à  $10^5$  (intégrale du corps noir de 5 à 13.6 eV, avec  $G_0 = 1$  pour l'ISRF). La couleur du champ de rayonnement est conservée alors que l'énergie absorbée est proportionnelle à  $G_0$ . Ce calcul a été exécuté pour trois densités différentes :  $n_H = 0.1, 30$  et  $300 \text{ cm}^{-3}$ . La Fig. 5.6 montre les valeurs de  $J_0$  en fonction de  $G_0$ . Quand  $n_H$  est faible, les interactions avec le gaz sont dominées par l'émission IR pour la construction du moment angulaire. Or quand  $G_0$  augmente, le temps caractéristique entre deux absorptions de photons diminue et la relaxation du PAH est interrompue. Il a alors une énergie interne plus grande et les taux d'émission IR augmentent car le pic de la distribution d'énergie interne se déplace vers le premier mode vibrationnel. Le nombre de pas dans la marche au hasard augmentant,  $J_0$  augmente. On remarque également que plus le PAH est grand, plus  $J_0$  augmente rapidement. L'énergie du premier mode vibrationnel diminue avec la taille et nécessite donc des valeurs de  $G_0$  plus faibles pour être excité. Par ailleurs, quand la densité augmente, on constate que l'émission IR ne devient un processus influent que pour de grandes valeurs de  $G_0$ . Pour  $G_0 \lesssim 10 - 100$ , cette valeur seuil dépendant de  $N_C$  et de  $n_H$ , la valeur de  $J_0$  est à peu près constante. Au-delà de ce seuil,  $J_0$  augmente avec  $G_0$ . Les conséquences de ce comportement de  $J_0$  avec  $G_0$  sur le spectre de rotation résultant seront décrites au §5.6.

### ♣ Influence de la couleur du champ de rayonnement

La Fig. 5.7 montre l'influence de la couleur du champ de rayonnement sur les valeurs de  $J_0$ . Le champ de rayonnement est composé du CMB et d'un corps noir de température  $T_{eff}$  comprise entre 5 000 et 50 000 K. L'intensité de ce corps noir est normalisée de telle sorte qu'il corresponde à  $G_0 = 1$ . La puissance absorbée dans le domaine UV/visible est donc conservée quelle que soit  $T_{eff}$  alors que la couleur change, c'est-à-dire l'énergie moyenne du photon absorbé. Pour un PAH avec 50 atomes de carbone, elle passe de 2.4 eV à 5 000 K à 8.4 eV à 50 000 K, contre 3.16 eV dans le cas de l'ISRF. On constate sur la Fig. 5.7 que pour  $T_{eff} \geq 10\,000 \text{ K}$ ,  $J_0$  est à peu près constant. Le moment angulaire est plus élevé pour les températures inférieures car la contribution de l'émission IR au freinage est trop faible. Pour les températures plus élevées,  $J_0$  ne varie pas. En effet, la Fig. 3.7 montre que lorsque l'énergie moyenne du photon absorbé augmente mais que  $G_0$  reste constant, l'importance de la queue de distribution de l'énergie interne est accentuée mais reste cependant mineure par rapport au pic de la distribution. De plus, l'énergie du pic n'est pas modifiée. Augmenter  $T_{eff}$  à  $G_0$  constant change donc peu la contribution de l'émission IR. Par ailleurs, comme  $G_0$  reste égal à 1, la contribution des interactions avec le gaz n'augmente pas de manière significative avec  $T_{eff}$  et  $J_0$  ne varie pas.

## 5.3.4 Influence de la densité du gaz $n_H$

La Fig. 5.8 montre l'influence de la densité du gaz sur le moment angulaire le plus probable. Le champ de rayonnement est un corps noir à 22 000 K avec  $G_0 = 1$ . On considère que le gaz est à l'équilibre thermique. Les paramètres du gaz sont donnés au §1.7. On constate que pour  $0.1 \lesssim n_H \lesssim 30 \text{ cm}^{-3}$  la valeur de  $J_0$  est à peu près constante. Pour les environnements plus denses,  $J_0$  augmente avec  $n_H$ . Ce comportement pour les milieux les plus denses s'explique aisément. En effet, les taux de changement du moment angulaire produits par les interactions avec le gaz sont directement proportionnels à  $n_H$  et dominent l'excitation. En revanche, pour les milieux moins

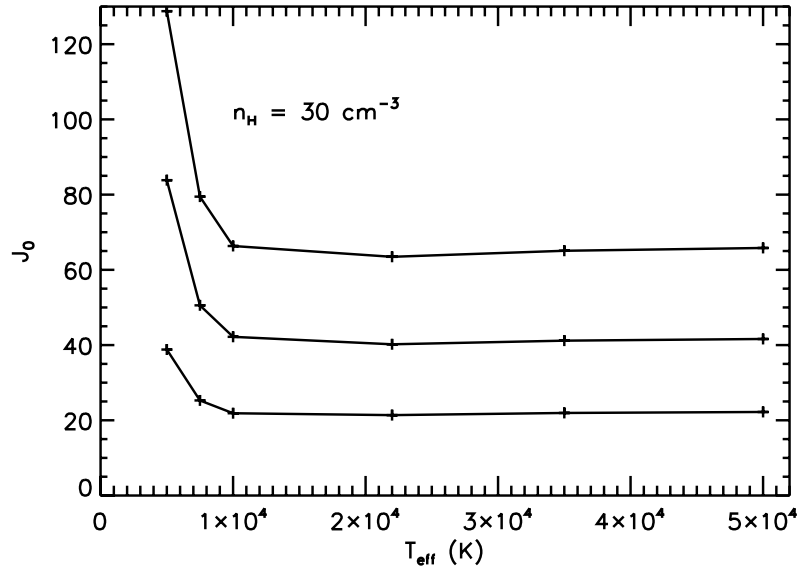


**Figure 5.6** - Moment angulaire le plus probable  $J_0$  en fonction de l'intensité du champ de rayonnement  $G_0$ . Le champ de rayonnement est un corps noir à 22 000 K. Sur chaque figure, les trois courbes représentent les résultats pour  $N_C = 20, 30$  et  $40$  de bas en haut. La figure en haut à gauche a été obtenue pour  $n_H = 0.1 \text{ cm}^{-3}$ , celle en haut à droite pour  $n_H = 30 \text{ cm}^{-3}$  et celle du bas pour  $n_H = 300 \text{ cm}^{-3}$ . Les autres paramètres du gaz ont été obtenus en se plaçant à l'équilibre thermique.

denses, l'excitation rotationnelle est dominée par l'émission IR et le freinage par l'émission rotationnelle. Ces deux contributions ne dépendent pas directement de la densité (voir Eq. 5.11 & 5.16). La valeur de  $J_0$  n'est donc pas modifiée tant que la densité n'est pas suffisante pour que les interactions avec le gaz prennent le pas sur les processus radiatifs. Ceci est vérifié pour  $n_H \lesssim 30 \text{ cm}^{-3}$  dans le cas où  $N_C \lesssim 30$ .

