THÈSE PRÉSENTÉE

POUR OBTENIR LE GRADE DE

DOCTEUR

DE L'UNIVERSITÉ DE BORDEAUX

ÉCOLE DOCTORALE SCIENCES PHYSIQUES ET DE L'INGÉNIEUR

ASTROPHYSIQUE, PLASMAS, NUCLÉAIRE

Par **Louise MARINHO**

Une étude des vents des étoiles froides évoluées : comprendre les propriétés et la chimie de la région de formation du vent et de la CSE plus étendue grâce à des observations et à une modélisation à haute résolution angulaire.

Sous la direction de : **Fabrice HERPIN**

Soutenue le 1er Octobre 2024

Membres du jury :

Mme. Caroline Soubiran	Directrice de recherche	LAB	Présidente
Mme. Ana Palacios	Astronome	LUPM	Rapportrice
M. Juan Ramon Pardo Carrion	Astronome	CSIC	Rapporteur
Mme. Agnès Lèbre	Directrice de Recherche	LUPM	Examinatrice
M. Arturo Lopez Ariste	Directeur de Recherche	IRAP	Examinateur
M. Helmut Wiesemeyer	Astronome	MPIfR	Examinateur
M. Fabrice Herpin	Astronome	LAB	Directeur de thèse

Bats toi, t'auras une vie grandiose

Les failles, Pomme

Une étude des vents des étoiles froides évoluées : comprendre les propriétés et la chimie de la région de formation du vent et de la CSE plus étendue grâce à des observations et à une modélisation à haute résolution angulaire.

Résumé : Les étoiles de masse intermédiaire, comme le Soleil, évolueront en étoiles AGB (Asymptotic Giant Branch), des étoiles qui ont un rayon beaucoup plus grand que le Soleil et qui sont un millier de fois plus lumineuses que lui. Ces étoiles évoluées jouent un rôle majeur dans l'évolution stellaire. Les étoiles froides évoluées présentent un taux de perte de masse important à travers des vents forts qui se propagent dans l'enveloppe circumstellaire (CSE) de l'étoile, ce qui contribue à l'enrichissement du milieu interstellaire et, par conséquent, au recyclage de la matière dans l'Univers. La physique de ces vents et l'origine de ces phénomènes de perte de masse sont encore peu compris, mais peuvent être contraints grâce à l'observation de diverses transitions moléculaires dans la CSE.

Grâce aux observations ALMA du large programme ATOMIUM, nous essayerons de décrire et de comprendre la dynamique du vent à travers l'enveloppe. Il a été récemment observé que la plupart des étoiles évoluées ont un compagnon proche qui impacte la dynamique du gaz autour de l'étoile et celle des vents. Avec un code de transfert radiatif (MCFOST), nous voulons reproduire les observations ALMA, en ajoutant un binaire dans le modèle. Nous essayerons d'expliquer les formes spiralées observées et de contraindre des paramètres stellaires (comme sa distance, son rayon), les composants de la poussière et les abondances moléculaires.

Cette thèse se concentrera également sur l'émission de la raie maser du SiO d'un échantillon d'étoiles évoluées récemment observées, afin de sonder la présence d'un champ magnétique dans la région interne de l'enveloppe, jusqu'à 2-4 rayons stellaires de la photosphère. Il est émis par des cellules de gaz dans la CSE et est fortement polarisé. À partir des observations radio millimétriques, nous pouvons obtenir les paramètres de Stokes et, après une calibration méticuleuse, déterminer les polarisations circulaires, ce qui, selon les prédictions théoriques, peuvent conduire à une caractérisation de l'environnement des cellules émettrices, et une estimation de l'intensité du champ magnétique projeté sur la ligne de visée. S'il y a un champ magnétique et si le maser est saturé, nous devrions observer une signature Zeeman en forme de " S " dans Stokes V. En utilisant le code *rvm*, nous rechercherons ce motif spécifique dans nos données. Nous travaillerons avec deux théories, l'une pour le maser saturé et l'autre pour le maser fortement saturé. Dans les deux cas, nous relierons les profils de raies observées en Stokes V à l'intensité du champ magnétique. Il reste encore des questions ouvertes sur l'origine du champ magnétique (par exemple, une dynamo de type solaire, une dynamo turbulente, ...) et son évolution. Nous essaierons de répondre à cela avec de futurs projets observationnels qui seront décrits dans la thèse.

