Université Fédérale
Toulouse Midi-Pyrénées

THÈSE

En vue de l'obtention du
DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par l'Université Toulouse 3 - Paul Sabatier

Présentée et soutenue par

Sacha FOSCHINO

Le 17 décembre 2020

Photophysique et évolution des hydrocarbures aromatiques polycycliques cosmiques à l'ère du télescope spatial James Webb

Ecole doctorale : **SDU2E - Sciences de l'Univers, de l'Environnement et de l'Espace**

Spécialité : **Astrophysique, Sciences de l'Espace, Planétologie**

Unité de recherche :
IRAP - Institut de Recherche en Astrophysique et Planetologie

Thèse dirigée par
Olivier BERNE et Christine JOBLIN

Jury

M. Vincent GUILLET, Rapporteur
M. Laurent VERSTRAETE, Rapporteur
Mme Émilie HABART, Examinatrice
M. Frédéric GALLIANO, Examinateur
M. Yannick DEVILLE, Examinateur
Mme Isabelle RISTORCELLI, Examinatrice
M. Olivier BERNE, Directeur de thèse
Mme Christine JOBLIN, Co-directrice de thèse

Résumé

Les spectres infrarouges des galaxies et de nombreux objets de la Voie Lactée sont dominés par des bandes spectrales intenses, localisées à 3.3, 6.2, 7.7, 8.6, 11.2, et 12.7 μm, nommées "bandes aromatiques infrarouges" (AIB). Elles sont attribuées au refroidissement d'une classe de molécules appelées "hydrocarbures aromatiques polycycliques" (PAH), excitées par l'absorption des photons ultraviolets (UV) interstellaires. Les PAH jouent un rôle clé dans la physique des environnements dominés par le rayonnement UV, appelées régions de photodissociation (PDR). En particulier, ils ont une contribution majeure au chauffage du gaz par effet photoélectrique (effet PE). Cependant, à ce jour aucun PAH spécifique n'a pu être identifié, ce qui rend délicat la description, dans les modèles, de leur contribution à la physique et la chimie des milieux. En particulier la contribution de l'effet PE au chauffage du gaz est prise en compte dans de nombreux codes astrophysiques. Il est néanmoins possible d'obtenir des informations globales sur les familles de PAH interstellaires, en se basant sur l'analyse des spectres AIB et de leurs variations. Ceci peut être réalisé en utilisant des méthodes d'apprentissage basées sur la séparation aveugle de sources (SAS), qui permettent d'extraire des spectres d'émission infrarouge représentatifs de populations moyennes de PAH.

Le premier volet de cette thèse a consisté à améliorer les approches basées sur la SAS dans le contexte de l'arrivée du futur observatoire spatial infrarouge JWST. En effet, les méthodes existantes étaient limitées par deux aspects : leur incapacité à traiter de gros volumes de données comme celles qui seront fournies par le JWST, et le fait que leur initialisation, réalisée de manière aléatoire, implique une non-stabilité des résultats. Pour résoudre ces problèmes, j'ai proposé et testé, un protocole basé sur une méthode de SAS hybride issue d'études antérieures. Cette approche a été testée sur un jeu de données d'archives (spectres SWS du satellite ISO) qui présente des caractéristiques semblables d'un point de vue spectral à celle du JWST. Ces tests ont permis de démontrer la robustesse et la rapidité de l'approche et les perspectives à venir pour l'analyse des données du JWST. Par ailleurs, nous avons obtenu de nouvelles informations sur la nature des porteurs des AIB avec, en particulier, une première analyse du domaine à 3 μm.

Le deuxième volet de cette thèse a concerné l'estimation de la contribution des PAH au chauffage du gaz interstellaire par effet photoélectrique ainsi que de l'effet de leur charge sur ce dernier, dans le cas de la PDR NGC 7023 NW. Pour obtenir cette contribution, j'ai comparé l'efficacité théorique de ce processus de chauffage à une valeur haute de l'efficacité observée, appelée efficacité "réduite". La première est calculée grâce aux paramètres moléculaire des PAH obtenues par de récentes expériences de laboratoire et par calcul de chimie quantique. L'efficacité observée "réduite" est obtenu par le ratio entre l'émission du gaz et l'émission additionnée du gaz et des PAH (obtenue via l'outil PAHTAT). Le rapport entre l'efficacité réduite et théorique donne la contribution relative des PAH au chauffage du gaz par rapport aux autres grains. Cette quantité, dans NGC 7023 NW s'élève entre 70 et 80%, ce qui montre l'importance majeure des PAH dans le chauffage du gaz ainsi qu'une description moléculaire de ce processus de chauffage. La taille des PAH influence peu ce résultat, en revanche le modèle montre qu'une connaissance plus précise de l'énergie cinétique des photoélectrons est cruciale pour avancer dans ce domaine.

Abstract

The infrared spectra of galaxies and numerous astrophysical objects of the Milky Way are dominated by intense spectral bands, localized at 3.3, 6.2, 7.7, 8.6, 11.2 and 12.7 μm, called "aromatic infrared bands" (AIB). They are attributed to the cooling of a class of molecules called "polycyclic aromatic hydrocarbons" (PAH), excited by the absorption of interstellar UV photons.

PAHs play a key role in the physics of environments dominated by UV radiation, called photodissociation regions (PDR). In particular they are the major contributors to the gas heating through the photoelectric effect (PE effect). Furthermore, PAHs play an important role in the extinction of stellar radiation and in the gas chemistry, being a possible catalyst in the H_2 formation, the most abundant molecule of the universe.

However, for now no specific PAH has been identified in the interstellar medium, which can yield in a difficult description of their contribution to the physics and chemistry in models. In particular, the contribution of the PE effect on dust in the gas heating is considered in several codes.

It is nevertheless possible to obtain global information on interstellar PAH families, based on the analysis of AIB spectra and their variations. This can be achieved using learning methods such as blind signal separation (BSS), which allows to extract infrared emission spectra, representative of mean populations of PAHs. The first part of this thesis consisted in upgrading the methods based on BSS in the context of the arrival of the James Webb Space Telescope (JWST). Indeed, current methods were limited in two aspects : their inability to handle large volumes of data such as those that will be provided by JWST, and the fact that their random initialization implied an instability of the results. In order to fix these issues, I proposed and developed an approach based on a hybrid BSS method. This approach has been tested on an archival data set (spectra from the SWS instrument onboard the ISO satellite) which present similar spectral characteristics as the coming JWST data. These tests allowed to show the robustness and rapidity of this approach and the perspectives for the analysis of the incoming JWST data. Moreover, we obtained new information on the nature of AIB carriers with, in particular a first analysis of the 3 μm domain.

The second part of this work was focused on the estimation of the PAH contribution to the interstellar gas heating by photoelectric effect as well as the effect of the charge in this process, in the case of the PDR NGC 7023 NW. In order to derive this contribution, I compared the theoritical efficiency of this heating process with an upper value of the observed efficiency, called "reduced" efficiency. the first one is computed using the molecular parameter of PAHs obtained by recent laboratory experiments and quantum chemistry computations. The "reduced" efficiency is derived using the ratio between the gas cooling emission and the sum of the gas cooling emission and the PAH cooling emission. the ratio between the "reduced" and theoritical efficiencies allows to derive the contribution of PAHs to the gas heating relatively to that of other types of grains. This quantity, in NGC 7023 NW, is comprised between 70 and 80%, which shows the major influence of PAHs in the gas heating as well as the molecular description of this heating process. The PAH size has only a little impact on this result, however the model shows that a more profound knowledge of the kinetic energy of photoelectrons is crucial to move forward in this area.

Remerciements

Ça y est, c'est fait : thèse soutenue ! Ces huit ans de découverte graduelle de la physique et du monde qui m'entoure sont passés beaucoup trop vite. S'ils se sont très bien déroulés c'est avant tout grâce au soutien sans condition de mes parents, Philippe et Nathalie. Ce sont les premiers que je veux remercier ici. Ils m'ont alimenté de livres et documentaires sur les volcans, les dinosaures, l'astronomie qui ont éveillé une passion pour les sciences naturelles, l'astronomie prenant peu à peu le dessus (le ciel est accessible partout, les volcans et dinosaures un peu moins). Mais c'est après avoir oscillé entre vouloir devenir concessionnaire automobile (no comment) et ingénieur automobile puis dans le spatial, que mon rêve de gosse a fini par prendre le dessus au lycée : l'astrophysique. Après avoir discuté de la difficulté du cursus et des débouchés (très) limités, mes parents m'ont soutenu coûte que coûte pour que je réalise mon rêve. Grâce à eux j'ai pu faire des études sans trop d'autres soucis que de réussir les exams. Merci du fond du cœur !

On peut aimer l'astronomie sans aimer la physique, si ce n'est pas mon cas c'est grâce à vous Loïc, pour me l'avoir enseigné de façon si décontractée et fun en seconde et terminale. Et vous aviez raison, la fac c'est génial :). Du coup, mes pensées vont aux étudiants qui ne peuvent pas profiter pleinement du pouvoir émancipateur de l'université en cette période vraiment pas facile.

Si j'ai atterri dans la super équipe de recherche MICMAC de l'IRAP, c'est grâce à toi Paolo qui m'a accueilli avec Christine en M1 pour mon premier sujet d'étude du milieu interstellaire, merci ! Ce stage m'a permis de découvrir l'étude des poussières d'étoiles par la spectroscopie que j'ai poursuivie par passion en stage de fin d'étude, cette fois avec Olivier et Christine. Puis vint l'obtention du financement de la thèse avec vous ! La thèse sous votre encadrement était une très belle expérience, merci pour votre patience, vos explications claires et les remises de la tête sur les épaules. Je pense que je n'oublierai jamais ces trois ans et ce que j'ai appris en dehors du contenu scientifique de la thèse grâce à vous.

Le manuscrit qui suit a été un exercice particulier, pas facile, sur lequel mes encadrants et aussi mes rapporteurs Laurent et Vincent m'ont aidé à étoffer et corriger des choses, merci à eux ainsi qu'au reste du jury, Frédéric et Yannick pour les discussions lors de la soutenance. Un merci chaleureux à mon comité de suivi, Emilie, Giacomo et Isabelle. En particulier Giacomo pour mon premier cours de photophysique des PAH durant mon premier stage, cela a sans doute augmenté mon attrait pour ces molécules/grains. Et merci pour les pizzas lorsqu'avec Gabi nous t'avons retenu tard le soir pour se rendre compte qu'il nous manquait un « .copy() » dans notre code ! Merci Isabelle pour ton soutien et ton intérêt pour mes activités de médiation scientifique au sein d'UniverSCiel et toutes ces belles interventions que tu nous as permis de faire.

Bien sûr une thèse c'est beaucoup de science sérieuse, d'algorithmes et de prises de tête, mais aussi beaucoup de fun avec d'autres gens dans le même bateau ! A vous, c'est plus qu'un merci qu'il faudrait ! Chronologiquement, c'est David qui obtient la palme du toulousain m'ayant supporté depuis le plus longtemps ! On a partagé les mystères de l'astronomie du master jusqu'à la thèse et d'*UPS in Space* jusqu'à *UniverSCiel*. C'était cool d'avoir pu compter sur toi pour la reprise de cette dernière quand je ne pouvais plus, merci ! Cimer à Gab' et Jas' partis du labo bien trop tôt (j'ai plus à vous faire le café comme ça, tant mieux :)) et Mathieu, Claire et Jean-Sébastien, sans toutes ces pauses café j'aurais été moins efficace et la science mondiale en aurait pâti ! Merci

à Margaux pour les mêmes choses mais aussi pour les soirées et les cours de cuisine, vive le boudin vietnamien ! Thank you, Gabi, for all the mutual-supports, the long conversations, being out until last call, it was cool to have a work-sis like you ! And in another extent, many thanks the Gabi's PhD Diaries group, Sujay, Andrès, Rémi, Evgeny, Daria, Abe, Tizi, Alessio, Sid, Lucy, Chen Lin, what a dream team we are !

Je ne peux pas dissocier l'astronomie du partage de ses merveilles au plus grand nombre, c'est ce que j'ai essayé de faire avec les associations *UPS in Space* et *UniverSCiel*. Un président ne peut pas faire grand-chose sans une équipe motivée derrière ! Merci énormément aux bureaux et actifs « de mon époque » pour avoir permis de diffuser l'astronomie sur le campus et au-delà ! Merci tout particulier à Hadrien qui a pu reprendre mon bébé, le faire grandir et devenir une si belle, dynamique et ambitieuse association (bien sûr avec son équipe aussi ;)) ! Le projet d'observatoire qui a émergé avec Jean Baptiste durant notre master devient réalité et sera, j'en suis sûr, une place très importante de l'astronomie amateur et étudiante de la région, voire plus ! C'est absolument fou ce que vous faites ! Longue vie à *UPS in Space* ! Longue vie aussi à *UniverSCiel* ! Tant de choses vécues au sein de cette asso avec les copains. Organiser Astro-jeunes 2k19 avec une équipe pareille ne pouvait qu'avoir le fantastique succès qu'on a connu, j'espère que la nouvelle génération *UniverSCiel* pourra lancer à leur tour une bataille de holi dans la cour ! La curiosité et l'enthousiasme des enfants à chaque intervention était incroyable (et la lettre et BD de ceux de l'IME de Plaisance du Touch était vraiment touchante). Merci à tous, en particulier Marina pour m'avoir mis le pied à l'étrier d'*UniverSCiel* et tout ton soutien. Bon courage au nouveau bureau et l'équipe de Xan, et merci d'avoir pris le relais !

Enfin, ma louloutte, qui m'apporte douceur et joie au quotidien, sans toi les derniers mois auraient été beaucoup plus difficiles. On a traversé plus de la moitié de nos thèses ensemble, jusqu'à être co-bureau durant des mois pour cause covid, que je remercierais presque pour nous avoir fait passer encore plus de temps ensemble. Comme dirait Carl Sagan, pour des petites créatures telles que nous, l'immensité [de l'univers] n'est supportable que par ton amour. (J'en fais trop ?) Bref, merci un gogolplex de fois d'être à mes côtés.

Merci à vous, lecteur, lectrice et bonne lecture !

Table des matières

Table des matières iii

1 Contexte astrophysique 1
- 1.1 Introduction générale . . . 2
- 1.2 Le milieu interstellaire . . . 3
  - 1.2.1 Les phases du milieu interstellaire . . . 3
  - 1.2.2 Le cycle de la matière . . . 5
- 1.3 Composition du milieu interstellaire . . . 7
  - 1.3.1 Les éléments chimiques . . . 7
  - 1.3.2 Molécules interstellaires et circumstellaires . . . 8
  - 1.3.3 La poussière interstellaire . . . 9
- 1.4 Attribution des bandes aromatiques infrarouges aux PAH . . . 11
- 1.5 Les régions de photodissociation . . . 14
  - 1.5.1 Champ de rayonnement UV . . . 14
  - 1.5.2 Structure associée à une région de formation stellaire . . . 15
  - 1.5.3 Bilan thermique du gaz dans une PDR . . . 16
- 1.6 Objectifs de cette thèse . . . 21

2 Méthodes et outils 23
- 2.1 L'astronomie infrarouge . . . 24
  - 2.1.1 Limitations dues à l'atmosphère terrestre et aux effets thermiques 24
  - 2.1.2 Résolutions spatiale et spectrale . . . 25
  - 2.1.3 Les types d'observations . . . 26
  - 2.1.4 Les observatoires infrarouges . . . 27
- 2.2 La séparation aveugle de sources en astrophysique . . . 31
  - 2.2.1 Généralités . . . 31
  - 2.2.2 La méthode NMF . . . 32
  - 2.2.3 Identification du nombre de composantes . . . 34
  - 2.2.4 Unicité et variabilité des solutions de la NMF . . . 34
  - 2.2.5 NMF couplée à une approche Monte-Carlo . . . 35
  - 2.2.6 Initialisation de la NMF par MASS : méthode MASS-NMF . . . 36
- 2.3 Photophysique générale des PAH . . . 37
  - 2.3.1 Relaxation de l'énergie interne . . . 38
  - 2.3.2 Ionisation . . . 39
  - 2.3.3 Photodissociation . . . 41

3 Analyse des bandes aromatiques infrarouges par séparation aveugle de sources dans le contexte de la mission JWST 43
- 3.1 Observations et interprétations des bandes aromatiques infrarouges . . . 44
  - 3.1.1 Observations des bandes aromatiques infrarouges . . . 44

3.1.2 Approches d'analyse des AIB . . . 44
3.1.3 Étude des spectres de populations physico-chimiques de PAH par SAS . . . 49
3.2 Adaptation de MASS-NMF à des observations de grande dimension dans le contexte du JWST . . . 51
3.2.1 Challenges de l'application de la SAS sur des données JWST . . . 51
3.2.2 Étape de pré-traitement . . . 52
3.2.3 Étape MASS-NMF . . . 53
3.3 Application sur données réelles . . . 54
3.3.1 Données ISO-SWS . . . 54
3.3.2 Pré-traitement des données ISO-SWS . . . 57
3.3.3 Application de MASS-NMF à X_{AIB} construit avec les données ISO-SWS . . . 59
3.4 Performances de l'application de MASS-NMF sur l'échantillon ISO-SWS 63
3.4.1 Reconstruction des données . . . 63
3.4.2 Rôle du spectre du Rectangle Rouge dans le calcul des spectres élémentaires . . . 63
3.4.3 Temps de calcul dans le contexte des données JWST . . . 65
3.5 Interprétation physique et chimique des résultats . . . 67
3.5.1 Identification des spectres représentatifs . . . 67
3.5.2 Diversité chimique / comparaison inter-spectres . . . 70

4 Impact des PAH sur le chauffage du gaz dans les régions de photodissociation 75
4.1 État des connaissances du lien entre évolution des PAH et chauffage du gaz . . . 76
4.1.1 Études observationnelles antérieures . . . 76
4.1.2 Quantification de la contribution des PAH au chauffage du gaz . . . 77
4.1.3 La région de photodissociation NGC 7023 NW . . . 78
4.2 Mesure observationnelle de ϵ_r dans NGC 7023 . . . 79
4.2.1 Données infrarouges . . . 79
4.2.2 Extraction des cartes . . . 81
4.3 Chauffage du gaz par effet photoélectrique sur les PAH : approche moléculaire . . . 83
4.3.1 Absorption d'un photon UV : propriétés moléculaires . . . 83
4.3.2 Calcul de l'efficacité du chauffage par les PAH . . . 86
4.4 Application du modèle et comparaison avec les observations . . . 88
4.4.1 Conditions physiques de NGC 7023 . . . 88
4.4.2 Comparaison observations - modèle . . . 90

Conclusion et perspectives 92

Bibliographie 96

Annexes 109

A MASS-NMF-spec sur données normalisées I

B Ajustements PAHTAT dans NGC 7023 NW III

C Calcul des fractions d'état de charge des PAH **V**

Liste des figures **VII**

Liste des tableaux **XIII**

Chapitre 1

Contexte astrophysique

« *The cosmos is within us, we are made of star stuff. We are a way, for the cosmos, to know itself.* »

Carl Sagan (1934-1996)

1.1 Introduction générale

Parmi les sciences naturelles, l'astronomie tient une place particulière dans la culture collective. Le monde entier a accès à l'objet d'étude des astronomes. Le paysage du ciel nocturne offre une vue qui fascine, composée de milliers d'étoiles réparties uniformément sur l'ensemble de la voûte. Une structure se distingue cependant, notamment dans le ciel d'été sous nos latitudes. L'ensemble des peuples lui ont donné différents noms mais c'est celui de "Voie Lactée" qui est resté en Occident. Cette bande visible loin des villes, traversant le ciel de part en part (voir figure 1.1) présente à l'oeil nu une grande variété de structures ainsi que des variations dans sa luminosité. La Voie Lactée est la

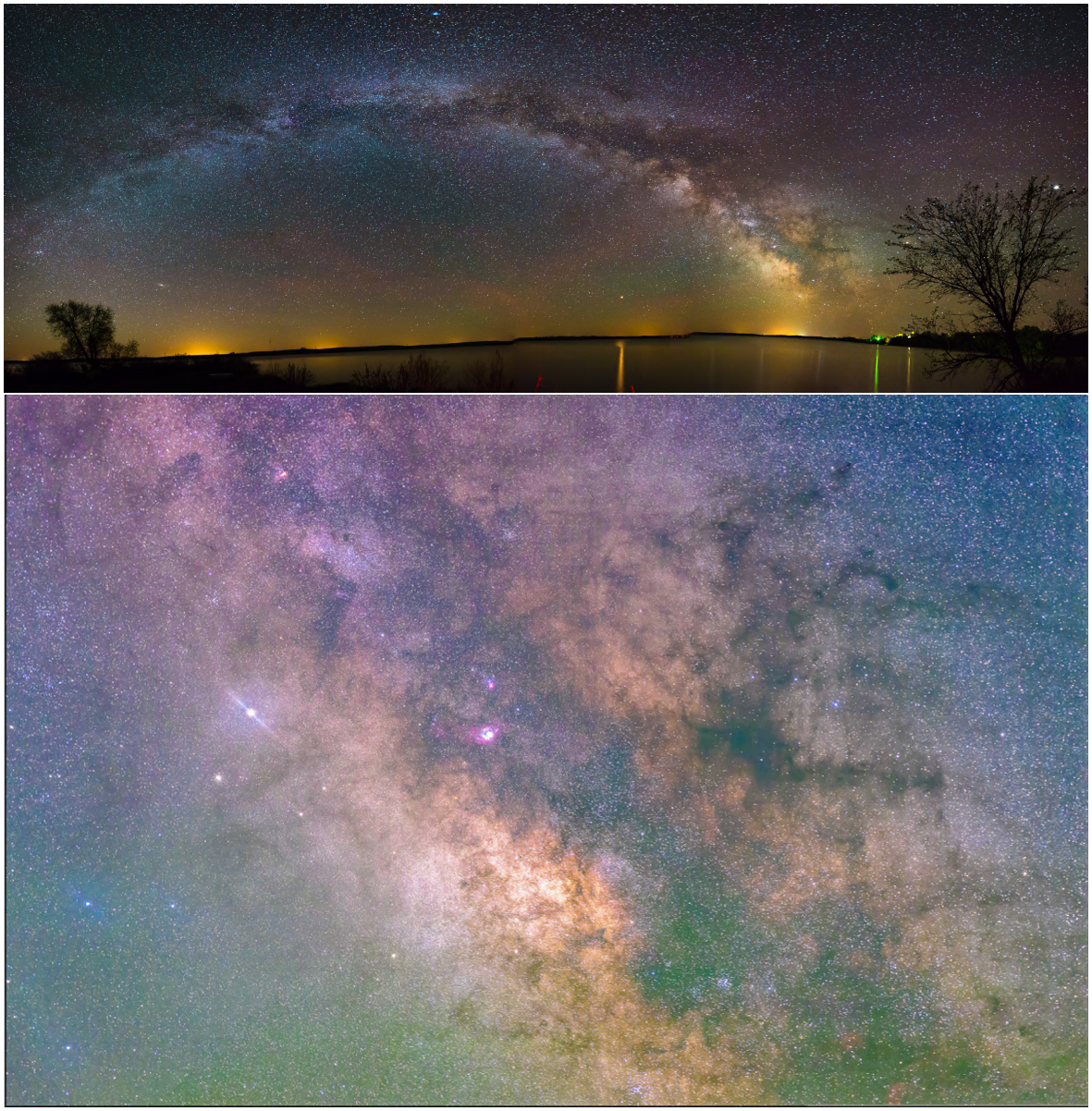

FIGURE 1.1 – En haut : Vue globale de la Voie Lactée, crédit : Jeff Savadel. En bas : vue du centre galactique de la Voie Lactée, crédit : Hadrien Dupuis.

vision par la tranche de notre Galaxie, une structure vaste, en forme de disque spiral et formée de centaines de milliards d'étoiles représentant 90% de sa masse. 99% du reste est contenu dans le gaz et 1% dans la poussière. Sa région la plus brillante et diversifiée se situe entre les constellations du Scorpion et du Sagittaire. La figure 1.1 propose une

vue détaillée de cette dernière. Dans ce panorama se mêlent étoiles, amas d'étoiles et nébuleuses. L'objet central de ce point de vue est la nébuleuse de la Lagune, M8. C'est une région de formation d'étoiles massives. Les étoiles jeunes en son centre irradient leur environnement, c'est l'hydrogène présent dans le gaz qui émet cette couleur rouge, observable à d'autres endroits de l'image. Elle est émise lorsque l'hydrogène ionisé par les photons ultraviolets (UV) d'énergie supérieure à 13.6 eV à proximité des étoiles massives se recombine avec un électron. L'atome d'hydrogène excité émet alors des raies dites de recombinaison, dont une raie correspondant à la transition $n = 3 \rightarrow 2$, appelée Hα. Le reste de l'image présente d'autres régions étendues, celles-ci sont sombres, dépourvues d'étoiles. C'est la manifestation de l'extinction de la lumière des étoiles par la poussière, troisième composante importante de la Galaxie, après les étoiles et le gaz[1]. La poussière présente entre les étoiles absorbe et diffuse la lumière, ici les longueurs d'onde visibles. Elle se trouve de manière diffuse partout dans la Galaxie, le rayonnement qui arrive jusqu'à nos instruments d'observation est donc plus ou moins affecté par sa présence. Dans les régions de formation d'étoiles massives comme M8 qui sont associées à de grands nuages moléculaires, elle joue un rôle fondamental sur la pénétration des photons UV permettant la mise en place d'un milieu de plus en plus propice à la formation de molécules jusqu'à atteindre un milieu froid, moléculaire, isolé des photons stellaires. Ce type d'environnement de transition entre étoiles et nuages moléculaires froids est appelé région de photodissociation (*photodissociation region*, PDR en anglais). Les PDR sont présentes systématiquement aux frontières des zones de formation d'étoiles. Les régions de formation d'étoiles, les PDR et la poussière sont intimement liées.

Avant de définir les objectifs de cette thèse, je décrirai plus en détails comment le milieu interstellaire se structure et de quoi il se compose. Une description de la poussière ainsi que des PDR permettra ensuite de dégager la complémentarité de leur étude conjointe : l'étude de la poussière nous permet de mieux comprendre les caractéristiques des PDR et inversement, l'étude des conditions physiques des PDR nous permet de mieux comprendre l'évolution des propriétés physico-chimiques de la poussière.

1.2 Le milieu interstellaire

1.2.1 Les phases du milieu interstellaire

A grande échelle, la Galaxie est composée de milieux peu denses et diffus et de milieux plus denses sous forme de vastes nuages associés à des régions de formation d'étoiles ou nuages moléculaires. Le milieu diffus présente différentes phases définies par l'état en densité, notée n, et température du gaz notée T. La transition entre deux milieux n'est pas forcément nette, pouvant rendre difficile la classification de certaines régions dans l'une des phases. Cette section en propose une description générale ainsi que des structures plus denses (observées notamment en figure 1.1). Ces différents environnements sont brièvement décrits ci-dessous et les valeurs typiques de la densité et température du gaz dans ces environnements sont compilées dans le tableau 1.1.

1. La matière noire est mise à part.

Phase	CMM	CNM	WNM	WIM	HIM
Température (K)	10	100	10^3	$10^3 - 10^4$	$10^5 - 10^6$
Densité (cm^{-3})	>200-$10^{4,a}$	10^2	0.5	0.1	$3\times10^{-3} - 10^{-2}$

TABLEAU 1.1 – Valeurs typiques des gammes de température et densité du gaz dans chaque phase du MIS. ^{a} : valeur pour les coeurs pré-stellaires.

Milieu ionisé chaud

Le milieu ionisé chaud (*Hot ionized medium*, HIM en anglais), s'applique principalement au gaz "coronal" composant le halo englobant la Galaxie. Il représente une large part du volume, mais une faible fraction de la masse du fait de sa très faible densité, de l'ordre de $n \sim 10^{-4} - 10^{-2}\,\mathrm{cm}^{-3}$. Cette faible densité permet aux ondes de chocs provenant des supernovae galactiques ainsi qu'au rayonnement UV de s'y propager facilement, chauffant le gaz aux plus hautes températures rencontrées dans le milieu interstellaire, de l'ordre de $T \sim 10^6\,\mathrm{K}$. Ceci implique une forte ionisation des espèces en présence (O VI par exemple). Les ondes de chocs des supernovae produisent aussi les conditions de ce milieu dans le disque galactique, on parle alors de milieu chaud entre les nuages (*hot intercloud medium* en anglais).

Milieu tiède ionisé

Les photons d'une énergie supérieure à 13.6 eV, appartenant au domaine des UV-extrêmes (EUV pour la suite), sont susceptibles d'ioniser l'hydrogène neutre, principal constituant du gaz interstellaire. Suite à son ionisation, l'hydrogène une probabilité de se recombiner avec un électron avec une efficacité qui dépend de T et de la densité d'électrons notée n_e. La compétition entre ionisation et recombinaison détermine le fait qu'un milieu soit plutôt ionisé ou neutre. Le milieu tiède ionisé (*Warm ionized medium*, WIM en anglais) s'établit lorsque le taux d'ionisation de H est plus rapide que le taux de recombinaison de H^+ avec les électrons. L'électron éjecté lors de l'ionisation emporte une certaine énergie cinétique qu'il transmet au gaz par thermalisation par collisions, le chauffant. Ce processus est le mode de chauffage principal du milieu tiède ionisé, permettant d'atteindre une température d'environ $T \sim 8000\,\mathrm{K}$. Cette phase est traçable notamment via l'émission Hα diffuse observée largement dans la Galaxie, voir Hollenbach and Thronson [1987].

Milieu neutre chaud

Ce milieu (*Warm neutral medium* en anglais, WNM) se présente lorsque le taux de recombinaison de H^+ avec les électrons est plus rapide que le taux d'ionisation de H. L'énergie des photons y est inférieure au potentiel d'ionisation (*ionization potential*, IP en anglais) du H soit $h\nu < 13.6\,\mathrm{eV}$. Le WNM regroupe tous les nuages HI d'une température de plusieurs milliers de Kelvin. Cette phase est particulièrement bien observée en émission dans la transition hyperfine à 21 cm de l'hydrogène.

Milieu neutre froid

Cette phase (*Cold Neutral Medium* en anglais, CNM) se distingue du WNM par une température plus basse, T$\sim$ 80 K. L'observation de ce milieu à 21 cm de longueur d'onde montre cette raie en absorption.

Nuages moléculaires

Les nuages moléculaires représentent une faible partie du volume total de la galaxie. Du fait de ses densités élevées, allant de 10^3 à $10^{6-7}\,\mathrm{cm}^{-3}$ pour les coeurs denses, cette phase représente une part substantielle de la masse du milieu interstellaire, environ 30% [Heyer and Dame, 2015]. Dans ces environnements, les atomes de H se combinent pour former du H_2 dont la dissociation n'est observée qu'aux interfaces avec le champ de rayonnement UV définissant un front de dissociation. Les températures du gaz dans ces nuages sont très faibles, de l'ordre de 10 K. La poussière est également très froide, permettant à des manteaux de glaces moléculaires de se former à leur surface. Ce milieu est protégé du rayonnement stellaire mais les rayons cosmiques y pénètrent, participant à leur chauffage et induisant une chimie active. L'émission millimétrique de la molécule de CO est le moyen principal de tracer cette phase.

Les régions H ii

Les régions de formation d'étoiles présentent en général une ou plusieurs étoiles massives en leur centre (de type O et/ou B). Ces étoiles sont de fortes émettrices de photons EUV qui ionisent le gaz environnant, formant une région H II. La température du gaz dans ces régions est directement influencée par la température de l'étoile, i.e. son type spectral. En effet, le gaz d'une région H II est chauffé par les collisions des photoélectrons issus de l'ionisation du H. L'énergie cinétique des photoélectrons dépend de la quantité d'énergie restante après ionisation ($h\nu - 13.6\,\mathrm{eV}$). Comme l'énergie maximale des photons est définie par la température de l'étoile, plus l'étoile est chaude, plus la température du gaz est haute, avoisinant généralement $T \sim 10^4\,\mathrm{K}$. Une région H II, dans le cas idéal d'un gaz de densité uniforme constitué uniquement d'hydrogène, autour d'étoiles ionisantes est modélisée par une sphère de Strömgren [Strömgren, 1939]. La distance à laquelle le flux de photons ionisants induit un taux de photoionisation de H égal au taux de recombinaison de H^+ avec les électrons, définit le rayon de Strömgren, noté R_S,

$$R_S = \left(\frac{3S_*}{4\pi n_H^2 \alpha}\right)^{1/3}, \tag{1.1}$$

où S_* est le taux d'émission de photons stellaires ionisants (en sec^{-1}), n_H la densité du gaz d'hydrogène (en cm^{-3} ; le gaz d'une région H II ne contient pas uniquement du H) et α le taux de recombinaison d'un proton avec un électron (en $\mathrm{cm}^3.\mathrm{sec}^{-1}$) avec : $\alpha = 1.627 \times 10^{-13} T_4^{-1/2}(1 - 1.657 \log T_4 + 0.584 T_4^{1/3})$ (voir Hummer and Seaton [1963]), avec $T_4 = T/10^4$ où T est la température du gaz ($T \sim 10^4\,\mathrm{K}$ dans une région H II). Une étoile massive de type O5 (T_{eff}=46000 K) entourée d'un gaz d'hydrogène de densité $n_H = 10^3\,\mathrm{cm}^{-3}$ et avec un taux de recombinaison $\alpha = 2.6 \times 10^{-13}\,\mathrm{cm}^3\mathrm{s}^{-1}$ génère une sphère de Strömgren d'environ 1 pc.

1.2.2 Le cycle de la matière

Le milieu interstellaire est constamment en évolution via le cycle de la matière qui s'y déroule. Ce dernier est lié au cycle de "vie" des étoiles et est schématisé sur la figure 1.2.

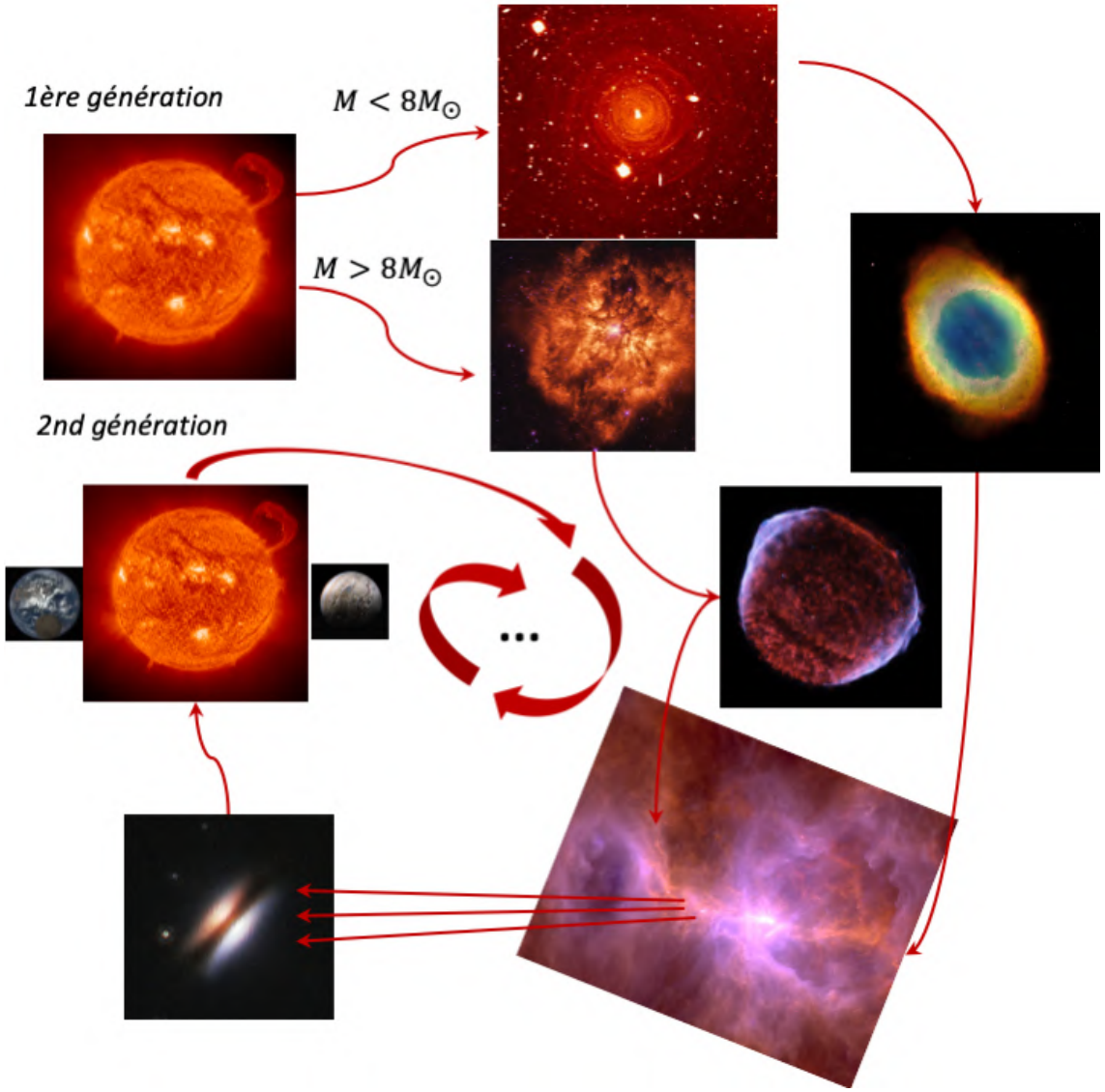

FIGURE 1.2 – Représentation du cycle de la matière. L'étoile, selon sa masse suit plusieurs trajets d'évolution possibles. De haut en bas : l'étoile AGB IRC+10216 ; la nébuleuse planétaire de la Lyre (M57) ; l'étoile Wolf-Rayet WR124 ; le rémanent de la supernova SN1006, la nébuleuse d'Orion (M42) et le disque de "la soucoupe volante". A gauche, images du Soleil seul puis avec son cortège de planètes. Crédits : NASA/ESA/ESO.

Selon leur masse, les étoiles termineront leur existence via des événements plus ou moins énergétiques. Ils auront cependant tous le même effet : libérer dans le milieu interstellaire la matière formée dans les étoiles.

La dernière phase de la vie des étoiles de plus faible masse telle que le Soleil, $M < 8\,M_\odot$ se caractérise par une éjection importante de matière ($\dot{M} \sim 10^{-7}\,\mathrm{M_\odot/an}$), une forte luminosité ($\mathrm{L} > 3000\,\mathrm{L_\odot}$) et une basse température en surface ($\mathrm{T} \sim 3000\,\mathrm{K}$), c'est la phase de branche asymptotique des géantes (AGB en anglais), qui dure quelques 10^5 années. L'étoile AGB carbonée IRC+10216 en est un exemple, en haut de la figure 1.2. Cette éjection de matière forme des coquilles autour de l'étoile. Ce milieu circumstellaire semble être un lieu privilégié de formation de poussière silicatée ou carbonée selon le rapport d'abondance oxygène/carbone (respectivement supérieur et inférieur à 1) qui y est observé. L'éjection de matière se poursuit jusqu'à souffler le reste des couches lors d'une *Nova*, laissant le coeur de l'étoile, une naine blanche, au centre d'une nébuleuse

planétaire, contenant les nouveaux éléments, comme celle de la Lyre (M57), en haut à droite de la figure 1.2.

L'évolution des étoiles massives ($M > 8\,M_\odot$) débouche aussi sur une période d'éjection de masse plus intense que lors de leur séquence principale. Citons le cas extrême des étoiles de Wolf-Rayet, dont WR124 est un exemple en figure 1.2, qui, pour une étoile de $40\,\mathrm{M}_\odot$, peut avoir un taux d'éjection de masse de $\dot{M} \sim 10^{-6}$ à $10^{-4}\,\mathrm{M}_\odot$/an durant $\sim 2 \times 10^5$ années. En fin de vie, l'étoile s'effondre et produit une supernova, les couches externes contenant les nouveaux éléments lourds sont éjectées. Il reste une étoile à neutrons au coeur d'un rémanent de supernova comme celui de SN1006, en figure 1.2.

La matière éjectée par les étoiles (toutes masses confondues) se dilue dans le milieu interstellaire sur des millions d'années, enrichissant le gaz en "métaux", i.e. tout élément plus lourd que H ou He. La matière formée par chaque génération d'étoiles finit par se retrouver dans un nuage moléculaire comme ceux qu'on peut trouver dans la nébuleuse d'Orion, représentée en bas à droite de la figure 1.2. Un nuage moléculaire peut satisfaire les critères de "Jeans", i.e. les conditions requises en densité, température et masse, pour s'effondrer gravitationnellement sur lui même menant à la formation d'une ou plusieurs étoiles.

Le mécanisme de formation des étoiles massives est encore mal contraint observationnellement du fait de leur rapidité. Celui des étoiles de masse solaire l'est davantage : la conservation du moment cinétique du nuage moléculaire initial implique un aplatissement du nuage jusqu'à la formation d'un disque proto-planétaire dans lequel subsiste $\sim 1\%$ de la masse du nuage, le reste étant accrété par la proto-étoile. Le disque de la "soucoupe volante", visible en bas à gauche de la figure 1.2 en est un exemple. Dans le cas des étoiles d'une masse $M < 3\,M_\odot$, la formation de l'étoile passe par une phase T-Tauri. Dans le cas d'une masse plus importante $3\,M_\odot < M < 8\,M_\odot$, c'est une phase Herbig Ae/Be. Ce sont des périodes courtes $\sim 10^6$ ans lors desquelles la luminosité des proto-étoiles, accrétant encore de la matière, est variable. Elles n'ont pas encore atteint la séquence principale (fusion de H pour former He) mais leur température permet de chauffer leur environnement, impliquant notamment l'évaporation des glaces de la surface des grains de poussière. À la fin de cette phase, les étoiles entrent en séquence principale et suivent la même trajectoire que la génération précédente d'étoiles, en finissant par enrichir à leur tour le milieu interstellaire en nouveaux métaux.

1.3 Composition du milieu interstellaire

1.3.1 Les éléments chimiques

La figure 1.3 montre les proportions en masse et en abondance des différents éléments chimiques à partir de mesures dans la photosphère du Soleil [Asplund et collab., 2009]. On note X, Y et Z les fractions de masse respectives de l'hydrogène, l'hélium et de tout le reste des éléments, classés comme *métaux*. Z est la *métallicité*. Les valeurs de référence sont X=0.7381, Y=0.2485 et Z=0.0134 [Asplund et collab., 2009]. Z est une grandeur mesurable dans les autres objets (étoiles et milieux) et comparée à celle du Soleil. L'abondance d'un élément X, notée ϵ_X, est mesurée sur une ligne de visée par rapport à la quantité d'hydrogène :

$$\log \epsilon_X = 12 + \log \frac{N_X}{N_H}, \tag{1.2}$$

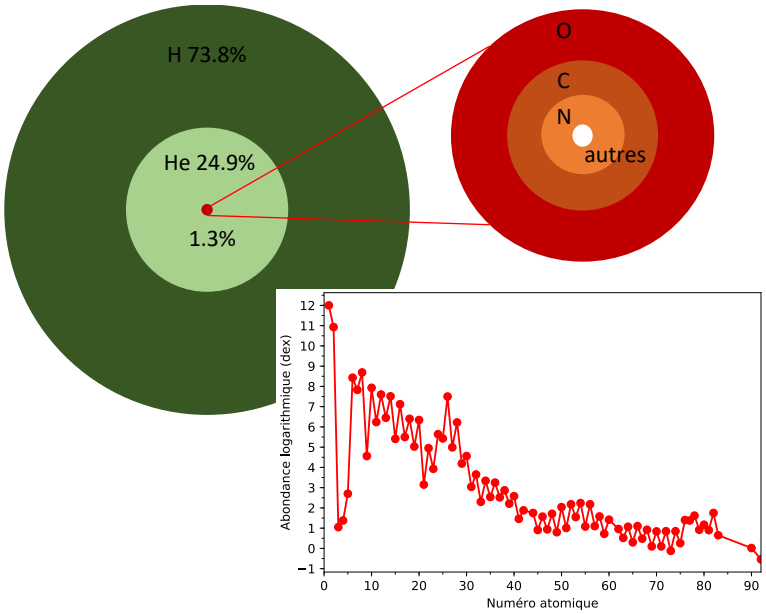

FIGURE 1.3 – Représentation de la répartition relative de la masses des différents éléments chimiques dans la photosphère du Soleil (disques de couleur) et évolution de l'abondance logarithmique de la photosphère du Soleil avec le numéro atomique. Graphique adapté de Asplund et collab. [2009]. Pour une discussion de ce que cette courbe peut nous apprendre sur les propriétés atomiques de ces éléments, voir la discussiom de Reeves [1969].

Élément	C	O	Mg	Si	Fe
$10^{-5} N_X/N_H$	29.5	53.7	4.37	3.55	3.47

TABLEAU 1.2 – Rapports entre la densité de colonne dans la photosphère solaire des principaux métaux et celle de l'hydrogène.

où N_X est la densité de colonne de l'élément X, i.e. le nombre de particules présentes dans une colonne de 1 cm^2 de surface à la base. C'est un paramètre rapidement décroissant avec le numéro atomique, d'où sa normalisation à 12 en échelle logarithmique pour l'hydrogène. La courbe de la figure 1.3 montre l'évolution de l'abondance logarithmique des éléments dans la photosphère solaire, inférée à partir de modèles de l'atmosphère du Soleil. Ces valeurs sont représentatives de la composition de la nébuleuse protosolaire, à environ 10% près étant donné la diffusion des éléments dans l'atmosphère solaire [2] [Asplund et collab., 2009]. C'est l'oxygène qui est le plus abondant des éléments formés par nucléosynthèse stellaire suivi du carbone. Un pic à Z=26 est aussi présent, correspondant au fer. Le tableau 1.2 donne les rapports de densité de colonne des métaux principaux, participant entre autre à la formation de poussière.

1.3.2 Molécules interstellaires et circumstellaires

À ce jour, plus de 200 molécules ont été détectées dans la Galaxie, soit dans le milieu interstellaire, soit dans les enveloppes d'étoiles évoluées. Les détections de nouvelles molécules sont concentrées dans quelques objets : les nuages moléculaires TMC-1 et Sgr B2 pour le milieu interstellaire et principalement dans l'enveloppe de l'étoile AGB carbonée la plus proche, IRC+10216, pour le milieu circumstellaire [McGuire, 2018]. Les premières espèces moléculaires à avoir été détectées sont CH, CN et CH^+ (des ra-

2. A noter que la valeur du Lithium est 150 fois moins abondante que dans les météorites.

dicaux) [Douglas and Herzberg, 1941; McKellar, 1940; Swings and Rosenfeld, 1937]. La molécule de H_2 n'a été détectée qu'en 1970 par Carruthers [1970], par ses transitions dans l'UV accessibles seulement depuis l'espace. La mesure de Carruthers [1970] a permis d'effectuer la première mesure de densité de colonne du H_2, de N_{H2}=1.3×10^{20} cm^{-2} en direction de l'étoile ξ Persei. Conformément aux prédictions de l'époque, la moitié de l'hydrogène sur cette ligne de visée est sous forme moléculaire. H_2 est la molécule la plus abondante, suivie de CO puis H_2O. La molécule de CO permet de tracer efficacement les nuages moléculaires via l'observation de sa transition rotationnelle dans le domaine millimétrique, à 115 GHz (2.6 mm). Un des grands intérêts de cette molécule est que l'on peut, en faisant certaines hypothèses, relier son émission à la densité de colonne du H_2 [Heyer and Dame, 2015]. De façon non exhaustive, son émission peut aussi servir à cartographier la Voie Lactée, à la mesure de la masse des nuages moléculaires ou encore du taux de formation d'étoiles dans les galaxies [Heyer and Dame, 2015].

Par ailleurs, on compte plus de 70 molécules contenant 6 atomes ou plus, appelées molécules organiques complexes (MOC). Enfin, les hydrocarbures aromatiques polycycliques (*Polycyclic Aromatic Hydrocarbons* en anglais, PAH par la suite), sont également une composante moléculaire importante mais elles doivent être considérées comme une famille car aucune espèce individuelle n'a pu être identifiée à ce jour.

La formation moléculaire ne sera pas traitée dans ce manuscrit, mais on pourra consulter Tielens [2013] et Herbst and van Dishoeck [2009] pour plus d'informations à ce sujet. Globalement, la chimie en phase gazeuse n'est pas assez efficace pour expliquer à elle seule les densités de colonne des molécules observées. Les grains de poussière jouent un rôle crucial dans l'évolution de la complexité chimique du milieu interstellaire.

1.3.3 La poussière interstellaire

La mesure de l'abondance du C, Mg, O, Si et Fe dans le gaz interstellaire indique que ces atomes sont sous-abondants dans le milieu interstellaire, et participent à la formation de grains de poussière. Ces grains absorbent et diffusent le rayonnement provoquant l'extinction interstellaire, dépendante de la longueur d'onde (figure 1.4). Dans le cas le plus simple, la variation d'intensité due à l'extinction est donnée par :

$$I_\lambda = I_\lambda^0 \mathrm{e}^{-\tau_\lambda}, \tag{1.3}$$

où I_λ^0 est le flux avant la traversée du milieu et I_λ est le flux observé, affecté par l'extinction. La profondeur optique τ_λ est définie comme :

$$\tau(\lambda) = \sigma_{ext}(\lambda) N_H, \tag{1.4}$$

avec $\sigma_{ext}(\lambda)$, la section efficace d'extinction par atome d'hydrogène (en cm^2/H) en fonction de la longueur d'onde et N_H la densité de colonne d'hydrogène, i.e. la quantité de H dans une colonne de 1 cm^2 de surface à la base (en H/cm^2). La figure 1.4 montre l'évolution de σ_{ext} dans le cas du milieu diffus à haute latitude galactique (DHLG pour la suite). L'extinction à la longueur d'onde λ peut par ailleurs être définie en magnitude selon :

$$A_\lambda = -2.5 \log \frac{I_\lambda}{I_\lambda^0}. \tag{1.5}$$

En injectant l'équation (1.3) dans 1.5, on obtient la relation : $A_\lambda = 1.086\,\tau_\lambda$. En général, l'extinction est mesurée dans la bande visible V par comparaison entre le spectre

"éteint" d'une étoile et celui d'une autre étoile de même type dont le spectre n'est pas affecté par l'extinction. A_V et N_H sont reliés par $A_V/N_H \sim 2\times10^{21}$ H cm^{-2} mag^{-1} (voir entre autres les études de Güver and Özel [2009] et Predehl and Schmitt [1995]).

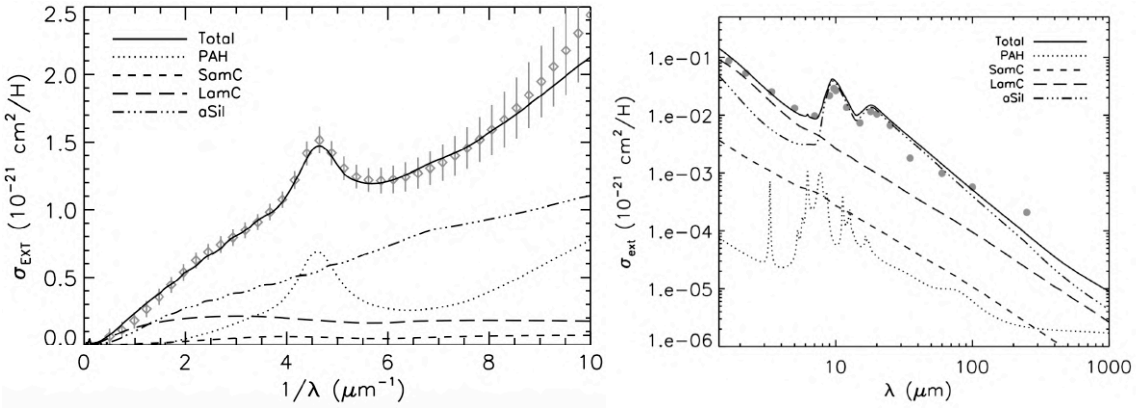

FIGURE 1.4 – Courbe d'extinction du milieu diffus à haute latitude galactique. Pour les deux, les lignes en pointillés et tirets sont les contributions des différentes populations de grains considérées par le modèle DUSTEM [Compiègne et collab., 2011]. À gauche : courbe d'extinction dans la partie UV. Les losanges représentent la loi d'extinction paramétrée par Fitzpatrick [1999] et les barres d'erreurs la dispersion de la courbe d'extinction observée (voir également Fitzpatrick 1999). À droite : domaine infrarouge au millimétrique de la courbe d'extinction. Les points correspondent à la courbe observée. Figures extraites de l'étude de Compiègne et collab. [2011].

L'extinction interstellaire, figure 1.4, présente une tendance générale de croissance rapide entre l'IR et l'UV, ainsi que des excès d'absorption quasi-systématiquement présents le long des différentes lignes de visées à 2175 Å, 3.4, 6.3, 9.7 et 18 μm. Le rayonnement absorbé par la poussière la chauffe, impliquant un rayonnement de refroidissement du domaine IR à sub-mm, montré en figure 1.5 dans le cas du milieu DHLG. Les plus gros grains sont en équilibre thermique avec le champ de rayonnement. Cet équilibre rend leur température dépendante de l'intensité du champ de rayonnement. Dans le milieu diffus baigné par le champ interstellaire moyen (voir section 1.5.1) elle est de l'ordre de 20 K, impliquant un rayonnement dans l'IR lointain ($\geq$ 100 μm, figure 1.5).