### 5.3.5 Influence du moment dipolaire électrique $\mu$

La Fig. 5.9 montre l'influence du moment dipolaire électrique des grains sur leur moment angulaire  $J_0$ . Les résultats sont présentés dans le cas du CNM défini dans la Tab. 1.1. Le paramètre que nous faisons varier est la constante  $m$  à laquelle le moment dipolaire intrinsèque est proportionnel. On constate que pour toutes les tailles, le moment angulaire diminue quand  $m$  augmente. En effet,



**Figure 5.7** - Moment angulaire le plus probable  $J_0$  en fonction de la température effective du champ de rayonnement  $T_{\text{eff}}$  pour  $n_H = 30 \text{ cm}^{-3}$ . Le champ de rayonnement est un corps noir de température  $T_{\text{eff}}$  dont l'intensité a été normalisée pour être telle que  $G_0 = 1$  dans tous les cas. Les paramètres du gaz ont été obtenus en se plaçant à l'équilibre thermique avec le logiciel CLOUDY (Ferland *et al.* 1998). A ce corps noir, on a ajouté le CMB. Les résultats sont présentés pour trois tailles :  $N_C = 20, 30$  et  $40$  de bas en haut.

le freinage par émission de photons purement rotationnels est proportionnel à  $\mu^2 \sim \mu_i^2 \propto m^2$ . Plus  $m$  augmente, plus le freinage est efficace.

## 5.4 Distribution du moment angulaire $n(J)$

La connaissance du moment angulaire le plus probable permet d'estimer la distribution du moment angulaire  $n(J, N_C)$ . Dans la mesure où la variation du moment angulaire  $\Delta J$  est toujours très inférieure au moment angulaire total le plus probable  $J_0$ , on peut considérer que la distribution des niveaux de populations des valeurs de  $J$  suit la loi "thermique" :

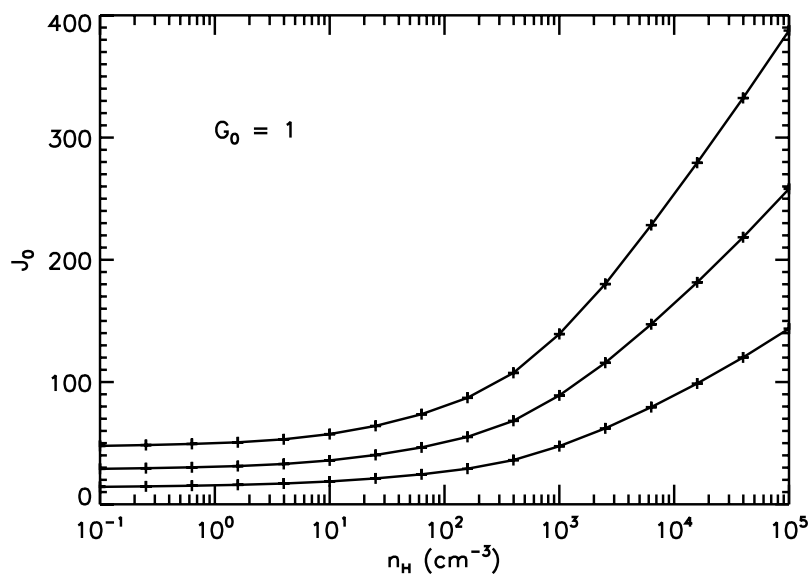
$$\Delta J \ll J_0 \Rightarrow n(J) = n_0 J^2 \exp(-J^2/J_0^2) \quad (5.52)$$

$$\text{avec } n_0 = \left[ \int_0^\infty J^2 \exp(-J^2/J_0^2) \right]^{-1}$$

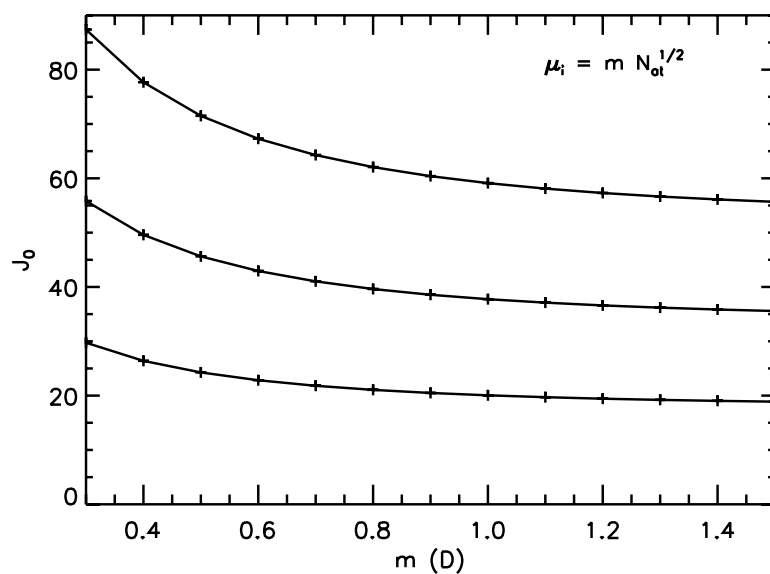
qui décrit bien l'action de l'émission IR<sup>11</sup> (Rouan *et al.* 1992; Mulas 1998) et des interactions gaz-grains (Draine et Lazarian 1998b).

<sup>11</sup>En réalité, Rouan *et al.* (1992) trouvent une distribution pseudo-thermique de la forme suivante :  $n(J) \propto (2J + 1)^2 \exp(-AJ(J + 1))$ . Cette distribution diffère très peu de la relation 5.52 pour les valeurs de  $J$  qui nous intéressent.