Mots-clés : Étoile évoluée, Radio Astronomie, Observation, Enveloppe circumstellaire, Champ magnétique

---

Unité de recherche
UMR 5804 UBx, CNRS, 33600 Pessac, France.

A study of the winds of evolved cold stars : understanding the properties and chemistry of the wind-forming region and the more extended CSE through observations and angular resolution modeling.

Abstract : Intermediate-mass stars, like the Sun, will evolve into AGB (Asymptotic Giant Branch) stars, which have a much larger radius than the Sun and are a thousand times brighter than it. These evolved stars play a major role in stellar evolution. Evolved cool stars have a high mass loss rate, which contributes to the enrichment of the interstellar medium and so, to the recycling of matter in the Universe, through strong winds propagating in the star's circumstellar envelope (CSE). The physics of these winds and the origin of these mass-loss phenomena are still poorly understood, but can be constrained by observations of various molecular transitions in the CSE.

Using ALMA observations from the large program ATOMIUM, we will attempt to describe and understand the dynamics of the winds through the envelope. It has recently been observed that most evolved stars have a close companion that impacts on the gas dynamics around the star and on the winds dynamics. Using a radiative transfer code (MCFOST), we aim to reproduce ALMA observations, adding a binary to the model. We will try to explain the observed spiral shapes and constrain stellar parameters (such as the distance and the radius), dust components and molecular abundances.

This thesis will also focus on the emission of the SiO maser line from a sample of recently observed evolved stars, in order to probe the presence of a magnetic field in the inner gas region of the envelope, up to 2-4 stellar radii from the photosphere. It is emitted by gas cells in the CSE and is strongly polarized. From mm-wave radio observations, we can derive the Stokes parameters and after careful calibration, determine the circular polarizations, which, according to theoretical predictions, can lead to a characterization of the environment of the emitting cells, like an estimate of the sightline-projected magnetic field strength. If there is a magnetic field and if the maser line is saturated, we should observe an « S » shape Zeeman signature in Stokes V. Using the *rvm* code, we search for this specific pattern in our data. We work with two theories, one for the saturated and one for the strongly saturated maser. In both cases, we can link the observed Stokes V line profiles to the magnetic field strength. There are still open questions about the origin of the magnetic field (e.g. a solar-type dynamo, a turbulent dynamo, etc.) and its evolution. We can try to answer these with future observational projects that will be described in this thesis.

Keywords : Evolved stars, Radio Astronomy, Observations, Circumstellar envelope, Magnetic Field

---

Unité de recherche
UMR 5804 UBx, CNRS, 33600 Pessac, France.

Remerciements

La thèse a été une grande aventure scientifique et très humaine. Cette expérience m'a énormément apporté et appris, sur les étoiles évoluées (évidemment), mais aussi sur moi. Et tout cela a été possible grâce à beaucoup de personnes qui m'ont soutenu et aidé lors de ces trois années à Bordeaux.

Je tiens avant tout à remercier Fabrice, pour ta confiance en moi pour mener ce projet et d'y avoir cru jusqu'au bout, pour tous tes conseils, tes nombreuses relectures et tout le temps investi. Tu as permis d'exaucer mon plus grand rêve, un immense merci pour tout.

Je remercie les membres du jury pour le temps consacré à lire ce travail et pour leurs retours.

J'ai eu la chance de travailler dans deux groupes. Merci à la collaboration PEPPER et au programme ATOMIUM pour nos échanges scientifiques. Ces collaborations m'ont permis notamment de travailler avec Ileyk et Miguel qui ont été d'une grande aide tout au long de cette thèse.

Pendant cette thèse, j'ai pu aller au télescope 30m de l'IRAM, merci Fabrice d'avoir permis ça et à Helmut pour toute son aide avec les données qui ont donné ces résultats si intéressants.

Et comment exprimer ma gratitude pour toutes les personnes qui ont relu cette thèse ? Vous y avez passé beaucoup de temps, vous m'avez énormément aidé. Un immense merci à vous. Il y a aussi toutes les personnes qui m'ont aidé à préparer la soutenance, qui m'ont écouté et réécouté. Merci Valentine, Nathalie, Nadège, Coralie et Jeremy.