Les plus petits grains, du fait de leur faible capacité calorifique, atteignent de plus haute températures ($\sim 10^3$ K) via l'absorption d'un seul photon. Ils ré-émettent rapidement l'énergie absorbée principalement dans l'IR moyen, ce qui leur permet d'avoir le temps de refroidir entre deux absorptions de photons. Leur température n'est pas dépendante du flux de rayonnement incident mais de l'énergie du photon. Ce mode de chauffage est dit impulsionel ou stochastique. Ils sont responsables de l'émission de structures spectrales dans l'infrarouge moyen, en particulier les bandes intenses dans la gamme 3-15 μm, visibles sur la figure 1.5.

Les signatures spectrales, en absorption et en émission, décrites ci-dessus, sont attribuées à différentes populations de grains. L'absorption à 9.7 et 18 μm (liaisons Si-O et O-Si-O respectivement) ainsi qu'une partie de l'émission à grandes longueurs d'onde est attribuée à des grains de silicates. L'absence de sous-structure dans ces bandes d'absorption indique une nature majoritairement amorphe [Kemper et collab., 2005] pour ces grains. Le "bump" à 2175 Å dans la courbe d'extinction ainsi que l'augmentation

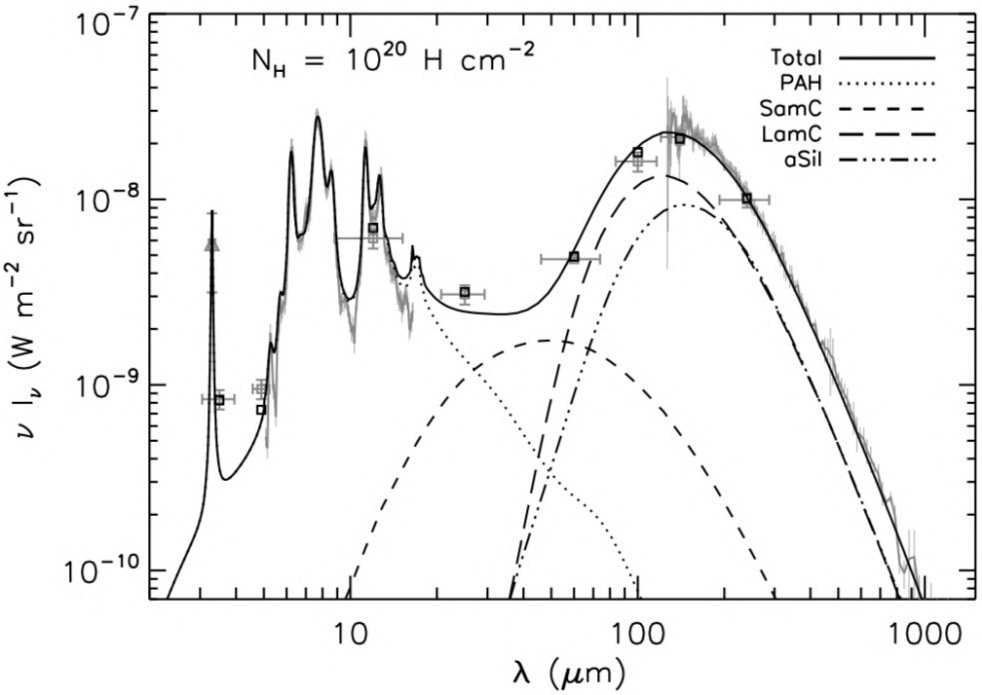

FIGURE 1.5 – Ajustement du spectre d'émission infrarouge du milieu diffus a haute latitude galactique (courbe et points en gris léger) par le modèle DUSTEM (courbe pleine noire). Les différentes courbes supplémentaires représentent les contributions des molécules polycycliques aromatiques hydrogénées (PAH), petits grains carbonés amorphes (SamC), gros grains carbonés amorphes (LamC) et silicates amorphes (aSil). D'après Compiègne et collab. [2011].

importante de l'extinction dans l'UV seraient causés par un mélange de grains carbonés aromatiques auquel les PAH contribuent [Draine, 1989; Joblin et collab., 1992]. Les signatures intenses en émission centrées pour les principales à 3.3, 6.2, 7.7, 8.6 et 11.2 μm, appelées "bandes aromatiques infrarouges" (AIB), sont attribuées aux plus petits grains carbonés, et notamment aux PAH. La section suivante présente les AIB et leur attribution aux PAH plus en détails.

1.4 Attribution des bandes aromatiques infrarouges aux PAH

Les observations spectroscopiques des régions de formation d'étoiles montrent la présence caractéristique de bandes spectrales intenses, appelées "bandes aromatiques infrarouges" (AIB en anglais), centrées pour les principales à 3.3, 6.2, 7.7, 8.6 et 11.2 μm (figure 1.6). Ces bandes ont été interprétées par Leger and Puget [1984] et Allamandola et collab. [1985] comme la signature spectrale du refroidissement radiatif de molécules polycycliques aromatiques hydrogénées (PAH) suite à l'absorption d'un photon UV, ce qui correspond au chauffage impulsionnel décrit ci-dessus. Dans l'article de Leger and Puget [1984] l'hypothèse PAH repose sur un bon accord entre le spectre IR du coronène ($C_{24}H_{12}$) modélisé à 600 K et les AIB ainsi que sur la nature réfractaire de ces molécules, leur permettant de résister à ces hautes températures. Toujours selon ces auteurs, les PAH interstellaires seraient composés d'un mélange de PAH différents comportant environ 50 atomes de carbone. Allamandola et collab. [1985] arrivent à la même conclusion en utilisant l'exemple du chrysène ($C_{18}H_{12}$) et la comparaison entre un

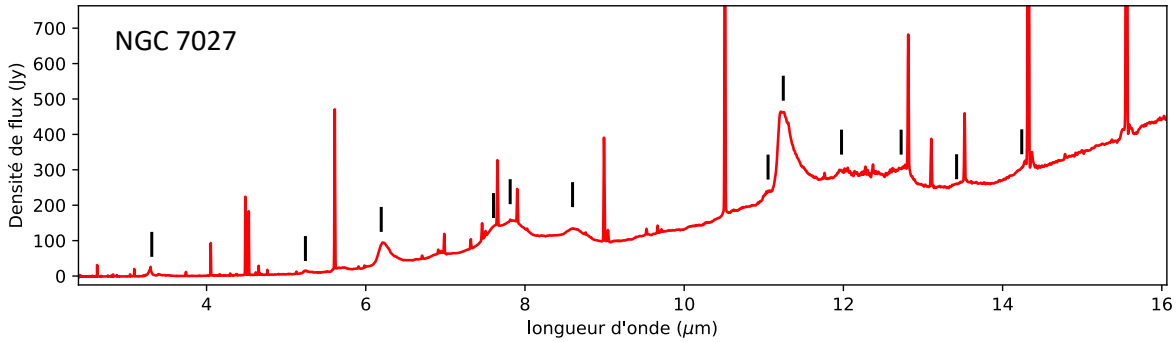

FIGURE 1.6 – Spectre infrarouge moyen de la nébuleuse planétaire NGC 7027. Les structures spectrales notées d'un trait noir font partie des bandes IR non-identifiée, aujourd'hui nommées bandes aromatiques infrarouges. Spectre provenant de l'instrument SWS à bord du satellite ISO.

AIB (μm)	Mode de vibration
3.3 μm	Étirement aromatique C-H
3.4 μm	Étirement aliphatique C-H
5.2 μm	Combinaison de pliage C-H et étirement C-C
5.65 μm	Combinaison de pliage C-H et étirement C-C
6.2 μm	Étirement aromatique C-C
6.9 μm	Pliage aliphatique C-H
7.6 μm	Étirement C-C et pliage dans le plan C-H
7.8 μm	Étirement C-C et pliage dans le plan C-H
8.6 μm	Pliage dans le plan C-H
11.0 μm	Pliage hors du plan C-H, cation
11.2 μm	Pliage hors du plan C-H, neutre
12.7 μm	Pliage hors du plan C-H, cation
13.6 μm	Pliage hors du plan C-H
14.2 μm	Pliage hors du plan C-H
16.4μm	Pliage dans et hors du plan C-C-C d'un cycle

TABLEAU 1.3 – Récapitulatif des modes de vibration correspondant aux différentes AIB [Allamandola et collab., 1987; Leger et collab., 1989]

spectre Raman de suie et un spectre de la Barre d'Orion obtenu avec le satellite IRAS (figure 1 de leur article). Ils signalent aussi que les PAH peuvent se trouver dans l'état ionisé dans les environnements très irradiés. Dans ces deux articles, l'idée défendue est que les bandes observées sont dues aux vibrations des liaisons C-C et C-H des PAH. Le tableau 1.3 donne l'attribution des principales AIB aux modes de vibration des PAH. La figure 1.7 représente les géométries d'un certain nombre d'espèces de cette famille de molécules.

Il faut noter que les AIB ne permettent pas l'identification d'une molécule en particulier. En effet, tous les PAH présentent les mêmes modes de vibration C-H, C-C ou C=C, qui émettent à des longueurs d'onde proches pour les différentes molécules, ce qui empêche d'identifier des molécules individuelles via leur spectre infrarouge. En revanche, une détection spécifique pourrait être facilitée dans le domaine radio si les molécules possédaient un dipôle électrique notable. Leur structure planaire et répartition de charge rendent leur dipôle électrique permanent très faible pour les espèces neutres et complètement hydrogénées [Ysard et collab., 2011; Ysard and Verstraete,

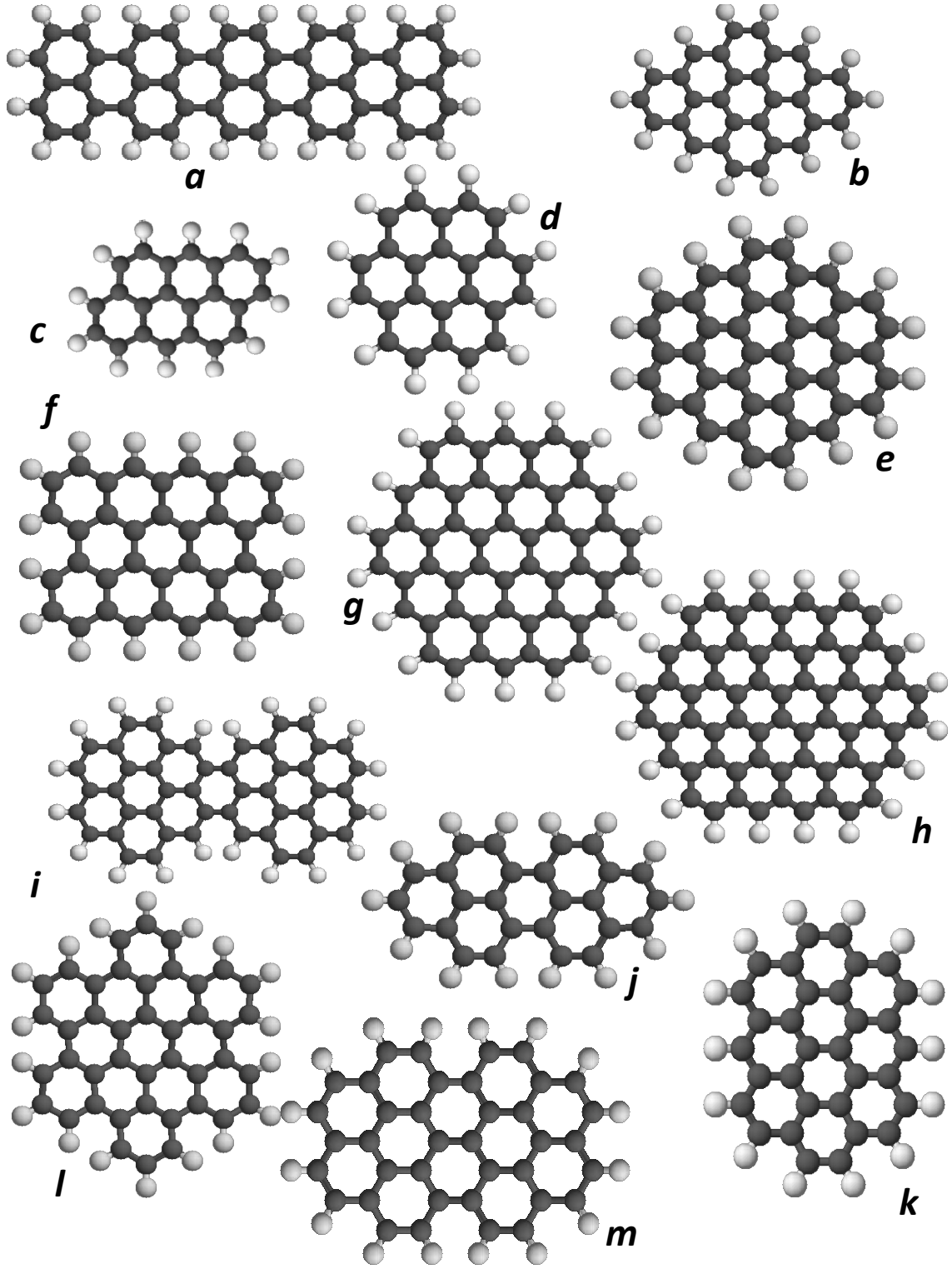

FIGURE 1.7 – Échantillon non-exhaustif de PAH de différentes formes. a : pentarylène, b : dibenzo-bc-kl-coronène, c : anthantrène, d : coronène, e : circumpyrène, f : tetrabenzocoronène, g : circumcoronène, h : circumovalène, i : dicoronylène, j : dibenzoperylène, k : ovalène, l : hexabenzocoronène, m : circumbiphenyl. Images provenant de la *Theoretical spectral database of PAH. Site web accessible à l'adresse :* http://astrochemistry.oa-cagliari.inaf.it/database/pahs.html .

2010]. Le cas du coranulène ($C_{20}H_{10}$) est tout de même à citer. Sa forme incurvée due à la présence d'un cycle central à cinq carbones induit un fort moment dipolaire électrique permanent. Cependant, sa détection, tentée plusieurs fois [Pilleri et collab., 2009; Thaddeus, 2006], n'a pu aboutir et seulement des valeurs supérieures de sa densité de colonne ont pu être déduites. Vijh et collab. [2004, 2005] ont pensé détecter la fluorescence visible des molécules d'anthracène ($C_{14}H_{10}$) et de pyrène ($C_{16}H_{10}$), mais ceci a été contredit par Mulas et collab. [2006]. La connaissance du spectre électronique des PAH peut aussi être un moyen de détecter une molécule en particulier. Des études sont menées en laboratoire afin de confronter les signatures spectrales avec les bandes interstellaires diffuses, structures spectrales interstellaires en absorption le long de plusieurs lignes de visées (voir Geballe [2016]), mais sans succès à ce jour concernant les PAH. Ces études d'identification en général sont confrontées à la grande diversité d'espèces à considérer [Salama et collab., 1996, 1999].

L'étude du rayonnement AIB repose donc sur l'hypothèse qu'il résulte de l'émission d'une même famille de molécules, les PAH. Bien que ces AIB ne permettent pas d'identifier des molécules spécifiques, elle permettent de renseigner sur les propriétés générales des populations de PAH interstellaires, comme nous le verrons par la suite.

1.5 Les régions de photodissociation

Une région de photodissociation est un type d'environnement où les bilans thermique et chimique du gaz sont régulés par le champ de rayonnement UV [Hollenbach and Tielens, 1999]. On trouve des PDR dans une grande variété d'objets :

— les bords de nuages moléculaires irradiés par une étoile ou une association d'étoiles massives,

— les disques protoplanétaires,

— les nébuleuses planétaires,

— les couches externes de géantes rouges,

— les nuages diffus et translucides.

1.5.1 Champ de rayonnement UV

Selon la situation de la PDR, le champ de rayonnement UV à considérer peut provenir du milieu interstellaire (champ moyen généré par l'ensemble des étoiles O et B de la Galaxie, dit ISRF) ou d'étoiles à proximité. Plusieurs estimations de la forme et l'intensité de l'ISRF ont été faites. Celle de Habing [1968] est souvent prise pour référence dans la littérature. L'auteur a donné une estimation de la densité de flux UV en trois longueurs d'onde (100, 140 et 220 nm). Ces points ont été ajustés par Draine and Bertoldi [1996] par l'expression :

$$\lambda u_\lambda = (-\frac{25}{6}\lambda^{-6} + \frac{25}{2}\lambda^{-5} - \frac{13}{3}\lambda^{-3}) \times 10^{-14} \quad \mathrm{erg/cm^3}, \tag{1.6}$$

où λ est en Å. Une autre estimation de l'ISRF a été proposée par Draine [1978], et peut être décrite analytiquement par [Heays et collab., 2017] :

$$I_\lambda = 3.2028\times10^{13}\lambda^{-3} - 5.1542\times10^{15}\lambda^{-4} + 2.0546\times10^{17}\lambda^{-5} \quad \mathrm{ph/cm^2/sec/nm/sr}, \tag{1.7}$$

valable entre 91.2 et 200 nm et complétée à plus grandes longueurs d'onde ($\lambda > 200$ nm) par van Dishoeck and Black [1982] :

$$I_\lambda = 3.67 \times 10^4 \lambda^{0.7} \quad \text{ph/cm}^2\text{/sec/nm/sr.} \tag{1.8}$$

Lorsque le champ UV considéré n'est pas celui du milieu interstellaire mais est dominé par une ou plusieurs étoiles (par exemple dans les régions de formation d'étoiles massives, ou dans les disques protoplanétaires), le spectre UV peut être modélisé grâce au catalogue de spectres stellaires de Kurucz [1993].

Le champ UV baignant une PDR est généralement mesurée par rapport au champ de Habing. On définit l'unité G_0 comme la valeur de la densité de flux de Habing intégrée entre les longueurs d'onde 91.2 et 240 nm (respectivement 13.6 et 5.166 eV correspondant à ce qui est appelé généralement photons "Far-UV", FUV) de 1.6×10^{-3} erg/sec/cm^2 ou 5.6×10^{-14} erg.cm^{-3} [Habing, 1968]. La borne haute en longueur d'onde est parfois prise à 206 nm (6 eV) dans la littérature, donnant un flux de 5.29×10^{-14} erg.cm^{-3} [Draine, 2011]. Pour une densité de flux $u(\lambda)$, G_0 est défini comme :

$$G_0 = \frac{\int_{912\text{Å}}^{2400\text{Å}} u(\lambda) d\lambda}{5.6 \times 10^{-14}\,\text{erg.cm}^{-3}}. \tag{1.9}$$

Dans le milieu interstellaire diffus de la Voie Lactée, $G_0 \sim 1.6$, pour une PDR dans une région de formation d'étoiles jeunes, comme la Barre d'Orion, $G_0 \sim 10^{4-5}$. Dans une PDR située à l'interface d'une région H II plus évoluée (PDR plus loin des étoiles sources), comme la crinière de la Tête de Cheval, $G_0 \sim 10^2$. Dans les parties centrales d'un disque proto-planétaire, G_0 peut avoisiner 10^6.

1.5.2 Structure associée à une région de formation stellaire

La structure d'une PDR de région de formation stellaire est présentée en Figure 1.8. Le rayon de Strömgren définit le front d'ionisation où il y a équilibre entre ionisation et recombinaison de H. Au delà de cette limite le gaz est essentiellement neutre et marque le début de la PDR. Les photons EUV étant tous absorbés dans la région H II, il ne reste que les photons FUV ($h\nu < 13.6\,eV$). Ces photons peuvent ioniser les atomes ayant un IP inférieur à celui de l'hydrogène (par exemple le carbone), et dissocier des molécules comme H_2 et CO. Cette définition correspond par ailleurs à l'intégralité des phases CNM et WNM ainsi qu'à la surface des nuages moléculaires (section 1.2.1).

La poussière en présence participe à atténuer le champ de rayonnement dans la PDR (voir section 1.3.3). La limite où le taux de dissociation de H_2 est égal au taux de formation définit le front de dissociation. Plus profondément dans la PDR, le carbone et l'oxygène atomique peuvent se combiner pour former du CO. Les observations montrent en effet une structure stratifiée des PDR, voir figure 1.9 pour le cas de la Barre d'Orion, dans laquelle H_2 et CO sont présents successivement par rapport à la surface atomique de la PDR, révélée par l'émission à 3.3 μm attribuée aux PAH. La PDR s'arrête là où le champ UV est assez atténué pour ne plus réguler la chimie du milieu. Dans leur schéma classique, Hollenbach and Tielens [1999] la placent vers A_V=10, où la molécule de O_2 n'est plus significativement dissocié.

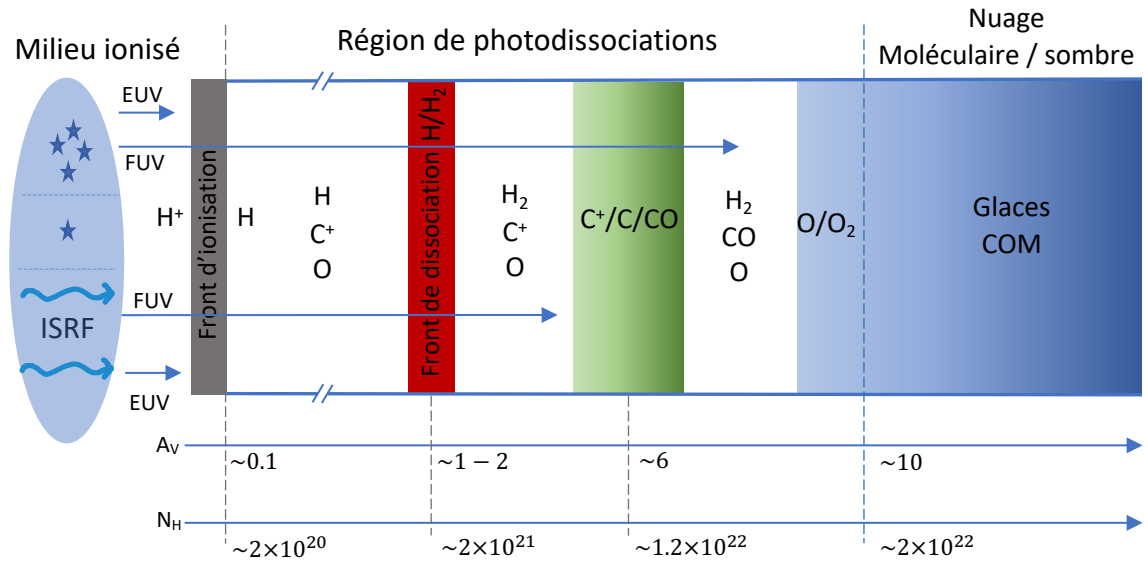

FIGURE 1.8 – Structure classique d'une PDR, adaptation personnelle de Hollenbach and Tielens [1999]. La source du rayonnement se trouve à gauche. Les échelles de profondeurs sont données en magnitude d'extinction dans le visible ainsi qu'en densité de colonne d'hydrogène.

1.5.3 Bilan thermique du gaz dans une PDR

Chauffage du gaz

Un certain nombre de processus contribuent au chauffage du gaz dans une PDR, les plus importants sont le chauffage par H_2 (formation, destruction, et désexcitation collisionnelle) et l'effet photoélectrique sur les grains.

Chauffage du gaz par H_2

La molécule de H_2 a la particularité de contribuer au chauffage du gaz lors (i) d'absorption de photon UV (sans dissociation, i.e. pompage UV), (ii) de sa dissociation et (iii) de sa formation.

-(i)- L'absorption d'un photon UV mène dans 85-90% des cas à l'excitation vibrationnelle de H_2. Dans le cas où la densité du gaz est inférieure à la densité critique $n^{cr}_{H_2}$ des transitions de H_2 de l'IR proche ($n^{cr}_{H_2} \sim 10^{4-5}\,\mathrm{cm}^{-3}$, dépendant de la température) la molécule évacue l'énergie par fluorescence infrarouge. Dans le cas contraire, $n > n^{cr}_{H_2}$, la désexcitation des niveaux vibrationnels par collisions chauffe le gaz.

-(ii)- Lors de sa dissociation, 10-15% des cas après absorption d'un photon UV, les deux atomes d'hydrogène générés emportent une part de l'énergie du photon ($\sim$0.25 eV) sous forme cinétique, chauffant le gaz.

-(iii)- Lors de sa formation, la molécule de H_2 peut se retrouver dans un état vibrationnellement excité et, encore selon la densité du gaz, transmettre cette énergie vibrationnelle au gaz. La contribution de ce mécanisme de chauffage est encore le sujet de nombreuses recherches.

Chauffage du gaz par effet photoélectrique sur les grains

L'ionisation d'un grain par un photon UV implique l'éjection d'un photoélectron qui emporte quelques eV sous forme d'énergie cinétique qui chauffe le gaz. Ce mécanisme est

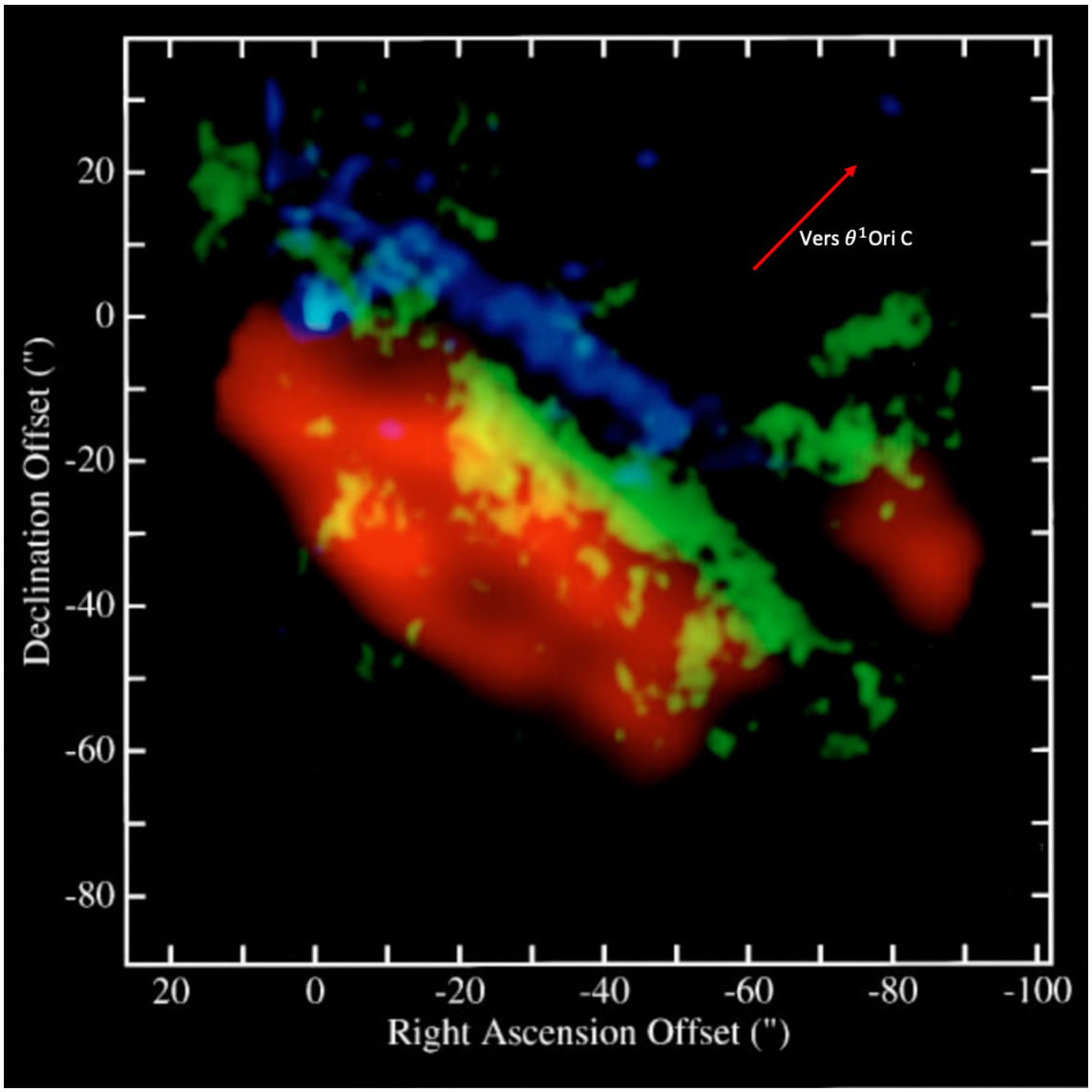

FIGURE 1.9 – Observation de la stratification de la PDR de la Barre d'Orion. Les couleurs représentent l'émission des PAH à 3.3μm (bleu) pour le gaz atomique, du H_2 1-0 S(1) (vert et jaune) pour le front de dissociation et du CO J=1-0 (rouge) pour le gaz moléculaire. La direction vers l'étoile massive θ^1 Ori C illuminant la PDR est indiquée. Différents traceurs sont utilisés pour sonder en profondeur les PDR. Issue de la review de Hollenbach and Tielens [1999].

appelé chauffage par effet photoélectrique (PE, en anglais) sur les grains, la figure 1.10 en propose une représentation. Les modèles indiquent qu'il est le principal processus de chauffage du gaz dans une PDR jusqu'aux profondeurs $A_V \sim 4$ [Hollenbach and Tielens, 1999]. De manière classique pour l'effet PE sur un grain, l'énergie du photoélectron (lorsque le grain est chargé) est $E_c^{e^-} = h\nu - W - \Phi_c$, où Φ_c est le potentiel Coulombien du grain et W l'énergie de travail, notée W, perdue par l'électron par diffusion à l'intérieur du grain. Des mesures sur des grains de graphite donnent $W \sim 4.5\,eV$. L'ionisation d'un grain neutre par un photon UV de $h\nu$=10 eV emporte donc ~5.5 eV qu'il transmet au gaz. Il existe différents modèles d'effet PE sur les grains, les plus courants étant ceux de Bakes and Tielens [1994] et de Weingartner and Draine [2001]. Le taux de chauffage du gaz par effet PE sur les grains peut être exprimé par [Bakes

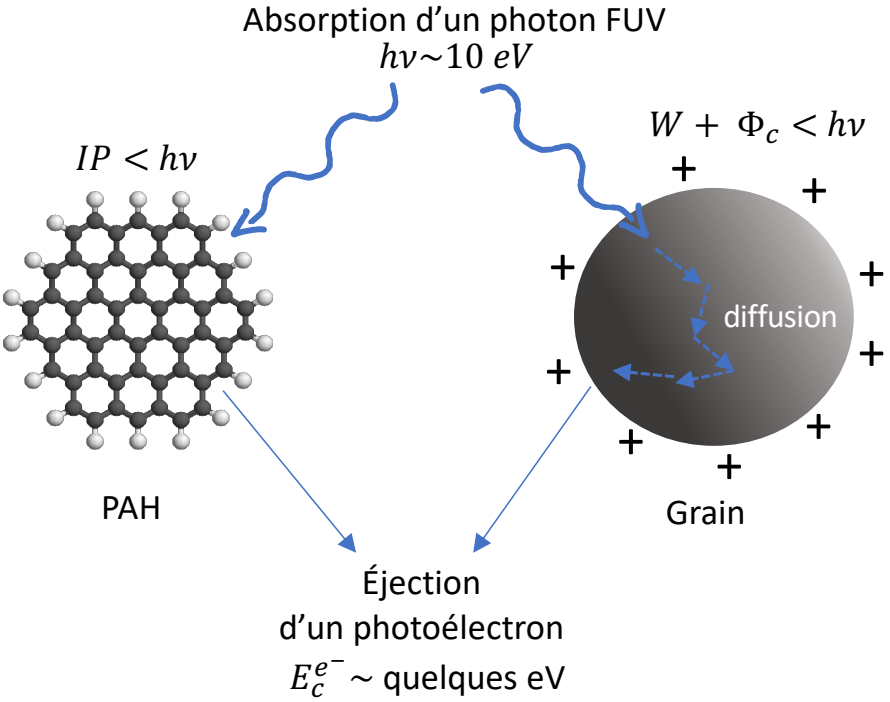

FIGURE 1.10 – Représentation schématique de l'éjection d'un photoélectron dans le gaz. Un photon d'énergie typique de 10 eV est absorbé par un PAH ou un grain. Dans le première cas, le photoélectron est directement éjecté de la molécule après avoir passé son potentiel d'ionisation (voir section 2.3). Dans le second cas, le photoélectron perd de l'énergie cinétique par diffusion dans le volume du grain et doit s'échapper du potentiel Coulombien si celui-ci est chargé avant d'être éjecté. Dans les deux cas, le photoélectron s'échappe avec une énergie cinétique de quelques eV qu'il transmet au gaz.

and Tielens, 1994] :

$$\Gamma n = 10^{-24} \epsilon G_0 n \qquad \mathrm{erg/cm^3/sec}, \tag{1.10}$$

où ϵ est l'efficacité du chauffage du gaz par effet photoélectrique, i.e. la fraction de l'énergie UV absorbée par la poussière transmise au gaz. Une estimation analytique de ϵ, est donnée par Bakes and Tielens [1994] par :

$$\epsilon = \frac{4.87 \times 10^{-2}}{1 + 4 \times 10^{-3} \gamma^{0.73}} + \frac{3.65 \times 10^{-2} (T/10^4)^{0.7}}{1 + 2 \times 10^{-4} \gamma}, \tag{1.11}$$

où $\gamma = G_0 \sqrt{T}/n_e$, d'unité $\mathrm{K^{1/2} cm^3}$ avec T la température du gaz en Kelvin et n_e la densité électronique en $\mathrm{cm^{-3}}$.

Les résultats du modèle de Bakes and Tielens [1994] montrent que 50% du chauffage est effectué via des grains de poussière de rayon inférieur à 15 Å. En effet, ils représentent une section efficace d'absorption dans l'UV cumulée importante. Ce domaine de taille correspond à celui des grains qui émettent dans l'IR moyen. Cependant, dans ce modèle, les auteurs considèrent une géométrie sphérique pour toutes les tailles de grains. Bakes and Tielens [1994] soulignent cependant que pour les plus petites tailles ($\mathrm{N_C} < 100$), les grains seraient plutôt sous forme de PAH (et donc non-sphériques). Ils précisent que cela a pour effet d'augmenter l'efficacité du chauffage par effet PE par rapport à des grains sphériques de même taille. Ceci suggère que les PAH et VSG jouent tous deux un rôle majeur dans le chauffage du gaz. La détermination de la contribution des PAH au chauffage PE fait l'objet du chapitre 4.

Refroidissement du gaz

Plusieurs mécanismes de refroidissement du gaz existent, dominés par les mécanismes radiatifs notamment dans l'IR. Ce sont principalement les transitions de structure fine de l'oxygène bandes [O I] à 63 μm et 145 μm et du carbone ionisé bande [C II] à 158 μm qui participent au refroidissement (voir figure 1.11).

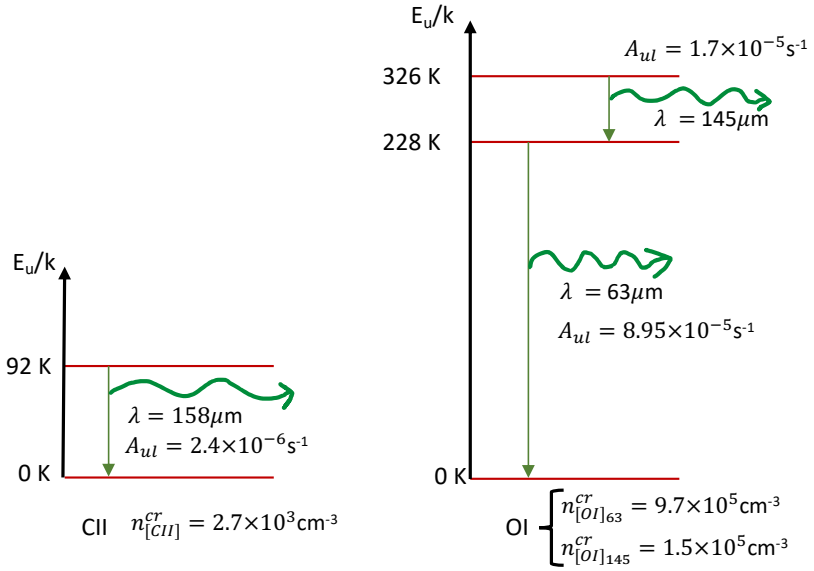

FIGURE 1.11 – Diagramme électronique du carbone ionisé (gauche) et de l'oxygène neutre (droite). Les flèches verticales vers le bas représentent les désexcitations radiative des niveaux de structure fine amenant au refroidissement du gaz. La constante k est la constante de Boltzmann. Les valeurs de densité critiques sont prises à une température du gaz à 100 K et des collisions avec H. Les coefficients d'Einstein A_{ul} pour la désexcitation spontanée de chaque transition sont affichés.

De manière générale, les transitions de désexcitations radiatives sont efficaces lorsque la densité du gaz est inférieure à la densité critique, notée n^{cr}, de chaque transition (qui varie avec la température). Les désexcitations collisionnelles deviennent aussi nombreuses que les désexcitations radiatives à partir de cette valeur de densité et deviennent plus fréquentes au-delà de n^{cr}. Pour des collisions avec H à une température cinétique de 100 K, les densités critiques pour les transitions [C II] à 158 μm, [O I] à 145 μm et 63 μm sont respectivement $n^{cr}_{[CII]}$=2.7×10^{3}cm^{-3}, $n^{cr}_{[OI]_{145}}$=1.5×10^{5}cm^{-3} et $n^{cr}_{[OI]_{63}}$=9.7×10^{5}cm^{-3} [Tielens, 2005]. Dans le cas d'une PDR de faible densité, le refroidissement est dominé par la raie de [C II]. Pour les fortes densités, $n > n^{[OI]_{63}}_{cr}$, les trois transitions sont à l'équilibre thermodynamique local et la raie [O I] à 63 μm domine. Dans le cas intermédiaire où $n^{cr}_{[CII]} < n < n^{cr}_{[OI]_{63}}$, la prédominance de l'une ou l'autre dépend de la densité. Ces raies refroidissent principalement jusqu'aux couches A_V=1-2. Par exemple, le taux de refroidissement induit par la transition [O I] 63 μm s'exprime comme :

$$n^2 \Lambda_{[OI]} = 2.5 \times 10^{-29} n^2 T^{2/3} \exp(-228/T) \quad \text{erg/cm}^3\text{/sec}, \tag{1.12}$$

et celui de la transition [C II] à 158 μm comme :

$$n^2 \Lambda_{[CII]} = 8 \times 10^{-27} n^2 \exp(-92/T) \quad \text{erg/cm}^3\text{/sec}. \tag{1.13}$$

Il existe d'autres espèces présentant des transitions électroniques à basse énergie qui peuvent participer au refroidissement du gaz comme par exemple [Si II] à 35 μm, [S I] à

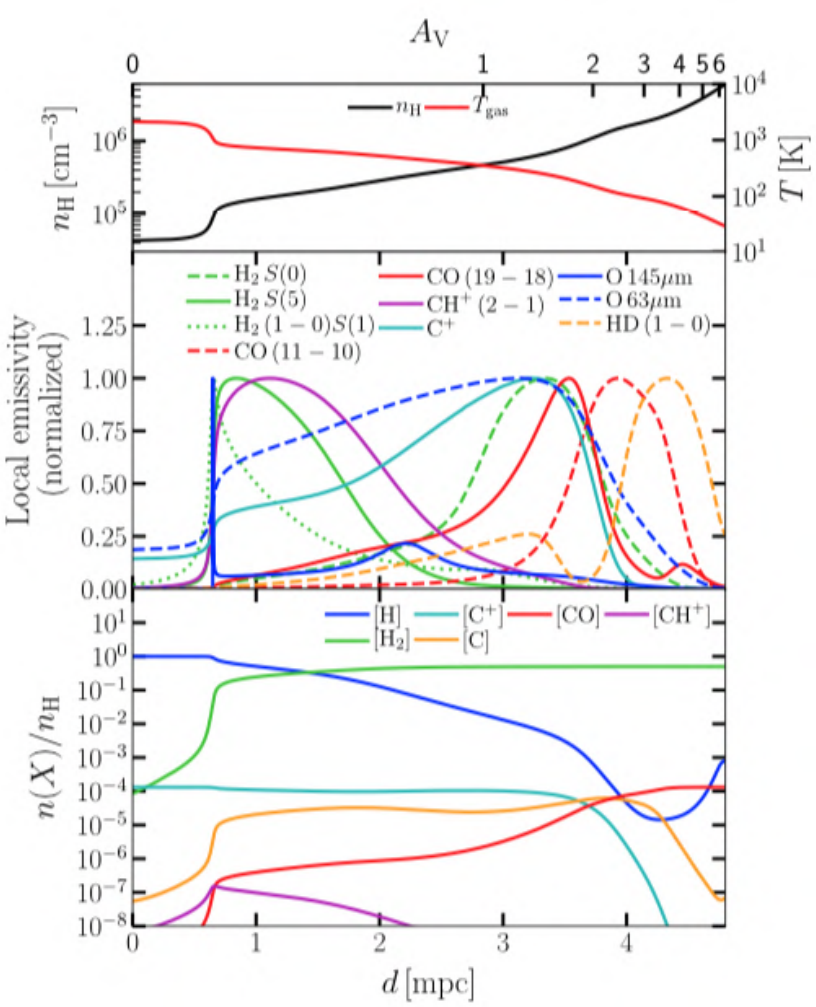

FIGURE 1.12 – Modèle de la structure spatiale de la PDR NGC 7023 avec la profondeur obtenu par Joblin et collab. [2018]. En haut : évolution de la densité d'hydrogène et de la température du gaz avec la profondeur. Au centre : Profil spatial de l'émission des différents traceurs considérés par Joblin et collab. [2018]. Les émissions ont toutes été normalisées à leur maximum. En bas : profil spatial de l'abondance de certaines espèces.

25 μm, [C I] à 370 et 609 μm. Les molécules, principalement H_2 et CO, participent aussi au refroidissement. L'énergie cinétique du gaz transmise à ces deux molécules lors de collisions induit une excitation des transitions rotationnelles ou rovibrationnelles qui peuvent se désexciter radiativement. La figure 1.12 montre l'exemple d'une modélisation plus complète du bilan chimique et thermique dans le cas de NGC 7023, via le code PDR de Meudon [Le Petit et collab., 2006]. Elle permet d'obtenir la variation spatiale de l'émission des principales espèces du gaz dans la PDR. La contribution du H_2 au refroidissement via ses raies rovibrationnelles et rotationnelles peut se faire à plusieurs profondeurs via des transitions différentes.

Bilan énergétique du gaz

La température d'une PDR est définie par l'équilibre entre les termes de chauffage et les termes de refroidissement. Considérons une PDR dense, i.e. $n \sim n_H > 10^4\,\mathrm{cm}^{-3}$, dont le gaz est chauffé essentiellement par effet photoélectrique sur la poussière, équation (1.10), avec une densité d'électrons $n_e = 1.6\times10^{-4} n_H$ correspondant à l'abondance

du carbone ionisé dans le gaz. À cette densité, c'est la transition [O I] à 63 μm qui domine le refroidissement (équation (1.12)). L'équilibre se fait à la température T telle que :

$$10^{-24}\epsilon G_0 n = 2.5 \times 10^{-29} n^2 T^{2/3} \exp(-228/T), \tag{1.14}$$

où ϵ est aussi une fonction de la température, voir équation (1.11). Dans le cas d'une PDR dense du type de la Barre d'Orion où $n \sim n_H \sim 10^4\,\mathrm{cm}^{-3}$ et $G_0 \sim 10^4$, l'équation (1.14) donne $T = 860\,\mathrm{K}$.

1.6 Objectifs de cette thèse

Ce travail de thèse concerne l'étude du rôle des plus petits constituants de la poussière carbonée, PAH et très petits grains, dans les régions de photodissociation. Comme nous l'avons vu en section 1.5.3, il a été suggéré que ces espèces sont responsables d'une partie importante du chauffage par effet PE dans les PDR. Une meilleure caractérisation de ce mécanisme implique donc une meilleure connaissance des propriétés physiques et chimiques de ces très petits grains. Le travail présenté ici se place dans la continuité des travaux engagés à Toulouse depuis une dizaine d'années consistant à extraire, à partir d'observations des spectres des AIB, les spectres élémentaires des différentes populations de PAH et très petits grains en utilisant des méthodes de séparation aveugle de sources (SAS) [Berné et collab., 2007; Boulais, 2017; Rapacioli et collab., 2005]. L'analyse de ces spectres permet notamment de contraindre la taille et l'état de charge des populations qui émettent les AIB et de les relier aux conditions physiques locales, en particulier au champ de rayonnement UV.

Après une description des différentes méthodes utilisées dans ce travail (chapitre 2), le chapitre 3 concerne l'extension de l'analyse des populations émettant les AIB au contexte JWST dans le but d'appliquer des méthodes de SAS aux données de spectro-imagerie obtenues avec les instruments NIRSpec et MIRI. Le chapitre 4 est consacré à une évaluation de la contribution des PAH dans le chauffage du gaz par effet PE, en utilisant une approche couplant observations et modélisation basée sur la photophysique des PAH. Enfin, les conclusions et perspectives de ce travail sont présentées.

Chapitre 2

Méthodes et outils

« *Equipped with his five senses, man explores the universe around him and calls the adventure science* »

Edwin Hubble (1889-1953)

2.1 L'astronomie infrarouge

L'étude des PAH interstellaires se fait principalement dans l'infrarouge, via leur émission des bandes caractéristiques de leur désexcitation vibrationnelle (les AIB), présentées en section 1.4 et étudiées dans le chapitre 3 de ce manuscrit. L'observation en astrophysique et en particulier dans le domaine infrarouge présente plusieurs contraintes décrites dans cette section. Les observatoires infrarouges et leur instruments utiles à cette thèse sont aussi décrits.

2.1.1 Limitations dues à l'atmosphère terrestre et aux effets thermiques

La contrainte principale dans l'observation infrarouge est l'absorption du rayonnement par l'atmosphère terrestre, induite notamment par H_2O, O_3, CH_4 et CO_2. La figure 2.1 montre l'évolution de l'absorption atmosphérique dans l'infrarouge moyen au niveau de l'observatoire *Gemini*, au sommet du Mauna Kea [1] (Hawaï). Quelques bandes spectrales pour lesquelles l'atmosphère terrestre est transparente existent cependant, notamment à $\sim$3 et $\sim$10 μm (exploitées au sol par exemple par le *Very Large Telescope* de l'ESO, dans le désert de l'Atacama au Chili), mais il n'est pas possible de faire l'acquisition d'un spectre infrarouge d'un objet interstellaire sur un grand intervalle de longueurs d'onde sans être affecté par cette absorption atmosphérique. C'est pour cette raison que l'on cherche à installer les observatoires infrarouges à haute altitude. Cela inclut les sommets de montagnes en zone aride mais aussi dans les airs via l'aviation (cas de SOFIA) ou des missions en ballons stratosphériques (PILOT par exemple). Un observatoire stratosphérique tel que SOFIA (à $\sim 11-13$ km d'altitude) aura déjà une majeure partie de l'atmosphère hors de la ligne de visée, cependant les observations seront toujours affectées par le reste de l'atmosphère terrestre. Le cas idéal est la mise en place d'observatoires spatiaux, dont ceux décrits en section 2.1.4, impliquant par ailleurs une limite de taille et masse des télescopes imposée par les capacités des lanceurs utilisés.

Les longueurs d'onde du domaine infrarouge correspondent au rayonnement thermique de corps à une température de l'ordre de 50 à 1000 K. L'observatoire spatial peut atteindre ces températures et émettre lui même un rayonnement thermique parasite provenant à la fois du télescope et des instruments. Cette émission est généralement plus importante que le rayonnement observé des objets astrophysiques. Il est donc nécessaire d'une part de se protéger directement du rayonnement solaire via des boucliers et d'autre part, de refroidir activement les instruments via un système cryogénique. Ceci se fait généralement à l'hélium, permettant d'atteindre de très basses températures (quelques Kelvin). Cependant, la perte progressive d'hélium restreint la durée de vie de l'observatoire à quelques années contre près de 30 ans pour le télescope spatial *Hubble*. Il est aussi nécessaire d'éviter le rayonnement de la Lune et la Terre, ce qui contraint les zones d'observations et les orbites du satellite. Enfin, les poussières présentes dans le plan de l'écliptique diffusent le rayonnement solaire et émettent leur propre rayonnement infrarouge (lumière zodiacale). Elles ajoutent une contrainte supplémentaire en perturbant les observations pour des objets proches du plan de l'écliptique (i.e. proches des constellations du zodiaque).

1. Données obtenues à partir des spectres IR proche et moyen de transmission disponibles à l'adresse : https://www.gemini.edu/observing/telescopes-and-sites/sites#Transmission

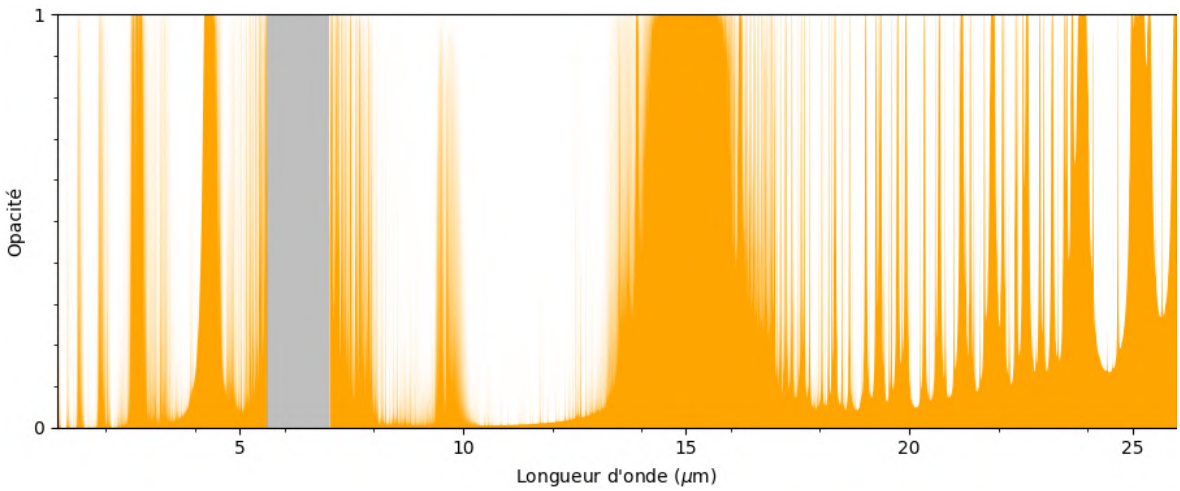

FIGURE 2.1 – Opacité de l'atmosphère dans l'infrarouge proche et moyen au niveau de l'observatoire *Gemini* au sommet du Mauna Kea (Hawaï). La zone grisée correspond à une absence de données.

2.1.2 Résolutions spatiale et spectrale

La précision spatiale d'une observation est limitée par la diffraction de la lumière passant par la pupille du système optique. Elle est décrite par le critère de Rayleigh défini par :

$$\theta = 1.22\frac{\lambda}{D}, \tag{2.1}$$

où θ est l'angle de séparation minimal entre deux objets pour les distinguer (en radians), D est le diamètre de l'instrument (en mètres) et λ la longueur d'onde d'observation (en mètres). Cette grandeur définit la largeur de la fonction d'étalement du point de l'instrument. Une observation à $\lambda = 0.5\,\mu$m (domaine visible) réalisée avec un télescope de 1 m de diamètre permet d'atteindre des échelles spatiales 10 fois plus faibles qu'une observation à $\lambda = 5\,\mu$m sur la même scène avec le même télescope. Pour obtenir un même niveau de résolution spatiale que le domaine visible, les infrastructures infrarouges doivent être considérablement plus importantes. Optimiser la taille d'un télescope spatial infrarouge en considérant les limites imposées par les lanceurs est donc primordial pour obtenir le maximum d'informations spatiales possible.

Lorsque l'observation consiste en l'acquisition d'un spectre, i.e. la dispersion en longueurs d'onde du rayonnement provenant d'un élément de résolution (voir section 2.1.3), c'est la résolution spectrale qui intervient. Un spectre présentera d'autant plus de détails spectraux que la résolvance, notée R de l'instrument est élevée. Cette dernière est définie comme :

$$R = \frac{\lambda}{\Delta\lambda}, \tag{2.2}$$

où λ est la longueur d'onde et $\Delta\lambda$ est l'intervalle de longueur d'onde minimal permettant de séparer deux raies. Cette dernière est définie par le système dispersif utilisé. Un spectrographe au pouvoir de résolution de R ∼10-100 est dit "basse" résolution, résolution "moyenne" pour R ∼500-5000, et haute résolution pour $R > 10^4$. Certains instruments peuvent aller jusqu'à R ∼10^{5-6} et 10^7 pour les observations radios hétérodynes.

2.1.3 Les types d'observations

L'imagerie par photométrie

La photométrie consiste à prendre une image d'une scène dans un certain domaine de longueurs d'onde défini par un filtre. La bande passante est définie par les longueurs d'ondes extrêmes et centrale du filtre ainsi que la fonction de transmission du filtre. Aucun détail spectral n'est accessible à l'intérieur de la bande passante. Une image photométrique intègre le flux de tout le rayonnement passant à travers le filtre. L'équation (2.1) donne la résolution spatiale théorique de l'instrument. Ce dernier doit être composé de pixels assez petits pour échantillonner la scène selon le critère de Nyquist, d'au moins deux pixels par élément de résolution. Il en ressort une image simple en 2 dimensions d'une scène astrophysique. Sa résolution spectrale est inversement proportionnelle à la taille de la bande passante (R de quelques unités à quelques dizaines). Ce type de données sert notamment à construire la distribution d'énergie spectrale (SED en anglais) d'objets astrophysiques.