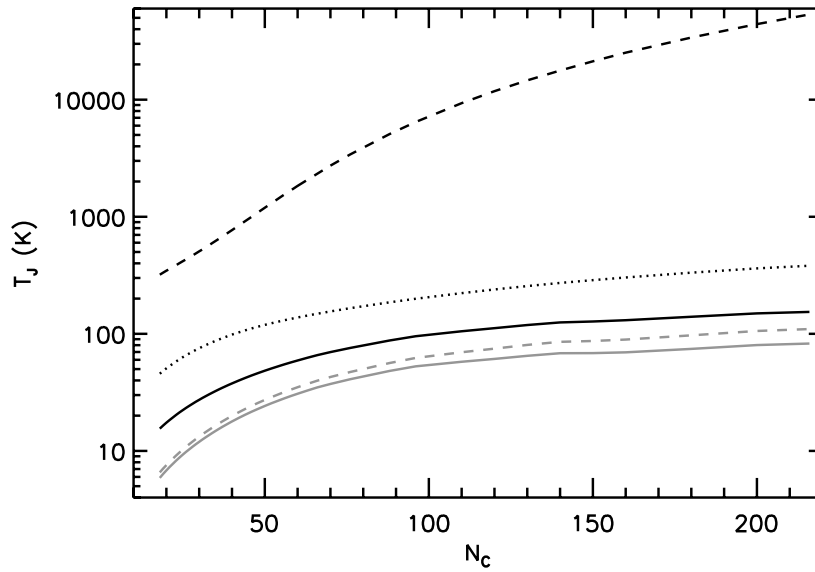




**Figure 5.8** - Moment angulaire le plus probable  $J_0$  en fonction de la densité d'hydrogène  $n_H$  du milieu dans lequel les grains sont plongés. Le champ de rayonnement est un corps noir à 22 000 K avec  $G_0 = 1$  auquel on a ajouté le CMB. Les paramètres du gaz ont été obtenus en se plaçant à l'équilibre thermique avec le logiciel CLOUDY (Ferland *et al.* 1998). Les résultats sont présentés pour trois tailles de PAH :  $N_C = 20, 30$  et  $40$  de bas en haut.



**Figure 5.9** - Moment angulaire le plus probable  $J_0$  en fonction du moment dipolaire électrique  $\mu(N_C)$  des grains. Les calculs ont été fait dans le cas du CNM. Les résultats sont présentés pour trois tailles de PAH :  $N_C = 20, 30$  et  $40$  de bas en haut.



**Figure 5.10** - Température rotationnelle pour des PAH cations en fonction de leur taille, pour trois environnements différents : le CNM (trait plein noir), le WNM (tirets gris), le WIM (trait plein gris), les nuages moléculaires (pointillés noirs) et la Barre d'Orion (tirets noirs).

## 5.5 Température rotationnelle

La température rotationnelle  $T_J$  est définie à partir du nombre rotationnel le plus probable  $J_0$  et de la distribution du moment angulaire  $n(J)$ . On obtient alors :

$$T_J \text{ (K)} = \frac{B J_0^2}{k} = 10 \times N_C^{-2} J_0^2 \quad (5.53)$$

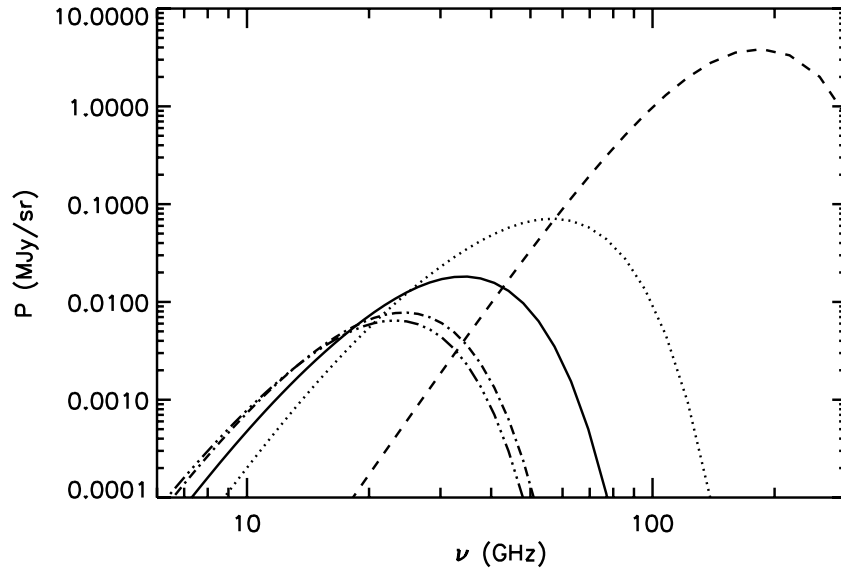
La Fig. 5.10 présente la température rotationnelle en fonction de la taille des PAH pour différents environnements interstellaires. On constate que  $T_J$  est subthermique dans le cas du milieu diffus (CNM, WNM et WIM) alors qu'elle est suprathermique pour les nuages moléculaires et la Barre d'Orion. Ces résultats sont en accord avec les résultats de Rouan *et al.* (1997). Ils montrent que dans le Rectangle Rouge la température rotationnelle des PAH est suprathermique avec  $T_J \sim 100$  K pour  $N_C = 40$ , et qu'elle est infrathermique dans le cas du milieu diffus et d'une nébuleuse par réflexion.

## 5.6 Emission rotationnelle résultante

### ♣ Détermination de la puissance émise

La puissance émise par un PAH contenant  $N_C$  atomes de carbone qui passe d'un niveau  $J$  à un niveau  $J - 1$  est :

$$P(J) = A_{J \rightarrow J-1} \times 2BJ \quad (5.54)$$



**Figure 5.11** - Spectre de rotation pour une distribution de tailles de PAH avec  $\alpha = 3.5$  (Mathis *et al.* 1977) et  $N_C = 30-216$ , pour une densité de colonne d'hydrogène  $N_H = 10^{21} \text{ cm}^{-2}$  et une abondance du carbone dans les PAH  $[C/H] = 4.3 \times 10^{-5}$ . La courbe en trait plein montre le cas du CNM, les tirets-pointillés celui du WIM, les tirets-triple pointillés celui du WIM, les pointillés le cas des nuages moléculaires et les tirets le cas de la Barre d'Orion.

avec  $A_{J \rightarrow J-1}$  le taux d'émission spontanée (Eq. 5.13) et  $2BJ = hv$  l'énergie de la transition ( $\Delta K = 0$  pour les transitions rotationnelles). On définit la distribution de tailles des PAH  $n_{PAH}(N_C)dN_C$  comme le nombre de PAH par proton du milieu interstellaire ayant un nombre d'atomes de carbone compris entre  $N_C$  et  $N_C + dN_C$ . Pour la distribution du moment angulaire  $n(N_C, J)$  on peut alors écrire :