Ces trois années au LAB ont été riches en rencontres. Merci à l'équipe FEMIS, aux chercheurs, aux ingénieurs et au personnel administratif pour leur aide. Un très grand merci à Leila, qui a supporté toutes les missions que j'ai faites ! Merci Valentine pour son soutien et sa présence, tu as été d'un réconfort exceptionnel. Merci Nadège pour nos échanges amicaux et scientifiques. Merci Jeremy d'avoir été mon parrain et de m'avoir accompagné pendant ces 3 ans et beaucoup écouté. Merci également Pierre et Sylvie, pour tout nos beaux moments passés ensemble. Les journées passées au LAB étaient toujours agréables, avec nos pauses midi partagées entre doctorants, mais aussi avec les chercheurs.euses, entre repas et mots fléchés, et nos pauses goûter un peu trop longues, mais si agréables et nécessaires. Ces moments de vie avec les doctorant.es, les stagiaires et les chercheurs.euses étaient incroyables. J'ai adoré ces années au LAB avec vous tous.

Un immense merci à ma co-bureau, Aimie, qui m'a supporté, pendant un an, et surtout pendant la rédaction, qui a toujours été là, je ne pouvais pas rêver mieux ! Merci d'avoir participé grandement à notre super déco de bureau (on a le plus beau). Merci Angèle de m'avoir légué la place (et le très grand bureau). Tu es une personne extraordinaire et tout ce que tu as fait pour moi ne rentrera pas en quelques lignes. Merci à vous deux, pour nos petits bonheurs partagés et notre solidarité. J'espère que l'on partagera ces moments encore longtemps !

Évidemment, tous les doctorant.es/ingénieurs ont été d'incroyables rencontres. Merci

aux means girls, Sarah, Nina, Coralie et Marianne ! C'était génial d'avoir pu passer du temps avec vous. Vous êtes devenues des amies précieuses, merci. Nous avons pu organiser tant de choses entre doctorant.es, qui ont rendu ma vie riche à Bordeaux. Merci Jean-Paul, Benjamin, Karlis, Maxime, Noé, Tommy, Thomas, Clément, Hugo, Alexandre et Pierre. Vous êtes devenus tous des super amis !

Je suis arrivée à Bordeaux, cette ville dans laquelle je n'avais jamais mis les pieds, et j'ai pu y rencontrer des personnes extraordinaires, qui ont rendu la vie ici très plaisante ! Isia, tout d'abord, ma première amie à Bordeaux, celle qui m'a fait découvrir la ville, sa culture, merci pour tout. Nous avons pu vivre l'expérience de la thèse ensemble, tu as été d'un soutient énorme et Bordeaux n'est plus pareil sans toi. Tu m'as aussi ouvert la porte de beaucoup d'autres rencontres qui ont donné ces amitiés incroyables : Coralie, Zaïnab, Echo, et tant d'autres, merci d'avoir été avec moi. Nous avons tant partagé ensemble : vous avez marqué ma vie à tout jamais ! Je n'aurais pas pu rêver de plus belles amitiés. Et merci Éloïse, pour tout ce que nous avons partagé et vécu.

Merci à mes amis hors de Bordeaux, qui même loin, ont été là. Merci à mes amis de master Émilie et Margaux ! Mais aussi celles et ceux de licence et tous les autres. Merci Sadek et Fabien d'être venus jusqu'ici !

Et enfin, je veux remercier ma famille, sans qui je n'en serais pas là aujourd'hui. Merci de m'avoir permis et donné les moyens d'y arriver. Merci de votre soutien, de votre présence. Mes parents, mes sœurs et puis mon frère, pour tous ces moments qu'on a pu avoir, même à distance, merci d'avoir pu rester si proche de moi.

Écrire n'est pas spécialement ma plus grande qualité. Je ne pense pas que ces quelques paragraphes ne suffiront pas à exprimer ce que je ressens. Mais vous avez été si nombreux près de moi, que lister tout ça est une tâche compliquée. J'espère n'avoir oublié personne, si c'est le cas, je suis vraiment désolée, donc merci à tous celles et ceux que je n'ai pas mentionnés ici.