La spectroscopie

Ce mode d'observation consiste à disperser les photons en fonction de leur longueur d'onde afin d'obtenir un spectre. La quantité d'informations contenues dans le spectre dépendra de la résolution spectrale du spectromètre (équation (2.2)). Deux raies trop proches peuvent être vues comme une seule si R n'est pas assez grand. De la même façon que pour une image, l'échantillonnage doit se faire selon le critère de Nyquist pour ne pas perdre d'information spectrale. La lumière est dispersée sur une caméra dont les pixels physiques deviennent des pixels spectraux. Ces pixels spectraux doivent couvrir un intervalle de longueur d'onde plus faible que $\Delta\lambda$ dans l'équation (2.2). Cependant, puisque la taille des pixels physiques est fixe, il se peut qu'une partie du spectre soit sous-échantillonné. Ce type de données se présente sous la forme d'un vecteur dont chaque élément est le nombre de photons détectés dans un petit intervalle de longueurs d'onde correspondant à environ $\Delta\lambda/2$. Le compte de photons est converti en une grandeur physique (flux, densité de flux, brillance...) une fois étalonné.

La spectro-imagerie ou imagerie hyperspectrale

Il est possible de tirer parti à la fois des informations spatiales et spectrales en utilisant la spectro-imagerie, appelée aussi imagerie hyperspectrale. Un spectre provenant d'un élément de résolution spatiale, l'instrument (lorsque c'est possible) peut faire l'acquisition de plusieurs spectres répartis spatialement dans la scène. Ceci permet d'observer une évolution spatiale des structures spectrales et ainsi suivre l'évolution des émetteurs de ce rayonnement. Il existe plusieurs méthodes comme :

— *on the fly* (OTF, au fil de l'eau), l'instrument échantillonne une zone par l'acquisition de plusieurs éléments de résolution spatiale juxtaposés, afin de construire une carte pixel après pixel.

— *IFU* pour *integral field unit*. L'instrument "coupe" l'image en plusieurs morceaux grâce à des optiques spéciales pour en obtenir les spectres simultanément.

— À filtres, plusieurs filtres sont utilisés pour échantillonner une scène spectralement.

Dans ce travail de thèse, j'ai principalement utilisé des données de spectroscopie et spectro-imagerie, chacune provenant d'observatoires spatiaux différents. La section

suivante décrit les missions ISO, *Spitzer* et *Herschel*, en se focalisant sur les instruments ayant fourni les données présentées dans ce manuscrit.

2.1.4 Les observatoires infrarouges

Infrared Space Observatory - *ISO*

Le satellite ISO est le premier observatoire spatial de l'infrarouge moyen pour lequel la communauté astrophysique mondiale pouvait proposer des observations spécifiques. Mis en service fin 1995, il succède à IRAS (1983-1984) qui a essentiellement effectué un relevé complet du ciel dans quatre bandes spectrales. Jusqu'en 1998, ISO effectue plus de 30 000 observations grâce à son télescope de 60 cm de diamètre et ses quatre instruments refroidis à $\sim$2 K :

— *Short Wavelength Spectrometer* (SWS) [de Graauw et collab., 1996] : spectromètre sur la bande 2.4-45 μm de résolution spectrale moyenne $R \sim$260-2000. Il était possible d'effectuer des observations selon plusieurs modes, rendant possible l'obtention de spectres à différentes résolutions et sur différentes bandes spectrales. Le mode SWS01 rassemble 1248 spectres sur tout le domaine accessible [Sloan et collab., 2003]. Cependant les *scans* pouvaient se faire à des vitesses différentes (notées de 1 à 4) ce qui impactait la résolution spectrale, d'où l'écart de résolution cité précédemment. De plus, le spectromètre est composé de 12 segments différents sur toute la région spectrale ayant des résolvances différentes. SWS ne permettait pas d'obtenir d'informations spatiales sur les objets observés, il présentait un champ (*beam*) d'une taille entre 14"×20" à 20"×33" selon les bandes spectrales et la vitesse de scan. Tout ceci est détaillé dans le manuel de l'instrument [Leech et collab., 2003].

L'observatoire ISO comprenait aussi les instruments (i) ISOCAM [Cesarsky et collab., 1996], (ii) *Long Wavelength Spectrometer* (LWS,Clegg et collab. [1996]) et (iii) ISOPHOT [Lemke et collab., 1996]. (i) ISOCAM est caméra qui permettait d'obtenir des cubes hyperspectraux de 2.5 à 17 μm à basse résolution spectrale ($R \sim$40) et à une résolution spatiale de 1.5 à 12" par pixel. (ii) LWS est l'instrument complémentaire de SWS à plus grandes longueurs d'onde (43 à 196 μm) avec une résolution spectrale de $R \sim$200 et spatiale de 1.65'. (iii) ISOPHOT permettait de réaliser des relevés photopolarimétriques (photométrie et mesure de la polarisation du rayonnement) dans plusieurs filtres entre 2.5 et 240 μm.

Spitzer Space Telescope

Le télescope spatial *Spitzer* [Werner et collab., 2004], de 85 cm de diamètre, a été lancé en 2003 pour une période au départ de deux ans et demi étendue de 3 ans en phase "froide" (refroidie à l'hélium) jusqu'en 2009 puis a entamé sa phase "chaude" jusqu'au début 2020. Il avait à son bord trois instruments dont :

— l'*InfraRed Spectrometer* (IRS, Houck et collab. [2004]) : celui-ci pouvait produire des cubes hyperspectraux échantillonnés avec une fente (méthode IFU). Il était composé de deux fois deux modules. *Short-Low* et *Long-Low* (SL et LL) respectivement de 5.2 à 14.5 μm et 14 à 38 μm avec une basse résolution spectrale (dite *Low*) de $R = 60 - 120$ et une résolution spatiale de respectivement $\sim$3.6" et $\sim$10.5". Les spectres de chaque module comportaient comme ISO-SWS plusieurs segments mesurant des portions réduites des spectres qu'il fallait combiner. SL et

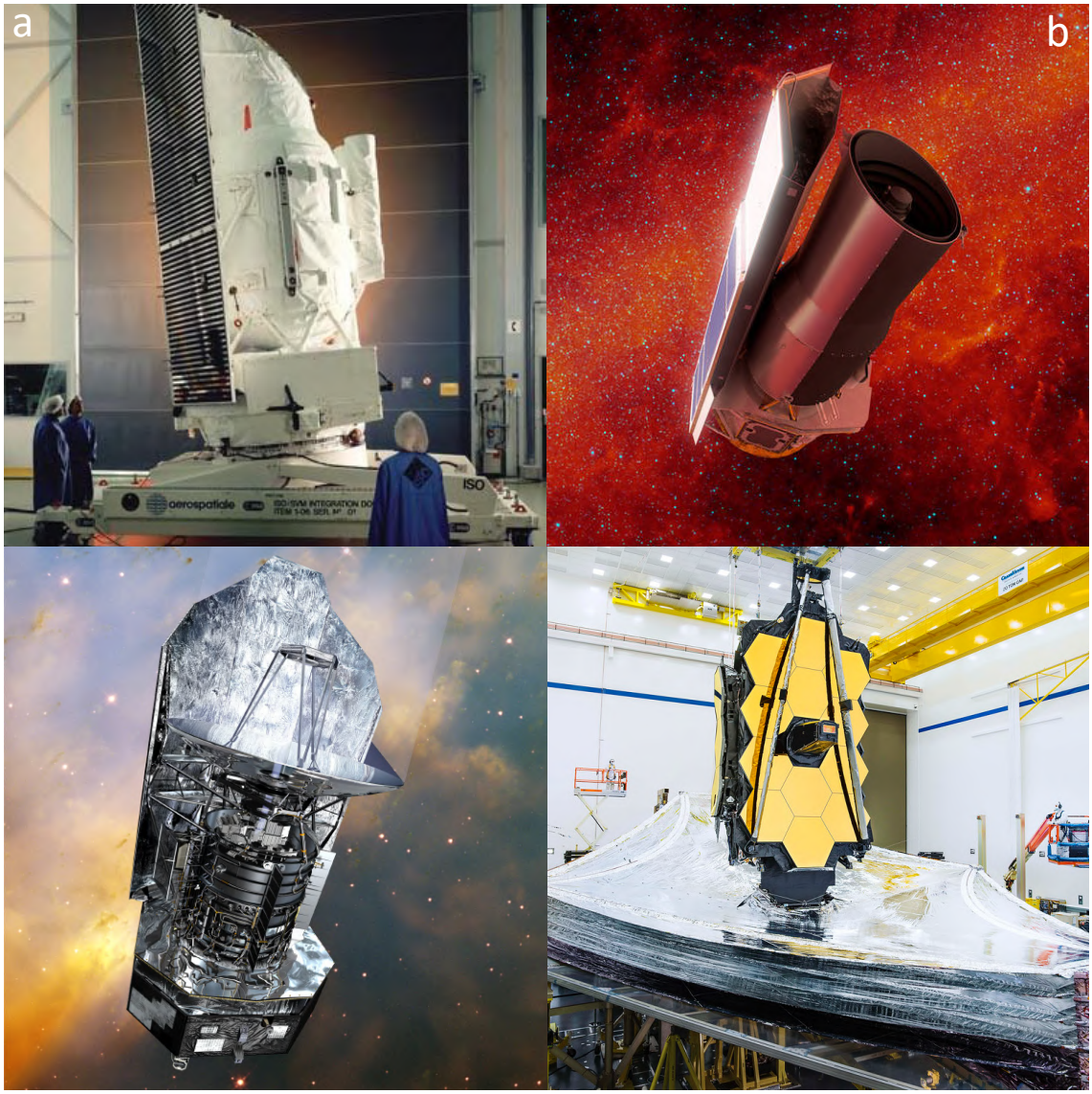

FIGURE 2.2 – Images des observatoires infrarouges utiles à ce travail. a : le *Infrared Space Observatory* ; b : *Spitzer* ; c : *Herschel* ; d : le *James Webb Space Telescope* en phase de test de déploiement des boucliers solaires en octobre 2019. Crédits : NASA/ESA/JPL-Caltech.

LL ont un intervalle de longueurs d'onde en commun de sorte à obtenir un spectre complet de 5.2 à 38 μm Les deux autres modules, *Short-High* (SH) et *Long-High* (LH) permettaient d'obtenir des cubes à plus grande résolution spectrale $R \sim$600 de 9.9 à 19.6 μm et 18.7 à 37.2 μm respectivement pour SH et LH.

Les deux autres instruments de *Spitzer*, IRAC [Fazio et collab., 2004] et MIPS [Rieke et collab., 2004] permettaient de réaliser des relevés photométriques dont les filtres étaient centrés à 3.6, 4.5, 6 et 8 μm pour IRAC et 24, 70 et 160 μm pour MIPS. L'utilisation de ces filtres permettait d'obtenir des SED dans la partie "basses" longueurs d'onde, sondant l'émission des plus petits grains de poussière. La phase froide permettait à ses instruments d'avoir une température plus basse que les objets qu'il observait et de ne pas perturber ses propres observations. Pour cela, ils devaient être refroidis à moins de 5 K. Au bout de 5 ans, l'hélium liquide servant à refroidir les instruments est arrivé à épuisement ce qui a fortement limité les observations sauf pour les bandes à 3.6 et 4.5 μm de l'instrument IRAC qui restaient utilisables.

Herschel Space Observatory

Herschel [Pilbratt et collab., 2010] est un observatoire spatial optimisé pour l'observation de l'infrarouge lointain et du sub-millimétrique. Avec son miroir de 3.5 mètres de diamètre, il est jusqu'à présent le télescope spatial le plus gros. Il emportait trois instruments dont :

— PACS [Poglitsch et collab., 2010] qui permettait d'effectuer à la fois des relevés photométriques et spectrométriques. La partie photométrie se composait de trois filtres centrés à 70, 100 et 160 μm sur des champ de vues de 3.5'×1.75' avec des pixels d'une taille de 3.2"×3.2" pour les deux premiers filtres et 6.4"×6.4" pour le troisième.

La partie spectrométrie permettait l'obtention de données hyperspectrales dont chaque champ de vue de 47"×47" était échantillonné par 5×5 pixels spatiaux. Les modes d'observations de cet instrument permettaient de retirer l'émission d'arrière plan des observations si l'objet d'étude n'était pas trop étendu (en dessous de 6'). Il pouvait acquérir un spectre sur toute la région de 55 à 210 μm à moyenne résolution $R = 1 - 4 \times 10^3$ ou en se focalisant sur certaines transitions précises comme celles de l'oxygène neutre à 63 et 145 μm ou du carbone ionisé à 158 μm. Les résolutions spatiales à ses longueurs d'onde étaient respectivement de 4.5", 8.8" et 11" [Bernard-Salas et collab., 2015].

Herschel comportait deux autres instruments (i) HIFI [de Graauw et collab., 2010] et (ii) SPIRE [Griffin et collab., 2010]. (i) HIFI était un spectromètre hétérodyne permettant d'obtenir des résolutions spectrales très hautes $R \sim 10^6$ et résoudre le profil des raies permettant d'étudier la dynamique du gaz. Il opérait entre 156 et 210 μm et 240 et 624 μm. (ii) SPIRE permettait de compléter la photométrie de PACS à plus grandes longueurs d'onde, i.e. 250, 350 et 500 μm.

Le futur (proche) : James Webb Space Telescope

Le *James Webb Space Telescope* [Gardner et collab., 2006] est le prochain observatoire dans l'infrarouge moyen pour lequel la communauté astronomique pourra proposer des observations. Il embarquera quatre instruments qui permettront d'effectuer des observations très variées entre 0.6 et 28 μm. Son miroir de 6.5 m permettra d'obtenir une

résolution spatiale de 0.125" à 3.3 μm et 0.29" à 7.7 μm, jamais atteinte pour un observatoire spatial infrarouge sur le même intervalle spectral. Deux instruments seront particulièrement intéressants pour le type d'étude présentée dans le chapitre 3 de ce manuscrit :

— *Mid-InfraRed Instrument* (MIRI) [Rieke et collab., 2015] : il permettra d'effectuer des mesures en coronographie, des relevés photométriques ainsi que de la spectroscopie avec ou sans fente à basse résolution et de la spectro-imagerie à moyenne résolution. C'est ce dernier mode qui nous intéresse, le mode MRS. Il permet d'obtenir des cubes de données de 4.9 à 28.8 μm à moyenne résolution spectrale de $R = 1550 - 3250$ et avec une résolution spatiale entre 0.17 et 1.2". Un spectre complet est segmenté en plusieurs morceaux. MIRI-MRS dispose de 4 chaînes, elles mêmes composées de 3 segments (courtes, moyennes et grandes longueurs d'onde). Chaque chaîne a un champ de vue légèrement différent, la première étant la plus petite de 3.2"×3.7", la dernière étant la plus grande de 6.9"×7.9". Chaque image spectrale est échantillonnée par des pixels de 0.196 à 0.273".

— *NearInfraRed Spectrograph* (NIRSpec) [Dorner, B. et collab., 2016] : cet instrument présente plusieurs modes d'observations comme de la spectroscopie multi-objets, spectroscopie à haut contraste à fente fixe, spectroscopie d'objets lumineux en série temporelle et de la spectro-imagerie (mode IFU). Ce dernier mode permet d'obtenir des cubes hyperspectraux sur le domaine 0.6 à 5.3 μm. Chaque champ de vue de 3"×3" est échantillonné par des pixels de 0.1" avec une résolution spectrale moyenne de $R = 1000$ à 2700 avec un mode basse résolution à $R = 100$.

La mise en commun des données NIRSpec et MIRI produira des cubes de données à haute résolution spatiale sur tout le domaine spectral accessible avec JWST. Les deux autres instruments sont (i) NIRCAM et (ii) NIRISS, observant tous les deux de 0.6 à 5 μm. (i) NIRCAM permettra d'effectuer de la photométrie dans 29 filtres de fonction de transmission plus ou moins étendue de $R \sim 1$ à $R \sim 100$, ainsi que de la coronographie, de la spectroscopie grand champ sans fente ainsi que des mesures en série temporelle (imagerie et spectroscopie). (ii) NIRISS permettra d'effectuer de la spectroscopie sans fente aussi bien sur un seul objet que sur un même champ de vue de 133" de cotés. Il présente un mode de masque interférométrique permettant une meilleure séparation de deux sources très proches l'une de l'autre et ayant un fort contraste en luminosité. Le site internet https://jwst-docs.stsci.edu/ regroupe toutes les informations techniques concernant les instruments. La mise en service de cet observatoire spatial suscite beaucoup d'attente dans toute la communauté astronomique depuis des années. En particulier, son pointage vers des PDR permettra d'observer l'évolution de la matière carbonée irradiée en fonction de l'intensité du champ de rayonnement UV avec une finesse inégalée. En particulier, la haute résolution spatiale permettra d'atteindre des échelles très fines et d'étudier les transitions autour des fronts d'ionisation et de dissociation, limitées autrefois à des échelles de plusieurs secondes d'arc (comme avec *Spitzer*).

2.2 La séparation aveugle de sources en astrophysique

2.2.1 Généralités

L'approche de séparation aveugle de sources (SAS) part de l'hypothèse qu'un signal, ici un spectre infrarouge, est le mélange de plusieurs signaux sources. L'hypothèse supplémentaire généralement faite est que ce mélange est linéaire et instantané. Un mélange est dit instantané quand chaque élément d'indice i des spectres observés ne dépend que des valeurs au même indice des spectres sources. Il est linéaire lorsque chaque spectre observé peut être modélisé par la combinaison linéaire d'un nombre r de spectres sources, tels que :

$$\boldsymbol{X} = \boldsymbol{A} \times \boldsymbol{S}, \tag{2.3}$$

avec $\boldsymbol{X}$ la matrice de données de dimensions $n \times m$ (n spectres de m points spectraux), $\boldsymbol{A}$ la matrice $n \times r$ des poids, $\boldsymbol{S}$ la matrice source de dimensions $r \times m$.

Le but des méthodes de SAS est d'obtenir une estimation des matrices $\boldsymbol{A}$ et $\boldsymbol{S}$, notées $\hat{\boldsymbol{A}}$ et $\hat{\boldsymbol{S}}$ et de même dimensions que $\boldsymbol{A}$ et $\boldsymbol{S}$. Il existe cinq approches principales pour calculer $\hat{\boldsymbol{A}}$ et $\hat{\boldsymbol{S}}$. Une courte revue de ces dernières est présentée ci-dessous.

-(i)- L'analyse en composantes indépendantes (ICA) se base sur l'indépendance statistique des sources, en utilisant par exemple la non-gaussianité des sources (voir le cas de la méthode FastICA [Hyvarinen, 1999]). Ce type de méthode a été utilisé pour des données hyperspectrales en astronomie IR, par Berné et collab. [2007].

-(ii)- L'analyse en composantes parcimonieuses (voir la revue par Jolliffe and Cadima [2016]) s'applique sur des problèmes pour lesquels les matrices $\boldsymbol{A}$ ou $\boldsymbol{S}$ sont parcimonieuses. Une matrice est parcimonieuse quand elle contient un grand nombre de valeurs nulles ou proches de zéro. Par exemple, la méthode SpaceCORR développée par Meganem et collab. [2010] se base sur la parcimonie spatiale des cubes hyperspectraux et peut être appliqué à des cas de données infrarouges en astronomie (voir section 3.2 du manuscrit de thèse de Boulais [2017]).

-(iii)- Les approches bayésiennes en SAS ajoutent des *a priori* sur les sources, coefficients de mélange ou le bruit des données, permettant de contraindre le modèle linéaire et de réduire le nombre de solutions possibles.

-(iv)- Les approches dites géométriques, se basent sur l'exploitation de la représentation géométrique des données. Elle sont particulièrement utilisées dans la communauté de l'observation de la Terre. Une méthode de SAS géométrique nommée MASS, a cependant été développée par A. Boulais, durant sa thèse à l'IRAP, et concerne spécifiquement une application aux données de spectroscopie infrarouge en astrophysique. Cette méthode sera illustrée en détails en section 2.2.6.

-(v)- La factorisation par matrices non-négatives (NMF en anglais) utilise la non-négativité des sources et des coefficients de mélanges. Pour que cette méthode soit applicable, il faut que la matrice de données contienne uniquement des éléments non-négatifs. Les observations (des spectres dans notre cas), sont, en résumé, un nombre de photons en fonction de la longueur d'onde. Chaque élément d'un spectre est supérieur ou égal à zéro[2], la matrice de données peut donc être modélisée par un produit de matrices non-négatives. La première résolution du problème de la NMF a été proposée par Paatero and Tapper [1994] et Paatero [1997] et se nommait *Positive matrix*

2. L'hypothèse de positivité n'inclut pas 0, d'où l'utilisation du terme "non-négative"

factorisation (PMF). Ce sont Lee and Seung [1999] et Lee and Seung [2001] qui ont permis son essor avec un algorithme très simple à implémenter. Berné et collab. [2007] et Rosenberg et collab. [2011] ont utilisé ce type de méthode pour l'analyse de données hyperspectrales IR. La suite de cette section décrit en détails la méthode NMF.

2.2.2 La méthode NMF

Principe mathématique

L'estimation des matrices $\hat{\boldsymbol{A}}$ et $\hat{\boldsymbol{S}}$ par la NMF se fait par la mise à jour itérative de ces deux matrices, jusqu'à satisfaire un critère de convergence. On définit un tel critère sur la base de la distance $D(\boldsymbol{X}||\hat{\boldsymbol{A}}\hat{\boldsymbol{S}})$ entre la matrice de données $\boldsymbol{X}$ et son modèle, le produit $\hat{\boldsymbol{A}}\times\hat{\boldsymbol{S}}$. $D(\boldsymbol{X}||\hat{\boldsymbol{A}}\hat{\boldsymbol{S}})$ peut être définie de deux manières différentes, l'une utilisant le carré de la distance euclidienne entre $\boldsymbol{X}$ et $\hat{\boldsymbol{A}}\times\hat{\boldsymbol{S}}$ définie par :

$$D(\boldsymbol{X}||\hat{\boldsymbol{A}}\hat{\boldsymbol{S}}) = \sum_{i,j}(\boldsymbol{X}_{i,j} - [\hat{\boldsymbol{A}}\hat{\boldsymbol{S}}]_{i,j})^2 = ||\boldsymbol{X} - \hat{\boldsymbol{A}} \times \hat{\boldsymbol{S}}||_F^2 \tag{2.4}$$

où $||.||_F$ est la norme de Frobénius, et l'autre utilisant la divergence de Kullback-Leibler (KL) définie par [Lee and Seung, 2001] :

$$D(\boldsymbol{X}||\hat{\boldsymbol{A}}\hat{\boldsymbol{S}}) = \sum_{i,j}(\boldsymbol{X}_{i,j} \ln \frac{\boldsymbol{X}_{i,j}}{[\hat{\boldsymbol{A}}\hat{\boldsymbol{S}}]_{i,j}} - \boldsymbol{X}_{i,j} + [\hat{\boldsymbol{A}}\hat{\boldsymbol{S}}]_{i,j}). \tag{2.5}$$

Le calcul de $\hat{\boldsymbol{A}}$ et $\hat{\boldsymbol{S}}$ se fait en minimisant le critère distance $D(\boldsymbol{X}||\hat{\boldsymbol{A}}\hat{\boldsymbol{S}})$:

$$(\hat{\boldsymbol{A}}, \hat{\boldsymbol{S}}) = \underset{\hat{\boldsymbol{A}},\hat{\boldsymbol{S}}}{\operatorname{argmin}}\, D(\boldsymbol{X}||\hat{\boldsymbol{A}}\hat{\boldsymbol{S}}) \text{ tel que } \hat{\boldsymbol{A}} \geq 0, \hat{\boldsymbol{S}} \geq 0. \tag{2.6}$$

Il existe plusieurs façons de résoudre ce problème. Deux méthodes sont détaillées ci-après, la mise à jour multiplicative et celle par moindres carrés alternatifs.

Mise à jour multiplicative

La méthode la plus simple et la plus courante pour résoudre le problème 2.6 est celle élaborée par Lee and Seung [1999]. Cette mise à jour est dite multiplicative, elle consiste à multiplier chaque élément des matrices $\hat{\boldsymbol{A}}$ et $\hat{\boldsymbol{S}}$ par un coefficient fonction du même élément des trois matrices au pas précédent. Elles permettent de diminuer la distance $D(\boldsymbol{X}||\hat{\boldsymbol{A}}\hat{\boldsymbol{S}})$ à chaque itération [Lee and Seung, 2001]. Elles sont définies respectivement pour la distance Euclidienne et la divergence KL comme :

$$\hat{\boldsymbol{S}}_{a\mu} \leftarrow \hat{\boldsymbol{S}}_{a\mu}\frac{(\hat{\boldsymbol{A}}^T\boldsymbol{X})_{a\mu}}{(\hat{\boldsymbol{A}}^T\hat{\boldsymbol{A}}\hat{\boldsymbol{S}})_{a\mu}}, \qquad \hat{\boldsymbol{A}}_{ia} \leftarrow \hat{\boldsymbol{A}}_{ia}\frac{(\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{S}}^T)_{ia}}{(\hat{\boldsymbol{A}}\hat{\boldsymbol{S}}\hat{\boldsymbol{S}}^T)_{ia}} \tag{2.7}$$

et

$$\hat{\boldsymbol{S}}_{a\mu} \leftarrow \hat{\boldsymbol{S}}_{a\mu}\sum_i(\frac{\hat{\boldsymbol{A}}_{ia}\boldsymbol{X}_{i\mu}}{[\hat{\boldsymbol{A}}\hat{\boldsymbol{S}}]_{i\mu}})\frac{1}{\sum_k \hat{\boldsymbol{A}}_{ka}}, \qquad \hat{\boldsymbol{A}}_{ia} \leftarrow \hat{\boldsymbol{A}}_{ia}\sum_\mu(\frac{\hat{\boldsymbol{S}}_{a\mu}\boldsymbol{X}_{i\mu}}{[\hat{\boldsymbol{A}}\hat{\boldsymbol{S}}]_{i\mu}})\frac{1}{\sum_\nu \hat{\boldsymbol{S}}_{a\nu}}. \tag{2.8}$$

Mise à jour par moindres carrés alternatifs

La méthode de mise à jour par moindres carrés alternatifs (ALS en anglais) est l'une des premières méthodes introduites afin de résoudre la NMF, notamment par Paatero and Tapper [1994]. Elle consiste à minimiser la fonction de coût successivement pour $\hat{\boldsymbol{A}}$ ($\hat{\boldsymbol{S}}$ étant fixée) et $\hat{\boldsymbol{S}}$ ($\hat{\boldsymbol{A}}$ étant fixée), impliquant la résolution de ces deux sous-problèmes d'optimisation en plus du problème global 2.6. Les deux sous-problèmes sont définis respectivement comme :

$$\hat{\boldsymbol{A}}^{k+1} = \underset{\hat{\boldsymbol{A}}}{\operatorname{argmin}}\, D(\boldsymbol{X}||\hat{\boldsymbol{A}}^{k}\hat{\boldsymbol{S}}^{k}) \text{ tel que } \hat{\boldsymbol{A}} \geq 0 \tag{2.9}$$

et

$$\hat{\boldsymbol{S}}^{k+1} = \underset{\hat{\boldsymbol{S}}}{\operatorname{argmin}}\, D(\boldsymbol{X}||\hat{\boldsymbol{A}}^{k+1}\hat{\boldsymbol{S}}^{k}) \text{ tel que } \hat{\boldsymbol{S}} \geq 0, \tag{2.10}$$

où k est l'indice d'itération. Il existe une multitude d'algorithmes d'ALS. Lin [2007] opère la résolution de l'ALS par descente de gradient, en utilisant la norme de Frobénius (équation (2.4)) comme fonction de coût. L'estimation du pas d'apprentissage des descentes de gradient limite en général l'efficacité de ce type d'approche en terme de coût de calcul. Cependant, l'implémentation proposée par Lin [2007] permet de converger plus rapidement vers la solution du problème 2.6 que la méthode de Lee and Seung [2001].

Critère d'arrêt des algorithmes

En pratique, il est nécessaire d'imposer un critère d'arrêt de l'algorithme. Il consiste généralement en l'évaluation de l'évolution de la fonction de coût d'un pas à l'autre, qui impose l'arrêt lorsqu'elle devient inférieure à un seuil, noté ϵ, tel que :

$$\frac{D^{k}(\boldsymbol{X}||\hat{\boldsymbol{A}}\hat{\boldsymbol{S}}) - D^{k+1}(\boldsymbol{X}||\hat{\boldsymbol{A}}\hat{\boldsymbol{S}})}{D^{k}(\boldsymbol{X}||\hat{\boldsymbol{A}}\hat{\boldsymbol{S}})} < \epsilon, \tag{2.11}$$

où k est l'indice d'itération ; ϵ est défini par l'utilisateur.

Le cas de la méthode de Lin [2007] est plus complexe car c'est la présence d'un point stationnaire qui stoppe l'algorithme. Dans ce cas, l'algorithme stoppe à la condition suivante :

$$||\nabla^{P} D^{k}(\boldsymbol{X}||\hat{\boldsymbol{A}}\hat{\boldsymbol{S}})||_{F} \leq \epsilon ||\nabla D^{1}(\boldsymbol{X}||\hat{\boldsymbol{A}}\hat{\boldsymbol{S}})||_{F}, \tag{2.12}$$

où ∇^{P} est le gradient projeté et ϵ la tolérance définie par l'utilisateur. Le même type de critère est à définir pour les deux sous-problèmes d'optimisation 2.9 et 2.10 tels que :

$$||\nabla_{S}^{P} D^{k}(\boldsymbol{X}||\hat{\boldsymbol{A}}\hat{\boldsymbol{S}})||_{F} \leq \epsilon_{S} \tag{2.13}$$

et

$$||\nabla_{A}^{P} D^{k}(\boldsymbol{X}||\hat{\boldsymbol{A}}\hat{\boldsymbol{S}})||_{F} \leq \epsilon_{A}. \tag{2.14}$$

Les tolérances ϵ_A et ϵ_S sont ensuite définies telles que :

$$\epsilon_{A} = \epsilon_{S} \equiv \max(10^{-3}, \epsilon)||\nabla D^{1}(\boldsymbol{X}||\hat{\boldsymbol{A}}\hat{\boldsymbol{S}})||_{F}. \tag{2.15}$$

À noter enfin que le nombre maximal d'itérations ou le temps de convergence peuvent être fixés, permettant de stopper l'algorithme en cas de convergence trop longue.

2.2.3 Identification du nombre de composantes

Le nombre de composantes à extraire r est défini par l'utilisateur. Plusieurs méthodes pour son identification existent, applicables selon les données considérées.

L'une d'entre elle, utilisée notamment par Rapacioli et collab. [2005] et Berne et collab. [2012], utilise les caractéristiques du bruit. Rapacioli et collab. [2005] calculent, par exemple, l'écart-type σ_r de la *matrice de bruit* $\mathbf{R}_r$ définie telle que :

$$\boldsymbol{R}_r = \boldsymbol{X} - \hat{\boldsymbol{A}} \times \hat{\boldsymbol{S}}, \tag{2.16}$$

obtenue à l'issue d'une réalisation de la NMF. L'écart-type σ_r est calculé pour plusieurs valeurs croissantes de r et comparé à l'écart-type du bruit dans les données σ_b. La valeur de σ_r est en principe décroissante lorsque r est croissant. Le nombre de composantes r est choisi lorsque $\sigma_r \approx \sigma_b$, signifiant que le résidu $\boldsymbol{R}_r$ contient essentiellement du bruit. Rapacioli et collab. [2005] et Berne et collab. [2012] ont montré que ce type de démarches basées sur le bruit étaient applicables sur plusieurs jeux de données.

Une autre méthode consiste en la réalisation de plusieurs NMF avec r croissant. La valeur de r est sélectionnée lorsque l'application avec *r+1* sources montre la présence d'artefacts ou de structures spectrales non-physiques [Berné et collab., 2007].

Une autre méthode est basée sur la technique de décomposition en valeurs singulières (SVD en anglais) des données, permettant l'obtention des valeurs propres de la matrice de covariance des données. Cette approche est décrite par Luo and Zhang [2000]. La SVD permet de factoriser une matrice de données $\boldsymbol{X}$ de dimension $n \times m$ telle que :

$$\boldsymbol{X} = \boldsymbol{D} \times \boldsymbol{O} \times \boldsymbol{V}^*, \tag{2.17}$$

où $\boldsymbol{D}$ est une matrice unitaire de dimension $n \times n$ et $\boldsymbol{V}^*$ la matrice adjointe de la matrice unitaire $\boldsymbol{V}$ de dimension $m \times m$. La matrice $\boldsymbol{O}$, de dimension $n \times m$, est diagonale et contient les valeurs propres de la matrice de covariance de $\boldsymbol{X}$. Ces dernières sont extraites sous la forme d'un vecteur et généralement classées par ordre décroissant. Théoriquement, le nombre de valeurs propres contribuant le plus à la variance des données donne le nombre de composantes sources r [Luo and Zhang, 2000]. Les valeurs propres correspondant aux r composantes se détachent nettement du bruit par une cassure à $r+1$ dans leur représentation, voir figure 3.9. Cependant, cette transition peut ne pas être évidente sur tous les jeux de données.

Il se peut qu'aucune de ces trois méthodes ne soient efficaces pour déterminer r. Dans ce cas, des hypothèses physiques supplémentaires sont nécessaires.

2.2.4 Unicité et variabilité des solutions de la NMF

Le problème de la NMF est en fait mal posé pour deux raisons principales. La première est qu'elle admet par nature un nombre infini de solutions. En effet, si le couple de matrices non-négatives [**A**,**S**] est solution de l'équation (2.3) alors le couple $[\boldsymbol{AT},\boldsymbol{T}^{-1}\boldsymbol{S}]$ est aussi solution, pour toute matrice inversible $\boldsymbol{T}$, qui ne doit pas nécessairement être non-négative. Il est possible, dans certains cas discutés par Donoho and Stodden [2003] et Moussaoui et collab. [2005] d'obtenir une solution unique. Cependant la non-unicité des solutions reste en général valable dans le cas des données astrophysiques.

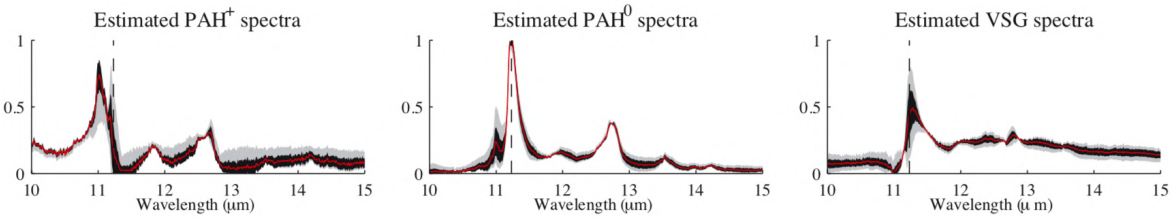

FIGURE 2.3 – Résultat de 100 réalisations de la NMF par Rosenberg et collab. [2011]. L'enveloppe grise représente les valeurs maximales et minimales en chaque longueur d'onde, la noire représente un écart-type de $1\,\sigma$ et la courbe rouge est le spectre moyen obtenu.

Le second inconvénient majeur de la NMF provient de la fonction de coût du problème d'optimisation 2.6. En général, la capacité à converger vers un minimum global est définie par la nature convexe de la fonction de coût. Dans le cas de la NMF, la fonction coût est convexe pour $\boldsymbol{A}$ lorsque $\boldsymbol{S}$ est fixée et pour $\boldsymbol{S}$ lorsque $\boldsymbol{A}$ est fixée mais ne l'est pas pour les deux simultanément. Ainsi, l'algorithme peut converger vers des minima locaux différents pour deux initialisations différentes. L'initialisation aléatoire des algorithmes implique qu'ils vont converger vers une solution différente pour chaque initialisation. D'un point de vue empirique, ces variations dans les solutions peuvent impliquer des structures spectrales sensiblement différentes lors de l'application de la NMF à des jeux de données réelles. C'est le cas notamment des résultats de l'étude effectuée par Rosenberg et collab. [2011], lors de l'application de la NMF sur des données *Spitzer*-IRS LH, voir figure 2.3. Les variations observées peuvent être problématiques, en particulier sur les intensités relatives des bandes, pouvant servir à déduire des paramètres physiques et chimiques des PAH. Citons aussi Berne et collab. [2012] qui, dans un autre domaine de longueur d'onde et autre type de mélange constatent une variation spectrale des solutions obtenues sur des données *Herschel*-HIFI. Des moyens existent pour s'affranchir des variations des solutions lorsqu'une initialisation aléatoire est choisie, imposant cependant un coût de calcul supplémentaire. Ceci est développé dans la section suivante.

De manière générale, il est possible de réduire l'ensemble des solutions possibles ainsi que la sensibilité aux conditions initiales du problème en jouant sur l'initialisation des algorithmes de NMF. Dans leurs études, Boutsidis and Gallopoulos [2008]; Langville et collab.; Rezaei et collab. [2011]; Wild et collab. [2004] en décrivent un certain nombre. La section 2.2.6 décrira la méthode d'initialisation élaborée par Boulais [2017], qui sera utilisée dans cette thèse étant donné les avantages qu'elle présente.

2.2.5 NMF couplée à une approche Monte-Carlo

Une solution pour s'affranchir de la variabilité des résultats de la NMF, lorsqu'une initialisation aléatoire des algorithmes est choisie, est d'effectuer un grand nombre N de réalisations en sauvegardant le résultat de chacun des tirages (matrices $\hat{\boldsymbol{A}}$ et $\hat{\boldsymbol{S}}$). Cette approche de type Monte-Carlo couplée à la NMF est notée MC-NMF dans la suite du manuscrit. À l'issue des N tirages, $N \times r$ spectres sources sont obtenus. Cependant, ces derniers ne sont pas stockés dans le même ordre dans chacune des matrices $\hat{\boldsymbol{S}}$, une étape de classification (*clustering* en anglais) est nécessaire. Un algorithme de *clustering* (comme la fonction *k-means*) est appliqué au jeu de $N \times r$ spectres sources afin d'obtenir automatiquement r *clusters* de N spectres ayant les caractéristiques spectrales les plus proches. L'exploitation de ces *clusters* peut ensuite se faire selon deux méthodes.

La première méthode, présentée dans Rosenberg et collab. [2011] se fait par l'ob-

tention du spectre moyen du *cluster*. L'intensité moyenne est calculée en chacun des m points spectraux des N spectres de chaque *cluster*. L'erreur est obtenue par le calcul de l'écart type en chaque point spectral. La figure 2.3 est un exemple de l'application de cette méthode.

La seconde méthode, présentée dans Berné et collab. [2013], permet de déterminer le spectre le plus probable du *cluster*. Les m densités de probabilité de l'intensité sont déduites (une pour chaque position spectrale) en utilisant la méthode des noyaux de Parzen. L'intensité correspondant au maximum de la densité de probabilité est choisie. Les barres d'erreurs sont obtenues en prenant les deux intensités correspondant à la moitié du maximum. Les travaux de Berné et collab. [2013] donnent un exemple de l'application de cette méthode aux données hyperspectrales de l'instrument *Herschel*-HIFI.

Cette approche MC-NMF ajoute un coût de calcul considérable (N fois le temps d'une réalisation de la NMF) dont la méthode d'initialisation décrite dans la section suivante permet d'éviter.

2.2.6 Initialisation de la NMF par MASS : méthode MASS-NMF

L'approche d'initialisation de la NMF exploitée dans cette thèse est celle qui a été développée à l'IRAP par A. Boulais durant sa thèse [Boulais, 2017], appelée MASS, pour *Maximum Angle Source Separation*. La méthode MASS est une méthode de SAS utilisant une approche géométrique. Nous détaillons ici brièvement son principe, et invitons les lecteurs et lectrices qui souhaiteraient plus de détails à consulter la manuscrit de A. Boulais (*op. cit.*).

Un jeu de n spectres de m points spectraux chacun génère un espace vectoriel de dimension m. La figure 2.4 donne un exemple d'une représentation géométrique de données sur lesquelles MASS est applicable, avec $n = 34$ vecteurs positifs contenant $m = 2$ points positifs. La positivité implique que ces n points se situent dans l'orthan positif ($x \geq 0$ et $y \geq 0$). Les points sont contenus dans un cône simplicial. Les arrêtes de ce cône sont formées par les observations entre lesquelles se trouvent toutes les autres observations, d'un point de vue angulaire (points rouges $\boldsymbol{a}$ et $\boldsymbol{b}$). Si pour chaque source, au moins un pixel présente la contribution unique de cette source (condition de parcimonie) alors les arrêtes du cône correspondent aux sources elles-mêmes.

La méthode MASS consiste à identifier les r arrêtes du cône simplicial (les vecteurs $\boldsymbol{a}$ et $\boldsymbol{b}$ en figure 2.4). Dans le cas général, pour identifier les arrêtes, MASS procède selon les étapes suivantes :

- calcule le produit scalaire entre chaque paire de vecteurs,
- isole la paire qui maximise l'angle (en pratique dans l'algorithme, minimise le produit scalaire) entre ces vecteurs, formant un sous-espace vectoriel,
- projette chaque autre vecteur observé sur ce sous-espace,
- isole le spectre maximisant l'angle entre lui même et sa projection orthogonale sur l'espace précédent,
- recommence jusqu'à obtenir l'extraction des r composantes.

Les r vecteurs extraits constituent $\boldsymbol{S}_{MASS}$ et la matrice des poids associée est notée $\boldsymbol{A}_{MASS}$. Durant sa thèse, A. Boulais [Boulais, 2017] a montré sur données synthétiques que l'initialisation de la NMF par le résultat de MASS, permet une réduction significative de la dispersion des résultats par rapport à une méthode MC-NMF classique.

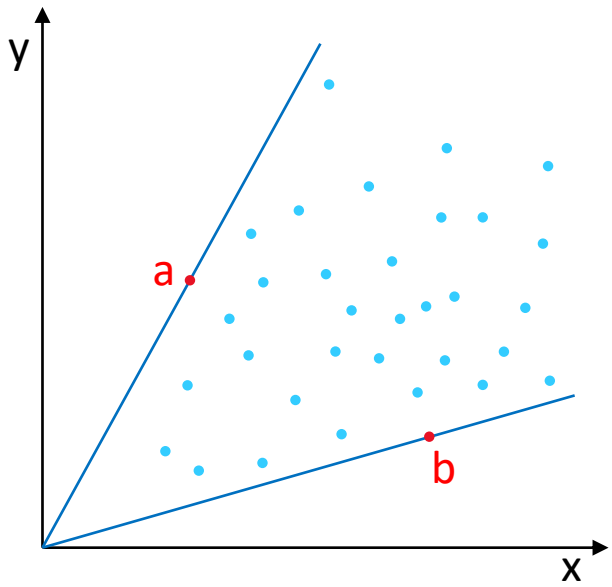

FIGURE 2.4 – Représentation géométrique d'un jeu de données non-négatif de dimension 2. Le couple de vecteurs $\boldsymbol{a}$ et $\boldsymbol{b}$ en rouge est celui qui minimise le produit scalaire parmi l'ensemble des couples de vecteurs.

De plus, dans les tests, le résultat obtenu est proche du minimum global, autrement dit l'algorithme fourni une solution proche de la bonne. MASS-NMF permet donc de s'affranchir de l'utilisation d'une approche Monte-Carlo couplée à la NMF et de réduire le coût de calcul de manière significative (réduction du temps de calcul d'un facteur N, typiquement $N = 100$). Boulais [2017] précise que seule l'initialisation de l'une des deux matrices ($\boldsymbol{A}$ ou $\boldsymbol{S}$) est nécessaire. Dans le cas général, c'est la matrice contenant le plus grand nombre d'éléments qui est à initialiser avec la matrice MASS correspondante. Cette approche, appelée MASS-NMF par la suite, est appliquée en chapitre 3 dans le contexte de l'arrivée des données JWST (voir section 3.2.1).

2.3 Photophysique générale des PAH

Ce manuscript utilise des concepts liés à la photophysique des PAH qui est brièvement décrite ici. Plus spécifiquement, lorsqu'un photon UV est absorbé par un PAH isolé, la molécule aura trois façons de se désexciter : (i) se refroidir radiativement, (ii) perdre un électron (ionisation, effet photoélectrique) et (iii) perdre des fragments (photodissociation). Ces différents processus mettent en jeu des échelles de temps très variables [Joblin et collab., 2020]. Dans une nébuleuse par réflexion comme NGC 7023, un PAH absorbe un photon toutes les quelques heures et se refroidit sur plusieurs secondes [Joblin et collab., 2020]. De plus, étant donné les densités de gaz rencontrées dans les milieux où l'on observe l'émission des PAH, les collisions sont rares, toutes les ∼28h [Omont, 1986]. Ces derniers peuvent donc être considérés comme isolés pendant leur relaxation suivant l'absorption d'un photon UV.

2.3.1 Relaxation de l'énergie interne

La figure 2.5 est un schéma simplifié des niveaux d'énergie électronique et vibrationnel dans le cas d'une molécule PAH neutre complètement hydrogénée (états électroniques singulets). L'absorption du photon UV, d'énergie $h\nu_{UV}$ (flèche rouge verticale vers le haut) dans un état électronique excité S_n est suivie de différents processus de relaxation de l'énergie, à la fois non-radiatifs et radiatifs. Par conversion interne (IC, flèches noires sur la figure 2.5), l'énergie est rapidement (de l'ordre de 10^{-12} sec) transférée vers les états électroniques les plus bas S_1 et S_0 mais avec une grande énergie vibrationnelle. Le processus IC a lieu entre états de même multiplicité (singulets S pour les neutres et doublets D pour les cations). Le processus de conversion intersystème (ISC) permet d'atteindre des états de multiplicité différente, les triplets (T), dans le cas des molécules neutres (flèche verte sur la figure).

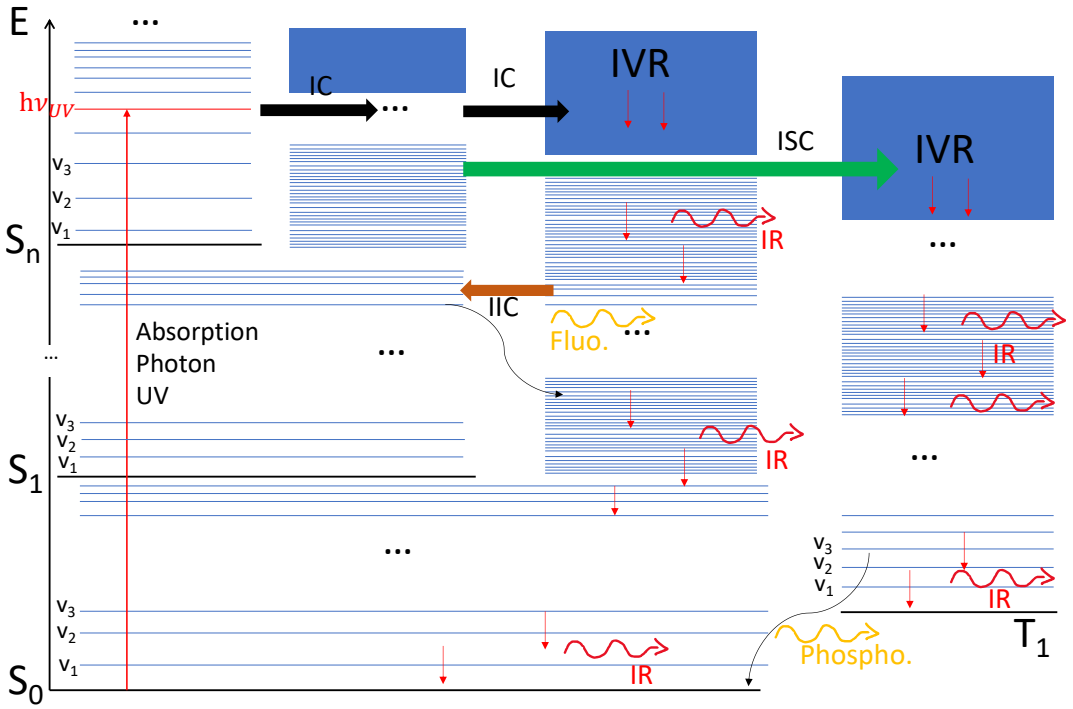

FIGURE 2.5 – Diagramme énergétique d'un PAH neutre montrant les processus de redistribution de l'énergie incluant les processus non radiatifs et le refroidissement radiatif. La flèche verticale rouge à gauche représente l'absorption de l'énergie d'un photon. IC : conversion interne ; ISC : conversion intersystème ; IIC : conversion interne inverse ; S : état électronique singulet ; T : état électronique triplet ; IVR : redistribution vibrationnelle intramoléculaire.

Les états électroniques bas qui sont peuplés, S_1, S_0 et T_1 contiennent beaucoup d'énergie vibrationnelle et sont soumis au processus de redistribution vibrationnelle intramoléculaire (IVR en anglais) qui met en jeu le couplage des modes de vibration. La densité de niveaux vibrationnels dans ces états est très importante. A titre d'exemple, la figure 2.6 montre comment évolue avec l'énergie interne la densité d'états vibrationnels pour la molécule de coronène, $C_{24}H_{12}$. Cette densité harmonique est calculée par comptage avec l'algorithme de Stein-Rabinovitch [Stein and Rabinovitch, 1973]. La molécule avec son énergie vibrationnelle importante atteint des températures élevées (typiquement 1400 K pour un coronène ayant absorbé un photon de 7 eV) et le refroidissement par émission IR peut alors se produire. Cette émission est longue et peut s'étendre sur des durées de l'ordre de la seconde et au delà.

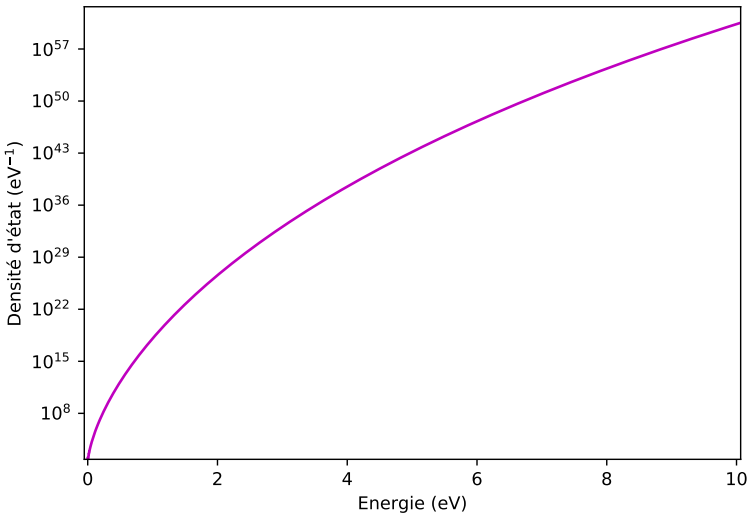

FIGURE 2.6 – Évolution de la densité d'états vibrationnels avec l'énergie interne de la molécule. Cas du coronène après absorption d'un photon de 10 eV.

D'autres processus radiatifs peuvent être impliqués comme la fluorescence directe de l'état S_1 vers S_0 et la phosphorescence de l'état T_1 vers S_0. Un autre type de fluorescence est la fluorescence dite récurrente ou de Poincaré. Cette fluorescence retardée par rapport à la fluorescence directe met en jeu le processus de conversion interne inverse (IIC sur la figure 2.5). Elle est surtout efficace dans le cas des cations pour lesquels les niveaux électroniques bas sont proches en énergie [Martin et collab., 2015].

2.3.2 Ionisation

L'ionisation du PAH peut se produire lorsque le photon absorbé a une énergie supérieure au potentiel d'ionisation (en anglais *ionization potential*, IP pour la suite). L'IP varie avec la taille, i.e. nombre d'atomes de carbone, et le degré d'ionisation de la molécule. Sa valeur peut se calculer facilement par les calculs de chimie quantique. Par exemple la *Theoretical spectral database of PAH*[3] [Malloci et collab., 2007a] présente les caractéristiques moléculaires calculées de 40 PAH contenant de 10 à 66 atomes de carbone, dont leurs deux premiers potentiels d'ionisation. On définit par la suite $IP^{(Z+1)+}$ pour décrire l'ionisation de l'espèce de charge Z vers l'espèce $(Z+1)$. Les valeurs des IP^+ calculées par Malloci et collab. [2007b], passent par exemple de 7.02 eV pour le coronène (N_C=24) à 5.71 eV pour le circumovalene (N_C=66). Leur comparaison avec les valeurs expérimentales (énergies d'apparition des photoélectrons ou des ions) en figure 1 de l'étude de Malloci et collab. [2007b], montre une légère sous-estimation par les calculs de 0.1 à 0.5 eV. Pour un même PAH, l'IP augmente avec le degré d'ionisation car il est de plus en plus difficile d'arracher un électron. Comme pour l'IP^+, l'IP^{2+} diminue avec l'augmentation de la taille des PAH.

Bakes and Tielens [1994] donnent une expression analytique classique de l'évolution du IP avec la taille et la charge des PAH, en considérant des disques conducteurs. Si la courbe ajuste correctement les points théoriques et expérimentaux pour les IP^+, elle surestime les IP^{2+} de 1 à 2 eV. Weingartner and Draine [2001] donnent plus tard une

3. Accessible à l'adresse : http://astrochemistry.oa-cagliari.inaf.it/database/pahs.html

meilleure description en ajoutant un terme empirique qui corrige des effets quantiques :

$$IP^{(Z+1)+}(a) = W + \frac{e^2}{a}(Z + \frac{1}{2}) + (Z + 2)\frac{e^2}{a}\frac{0.3\text{Å}}{a}, \tag{2.18}$$

où W est l'énergie de travail d'extraction d'un électron d'un grain de graphite, généralement prise à 4.4 eV ; Z est le degré d'ionisation, e est la charge élémentaire et a la taille de la molécule en Å. Des valeurs expérimentales correspondant aux doubles et triples ionisations ont été récemment obtenues pour des PAH de petite taille jusqu'au coronène [Zhen et collab., 2016] et pour de plus grands PAH contenant entre 30 et 48 atomes de carbone [Wenzel et collab., 2020]. Wenzel et collab. [2020] ont montré que l'évolution des trois IP avec la taille peut être représentée avec le formalisme de Weingartner and Draine [2001] avec une valeur de W=3.9 eV.