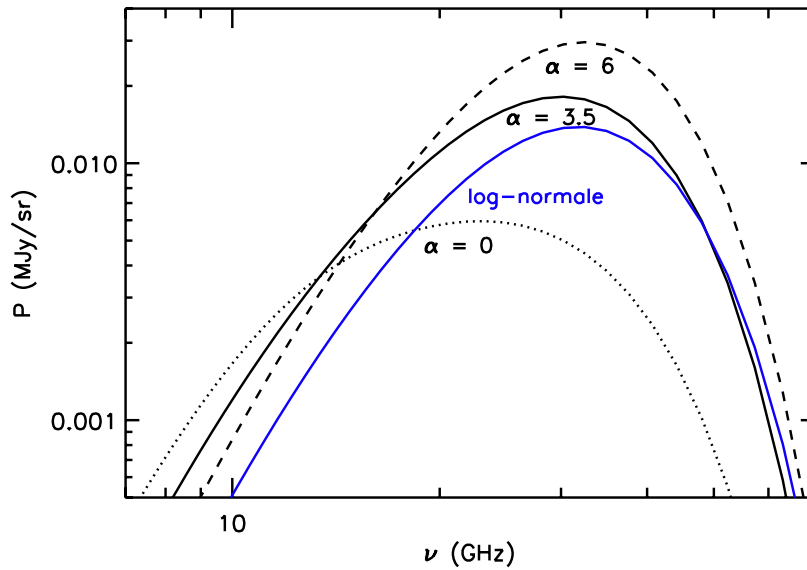
$$P(h\nu) = \frac{N_H}{4\pi} \int_{N_{min}}^{N_{max}} A_{J \rightarrow J-1} n(N_C, J) \frac{2BJ}{2Bc} n_{PAH}(N_C) dN_C \quad (5.55)$$

Dans la mesure où nous sommes intéressés par le spectre en bande large, la largeur de bande a été posée égale à  $2Bc$  :  $\Delta\nu = 2Bc$  est la bande passante du photon émis en Hz.

#### ♣ Variations en fonction du milieu considéré et de la distribution de tailles

La Fig. 5.11 montre l'influence de l'environnement interstellaire dans lequel les PAH sont plongés sur le spectre de rotation et la Fig. 5.12 celle de la distribution de tailles. On prend comme distribution de tailles une loi de puissance en  $n(a) \propto a^{-\alpha}$  ou  $n(N_C) \propto N_C^{-\beta}$  avec  $\beta = (\alpha + 1)/2$ . Augmenter la valeur de  $\alpha$  revient donc à augmenter la fraction de petits PAH ( $N_C \lesssim 70$ ). On passe de  $\sim 30\%$  à  $\sim 90\%$  de petits PAH quand  $\alpha$  passe de 0 à 6 avec  $N_C = 30 - 216$ . L'intensité varie d'un facteur 5 alors que le pic est décalé vers le rouge d'environ 9 GHz. La valeur choisie pour la plus petite taille de PAH trouvera sa justification au chapitre 7. La Fig. 5.12 montre également un spectre de rotation obtenu avec une distribution de tailles de type *log-normale*, similaire à celle utilisée par Draine et Lazarian (1998b) :

$$n_{PAH}(N_C) \propto N_C^{-1} \exp \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{\ln(N_C/N_0)}{\sigma} \right)^2 \right] \quad (5.56)$$



**Figure 5.12** - Spectre de rotation pour une distribution de tailles des PAH  $n(a) \propto a^{-\alpha}$  et  $N_C = 30 - 216$ . La courbe en trait plein montre le cas classique  $\alpha = 3.5$  (Mathis *et al.* 1977), les pointillés le cas  $\alpha = 0$  (autant de gros PAH que de petits PAH avec une taille moyenne de 123 atomes de carbone) et les tirets le cas  $\alpha = 6$  (une majorité de petits PAH avec une taille moyenne de 38 atomes de carbone). La courbe bleue montre un spectre obtenu avec une distribution de tailles de type log-normale centrée en  $N_C = 44$ .

où  $N_0 = 44$  et  $\sigma = 0.4$ . Le spectre de rotation pique dans la même gamme de fréquences que pour  $\alpha = 3.5$  et 6 dont les tailles moyennes sont de 48 et 38 atomes de carbone respectivement. La fréquence au maximum est légèrement supérieure au cas MRN car la loi log-normale est centrée sur la taille  $N_0$  et défavorise ainsi les PAH plus grands.

#### ♣ Variations en fonction de $G_0$ et de $T_{eff}$

La Fig. 5.13 montre l'influence de  $G_0$  sur la position et l'intensité du spectre de rotation. On a vu au §5.3.3 que  $J_0$  varie peu pour  $G_0 \lesssim 10 - 100$  si la densité du gaz est suffisamment importante. Nous examinons ici les conséquences de ce constat sur le spectre de rotation et cela dans quelques bandes d'instruments utiles pour l'observation de l'émission anormale :

- WMAP : cet instrument est présenté au §6.2.1, nous utilisons ici la bande K à 23 GHz.
- GBT (Green Bank Telescope) : le GBT est situé dans le comté de Pocahontas en Virginie Occidentale, c'est le plus grand radio-télescope entièrement orientable. Il possède un diamètre de 100 m environ et sa conception lui permet de voir tout le ciel au-dessus de  $5^\circ$  d'élévation. Le domaine de fréquences disponible s'étend de 290 MHz à 49 GHz. Nous utilisons ici la bande Ku à 13.7 GHz. Ce test est illustratif pour comprendre le comportement du spectre rotationnel à basse fréquence, car de telles observations sont difficiles. La sensibilité du GBT est en effet insuffisante pour mesurer l'émission étendue à basse fréquence.
- Planck-LFI (Low Frequency Instrument) : LFI est l'instrument basse fréquence embarqué sur le satellite Planck. Il est conçu pour couvrir la gamme de fréquences 30-70 GHz avec une résolution angulaire de 33 à 10 arcmin. Nous utilisons ici les bandes à 30, 44 et 70 GHz de LFI et la bande à 100 GHz de Planck-HFI (High Frequency Instrument).

On constate sur la Fig. 5.13 que la position du pic du spectre de rotation varie relativement peu

pour les régions de forte densité ( $n_H \geq 30 \text{ cm}^{-3}$ ) pour  $0.01 \leq G_0 \leq 10$ . En revanche, dans le cas d'un champ de rayonnement plus intense ou d'une région moins dense, cette position peut varier grandement. Par ailleurs, on peut noter que la puissance émise dans les bandes<sup>12</sup> à basse fréquence (GBT et WMAP) est relativement constante pour  $0.01 \leq G_0 \leq 10$ . Le spectre d'émission rotationnelle devrait donc être peu variable dans le cas du milieu diffus (CNM, WNM, WIM). Pour  $10 \leq G_0 \leq 10^5$ , la puissance émise dans les bandes est constante pour  $\nu \geq 23 \text{ GHz}$  quelle que soit la densité du milieu considéré.

La Fig. 5.14 présente la position du pic d'émission rotationnelle et l'intensité dans les bandes que nous venons de décrire en fonction de la couleur du champ de rayonnement. On constate que pour  $T_{eff} \geq 10\,000 \text{ K}$  la position et l'intensité du spectre sont conservées et cela pour toutes les bandes.