Merci.

Table des matières

1 Introduction **1**
1.1 Introduction générale . . . 1
1.2 Évolution Stellaire . . . 4
1.2.1 Étoiles de faible masse . . . 5
1.2.1.1 Formation des étoiles de faible masse . . . 5
1.2.1.2 Séquence principale . . . 5
1.2.1.3 Étoiles froides évoluées . . . 6
1.2.1.4 Etoiles Post-AGB . . . 10
1.2.2 Étoiles Massives . . . 12
1.3 Champ magnétique des étoiles . . . 14
1.3.1 Champ magnétique Solaire . . . 14
1.3.2 Champ magnétique des étoiles AGB . . . 16
1.3.3 Champ magnétique des étoiles RSG . . . 17
1.4 Objectifs de la thèse . . . 18

2 Radio Astronomie **20**
2.1 Histoire de la Radio Astronomie . . . 20
2.2 Théorie des Antennes . . . 22
2.3 Fonctionnement d'un radiotéléscope . . . 24
2.3.1 L'antenne IRAM 30m . . . 24
2.3.2 Détection hétérodyne . . . 25
2.3.3 Frontend et Backend . . . 26
2.3.4 Procédures observationnelles . . . 28
2.3.5 Observation Polarimétrique . . . 29
2.4 Interférométrie . . . 30
2.4.1 Pourquoi faire de l'interférométrie ? . . . 30
2.4.2 Principes observationnels . . . 32
2.4.3 ALMA . . . 34

3 Le code MCFOST et transfert radiatif **36**
3.1 Présentation de MCFOST . . . 36
3.2 Équations et Calculs en Transfert Radiatif . . . 38
3.2.1 Introduction et définitions . . . 38
3.2.2 Méthode Monte-Carlo et Ray-Tracing . . . 40
3.2.3 Calcul de la température . . . 44
3.2.3.1 Équations générales . . . 44
3.2.3.2 Température des grains dans MCFOST . . . 45
3.2.4 SED . . . 46
3.2.4.1 Introduction . . . 46

3.2.4.2 Calculs des images dans MCFOST . . . 46
3.3 Paramètres du code MCFOST . . . 48
3.3.1 Description des paramètres . . . 49
3.3.2 Fichiers extérieurs et options . . . 50
3.3.3 Sorties et observables . . . 52

4 Modélisation de la CSE **54**
4.1 Modélisation d'une enveloppe circumstellaire . . . 55
4.1.1 Propriétés des poussières . . . 55
4.1.1.1 Composition et proportions . . . 55
4.1.1.2 Indices optiques . . . 57
4.1.1.3 Extinction . . . 57
4.1.2 Distribution des poussières et modèle hydrodynamique . . . 59
4.1.3 Loi d'abondance moléculaire . . . 61
4.2 Outils de comparaison aux observations . . . 62
4.2.1 Images - convolution . . . 62
4.2.2 Spectre et aire intégrée . . . 62
4.3 Présentation du projet ATOMIUM . . . 63
4.4 Cas d'étude : GY Aql . . . 66
4.4.1 Étude observationelle à partir des cartes ALMA . . . 67
4.4.1.1 Étude des raies . . . 67
4.4.1.2 Vitesse des vents . . . 74
4.4.1.3 Rapports isotopiques . . . 75
4.4.2 Modélisation avec MCFOST . . . 84
4.4.2.1 Paramètres initiaux . . . 84
4.4.2.2 Premier modèle et résultats . . . 87
4.4.2.3 Étude paramétrique pour la détermination de paramètres 90
4.4.2.4 Rapport isotopique et autres molécules carbonées . . . 94
4.4.3 Étude temporelle du modèle . . . 96
4.4.3.1 Modèle stellaire CO5BOLD . . . 96
4.4.3.2 Utilisation et correction des SED . . . 98
4.4.3.3 Résultats . . . 99
4.5 Conclusion . . . 101