L'absorption d'un photon dont l'énergie est supérieure à l'IP n'entraîne pas systématiquement l'ionisation de la molécule. Il y a un rendement d'ionisation à prendre en compte si l'on veut estimer l'émission de photoélectrons par les PAH interstellaires. Verstraete et collab. [1990] et Jochims et collab. [1996] ont mesuré expérimentalement ce rendement pour la première ionisation de PAH de taille jusqu'au coronène. Ce rendement augmente quasi-linéairement avec l'énergie du photon depuis la valeur de IP^+ jusqu'à atteindre 1 (ionisation systématique) autour de 17 eV, courbes noires en figure 2.7. Wenzel et collab. [2020] ont déterminé le rendement de photoionisation correspondant à des PAH cationiques. Comme le montre la figure 2.7 (courbes vertes), l'évolution est dans ce cas, moins linéaire du fait de la présence d'un plateau autour de 12 eV. Nous reviendrons sur l'utilisation de ces données en section4.3.

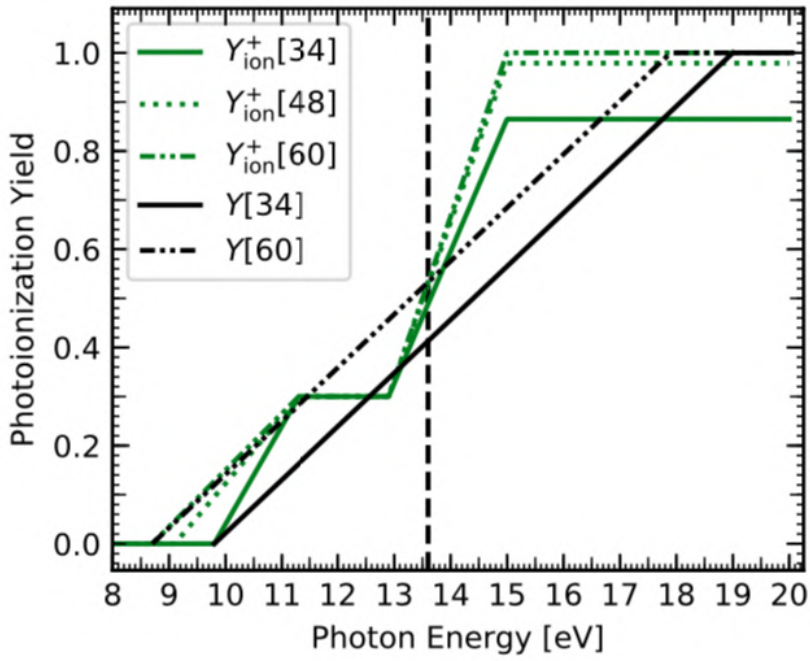

FIGURE 2.7 – Évolution du rendement d'ionisation pour les deux premiers états d'ionisation de plusieurs PAH. Le nombre de carbone des PAH considérés est entre crochets dans la légende. En noir : cas des PAH neutres ; En vert : cas des PAH cations. La ligne verticale en tirets représente l'énergie maximale des photons dans une PDR ($h\nu = 13.6$ eV). Figure issue de Wenzel et collab. [2020].

2.3.3 Photodissociation

La photodissociation est un processus déterminant dans la durée de vie des PAH interstellaires. Par exemple le modèle de Montillaud et collab. [2013] montre que seuls les PAH de plus de typiquement 50 atomes de carbone peuvent survivre dans les PDR. Castellanos et collab. [2018] ont évalué le taux de production d'hydrogène moléculaire par ce processus montrant que les PAH pouvaient avoir une contribution importante à la formation de H_2 dans les PDR. Les voies usuelles de fragmentation des PAH sont la perte de H, H_2 et C_2H_2. L'étude des rendements et des voies de photodissociation des PAH fait l'objet d'études en laboratoire utilisant souvent le rayonnement UV synchrotron (par exemple Rodriguez Castillo et collab. [2018]; West et collab. [2018]). Wenzel et collab. [2020] ont montré que pour des PAH de grande taille (autour de 50 atomes de carbone) l'ionisation est le processus largement dominant. Pour ces espèces, la dissociation n'est à considérer que dans les cas plus rares d'absorption multiple de photons [Montillaud et collab., 2013].

Chapitre 3

Analyse des bandes aromatiques infrarouges par séparation aveugle de sources dans le contexte de la mission JWST

« *Les religions se dissipent telle la brume du matin. Les royaumes s'effondrent telle la dune sous le vent. Seule la science s'inscrit dans le bronze de l'éternité* »

Ulugh Beg (1394-1449)

3.1 Observations et interprétations des bandes aromatiques infrarouges

3.1.1 Observations des bandes aromatiques infrarouges

Les bandes aromatiques infrarouges (AIB, voir Section 1.3.3) dominent le spectre de la Galaxie dans l'IR moyen et sont observées dans différents objets astrophysiques ayant tous en commun de présenter des PDR (Section 1.5), dont des disques protoplanétaires, régions H II, nébuleuses par réflexion, nébuleuses planétaires (voir Tielens 2008), etc. Elles sont aussi observées dans des galaxies proches [Galliano et collab., 2018], et distantes, jusqu'à un redshift de z∼4 [Riechers et collab., 2014]. La figure 3.1 montre des spectres de plusieurs objets où les AIB sont présentes. Même si ces spectres ont la même apparence au premier abord, des variations de second ordre sont présentes concernant :

— la longueur d'onde du pic de certaines bandes, comme la bande à 6.2 μm pouvant varier entre 6.2 et 6.28 μm ou la bande à 7.7 μm pouvant aller de 7.6 à 7.8 μm,

— la largeur des bandes,

— le rapport d'intensité des bandes, notamment entre les bandes à 7.7 et 11.3 μm qui peut être dominantes l'une ou l'autre.

Ces variations sont constatées d'un objet astrophysique à l'autre [Hony et collab., 2001; Peeters et collab., 2002] mais aussi d'une région à une autre à l'intérieur d'un même objet [Cesarsky et collab., 2000; Giard et collab., 1992; Joblin et collab., 1996a; Rapacioli et collab., 2005; Sloan et collab., 1997], voir figure 3.1. Ces variations peuvent être dues aux conditions d'excitation mais aussi à l'évolution physico-chimique des porteurs des AIB. Étant donné la quantité de données apportées par les observatoires successifs, ISO et *Spitzer*, il a été nécessaire d'adopter des méthodes d'analyse pour tenter de relier ces variations spectrales aux conditions physiques des objets astrophysiques et aux caractéristiques physico-chimiques des émetteurs des AIB. La section suivante présente un état de l'art de ces méthodes d'analyse.

3.1.2 Approches d'analyse des AIB

Trois approches existent dans la littérature permettant l'analyse et l'interprétation des AIB en lien avec leurs variations spectrales :

— l'approche taxonomique : classer les spectres selon des critères morphologiques,

— la décomposition individuelle : modéliser chaque bande individuellement et étudier son comportement selon les sources astrophysiques et les conditions d'excitation,

— la décomposition globale : modéliser chaque spectre (i.e. de 3.3 à 18 μm dans l'idéal) comme résultant d'un mélange de spectres plus élémentaires.

Approche taxonomique

Le satellite ISO a permis d'obtenir des spectres de PDR de types différents, présentant des conditions physiques très variées. Peeters et collab. [2002] ont répertorié les variations des AIB observées entre chaque spectre à partir d'un catalogue d'objets astrophysiques obtenus avec l'instrument SWS. Les auteurs ont défini trois classes

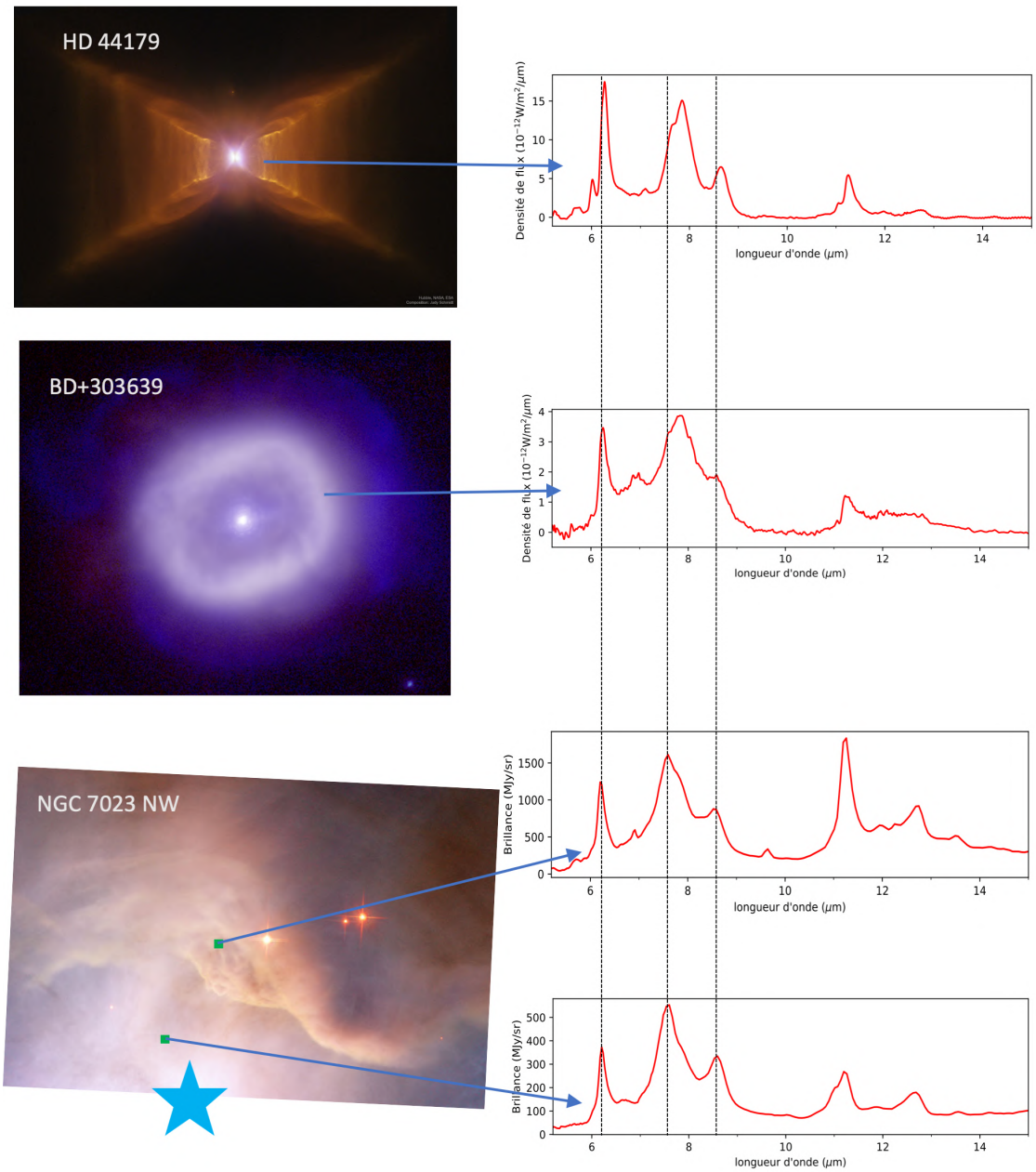

FIGURE 3.1 – Aperçu des variations spectrales des AIB dans différents objets astrophysiques. Les lignes verticales sont placées de gauche à droite à 6.2, 7.6 et 8.6 μm afin de facilité les comparaisons entre les spectres. En haut : Spectre ISO-SWS du voisinage de l'étoile post-AGB HD44179 (continuum soustrait). Crédit : Hubble/NASA/ESA/JudySchmidt. Au milieu : Nébuleuse planétaire BD+303639. Spectre ISO-SWS dont le continuum a été soustrait. Crédits : Gemini Observatory. En bas : Deux spectres extraits à deux positions différentes de la carte hyperspectrale de la nébuleuse par réflexion NGC7023 (image de gauche) obtenue par Werner et collab. [2004a] avec *Spitzer*-IRS. Crédit : NASA/ESA.

spectrales notées $\mathscr{A}$, $\mathscr{B}$ et $\mathscr{C}$ en se basant sur les caractéristiques spectrales de la région de 6 à 9 μm. Chaque classe est définie par la position en longueur d'onde des AIB à 6.2, 7.7 et 8.6 μm. La classe $\mathscr{A}$ concerne les objets ayant un spectre comportant ces trois bandes piquant respectivement à ∼6.22, 7.6 et 8.6 μm, celles de la classe $\mathscr{B}$ piquent à 6.24-6.28, 7.8 et au-delà de 8.62 μm et celles de la classe $\mathscr{C}$ présentant une bande à environ 6.3 μm et une seule structure très large centrée autour de 8.22 μm, avec

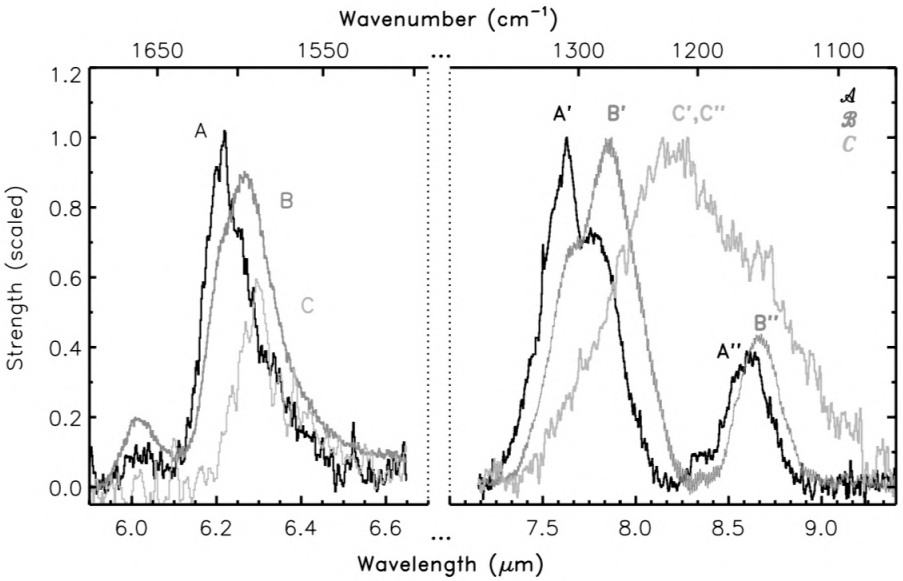

FIGURE 3.2 – Spectres typiques des classes $\mathscr{A}$, $\mathscr{B}$ et $\mathscr{C}$ sur l'intervalle 6-9 μm. Figure issue de Peeters et collab. [2002].

aucune structure distincte à 7.7 et 8.6 μm. Les spectres des régions H II et nébuleuses par réflexion sont de type $\mathscr{A}$ tandis que ceux des nébuleuses planétaires sont plutôt de type $\mathscr{B}$. Les spectres de classe $\mathscr{C}$ sont plus rarement observés, et correspondent à des étoiles en phase post-AGB. Néanmoins, ce dernier type d'objets astrophysiques peut comprendre des spectres des trois classes, montrant son caractère particulier et rapidement évolutif.

Par comparaison des observations avec les données théoriques et expérimentales, Peeters et collab. [2002] attribuent les variations en position et profil de la bande à 6.2 μm à un effet combiné de mélange de familles de PAH et de l'anharmonicité de leurs modes de vibrations. Les auteurs concluent par ailleurs que les variations observées indiquent que les populations de PAH sont fortement affectées par les conditions physiques de leur environnement.

Hony et collab. [2001] comparent de la même manière un catalogue d'objets en se concentrant sur la région du spectre entre 11 et 12.7 μm, où les modes de pliage hors plan des liaisons C-H des PAH émettent. Sans établir de classes, ils remarquent que le rapport d'intensité entre la 11.2 et 12.7 μm évolue selon le type d'objet astrophysique. La bande a 11.2 μm est dominante dans les nébuleuses planétaires tandis que le rapport entre les deux bandes est proche de l'unité dans les régions H II. A partir de calculs de chimie quantique, ils suggèrent que l'émission des différentes bandes dans cette région spectrale est fonction de la structure des PAH.

Décomposition individuelle

Cette approche consiste en un ajustement en composantes multiples afin d'extraire les caractéristiques spectrales individuelles des AIB. La première méthode de ce type a été utilisée par Boulanger et collab. [1998] sur des données ISOCAM-cvf. Leurs ajustements de bandes étaient plus satisfaisants en utilisant un profil de Lorentz plutôt que Gaussien. Les ailes du premier s'étendent plus que celles du second, reproduisant mieux la structure spectrale des AIB.

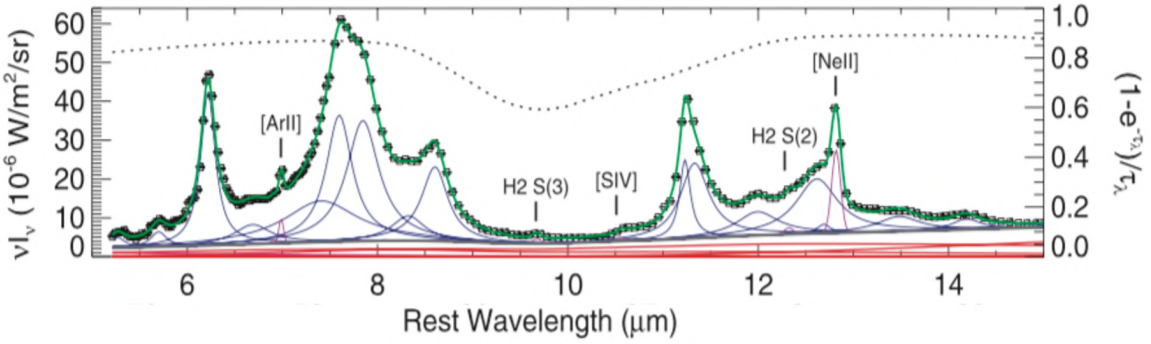

FIGURE 3.3 – Ajustement (courbe verte) du spectre *Spitzer*-IRS (carrés) par l'outil PAHFIT. Les lignes rouges sont les corps noirs modifiés modélisant l'émission thermique de la poussière., les courbes bleues sont les modèles des AIB individuelles et les courbes violettes sont les modèles des raies du gaz. La courbe en pointillés représente l'extinction ajustée correspondant à l'axe des ordonnées de droite. Figure issue de Smith et collab. [2007b].

La modélisation des bandes par un profil Lorentzien a ensuite été reprise par Verstraete et collab. [2001] qui constatent que chaque bande peut être ajustée par au plus deux Lorentziennes. Cependant, l'utilisation de profils Lorentziens n'est pas généralisée, ceux de Drude pouvant aussi montrer de bonnes performances [Li and Draine, 2001]. L'utilisation de l'un des trois profils cités peut aussi avoir une incidence sur la modélisation de l'émission continue sous-jacente aux AIB [Boulanger et collab., 1998; Galliano et collab., 2008].

L'approche de décomposition individuelle a ensuite été étendue avec la création d'un outil d'ajustement des AIB sur tout le domaine spectral de 5 à 35 μm adapté aux données *Spitzer*-IRS, nommé PAHFIT, par Smith et collab. [2007b]. Il permet de modéliser chaque bande avec un profil de Drude ou Gaussien. La figure 3.3 donne un exemple d'ajustement par cet outil, sur le domaine 5-14 μm. Smith et collab. [2007b] modélisent un spectre IR moyen comme étant la somme des AIB, de raies du gaz et d'émission de type continuum qui est représentée par plusieurs corps noirs modifiés à des températures différentes pour les grains de poussière en équilibre thermique ainsi que des corps noirs pour l'émission d'étoiles à proximité. Cette somme d'émissions est affectée par un terme non linéaire d'extinction. Cet outil a été largement utilisé et a permis de montrer l'évolution du rapport d'intensité entre les bandes à 6.2 et 11.2 μm et 7.7 et 11.2 μm, pouvant varier jusqu'à un facteur 10 [Galliano et collab., 2008; Smith et collab., 2007b]. En particulier, Galliano et collab. [2008] ont montré une corrélation entre ces rapports et le facteur d'ionisation γ. Ces rapports permettent aussi d'évaluer les relations entre l'émission des AIB et la formation stellaire dans les autres galaxies.

Indépendamment de PAHFIT et plus récemment, Peeters et collab. [2017]; Stock and Peeters [2017]; Zang et collab. [2019] utilisent un jeu de quatre Gaussiennes pour modéliser et suivre l'évolution spectrale entre 6 et 9 μm. A partir des corrélations entre ces quatre composantes, Peeters et collab. [2017] en déduisent qu'au moins deux populations d'émetteurs contribuent à l'émission de ce domaine.

Globalement, le défi principal dans ce type d'approche est le choix du profil de bandes à adopter. Les AIB peuvent ne pas toutes avoir le même profil sur un même spectre et leur profil est clairement asymétrique, rendant difficile leur modélisation avec une seule composante [Peeters et collab., 2002; Verstraete et collab., 2001]. Ceci peut avoir une conséquence sur la distinction des flux attribuable aux AIB ou à l'émission continue sous-jacente, en particulier dans l'analyse de l'aile rouge de la bande.

Décomposition globale

Dans ce type d'approche, un spectre de AIB est modélisé comme la combinaison de plusieurs spectres plus élémentaires, caractéristiques de populations de PAH. Ces spectres peuvent correspondre à des spectres de PAH (connaissance *a priori*) et être utilisés pour modéliser des spectres observés. Ils peuvent aussi ne pas être connus *a priori*, mais être estimés à partir des observations.

-(i)- Spectres *a priori* : Par cette approche, les spectres observés sont ajustés par la combinaison d'un certain nombre de spectres de PAH. La base de données "NASA Ames PAH IR spectroscopic database" [Bauschlicher et collab., 2010, 2018; Boersma et collab., 2014] contient des milliers de spectres IR théoriques à 0 K (et un nombre plus limité de spectres expérimentaux) pour plusieurs états de charges (-1 à 3). La comparaison d'un spectre d'absorption théorique ou expérimental avec un spectre d'émission provenant d'un environnement astrophysique n'est pas faisable directement. Les molécules qui émettent sont chaudes et le spectre observé résulte d'une cascade d'émission lors du refroidissement de la molécule (cf. section 2.3 et Pech et collab. [2002]). Il est donc nécessaire d'appliquer un modèle d'émission aux spectres IR théoriques tenant compte de l'élargissement et du décalage des bandes spectrales avec la température. Bauschlicher et collab. ont mis à disposition un outil de simulation de spectres d'émission astrophysiques, nommé PAHdb, permettant d'exploiter l'ensemble des spectres de leur base de données. La figure 3.4 montre l'exemple de l'application de l'outil à un spectre *Spitzer*-IRS de M17. Le spectre observé a été ajusté par un ensemble de spectres simulés qui ont été séparés par états de charge.

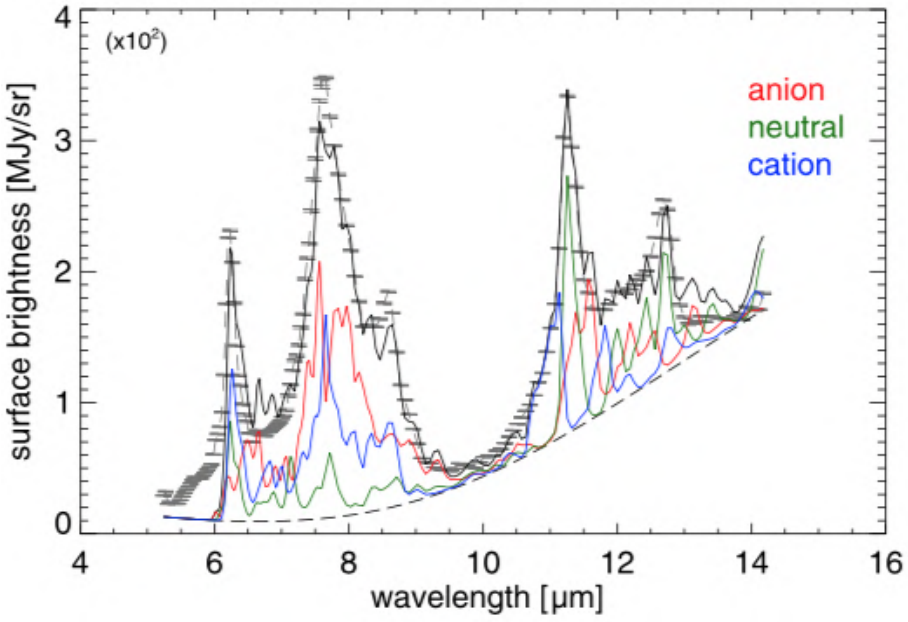

FIGURE 3.4 – Ajustement d'un spectre *Spitzer*-IRS de M17 (points avec barres d'erreurs) avec l'outil PAHdb (ligne noire). Les spectres des différents états de charge des PAH, dont la combinaison donne l'ajustement, sont représentés.

Bien qu'il y ait un grand nombre de spectre IR dans la base de NASA Ames, cet ajustement reste limité par le modèle d'émission qui traite de manière simplifiée les effets liés à la température avec un décalage spectral et une largeur qui ne dépendent pas du mode de vibration ni de la molécule. Boersma et collab. [2013] ont appliqué cette

méthode aux données *Spitzer*-IRS de plusieurs objets et obtiennent une estimation de la distribution en taille et charge des PAH dans ces objets astrophysiques.

-(ii)- Méthode aveugle : Une deuxième méthode de décomposition globale consiste, à l'inverse de la première, à déduire les spectres représentatifs des populations de PAH à partir des observations elles-mêmes. Ces spectres ne sont pas connus à l'avance et le but est de les estimer via l'application d'une méthode dite de séparation aveugle de sources (cf. section 2.2). Cette technique de traitement du signal a été appliquée dans de nombreux domaines autres que l'astrophysique (voir Comon and Jutten [2010] pour plus d'informations). Son application aux jeux de données de spectroscopie et spectro-imagerie infrarouges en astrophysique a permis d'extraire trois spectres différents qui ont été attribués à des familles différentes de porteurs des AIB : des PAH neutres, des PAH cations et des très petits grains en évaporation.[Rapacioli et collab., 2005][Berné et collab., 2007, 2009]. La section suivante dresse en détails l'historique de cette approche dans laquelle ce travail de thèse s'inscrit, ainsi que les apports de son application dans l'interprétation des observations.

3.1.3 Étude des spectres de populations physico-chimiques de PAH par SAS

Extraction de spectres représentatifs par SAS, approche toulousaine

Depuis une quinzaine d'années, les équipes de l'IRAP on développé des approches d'analyse de données hyperspectrales infrarouges grâce à des méthodes de SAS (section 2.2). Rapacioli et collab. [2005] ont analysé des données hyperspectrales ISOCAM-cvf des nébuleuses NGC 7023 et ρ-Ophiucus en utilisant la méthode SVD couplée à une méthode Monte-Carlo. Berné et collab. [2007] ont utilisé la méthode NMF de Lee and Seung [2001] appliquée aux données hyperspectrales *Spitzer*-IRS sur les mêmes objets ainsi que pour Ced 201. Trois spectres différents ont pu être extraits de ces applications, chacun attribuée à une population d'émetteurs des AIB. La figure 3.5 montre ces trois spectres obtenus par Berné et collab. [2007]; Rapacioli et collab. [2005] dans NGC 7023 NW. Un premier spectre est attribué à une population de très petits grains (*Very Small Grains*, VSG en anglais), qui pourraient être des agrégats de PAH [Rapacioli et collab., 2006]. Il se distingue des deux autres par la largeur de ses bandes et la présence d'un continuum à partir de 10 μm. Les deux autres spectres sont attribués à des populations de PAH neutres (PAH^0) et cationiques (PAH^+). Ils présentent des bandes plus fines et aucun continuum. La différence entre les spectres de PAH^0 et PAH^+ réside dans le rapport d'intensité entre les bandes à 7.7 μm et 11.2 μm. Grâce notamment à la distribution spatiale de chacune des populations, Berné et collab. [2007] ont proposé un scénario d'évolution des différentes populations : les VSG, sous l'influence du champ UV ambiant, se détruisent produisant des PAH neutres isolés qui sont à leur tour ionisés. La figure 3.5b montre leur distribution spatiale dans l'objet NGC 7023 NW. Les PAH^+ sont effectivement plus proches de l'étoile HD 200775 tandis que les VSG, plus sensibles au champ UV, se trouvent plus loin de la source de rayonnement.

L'application de la SAS s'est poursuivie avec Rosenberg et collab. [2011] qui ont utilisé la NMF couplée à une méthode Monte-Carlo, sur des données hyperspectrales *Spitzer*-IRS à plus haute spectrale résolution, $R = 600$, sur la portion 10-15 μm. La meilleure résolution spectrale a permis la distinction des bandes autour de 11 μm. Trois spectres ont été extraits qui, couplés à leur ajustement via l'outil PAHdb, ont permis

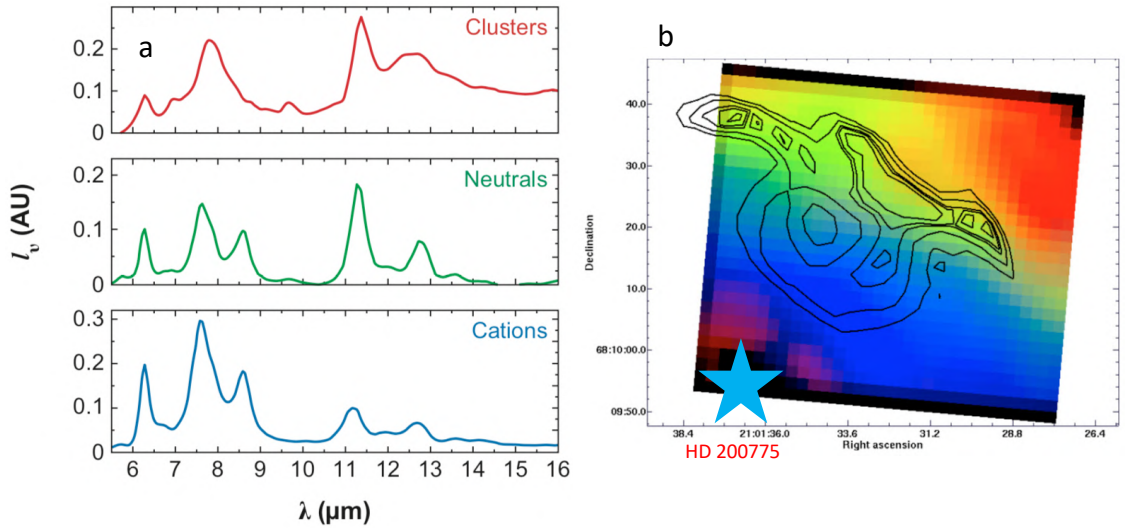

FIGURE 3.5 – *a* : Spectres représentatifs de populations d'émetteurs d'AIB obtenus par Berné et collab. [2007] après application de la NMF sur les données hyperspectrales de NGC 7023 NW par Berné et collab. [2007], issue de la revue faite par Tielens [2008]. *b* : Distribution spatiale des trois populations avec le même code couleur que les spectres de gauche. Les contours noirs correspondent à l'émission à 8 μm obtenue avec l'instrument IRAC à bbord de *Spitzer*. La position de l'étoile HD 200775 y est représenté. Issu de Berné et collab. [2007].

d'attribuer les pics à 11, 11.2 et 11.3,μm aux populations de PAH^+, PAH^0 et VSG, respectivement.

Outil PAHTAT

Une approche dérivée du résultat des applications de la SAS consiste à modéliser tout spectre IR présentant des AIB par une combinaison des spectres de PAH^+, PAH^0 et VSG précédemment extrait des observations par SAS. Cela permet de ne pas appliquer une méthode de SAS systématiquement sur chaque nouveau jeu de données. C'est l'approche qui a émergé avec l'étude de Joblin et collab. [2008]. Les auteurs ont moyenné les spectres estimés obtenu par Rapacioli et collab. [2005] et Berné et collab. [2007] pour construire des spectres modèles à la résolution de ISOCAM, soit $R = 45$, utilisés ensuite pour ajuster des spectres de nébuleuses planétaires. Or, le spectre de ces objets présente en général des caractéristiques de classe $\mathscr{B}$, avec une bande "à 7.7 μm" déplacée à ∼7.8-7.9 μm plutôt qu'à 7.6 μm. Avec leur bande centrée à 7.6 μm, les spectres de PAH^+, PAH^0 ne peuvent expliquer cette différence. Cela a poussé Joblin et collab. [2008] à introduire un spectre d'une quatrième population, construit à partir de celui de la population de PAH^+ en déplaçant la bande principale de 7.6 μm à 7.9 μm et la bande à 8.55 μm à 8.65 μm. Les ajustement des spectres de nébuleuses planétaires se sont alors révélés satisfaisants. Joblin et collab. [2008] ont attribué ce spectre supplémentaire à une population de grands PAH ionisés, appelés PAH^x. La charge de cette population est discutée par ces auteurs sans conclure sur son caractère cationique ou anionique.

Pour finir, Pilleri et collab. [2012] ont présenté un outil d'ajustement des spectres dans l'IR moyen basé sur ces quatre spectres modèles (VSG, PAH^0, PAH^+ et PAH^x) nommé PAH Toulouse Astronomical Templates (PAHTAT pour la suite), à la résolution de *Spitzer*-IRS en mode SH, i.e. $R = 80$. Ils sont montrés en figure 3.6. C'est à partir de cette étude que le terme VSG en évaporation (eVSG) est utilisé pour référer à la population porteuse du spectre présentant des bandes larges et un continuum.

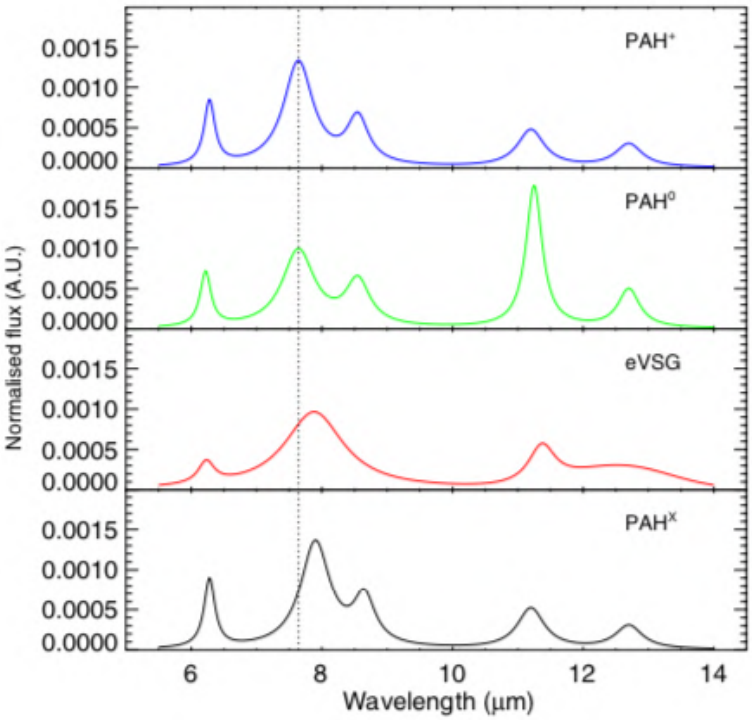

FIGURE 3.6 – Jeu de spectres modèles inclus dans l'outil d'ajustement PAHTAT [Pilleri et collab., 2012]. Les spectres sont normalisés à leur aire intégrée de 5.5 à 14 μm.

Pilleri et collab. [2012] ont par ailleurs mis à jour le spectre correspondant aux eVSG par rapport à celui de Joblin et collab. [2008] en ajoutant un plateau (structure large) sur la région 12 à 14 μm afin de mieux ajuster les spectres observés. L'outil PAHTAT a permis de cartographier la distribution spatiale des différentes familles eVSG, PAH^0, PAH^+ et PAH^x dans les régions Est, Sud et Nord-Ouest de NGC 7023, Nord et Sud de NGC 2023 ainsi que pour l'objet ρ-Ophiucus. En mettant en relation l'intensité du champ UV présent dans ces PDR, notée G_0, et la quantité de carbone inclus dans la population des eVSG, notée f_{evsg}, Pilleri et collab. [2012] ont pu établir une relation empirique entre ces deux quantités, montrant une anti-corrélation entre f_{evsg} et G_0. Ce code est maintenant disponible à l'usage par la communauté, et est applicable à n'importe quel spectre *Spitzer*-IRS présentant des AIB [1].

3.2 Adaptation de MASS-NMF à des observations de grande dimension dans le contexte du JWST

3.2.1 Challenges de l'application de la SAS sur des données JWST

Le JWST apportera la prochaine génération d'observations spectroscopiques infrarouges depuis l'espace, d'une qualité inédite. Elles surpasseront celles des observatoires précédents tels que ISO, *Spitzer* et *Akari*, aussi bien en sensibilité qu'en résolution spatiale, le tout à une résolution spectrale moyenne. Elles parcourront les longueurs

1. Une version IDL du code PAHTAT ainsi que les spectres modèles sont disponibles à l'adresse : http://userpages.irap.omp.eu/~cjoblin/PAHTAT/Site/PAHTAT.html

d'ondes de 0.6 à 28 μm lors de la fusion des données des instruments NIRSpec et MIRI. Les cubes des différentes chaînes de MIRI présenteront une taille entre $17 \times 19 \times 3000$ et $26 \times 29 \times 3000$ points spectraux tandis qu'un jeu de données typique de NIRSpec aura une taille de $30 \times 30 \times 12000$. La mémoire nécessaire pour un cube de données typique sera de l'ordre de ~ 200 Mo contre ~ 1 Mo pour ceux de *Spitzer*-IRS (sur un champ de vue de 70" de diamètre contre ~ 3" $\times 3$" pour NIRSpec). Le grand volume de données nécessite l'utilisation d'algorithmes de SAS efficaces. L'application d'un protocole couplant la NMF à une méthode Monte-Carlo comme décrit en section 2.2.5 est trop coûteuse. Les tests sur données synthétiques de l'utilisation du couplage entre la méthode MASS et la NMF par Boulais [2017] montrent qu'il est possible d'obtenir rapidement la bonne solution. Par ailleurs, aucune des méthodes existantes de SAS ne contient de pré-traitement pour s'affranchir de la contamination des spectres AIB par les continuum et les raies du gaz. Les sections suivantes décrivent d'une part la méthode de pré-traitement qui a été développée durant cette thèse et d'autre par l'adaptation de MASS-NMF aux grands jeux de données infrarouges à venir avec le JWST.

3.2.2 Étape de pré-traitement

Modèle de donnée

L'enjeu du pré-traitement est de séparer les AIB des émissions du continuum et du gaz. Pour cela nous adoptons le modèle de données suivant : un cube hyperspectral issu des observations des instruments NIRSpec et MIRI est une matrice $\boldsymbol{C}(i,j,k)$ où i et j sont les coordonnées spatiales, et k l'indice spectral. $\boldsymbol{C}$ est de dimension de $t \times q \times l$. Le vecteur aux coordonnées spatiales (i,j), noté $\boldsymbol{x}(i,j)$, est un spectre de l éléments. L'hypothèse formulée est que chaque spectre $\boldsymbol{x}(i,j)$ est la somme de spectres contenant l'émission des raies du gaz, $\boldsymbol{x}(i,j)_{gaz}$, des AIB, $\boldsymbol{x}(i,j)_{AIB}$, des continuum stellaires et de la poussière $\boldsymbol{x}(i,j)_{cont}$ et du bruit $n(i,j)$. En résumé on obtient le modèle linéaire suivant :

$$x(i,j) = x(i,j)_{gaz} + x(i,j)_{AIB} + x(i,j)_{cont} + n(i,j). \tag{3.1}$$

L'objectif du pré-traitement se résume ainsi à calculer $\boldsymbol{x}(i,j)_{AIB}$ pour toutes les valeurs de i et j. Ce calcul est fait en ajustant des modèles de $\boldsymbol{x}(i,j)_{gaz}$, $\boldsymbol{x}(i,j)_{AIB}$, et $\boldsymbol{x}(i,j)_{cont}$ à $\boldsymbol{x}(i,j)$. La section suivante décrit les modèles considérés pour $\boldsymbol{x}(i,j)_{gaz}$, $\boldsymbol{x}(i,j)_{AIB}$, et $\boldsymbol{x}(i,j)_{cont}$.

Composantes du modèle linéaire de pré-traitement

Pour une position spatiale (i,j) donnée, $\boldsymbol{x}_{gaz}$ est exprimé comme une somme de Gaussiennes, contenues dans un catalogue. Mathématiquement, cela s'écrit de la manière suivante :

$$\boldsymbol{x}_{gaz} = \boldsymbol{L} \times \boldsymbol{p}, \tag{3.2}$$

où $\mathbf{L}$ est une matrice de dimensions $a \times b$ dont les colonnes (les b composantes de ce catalogue) sont des courbes Gaussiennes de a éléments spectraux et $\boldsymbol{p}$ est le vecteur colonne contenant les b poids correspondant à chaque composante. De la même manière :

$$\boldsymbol{x}_{AIB} = \boldsymbol{U} \times \boldsymbol{g}, \tag{3.3}$$

où $\boldsymbol{U}$ est une matrice de dimensions $a \times d$ dont les colonnes (les d composantes de ce catalogue) sont des courbes Gaussiennes de a éléments spectraux et $\boldsymbol{h}$ est le vecteur

colonne contenant les d poids correspondant à chaque composante. Enfin :

$$\boldsymbol{x}_{cont} = \boldsymbol{E} \times \boldsymbol{g}, \tag{3.4}$$

où $\boldsymbol{E}$ est une matrice $a \times c$ dont les colonnes sont des fonction notées $e(\lambda)$ avec a pixels spectraux et $\boldsymbol{g}$ est le vecteur colonne contenant les c poids correspondant à chaque composante. $e(\lambda)$ est définie par :

$$e(\lambda) = \frac{1}{\lambda} B_\lambda(\lambda, T_j) \times \exp\left(-\tau_\lambda^k\right), \tag{3.5}$$

avec j allant de 0 à j_{max} et k allant de 0 à k_{max} et $B_\lambda(\lambda, T_j)$ la fonction de Planck à la *j-ème* température. On peut constater que le catalogue $\boldsymbol{E}$ consiste en une série de corps noirs modifiés à différentes températures, affectés par de l'extinction avec une opacité τ_λ sur la ligne de visée. En effet dans l'infrarouge moyen la présence de silicates est responsable d'une absorption à 9.7 μm (voir section 1.3.3). C'est un échantillonage en densité de colonne N_H qui permet d'obtenir des valeurs différentes de l'opacité induite par l'extinction interstellaire. La définition de j_{max} et k_{max} se fait par l'utilisateur. Une manière de définir j_{max} est d'utiliser un pas en température entre deux bornes de températures. Le nombre k_{max} d'opacités est défini afin de couvrir une gamme réaliste pour les observations considérées.

Ajustement du modèle aux observations

Pour ajuster le modèle défini ci dessus aux données, il faut calculer les vecteurs $\boldsymbol{p}$, $\boldsymbol{h}$, et $\boldsymbol{g}$. Pour ce faire on définit un vecteur $\boldsymbol{v}$ de longueur $(b+c+d)$ qui est la concaténation en un seul vecteur colonne de $\boldsymbol{p}$, $\boldsymbol{h}$, et $\boldsymbol{g}$. L'estimation, noté $\hat{\boldsymbol{v}}$, du vecteur $\boldsymbol{v}$ est calculée telle que :

$$\hat{\boldsymbol{v}} = \underset{\boldsymbol{v}}{\operatorname{argmin}} \, ||\boldsymbol{H}\boldsymbol{v} - \boldsymbol{x}(i,j)||^2 \quad \text{tq } \boldsymbol{v} \geq 0. \tag{3.6}$$

Dans l'équation ci dessus, $\boldsymbol{H}$ est la matrice de dimensions $a \times (b + c + d)$, issue de la concaténation latérale des matrices catalogues $\boldsymbol{L}$, $\boldsymbol{E}$ et $\boldsymbol{U}$. On extrait de $\hat{\boldsymbol{v}}$ une estimation de $\boldsymbol{h}$, notée $\hat{\boldsymbol{h}}$, qui permet de calculer le vecteur $\hat{\boldsymbol{x}}_{AIB} = \boldsymbol{U} \times \hat{\boldsymbol{h}}$. Cette procédure est répétée pour l'ensemble des positions spatiales (i, j) du cube hyperspectral $\boldsymbol{C}$. Chaque vecteur $\hat{\boldsymbol{x}}_{AIB}$ est ensuite inclus dans une nouvelle matrice 2 D, nommée $\boldsymbol{X}_{AIB}$, de dimension $(t \times q) \times l$.

3.2.3 Étape MASS-NMF

Une fois l'étape de pré-traitement effectuée, il s'agit ensuite d'appliquer MASS-NMF à $\boldsymbol{X}_{AIB}$ (section 2.2.6). Pour cela, le nombre r de spectres de populations d'émetteurs des AIB doit d'abord être estimé (section 2.2.3).

L'application de MASS-NMF peut se faire de deux manières différentes (section 2.2.6), selon les dimensions du problème de SAS. Si la matrice de poids contient un nombre plus important de coefficients que la matrice source, i.e. qu'il y a plus de pixels spatiaux que de pixels spectraux, alors c'est l'initialisation $\boldsymbol{A}^1 = \boldsymbol{A}_{MASS}$ qui est recommandée, appelée MASS-NMF-map. Dans le cas où il y a plus de pixels spectraux que de pixels spatiaux, c'est l'initialisation $\boldsymbol{S}^1 = \boldsymbol{S}_{MASS}$ qui est recommandée, appelée MASS-NMF-spec. Le résultat de l'application de MASS-NMF sur $\boldsymbol{X}_{AIB}$ est un jeu de r spectres élémentaires, aussi dits "représentatifs" de populations d'émetteurs des AIB. La reconstruction des données avec pour base les r spectres représentatifs de populations

d'émetteur permet d'évaluer leur contribution à l'émission dans l'environnement étudié.

Dans le reste du chapitre, le protocole alliant pré-traitement et utilisation de MASS-NMF est appliqué sur un jeu de données réelles issues des observations par l'instrument ISO-SWS (section 2.1.4). Le résultat sera aussi analysé de sorte à identifier les populations d'émetteur de AIB présent dans ce jeu de données.

3.3 Application sur données réelles

3.3.1 Données ISO-SWS

Choix des données

Les données ISO-SWS sont les plus proches d'un point de vue spectral de celles qui seront délivrées par la combinaison des données NIRSpec (0.6-5 μm) et MIRI (4.8-28 μm) du JWST. Leur couverture spectrale contient toutes les AIB dont celles de la région à 3.3 μm qui n'a pas été considérée par les études antérieures de SAS. La résolution spectrale des données SWS est aussi plus grande que celle de IRS. Certains spectres peuvent atteindre $R \sim$3000 mais la plupart des spectres ont une résolution plus réduite de $260 < R < 1200$ [Sloan et collab., 2003].

L'instrument SWS ne permet pas d'obtenir d'informations spatiales sur les objets observés. Pour pallier à ce problème, le jeu de données est construit à partir de spectres de plusieurs objets astrophysiques différents. De plus, la résolution spatiale de l'instrument implique que certains objets sont totalement englobés dans son *beam*. Cela a aussi pour conséquence de mélanger l'émission de plusieurs régions, par exemple de la région H II avec celle de la PDR, induisant l'apparition dans le spectre de raies du gaz ionisé qui ne sont pas observées normalement dans les PDR. Cela constitue un challenge de plus pour tester la qualité de l'extraction des AIB à partir de tels spectres. Un inconvénient supplémentaire est que chaque observation n'a pas été faite avec les mêmes caractéristiques spectrales comme la résolution spectrale, échantillonnage et implique un bruit variable d'un spectre à l'autre. Ces problèmes sont traités dans la section suivante.

Les données ont été extraites de l'archive en ligne de l'observatoire ISO [Salama et collab., 2004]. Elles proviennent toutes du catalogue de données uniformisées traitée par Sloan et collab. [2003]. Les spectres sélectionnés sont ceux présentant des AIB bien définies et pas une extinction très importante. En tout, $n = 31$ spectres ont été retenus. Le tableau 3.1 résume le nom et le type des sources de chaque spectre. Quelques exemples des spectres sélectionnés sont montrés en figure 3.7.

Homogénéisation des données

Caractéristiques spectrales

La résolution spectrale de l'ensemble des spectres est à homogénéiser dans un premier temps avant d'établir un re-échantillonnage commun à tout le jeu de données. Ceci permettra de construire la matrice de données $\boldsymbol{X}$.

Chaque spectre ISO-SWS est le résultat de la mise bout à bout de plusieurs segments spectraux (le *stitching* en anglais) présentant chacun une résolvance différente qui varie avec la longueur d'onde. Afin de préserver la même quantité d'information

Sources	type	vitesse de *scan*
BD +303639	PN	3
IRAS 07027 - 7934	PN	2
He 2 113	PN	2
IRAS 17047 - 5650	PN	1
IRAS 18317 - 0757	CHII	2
IRAS 23030 + 5958	CHII	2
IRAS 19442 + 2427	CHII	2
IRAS 22308 + 5812	CHII	2
IRAS 18032 - 2032	CHII	2
IRAS 23133 + 6050	CHII	2
IRAS17279 - 3350	CHII	2
IRAS 18502 + 0051	CHII	2
W3A0 2219 + 6125	CHII	2
IRAS 12063 - 6259	CHII	2
Orion Bar (1) BRGA	HII	2
Orion Bar (2) D5	HII	2
Orion Bar (3) D5	HII	2
Orion Bar (4) H2S1	HII	4
S106 IRS4	HII	2
G327.3 - 0.5	HII	1
M17 (8) IRAM POS 8	HII	2
M17 (6) IRAM POS 7	HII	2
M17 (5) IRAM POS 6	HII	4
M17 (2) IRAM POS 4	HII	2
M17 (3) IRAM POS 5	HII	2
IRAS 15384-5348	HII	4
NGC7023	RN	2
IRAS 03260 + 3111	RN	3
IRAS 16555 - 4237	RN	2
Red Rectangle	Post AGB	4
M82	Galaxy	4

TABLEAU 3.1 – Liste des sources astrophysique choisies dans l'échantillon avec leur type et vitesse de *scan*.

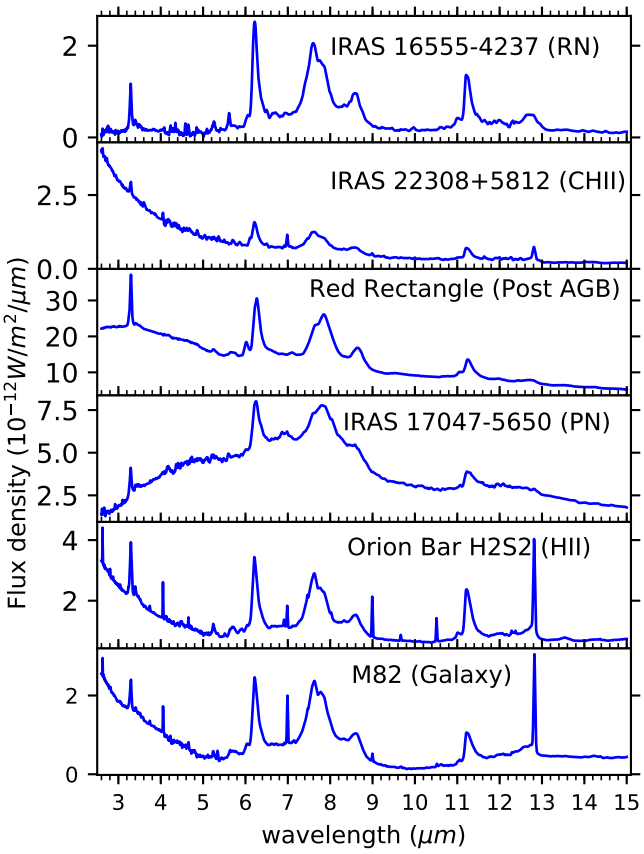

FIGURE 3.7 – Exemple des spectres observés, obtenus avec l'instrument ISO-SWS.

spectrale dans chaque spectre, c'est le mode d'observation présentant la plus basse résolvance qui est choisi comme référence. C'est le cas de la vitesse de *scan* 2 du mode d'observation 01 dont les caractéristiques sont résumées dans le tableau 3.2. La résolution spectrale de chaque segment de chaque spectre observé a été dégradée à la valeur la plus basse rencontrée sur chaque segment du mode 01 à vitesse de *scan* 2. Pour ce faire, chaque segment a été convolué par un noyau Gaussien de largeur équivalente à la résolution correspondante. Ensuite, chaque spectre a été interpolé sur un nouveau vecteur de longueur d'onde, échantillonné à $\frac{\Delta\lambda}{10}$ sur chaque segment, où $\Delta\lambda = \frac{\lambda}{R}$. Il en résulte $n = 31$ spectres sur l'intervalle 2.6-15 μm de $m = 6799$ points spectraux.

Conversion des flux

Segment SWS	Région spectrale (μm)	R	λ_{ref} (μm)
1B	2.6 - 3.02	380	2.6
1D	3.02 - 3.52	420	3.1
1E	3.52 - 4.08	340	3.75
2A	4.08 - 5.30	400	4.08
2B	5.30 - 7.00	260	5.8
2C	7.00 - 12.40	310	7.00
3A	12.40 - 16.50	320	12.9

TABLEAU 3.2 – Nom des segments spectraux d'ISO-SWS avec leurs longueurs d'onde extrêmes ainsi que leur résolution spectrale prise en compte à la longueur d'onde de référence λ_{ref}. Voir figure 4.2 en section 4.5.1.2 de Leech et collab. [2003].