#### ♣ Variations en fonction de $n_H$

La Fig. 5.15 montre l'influence de  $n_H$  sur la position et l'intensité du spectre de rotation dans les mêmes bandes que celles décrites précédemment. On a vu au §5.3.4 que  $J_0$  varie peu pour  $0.1 \lesssim n_H \lesssim 30 \text{ cm}^{-3}$ . On peut constater que la position du pic d'émission rotationnelle est assez stable pour la même gamme de densités. Il se déplace vers les plus hautes fréquences pour les densités plus importantes. Par ailleurs, l'intensité varie relativement peu dans les bandes à basse fréquence pour  $0.1 \lesssim n_H \lesssim 30 \text{ cm}^{-3}$ .

L'étude des variations du spectre de rotation en fonction de  $G_0$  et de  $n_H$  nous montre donc que l'émission rotationnelle n'est proportionnelle à aucune de ces deux quantités. Elle est assez peu sensible pour  $n_H \lesssim 30 \text{ cm}^{-3}$  et  $0.01 \lesssim G_0 \lesssim 10$  à 23 GHz.  $G_0$  et  $n_H$  influencent cependant dans certains cas sa fréquence et son intensité. Ceci sera une information à retenir avant d'essayer d'interpréter les observations de l'émission anormale.

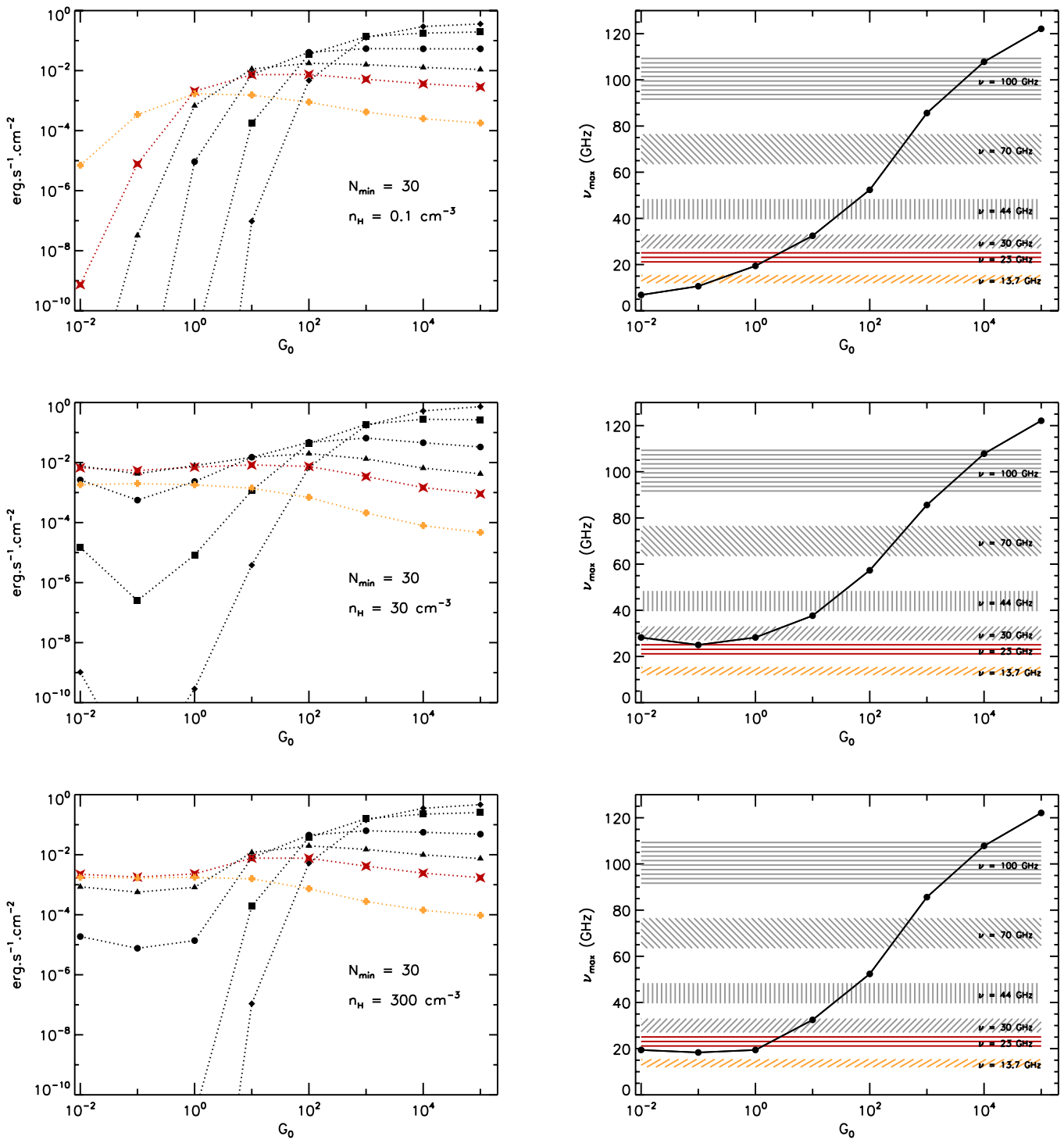
#### ♣ Variations en fonction de $\mu$

La Fig. 5.16 montre l'influence du moment dipolaire électrique sur l'intensité et la position du spectre rotationnel dans les mêmes bandes que celles décrites précédemment. On a vu au §5.3.5 que le moment angulaire diminue quand  $\mu$  augmente. Ce résultat se répercute sur le spectre de la manière suivante :

- le pic d'émission est décalé vers les basses fréquences quand  $\mu$  augmente. Le freinage étant de plus en plus efficace, les grains tournent moins vite. En multipliant  $m$  par un facteur 5, le maximum d'émission est décalé de 15 GHz.
- l'émissivité dans les bandes à haute fréquence diminue, alors qu'elle augmente dans les bandes à basse fréquence. La diminution reste cependant modérée dans la plupart de ces bandes car l'émissivité des grains est proportionnelle à  $\mu^2$ .