5 Polarisation et champ magnétique **103**
5.1 Introduction . . . 104
5.2 Observations . . . 106
5.3 Réduction de données et calibration . . . 108
5.3.1 Paramètres de Stokes . . . 108
5.3.2 Polarisation instrumentale . . . 110
5.3.2.1 Suppression des fuites instrumentales de Stokes I vers Stokes V . . . 110
5.3.2.2 Suppression des fuites instrumentales de Stokes I vers Stokes Q et U . . . 112
5.4 Analyse des données et méthode . . . 113
5.4.1 Analyse des composantes de Stokes I et V . . . 113
5.4.2 Calcul des incertitudes . . . 116
5.4.3 Description des signaux Stokes I et V observés . . . 118
5.4.4 Saturation de la raie maser . . . 120

5.4.5 Estimation du champ magnétique . . . 123
5.4.5.1 Maser saturé . . . 123
5.4.5.2 Maser non saturé . . . 124
5.4.5.3 Détermination de l'angle d'incidence du faisceau maser . . 124
5.5 Résultats . . . 126
5.5.1 Polarisation observée et excitation du maser . . . 126
5.5.2 Intensité du champ magnétique . . . 129
5.6 Discussion . . . 130
5.7 Conclusions . . . 134

6 Synthèse et perspectives **136**
6.1 Conclusions . . . 136
6.1.1 Observation et modélisation de la CSE . . . 136
6.1.2 Champ magnétique . . . 138
6.2 Perspectives . . . 138
6.2.1 Origines du champ magnétique . . . 138
6.2.1.1 Dynamo Turbulente . . . 138
6.2.1.2 Proposals et objectifs . . . 139
6.2.2 Modélisation de l'émission moléculaire . . . 143
6.2.3 Modèle chimique et évolution stellaire . . . 147
6.2.4 SED 3D dans MCFOST . . . 148

A Exemple de fichier de paramètres pour MCFOST **169**

B Émission modélisée du CO **172**
B.1 Variation suivant la ligne de visée . . . 172
B.2 Variation dans la loi d'abondance . . . 173

C Facteur de Landé de la raie maser SiO **176**

D Élimination de la polarisation instrumentale **178**

E Articles **180**
E.1 SiO maser polarization and magnetic field in evolved cool stars . . . 180
E.2 Chemical tracers of a highly eccentric AGB-main-sequence star binary . . . 199
E.3 ATOMIUM : Molecular inventory of 17 oxygen-rich evolved stars observed with ALMA . . . 230
E.4 ATOMIUM : ALMA Tracing the Origins of Molecules In dUst forming oxygen-rich M-type stars . . . 272

Chapitre 1

Introduction

Quand on veut une chose, tout l'Univers conspire à nous permettre de réaliser ce rêve

L'Alchimiste - Paulo Coelho

Sommaire

1.1 Introduction générale 1
1.2 Évolution Stellaire 4
1.2.1 Étoiles de faible masse 5
1.2.1.1 Formation des étoiles de faible masse 5
1.2.1.2 Séquence principale 5
1.2.1.3 Étoiles froides évoluées 6
1.2.1.4 Etoiles Post-AGB 10
1.2.2 Étoiles Massives 12
1.3 Champ magnétique des étoiles 14
1.3.1 Champ magnétique Solaire 14
1.3.2 Champ magnétique des étoiles AGB 16
1.3.3 Champ magnétique des étoiles RSG 17
1.4 Objectifs de la thèse 18

1.1 Introduction générale

L'observation des étoiles et du Soleil par les humains s'est toujours accompagnée d'une fascination pour ces objets célestes. La formation et l'évolution de notre étoile n'ont cessé d'inspirer la curiosité et de susciter la recherche d'explications, qu'elles fassent appel aux mythes ou au rationalisme scientifique.