Certain spectres issus du catalogue de Sloan et collab. [2003] présentent des valeurs négatives sur un intervalle non-négligeable de longueurs d'onde. Pour y remédier et obtenir des données non-négatives, chaque spectre présentant des valeurs négative a été rehaussé par l'ajout d'une constante. Cette constante est égale à la différence entre 0 et la plus basse valeur de flux du spectre.

De plus, les spectres ISO-SWS sont présentés en Jansky, i.e. $\propto 10^{-26}\mathrm{W/m^2/Hz}$, en fonction des longueurs d'onde en μm. Pour obtenir une meilleure visualisation du flux dans chaque AIB, les données sont converties en $\mathrm{W/m^2/\mu m}$ (l'aire d'une bande au-dessus de la ligne de base du spectre représente directement le flux observé). Si F_ν et F_λ sont respectivement les densités de flux en fréquence et en longueur d'onde et $\mathrm{d}\nu$ et $\mathrm{d}\lambda$ les incréments infinitésimaux en fréquence et longueur d'onde respectivement, la conservation du flux permet d'écrire :

$$F_\nu d\nu = F_\lambda d\lambda. \tag{3.7}$$

De là, on obtient :

$$F_\lambda = F_\nu \frac{d\nu}{d\lambda} = F_\nu \frac{c}{\lambda^2}. \tag{3.8}$$

C'est ce qui donne la forme particulière de certains spectres à courte longueur d'onde. Ces spectres ont une ligne de base en F_ν qui n'est pas proche de 0 à courte longueur d'onde. La conversion implique une allure en $\propto \frac{1}{\lambda^2}$. Les spectres dans ce cas (M82 par exemple en figure 3.7 ont été laissés avec cette allure qui permet de tester l'ajustement d'une ligne de base à l'allure extrême, correspondant à une contribution stellaire à l'émission continue.

3.3.2 Pré-traitement des données ISO-SWS

Les spectres ISO-SWS homogénéisés décrits ci-dessus sont rangés dans les lignes d'une matrice $\boldsymbol{X}$ de dimensions $n \times m = 31 \times 6799$. La séquence de pré-traitement présentée en section 3.2.2 est appliquée sur cette matrice. Pour respecter strictement la procédure, $\boldsymbol{X}$ est donc considérée comme un cube de dimension $1 \times 31 \times 6799$.

Paramètres du pré-traitement

Afin d'appliquer le pré-traitement sur données réelles, il est nécessaire de définir spécifiquement pour les données ISO-SWS les catalogues $\boldsymbol{L}$, $\boldsymbol{E}$ et $\boldsymbol{U}$.

Catalogue $\boldsymbol{L}$: émission du gaz

La modélisation des raies du gaz dans les données ISO SWS est effectuée, pour chaque raie, par un jeu de n_g Gaussiennes réparties sur un intervalle $\Delta\lambda$ autour de la position centrale de la raie, μ. Cette approche permet de modéliser des raies qui sont non Gaussiennes -ce qui est le cas du fait du profil instrumental de la PSF spectrale de SWS, tout en conservant une approche linéaire telle que décrite en équation (3.6). Pour les 15 raies identifiées dans les données SWS, le tableau 3.3 donne les valeurs des paramètres n_g, $\Delta\lambda$ et μ qui permettent de construire les spectres du catalogue $\boldsymbol{L}$. 185 spectres de Gaussiennes pour reproduire les 15 raies sont créées, ce qui implique une taille $a \times b = 6799 \times 185$ pour la matrice $\boldsymbol{L}$.

Identification	μ (μm)	σ (μm)	$\Delta\lambda$ (μm)	n_g
H I	2.62	0.005	0.02	15
H I	3.74	0.009	0.02	10
H I	4.05	0.009	0.05	20
H I	4.65	0.009	0.04	10
H I	4.84	0.009	0.04	10
H_2 S(5)	6.91	0.012	0.02	10
[Ar II]	6.97	0.009	0.05	10
H I	7.45	0.009	0.04	10
[Ar III]	8.99	0.009	0.06	10
H_2 (S3)	9.66	0.009	0.04	10
[S IV]	10.51	0.009	0.06	10
[Ni II]	10.67	0.009	0.045	10
H_2 (S2)	12.27	0.009	0.04	10
H I	12.36	0.009	0.04	10
[Ne II]	12.81	0.009	0.06	30

TABLEAU 3.3 – Liste des paramètres des Gaussiennes utilisées pour générer la matrice catalogue $\boldsymbol{L}$. Le paramètre μ est la position centrale de la raie.

Catalogue $\boldsymbol{E}$: émission continue

L'émission continue est calculée par l'équation (3.5). Pour pouvoir reproduire le continuum des données ISO-SWS, il a été choisi de discrétiser les températures entre T_{max}=6000 K et T_{min}=40 K avec un pas de ΔT=20 K. Les valeurs en extinction sont échantillonnées en densité de colonne à N_H=0 (pas d'extinction) et N_H=1.6×10^{22} cm^{-2} (extinction $A_V \approx 10$) la dernière valeur N_H=5×10^{22} cm^{-2} (extinction $A_V \approx 25$). La matrice $\boldsymbol{E}$ est, avec cette approche, de dimension $a \times c = 6799 \times 897$.

Catalogue $\boldsymbol{U}$: émission des AIB

Pour créer le catalogue $\boldsymbol{U}$, plusieurs jeux de Gaussiennes de différentes largeurs fixées σ ont été générées, de façon à paver des intervalles en longueur d'onde où des AIB sont présentes. Le tableau 3.4 résume les intervalles pris en compte ainsi que la largeur des différents jeux de Gaussiennes utilisés. La matrice $\boldsymbol{U}$ est de dimension $a \times d = 6799 \times 698$

Application du pré-traitement aux données ISO-SWS

Le problème 3.6 a été optimisé pour la matrice $\boldsymbol{X}$ en utilisant les catalogues de $\boldsymbol{L}$,$\boldsymbol{E}$ et $\boldsymbol{U}$ décrits ci-dessus, avec la fonction *nnls* de la librairie *scipy* du langage Python 3.6. Le calcul appliqué aux observations ISO-SWS prend quelques minutes sur un ordinateur portable doté d'un processeur cadencé à 3.5 GHz. La résolution de ce problème permet d'obtenir $\hat{\boldsymbol{v}}$, qui contient le vecteur de poids $\hat{h}$. Il est ainsi possible de calculer $\hat{\boldsymbol{x}}_{AIB} = \boldsymbol{U} \times \hat{\boldsymbol{h}}$ pour les 31 spectres disponibles, et de construire la matrice $\boldsymbol{X}_{AIB}$ dont les lignes sont les $\hat{\boldsymbol{x}}_{AIB}$. La figure 3.8 montre quelques exemples d'estimations $\hat{\boldsymbol{x}}_{AIB}$. Le reste des estimations sont disponible en Annexe de la version en ligne de Foschino, S. et collab. [2019]. L'ensemble des ajustements et l'extraction des AIB est bon. Cependant, le bruit élevé dans un certain nombre de spectres, notamment à basse longueur d'onde rend,

Intervalle (μm)	nombre de Gaussiennes	σ (μm)
3.25 - 3.55	50	0.005
3.25 - 3.55	50	0.018
5.195 - 5.44	50	0.095
5.195 - 5.44	50	0.05
6.15 - 6.4	30	0.005
5.5 - 6.9	40	0.05
6.91 - 8.8	100	0.3
6.91 - 8.8	100	0.15
6.91 - 8.8	100	0.08
11.0 - 11.7	30	0.08
11.0 - 11.7	30	0.045
11.77 - 12.17	20	0.1
11.77 - 12.17	20	0.05
12.35 - 12.8	9	0.1
12.85 - 13.15	5	0.1
13.2 - 14.6	14	0.1

TABLEAU 3.4 – Liste des paramètres des Gaussiennes utilisées pour générer la matrice catalogue $\boldsymbol{U}$.

incertaine la qualité de l'extraction des bandes à 3.3 et 3.4 μm ainsi que le plateau sous-jacent à cette émission.

3.3.3 Application de MASS-NMF à X_{AIB} construit avec les données ISO-SWS

Choix de r

Avant d'appliquer MASS-NMF à $\boldsymbol{X}_{AIB}$, il faut identifier le nombre de composantes que l'on souhaite extraire. Les méthodes d'estimation du nombre de composantes, r, à inclure dans la résolution de MASS-NMF sont décrites en section 2.2.3. Globalement, aucune d'entre elles n'a montré son efficacité dans le cas du jeu de données ISO-SWS. La première méthode consiste à appliquer une SVD sur $\boldsymbol{X}_{AIB}$ pour obtenir les vecteurs propres de la matrice de covariance. Pour cela, la fonction *svd* de la librairie *numpy.linalg* du langage Python a été utilisée. La figure 3.9 montre les valeurs propres obtenues en échelle logarithmique. Une cassure nette dans les valeurs propre à un certain élément doit permettre d'identifier la dimension du sous-espace de représentation des données qui donne la valeur de r. Dans notre cas, cette cassure n'est pas nette et ne permet pas d'identifier r. En guise de comparaison, le même type de figure provenant du test sur données synthétiques fait par A. Boulais [Boulais, 2017] et montrant une cassure nette à $r = 4$ est presenté en figure 3.9.

La seconde méthode utilisée par Rapacioli et collab. [2005] et recommandée par Berne et collab. [2012] consiste à augmenter r jusqu'à ce que l'écart type du résidu de reconstruction soit équivalent au bruit des données. Dans notre cas, il ne peut pas y avoir de mesure du bruit unique pour l'ensemble du jeu de spectres de AIB. Chaque spectre est issu d'observations effectuées à des dates différentes, utilisant des modes d'observation différents et présentant des bruits très différents. Une dernière méthode utilisée par Berné et collab. [2007] consiste à appliquer la NMF en augmentant la va-

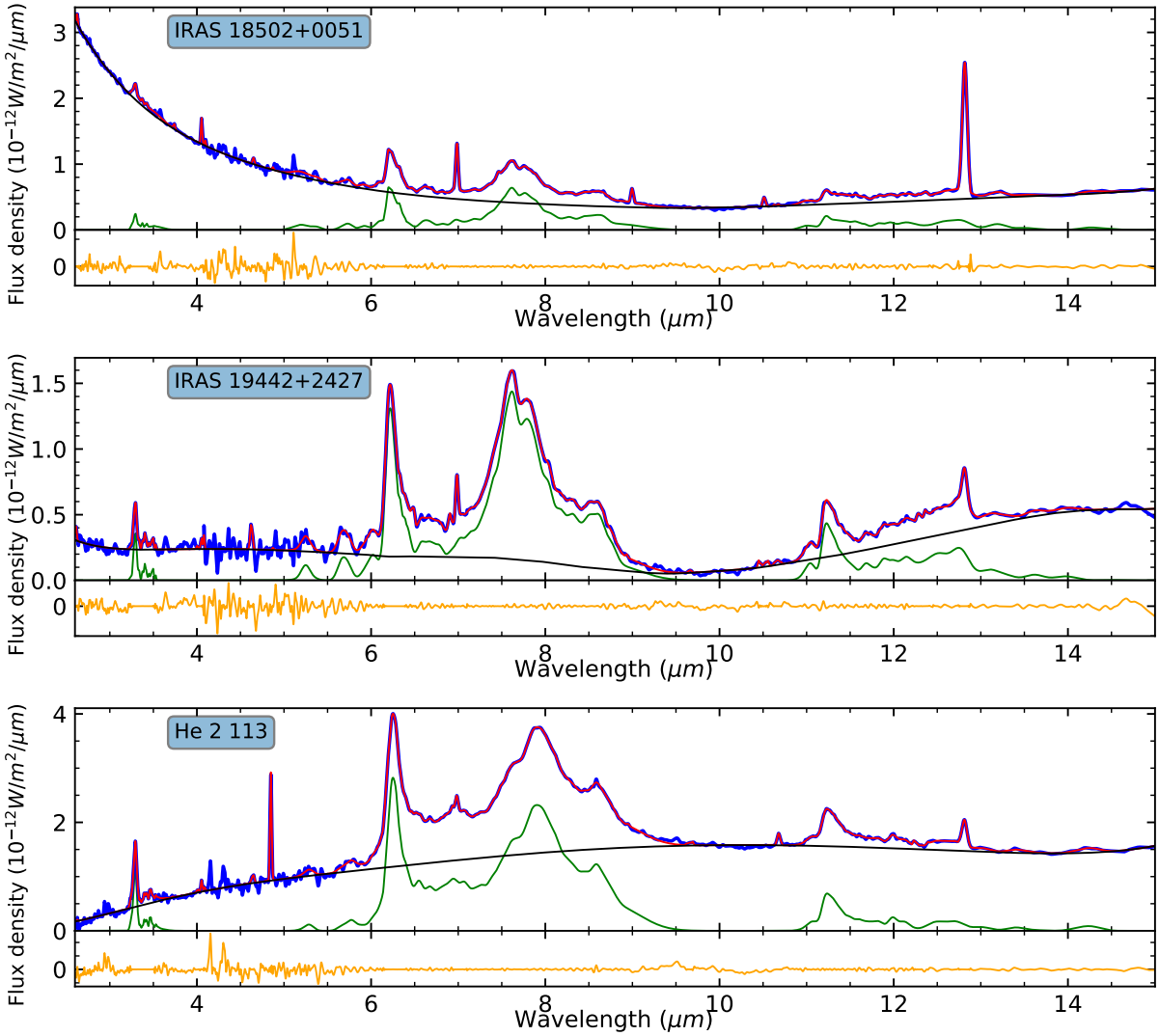

FIGURE 3.8 – Exemples d'extraction de AIB en vert des spectres observés en bleu. La courbe rouge est le modèle des données et celle en orange est le résidu de l'ajustement. Le reste des figures est disponible en annexe de la version en ligne de Foschino, S. et collab. [2019].

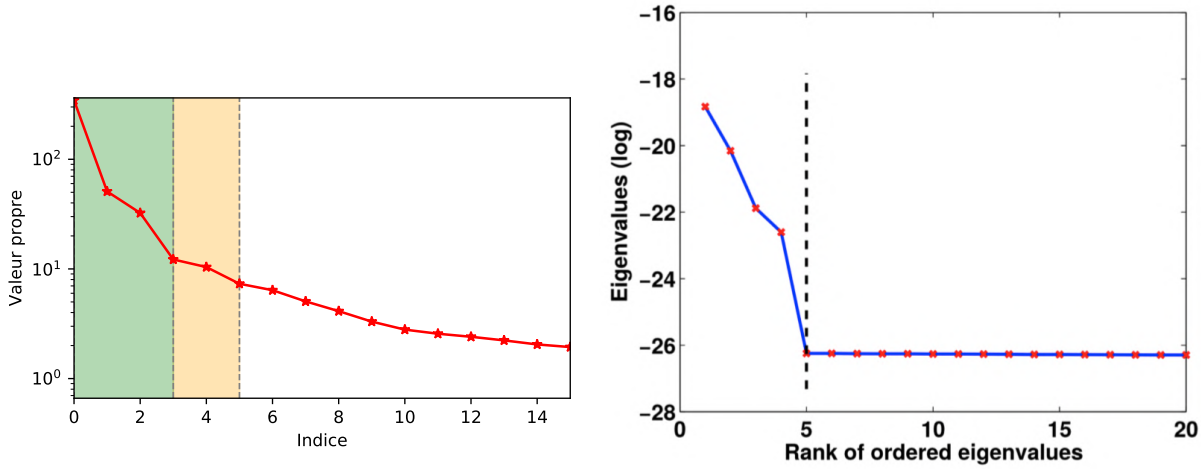

FIGURE 3.9 – À gauche : Valeurs propres ordonnées issues de l'application de la SVD sur $\boldsymbol{X}_{AIB}$. À droite : Même procédé appliqué par A. Boulais à une mélange synthétique de 4 spectres [Boulais, 2017], montrant une cassure nette à $r + 1 = 5$.

leur de r jusqu'à observer des artefacts spectraux dans les solutions. Cette méthode n'est pas efficace non-plus car nous avons pu augmenter r jusqu'à $r = 7$, sans identifier d'artefacts tels que decrits par Berné et collab. [2007]. Le choix de r a été fait en se basant sur les étude précédentes de SAS appliquées à des spectres comportant des AIB. Jusque là, trois populations ont été extraites des jeux de données hyperspectrales de nébuleuses par réflexion par Berné et collab. [2007]; Rapacioli et collab. [2005] et Rosenberg et collab. [2011]. Cependant, l'étude de Joblin et collab. [2008] suggère qu'une quatrième population serait à l'origine du décalage spectral de 7.6 μm à 7.8 μm de la bande principale du complexe à 7.7 μm des spectres de nébuleuses planétaires. Comme le jeu de données comporte des spectres de nébuleuses planétaires et par réflexion, le test est effectué en fixant $r = 4$.

Application de MASS-NMF à $\mathbf{X}_{AIB}$

La méthode MASS-NMF [2] est appliquée à $\boldsymbol{X}_{AIB}$ avec $r = 4$ ce qui permet d'obtenir $\hat{\boldsymbol{S}}$ contenant 4 spectres élémentaires, notés de 1 à 4, et présentés en figure 3.10. Les courbes en tirets sur cette même figure sont les 4 spectres modèles utilisés par l'outil PAHTAT [Pilleri et collab., 2012], décrit en section 3.1.3. On constate que le résultat de MASS-NMF est cohérent avec les spectres de Pilleri et collab. [2012] et ajoute la région à 3.3 μm. À des fins de simplicités, il sera fait référence aux spectres 1 à 4 par le nom des spectres PAHTAT qui leur correspond (figure 3.10), à savoir respectivement des PAH cationiques (PAH^+), PAH neutres (PAH^0), très petits grains en évaporation (eVSG) ainsi que des PAH^x (grands PAH ionisés). Ces attributions seront discutées plus en détails en section 3.5.

2. pour être précis, il s'agit de la méthode MASS-NMF-Spec décrite dans Boulais [2017]

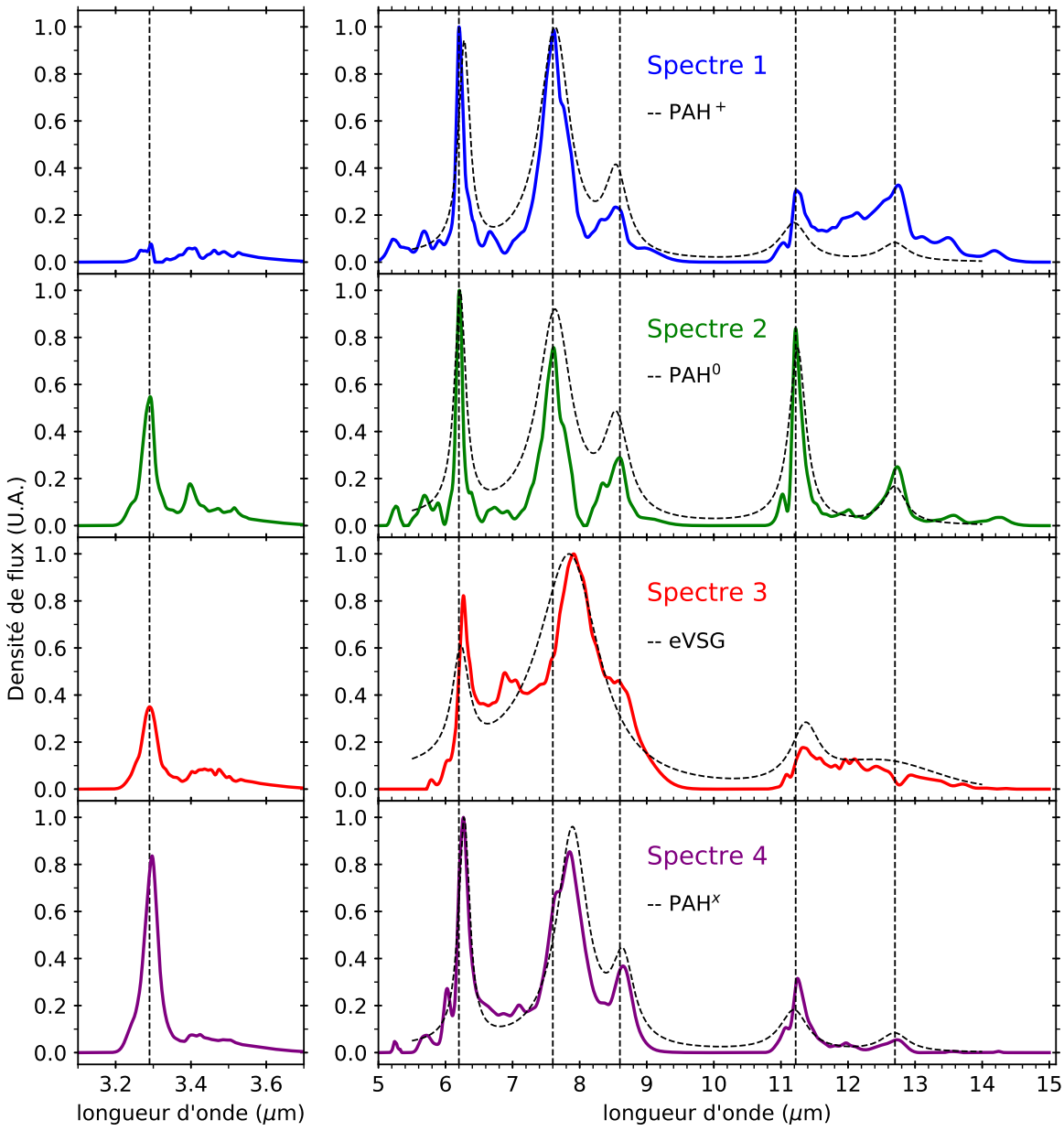

FIGURE 3.10 – Spectres représentatifs obtenus par l'application de MASS-NMF sur $\boldsymbol{X}_{AIB}$. Les courbes en tirets superposées sont les spectres modèles PAHTAT des populations PAH^+, PAH^0, eVSG et PAH^x [Pilleri et collab., 2012]. Les lignes verticales en tirets correspondent aux positions des principales bandes du spectre 2 (à 3.29, 6.20, 7.60, 8.60, 11.22 et 12.70 μm).

3.4 Performances de l'application de MASS-NMF sur l'échantillon ISO-SWS

3.4.1 Reconstruction des données

Rappelons que le but principal de l'approche de décomposition globale par SAS est de pouvoir représenter de façon fiable les variations spectrales observées dans un jeu de données infrarouge moyen par la variation de la contribution d'un nombre réduit de spectres. Les spectres élémentaires sont obtenus à partir de $\boldsymbol{X}_{AIB}$, il est nécessaire de vérifier qu'ils permettent bien ensuite de reconstruire le jeu de données observées $\boldsymbol{X}$. La reconstruction se fait en utilisant le même algorithme que pour le pré-traitement des observations (méthode décrite en section 3.2.2). Le catalogue de Gaussiennes servant à modéliser les AIB est simplement remplacé par les spectres élémentaires obtenus avec MASS-NMF. Cela revient à remplacer, dans la procédure de pré-traitement, les colonnes de la matrice catalogue $\boldsymbol{U}$ par les lignes de la matrice $\hat{\boldsymbol{S}}$ de dimension $r \times m = 4 \times 6799$. La figure 3.12 montre l'exemple des reconstructions de trois spectres ISO-SWS (les mêmes que ceux précédemment utilisés pour illustrer les performances du pré-traitement) avec cette approche. L'intégralité des reconstructions est disponible dans la version en ligne de Foschino, S. et collab. [2019]. Le tableau 3.5 résume la contribution des 4 spectres élémentaires de $\hat{\boldsymbol{S}}$ aux observations ISO-SWS.

Qualitativement, l'ensemble des ajustements est bon. Pour étudier quantitativement la qualité des reconstructions, nous avons considéré le vecteur des résidus qui est la différence entre le spectre observé et reconstruit. L'écart type de ce vecteur est noté $\sigma_{résidu}$. Il est ensuite possible de comparer $\sigma_{résidu}$ aux valeurs de référence de l'incertitude instrumentale donnée par le code de réduction des données effectuée par Sloan et collab. [2003].

La figure 3.11 présente le rapport entre $\sigma_{résidu}$ et ces valeurs de référence. L'écart-type des résidus est de 3 fois plus faible à 2.5 fois plus fort que l'incertitude instrumentale moyenne, ce qui indique que la reconstruction est obtenue avec une qualité qui est comparable à l'incertitude instrumentale.

3.4.2 Rôle du spectre du Rectangle Rouge dans le calcul des spectres élémentaires

La dernière ligne du tableau 3.5 montre la somme du flux émis par chaque spectre élémentaire dans les observations. Le spectre PAH^x est celui qui présente la contribution la plus importante. Ceci est dû à la présence du Rectangle Rouge (RR) dans le jeu de données ISO-SWS. Le flux de cette source, la plus brillante du ciel en infrarouge moyen, est 12 fois plus important que le flux moyen du reste de l'échantillon de spectre et 3 fois plus important que la seconde source la plus brillante (IRAS 07027-7934). Par ailleurs, le spectre PAH^x contribue à hauteur de 96% dans le spectre du RR. Autrement dit, le spectre PAH^x est quasiment identique au spectre du RR. Ce résultat est obtenu du fait du poids important que représente le spectre du RR dans le critère à optimiser, la distance Euclidienne (voir Eq. 2.6), qui dépends quadratiquement de la valeur absolue des éléments dans les spectres. Les valeurs du spectre du RR étant très grandes, et, ce spectre étant différent spectralement des autres en particulier en ce qui concerne la bande à 7.7 μm décalée à 7.85 μm, l'algorithme MASS-NMF favorise une solution dans laquelle un des spectres élémentaires est proche du spectre AIB du RR. Une alternative pour corriger cet effet consisterait à normaliser l'ensemble des spectres

TABLEAU 3.5 – Contribution relative des spectres 1 à 4 dans chaque spectre observé du jeu de données.

Objet	Type	Classe	Spec. 1	Spec. 2	Spec. 3	Spec. 4	Flux total
			PAH^+	PAH^0	$eVSG$	PAH^x	10^{-12}W/m^2
M17 2	HII	A	0.41	0.18	0.28	0.12	2.91
M17 3	HII	A	0.41	0.19	0.23	0.17	2.58
M17 5	HII	A	0.55	0.06	0.25	0.15	2.28
M17 6	HII	A	0.35	0.20	0.31	0.14	0.93
M17 8	HII	A	0.30	0.28	0.32	0.09	0.69
Orion Bar H2S1	HII	A	0.04	0.49	0.16	0.31	3.95
Orion Bar BRGA	HII	A	0.15	0.45	0.01	0.39	3.22
Orion Bar D5 (2)	HII	A	0.15	0.43	0.09	0.33	5.76
Orion Bar D5 (3)	HII	A	0.13	0.44	0.09	0.34	5.33
S106	HII	A	0.36	0.22	0.18	0.25	3.52
G 327.3 - 0.5	HII	A	0.62	0.02	0.10	0.26	4.17
IRAS 15384-5348	HII	A	0.50	0.11	0.19	0.21	2.79
BD +30 3639	PN	B	0.00	0.21	0.61	0.18	4.08
He2 113	PN	B	0.00	0.09	0.70	0.22	4.34
IRAS 07027-7934	PN	B	0.00	0.00	0.87	0.13	1.37
IRAS 17047-5650	PN	B	0.15	0.08	0.75	0.02	7.88
M82	Starburst	A	0.40	0.11	0.36	0.13	3.76
NGC7023	RN	A	0.19	0.38	0.23	0.20	1.05
IRAS 16555-4237	RN	A	0.26	0.33	0.18	0.24	3.06
IRAS 03260+3111	RN	A	0.23	0.32	0.28	0.17	2.36
IRAS 18317-0757	CHII	A	0.55	0.02	0.16	0.27	2.71
IRAS 23030+5958	CHII	A	0.24	0.38	0.00	0.38	0.56
IRAS 19442+2427	CHII	A	0.56	0.01	0.36	0.08	2.20
IRAS 22308+5812	CHII	A	0.31	0.27	0.19	0.23	1.16
IRAS 18032-2032	CHII	A	0.61	0.00	0.22	0.17	1.68
W3A02219+6125	CHII	A	0.51	0.20	0.11	0.18	3.60
IRAS 18502+0051	CHII	A	0.60	0.00	0.15	0.25	1.09
IRAS 17279-3350	CHII	A	0.60	0.00	0.28	0.12	1.08
IRAS 23133+6050	CHII	A	0.27	0.30	0.08	0.35	2.37
IRAS 12063-6259	CHII	A	0.39	0.20	0.16	0.25	1.85
Red Rectangle	Post AGB	B	0.00	0.00	0.04	0.96	22.63
Contribution moyenne			0.32	0.19	0.26	0.23	
Somme des flux	10^{-12}W/m^2		24.85	17.79	25.62	39.84	

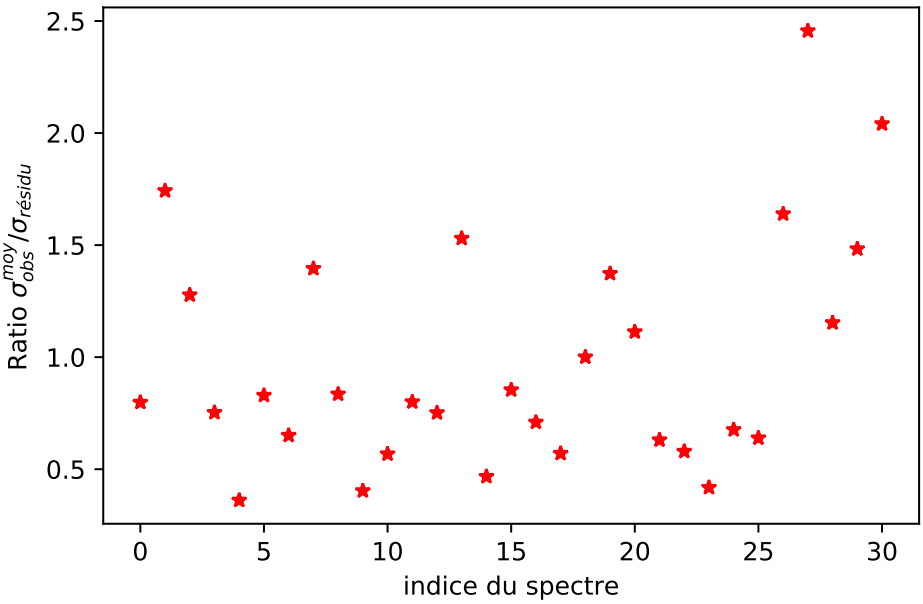

FIGURE 3.11 – Rapport entre l'erreur instrumentale moyenne et l'écart-type du résidu $\sigma_{résidu}$ pour chacun des 31 spectres ISO-SWS considérés. Voir section 3.4.1.

de sorte à obtenir une aire égale à 1 pour chacun d'entre eux. Le résultat de l'extraction des spectres représentatifs sur les données ISO-SWS normalisées est présenté en Annexe A et montre que dans ce cas le spectre PAH^x n'est plus identifié car le poids du spectre qui est dominé par cette population (le spectre du RR) devient négligeable dans le critère vis-à-vis des 30 autres spectres. Cela indique l'importance de considérer des échantillons dans lesquels une bonne représentativité en terme de flux et de spécificité spectroscopique est présente. Dans cette étude, le choix a donc été fait de garder les spécificités en flux et représentativité des spectres telles que présentes dans le jeu de données $\boldsymbol{X}$ initial.

3.4.3 Temps de calcul dans le contexte des données JWST

Le protocole, incluant pré-traitement et application de MASS-NMF sur le jeu de données ISO-SWS se fait en une dizaine de minutes sur un ordinateur portable. Les données JWST contiendront un nombre de points spectraux plusieurs ordres de grandeurs supérieur à celui du jeu de données ISO-SWS de cette étude. Le projet d'observation ERS "Feedback of Massive stars" [Berne et collab., 2017] a pour objectif d'obtenir un relevé hyperspectral de la Barre d'Orion sur plusieurs champs de vue des instruments NIRSpec et MIRI. Il est planifié d'effectuer 9 champs de vues MIRI, apportant un cube de données $\boldsymbol{C}$ de dimension $\sim 50\times50\times20000$ points, soit ~ 230 fois le nombre de points du jeu de données considéré dans ce travail. Le modèle de donnée décrit en section 3.2.2 sera applicable. Afin d'estimer le temps de calcul nécessaire à l'application du protocole proposé dans ce chapitre, j'ai crée un jeu de spectres de 20000 points spectraux chacun à partir des spectres SWS. L'étape de pré-traitement sur un spectre prend entre 30 et 45 secondes. Dans le cas d'un échantillon de spectres tel que celui de Berne et collab. [2017] qui en contient 2500, le temps de calcul nécessaire au pré-traitement total est d'environ 24 h sur un ordinateur portable, donc quelques heures sur un serveur.

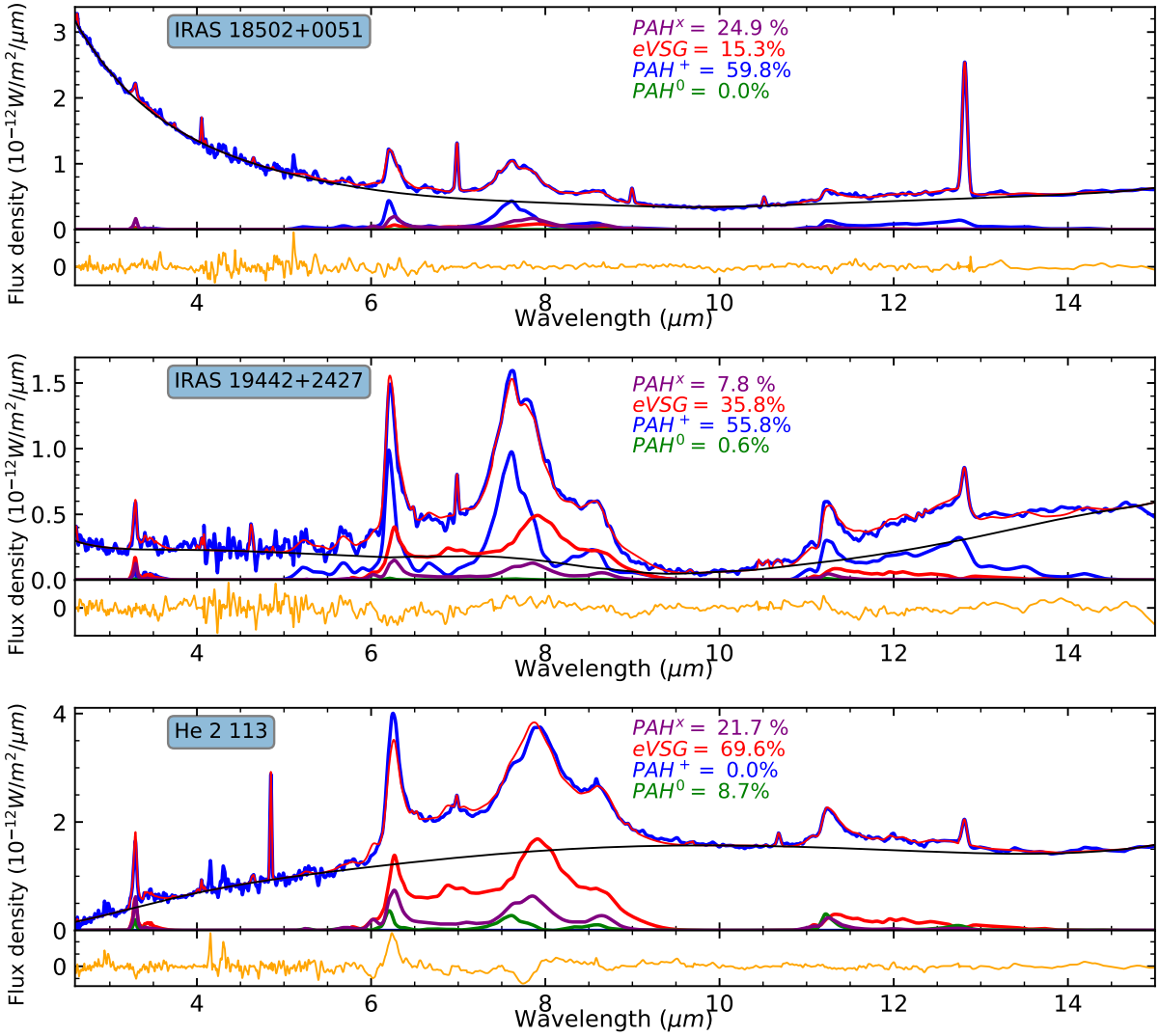

FIGURE 3.12 – Exemples de reconstructions de spectres observés, en utilisant le jeu de spectres représentatifs présenté en figure 3.10. Les notations en pourcentage correspondent aux contributions relatives de ces mêmes spectres représentatifs. Elles sont notées selon les interprétations faites en section 3.5. Les quatre courbes bleu, verte, rouge et violette ayant une ligne de base à 0 représentent les spectres représentatifs 1, 2, 3 et 4 respectivement. Les courbes bleues et rouges les plus hautes sont respectivement les observations et l'ajustement. La courbe noire représente le continuum. Le reste des figures est disponible en Annexe de Foschino, S. et collab. [2019].

C'est ensuite l'étape MASS-NMF qui a été testé sur un jeu de spectres AIB purs de dimensions $50 \times 50 \times 20000$. Il a été généré en combinant linéairement avec des poids aléatoire sur 50×50 positions spatiales les 4 spectres élémentaires extrait du jeu de données ISO-SWS interpolés sur une grille spectrale de 20 000 points. L'application de MASS-NMF à ce jeu de données se fait en environ 350 secondes. En résumé, le temps de calcul est dominé par le pré-traitement, qui prend 24h sur un ordinateur portable. Cette procédure étant facilement parallèlisable, elle prendra qqes heures sur un serveur. L'ensemble de la procédure (pré-traitement + MASS-NMF) pour un cube JWST tel que celui qui sera produit par le projet ERS couvrant l'ensemble de la gamme 0.6-28 μm, prendra donc quelques heures au total, ce qui est tout a fait acceptable.

3.5 Interprétation physique et chimique des résultats

La figure 3.10 représente les spectres représentatifs obtenus par une seule application de MASS-NMF-spec au jeu de données décrit en section 3.3. Ces spectres sont comparés aux spectres modèles obtenus avec l'outil PAHTAT (section 3.1.3). Cette section discute l'apport scientifique de ces nouveaux spectres représentatifs.

3.5.1 Identification des spectres représentatifs

L'interprétation des spectres représentatifs en famille d'espèces chimiques peut se faire via l'étude approfondie de leurs signatures spectrales ainsi que par leur distribution spatiale lorsque celle-ci est disponible.

Dans notre cas, il faut considérer que le jeu de données est limité (par le faible nombre de spectres et par le bruit) et qu'il n'y a pas d'information spatiale. Les caractéristiques spectrales des différentes populations impliquées dans l'émission des AIB qui vont suivre ne sont pas définitives et peuvent être amenées à changer dans les détails lorsque des données d'une plus grande qualité seront disponibles. Cette section illustre la méthodologie employée afin de faire correspondre, s'il y a lieu, les similarités globales de chaque spectre avec les spectres issus des études précédentes. Pour la suite, nous discutons chaque spectre extrait individuellement. Les positions des AIB du spectre 2 pourront être prises arbitrairement comme référence comme sur la figure 3.10.

Spectre 1 : PAH cations. Le premier spectre est dominé par deux bandes centrées à 6.20 et 7.61 μm suivies par d'autres bandes principales à 8.53, 11.24 et 12.75 μm. Il partage ces caractéristiques avec le spectre 2 mais présente un plus grand rapport d'intensité entre la bande à 7.61 μm (mode d'étirement C-C) et celle à 11.20 μm (pliage hors-plan des liaisons C-H). De plus, la région à 3.3 μm (étirement C-H) ne présente aucune émission notable mis à part de très faibles pics. Le rapport favorable à la bande à 7.61 μm est caractéristique d'une population cationique comme l'indique les études expérimentales et théoriques, par exemple DeFrees et collab. [1993]; Hudgins and Allamandola [1999]; Szczepanski and Vala [1993] ainsi que celle par Boersma et collab. [2013] utilisant l'outil PAHdb. L'absence de signal à 3.3 μm est aussi un indice de la nature cationique de cette population car l'ionisation d'un PAH amène à une forte chute de l'intensité de cette bande [Pauzat et collab., 1995]. Pour la suite, le spectre 1 sera nommé PAH^+ pour plus de simplicité. Il est comparé au spectre modèle de PAHTAT correspondant à cette population. En analysant dans les détails, nous notons que

la bande à 6.20 μm est décalée à plus basse longueur d'onde par rapport au spectre modèle PAH^+ de l'outil PAHTAT, pour lequel cette bande pique à 6.27 μm. Cependant la position de cette bande varie dans les différents spectres de cette population qui ont été extraits par SAS. Rapacioli et collab. [2005] l'observent à 6.28 μm tandis que Berné et collab. [2007] la trouve à 6.24 μm. Il est à noter que ce décalage de 0.08 μm entre les deux extrêmes est néanmoins plus faible que la résolution spectrale de 0.14 μm de ISOCAM aux mêmes longueurs d'onde et est donc faiblement significatif. Le spectre 1 est aussi comparable à celui extrait par Rosenberg et collab. [2011] de données *Spitzer*-IRS provenant de NGC 7023, sur la gamme 10-15 μm à une meilleure résolution (R$\sim$600). Cependant cette étude met en évidence une bande à 11.00 μm pour la population de PAH^+, qui est mineure dans notre cas. De plus, nous observons dans le spectre 1 une émission sous-jacente, un plateau de $\sim$11 à $\sim$14 μm, qui est absent dans le spectre PAH^+ de Rosenberg et collab. [2011] et dans celui de PAHTAT (cf. Figure 3.10). Il n'est pas surprenant que ces deux derniers spectres soient semblables car ils proviennent tous deux du même objet : NGC 7023.

Spectre 2 : PAH neutres. Ce spectre présente globalement les mêmes bandes que le spectre 1 dans la gamme de 5 à 15 μm. Il est dominé par les bandes à 6.20, 7.61 et 11.22 μm. Par contre, il présente une émission riche dans la région à 3.3 μm. La bande d'étirement C-H aromatique à 3.3 μm est clairement définie et est accompagnée de bandes "satellites" à 3.40, 3.43, 3.47 et 3.51 μm surplombant un plateau. Le rapport des bandes 7.61 et 11.22 μm en faveur de la seconde indique que cette population est dominée par des molécules neutres (voir par exemple les observations de Compiègne et collab. [2007] et Joblin et collab. [1996b]). Cette identification est aussi supportée par les travaux antérieurs [Berné et collab., 2007; Rapacioli et collab., 2005] et l'obtention du spectre modèle des PAH^0 dans PAHTAT. Il y a également une similarité entre le spectre 2 et celui des PAH^0 obtenu par Rosenberg et collab. [2011] qui présente une bande dominante à 11.20 μm ainsi que la même structure spectrale sur le reste de la gamme jusqu'à 15 μm.

Spectre 3 : eVSG. Ce spectre est très particulier par rapport aux deux précédents. La première différence se situe dans le complexe de bandes à 7.70 μm où l'on observe moins de structures. Cette région est dominée par une seule bande centrée à 7.91 μm dont la largeur intègre la bande à 8.60 μm qui devient moins discernable que dans les spectres 1 et 2. La gamme entre 11 et 15 μm est aussi moins structurée que pour les deux premiers spectres avec tout de même la contribution d'une bande décalée vers le rouge par rapport à la bande à 11.20 μm. Ces observations nous permettent de relier le spectre 3 au spectre d'émission des très petits grains en évaporation (eVSG) décrits par Pilleri et collab. [2012]. À noter que pour la gamme de 10 à 15 μm ce spectre est aussi très semblable au spectre correspondant extrait par Rosenberg et collab. [2011]. Dans notre échantillon, le spectre 3 contribue principalement dans l'émission des nébuleuses planétaires.

Spectre 4 : PAH^x ? C'est la première fois que 4 spectres interprétables physiquement sont extraits par une méthode de SAS. Le spectre 4 est dominé par les bandes à 3.3, 6.2 et 7.7 μm. Il présente une morphologie globalement similaire à celui d'un spectre de PAH avec des caractéristiques plus fines singulières. La bande à 6.2 μm est décalée substantiellement à 6.29 μm. Le pic du complexe de bandes à 7.7 μm présente un important décalage, allant jusqu'à 7.85 μm. La bande à 8.6 μm est également dé-

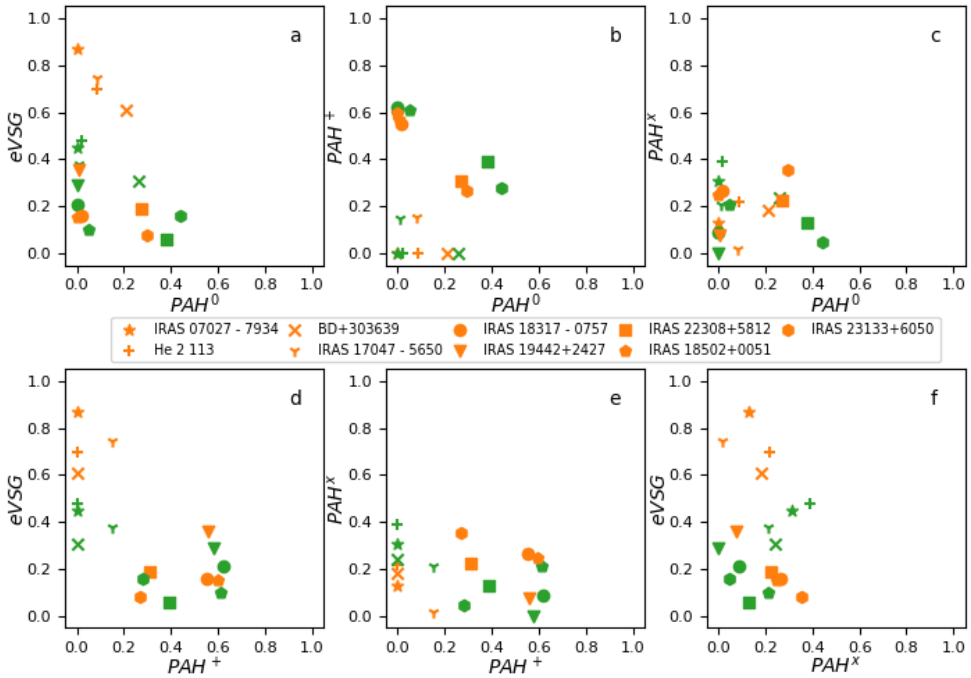

FIGURE 3.13 – Comparaison de la contribution des spectres modèles de Joblin et collab. [2008] et de ceux extraits de cette étude dans les objets en commun aux deux études. Les symboles oranges correspondent à ce travail et les verts à Joblin et collab. [2008].

calée à 8.65 μm alors que sa position est plutôt stable dans les autres spectres (entre 8.56 et 8.60 μm). Le rapport entre la bande à 7.85 μm et celle à 11.2 μm est dominé par la première ce qui suggère que ce spectre est du à une population plutôt ionisée. Ces caractéristiques, i.e. ce rapport et décalage des bandes est fortement similaire aux caractéristiques du spectre des PAH^x (cf. section 3.1.2 (point (ii)) qui y est comparé en figure 3.10 et est intégré dans l'outil PAHTAT. Joblin et collab. [2008] ont attribué ce spectre à une population de PAH ionisés comportant plus de 100 atomes de carbones. Le modèle des PAH^x de PAHTAT a été construit à partir de celui des PAH$^+$ en décalant les bandes à 7.7 et 8.6 μm à plus grande longueur d'onde. Ici, ce spectre est extrait pour la première fois grâce à la SAS. Cependant, il faut garder en tête que son extraction est rendue possible uniquement par la présence du spectre du Rectangle Rouge dans la liste des spectres analysés. Il faudra donc confirmer cette extraction sur un jeu de données plus vaste et plus divers. Pour finir, le spectre 4 présente une émission dans la région à 3.3 μm avec une bande très intense à 3.30 μm suivie d'un faible plateau. Ce résultat peut sembler étonnant au vue de la taille des émetteurs. Cela pourrait indiquer des conditions d'excitation extrêmes qui porteraient ces PAH de plus grande taille à de plus hautes températures que celles atteintes par les PAH émettant le spectre 2.

Les objets astrophysiques galactiques étudiés par Joblin et collab. [2008] sont tous présents dans l'échantillon considéré ici. Pour ajuster les spectres de ces objets, les auteurs ont utilisé les 4 spectres modèles montrés sur la figure 3.10 (courbes en tirets), qui ont été inclus plus tard dans PAHTAT. L'ajustement a été fait à la résolution des spectres modèles, i.e. R=45 car provenant en partie d'observations ISOCAM (voir leur section 3.2 pour la méthode d'ajustement). Ici, nous pouvons comparer les ajustements de nos deux études en terme de contribution relative des 4 populations de porteurs des

AIB (PAH^+, PAH^0, eVSG et PAH^x). La figure 3.13 compare les résultats. Des différences sont observées, notamment dans la contribution des eVSG, plus importante globalement dans notre nouvelle étude que dans celle de Joblin et collab. [2008]. Cependant, les mêmes tendances sont globalement retrouvées et parfois exagérées. Tout en préservant les tendances des populations principales composant les spectres, l'utilisation de données à plus grande résolution spectrale permet d'accéder à une plus grande quantité d'informations spectrales (donc chimiques) sur ces dernières via leurs spectres représentatifs. En plus des AIB principales, une grande quantité de AIB plus faibles qui ne sont pas extraites par les méthodes précédentes sont présentes. Celles dont l'extraction n'est pas sujette à caution sont résumées dans le tableau 3.6.

Implication pour les classes de Peeters et collab. [2002]

L'analyse des AIB faite dans ce travail considère une observation comme le résultat d'une combinaison linéaire des 4 spectres élémentaires décrits plus haut. Peeters et collab. [2002] ont proposé une classification des spectres observés provenant d'une multitude d'objets astrophysiques avec trois classes (voir section 3.1.2). Les spectres extraits correspondant aux populations PAH^+, PAH^0, eVSG et PAH^x (figure 3.10) peuvent être comparés à ces classes. Les deux premiers entrent dans la classe $\mathscr{A}$ tandis que les deux derniers entrent dans la $\mathscr{B}$. Puisqu'aucun objet de l'échantillon de spectres considérés n'est de classe C, aucun spectre extrait ne peut avoir les caractéristiques de cette classe. Les spectres observés de classe $\mathscr{A}$ sont donc dominés par l'émission des populations correspondant aux PAH^+ et PAH^0. Les objets de la classe $\mathscr{B}$ auraient un environnement plus favorable aux eVSG et PAH^x. Ceci est intrigant puisque les PAH^x sont supposés présents dans des environnements fortement irradiés [Joblin et collab., 2008] et que les eVSG seraient justement détruits par de forts rayonnements, entraînant la production de PAH en phase gazeuse [Pilleri et collab., 2012]. Ce mélange peut être dû au fait que l'objet entier est englobé dans le *beam* de l'instrument. La zone la plus irradiée de la nébuleuse planétaire montrerait la présence de PAH^x tandis que les coquilles de poussières présenteraient plus une composition d'eVSG.

3.5.2 Diversité chimique / comparaison inter-spectres

Dans cette section nous nous focaliserons sur les points communs et différences entres les spectres pour en dégager la diversité chimique qui les distingue. Cette analyse est faite en se basant sur la littérature qui a permis d'attribuer certaines bandes à des modes de vibration particuliers des PAH.

Parcourons les spectres par longueurs d'onde croissantes. La région à $3\,\mu$m est considérée pour la première fois dans une étude de SAS. Le spectre 1 (attribué aux PAH^+) mis à part, tous les spectres y présentent une émission non négligeable et différente d'un spectre à l'autre. Pour les PAH, il est connu que l'ionisation va affecter l'émission de la molécule dans cette gamme car la section efficace d'absorption IR est fortement diminuée [Pauzat et collab., 1995]. Néanmoins, cet effet s'atténue avec la taille de la molécule si bien que l'émission d'un PAH cation de $\sim$100 atomes de carbone devient équivalente à celle d'un PAH neutre de même taille [Bauschlicher et collab., 2009]. De plus, les calculs de chimie quantique pour les PAH anions, regroupés dans les

TABLEAU 3.6 – Liste des bandes extraites dans chaque spectre représentatif avec leur possible attribution.