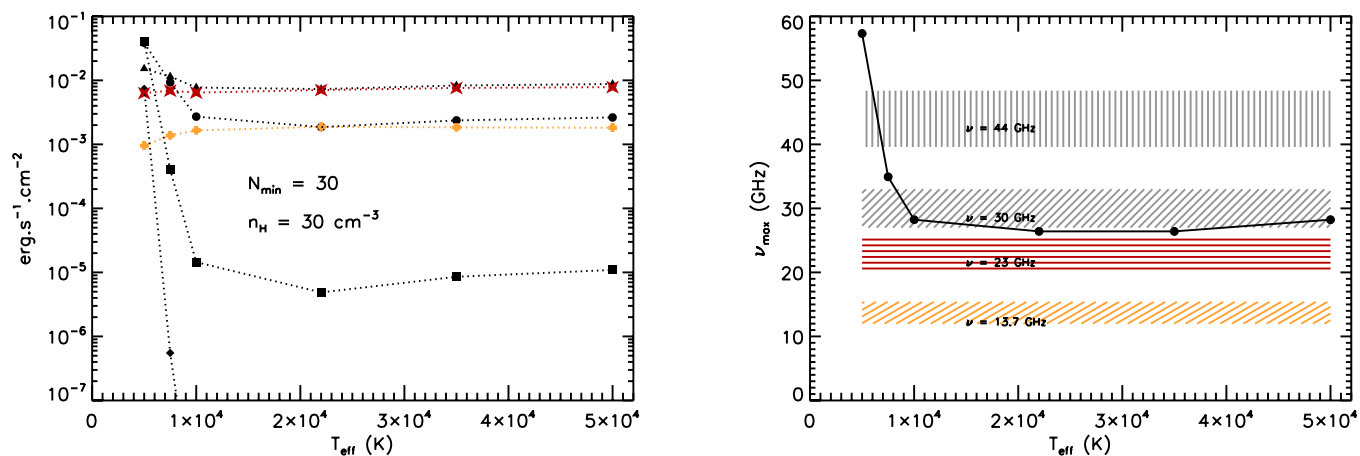
<sup>12</sup>On représente ici l'intensité intégrée dans les bandes instrumentales considérées qui ont des largeurs finies. Si on appelle  $f_\nu$  la fonction de transmission dans une bande donnée en fonction de la fréquence, l'intensité intégrée dans cette bande est :

$$\frac{\int P(h\nu)f_\nu d\nu}{\int f_\nu d\nu} \quad \text{avec } P(h\nu) \text{ définie par l'Eq. 5.55} \quad (5.57)$$

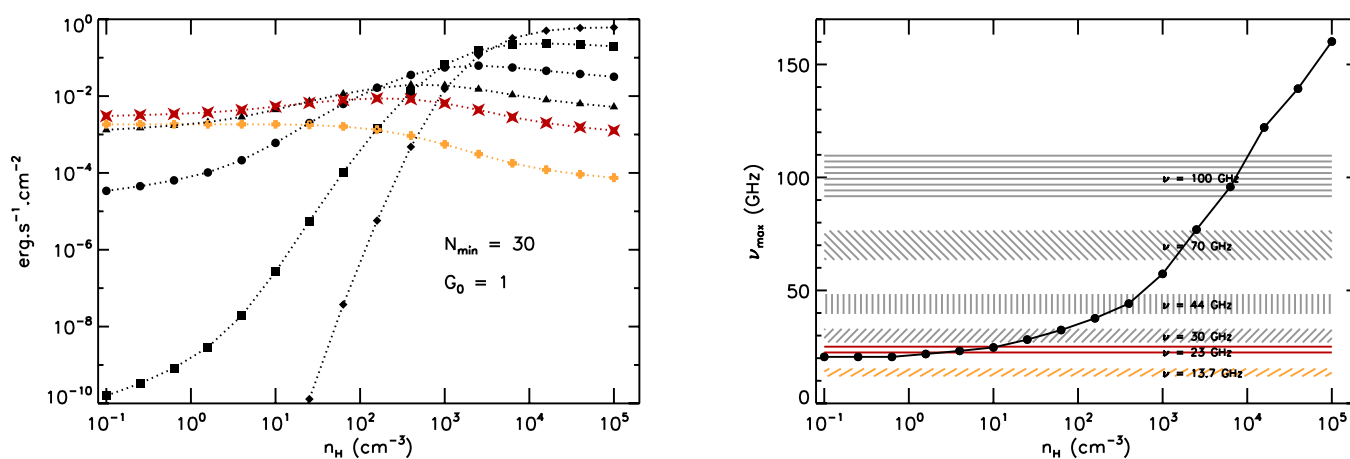


**Figure 5.13** - Ces résultats ont été obtenus à partir des modèles décrits au §5.3.3 pour une distribution de tailles MRN avec  $N_C = 30 - 216$  et pour trois densités  $n_H = 0.1, 30, 300$  cm<sup>-3</sup> de haut en bas. *A gauche* : émissivité intégrée en fonction de  $G_0$  dans la bande WMAP à 23 GHz (étoiles rouges), dans la bande GBT à 13.7 GHz (croix oranges), dans les bandes LFI à 30, 44, 70 et 100 GHz (triangles, disques, carrés et losanges respectivement). *A droite* : position du pic d'émission rotationnelle en fonction de  $G_0$ . Les zones hachurées montrent la position et la largeur des bandes citées précédemment.

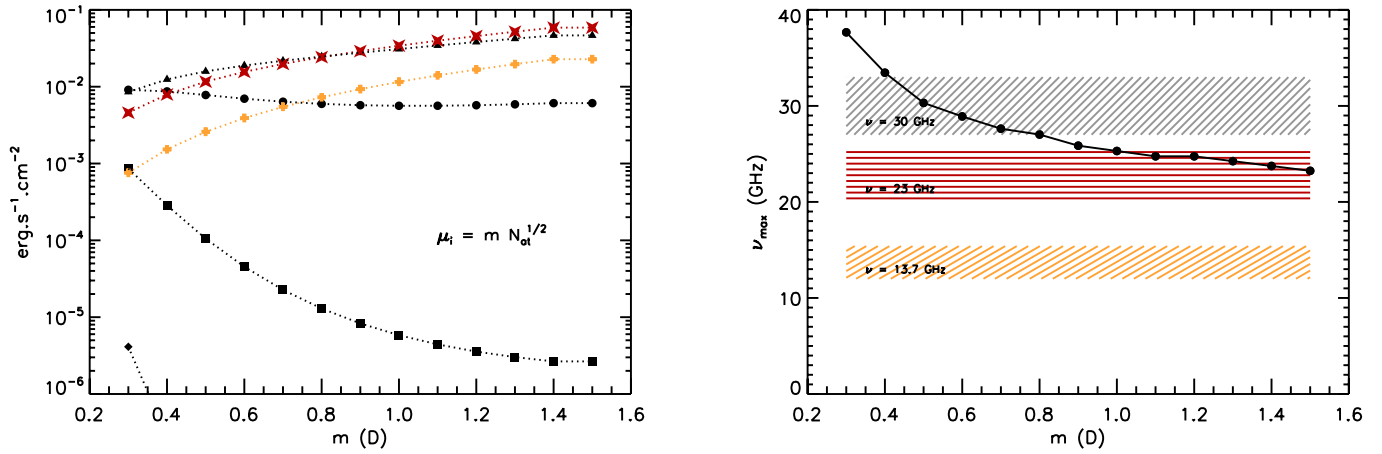




**Figure 5.14** - Ces résultats ont été obtenus à partir des modèles décrits au §5.3.3 pour une distribution de tailles MRN avec  $N_C = 30 - 216$  et  $n_H = 30 \text{ cm}^{-3}$ . *A gauche* : émissivité intégrée en fonction de  $T_{\text{eff}}$ . *A droite* : position du pic d'émission rotationnelle en fonction de  $T_{\text{eff}}$ . La légende est la même que pour Fig. 5.13.