Au cours de l'histoire, différentes civilisations ont apporté des explications mythologiques à l'origine et au mouvement du Soleil et de la Lune. Le Soleil a été personnifié par la déesse Sól en Scandinavie, Ra en Égypte, Lisa au Dahomey et par Hélios en Grèce. Hélios est une divinité, fils des deux Titans, Hypérion et Théia. Cette figure importante de la mythologie est une entité primordiale, père de nombreux personnages mythologiques, dont Circé. Elle est aussi appelée *Polyphármakos*, décrite comme une puissante

sorcière, elle fait son apparition dans l'Odyssée lors du passage d'Ulysse par son île, sur son chemin vers Ithaque. Magicienne, Circé est qualifiée de sorcière comme de nombreuses femmes dans l'histoire, car elle maîtrise des sciences inconnues des hommes. Son sort fut partagé par Aglaonike de Thessalie ou Hypatie d'Alexandrie : deux astronomes qui étudiaient principalement les cycles lunaires pour l'élaboration de calendriers et pour l'aide à l'agriculture. Elles comprenaient aussi des phénomènes physiques comme les éclipses ; on attribuait même à Aglaonike le pouvoir de contrôler et faire disparaître la Lune [1]. En 3000 avant J-C / AEC, les astres s'étudiaient déjà depuis la Mésopotamie. Enheduanna, la première auteur/autrice de l'humanité, se penchait aussi sur les cycles lunaires. Elle fut exilée même si ses travaux avaient pour but de nourrir son culte à *Sîn*, la divinité de la Lune [2]. En Grèce, la Lune fut personnifiée en Séléné, soeur d'Hélios. Les deux astres les plus brillants du ciel étaient associés à des entités, mais les étoiles du ciel trouvaient, elles aussi, leur explication dans les mythes. Par exemple, la constellation de la Grande Ourse était Callisto, une chasseresse à qui Artémis avait donné une place dans les étoiles. Même des objets beaucoup plus lointains que les étoiles de notre Galaxie, suffisamment lumineux pour être observés à l'œil nu, tels que la galaxie d'Andromède qui trouve son nom d'après le mythe de Persée. Andromède était une princesse d'Ethiopie et apparut dans le mythe en devenant sa femme.

Au-delà des explications religieuses, des personnes comme celles citées précédemment comprenaient déjà des phénomènes physiques et les mouvements des astres. Elles furent chassées et exilées pour avoir donné des explications méconnues des hommes et scientifiques. Les explications hors des mythes et de la religion, et notamment au-delà d'un modèle géocentrique, mirent longtemps à être acceptées. Même si l'héliocentrisme fut évoqué par Aristarque de Samos dans l'Antiquité, il fallut attendre Copernic au XVIème siècle pour que cela soit plus communément admis.

La physique stellaire et l'astrométrie ont évolué en parallèle. On s'est d'abord porté sur des calculs de position des astres, jusqu'au XIX siècle avec les premières études spectroscopique. C'est en 1802 que William Hyde Wollaston et Joseph von Fraunhofer ont pour la première fois observé le spectre d'absorption du Soleil, ce qui lança l'intérêt pour cette science. En 1885, Edward C. Pickering commença un projet au Harvard College Observatory de mesure de spectre d'autres étoiles. De nombreuses femmes, surnommées "calculatrices humaines", cataloguèrent près de 10 000 étoiles et classèrent leur spectre parmi 13 classes spectrales. Parmi les grandes avancées figurent les calculs de distances des céphéides par Henrietta Swan Leavitt au XIXème siècle, ainsi que la nucléosynthèse stellaire, théorisée par Margaret Burbidge en 1957.

Les étoiles sont au cœur du recyclage de la matière. Du nuage moléculaire au stade de nébuleuse planétaire, la vie d'une étoile est un cycle riche en évènements et phénomènes physiques. Les étoiles, comme notre Soleil, passeront par différentes phases dans leur vie, notamment une phase froide évoluée, stade où les étoiles sont des actrices majeures du recyclage de la matière dans l'Univers. La matière restante à la mort des étoiles servira à en former de futures (illustration du cycle de vie des étoiles en Fig. 1.1). Comprendre la vie des étoiles est nécessaire pour comprendre notre Univers, ainsi que le Soleil et son

1. *L'oeil de la gorgone* de Noémie Fachan
2. https://sf2a.eu/website2023/wp-content/uploads/2022/04/pdf_IVauglin_HistoireFemmes.pdf

système planétaire, comment il s'est formé et ce qu'il deviendra.