Bande (μm)	Attribution	PAH$^+$	PAH^0	eVSG	PAH^x
		Principaux pics			
3.3	Aromatic C-H stretch	-	3.29	3.29	3.30
6.2	Aromatic C-C stretch	6.20	6.20	6.27	6.27
7.7 complex	Aromatic C-C stretch	7.61	7.61	7.91	7.85
8.6	Aromatic C-H in-plane bend	*8.56* (8.52,8.60)	8.60	8.58	8.65
11.2	Aromatic C-H out-of-plane bend	11.24	11.22	*11.35* (11.32,11.38)	11.25
12.7	Aromatic C-H out-of-plane bend	12.75	12.73	-	12.73
		Épaules/Ailes			
3.3	Aromatic C-H stretch		3.24		3.24
6.2	Aromatic C-C stretch				6.22
7.7 complex	Aromatic C-C stretch	7.52,7.76,7.88	7.53,7.77	7.72,8.06	7.65
8.6	Aromatic C-H in-plane bend		8.53		
12.5	Aromatic C-H out-of-plane bend	12.53	12.50	-	12.50
		Bandes mineures			
3.4	Aliphatic C-H stretch	-	3.40, 3.43	[3.38-3.52]	[3.38-3.52]
3.5	Aliphatic C-H stretch, Combination bands	-	3.47	-	-
3.5	Aliphatic C-H stretch, Combination bands	-	3.51	-	-
5.2	Combination bands/aromatic	5.23	5.26	-	5.24
5.7	Combination bands/aromatic	5.68	5.69	5.79	5.70
6.0	-	-	-	6.02	6.02
6.7	Aromatic C-C stretch ?	6.66	6.73	-	6.62
6.9	Aliphatic C-H deformation ?	-	6.92	6.88	6.87
7.0	?	-	-	7.04	7.09
8.3	Aromatic C-H in-plane bend ?	8.32	8.34	8.45	8.35
11.0	Aromatic C-H out-of-plane bend	11.03	11.02	11.09	11.07
11.5	Aromatic C-H out-of-plane bend	-	-	11.58,11.81	-
12.0	Aromatic C-H out-of-plane bend	11.92	-	11.96	11.97
12.0	Aromatic C-H out-of-plane bend	12.13	-	12.09	-
12.4	Aromatic C-H out-of-plane bend	-	-	12.42	-
13.5	Aromatic C-H out-of-plane bend	13.50	13.56	13.33,13.71	13.56
14.2	Aromatic C-H out-of-plane bend	14.18	14.25	-	14.25
		Plateaux			
3.20-3.60		-	moy.	moy.	faible
6-9		-	-	fort	moy.
11-13.50		moy.	-	moy.	faible

bases de données de Cagliari [3] et de NASA Ames [4], montrent que ces molécules ont une section efficace d'absorption IR plus intense que les neutres [Bauschlicher et collab., 2009]. Ceci permet de renforcer l'attribution des spectres 1, 2 et 4 : le premier est dominé par l'émission des PAH cations tandis que le second l'est par des neutres. La présence d'une bande très intense à 3.28 μm pour le spectre 4 pourrait indiquer que les gros PAH ionisés formant la population des PAH^x seraient des anions plutôt que des cations (les deux hypothèses étaient proposées par Joblin et collab. [2008]).

L'émission dans la gamme à 3.3 μm implique une température d'excitation de $\sim$1500K, ce qui requiert une petite capacité calorifique, i.e. une petite taille de molécule. Les émetteurs du spectre 1 pourraient aussi ne pas être assez excités pour émettre dans cette gamme. Ce serait le cas de PAH cations de grande taille dont la section efficace d'absorption IR n'est pas négligeable mais qui atteignent des températures moins élevées en raison de leur taille. Le problème inverse se pose pour le spectre 3, attribué aux eVSG. Étant donné leur taille (agrégats de PAHs), il n'est pas attendu d'émission à courtes longueurs d'onde de leur part mais plutôt à plus grandes longueurs d'onde [Rapacioli et collab., 2005]. Dans ces problèmes, il faut garder en tête que les spectres représentatifs extraits par NMF reflètent les contributions dominantes dans les variations spectrales d'un échantillon de spectres. La NMF n'a pas la capacité de séparer des composantes spectrales (populations chimiques) dont l'intensité est trop faible comparée aux autres. De plus, si un mélange est présent dans des proportions équivalentes dans tous les spectres alors il ne sera pas possible de séparer les composantes de ce mélange. C'est ainsi que Pilleri et collab. [2015] ont proposé que le spectre des eVSG contenait aussi une contribution de petits PAH émettant dans la région à 3.3 μm.

En plus de la bande à 3.3 μm, le spectre des PAH neutres en présente une bien définie à 3.4 μm ainsi que de plus faibles à 3.43, 3.47 et 3.51 μm. Elles ont toutes été observées dans de nombreux objets astrophysiques [Ohsawa et collab., 2016; Pilleri et collab., 2015; Sloan et collab., 1997] et ont été attribuées aux modes de vibration de liaisons C-H aliphatiques dans des groupes méthyles attachés aux PAH [Joblin et collab., 1996a] ou à des PAH super-hydrogénés (plus riches en atomes d'hydrogène que les PAH standards). De ces espèces est aussi attendue une émission aux environs de 6.9 μm [Steglich et collab., 2013], ce qui est bien le cas pour le spectre 2. Le spectre des eVSG présente aussi une contribution à 6.9 μm qui peut être liée aux composantes aliphatiques de cette population [Pilleri et collab., 2015]. Plus particulièrement, la bande à 3.4 μm et celles qui suivent ne sont détectées que dans la population des PAH^0 indiquant la spécificité chimique de cette population. Pour les spectres d'eVSG et PAH^x, la 3.3 μm est plutôt suivie d'un large plateau centré à $\sim$3.45 μm. Pilleri et collab. [2015] ont détecté ce plateau dans les spectres d'émission de l'objet NGC 7023 mesurés avec l'instrument AKARI-IRC. La forte corrélation entre l'intensité du plateau et celle de la bande à 3.3 μm qu'ils constatent indique que l'émission du plateau provient de liaisons aromatiques (probablement des bandes de combinaison).

Dans la région autour de 6 μm, outre le décalage de 0.07 μm de la bande à 6.2 μm des spectres d'eVSG et PAH^x par rapport à celle des spectres PAH$^+$ et PAH^0, une bande satellite à celle à 6.2 μm est observée très clairement à 6.0 μm dans le spectre des PAH^x et dans une moindre mesure dans celui des eVSG. Elle est observée dans un certain nombre d'objets astrophysiques mais son identification n'est pas claire. Peeters et collab. [2002] l'attribuent à un étirement C=O dans des PAH comportant des atomes

3. Base de données accessible à l'adresse : http://astrochemistry.oa-cagliari.inaf.it/database/pahs.html

4. Base de données accessible à l'adresse :https://www.astrochemistry.org/pahdb/

d'oxygène, Joalland et collab. [2009] l'identifient à un mode C-C dans des complexes de PAH comportant des atomes de silicium et Hsia et collab. [2016] à un mode C=C d'un groupe oléfinique attaché au PAH. [5].

La région autour de 7.7 μm montre une certaine similarité entre les PAH^+ et PAH^0. Pour les deux, le complexe de bandes à 7.7 μm est formé d'une bande à 7.61 μm et d'une autre fusionnée à la première à 7.75 μm. Les deux spectres ne présentent pas de plateau sous-jacent dans cette gamme de longueurs d'onde, plateau qui est plutôt largement associé aux eVSG ainsi qu'aux PAH^x dans une moindre mesure.

Pour finir, la région de 11 à 15 μm présente une morphologie très différente d'un spectre à l'autre. Cette gamme est associée aux modes de pliage hors plan de liaisons C-H, dont la fréquence varie en fonction du nombre d'hydrogènes voisins sur un même cycle [Hony et collab., 2001]. Seul le spectre des PAH^0 présente deux bandes intenses à 11.2 et 12.7 μm et pas ou peu d'émission de continuum sous-jacent. Pour les autres spectres, la part du continuum par rapport aux bandes est plus importante. Il faut noter que Joblin et collab. [2008] ont utilisé deux structures spectrales supplémentaires, larges et centrées à 8.2 et 12 μm pour ajuster le spectre des PNe. Ces bandes sont clairement visibles dans les post-AGB et jeunes PNe pour disparaître ensuite sous l'effet du champ de rayonnement UV. Ces composantes ne sont cependant pas extraites lors de notre utilisation de la NMF. Il est néanmoins possible qu'elles soient contenues dans les 4 spectres élémentaires extraits des données ISO-SWS mais que la méthode n'ait pas réussi à les séparer.

Pour conclure cette discussion, nous pouvons dire que les spectres extraits de notre analyse SAS permettent de contraindre dans une certaine mesure la diversité chimique des différentes populations qui émettent les AIB. En effet, l'échantillon de spectres observés étant limité en quantité et qualité, l'attribution des différentes bandes doit être faite avec prudence. Des résultats plus robustes pourront être obtenus lorsque le JWST nous apportera des données résolues finement aussi bien spectralement que spatialement. Cette finesse spatiale permettra d'atteindre des régions dans lesquelles l'évolution chimique des populations de PAH est directement modulée par des conditions physiques locales telles que le champ UV. Les 4 spectres représentatifs extraits dans notre étude sont cohérents avec les études précédentes et montrent l'importance de l'influence du champ UV. La signature de liaisons aliphatiques, qui sont plus fragiles que les liaisons aromatiques, dans le spectre des PAH^0 confirme que ceux-ci sont produits par évaporation des eVSG qui peuvent générer en continu ces espèces contenant des liaisons aliphatiques [Pilleri et collab., 2015]. La population PAH^+ est par contre plus affectée par le champ UV. Son équilibre d'ionisation implique une interaction continue avec les photons UV, interaction qui a du détruire les liaisons et espèces les plus fragiles. De plus, il est possible que les tendances observées à 3.30 μm et entre 11 et 13 μm révèlent les premières étapes de la déshydrogénation. Néanmoins, peu de données spectrales sont disponibles à ce jour pour tester ce scénario [Pauzat et collab., 1995]. Le spectre des PAH^x indique la présence d'anions mais est sujet à caution étant donné la dépendance à la présence du spectre non-normalisé du RR dans les données. Le spectre des eVSG est de manière générale plus difficile à commenter chimiquement ce qui démontre aussi notre connaissance limitée sur la nature de cette population.

5. Un oléfine est un hydrocarbure cyclique ou non qui contient une liaison double carbone-carbone en plus de celles de base pour un composé aromatique. Voir le IUPAC Gold Book pour plus d'informations [Moss et collab., 1995]

Chapitre 4

Impact des PAH sur le chauffage du gaz dans les régions de photodissociation

« *It's good to have many questions*
About the world that you face
That's how all of human kind's
Discoveries are made »

Terra Lumina, "Shifting Light"

Comme discuté en section 1.5.3, l'effet photoélectrique (effet PE) sur la poussière est la première source de chauffage du gaz dans le milieu interstellaire neutre et dans les PDR jusqu'à une profondeur typique de $A_V = 4$. Les grains de toutes tailles y contribuent, mais d'après les modèles ce sont les plus petits qui sont responsables d'une fraction importante du chauffage. En particulier, il est suspecté que les PAH y jouent un rôle majeur, néanmoins il n'existe pas d'études détaillées pour valider ce point. Il s'agit dans ce chapitre de quantifier ce processus en couplant d'une part l'utilisation de certaines observables permettant de caractériser la charge des PAH et le refroidissement du gaz avec d'autre part une modélisation simple reposant sur des paramètres moléculaires obtenus par la théorie ou l'expérience. La section 4.1 présente les études observationnelles antérieures de la relation entre PAH et chauffage du gaz ainsi que la démarche adoptée dans ce travail afin de quantifier leur contribution à ce dernier. La section 4.2 décrit l'exploitation des données infrarouges du cas d'étude : NGC 7023 NW. La section 4.3 présente un modèle de chauffage du gaz par effet PE sur les PAH que la section 4.4 permet de comparer aux observation afin de quantifier la contribution des PAH au chauffage du gaz.

4.1 État des connaissances du lien entre évolution des PAH et chauffage du gaz

4.1.1 Études observationnelles antérieures

En combinant les données *Herschel*-HIFI observant l'émission de la raie [C II] à 158 μm et le cube hyperspectral *Spitzer*-IRS obtenu par Werner et collab. [2004b], Joblin et collab. [2010] ont montré que l'intensité des AIB et de la raie [C II] à 158 μm sont corrélées spatialement (figure 4.1) en particulier à la surface de la PDR. Ceci indique que les PAH sont certainement responsables d'une fraction importante du chauffage dans cette PDR. Cependant, comme le notent ces auteurs, afin de progresser sur l'étude du bilan énergétique dans cette région, il faudrait inclure le refroidissement par la raie [O I] à 63 μm ainsi qu'une modélisation de la photophysique des PAH.

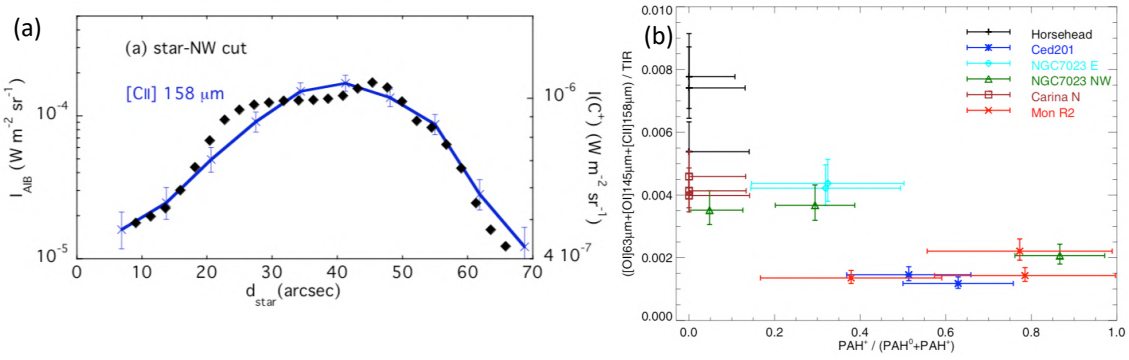

FIGURE 4.1 – (a) : Évolution de l'émission des AIB (losanges noirs, échelle de gauche) et de la raie [C II] à 158 μm (courbe bleue, échelle de droite) avec la distance à HD 200775, issue de Joblin et collab. [2010]. (b) : Évolution de l'efficacité du chauffage du gaz par effet PE avec la fraction de PAH^+ relativement à celle des PAH^0. Issue de Okada et collab. [2013].

Okada et collab. [2013] ont étudié par la suite la relation entre la charge des PAH et l'efficacité du chauffage en combinant des données *Herschel*-PACS ainsi que *Spitzer*-IRS sur un échantillon de 6 PDR. Les données PACS permettent de mesurer les émissions

de refroidissement du gaz et de la poussière, à partir desquelles il est possible de réaliser une estimation de l'efficacité du chauffage par effet PE, notée ϵ, par :

$$\epsilon = \frac{[\mathrm{C\,II}]_{158\mu\mathrm{m}} + [\mathrm{O\,I}]_{145\mu\mathrm{m}} + [\mathrm{O\,I}]_{63\mu\mathrm{m}}}{[\mathrm{C\,II}]_{158\mu\mathrm{m}} + [\mathrm{O\,I}]_{145\mu\mathrm{m}} + [\mathrm{O\,I}]_{63\mu\mathrm{m}} + I_{\mathrm{dust}}}, \tag{4.1}$$

où I_{dust} est l'énergie émise par la poussière de l'infrarouge proche à l'infrarouge lointain (généralement appelée TIR pour *total infrared radiation*, mesurée de 3 à 1100 μm [Dale and Helou, 2002]). Le numérateur de l'équation 4.1 est une mesure de l'énergie injectée dans le gaz lorsque le milieu est à l'équilibre (hypothèse qui est faite ici), le dénominateur permet d'estimer l'énergie totale absorbée par la poussière. Ce qui n'est pas transmis au gaz (i.e. l'énergie émise via les trois raies de O I et C II) chauffe le grain qui émet ensuite dans l'infrarouge. Les données IRS (IR moyen de 5 à 15 μm) contiennent quant à elle à la fois l'émission de refroidissement des PAH ainsi que l'information sur leur charge qu'il est possible d'extraire grâce à l'outil PAHTAT ([Pilleri et collab., 2012], voir aussi section 3.1.3). En combinant les données *Herschel* et *Spitzer* analysées avec PAHTAT sur plusieurs PDR, Okada et collab. [2013] ont mis en évidence un lien possible entre l'évolution de ϵ et celle de la charge des PAH (figure 4.1), indiquant que, comme prédit par les modèles, ϵ diminue quand la charge des grains (ici les PAH) augmente. Néanmoins, les données exploitées par Okada et collab. [2013] ne permettaient pas de faire un suivi spatial du fait d'un mauvais échantillonage des cartes PACS utilisées[1]. La mise en évidence claire du lien entre charge des PAH et chauffage du gaz reste donc à ce stade incertaine.

Plus récemment, Bernard-Salas et collab. [2015] ont présenté des cartes bien échantillonnées spatialement obtenues avec le spectromètre PACS dans les trois principales raies de refroidissement du gaz (C II et O I) dans la nébuleuse NGC 7023. Cependant, ces auteurs se sont concentrés principalement sur l'émission du gaz et n'ont pas effectué de comparaison avec l'évolution des PAH dans l'objet. Ces données permettent d'obtenir une vision précise du bilan thermique de NGC 7023 NW. Son analyse spatiale combinée aux dernières informations moléculaires concernant les PAH obtenues via des expériences de laboratoire et calculs de chimie quantique permet d'estimer indirectement leur contribution au chauffage du gaz. La section suivante décrit la démarche.

4.1.2 Quantification de la contribution des PAH au chauffage du gaz

L'efficacité du chauffage du gaz par effet PE sur la poussière est définie en équation 4.1, et prend en compte le chauffage issu de l'ensemble des grains. Nous proposons une approche indirecte pour estimer la contribution des PAH au chauffage du gaz à partir des observables à disposition. Pour ce faire, ce n'est pas ϵ_{obs} qui est utilisée mais une grandeur définie de façon similaire, ne considérant que l'émission de refroidissement IR des PAH et du gaz :

$$\epsilon_r = \frac{I_{\mathrm{gaz}}}{I_{\mathrm{gaz}} + I_{\mathrm{PAH}}}, \tag{4.2}$$

où I_{gaz} est l'émission de refroidissement du gaz et I_{PAH} celle des PAH.

Il est important de noter que ϵ_r contient le refroidissement due au chauffage par tous les grains et pas seulement des PAH. En réalité, seule une fraction notée α du

1. Ces données avaient été obtenues dans le mode Range Scan, qui couvre toute la gamme spectrale de PACS, mais ne fournit que 25 pixels spatiaux sous-échantillonant la PSF du telescope

refroidissement observé du gaz est due aux PAH. Nous pouvons donc définir l'intensité du refroidissement du gaz réellement due au chauffage des PAH comme :

$$I_{\rm gaz}^{\rm PAH} = \alpha I_{gaz}, \tag{4.3}$$

où α est compris entre 0 et 1. L'efficacité du chauffage par effet photoélectrique des PAH spécifiquement, notée ϵ_{PAH}, peut alors être définie comme :

$$\epsilon_{\rm PAH} = \frac{I_{\rm gaz}^{\rm PAH}}{I_{\rm gaz}^{\rm PAH} + I_{\rm PAH}}, \tag{4.4}$$

donnant la relation suivante en injectant l'équation 4.3 dans l'équation 4.4 :

$$\epsilon_{\rm PAH} = \frac{\alpha I_{gaz}}{\alpha I_{gaz} + I_{\rm PAH}}. \tag{4.5}$$

En combinant l'équation précédente avec l'équation 4.2, il vient :

$$\frac{\epsilon_{\rm PAH}}{\epsilon_r} = \alpha \frac{I_{\rm PAH} + I_{gaz}}{I_{\rm PAH} + \alpha I_{gaz}}. \tag{4.6}$$

Enfin puisqu'en général, $I_{\rm PAH} >> I_{\rm gaz}$, le ratio de l'équation précédente devient :

$$\frac{\epsilon_{\rm PAH}}{\epsilon_r} \approx \alpha. \tag{4.7}$$

Par conséquent, la fraction α du refroidissement du gaz due au chauffage par effet PE sur les PAH spécifiquement peut être estimé par le ratio entre ϵ_{PAH} et ϵ_r. La première quantité est calculé via le modèle moléculaire théorique décrit en section 4.3, l'efficacité réduite est, elle, dérivée des observations décrites en section suivante.

4.1.3 La région de photodissociation NGC 7023 NW

NGC 7023 est une nébuleuse par réflexion qui se trouve dans la constellation de Céphée. La figure 4.2 en présente la partie Nord-Ouest. En son centre se trouve HD 200775, une étoile double spectroscopique composée de deux étoiles Herbig Be de type B3V et B5 respectivement [Finkenzeller, 1985; Racine, 1968] accompagnées d'un troisième compagnon [Li et collab., 1994], le tout situé à une distance de 320 pc du Soleil [Benisty et collab., 2013]. Cette valeur de distance est obtenue via une mise à jour des paramètres orbitaux des deux principales étoiles. D'autres mesures ont été dérivées des observations du satellite Hipparcos, comme 430 pc [van den Ancker et collab., 1997] et plus tard 530 pc [van Leeuwen, 2007]. HD 200775 illumine directement la surface du nuage moléculaire. Plusieurs PDR denses ont été détectées, notamment à 42" au nord-ouest (NW), 70" au Sud et 140" à l'Est de l'étoile centrale. La première, notée NGC 7023 NW, est la plus lumineuse en infrarouge, elle est vue de côté (*edge-on*) ce qui permet d'observer sa structure stratifiée due à l'atténuation du champ de rayonnement avec la profondeur (voir figure 1.9). L'observation et modélisation de cette PDR indique qu'elle contient des structures filamentaires denses ($n_H \sim 10^{5-6}$cm^{-3}) dans un milieu globalement moins dense ($n_H \sim 10^4$cm^{-3}) [Chokshi et collab., 1988; Fuente et collab., 1996; Joblin et collab., 2018; Lemaire et collab., 1996]. Plusieurs estimations concordent sur la valeur du flux UV au niveau du front de dissociation de G_0=2600 [Chokshi et collab., 1988; Joblin et collab., 2018; Pilleri et collab., 2012].

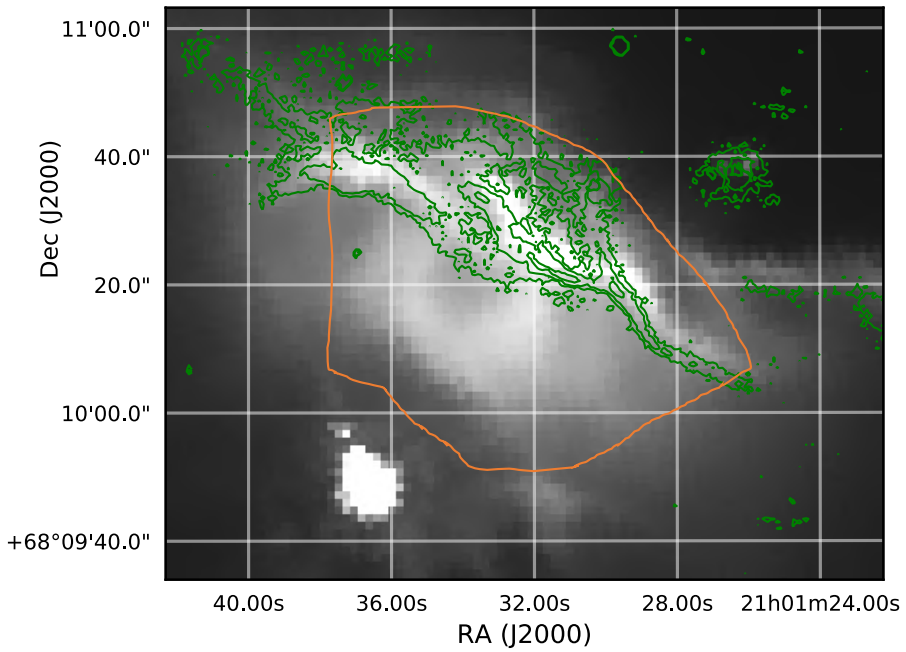

FIGURE 4.2 – Vue générale de la partie NGC 7023 NW. Nuances de gris : image Spitzer-IRAC à 8 μm ; Contours vert : émission rovibrationnelle S(1) 1-0 du H_2 à 2.121 μm [Lemaire et collab., 1996] ; Contours orange : champ de vue commun exploité dans cette étude, décrit en section 4.2.2.

4.2 Mesure observationnelle de ϵ_r dans NGC 7023

4.2.1 Données infrarouges

Émission du gaz

Bernard-Salas et collab. [2015] ont présenté les observations des raies de refroidissement du gaz [C II] à 158 μm, [O I] à 145 μm et [O I] à 63 μm dans NGC 7023 NW obtenues avec *Herschel*-PACS, auxquelles ils ont comparé celle de [C I], H_2, CO et des valeurs haute de celles H_2O et CH^+ (non-détectées dans les données *Herschel*-SPIRE).

Leur étude du bilan du refroidissement du gaz dans toute la PDR et cavité indique qu'il est dominé par la raie [O I] à 63 μm, à hauteur de 30%, au minimum. La raie de [C II] à 158 μm contribue plus dans la cavité séparant HD 200775 du front de dissociation, de l'ordre de 30 à 45%. La contribution de H_2 et très localisée à la surface du nuage moléculaire, avec une contribution de l'ordre de 30 à ∼45% du refroidissement dans cette région. Les autres espèces comme C I, CO, H_2O et CH^+ contribuent de façon mineure (5% en cumulé) et seront ignorées dans notre étude.

Ainsi, afin d'estimer observationnellement l'efficacité PE dans cet objet, ce sont les raies principales, i.e. celles des [C II] et [O I], qui sont prises en compte dans cette étude. En complément des cartes PACS s'ajoutent celles des transitions rotationnelles 0-0 S(1), S(2) et S(3) du H_2 à 17.035, 12.278 et 9.7 μm respectivement. Les cartes de d'émission des raies S(2) et S(3) du H_2 exploitées par Bernard-Salas et collab. [2015] ont été extraites via l'application de PAHTAT [Pilleri et collab., 2012] sur le cube hyperspectral *Spitzer*-IRS en mode SL obtenu par Werner et collab. [2004b]. La carte de la transition S(1) a été extraite avec le logiciel CUBISM [Smith et collab., 2007a] du cube *Spitzer*-IRS en mode LL obtenu par Werner et collab. [2004b].

Les cartes d'émission de chacune des raies de refroidissement considérées dans cette

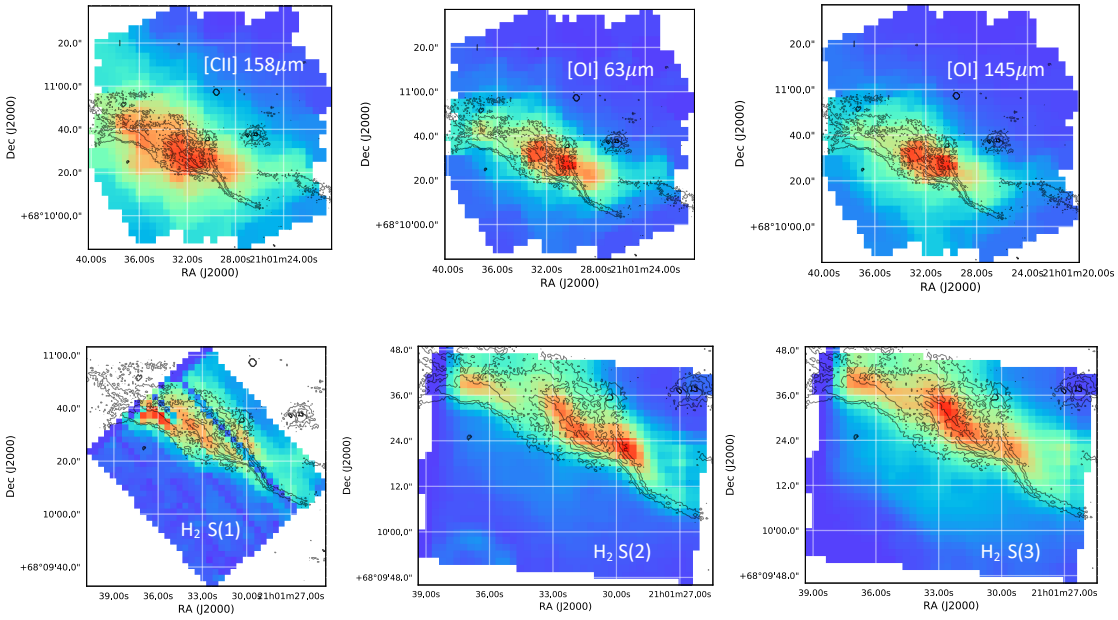

FIGURE 4.3 – Cartes d'émissions des raies de refroidissement du gaz prisent en compte dans cette étude. L'émission de la transition v=1-0 S(1) du H_2 à 2.121 μm, traçant le front de dissociation de la PDR, est représentée en contours noirs sur chaque image. Les trois cartes du haut représentent l'émission des transitions [C II] à 158 μm, [O I] à 145 μm et [O I] à 63 μm, observées via l'instrument *Herschel*-PACS à une résolution spatiale de 11", 8.8" et 4.5" respectivement. Les trois du bas sont les cartes des transitions rotationnelles pures du H_2 S(1), S(2) et S(3) à 17.035, 12.278 et 9.7 μm respectivement. Les cartes S(2) et S(3) proviennent du module SL de l'instrument *Spitzer*-IRS à une résolution spatiale de 3.6" tandis que celle de S(1) l'est du module IRS-LL à une résolution spatiale de 10".

étude sont présentées en figure 4.3 à leur résolution spatiale originale. L'émission rovibrationnelle 1-0 S(1) à 2.121 μm du H_2 obtenue par Lemaire et collab. [1996] et permettant de tracer le front de dissociation de la PDR est ajoutée en contours (à noter que cette raie n'intervient pas dans le refroidissement du gaz, car elle est excitée directement par l'UV).

Émission des PAH

La cartographie hyperspectrale de l'émission des PAH dans NGC 7023 NW a été obtenue par Werner et collab. [2004b] avec l'instrument IRS, à bord du télescope spatial *Spitzer*. La figure 4.4 montre le cube IRS-SL à 8 μm ainsi que deux spectres extraits de deux positions différentes. Le cube a été acquis à une résolution spatiale de 3.6", échantillonné par des pixels de 1.8", et à une résolution spectrale $R \sim 80$, le tout sur un intervalle spectral allant de 5.5 à 15 μm (mode SL). Il prend en compte un champ de vue allant de HD 200775 jusqu'à $\sim$ 80" au Nord-Ouest de l'étoile. Ceci permet de suivre l'évolution des PAH et de leurs populations sur une large gamme de conditions d'excitation [Berné et collab., 2007; Pilleri et collab., 2012; Rapacioli et collab., 2005; Rosenberg et collab., 2011].

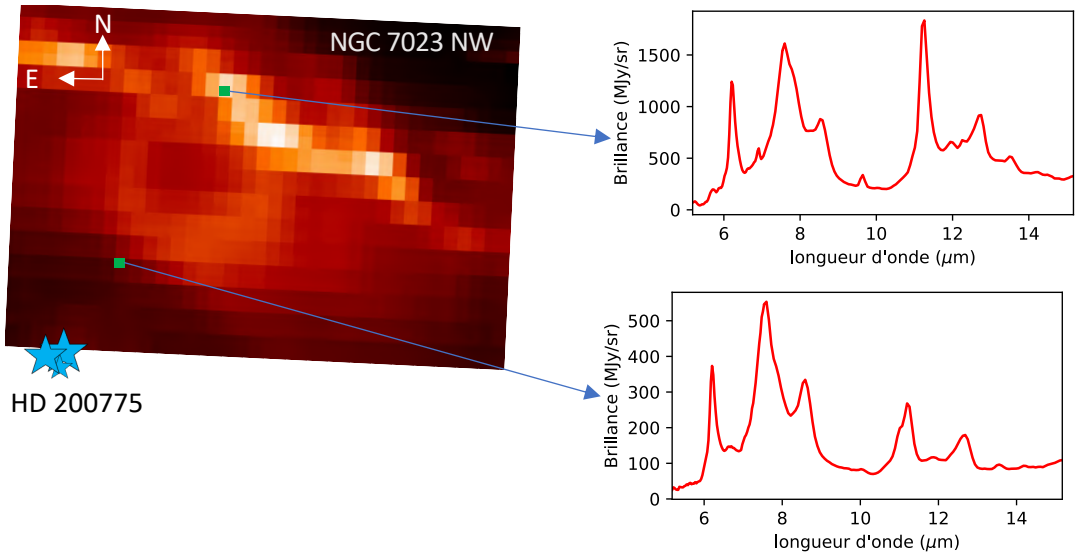

FIGURE 4.4 – Image à 8 μm extraite du cube *Sptizer*-IRS en mode SL obtenu par Werner et collab. [2004b]. Les spectres proviennent des deux pixels notés en vert.

4.2.2 Extraction des cartes

Zone spatiale d'étude

Pour cette étude, nous avons limité le champ de vue sur lequel les cartes ont été réalisées : les parties à moins de 20" de l'étoile et à plus de 60" sont exclues. La zone d'étude résultante est presentée en contours sur la figure 4.2. En effet, dans les régions les plus proches de l'étoile, comme le montre la figure B.1, les ajustements PAHTAT des spectres *Spitzer*-IRS proche de l'étoile double (<20") sont de mauvaise qualité en raison d'une forte émission autour de 9 μm, et la présence de bandes dues à d'autres espèces comme les fullerènes [Berné et collab., 2013]. Au delà de 60", le rapport signal sur bruit des spectres IRS devient faible (voir figure B.1) et rend les ajustements avec PAHTAT moins pertinents. Par ailleurs, exclure les régions les plus lointaines de l'étoile permet de limiter l'importance des effets d'opacité dans l'IR moyen sur la ligne de visée (voir figure 4 de l'étude de Pilleri et collab. [2012]).

Carte de refroidissement du gaz

Le refroidissement total du gaz I_{gaz} est estimé sur le champ de vue défini ci-dessus par la somme des émissions dans les raies [O I] à 63 et 145 μm et [C II] à 158 μm ainsi que dans les raies rotationnelles v=0-0 S(1), S(2) et S(3) du H_2. Au préalable, la résolution spatiale de chacune des cartes présentées en figure 4.3 a été dégradée à 11" par convolution avec un noyau gaussien et leur grille de coordonnées a été reprojetée sur celle de la carte PACS de la raie [C II] à 158 μm. La carte résultante de l'émission de refroidissement du gaz dans NGC 7023 NW est présentée en figure 4.5(a).

Cartes des propriétés des PAH

L'outil PAHTAT [Pilleri et collab., 2012] est utilisé pour ajuster chaque spectre IRS sur le champ de vue défini ci-dessus et obtenir l'intensité intégrée de l'émission des PAH^+, PAH^0 (respectivement I_{PAH^+} et I_{PAH^0}) ainsi que l'intensité totale des AIB

(I_{AIB}). La carte de fraction d'ionisation f_{ion} des PAH est ensuite calculée comme suit :

$$f_{ion}^{Obs} = \frac{I_{PAH^+}}{I_{PAH^+} + I_{PAH^0}}. \tag{4.8}$$

La résolution spatiale des cartes de I_{AIB} et de la fraction d'ionisation f_{ion}^{Obs} des PAH a ensuite été dégradée de 3.6" à 11" et leur grille de coordonnées a été reprojetée sur celle de la carte PACS du [C II] à 158 μm. Les cartes résultantes sont présentées en figure 4.5 (b) et (c).

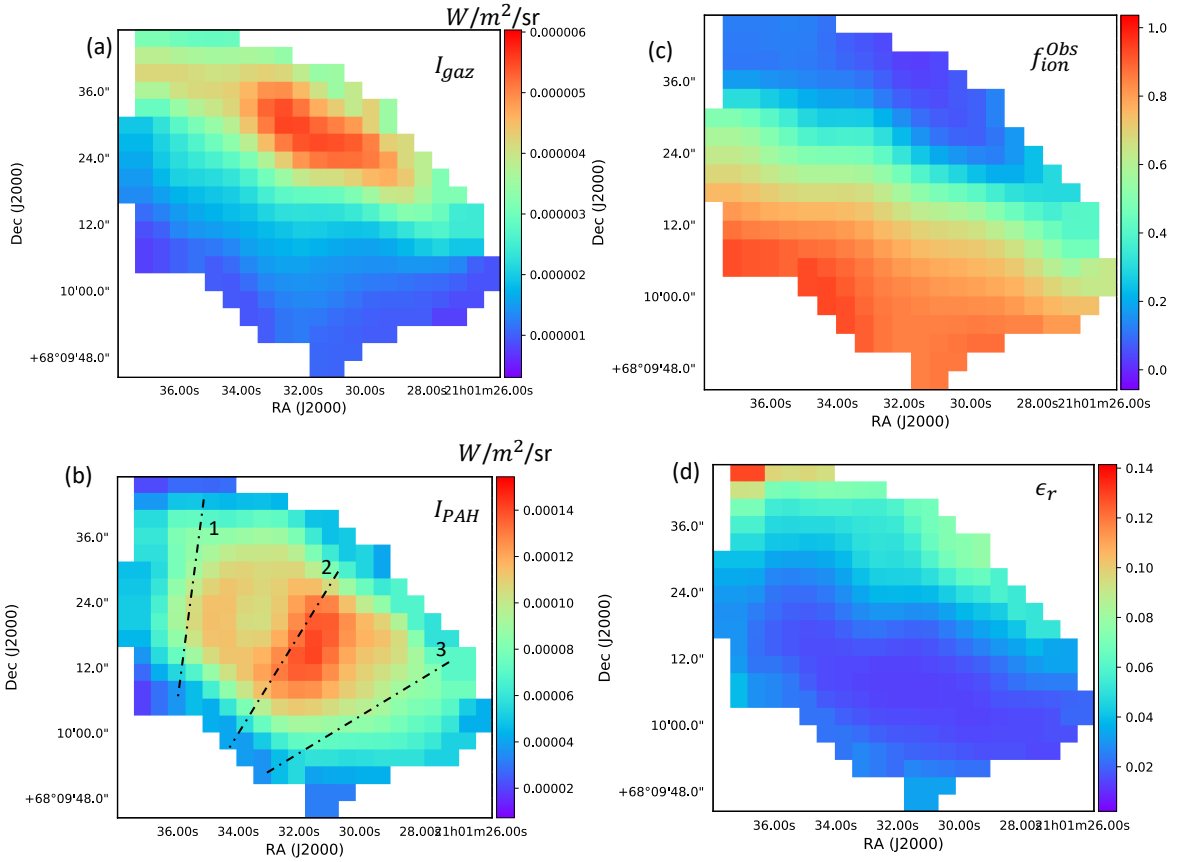

FIGURE 4.5 – (a) : Carte de l'émission de refroidissement du gaz ; (b) : Carte de l'intensité intégrée des PAH ; (c) : Carte de la fraction d'ionisation f_{ion}^{Obs} ; (d) : Carte de l'efficacité restreinte ϵ_r.

Carte de l'efficacité du chauffage par effet PE sur les PAH

L'efficacité du chauffage PE réduite, notée ϵ_r, est extraite des observations comme définie en eq. 4.2 La carte de ϵ_r est présentée en figure 4.5(d).

4.3 Chauffage du gaz par effet photoélectrique sur les PAH : approche moléculaire

Nous décrivons ci-dessous les propriétés physico-chimiques des PAH qui seront utilisée dans le calcul du chauffage PE (section 4.3.2). Ces propriétés sont obtenues soit par des calculs de chimie quantique ou des expériences de laboratoire (section 4.3.1).

4.3.1 Absorption d'un photon UV : propriétés moléculaires

Les processus photophysiques impliqués dans la relaxation suivant l'absorption d'un photon UV ont été décrits en section 2.3. En résumé ils impliquent une compétition entre l'ionisation, la dissociation et le refroidissement radiatif. Nous nous limitons ici à la description de l'ionisation en lien avec le chauffage photoélectrique. Nous ne considérons pas le cas des anions. En effet, Andrews et collab. [2016] estiment qu'ils représentent $\sim 15\%$ des états de charge des PAH à un $A_V = 2$ dans NGC 7023 NW, présentant un paramètre d'ionisation $\gamma \sim 10^3\,\mathrm{K}^{1/2}\mathrm{cm}^3$. Comme nous le verrons par la suite, dans les régions de NGC 7023 étudiées ici $\gamma > 10^3\,\mathrm{K}^{1/2}\mathrm{cm}^3$ dans la plus grande partie de la nébuleuse que nous avons étudiée, à l'exception éventuelle du point le plus éloigné de l'étoile.

Par la suite, la charge Z correspond donc aux états de charge $Z \geq 0$. Plusieurs paramètres moléculaires des PAH sont alors à considérer :

- les potentiels d'ionisation, notés $\mathrm{IP}^{(Z+1)+}$ pour décrire l'ionisation de l'espèce de charge Z vers l'espèce $(Z+1)$
- les rendements de photoionisation en fonction de l'énergie $E = h\nu$ du photon absorbé, noté $\mathrm{Y}^{Z+}(E)$,
- la section efficace de photoabsorption, notée $\sigma(E, Z)$,

Modèle moléculaire : choix des espèces

Le modèle repose sur les données moléculaires disponibles comme les sections efficaces de photoabsorption théoriques contenues dans la *Theoretical spectral database of PAH*[2] [Malloci et collab., 2007a] que nous avons utilisées. Les molécules sélectionnées dans cette base de données pour cette étude sont présentées dans le tableau 4.1. Ces molécules ont été sélectionnées sur la base de deux critères :(i) l'étude de Wenzel et collab. [2020] a montré que les événements de photodissociation sont minoritaires par rapport aux photoionisation (responsables du chauffage PE) pour des molécules à partir de N_C=32, dans leur échantillon. Nous avons donc considéré seulement les molécules avec $N_C \geq 32$. (ii) Nous nous sommes limités aux molécules de forme compacte qui sont supposées plus stables dans le MIS [Ekern et collab., 1998; Jochims et collab., 1994]. Au final, cela représente 9 molécules avec une taille variant entre $N_C = 32$ et $N_C = 66$, ce qui inclut la taille typique ($N_C = 50$) des PAH interstellaires [Allamandola et collab., 1985; Andrews et collab., 2016; Leger et collab., 1989; Leger and Puget, 1984; Montillaud et collab., 2013]. Trois catégories de tailles sont construites pour cet échantillon, petits PAH ($32 \leq N_C < 40$), moyens PAH ($40 \leq N_C < 48$), et grands PAH ($48 \leq N_C < 66$) qui seront utiles par la suite.

2. Accessible à l'adresse : http://astrochemistry.oa-cagliari.inaf.it/database/pahs.html

"Petits PAH"	"Moyens PAH"	"Grands PAH"
Ovalene ($C_{32}H_{14}$)	Circumanthracene ($C_{40}H_{16}$)	Dicoronylene ($C_{48}H_{20}$)
Tetrabenzocoronène ($C_{36}H_{16}$)	Circumpyrene ($C_{42}H_{16}$)	Circumcoronene ($C_{54}H_{18}$)
Circumbiphenyl ($C_{38}H_{16}$)	Hexabenzocoronene ($C_{42}H_{18}$)	Circumovalene ($C_{66}H_{20}$)

TABLEAU 4.1 – Molécules considérées pour l'étude et dont les sections efficaces théoriques de photoabsorption ont été utilisées, et catégories définies à partir des ces molécules.

Estimation des potentiels d'ionisation concernés

Malloci et collab. [2007a] et Wenzel et collab. [2020] ont montré que des dications pouvaient se former dans les PDR, en particulier pour des espèces de tailles $N_C \geq 32$ considérées dans ce travail car la valeur de IP^{2+} (voir figure 4.6) est inférieure à 13.6 eV. Les données concernant IP^{3+} sont plus limitées, mais Zhen et collab. [2016] ont montré que la valeur de IP^{3+} est supérieure à 13.6 eV pour des petits PAH, ce qui est aussi le cas pour des PAH de plus grande taille jusqu'à $N_C \geq 48$ [Wenzel et collab., 2020]. On ne s'attend donc pas à ce que les trications soient des espèces importantes dans les PDR. Ces espèces ne sont donc pas incluses dans notre modèle. En résumé, pour NGC 7023, nous considérons donc un modèle à 3 niveaux (Z=0, 1, 2). Pour calculer les potentiels d'ionisation dans notre modèle, nous utilisons l'équation de Wenzel et collab. [2020], qui relie les IP avec la taille et l'état de charge Z des PAH :

$$IP^{(Z+1)+} = 3.9\,\text{eV} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0}[(Z+\frac{1}{2})\frac{e^2}{a} + (Z+2)\frac{e^2}{a}\frac{0.03\,\text{nm}}{a}]\frac{1\text{C}}{e}\,\text{eV}, \tag{4.9}$$

où ϵ_0 est la permittivité du vide en F/nm, e la charge élémentaire en Coulomb et a le diamètre de la molécule. La correspondance entre le diamètre (en nm) et le nombre d'atomes de carbone est basée sur la masse volumique du graphite :

$$a = \sqrt[3]{\frac{N_C}{468}}\,\text{nm}. \tag{4.10}$$

La figure 4.6 montre l'évolution des valeurs IP^+ à IP^{3+} avec N_C, calculées avec l'équation 4.9, en comparaison des données mesurées en laboratoire, ou théoriques.

Rendement d'ionisation

Plusieurs processus peuvent entrer en compétition lors de l'absorption d'un photon dont l'énergie est supérieure au potentiel d'ionisation de la molécule, impliquant que l'ionisation n'est pas systématique. La mesure du rendement d'ionisation permet de rendre compte de l'évolution du poids de l'ionisation dans cette compétition en fonction de l'énergie du photon absorbé. Plusieurs études expérimentales ont permis d'obtenir ce paramètre pour plusieurs molécules spécifiques aussi bien neutres [Jochims et collab., 1996; Verstraete et collab., 1990] que cationiques [Wenzel et collab., 2020; Zhen et collab., 2016]. Dans le cas des molécules neutres, Jochims et collab. [1996] ont proposé une loi simple pour modéliser le rendement d'ionisation d'un PAH, indépendamment de sa taille mais dépendant de son IP, que nous utilisons dans le modèle :

$$Y^0(E) = \begin{cases} \frac{E-IP^+}{9.2} \\ 1 \end{cases} \quad \text{pour} \quad \begin{matrix} E \leq \text{IP}^+ + 9.2 \\ E > \text{IP}^+ + 9.2 \end{matrix} \tag{4.11}$$

La figure 4.7 montre les valeurs de rendements que nous avons utilisées. A noter que bien que la loi donnée ci-dessus ait été élaborée à partir de petits PAH (N_C=6 à

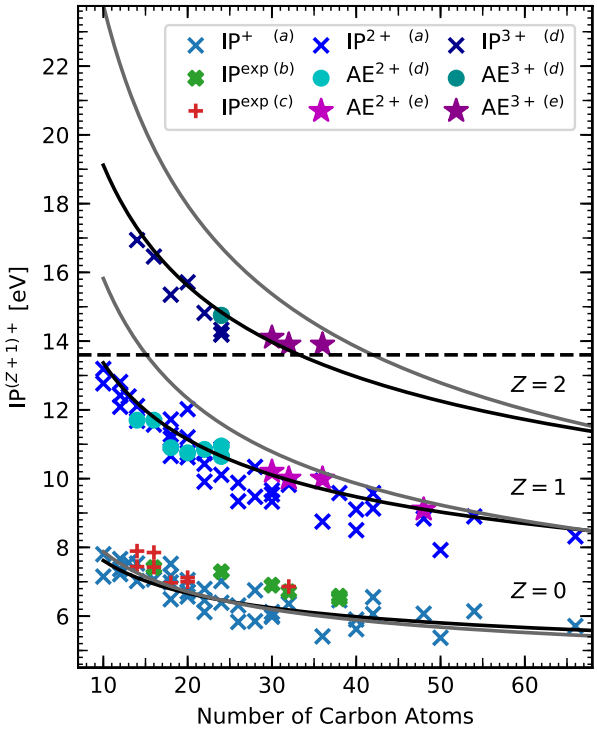

FIGURE 4.6 – Évolution du potentiel d'ionisation des PAH avec leur taille et l'état de charge. La courbe noire pleine montre l'ajustement des données par l'équation 4.9. Issue de Wenzel et collab. [2020]. $^{(a)}$: Malloci et collab. [2007b] ;$^{(b)}$: Clar et collab. [1981] ;$^{(c)}$: Hager and Wallace [1988] ;$^{(d)}$:Zhen et collab. [2016] ;$^{(e)}$: Wenzel et collab. [2020].

18), les auteurs estiment que ce comportement reste valable pour des PAH plus grands d'intérêt astrophysique [Jochims et collab., 1996].

Dans le cas de la seconde ionisation (Z=1 -> 2), le rendement utilisé est celui proposé par Wenzel et collab. [2020], en utilisant une approche similaire à celle de Jochims et collab. [1996] :

$$Y^{+}(N_{\mathrm{C}},E)=\begin{cases}0 & E<\mathrm{IP}^{2+}\\ \frac{\alpha}{11.3-\mathrm{IP}_{2+}}(E-\mathrm{IP}^{2+}) & \mathrm{IP}^{2+}\leq E<11.3\\ \alpha & \text{pour}\quad 11.3\leq E<12.9\\ \frac{\beta(N_{\mathrm{C}})-\alpha}{2.1}(E-12.9)+\alpha & 12.9\leq E<15.0\\ \beta(N_{\mathrm{C}}) & E\geq 15.0,\end{cases} \tag{4.12}$$

où $\alpha = 0.3$ est la valeur du plateau et β dépend de N_{C} comme :

$$\beta(N_{\mathrm{C}})=\begin{cases}0.59+8.1\cdot 10^{-3}N_{\mathrm{C}} & \text{pour}\quad 32\leq N_{\mathrm{C}}<50\\ 1 & N_{\mathrm{C}}\geq 50.\end{cases} \tag{4.13}$$

En plus du décalage du à la différence de potentiel, l'allure des courbes Y^0 et Y^+ diffère par la présence d'un plateau entre 11.3 et 12.9 eV pour Y^+ (voir figure 4.7).

Les sections efficaces de photoabsorption et de photoionisation

La section efficace de photoabsorption, notée $\sigma(E,Z)$, d'unités cm^2 ou MBarn ($10^{-18}\mathrm{cm}^2$) présente des différences entre molécules et états de charge. Pour les raisons discutées au début de la section 4.3.1, les molécules retenues sont distribuées de façon égale en trois catégories selon le tableau 4.1 (trois molécules par catégorie).

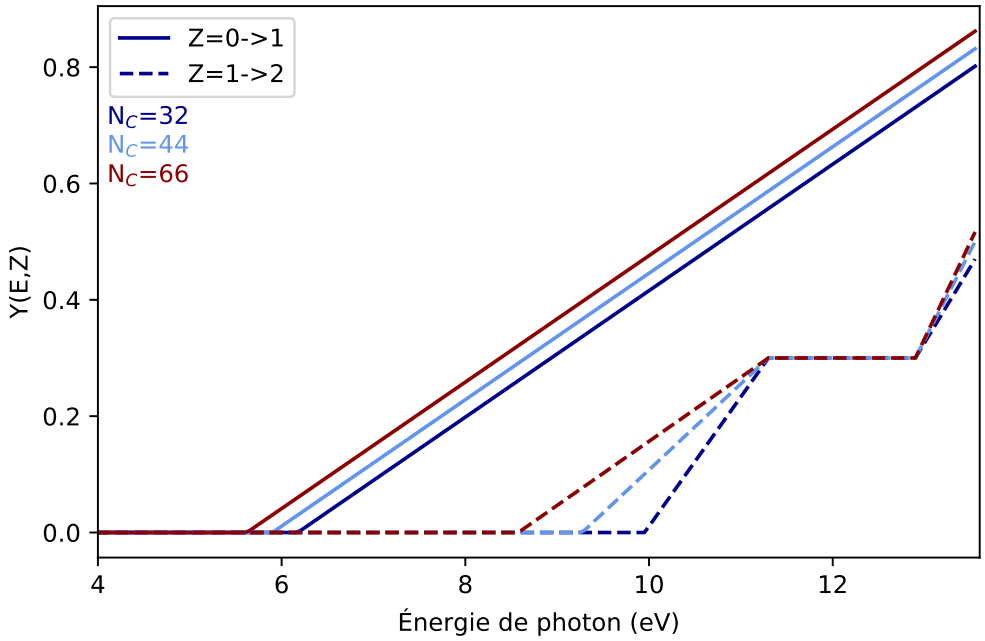

FIGURE 4.7 – Représentation des rendements d'ionisation pour $Z = 0$ (lignes pleines) et $Z = 1$ (tirets), respectivement issus des équations 4.11 et 4.12, pour une taille de chaque catégorie.

Pour une catégorie de taille et un état de charge donné, la section efficace de chaque molécule est normalisée par son nombre d'atomes de carbone. Ensuite, les trois sections efficaces normalisées sont moyennées. La démarche est appliquée pour les trois catégories de taille et les trois états de charge. En tout, il est obtenu une section efficace de photoabsorption moyenne par atome de carbone $\sigma(E, Z)$ pour chaque état de charge de chaque catégorie de taille. Ces sections efficaces sont présentées en figure 4.8.

Dans le modèle, lorsque N_C est choisi par l'utilisateur, la section efficace normalisée utilisée est celle qui correspond à la catégorie de taille ou se situe N_C. Par exemple si $N_C = 50$, ce sera la section efficace des "grands" PAH qui sera utilisée dans le modèle (figure 4.8).

À partir des sections efficaces de photoabsorption de chaque catégorie de taille et du rendement d'ionisation, il est possible de calculer les sections efficaces d'ionisation moyenne par :

$$\sigma_{\text{ion}}(E, Z) = Y^{Z+}(E) \times \sigma(E, Z) \times N_C. \tag{4.14}$$

La figure 4.8 représente les $\frac{\sigma_{\text{ion}}(E,Z)}{N_C}$ des trois tailles considérées en figure 4.7.