**Figure 5.15** - Ces résultats ont été obtenus à partir des modèles décrits au §5.3.4 pour une distribution de tailles MRN avec  $N_C = 30 - 216$  et pour  $G_0 = 1$ . *A gauche* : émissivité intégrée en fonction de  $n_H$  dans la bande WMAP à 23 GHz (étoiles rouges), dans la bande GBT à 13.7 GHz (croix oranges), dans les bandes LFI à 30, 44, 70 et 100 GHz (triangles, disques, carrés et losanges respectivement). *A droite* : position du pic d'émission rotationnelle en fonction de  $n_H$ . Les zones hachurées montrent la position et la largeur des bandes citées précédemment.



**Figure 5.16** - Ces résultats ont été obtenus à partir des modèles décrits au §5.3.5 pour une distribution de tailles MRN avec  $N_C = 30 - 216$  et pour  $G_0 = 1$ . *A gauche* : émissivité intégrée en fonction de  $m$  dans la bande WMAP à 23 GHz (étoiles rouges), dans la bande GBT à 13.7 GHz (croix oranges), dans les bandes LFI à 30, 44, 70 et 100 GHz (triangles, disques, carrés et losanges respectivement). *A droite* : position du pic d'émission rotationnelle en fonction de  $m$ . Les zones hachurées montrent la position et la largeur des bandes citées précédemment.

## 5.7 Comparaison avec les modèles précédents

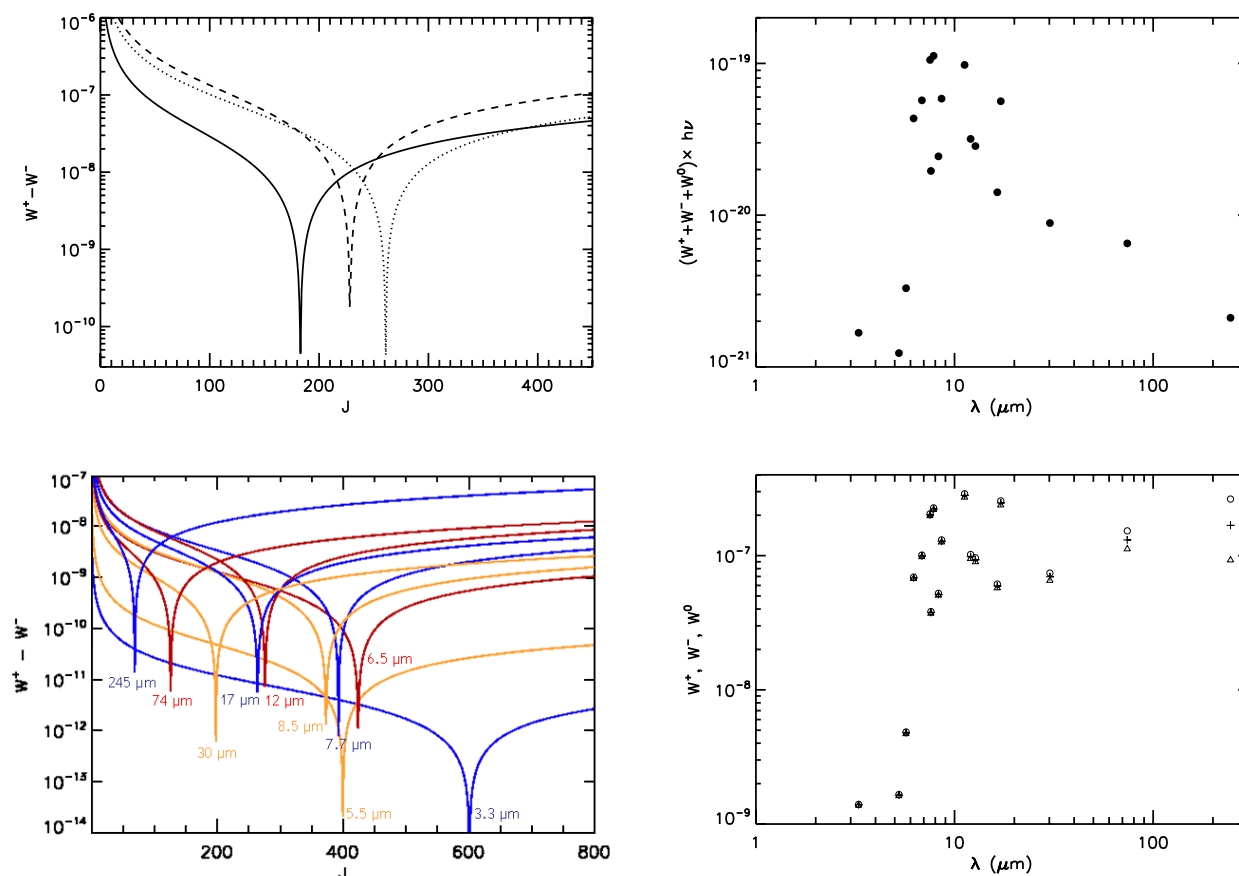
La partie innovante de notre modèle de rotation est le traitement détaillé de l'émission rovibrationnelle IR. Nous faisons donc ici la comparaison de nos taux de changement de  $J$  avec ceux de Rouan *et al.* (1992) et ceux de Draine et Lazarian (1998b). Pour les premiers, nous utilisons directement le taux fourni dans Rouan *et al.* (1997) :

$$(\tau^{-1}\Delta J)_{\text{Rouan}} = W^+ - W^- = -7.4 \times 10^{-8} \left[ \frac{J}{270} \left( \frac{N_C}{78} \right)^{-1/3} - \frac{405}{J} \left( \frac{N_C}{78} \right)^{4/3} \right] \quad (\text{en s}^{-1}) \quad (5.58)$$

Pour les seconds, en utilisant les facteurs de conversion donnés au §5.2, on obtient pour un PAH plan avec  $N_C = 50$  :

$$(\tau^{-1}\Delta J)_{\text{DL98}} = W^+ - W^- = \frac{1.2 \times 10^{-5}}{J} - 1.75 \times 10^{-10} J \quad (\text{en s}^{-1}) \quad (5.59)$$