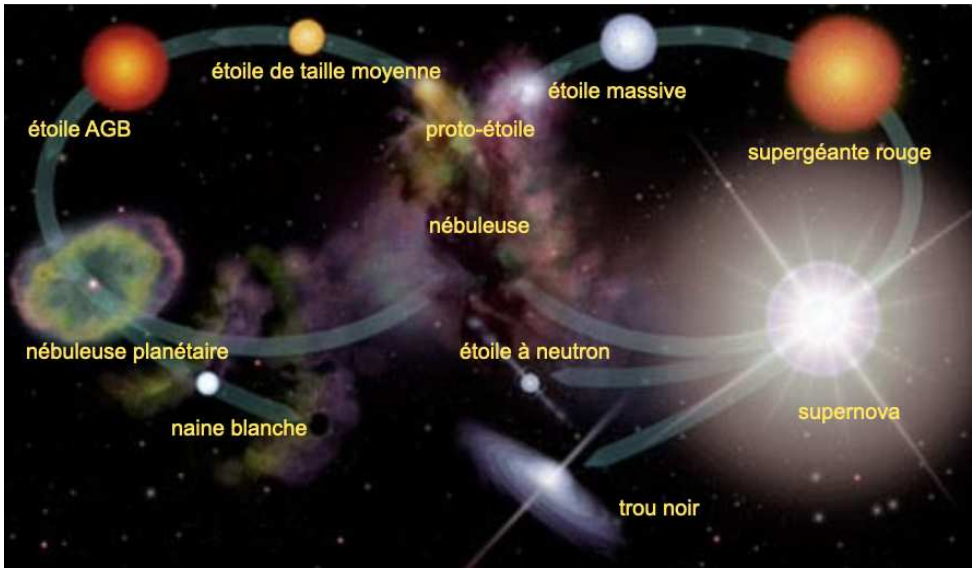


FIGURE 1.1 – Cycle de vie des étoiles. https://imagine.gsfc.nasa.gov/educators/lessons/xray_spectra/

Classification des étoiles

La température de couleur, la gravité de surface, la masse et la luminosité sont les éléments utilisés pour classifier les étoiles (comme ce qui avait été fait par l'équipe au Harvard College University de E. C. Pickering). Aujourd'hui, les étoiles sont classifiées en 8 classes de type spectral, O, B, A, F, G, K, M [3], en allant des plus chaudes (bleues) aux plus froides (rouges-oranges). Ces classes sont elles-mêmes divisées en 10 sous-classes allant de 0 à 9 pour plus de précision dans la classification.

Avec la loi de Stefan-Bolztman, nous pouvons relier la luminosité de l'étoile à sa température effective, ce qui correspond à une température de surface (plus précisément à la température d'un corps noir correspondant à la distribution spectrale d'énergie *SED* de l'étoile [4]) :

$$L = 4\pi R^2 \sigma T_{\text{eff}}^4 \tag{1.1}$$

où L désigne la luminosité, R le rayon et T_{eff} la température effective de l'étoile. $\sigma \sim 5.67 \times 10^{-8}$ W.m^{-2}.K^{-4} est la constante de Stefan-Boltzmann. On spécifie également le type d'étoile par sa classe de luminosité allant de I à VI :

— I : super-géante extrêmement lumineuse
— II : géante brillante
— III : géante
— IV : sous-géante
— V : naine

3. Aujourd'hui, nous avons plus de classes spectrales : W, O, B, A, F, G, K, M, L, T, Y, R, N, C, S. W correspond aux étoiles Wolf-Rayet. Les classes L, T et Y représentent les naines brunes (objets stellaires qui ont une masse trop faible qui ne permet pas la fusion de l'hydrogène). Et enfin, les classes R, N, C, S sont pour les étoiles carbonées.

4. La SED correspond à la densité de flux en fonction de la longueur d'onde de l'étoile, ceci sera développé en Sec. 3.

— VI : sous-naine

Le Soleil par exemple est une naine jaune avec une température effective de 5770 K, c'est une étoile de type G2V. Au XXème siècle est mis en place le diagramme d'Hertzsprung-Russell, illustré en Fig. 1.2. On y classe les étoiles selon la classification présentée ci-dessus, c'est-à-dire, en fonction de leur température et de leur luminosité. Sur les axes horizontaux de la Fig. 1.2, on retrouve en haut la température et en bas la classe spectrale. En vertical, on retrouve la luminosité et la magnitude. On peut y voir au centre le Soleil sur la séquence principale. Il va suivre au cœur de sa vie la ligne bleue.