4.3.2 Calcul de l'efficacité du chauffage par les PAH

L'efficacité du chauffage par les PAH est la fraction d'énergie (ou de puissance) absorbée sous forme de photons UV par ce PAH qui est injectée dans le gaz via l'éjection d'électrons qui se thermalisent avec le gaz par collisions. Elle peut s'écrire :

$$\epsilon_{PAH} = \frac{P_{gaz}}{P_{tot}}, \tag{4.15}$$

où P_{gaz} est la puissance injectée dans le gaz et P_{tot} la puissance totale absorbée par la molécule. Puisque les PAH peuvent se trouver sous plusieurs états de charge, le terme de chauffage du gaz P_{gaz} dépend de la distribution de charges des PAH. Nous

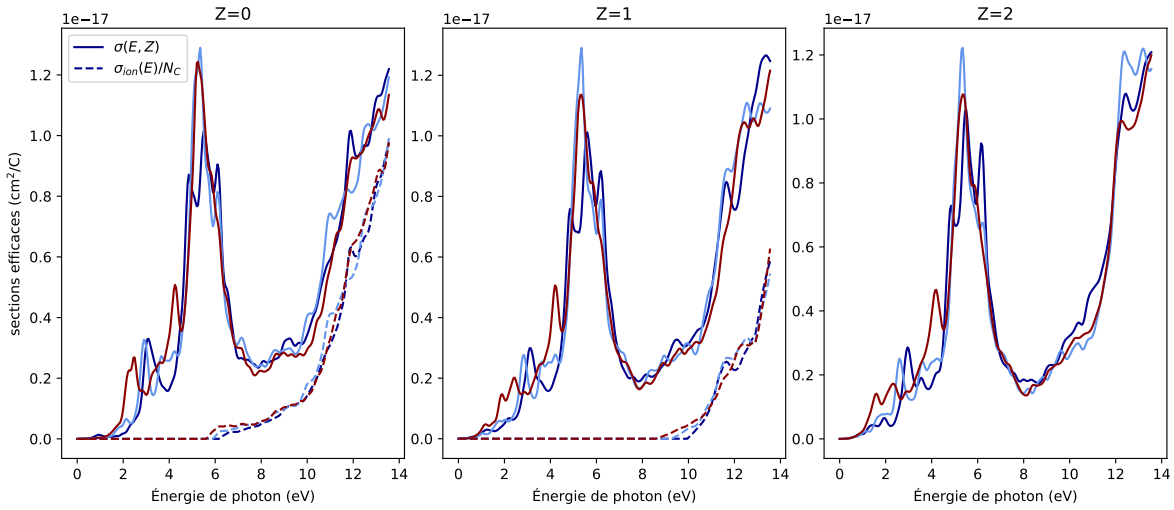

FIGURE 4.8 – Sections efficaces de photoabsorption théoriques par atome de carbone (traits pleins) et section efficace d'ionisation (tirets) par atome de carbone, représentées jusqu'à une énergie de 13.6 eV. À gauche : cas des neutres ; Au milieu : cas des cations ; À droite : cas des dications. Les trois catégories de tailles sont représentées avec le même code couleur qu'en figure 4.7.

avons vu que la formation des trications doit être une voie mineure et elle n'est donc pas considérée dans notre modèle (voir section 4.3.1). P_{gaz} dépend donc des populations PAH^0 et PAH^+ (et pas PAH^{++}). Il est défini par :

$$P_{gaz} = f^0 \times P^0_{gaz} + f^+ \times P^+_{gaz} \quad \text{(erg/sec)}, \tag{4.16}$$

où f^0 et f^+ sont les fractions de populations des neutres et cations respectivement. Leur calcul ainsi que celui de f^{++}, correspondant aux dications, est décrit en Annexe C. On définit par ailleurs $f^{Mod}_{ion} = f^+ + f^{++}$, la fraction d'ionisation des PAH calculée par le modèle. Les termes P^0_{gaz} et P^+_{gaz} sont les taux de chauffage du gaz par les PAH^0 et PAH^+, définis de façon générale par :

$$P^{Z+}_{gaz} = G \int_0^{\Omega} d\Omega \int_{IP^{(Z+1)+}}^{13.6} (E - IP^{(Z+1)+}) \sigma_{\text{ion}}(E, Z) \frac{I_E(E)}{E} dE \quad \text{(erg/sec)}, \tag{4.17}$$

où la constante G est le coefficient de partition, c'est à dire la fraction de l'énergie restante après ionisation qui est transmise au photoélectron, et $I_E(E)$, d'unité erg/sec/cm^2/eV/sr, est l'intensité locale du champ de rayonnement, dans le cas de notre étude, celui produit par l'étoile HD 200775 et décrit en section 4.4.1. Le champ de rayonnement, considéré comme isotrope, intercepté par les PAH provient d'un angle solide Ω de 2π stéradians. Il est aussi à noter que, dans ce modèle, le paramètre G est explicitement considéré comme indépendant de l'énergie du photon et constant pour toutes les tailles de PAH, ce qui est une approximation. La valeur de $G = 0.5$ est communément utilisée dans la littérature [Bakes and Tielens, 1994; Tielens, 2005; Verstraete et collab., 1990], cependant peu d'études ont pu contraindre sa valeur ainsi que sa dépendance en énergie de photon absorbé. Ici, nous adoptons également une valeur de 0.5, mais l'influence de ce choix sur les résultats est discutée en section 4.4.

La puissance absorbée par la molécule P_{tot} est définie par :

$$P_{tot} = f^0 \times P^0_{tot} + f^+ \times P^+_{tot} + f^{++} \times P^{++}_{tot} \quad \text{(erg/sec)}. \tag{4.18}$$

Les dications ne contribuent pas au chauffage du gaz mais absorbent tout de même des photons. Les termes P_{tot}^{Z+}, i.e. puissances totales absorbées par chaque état de charge, sont calculés par :

$$P_{tot}^{Z+} = \int_0^{\Omega} d\Omega \int_0^{13.6\,\mathrm{eV}} \sigma(E,Z) I_E(E) dE \quad (\mathrm{erg/sec}). \tag{4.19}$$

Finalement, l'efficacité du chauffage par effet photoélectrique sur les PAH se calcule en chaque position par :

$$\epsilon_{PAH} = \frac{f^0 \times P_{gaz}^0 + f^+ \times P_{gaz}^+}{f^0 \times P_{tot}^0 + f^+ \times P_{tot}^+ + f^{++} \times P_{tot}^{++}}. \tag{4.20}$$

Le modèle présenté dans cette section permet par la suite de calculer la distribution des charges des PAH (pour Z=[0,1,2]) ainsi que leur contribution au chauffage du gaz et l'efficacité du chauffage globale en quelques positions de NGC 7023 NW définies en section 4.4.1. Il est au préalable nécessaire d'identifier des valeurs réalistes des conditions physiques présentes dans cet objet, dont le champ de rayonnement, la température et densité du gaz, ce qui est fait en section suivante.

4.4 Application du modèle et comparaison avec les observations

Le modèle décrit précédemment est appliqué aux conditions de NGC 7023 NW, en utilisant le champ de rayonnement et les valeurs de températures et densités disponibles dans la littérature.

La section 4.4.1 décrit les conditions physiques retenues pour une série de positions dans la PDR situées entre 20" et 60" de l'étoile, correspondant à la zone d'étude définie en section 4.1. Les valeurs de fraction d'ionisation des PAH ainsi que l'efficacité du chauffage par effet PE déduites des observations sont comparées aux valeurs obtenues par le modèle sur les trois catégories de tailles "petite", "moyenne" et "grande" en section 4.4.2. Les tailles de PAH utilisées pour chaque catégorie sont respectivement $N_C = 32, 44$ et 66.

4.4.1 Conditions physiques de NGC 7023

Champ de rayonnement

Le spectre du système stellaire HD 200775 utilisé ici (en intensité notée $I_E(E)$), est présenté en figure 4.9. Il s'agit de celui construit par Joblin et collab. [2018] selon la procédure décrite par Pilleri et collab. [2012], à partir de spectres stellaires synthétiques issues de la base de donnée de Kurucz [1993]. Les auteurs ont modélisé le spectre de HD 200775 par celui de deux étoiles de température effective de 1.5×10^4 K et un rayon effectif de 10 fois celui du Soleil [Pilleri et collab., 2012]. Une extinction d'un $A_V = 1.5$ a aussi été appliquée sur le spectre résultant pour tenir compte de la présence de poussière dans l'environnement direct de HD 200775 [Pilleri et collab., 2012]. Afin de déterminer le G_0 en chaque position modélisée, il est nécessaire d'appliquer un facteur de dilution sphérique dépendant de la distance réelle entre l'étoile et chaque position. Pour cela il faut connaître l'angle entre le plan du ciel et le rayon entre l'étoile et la surface de la PDR. Joblin et collab. [2018] donnent une distance réelle entre l'étoile et la PDR de 0.143 pc ce qui implique un angle de 63°.

Il n'est, de plus, pas considéré d'extinction jusqu'à 45", où l'augmentation de la densité de colonne de poussière est prise en compte via l'application d'un terme multiplicatif $e^{-\tau(\lambda)}$ au champ dilué, où $\tau(\lambda) = \sigma_{ext}(\lambda)N_H$ (voir section 1.3.3). Sous l'hypothèse d'une densité constante de $n_H = 2 \times 10^4\,\mathrm{cm}^{-3}$, les valeurs de N_H estimées aux positions 50", 55" et 60" à partir de la position à 45" sont respectivement de 10^{21}, 2×10^{21} et $3.2 \times 10^{21}\,\mathrm{cm}^{-2}$. Ceci implique des valeurs d'extinction dans la bande V de $A_V = 0.5, 1$ et $1.6\,\mathrm{mag}$ respectivement.

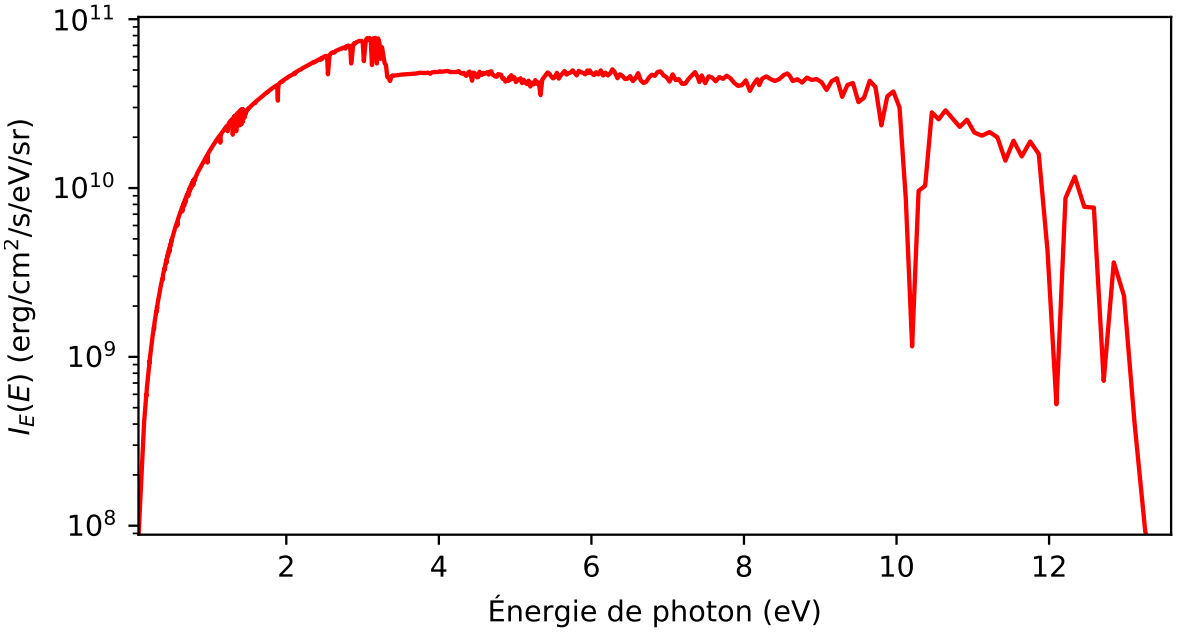

FIGURE 4.9 – Intensité spécifique modélisée de HD 200775 [Pilleri et collab., 2012].

Températures et densités

Les conditions physiques (température et densité du gaz) considérées sont résumées dans le tableau 4.2. Pour la température du gaz, les valeurs dans la cavité se basent sur les calculs effectués par A. Boulais lors de son stage de fin d'étude [Boulais, 2013]. Ce dernier traite le bilan thermique décrit dans l'équation 1.14 en considérant un refroidissement par les raies du [O I] à $63\,\mu$m, [C II] à $158\,\mu$m et celui par la poussière ainsi qu'un chauffage par effet photoélectrique. Le traitement de l'opacité de la raie [C II] lui a permis d'obtenir un profil de température depuis l'étoile jusqu'au front de dissociation. La température reste autour de 750 K dans la majeure partie de la cavité, valeur adoptée ici entre 20" et 45". Les valeurs adoptée à l'intérieur de la PDR proviennent de modèles de Joblin et collab. [2018] et Montillaud et collab. [2013].

Pour les densités, Berné et collab. [2015] ont déterminé un profil de cette grandeur de 5" à 25" de l'étoile. Ils donnent $n_H \sim 1.5 \times 10^4\,\mathrm{cm}^{-3}$ entre 20" et 25", valeur considérée ici constante jusqu'à la PDR à partir de laquelle la valeur estimée par Pilleri et collab. [2012] de $n_H \sim 2 \times 10^4\,\mathrm{cm}^{-3}$ est prise en compte. La densité électronique est basée sur l'ionisation totale du carbone, i.e. $n_e = 1.6 \times 10^{-4} n_H\,\mathrm{cm}^{-3}$.

La température, densité électronique et intensité du champ de rayonnement permettent de calculer le facteur d'ionisation $\gamma = \frac{G_0\sqrt{T}}{n}$. Andrews et collab. [2016] ont déterminé un $\gamma \sim 2 \times 10^4\,\mathrm{K}^{1/2}\mathrm{cm}^3$ au bord de la PDR ($\sim 42''$ de HD 200775). La valeur obtenue dans notre modèle est cohérente avec celle obtenue par ces auteurs.

d (")	20	25	30	35	40	45	50	55	60
G_0	11004	7042	4890	3593	2751	2173	1760	733	193
T (K)	750	750	750	750	750	750	350	150	150
n_H (10^4cm^{-3})	1.5	1.5	1.5	1.5	2	2	2	2	2
γ K$^{1/2}$cm^3	125567	80363	55807	41001	23543	18602	10293	2807	741

TABLEAU 4.2 – Conditions physiques en chaque position.

4.4.2 Comparaison observations - modèle

Les positions des trois coupes le long desquelles les valeurs de f_{ion}^{Obs} et ϵ_r sont relevées pour la comparaison avec le modèle sont présentées en figure 4.5. Les valeurs extraites sont, elles, présentées en figure 4.10, 4.11 et 4.12 et comparées avec les valeurs du modèle f_{ion}^{Mod} et ϵ_{PAH}.

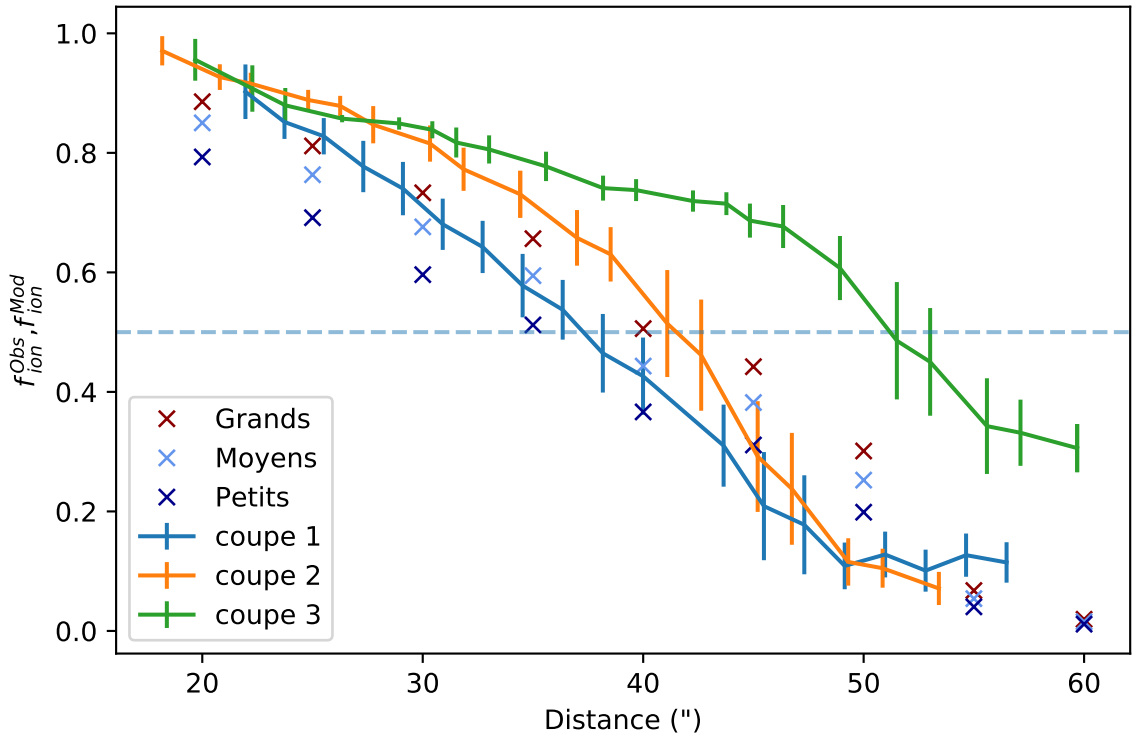

FIGURE 4.10 – Évolution de la fraction d'ionisation des PAH avec la distance angulaire à HD 200775. Les courbes pleines représentent les valeurs de f_{ion}^{Obs}, extraites des observations le long des trois coupes définies en figure 4.5. Ces valeurs ont été mesurées sur la carte de fraction d'ionisation à la résolution de *Spitzer*-IRS. Les barres d'erreurs sur les valeurs observées correspondent à l'écart type dans un carré de 3 x 3 pixels autour du pixel se trouvant sur la coupe. Les croix correspondent aux valeurs de f_{ion}^{Mod} pour les 3 catégories de tailles définies en section 4.3.1. La ligne en tirets représente l'équivalence entre la population de PAH neutres et les populations ionisées.

La figure 4.10 montre le comportement décroissant de f_{ion}^{Obs} des régions les plus proches de HD 200775 vers l'arrière du front de dissociation, à mesure que le champ UV diminue. Cette tendance est présente à la fois dans les valeurs déduites de l'observation via PAHTAT, sur les trois coupes, et dans le modèle f_{ion}^{Mod}. L'accord général entre les valeurs issues des observations et celles du modèle est bon. En particulier, la coupe 2 présente une position d'équivalence entre PAH^0 et PAH^+ ($f_{ion}^{Obs} = 0.5$) à $\sim$ 42",

correspondant à la position du front de dissociation de la PDR [Pilleri et collab., 2012] correctement reproduite par le modèle pour les grands PAH. Cette figure montre de plus qu'en une même position, les grands PAH présentent une fraction d'ionisation plus grande que les plus petits du fait de leur IP plus faible.

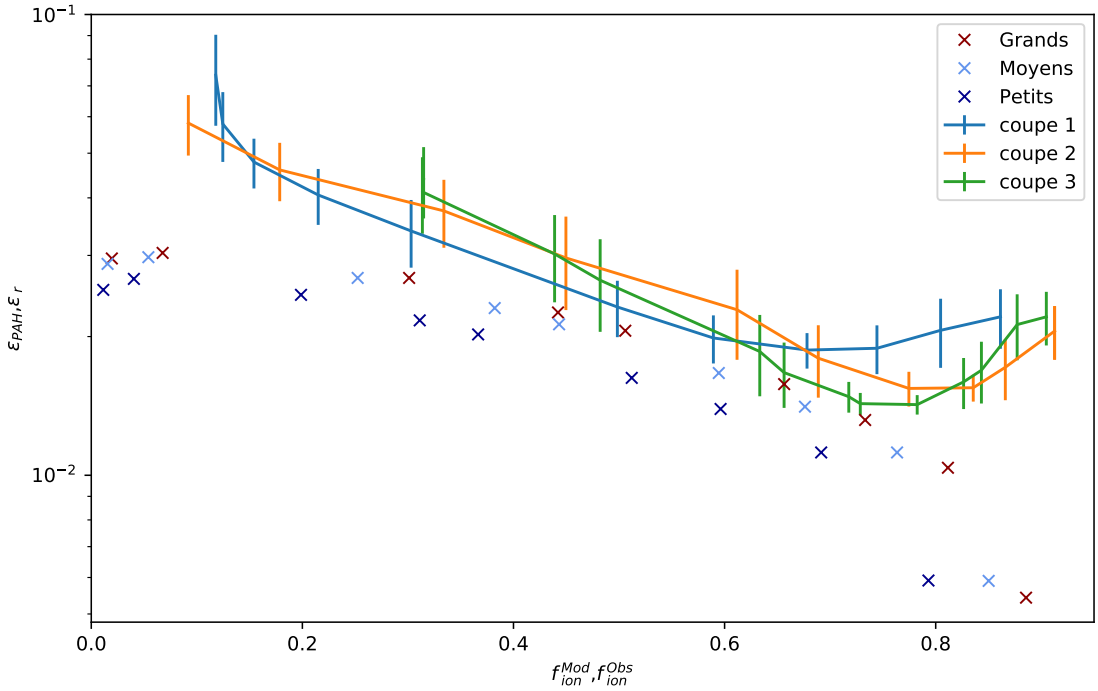

FIGURE 4.11 – Évolution de l'efficacité du chauffage par les PAH, ϵ_r, observée le long des coupes définies en figure 4.5 avec la fraction de PAH cations f_{ion}^{Obs}. Les barres d'erreurs verticales des valeurs observées correspondent à l'écart-type dans un carré de 3 x 3 pixels autour du pixel d'intérêt se trouvant sur la coupe. Les croix correspondent aux estimations avec le modèle de ϵ_{PAH} en fonction de f_{ion}^{Mod} pour les trois catégories de taille décrites en section 4.3.1.

La figure 4.11 compare les courbes d'évolution de ϵ_r et ϵ_{PAH} en fonction de la fraction d'ionisation. Elles montrent toutes deux une tendance décroissante claire à mesure que la part des PAH ionisés augmente. Ce résultat est cohérent avec l'effet attendu de la charge des PAH sur l'efficacité du chauffage. L'augmentation de la proportion de cations et dications par rapport aux neutres fait chuter l'efficacité du chauffage. En effet, comme discuté en section 2.3, l'IP des PAH augmente avec leur charge. Puisque l'énergie maximale des photons FUV dans une PDR est limitée à E=13.6 eV, plus une molécule est chargée moins un photoélectron emportera d'énergie transmise par la suite au gaz, ce qui rend le chauffage moins efficace. Il est a noter que l'effet de la taille sur les valeurs de ϵ_{PAH} est faible, et comparable aux barres d'erreur des observations.

L'application de l'approche d'écrite en section 4.1.2, permet une estimation α, i.e. la contribution des PAH au chauffage du gaz, de $\alpha = 0.70 - 0.80$. Ce résultat montre que les PAH ont bien une contribution majoritaire dans le chauffage du gaz par effet PE. Dans le cas de NGC 7023 NW, celle-ci est supérieure à la valeur estimée par Bakes and Tielens [1994].

La figure 4.12 présente également l'évolution de l'efficacité du chauffage par les grand PAH seulement avec la fraction d'ionisation de cette même catégorie, mais cette fois-ci pour différentes valeurs du coefficient de partition G, introduit en équation 4.17) pour le modèle. Alors que le modèle représente 70 à 80% de ϵ_r pour les grands PAH avec G=0.5, la contribution des PAH au chauffage monte à 100% pour G=0.6, pour la

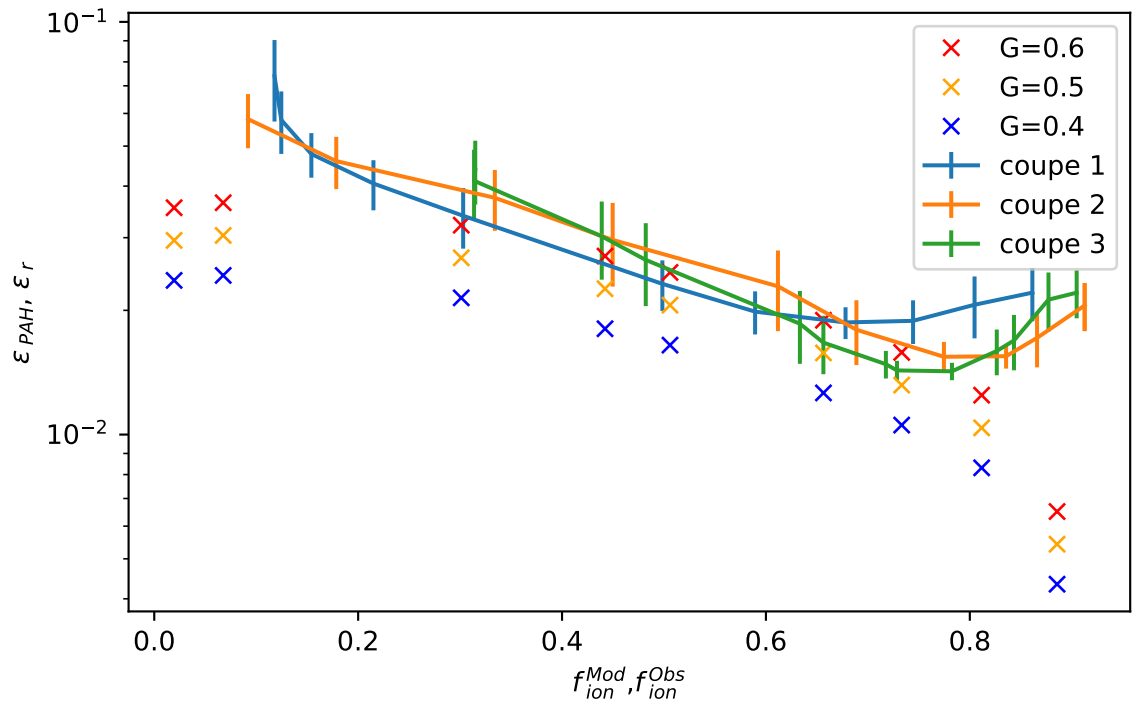

FIGURE 4.12 – Évolution de l'efficacité du chauffage par les PAH avec la fraction d'ionisation des PAH. Les courbes pleines présentent les valeurs de ϵ_r le long des coupes définies en figure 4.5 en fonction de f_{ion}^{Obs}. Les croix correspondent ici aux valeurs de ϵ_{PAH} obtenues avec le modèle pour les grands PAH avec trois valeurs de facteur G différents, en fonction de f_{ion}^{Mod}.

même catégorie de taille. Ce résultat montre l'importance d'une bonne caractérisation de ce paramètre moléculaire, notamment de sa dépendance avec l'énergie des photons. Des expériences en laboratoire comme celles engagées par P. Bréchignac et son équipe pourront permettre cette caractérisation [Ph. Bréchignac et collab.].

Enfin, la remontée de ϵ_r proche de l'étoile, à $f_{ion}^{Obs} > 0.75$, n'est pas expliquée par le modèle. En effet, dans le modèle, au niveau des régions proches de l'étoile où le champ de rayonnement est très important ($G_0 > 10^4$), les dications deviennent de plus en plus abondants. Étant le plus haut état de charge considéré, ces derniers ne contribuent pas au chauffage, ce qui fait chuter ϵ_{PAH}. Afin de réconcilier les observations et modèles, d'autres mécanismes de chauffage impliquant d'autres grains que les PAH doivent être considérés. Il est possible en particulier que des grains de plus grande taille contribuent à maintenir l'efficacité du chauffage. Ceci suggère l'importance de considérer un modèle complet incluant tous types de grains pour le chauffage PE, intégré dans un code de région de photodissociation tel que le code PDR de Meudon [Le Petit et collab., 2006] afin de contraindre au mieux l'ensemble des processus en lien avec les observations.

Conclusion et perspectives

Conclusion et résultats

L'étude des AIB a mené la communauté à proposer qu'elles étaient émises par la classe de molécules constituée des PAH. Aujourd'hui, toujours aucune de ces molécules n'a pu être identifiée spécifiquement mais l'hypothèse PAH se consolide à mesure que les techniques d'expériences de laboratoire, de calculs de chimie quantique et d'observations astronomiques évoluent. Le lancement du JWST, prévu pour fin octobre 2021, permettra d'approfondir considérablement nos connaissances de ces molécules et de leur impact sur leur environnement. C'est dans ce contexte que cette thèse s'est déroulée.

Dans la première partie de ce travail, une adaptation de la méthode hybride de SAS "MASS-NMF" a été utilisée. J'ai montré qu'elle permettait de remédier aux problèmes inhérents à l'utilisation de la NMF seule en vue de son application aux grands jeux de données IR moyen du JWST. En effet, les méthodes antérieures (par ex. Berné et collab. 2007) utilisant en particulier la NMF seule, ne donnaient pas de résultats stables notamment à cause de l'initialisation aléatoire des algorithmes, impliquant la nécessité de leur couplage à une méthode Monte-Carlo (voir Rosenberg et collab. 2011). Un grand nombre d'applications N (en général, $N = 100$) de la NMF étaient alors nécessaires pour obtenir une solution statistiquement fiable. Ce coût supplémentaire les rendaient difficilement applicables à des jeux de données de grande taille tels que ceux du JWST. La méthode testée dans ce manuscrit consiste en l'utilisation complémentaire de la NMF avec la méthode géométrique de SAS appelée "séparation de sources par angle maximum" (MASS), couplée à un pré-traitement pour extraire les AIB. La contrainte des solutions de la NMF grâce à son initialisation par le résultat de MASS permet de réduire le nombre de minima locaux accessibles par la NMF. J'ai testé cette approche sur des données réelles présentant une contribution claire des AIB, provenant des données d'archive de l'instrument ISO-SWS. Ces données sont les plus proches, d'un point de vue spectral, de celles que les instruments NIRSpec et MIRI du JWST nous apporteront et elles permettent donc de mettre cette méthode à l'épreuve. Il ressort des tests que cette approche permet d'obtenir une dispersion négligeable des résultats. Ceci permet d'écarter l'utilisation d'une méthode de SAS couplée à une approche Monte-Carlo et de réduire le temps de calcul d'un facteur N. Cette méthodologie permettra de ramener l'étude des variations spectrales des AIB présentes dans de grands jeux de données (obtenus à haute résolution spatiale) à celle d'un nombre réduit de spectres représentatifs de populations de PAH. Un résultat complémentaire de ce test est l'obtention d'un nouveau jeu de spectres représentatifs des différentes populations impliquées dans l'émission des AIB. En effet, 4 spectres ont pu être extraits des données ISO-SWS, avec la prise en compte de la région à $3\,\mu$m pour la première fois dans une étude de SAS. Ces spectres ont pu être attribués aux populations déjà identifiées de PAH neutres, PAH cationiques et de très petits grains en évaporation. La

quatrième population est extraite pour la première fois par une méthode de SAS, elle correspond à des grands PAH ionisés, potentiellement des anions. Cependant, l'interprétation détaillée de ces spectres reste limitée par le faible nombre de spectres ainsi que par leur qualité.

Suite à ce travail, je me suis intéressé à l'influence des PAH sur le chauffage du gaz dans les PDR. L'ionisation des PAH par le rayonnement UV des étoiles provoque l'émission de photoélectrons. Ces photoélectrons ont une énergie cinétique de quelques eV, qu'ils transmettent au gaz par collisions, le chauffant. Plus globalement, ce phénomène concerne l'ensemble des grains de poussière. Dans mon travail de thèse, je me suis concentré sur la contribution spécifique des PAH à ce processus de chauffage ainsi que l'influence de leur charge sur ce dernier dans le cas de la PDR NGC 7023NW. Pour ce faire, j'ai utilisé une méthode indirecte en deux étapes : (i) estimation observationnelle d'une valeur haute de l'efficacité du chauffage par effet PE, appelée efficacité réduite notée ϵ_r ; (ii) modélisation de l'effet PE sur les PAH grâce aux résultats récents d'expériences de laboratoire ainsi que de calculs de chimie quantique, permettant d'estimer l'efficacité de l'effet PE sur les PAH, notée ϵ_{PAH}. L'évolution similaire de ϵ_r et ϵ_{PAH} avec la fraction d'ionisation des PAH confirme le lien entre l'état de charge de ces derniers et l'efficacité du chauffage. Plus un milieu contient de PAH ionisés, moins le chauffage par effet PE sur ces derniers sera efficace. De plus, le rapport entre ϵ_r et ϵ_{PAH} donne directement une estimation de la contribution des PAH au chauffage du gaz à hauteur de $\alpha = 70 - 80\%$. Ceci montre l'importance des PAH dans le chauffage du gaz par effet PE, de même que la nécessitée de traiter de façon précise leur influence dans les modèles PDR. Par ailleurs, grâce au modèle développé dans ce travail, il a aussi été possible de déterminer que la taille des molécules n'a pas d'importance significative sur ϵ_{PAH}.

Perspectives

La méthodologie d'application de MASS-NMF testée dans ce manuscrit pourra être appliquée aux données JWST, notamment celle de l'ERS "Radiative Feedback of massive stars", menée entre autre par O. Berné dès 2022. Cette application directe pourra permettre l'extraction de nouveau spectres modèles, et la construction d'une nouvelle version de l'outil PAHTAT, compatible avec les observations "JWST". Cette approche permettra de mieux contraindre la diversité chimique des populations de PAH et d'affiner les scénarios de formation, évolution et destruction de ces espèces dans tous les types d'environnements accessibles au JWST. La réduction des échelles spatiales accessibles permettra l'extraction de spectres représentatifs de populations plus spécifiques que celles attribuées jusqu'à maintenant.

La meilleure connaissance des espèces en présence permettra aussi de mieux quantifier le mécanisme de chauffage du gaz par effet photoélectrique sur les PAH. L'arrivée du JWST permettra par ailleurs d'obtenir une contrainte forte sur le bilan thermique des PDR, notamment via l'observation d'un grand nombre de raies spectrales du H_2, à des échelles spatiales fines. Les modèles d'évolution des PDR auront aussi besoin d'un traitement précis de toutes les sources de chauffage pour rendre compte des processus thermiques mis en jeu. L'effet photoélectrique sur la poussière est la source principale de chauffage dans les couches externes des PDR et les PAH en sont des contributeurs majeurs. L'implémentation dans les modèles PDR, du traitement de ce processus via

le modèle proposé dans cette thèse permettra de tester à la fois le modèle PAH et le rôle de ces molécules dans la physico-chimie des PDR.

Dans tous les cas traités dans ces travaux, l'arrivée du JWST promet une amélioration conséquente de notre compréhension des PAH interstellaires ainsi que de leur influence sur leur environnement. Cette thèse aura permis d'explorer les besoins et implications scientifiques du saut en qualité des observations à venir.

Bibliographie

Allamandola, L. J., **A. G. G. M. Tielens**, and **J. R. Barker**, 1985. Polycyclic aromatic hydrocarbons and the unidentified infrared emission bands - Auto exhaust along the Milky Way. The Astrophysical Journal, 290 : L25.
URL http://dx.doi.org/10.1086/184435 11, 83

Allamandola, L. J., **A. G. G. M. Tielens**, and **J. R. Barker**, 1987. Infrared emission from interstellar PAHs. In **G. E. Morfill** and **M. Scholer**, editors, NATO ASIC Proc. 210 : Physical Processes in Interstellar Clouds, pages 305–331. 12, XIII

Andrews, H., **A. Candian**, and **A. G. G. M. Tielens**, 2016. Hydrogenation and dehydrogenation of interstellar PAHs : Spectral characteristics and H_2 formation. , 595 : A23.
URL http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/201628819 83, 89

Asplund, M., **N. Grevesse**, **A. J. Sauval**, **et collab.**, 2009. The Chemical Composition of the Sun. Annual Review of Astronomy and Astrophysics, 47, 1 : 481–522.
URL http://dx.doi.org/10.1146/annurev.astro.46.060407.145222 7, 8, VII

Bakes, E. L. O. and **A. G. G. M. Tielens**, 1994. The Photoelectric Heating Mechanism for Very Small Graphitic Grains and Polycyclic Aromatic Hydrocarbons. , 427 : 822.
URL http://dx.doi.org/10.1086/174188 17, 18, 39, 87, 91

Bauschlicher, C. W., **C. Boersma**, **A. Ricca**, **et collab.**, 2010. THE NASA AMES POLYCYCLIC AROMATIC HYDROCARBON INFRARED SPECTROSCOPIC DATABASE : THE COMPUTED SPECTRA. , 189, 2 : 341–351.
URL http://dx.doi.org/10.1088/0067-0049/189/2/341 48

Bauschlicher, C. W., **A. Ricca**, **C. Boersma**, **et collab.**, 2018. The NASA Ames PAH IR Spectroscopic Database : Computational Version 3.00 with Updated Content and the Introduction of Multiple Scaling Factors. , 234, 2 : 32.
URL http://dx.doi.org/10.3847/1538-4365/aaa019 48

Bauschlicher, C. W., Jr., **E. Peeters**, and **L. J. Allamandola**, 2009. The Infrared Spectra of Very Large Irregular Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAHs) : Observational Probes of Astronomical PAH Geometry, Size, and Charge. , 697 : 311–327.
URL http://dx.doi.org/10.1088/0004-637X/697/1/311 70, 72

Benisty, M., **K. Perraut**, **D. Mourard**, **et collab.**, 2013. Enhanced H_α activity at periastron in the young and massive spectroscopic binary HD 200775. , 555 : A113.
URL http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/201219893 78

Bernard-Salas, J., **E. Habart**, **M. Köhler**, **et collab.**, 2015. Spatial variation of the cooling lines in the reflection nebula NGC 7023. Astronomy & Astrophysics, 574 : A97.
URL http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/201423705 29, 77, 79

Berne, O., **E. Habart**, **E. Peeters**, **et collab.**, 2017. Radiative Feedback from Massive Stars as Traced by Multiband Imaging and Spectroscopic Mosaics. JWST Proposal ID 1288. Cycle 0 Early Release Science. 65

Berne, O., **C. Joblin**, **Y. Deville**, **et collab.**, 2012. BLIND DECOMPOSITION OF HERSCHEL-HIFI SPECTRAL MAPS OF THE NGC 7023 NEBULA. Proceedings of the annual meeting of the french society of astronomy and astrophysics (SF2A), page 6.
URL https://arxiv.org/abs/1210.3453 34, 35, 59

Berné, O., **J. Montillaud**, and **C. Joblin**, 2015. Top-down formation of fullerenes in the interstellar medium. , 577 : A133.
URL http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/201425338 89

Berné, O., **G. Mulas**, and **C. Joblin**, 2013. Interstellar C_{60}^+. , 550 : L4.
URL http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/201220730 81

Berné, O., **A. Boulais**, **Y. Deville**, **et collab.**, 2013. NMF-Based spectral unmixingof herschel observations of the horsehead nebula. In 2013 5th Workshop on Hyperspectral Image and Signal Processing : Evolution in Remote Sensing (WHISPERS), pages 1–4.
URL http://dx.doi.org/10.1109/WHISPERS.2013.8080633 36

Berné, O., **C. Joblin**, **Y. Deville**, **et collab.**, 2007. Analysis of the emission of very small dust particles from Spitzer spectro-imagery data using blind signal separation methods. , 469, 2 : 575–586.
URL http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361:20066282 21, 31, 32, 34, 49, 50, 59, 61, 68, 80, 93, X

Berné, O., **C. Joblin**, **A. Fuente**, **et collab.**, 2009. What can we learn about protoplanetary disks from analysis of mid-infrared carbonaceous dust emission ? , 495, 3 : 827–835.
URL http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361:200810559 49

Boersma, C., **C. W. Bauschlicher**, **A. Ricca**, **et collab.**, 2014. THE NASA AMES PAH IR SPECTROSCOPIC DATABASE VERSION 2.00 : UPDATED CONTENT, WEB SITE, AND ON(OFF)LINE TOOLS. , 211, 1 : 8.
URL http://dx.doi.org/10.1088/0067-0049/211/1/8 48

Boersma, C., **J. D. Bregman**, and **L. J. Allamandola**, 2013. PROPERTIES OF POLYCYCLIC AROMATIC HYDROCARBONS IN THE NORTHWEST PHOTON DOMINATED REGION OF NGC 7023. I. PAH SIZE, CHARGE, COMPOSITION, AND STRUCTURE DISTRIBUTION. , 769, 2 : 117.
URL http://dx.doi.org/10.1088/0004-637X/769/2/117 48, 67

Boulais, A., 2013. Méthodes de séparation aveugle de source et application à l'imagerie hyperspectrale en astrophysique. 89

Boulais, A., 2017. Méthodes de séparation aveugle de sources et application á l'imagerie hyperspectrale en astrophysique. phd, Université de Toulouse, Université Toulouse III - Paul Sabatier.
URL http://thesesups.ups-tlse.fr/3863/ 21, 31, 35, 36, 37, 52, 59, 61, X

Boulanger, F., **P. Boisssel**, **D. Cesarsky**, **et collab.**, 1998. The shape of the unidentified infra-red bands : analytical fit to ISOCAM spectra. , 339 : 194–200. 46, 47

Boutsidis, C. and **E. Gallopoulos**, 2008. SVD based initialization : A head start for nonnegative matrix factorization. Pattern Recognition, 41, 4 : 1350–1362.
URL http://dx.doi.org/10.1016/j.patcog.2007.09.010 35

Carruthers, G. R., 1970. Rocket Observation of Interstellar Molecular Hydrogen. The Astrophysical Journal, 161 : L81.
URL http://dx.doi.org/10.1086/180575 9

Castellanos, P., **A. Candian**, **H. Andrews**, **et collab.**, 2018. Photoinduced polycyclic aromatic hydrocarbon dehydrogenation. Molecular hydrogen formation in dense PDRs. , 616 : A167.
URL http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/201833221 41

Cesarsky, C. J., **A. Abergel**, **P. Agnese**, **et collab.**, 1996. ISOCAM in flight. , 315 : L32–L37. 27

Cesarsky, D., **J. Lequeux**, **C. Ryter**, **et collab.**, 2000. ISO observations of the reflection nebula Ced 201 : evolution of carbonaceous dust. , 354 : L87–L91. 44

Chokshi, A., **A. G. G. M. Tielens**, **M. W. Werner**, **et collab.**, 1988. C II 158 Micron and O i 63 Micron Observations of NGC 7023 : A Model for Its Photodissociation Region. , 334 : 803.
URL http://dx.doi.org/10.1086/166878 78

Clar, E., **J. M. Robertson**, **R. Schloegl**, **et collab.**, 1981. Photoelectron spectra of polynuclear aromatics. 6. applications to structural elucidation : "circumanthracene". Journal of the American Chemical Society, 103, 6 : 1320–1328.
URL http://dx.doi.org/10.1021/ja00396a003 85, XI

Clegg, P. E., **P. A. R. Ade**, **C. Armand**, **et collab.**, 1996. The ISO Long-Wavelength Spectrometer. , 315 : L38–L42. 27

Comon, P. and **C. Jutten**, 2010. Handbook of Blind Source Separation : Independent component analysis and applications. Academic press. 49

Compiègne, M., **L. Verstraete**, **A. Jones**, **et collab.**, 2011. The global dust SED : tracing the nature and evolution of dust with DustEM. , 525 : A103.
URL http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/201015292 10, 11, VII

Compiègne, M., **A. Abergel**, **L. Verstraete**, **et collab.**, 2007. Aromatic emission from the ionised mane of the Horsehead nebula. , 471, 1 : 205–212.
URL http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361:20066172 68

Dale, D. A. and **G. Helou**, 2002. The Infrared Spectral Energy Distribution of Normal Star-forming Galaxies : Calibration at Far-Infrared and Submillimeter Wavelengths. , 576, 1 : 159–168.
URL http://dx.doi.org/10.1086/341632 77

de Graauw, T., **L. N. Haser**, **D. A. Beintema**, **et collab.**, 1996. Observing with the ISO Short-Wavelength Spectrometer. , 315 : L49–L54. 27

de Graauw, T., **F. P. Helmich**, **T. G. Phillips**, **et collab.**, 2010. The Herschel-Heterodyne Instrument for the Far-Infrared (HIFI). , 518 : L6.
URL http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/201014698 29

DeFrees, D. J., **M. D. Miller**, **D. Talbi**, **et collab.**, 1993. Theoretical infrared spectra of some model polycyclic aromatic hydrocarbons - Effect of ionization. , 408 : 530–538.
URL http://dx.doi.org/10.1086/172610 67

Donoho, D. and **V. Stodden**, 2003. When Does Non-Negative Matrix Factorization Give a Correct Decomposition into Parts ? page 8. 34

Dorner, B., **Giardino, G.**, **Ferruit, P.**, **et collab.**, 2016. A model-based approach to the spatial and spectral calibration of nirspec onboard jwst. A&A, 592 : A113.
URL http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/201628263 30

Douglas, A. E. and **G. Herzberg**, 1941. Note on CH$\hat{\{+\}}$ in Interstellar Space and in the Laboratory. , 94 : 381.
URL http://dx.doi.org/10.1086/144342 9

Draine, B., 1989. On the Interpretation of the λ 2175 Å Feature. In **L. J. Allamandola** and **A. G. G. M. Tielens**, editors, Interstellar Dust, volume 135 of IAU Symposium, page 313. 11

Draine, B. T., 1978. Photoelectric heating of interstellar gas. , 36 : 595–619.
URL http://dx.doi.org/10.1086/190513 14

Draine, B. T., 2011. Physics of the Interstellar and Intergalactic Medium. 15

Draine, B. T. and **F. Bertoldi**, 1996. Structure of Stationary Photodissociation Fronts. , 468 : 269.
URL http://dx.doi.org/10.1086/177689 14

Ekern, S. P., **A. G. Marshall**, **J. Szczepanski**, **et collab.**, 1998. Photodissociation of Gas-Phase Polycylic Aromatic Hydrocarbon Cations. Journal of Physical Chemistry A, 102, 20 : 3498–3504.
URL http://dx.doi.org/10.1021/jp980488e 83

Fazio, G. G., **J. L. Hora**, **L. E. Allen**, **et collab.**, 2004. The Infrared Array Camera (IRAC) for the Spitzer Space Telescope. , 154, 1 : 10–17.
URL http://dx.doi.org/10.1086/422843 29

Finkenzeller, U., 1985. Rotational velocities, spectral types and forbidden lines of Herbig Ae/Be stars. , 151 : 340–348. 78

Fitzpatrick, E. L., 1999. Correcting for the Effects of Interstellar Extinction. Publications of the Astronomical Society of the Pacific, 111, 755 : 63–75.
URL http://dx.doi.org/10.1086/316293 10, VII

Foschino, S., **Berné, O.**, and **Joblin, C.**, 2019. Learning mid-IR emission spectra of polycyclic aromatic hydrocarbon populations from observations. A&A, 632 : A84.
URL http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/201935085 58, 60, 63, 66, X

Fuente, A., **J. Martin-Pintado**, **R. Neri**, **et collab.**, 1996. The filamentary structure of the interface between the atomic and the molecular phases in NGC 7023. , 310 : 286–296. 78

Galliano, F., **M. Galametz**, and **A. P. Jones**, 2018. The Interstellar Dust Properties of Nearby Galaxies. , 56 : 673–713.
URL http://dx.doi.org/10.1146/annurev-astro-081817-051900 44

Galliano, F., **S. C. Madden**, **A. G. G. M. Tielens**, **et collab.**, 2008. Variations of the Mid-IR Aromatic Features inside and among Galaxies. , 679, 1 : 310–345.
URL http://dx.doi.org/10.1086/587051 47

Gardner, J. P., **J. C. Mather**, **M. Clampin**, **et collab.**, 2006. The James Webb Space Telescope. Space Science Reviews, 123, 4 : 485–606.
URL http://dx.doi.org/10.1007/s11214-006-8315-7 29

Geballe, T. R., 2016. The diffuse interstellar bands - a brief review. Journal of Physics : Conference Series, 728 : 062 005.
URL http://dx.doi.org/10.1088/1742-6596/728/6/062005 14

Giard, M., **J. P. Bernard**, and **M. Dennefeld**, 1992. The 3.3 micron emission in M17. , 264 : 610–622. 44

Griffin, M. J., **A. Abergel**, **A. Abreu**, **et collab.**, 2010. The Herschel-SPIRE instrument and its in-flight performance. , 518 : L3.
URL http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/201014519 29

Güver, T. and **F. Özel**, 2009. The relation between optical extinction and hydrogen column density in the Galaxy. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 400, 4 : 2050–2053.
URL http://dx.doi.org/10.1111/j.1365-2966.2009.15598.x 10

Habing, H. J., 1968. The interstellar radiation density between 912 A and 2400 A. , 19 : 421. 14, 15

Hager, J. W. and **S. C. Wallace**, 1988. Two-laser photoionization supersonic jet mass spectrometry of aromatic molecules. Analytical Chemistry, 60, 1 : 5–10.
URL http://dx.doi.org/10.1021/ac00152a003 85, XI

Heays, A. N., **A. D. Bosman**, and **E. F. van Dishoeck**, 2017. Photodissociation and photoionisation of atoms and molecules of astrophysical interest. A&A, 602 : A105.
URL http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/201628742 14

Herbst, E. and **E. F. van Dishoeck**, 2009. Complex organic interstellar molecules. Annual Review of Astronomy and Astrophysics, 47, 1 : 427–480.
URL http://dx.doi.org/10.1146/annurev-astro-082708-101654 9

Heyer, M. and **T. Dame**, 2015. Molecular Clouds in the Milky Way. Annual Review of Astronomy and Astrophysics, 53, 1 : 583–629.
URL http://dx.doi.org/10.1146/annurev-astro-082214-122324 5, 9

Hollenbach, D. J. and **H. A. Thronson**, editors, 1987. Interstellar Processes : Proceedings of the Symposium on Interstellar Processes, Held in Grand Teton National Park, July 1986, volume 134 of Astrophysics and Space Science Library. Springer Netherlands, Dordrecht. ISBN 978-90-277-2485-4 978-94-009-3861-8.
URL http://dx.doi.org/10.1007/978-94-009-3861-8 4

Hollenbach, D. J. and **A. G. G. M. Tielens**, 1999. Photodissociation regions in the interstellar medium of galaxies. Reviews of Modern Physics, 71, 1 : 173–230.
URL http://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.71.173 14, 15, 16, 17, VIII

Hony, S., **C. Van Kerckhoven**, **E. Peeters**, **et collab.**, 2001. The CH out-of-plane bending modes of PAH molecules in astrophysical environments. , 370, 3 : 1030–1043.
URL http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361:20010242 44, 46, 73

Houck, J. R., **T. L. Roellig**, **J. van Cleve**, **et collab.**, 2004. The Infrared Spectrograph (IRS) on the Spitzer Space Telescope. , 154, 1 : 18–24.
URL http://dx.doi.org/10.1086/423134 27

Hsia, C.-H., **S. Sadjadi**, **Y. Zhang**, **et collab.**, 2016. THE 6 m FEATURE AS A TRACER OF ALIPHATIC COMPONENTS OF INTERSTELLAR CARBONACEOUS GRAINS. , 832, 2 : 213.
URL http://dx.doi.org/10.3847/0004-637X/832/2/213 73

Hudgins, D. M. and **L. J. Allamandola**, 1999. Interstellar PAH Emission in the 11-14 Micron Region : New Insightsfrom Laboratory Data and a Tracer of Ionized PAHS. , 516 : L41–L44.
URL http://dx.doi.org/10.1086/311989 67

Hummer, D. G. and **M. J. Seaton**, 1963. The ionization structure of planetary nebulae, I. Pure hydrogen nebulae. , 125 : 437.
URL http://dx.doi.org/10.1093/mnras/125.5.437 5

Hyvarinen, A., 1999. Fast and robust fixed-point algorithms for independent component analysis. IEEE Transactions on Neural Networks, 10, 3 : 626–634.
URL http://dx.doi.org/10.1109/72.761722 31

Joalland, B., **A. Simon**, **C. J. Marsden**, **et collab.**, 2009. Signature of $[SiPAH]^+$ π-complexes in the interstellar medium. , 494 : 969–976.
URL http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361:200810863 73

Joblin, C., **E. Bron**, **C. Pinto**, **et collab.**, 2018. Structure of photodissociation fronts in star-forming regions revealed by Herschel observations of high-J CO emission lines. , 615 : A129.
URL http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/201832611 20, 78, 88, 89, VIII

Joblin, C., **A. Leger**, and **P. Martin**, 1992. Contribution of polycyclic aromatic hydrocarbon molecules to the interstellar extinction curve. The Astrophysical Journal, 393 : L79.
URL http://dx.doi.org/10.1086/186456 11

Joblin, C., **P. Pilleri**, **J. Montillaud**, **et collab.**, 2010. Gas morphology and energetics at the surface of PDRs : New insights with *Herschel* observations of NGC 7023. Astronomy and Astrophysics, 521 : L25.
URL http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/201015129 76, X

Joblin, C., **R. Szczerba**, **O. Berné**, **et collab.**, 2008. Carriers of the mid-IR emission bands in PNe reanalysed : Evidence of a link between circumstellar and interstellar aromatic dust. , 490, 1 : 189–196.