La Fig. 5.17 présente la comparaison de ces deux taux avec le nôtre pour un PAH plan de 50 atomes de carbone. Les taux pour ces trois modèles ont des valeurs comparables. Cependant, on peut constater que le passage par zéro, c'est-à-dire  $W^+ - W^- = 0$ , est réalisé pour des valeurs de  $J$  différentes. En effet, pour Draine et Lazarian (1998b), ce passage a lieu pour  $J \sim 260$ , pour Rouan *et al.* (1992) pour  $J \sim 225$  et pour notre modèle pour  $J \sim 180$ . Lorsqu'on modifie le modèle décrit dans ce chapitre pour considérer un unique mode vibrationnel, on constate que dans le cas de Draine et Lazarian (1998b) le taux de changement est dominé par un mode effectif à  $15 \mu\text{m}$ , dans le cas de Rouan *et al.* (1992) à  $20 \mu\text{m}$  et dans notre cas à  $31 \mu\text{m}$ . Nos résultats montrent donc la prédominance des modes à basse énergie pour la rotation. Ce résultat est illustré par la Fig. 5.17La différence entre nos résultats et les résultats de Draine et Lazarian (1998b) provient de :



**Figure 5.17** - *En haut à gauche* : comparaison de la contribution de l'émission rovibrationnelle IR de notre modèle  $|(\tau^{-1}\Delta J)_{IR}| = |W^+ - W^-|$  (courbe en trait plein noir) aux modèles de Rouan *et al.* (1992) (tirets) et Draine et Lazarian (1998b) (pointillés) dans le cas du CNM avec  $N_C = 50$ . *En haut à droite* :  $(W^+ + W^- + W^0) \times h\nu_0$  en fonction de la longueur d'onde des 18 modes vibrationnels. Cette quantité est proportionnelle à l'émissivité IR des PAH et on peut constater qu'on retrouve le résultat de la Fig. 3.12 où l'on montrait que l'émissivité des PAH est dominée par les modes dans l'IR moyen. *En bas à gauche* : taux de changement du moment angulaire en fonction de  $J$  pour les 18 modes vibrationnels. Les regroupements de bandes sont les mêmes que dans la Fig. 3.13. *En bas à droite* : les cercles représentent  $W^-$ , les triangles  $W^+$  et les croix  $W^0$  pour les 18 modes vibrationnels en fonction de leur longueur d'onde.

- La section efficace d'absorption  $\sigma_{abs}$  : nous utilisons un spectre de modes et pas un continuum. Draine et Lazarian (1998b) ont utilisé la section efficace du graphite soit une loi de puissance en  $\nu^2$ . Cela favorise les états à haute énergie interne face aux états à plus basse énergie.
- La capacité calorifique  $C(T)$  : en utilisant notre spectre de modes et en supposant que ceux-ci sont harmoniques, on trouve que la capacité calorifique des PAH est plus grande que celle du graphite pour  $T < 100$  K et à peu près égale à elle à plus haute température (Fig. 3.5). Or si on appelle  $P(T)$  la puissance émise par un PAH de température  $T$ , la conservation de l'énergie au cours d'une fluctuation de température donne :  $C(T)dT = -P(T)dt$ . Une capacité calorifique plus grande à basse température augmente donc la contribution des modes à basse énergie qui sont ceux qui dominent  $(\tau^{-1}\Delta J)_{IR}$ .

Enfin, le fait que des modes avec des forces d'oscillateur faibles puissent dominer les variations de  $J$  s'explique grâce aux termes  $\nu^{\pm,0}(\nu_0, J, K)$ . En effet, quand l'énergie du mode est grande, les termes en  $J$  et en  $K$  sont négligeables et les taux  $W^{\pm,0}$  sont quasiment égaux. En revanche, quand l'énergie du mode est faible, ces termes ne sont plus négligeables et la différence entre les trois taux peut devenir importante. Les modes à 30 et 74  $\mu\text{m}$  peuvent donc dominer  $(\tau^{-1}\Delta J)_{IR}$  (voir Fig. 5.17).

## 5.8 Conclusions

Nous avons développé un modèle de rotation des PAH interstellaires avec des propriétés moléculaires réalistes. Les interactions avec le gaz et les photons sont prises en compte. Ce modèle détermine la distribution de moment angulaire des molécules et nous avons pu en déduire le spectre rotationnel des PAH dans différents environnements interstellaires. Nous avons montré que les processus radiatifs (émissions rotationnelle et IR) sont non négligeables comparativement aux interactions avec le gaz. Le calcul détaillé du taux de variation du moment angulaire par émission IR a permis de mettre en évidence la prédominance des modes vibrationnels à basse énergie pour la construction de la distribution  $n(J)$ . On a également pu montrer que l'émission IR est le processus dominant la désexcitation de la rotation dans les milieux peu denses, soumis à un champ de rayonnement intense. Dans les milieux moins irradiés ou plus denses, c'est l'émission de photons rotationnels qui domine le freinage. On notera que tous les résultats présentés dans ce chapitre sont fonction du moment dipolaire électrique choisi pour la distribution de PAH. Une diminution de  $\mu$  entraînerait une augmentation de  $J_0$  et un décalage du spectre rotationnel vers les hautes fréquences ainsi qu'une diminution de son intensité.

Nous avons également pu montrer que l'émission rotationnelle n'est proportionnelle ni à l'intensité du champ de rayonnement incident ni à la densité du gaz dans lequel se trouvent les PAH. Elle est même peu sensible à  $n_H$  et  $G_0$  pour :  $n_H \geq 10$  et  $0.01 \lesssim G_0 \lesssim 10 - 100$  dans la bande K de l'instrument WMAP. Ces résultats ont des conséquences observationnelles fortes qui sont présentées et exploitées dans le chapitre 7.

Enfin, la connaissance du moment angulaire des PAH interstellaires permet de déduire leur température rotationnelle. Ce résultat est également intéressant dans la mesure où il peut être confronté aux largeurs des bandes diffuses observées dans le milieu interstellaire (§2.2). Cela donne des informations sur la taille de l'émetteur de cette bande. L'élargissement de la largeur des bandes est lié à la rotation des PAH puisque les bandes diffuses sont des transitions électroniques avec une sous-structure de raies de rovibration de la molécule. Rouan *et al.* (1997), Mulas (1998); Mulas *et al.* (2003) & Mallocci *et al.* (2003) ont entrepris de faire ce travail dans le cas du Rectangle Rouge en particulier : il serait intéressant de voir les résultats que l'on obtient avec notre modèle pour ce même objet et d'autres objets du milieu interstellaire. Cette étude sera une des utilisations possibles de notre modèle de rotation.