URL http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361:20079061 50, 51, 61, 69, 70, 72, 73, X

Joblin, C., **A. G. G. M. Tielens**, **L. J. Allamandola**, **et collab.**, 1996a. Spatial Variation of the 3.29 and 3.40 Micron Emission Bands within Reflection Nebulae and the Photochemical Evolution of Methylated Polycyclic Aromatic Hydrocarbons. , 458 : 610.
URL http://dx.doi.org/10.1086/176843 44, 72

Joblin, C., **A. G. G. M. Tielens**, **T. R. Geballe**, **et collab.**, 1996b. Variations of the 8.6 and 11.3 MU M Emission Bands within NGC 1333 : Evidence for PAH Cations. , 460 : L119.
URL http://dx.doi.org/10.1086/309986 68

Joblin, C., **G. Wenzel**, **S. Rodriguez Castillo**, **et collab.**, 2020. Photo-processing of astro-PAHs. In Journal of Physics Conference Series, volume 1412 of Journal of Physics Conference Series, page 062002.
URL http://dx.doi.org/10.1088/1742-6596/1412/6/062002 37

Jochims, H. W., **H. Baumgaertel**, and **S. Leach**, 1996. Photoionization quantum yields of polycyclic aromatic hydrocarbons. , 314 : 1003–1009. 40, 84, 85

Jochims, H. W., **E. Ruhl**, **H. Baumgartel**, **et collab.**, 1994. Size Effects on Dissociation Rates of Polycyclic Aromatic Hydrocarbon Cations : Laboratory Studies and Astrophysical Implications. , 420 : 307.
URL http://dx.doi.org/10.1086/173560 83

Jolliffe, I. T. and **J. Cadima**, 2016. Principal component analysis : a review and recent developments. Philosophical Transactions of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 374, 2065 : 20150 202.
URL http://dx.doi.org/10.1098/rsta.2015.0202 31

Kemper, F., **W. J. Vriend**, and **A. G. G. M. Tielens**, 2005. Erratum : "The Absence of Crystalline Silicates in the Diffuse Interstellar Medium" (ApJ, 609, 826 [2004]). The Astrophysical Journal, 633, 1 : 534–534.
URL http://dx.doi.org/10.1086/447764 10

Kurucz, R. L., 1993. VizieR Online Data Catalog : Model Atmospheres (Kurucz, 1979). VizieR Online Data Catalog, VI/39. 15, 88

Langville, A., N., **C. Meyer, D.**, and **Russel**, . Initializations for the Nonnegative Matrix Factorization. 35

Le Page, V., **T. P. Snow**, and **V. M. Bierbaum**, 2001. Hydrogenation and Charge States of PAHS in Diffuse Clouds. I. Development of a Model. , 132, 2 : 233–251.
URL http://dx.doi.org/10.1086/318952 VI

Le Petit, F., **C. Nehme**, **J. Le Bourlot**, **et collab.**, 2006. A Model for Atomic and Molecular Interstellar Gas : The Meudon PDR Code. The Astrophysical Journal Supplement Series, 164, 2 : 506–529.
URL http://dx.doi.org/10.1086/503252 20, 92

Lee, D. D. and **H. S. Seung**, 1999. Learning the parts of objects by non-negative matrix factorization. Nature, 401, 6755 : 788–791.
URL http://dx.doi.org/10.1038/44565 32

Lee, D. D. and **H. S. Seung**, 2001. Algorithms for Non-negative Matrix Factorization. In **T. K. Leen**, **T. G. Dietterich**, and **V. Tresp**, editors, Advances in Neural Information Processing Systems 13, pages 556–562. MIT Press.
URL http://papers.nips.cc/paper/1861-algorithms-for-non-negative-matrix-factoriz
pdf 32, 33, 49

Leech, K., **D. Kester**, **R. Shipman**, **et collab.**, 2003. SWS – The Short Wavelength Spectrometer. page 219. 27, 56, XIII

Leger, A., **L. D'Hendecourt**, and **D. Defourneau**, 1989. Physics of IR emission by interstellar PAH molecules. , 216, 1-2 : 148–164. 12, 83, XIII

Leger, A. and **J. L. Puget**, 1984. Identification of the "unidentified" IR emission features of interstellar dust ? , 500 : 279–282. 11, 83

Lemaire, J. L., **D. Field**, and **J. P. Maillard**, 1996. High resolution Fourier transform spectroscopy of H2 IR emission in NGC 7023. page 6. 78, 79, 80, XI

Lemke, D., **U. Klaas**, **J. Abolins**, **et collab.**, 1996. ISOPHOT - capabilities and performance. , 315 : L64–L70. 27

Li, A. and **B. T. Draine**, 2001. Infrared Emission from Interstellar Dust. II. The Diffuse Interstellar Medium. , 554, 2 : 778–802.
URL http://dx.doi.org/10.1086/323147 47

Li, W., **I. Evans, Neal J.**, **P. M. Harvey**, **et collab.**, 1994. Near-Infrared (J, H, K) Imaging of Herbig Ae/Be Stars. , 433 : 199.
URL http://dx.doi.org/10.1086/174636 78

Lin, C.-J., 2007. Projected Gradient Methods for Nonnegative Matrix Factorization. Neural Computation, 19, 10 : 2756–2779.
URL http://dx.doi.org/10.1162/neco.2007.19.10.2756 33

Luo, J. and **Z. Zhang**, 2000. Using eigenvalue grads method to estimate the number of signal source. In WCC 2000 - ICSP 2000. 2000 5th International Conference on Signal Processing Proceedings. 16th World Computer Congress 2000, volume 1, pages 223–225 vol.1.
URL http://dx.doi.org/10.1109/ICOSP.2000.894479 34

Malloci, G., **C. Joblin**, and **G. Mulas**, 2007a. On-line database of the spectral properties of polycyclic aromatic hydrocarbons. Chemical Physics, 332, 2 : 353 – 359.
URL http://dx.doi.org/https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2007.01.001
39, 83, 84

Malloci, G., **C. Joblin**, and **G. Mulas**, 2007b. Theoretical evaluation of PAH dication properties. Astronomy & Astrophysics, 462, 2 : 627–635.
URL http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361:20066053 39, 85, XI

Martin, S., **M. Ji**, **J. Bernard**, **et collab.**, 2015. Fast radiative cooling of anthracene : Dependence on internal energy. , 92, 5 : 053425.
URL http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.92.053425 39

McGuire, B. A., 2018. 2018 Census of Interstellar, Circumstellar, Extragalactic, Protoplanetary Disk, and Exoplanetary Molecules. The Astrophysical Journal Supplement Series, 239, 2 : 17.
URL http://dx.doi.org/10.3847/1538-4365/aae5d2 8

McKellar, A., 1940. Wave Lengths of the CH Band Lines. Publications of the Astronomical Society of the Pacific, 52 : 312.
URL http://dx.doi.org/10.1086/125205 9

Meganem, I., **Y. Deville**, and **M. Puigt**, 2010. Blind separation methods based on correlation for sparse possibly-correlated images. IEEE International Conference ICASSP, pages 1334–1337. 31

Montillaud, J., **C. Joblin**, and **D. Toublanc**, 2013. Evolution of polycyclic aromatic hydrocarbons in photodissociation regions : Hydrogenation and charge states. Astronomy & Astrophysics, 552 : A15.
URL http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/201220757 41, 83, 89, VI

Moss, G. P., **P. A. S. Smith**, and **D. Tavernier**, 1995. Glossary of class names of organic compounds and reactivity intermediates based on structure (iupac recommendations 1995). Pure and Applied Chemistry, 67, 8-9 : 1307 – 1375.
URL http://dx.doi.org/https://doi.org/10.1351/pac199567081307 73

Moussaoui, S., **D. Brie**, and **J. Idier**, 2005. Non-negative Source Separation : Range of Admissible Solutions and Conditions for the Uniqueness of the Solution. In Proceedings. (ICASSP '05). IEEE International Conference on Acoustics, Speech, and Signal Processing, 2005., volume 5, pages 289–292. IEEE, Philadelphia, Pennsylvania, USA. ISBN 978-0-7803-8874-1.
URL http://dx.doi.org/10.1109/ICASSP.2005.1416297 34

Mulas, G., **G. Malloci**, **C. Joblin**, **et collab.**, 2006. Estimated IR and phosphorescence emission fluxes for specific polycyclic aromatic hydrocarbons in the <ASTROBJ>Red Rectangle</ASTROBJ>. , 446, 2 : 537–549.
URL http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361:20053738 14

Ohsawa, R., **T. Onaka**, **I. Sakon**, **et collab.**, 2016. *AKARI* /IRC NEAR-INFRARED SPECTRAL ATLAS OF GALACTIC PLANETARY NEBULAE. , 151, 4 : 93.
URL http://dx.doi.org/10.3847/0004-6256/151/4/93 72

Okada, Y., **P. Pilleri**, **O. Berné**, **et collab.**, 2013. Probing the role of polycyclic aromatic hydrocarbons in the photoelectric heating within photodissociation regions. Astronomy & Astrophysics, 553 : A2.
URL http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/201118450 76, 77, X

Omont, A., 1986. Physics and chemistry of interstellar polycyclic aromatic molecules. , 164 : 159–178. 37

Paatero, P., 1997. Least squares formulation of robust non-negative factor analysis. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 37, 1 : 23–35.
URL http://dx.doi.org/10.1016/S0169-7439(96)00044-5 31

Paatero, P. and **U. Tapper**, 1994. Positive matrix factorization : A non-negative factor model with optimal utilization of error estimates of data values. Environmetrics, 5, 2 : 111–126.
URL http://dx.doi.org/10.1002/env.3170050203 31, 33

Pauzat, F., **D. Talbi**, and **Y. Ellinger**, 1995. UIR bands : computational experiments on the IR spectra of naphthalene derivatives as models for PAHs. , 293 : 263–277. 67, 70, 73

Pech, C., **C. Joblin**, and **P. Boissel**, 2002. The profiles of the aromatic infrared bands explained with molecular carriers. , 388 : 639–651.
URL http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361:20020416 48

Peeters, E., **C. W. Bauschlicher**, **L. J. Allamandola**, **et collab.**, 2017. The PAH Emission Characteristics of the Reflection Nebula NGC 2023. , 836, 2 : 198.
URL http://dx.doi.org/10.3847/1538-4357/836/2/198 47

Peeters, E., **S. Hony**, **C. Van Kerckhoven**, **et collab.**, 2002. The rich 6 to 9 $\vec\mu$m spectrum of interstellar PAHs. , 390, 3 : 1089–1113.
URL http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361:20020773 44, 46, 47, 70, 72, IX

Ph. Bréchignac, **L. Verstraete**, **E. Dartois**, **et collab.**, . Photoionization of polycyclic aromatic hydrocarbons : contribution to the heating of the interstellar medium.
URL https://tielens2019.sciencesconf.org/data/program/Brechignac_Talk_Avignon_Tielens.pdf 92

Pilbratt, G. L., **J. R. Riedinger**, **T. Passvogel**, **et collab.**, 2010. Herschel Space Observatory. An ESA facility for far-infrared and submillimetre astronomy. , 518 : L1.
URL http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/201014759 29

Pilleri, P., **D. Herberth**, **T. F. Giesen**, **et collab.**, 2009. Search for corannulene ($C_{20}H_{10}$) in the Red Rectangle. , 397, 2 : 1053–1060.
URL http://dx.doi.org/10.1111/j.1365-2966.2009.15067.x 14

Pilleri, P., **C. Joblin**, **F. Boulanger**, **et collab.**, 2015. Mixed aliphatic and aromatic composition of evaporating very small grains in NGC 7023 revealed by the 3.4/3.3 m ratio. , 577 : A16.
URL http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/201425590 72, 73

Pilleri, P., **J. Montillaud**, **O. Berné**, **et collab.**, 2012. Evaporating very small grains as tracers of the UV radiation field in photo-dissociation regions. , 542 : A69.
URL http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/201015915 50, 51, 61, 62, 68, 70, 77, 78, 79, 80, 81, 88, 89, 91, X, XI

Poglitsch, A., **C. Waelkens**, **N. Geis**, **et collab.**, 2010. The Photodetector Array Camera and Spectrometer (PACS) on the Herschel Space Observatory. , 518 : L2.
URL http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/201014535 29

Predehl, P. and **J. H. M. M. Schmitt**, 1995. X-raying the interstellar medium : ROSAT observations of dust scattering halos. , 500 : 459–475. 10

Racine, R., 1968. Stars in reflection nebulae. , 73 : 233–245.
URL http://dx.doi.org/10.1086/110624 78

Rapacioli, M., **F. Calvo**, **C. Joblin**, **et collab.**, 2006. Formation and destruction of polycyclic aromatic hydrocarbon clusters in the interstellar medium. , 460, 2 : 519–531.
URL http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361:20065412 49

Rapacioli, M., **C. Joblin**, and **P. Boissel**, 2005. Spectroscopy of polycyclic aromatic hydrocarbons and very small grains in photodissociation regions. , 429, 1 : 193–204.
URL http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361:20041247 21, 34, 44, 49, 50, 59, 61, 68, 72, 80

Reeves, H., 1969. PROPRIÉTÉS DES NOYAUX ET ABONDANCE COSMIQUE DES ÉLÉMENTS. Le Journal de Physique Colloques, 30, C3 : C3–132–C3–136.
URL http://dx.doi.org/10.1051/jphyscol:1969321 8, VII

Rezaei, M., **R. Boostani**, and **M. Rezaei**, 2011. An efficient initialization method for nonnegative Matrix factorization. Journal of Applied Sciences, 11 : 354–359. 35

Riechers, D. A., **A. Pope**, **E. Daddi**, **et collab.**, 2014. Polycyclic Aromatic Hydrocarbon and Mid-Infrared Continuum Emission in a z &gt ; 4 Submillimeter Galaxy. , 786, 1 : 31.
URL http://dx.doi.org/10.1088/0004-637X/786/1/31 44

Rieke, G. H., **G. S. Wright**, **T. BÃ¶ker**, **et collab.**, 2015. The mid-infrared instrument for the james webb space telescope , i : Introduction. Publications of the Astronomical Society of the Pacific, 127, 953 : 584.
URL http://stacks.iop.org/1538-3873/127/i=953/a=584 30

Rieke, G. H., **E. T. Young**, **C. W. Engelbracht**, **et collab.**, 2004. The Multiband Imaging Photometer for Spitzer (MIPS). , 154, 1 : 25–29.
URL http://dx.doi.org/10.1086/422717 29

Rodriguez Castillo, S., **A. Simon**, and **C. Joblin**, 2018. Investigating the importance of edge-structure in the loss of h/h_2 of pah cations : The case of dibenzopyrene isomers. International Journal of Mass Spectrometry, 429 : 189–197.
URL http://dx.doi.org/10.1016/j.ijms.2017.09.013 41

Rosenberg, M. J. F., **O. Berné**, **C. Boersma**, **et collab.**, 2011. Coupled blind signal separation and spectroscopic database fitting of the mid infrared PAH features. , 532 : A128.
URL http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/201016340 32, 35, 49, 61, 68, 80, 93, IX

Salama, A., **I. Ortiz**, **C. Arviset**, **et collab.**, 2004. User provided reduced data, catalogues and atlases in the ISO Data Archive. page 4. 54

Salama, F., **E. L. O. Bakes**, **L. J. Allamandola**, **et collab.**, 1996. Assessment of the Polycyclic Aromatic Hydrocarbon–Diffuse Interstellar Band Proposal. , 458 :

621.
URL http://dx.doi.org/10.1086/176844 14

Salama, F., **G. A. Galazutdinov**, **J. Krełowski**, **et collab.**, 1999. Polycyclic Aromatic Hydrocarbons and the Diffuse Interstellar Bands : A Survey. , 526, 1 : 265–273.
URL http://dx.doi.org/10.1086/307978 14

Sloan, G. C., **J. D. Bregman**, **T. R. Geballe**, **et collab.**, 1997. Variations in the 3 Micron Spectrum across the Orion Bar : Polycyclic Aromatic Hydrocarbons and Related Molecules. , 474 : 735–740.
URL http://dx.doi.org/10.1086/303484 44, 72

Sloan, G. C., **K. E. Kraemer**, **S. D. Price**, **et collab.**, 2003. A Uniform Database of 2.4–45.4 Micron Spectra from the *Infrared Space Observatory* Short Wavelength Spectrometer. , 147, 2 : 379–401.
URL http://dx.doi.org/10.1086/375443 27, 54, 57, 63

Smith, J. D. T., **L. Armus**, **D. A. Dale**, **et collab.**, 2007a. Spectral Mapping Reconstruction of Extended Sources. , 119, 860 : 1133–1144.
URL http://dx.doi.org/10.1086/522634 79

Smith, J. D. T., **B. T. Draine**, **D. A. Dale**, **et collab.**, 2007b. The Mid-Infrared Spectrum of Star-forming Galaxies : Global Properties of Polycyclic Aromatic Hydrocarbon Emission. , 656 : 770–791.
URL http://dx.doi.org/10.1086/510549 47, IX

Spitzer, L., 2004. Physical processes in the interstellar medium. Physics textbook. Wiley, Weinheim. ISBN 978-0-471-29335-4. OCLC : 255567470. VI

Steglich, M., **C. Jäger**, **F. Huisken**, **et collab.**, 2013. The Abundances of Hydrocarbon Functional Groups in the Interstellar Medium Inferred from Laboratory Spectra of Hydrogenated and Methylated Polycyclic Aromatic Hydrocarbons. , 208 : 26.
URL http://dx.doi.org/10.1088/0067-0049/208/2/26 72

Stein, S. E. and **B. S. Rabinovitch**, 1973. Accurate evaluation of internal energy level sums and densities including anharmonic oscillators and hindered rotors. The Journal of Chemical Physics, 58, 6 : 2438–2445.
URL http://dx.doi.org/10.1063/1.1679522 38

Stock, D. J. and **E. Peeters**, 2017. Polycyclic Aromatic Hydrocarbon Emission in Spitzer/IRS Maps. II. A Direct Link between Band Profiles and the Radiation Field Strength. , 837, 2 : 129.
URL http://dx.doi.org/10.3847/1538-4357/aa5f54 47

Strömgren, B., 1939. The Physical State of Interstellar Hydrogen. , 89 : 526.
URL http://dx.doi.org/10.1086/144074 5

Swings, P. and **L. Rosenfeld**, 1937. Considerations Regarding Interstellar Molecules. The Astrophysical Journal, 86 : 483.
URL http://dx.doi.org/10.1086/143880 9

Szczepanski, J. and **M. Vala**, 1993. Infrared frequencies and intensities for astrophysically important polycyclic aromatic hydrocarbon cations. , 414 : 646–655.
URL http://dx.doi.org/10.1086/173110 67

Thaddeus, P., 2006. The prebiotic molecules observed in the interstellar gas. Philosophical Transactions of the Royal Society B : Biological Sciences, 361, 1474 : 1681–1687.
URL http://dx.doi.org/10.1098/rstb.2006.1897 14

Tielens, A., 2005. The Physics and Chemistry of the Interstellar Medium. 19, 87

Tielens, A. G. G. M., 2008. Interstellar Polycyclic Aromatic Hydrocarbon Molecules. Annual Review of Astronomy and Astrophysics, 46, 1 : 289–337.
URL http://dx.doi.org/10.1146/annurev.astro.46.060407.145211 44, 50, X

Tielens, A. G. G. M., 2013. The molecular universe. Rev. Mod. Phys., 85 : 1021–1081.
URL http://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.85.1021 9

van den Ancker, M. E., **P. S. The**, **H. R. E. Tjin A Djie**, **et collab.**, 1997. HIPPARCOS data on Herbig Ae/Be stars : an evolutionary scenario. , 324 : L33–L36. 78

van Dishoeck, E. F. and **J. H. Black**, 1982. The excitation of interstellar C2. , 258 : 533–547.
URL http://dx.doi.org/10.1086/160104 15

van Leeuwen, F., 2007. Validation of the new Hipparcos reduction. , 474, 2 : 653–664.
URL http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361:20078357 78

Verstraete, L., **A. Leger**, **L. D'Hendecourt**, **et collab.**, 1990. Ionization cross-section measurements for two PAH molecules - Implications for the heating of diffuse interstellar gas. , 237, 2 : 436–444. 40, 84, 87, VI

Verstraete, L., **C. Pech**, **C. Moutou**, **et collab.**, 2001. The Aromatic Infrared Bands as seen by ISO-SWS : Probing the PAH model. Astronomy & Astrophysics, 372, 3 : 981–997.
URL http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361:20010515 47

Vijh, U. P., **A. N. Witt**, and **K. D. Gordon**, 2004. Discovery of Blue Luminescence in the Red Rectangle : Possible Fluorescence from Neutral Polycyclic Aromatic Hydrocarbon Molecules ? , 606, 1 : L65–L68.
URL http://dx.doi.org/10.1086/421106 14

Vijh, U. P., **A. N. Witt**, and **K. D. Gordon**, 2005. Blue Luminescence and the Presence of Small Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in the Interstellar Medium. , 633, 1 : 262–271.
URL http://dx.doi.org/10.1086/447763 14

Weingartner, J. C. and **B. T. Draine**, 2001. Photoelectric Emission from Interstellar Dust : Grain Charging and Gas Heating. The Astrophysical Journal Supplement Series, 134, 2 : 263–281.
URL http://dx.doi.org/10.1086/320852 17, 39, 40

Wenzel, G., **C. Joblin**, **A. Giuliani**, **et collab.**, 2020. Astrochemical relevance of VUV ionization of large PAH cations. , 641 : A98.
URL http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/202038139 40, 41, 83, 84, 85, IX, XI

Werner, M. W., **T. L. Roellig**, **F. J. Low**, **et collab.**, 2004. The spitzer space telescope mission. The Astrophysical Journal Supplement Series, 154, 1 : 1–9.
URL http://dx.doi.org/10.1086/422992 27

Werner, M. W., **T. L. Roellig**, **F. J. Low**, **et collab.**, 2004a. The Spitzer Space Telescope Mission. , 154 : 1–9.
URL http://dx.doi.org/10.1086/422992 45, IX

Werner, M. W., **K. I. Uchida**, **K. Sellgren**, **et collab.**, 2004b. New Infrared Emission Features and Spectral Variations in NGC 7023. , 154, 1 : 309–314.
URL http://dx.doi.org/10.1086/422413 76, 79, 80, 81, XI

West, B., **S. Rodriguez Castillo**, **A. Sit**, **et collab.**, 2018. Unimolecular reaction energies for polycyclic aromatic hydrocarbon ions. Physical chemistry chemical physics : PCCP, 20, 10 : 7195–7205.
URL http://dx.doi.org/10.1039/c7cp07369k 41

Wild, S., **J. Curry**, and **A. Dougherty**, 2004. Improving non-negative matrix factorizations through structured initialization. Pattern Recognition, 37, 11 : 2217–2232.
URL http://dx.doi.org/10.1016/j.patcog.2004.02.013 35

Ysard, N., **M. Juvela**, and **L. Verstraete**, 2011. Modelling the spinning dust emission from dense interstellar clouds. , 535 : A89.
URL http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/201117394 12

Ysard, N. and **L. Verstraete**, 2010. The long-wavelength emission of interstellar PAHs : characterizing the spinning dust contribution. , 509 : A12.
URL http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/200912708 12

Zang, R. X., **E. Peeters**, and **C. Boersma**, 2019. Tying spatial variations in polycyclic aromatic hydrocarbon (PAH) emission to a changing PAH population in the reflection nebula NGC 2023. The Astrophysical Journal, 887, 1 : 46.
URL http://dx.doi.org/10.3847/1538-4357/ab4e99 47

Zhen, J., **S. R. Castillo**, **C. Joblin**, **et collab.**, 2016. VUV PHOTO-PROCESSING OF PAH CATIONS : QUANTITATIVE STUDY ON THE IONIZATION VERSUS FRAGMENTATION PROCESSES. The Astrophysical Journal, 822, 2 : 113.
URL http://dx.doi.org/10.3847/0004-637X/822/2/113 40, 84, 85, XI

Annexe A

MASS-NMF-spec sur données normalisées

La figure A.1 représente l'extraction obtenue à partir de l'application du protocole MASS-NMF-spec sur $\mathbf{X}_{AIB}$ dont les lignes (spectres d'AIB pur) sont normalisées de sorte à avoir une aire égale à 1. Comme décrit en section 3.4.2, le spectre 4 de la figure 3.10 n'est plus représenté parmi les spectres extrait. Les spectres 1 à 3 sont proche des spectres moyens des spectre 1 à 3 (PAH^+, PAH^0 et eVSG) de la figure 3.10, le quatrième ne ressemble à rien de déjà extrait.

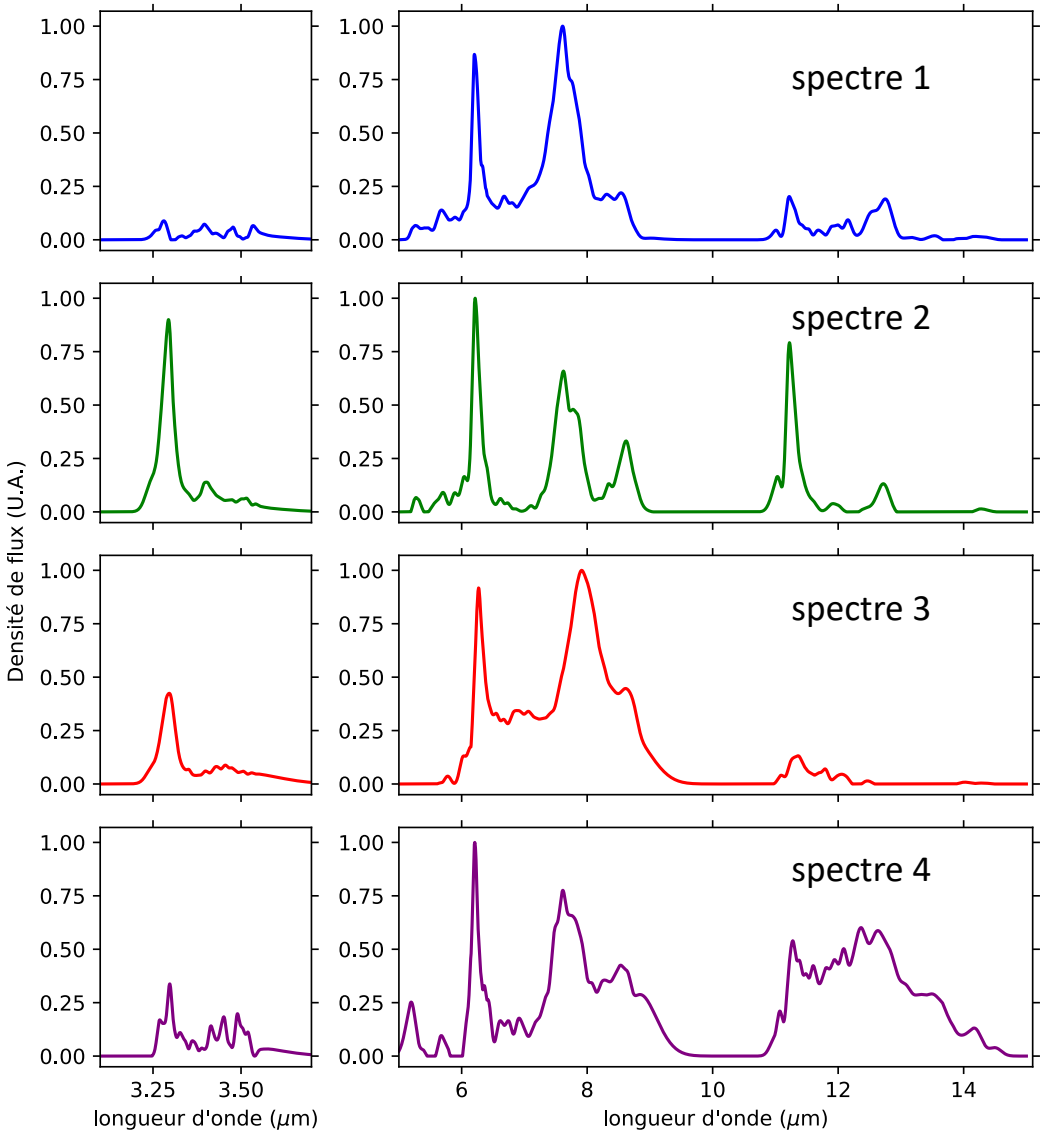

FIGURE A.1 – Extraction des spectres représentatifs par MASS-NMF à partir des données ISO-SWS normalisées à l'aire.

Annexe B

Ajustements PAHTAT dans NGC 7023 NW

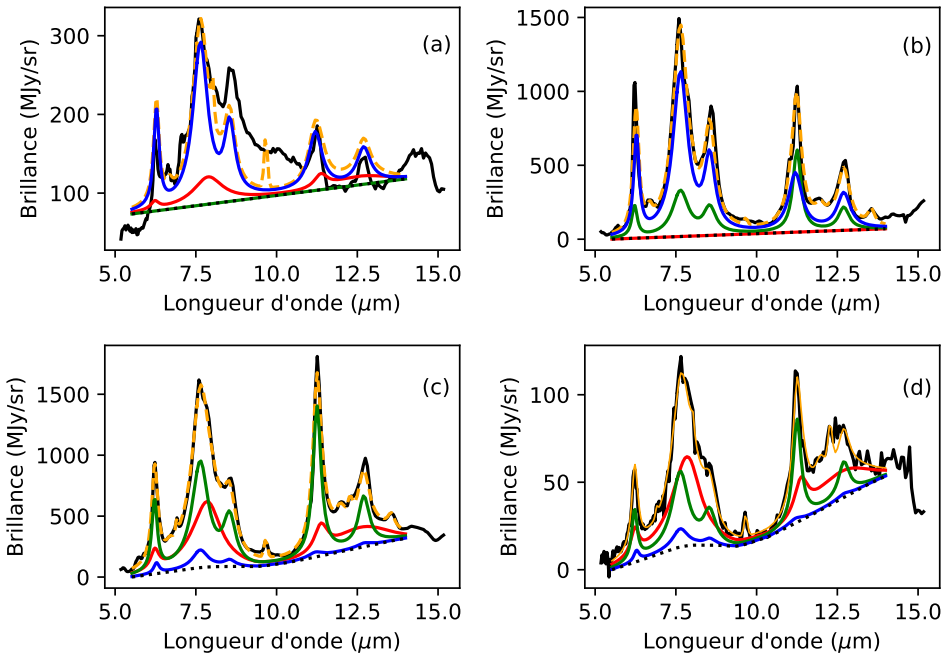

FIGURE B.1 – Exemples d'ajustements PAHTAT (tirets oranges) de spectres du cube hyperspectral *Spitzer*-IRS SL typiques de quatre intervalles de distances d par rapport à l'étoile, discutés en section 4.2.2. (a) : $d < 20''$; (b) : $20'' < d < 40''$; (c) : $40'' < d < 60''$; (d) : $> 60''$. Les données sont représentées en courbe pleine noire et le continuum en pointillés noirs. Chaque population de PAH^+, PAH^0 et eVSG sont en courbe bleue, verte et rouge respectivement.

Annexe C

Calcul des fractions d'état de charge des PAH

Dans le cas général, tout milieu présente une distribution de charge des PAH qui est directement liée aux conditions physiques locales. Chaque état de charge des PAH contribuera différemment au chauffage, ce qui influencera l'efficacité globale de ce phénomène. Il est donc nécessaire d'estimer la fraction f^{Z+} des PAH dans chaque état de charge Z. Si l'on considère l'évolution des charges à l'équilibre, il est possible d'écrire :

$$(k^{Z}_{\rm rec} + k^{Z}_{\rm pe}) f^{Z+} = f^{(Z-1)+} k^{(Z-1)+}_{\rm pe} + f^{(Z+1)+} k^{(Z+1)+}_{\rm rec} \tag{C.1}$$

où $\mathrm{k}^{Z+}_{\rm pe}$ et $\mathrm{k}^{Z+}_{\rm rec}$ sont respectivement les taux d'ionisation et de recombinaison du PAH dans un état d'ionisation Z. Le système d'équations engendré par l'équation C.1 est fermé par :

$$\sum_{Z_{\rm min}}^{Z_{\rm max}} f^{Z+} = 1. \tag{C.2}$$

Fraction des états de charge des PAH

L'application de l'équation C.1 dans le cas de trois états de charge accessibles, en considérant l'équilibre des charges donne :

$$f^{+} = (1 + \frac{k^{+}_{rec}}{k^{0}_{pe}} + \frac{k^{+}_{pe}}{k^{++}_{rec}})^{-1}, \tag{C.3}$$

$$f^{0} = (1 - f^{+}\frac{k^{+}_{pe}}{k^{++}_{rec}})(1 + \frac{k^{0}_{pe}}{k^{+}_{rec}})^{-1}, \tag{C.4}$$

$$f^{++} = (1 - f^{0})(1 + \frac{k^{++}_{rec}}{k^{+}_{pe}})^{-1}, \tag{C.5}$$

Avec pour rappel : $f^0 + f^+ + f^{++} = 1$. On définit de plus la fraction d'ionisation des PAH issue du modèle par $f^{Mod}_{ion} = f^+ + f^{++}$. Les valeurs d'efficacité du chauffage par effet PE sur les PAH estimées par ce modèle sont comparées à f^{Mod}_{ion} en section 4.4.2.

Taux d'ionisation

Le taux d'ionisation est déterminé à partir du modèle par :

$$k^{Z+}_{\rm pe} = \int_0^{\Omega} d\Omega \int_{IP^{(Z+1)+}}^{13.6} \frac{\sigma_{ion}(E,Z) I_E(E)}{E} dE \quad (\mathrm{s}^{-1}) \tag{C.6}$$

Le numérateur correspond à l'énergie absorbée lors d'événements d'ionisation. Sa division par l'énergie du photon donne le spectre du nombre d'événements d'ionisation. L'intégration sur les énergies possibles des photons donne le nombre total d'ionisations par seconde.

Taux de recombinaison

La recombinaison d'un électron avec un PAH chargé est un phénomène qui excite la molécule, impliquant l'augmentation de son énergie interne d'une énergie égale à son IP. Le risque est que cette recombinaison entraîne une fragmentation de la molécule. Le Page et collab. [2001] et Montillaud et collab. [2013] ont déjà discuté et évalué ce risque dans le cas des PAH cations. La hausse de l'énergie interne de la molécule peut se traiter de la même façon que l'absorption d'un photon d'énergie égale au IP. Pour les tailles de PAH considérées, la photodissociation est négligeable pour des énergies inférieures à 13.6 eV. Il en est donc de même pour la recombinaison avec les électrons.

Le taux de recombinaison électronique est estimé via la loi de Spitzer [Spitzer, 2004], valable pour des objets sphériques. Verstraete et collab. [1990] ont adapté ce taux à des PAH en considérant une forme en disque. Le coefficient de recombinaison électronique k_{rec}^{Z} est donné par :

$$k_{rec}^{Z} n_e = 1.28 \times 10^{-10} N_C \sqrt{T} (1 + \Phi) n_e \quad (\mathrm{s}^{-1}). \tag{C.7}$$

où n_e est la densité électronique et $\Phi = \frac{eU(a)}{kT} = \frac{1.85 \times 10^5}{T\sqrt{N_C}}$, avec U(a) le potentiel électrostatique moyen. Ce dernier est défini comme U(a)=$\frac{e}{a}$, avec e la charge du grain. Le paramètre a représente le rayon du grain, relié, dans le cas d'un PAH, au nombre de carbones N_C par a=$0.9\sqrt{N_C}$ Å. Verstraete et collab. [1990] utilisent l'expression C.7 dans le cas de la recombinaison d'un PAH cation. Dans le cas de la recombinaison d'un dication en cation, je ferai l'hypothèse que seul le potentiel électrostatique du grain change, passant à U(a)=$\frac{2e}{a}$. La recombinaison électronique d'un dication est aussi supposée non-dissociative. Ainsi, le coefficient de recombinaison électronique est implémenté dans le modèle par l'expression :

$$k_{rec}^{Z} n_e = 1.28 \times 10^{-10} N_C \sqrt{T} (1 + (Z+1) \frac{1.85 \times 10^5}{\sqrt{N_C} T}) n_e \quad (\mathrm{s}^{-1}). \tag{C.8}$$

Liste des figures

1.1 En haut : Vue globale de la Voie Lactée, crédit : Jeff Savadel. En bas : vue du centre galactique de la Voie Lactée, crédit : Hadrien Dupuis. . . 2

1.2 Représentation du cycle de la matière. L'étoile, selon sa masse suit plusieurs trajets d'évolution possibles. De haut en bas : l'étoile AGB IRC+10216 ; la nébuleuse planétaire de la Lyre (M57) ; l'étoile Wolf-Rayet WR124 ; le rémanent de la supernova SN1006, la nébuleuse d'Orion (M42) et le disque de "la soucoupe volante". A gauche, images du Soleil seul puis avec son cortège de planètes. Crédits : NASA/ESA/ESO. . . . 6

1.3 Représentation de la répartition relative de la masses des différents éléments chimiques dans la photosphère du Soleil (disques de couleur) et évolution de l'abondance logarithmique de la photosphère du Soleil avec le numéro atomique. Graphique adapté de Asplund et collab. [2009]. Pour une discussion de ce que cette courbe peut nous apprendre sur les propriétés atomiques de ces éléments, voir la discussiom de Reeves [1969]. 8

1.4 Courbe d'extinction du milieu diffus à haute latitude galactique. Pour les deux, les lignes en pointillés et tirets sont les contributions des différentes populations de grains considérées par le modèle DUSTEM [Compiègne et collab., 2011]. À gauche : courbe d'extinction dans la partie UV. Les losanges représentent la loi d'extinction paramétrée par Fitzpatrick [1999] et les barres d'erreurs la dispersion de la courbe d'extinction observée (voir également Fitzpatrick 1999). À droite : domaine infrarouge au millimétrique de la courbe d'extinction. Les points correspondent à la courbe observée. Figures extraites de l'étude de Compiègne et collab. [2011]. 10

1.5 Ajustement du spectre d'émission infrarouge du milieu diffus a haute latitude galactique (courbe et points en gris léger) par le modèle DUSTEM (courbe pleine noire). Les différentes courbes supplémentaires représentent les contributions des molécules polycycliques aromatiques hydrogénées (PAH), petits grains carbonés amorphes (SamC), gros grains carbonés amorphes (LamC) et silicates amorphes (aSil). D'après Compiègne et collab. [2011]. 11

1.6 Spectre infrarouge moyen de la nébuleuse planétaire NGC 7027. Les structures spectrales notées d'un trait noir font partie des bandes IR non-identifiée, aujourd'hui nommées bandes aromatiques infrarouges. Spectre provenant de l'instrument SWS à bord du satellite ISO. 12

1.7 Échantillon non-exhaustif de PAH de différentes formes. a : pentarylène, b : dibenzo-bc-kl-coronène, c : anthantrène, d : coronène, e : circumpyrène, f : tetrabenzocoronène, g : circumcoronène, h : circumovalène, i : dicoronylène, j : dibenzoperylène, k : ovalène, l : hexabenzocoronène, m : circumbiphenyl. Images provenant de la *Theoretical spectral database of PAH. Site web accessible à l'adresse : http://astrochemistry.oa-cagliari.inaf.it/database/pahs.html*. 13

1.8 Structure classique d'une PDR, adaptation personnelle de Hollenbach and Tielens [1999]. La source du rayonnement se trouve à gauche. Les échelles de profondeurs sont données en magnitude d'extinction dans le visible ainsi qu'en densité de colonne d'hydrogène. 16

1.9 Observation de la stratification de la PDR de la Barre d'Orion. Les couleurs représentent l'émission des PAH à 3.3μm (bleu) pour le gaz atomique, du H_2 1-0 S(1) (vert et jaune) pour le front de dissociation et du CO J=1-0 (rouge) pour le gaz moléculaire. La direction vers l'étoile massive θ^1 Ori C illuminant la PDR est indiquée. Différents traceurs sont utilisés pour sonder en profondeur les PDR. Issue de la review de Hollenbach and Tielens [1999]. 17

1.10 Représentation schématique de l'éjection d'un photoélectron dans le gaz. Un photon d'énergie typique de 10 eV est absorbé par un PAH ou un grain. Dans le première cas, le photoélectron est directement éjecté de la molécule après avoir passé son potentiel d'ionisation (voir section 2.3). Dans le second cas, le photoélectron perd de l'énergie cinétique par diffusion dans le volume du grain et doit s'échapper du potentiel Coulombien si celui-ci est chargé avant d'être éjecté. Dans les deux cas, le photoélectron s'échappe avec une énergie cinétique de quelques eV qu'il transmet au gaz. 18

1.11 Diagramme électronique du carbone ionisé (gauche) et de l'oxygène neutre (droite). Les flèches verticales vers le bas représentent les désexcitations radiative des niveaux de structure fine amenant au refroidissement du gaz. La constante k est la constante de Boltzmann. Les valeurs de densité critiques sont prises à une température du gaz à 100 K et des collisions avec H. Les coefficients d'Einstein A_{ul} pour la désexcitation spontanée de chaque transition sont affichés. 19

1.12 Modèle de la structure spatiale de la PDR NGC 7023 avec la profondeur obtenu par Joblin et collab. [2018]. En haut : évolution de la densité d'hydrogène et de la température du gaz avec la profondeur. Au centre : Profil spatial de l'émission des différents traceurs considérés par Joblin et collab. [2018]. Les émissions ont toutes été normalisées à leur maximum. En bas : profil spatial de l'abondance de certaines espèces. 20

2.1 Opacité de l'atmosphère dans l'infrarouge proche et moyen au niveau de l'observatoire *Gemini* au sommet du Mauna Kea (Hawaï). La zone grisée correspond à une absence de données. 25

2.2 Images des observatoires infrarouges utiles à ce travail. a : le *Infrared Space Observatory* ; b : *Spitzer* ; c : *Herschel* ; d : le *James Webb Space Telescope* en phase de test de déploiement des boucliers solaires en octobre 2019. Crédits : NASA/ESA/JPL-Caltech. 28

2.3 Résultat de 100 réalisations de la NMF par Rosenberg et collab. [2011]. L'enveloppe grise représente les valeurs maximales et minimales en chaque longueur d'onde, la noire représente un écart-type de $1\,\sigma$ et la courbe rouge est le spectre moyen obtenu. 35

2.4 Représentation géométrique d'un jeu de données non-négatif de dimension 2. Le couple de vecteurs $\boldsymbol{a}$ et $\boldsymbol{b}$ en rouge est celui qui minimise le produit scalaire parmi l'ensemble des couples de vecteurs. 37

2.5 Diagramme énergétique d'un PAH neutre montrant les processus de redistribution de l'énergie incluant les processus non radiatifs et le refroidissement radiatif. La flèche verticale rouge à gauche représente l'absorption de l'énergie d'un photon. IC : conversion interne ; ISC : conversion intersystème ; IIC : conversion interne inverse ; S : état électronique singulet ; T : état électronique triplet ; IVR : redistribution vibrationnelle intramoléculaire. 38

2.6 Évolution de la densité d'états vibrationnels avec l'énergie interne de la molécule. Cas du coronène après absorption d'un photon de 10 eV. . . . 39

2.7 Évolution du rendement d'ionisation pour les deux premiers états d'ionisation de plusieurs PAH. Le nombre de carbone des PAH considérés est entre crochets dans la légende. En noir : cas des PAH neutres ; En vert : cas des PAH cations. La ligne verticale en tirets représente l'énergie maximale des photons dans une PDR ($h\nu = 13.6\,\mathrm{eV}$). Figure issue de Wenzel et collab. [2020]. 40

3.1 Aperçu des variations spectrales des AIB dans différents objets astrophysiques. Les lignes verticales sont placées de gauche à droite à 6.2, 7.6 et $8.6\,\mu$m afin de facilité les comparaisons entre les spectres. En haut : Spectre ISO-SWS du voisinage de l'étoile post-AGB HD44179 (continuum soustrait). Crédit : Hubble/NASA/ESA/JudySchmidt. Au milieu : Nébuleuse planétaire BD+303639. Spectre ISO-SWS dont le continuum a été soustrait. Crédits : Gemini Observatory. En bas : Deux spectres extraits à deux positions différentes de la carte hyperspectrale de la nébuleuse par réflexion NGC7023 (image de gauche) obtenue par Werner et collab. [2004a] avec *Spitzer*-IRS. Crédit : NASA/ESA. 45

3.2 Spectres typiques des classes $\mathscr{A}$, $\mathscr{B}$ et $\mathscr{C}$ sur l'intervalle 6-9 μm. Figure issue de Peeters et collab. [2002]. 46

3.3 Ajustement (courbe verte) du spectre *Spitzer*-IRS (carrés) par l'outil PAHFIT. Les lignes rouges sont les corps noirs modifiés modélisant l'émission thermique de la poussière., les courbes bleues sont les modèles des AIB individuelles et les courbes violettes sont les modèles des raies du gaz. La courbe en pointillés représente l'extinction ajustée correspondant à l'axe des ordonnées de droite. Figure issue de Smith et collab. [2007b]. 47

3.4 Ajustement d'un spectre *Spitzer*-IRS de M17 (points avec barres d'erreurs) avec l'outil PAHdb (ligne noire). Les spectres des différents états de charge des PAH, dont la combinaison donne l'ajustement, sont représentés. 48

3.5 *a* : Spectres représentatifs de populations d'émetteurs d'AIB obtenus par Berné et collab. [2007] après application de la NMF sur les données hyperspectrales de NGC 7023 NW par Berné et collab. [2007], issue de la revue faite par Tielens [2008]. *b* : Distribution spatiale des trois populations avec le même code couleur que les spectres de gauche. Les contours noirs correspondent à l'émission à 8 μm obtenue avec l'instrument IRAC à bbord de *Spitzer*. La position de l'étoile HD 200775 y est représenté. Issu de Berné et collab. [2007]. 50

3.6 Jeu de spectres modèles inclus dans l'outil d'ajustement PAHTAT [Pilleri et collab., 2012]. Les spectres sont normalisés à leur aire intégrée de 5.5 à 14 μm. 51

3.7 Exemple des spectres observés, obtenus avec l'instrument ISO-SWS. . . 56

3.8 Exemples d'extraction de AIB en vert des spectres observés en bleu. La courbe rouge est le modèle des données et celle en orange est le résidu de l'ajustement. Le reste des figures est disponible en annexe de la version en ligne de Foschino, S. et collab. [2019]. 60

3.9 À gauche : Valeurs propres ordonnées issues de l'application de la SVD sur $\boldsymbol{X}_{AIB}$. À droite : Même procédé appliqué par A. Boulais à une mélange synthétique de 4 spectres [Boulais, 2017], montrant une cassure nette à $r + 1 = 5$. 61

3.10 Spectres représentatifs obtenus par l'application de MASS-NMF sur $\boldsymbol{X}_{AIB}$. Les courbes en tirets superposées sont les spectres modèles PAHTAT des populations PAH^+, PAH^0, eVSG et PAH^x [Pilleri et collab., 2012]. Les lignes verticales en tirets correspondent aux positions des principales bandes du spectre 2 (à 3.29, 6.20, 7.60, 8.60, 11.22 et 12.70 μm). 62

3.11 Rapport entre l'erreur instrumentale moyenne et l'écart-type du résidu $\sigma_{résidu}$ pour chacun des 31 spectres ISO-SWS considérés. Voir section 3.4.1. 65

3.12 Exemples de reconstructions de spectres observés, en utilisant le jeu de spectres représentatifs présenté en figure 3.10. Les notations en pourcentage correspondent aux contributions relatives de ces mêmes spectres représentatifs. Elles sont notées selon les interprétations faites en section 3.5. Les quatre courbes bleu, verte, rouge et violette ayant une ligne de base à 0 représentent les spectres représentatifs 1, 2, 3 et 4 respectivement. Les courbes bleues et rouges les plus hautes sont respectivement les observations et l'ajustement. La courbe noire représente le continuum. Le reste des figures est disponible en Annexe de Foschino, S. et collab. [2019]. 66

3.13 Comparaison de la contribution des spectres modèles de Joblin et collab. [2008] et de ceux extraits de cette étude dans les objets en commun aux deux études. Les symboles oranges correspondent à ce travail et les verts à Joblin et collab. [2008]. 69

4.1 (a) : Évolution de l'émission des AIB (losanges noirs, échelle de gauche) et de la raie [C II] à 158 μm (courbe bleue, échelle de droite) avec la distance à HD 200775, issue de Joblin et collab. [2010]. (b) : Évolution de l'efficacité du chauffage du gaz par effet PE avec la fraction de PAH^+ relativement à celle des PAH^0. Issue de Okada et collab. [2013]. 76

4.2 Vue générale de la partie NGC 7023 NW. Nuances de gris : image Spitzer-IRAC à 8 μm ; Contours vert : émission rovibrationnelle S(1) 1-0 du H_2 à 2.121 μm [Lemaire et collab., 1996] ; Contours orange : champ de vue commun exploité dans cette étude, décrit en section 4.2.2. 79

4.3 Cartes d'émissions des raies de refroidissement du gaz prisent en compte dans cette étude. L'émission de la transition v=1-0 S(1) du H_2 à 2.121 μm, traçant le front de dissociation de la PDR, est représentée en contours noirs sur chaque image. Les trois cartes du haut représentent l'émission des transitions [C II] à 158 μm, [O I] à 145 μm et [O I] à 63 μm, observées via l'instrument *Herschel*-PACS à une résolution spatiale de 11", 8.8" et 4.5" respectivement. Les trois du bas sont les cartes des transitions rotationnelles pures du H_2 S(1), S(2) et S(3) à 17.035, 12.278 et 9.7 μm respectivement. Les cartes S(2) et S(3) proviennent du module SL de l'instrument *Spitzer*-IRS à une résolution spatiale de 3.6" tandis que celle de S(1) l'est du module IRS-LL à une résolution spatiale de 10". . 80

4.4 Image à 8 μm extraite du cube *Sptizer*-IRS en mode SL obtenu par Werner et collab. [2004b]. Les spectres proviennent des deux pixels notés en vert. 81

4.5 (a) : Carte de l'émission de refroidissement du gaz ; (b) : Carte de l'intensité intégrée des PAH ; (c) : Carte de la fraction d'ionisation f_{ion}^{Obs} ; (d) : Carte de l'efficacité restreinte ϵ_r. 82

4.6 Évolution du potentiel d'ionisation des PAH avec leur taille et l'état de charge. La courbe noire pleine montre l'ajustement des données par l'équation 4.9. Issue de Wenzel et collab. [2020]. $^{(a)}$: Malloci et collab. [2007b] ;$^{(b)}$: Clar et collab. [1981] ;$^{(c)}$: Hager and Wallace [1988] ;$^{(d)}$:Zhen et collab. [2016] ;$^{(e)}$: Wenzel et collab. [2020]. 85

4.7 Représentation des rendements d'ionisation pour $Z = 0$ (lignes pleines) et $Z = 1$ (tirets), respectivement issus des équations 4.11 et 4.12, pour une taille de chaque catégorie. 86

4.8 Sections efficaces de photoabsorption théoriques par atome de carbone (traits pleins) et section efficace d'ionisation (tirets) par atome de carbone, représentées jusqu'à une énergie de 13.6 eV. À gauche : cas des neutres ; Au milieu : cas des cations ; À droite : cas des dications. Les trois catégories de tailles sont représentées avec le même code couleur qu'en figure 4.7. 87

4.9 Intensité spécifique modélisée de HD 200775 [Pilleri et collab., 2012]. . . 89

4.10 Évolution de la fraction d'ionisation des PAH avec la distance angulaire à HD 200775. Les courbes pleines représentent les valeurs de f_{ion}^{Obs}, extraites des observations le long des trois coupes définies en figure 4.5. Ces valeurs ont été mesurées sur la carte de fraction d'ionisation à la résolution de *Spitzer*-IRS. Les barres d'erreurs sur les valeurs observées correspondent à l'écart type dans un carré de 3 x 3 pixels autour du pixel se trouvant sur la coupe. Les croix correspondent aux valeurs de f_{ion}^{Mod} pour les 3 catégories de tailles définies en section 4.3.1. La ligne en tirets représente l'équivalence entre la population de PAH neutres et les populations ionisées. 90

4.11 Évolution de l'efficacité du chauffage par les PAH, ϵ_r, observée le long des coupes définies en figure 4.5 avec la fraction de PAH cations f_{ion}^{Obs}. Les barres d'erreurs verticales des valeurs observées correspondent à l'écart-type dans un carré de 3 x 3 pixels autour du pixel d'intérêt se trouvant sur la coupe. Les croix correspondent aux estimations avec le modèle de ϵ_{PAH} en fonction de f_{ion}^{Mod} pour les trois catégories de taille décrites en section 4.3.1. 91

4.12 Évolution de l'efficacité du chauffage par les PAH avec la fraction d'ionisation des PAH. Les courbes pleines présentent les valeurs de ϵ_r le long des coupes définies en figure 4.5 en fonction de f_{ion}^{Obs}. Les croix correspondent ici aux valeurs de ϵ_{PAH} obtenues avec le modèle pour les grands PAH avec trois valeurs de facteur G différents, en fonction de f_{ion}^{Mod}. . . 92

A.1 Extraction des spectres représentatifs par MASS-NMF à partir des données ISO-SWS normalisées à l'aire. II

B.1 Exemples d'ajustements PAHTAT (tirets oranges) de spectres du cube hyperspectral *Spitzer*-IRS SL typiques de quatre intervalles de distances d par rapport à l'étoile, discutés en section 4.2.2. (a) : $d < 20''$; (b) : $20'' < d < 40''$; (c) : $40'' < d < 60''$; (d) : $> 60''$. Les données sont représentées en courbe pleine noire et le continuum en pointillés noirs. Chaque population de PAH^+, PAH^0 et eVSG sont en courbe bleue, verte et rouge respectivement. III

Liste des tableaux

1.1 Valeurs typiques des gammes de température et densité du gaz dans chaque phase du MIS. [a] : valeur pour les coeurs pré-stellaires. 4
1.2 Rapports entre la densité de colonne dans la photosphère solaire des principaux métaux et celle de l'hydrogène. 8
1.3 Récapitulatif des modes de vibration correspondant aux différentes AIB [Allamandola et collab., 1987; Leger et collab., 1989] 12

3.2 Nom des segments spectraux d'ISO-SWS avec leurs longueurs d'onde extrêmes ainsi que leur résolution spectrale prise en compte à la longueur d'onde de référence λ_{ref}. Voir figure 4.2 en section 4.5.1.2 de Leech et collab. [2003]. 56
3.3 Liste des paramètres des Gaussiennes utilisées pour générer la matrice catalogue $\boldsymbol{L}$. Le paramètre μ est la position centrale de la raie. 58
3.5 Contribution relative des spectres 1 à 4 dans chaque spectre observé du jeu de données. 64
3.6 Liste des bandes extraites dans chaque spectre représentatif avec leur possible attribution. 71

4.1 Molécules considérées pour l'étude et dont les sections efficaces théoriques de photoabsorption ont été utilisées, et catégories définies à partir des ces molécules. 84
4.2 Conditions physiques en chaque position. 90