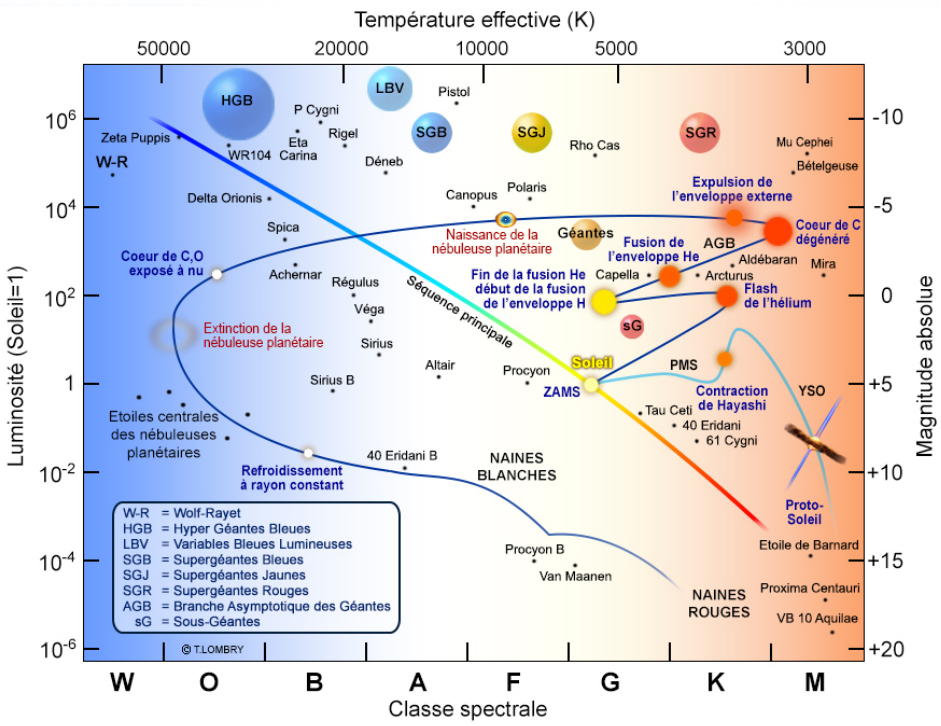


FIGURE 1.2 – Diagramme d'Hertzsprung-Russell. On retrouve la séquence principale en diagonale au centre. Le Soleil (1 $M_\odot$) qui, au cours de sa vie, va suivre une évolution sur le diagramme HR, représentée par la ligne bleue claire pour sa phase de proto-étoile, et en bleue foncée de la séquence principale jusqu'à ce qu'il devienne une naine blanche. (T. Lombry)

1.2 Évolution Stellaire

Nous séparons en plusieurs catégories les étoiles selon leur masse. Nous allons voir qu'elles suivent une vie très différente, c'est-à-dire un chemin différent sur le diagramme HR, en fonction de leur masse initiale. Jusqu'à 0.08 masse solaire ($M_\odot$), ce sont des naines brunes. Ce sont des objets substellaires qui ne sont pas assez massifs pour permettre la fusion de l'hydrogène et n'atteignent donc jamais la séquence principale. Au delà, nous parlons d'étoile de faible masse jusqu'à 8 $M_\odot$, et d'étoile massive au delà de 8 $M_\odot$.

1.2.1 Étoiles de faible masse

Plus précisément, nous séparons ces étoiles en deux catégories, les étoiles de faible masse de 0.08 à 4 $M_\odot$, et les étoiles de masse intermédiaire (4 à 8 $M_\odot$). Ces étoiles de faible masse passent plusieurs milliards d'années sur la séquence principale et ont un temps de vie très long.

Nous parlerons en détail des étoiles de faible masse. Ce sont les étoiles de type solaire. Ces étoiles vont suivre la même vie que notre Soleil. Les étoiles de masse intermédiaire suivent une vie assez comparable mais plus rapide.

1.2.1.1 Formation des étoiles de faible masse

Les étoiles se forment à partir de la matière du milieu interstellaire et à la fin de leur vie, la matière qui les constitue alimentera ce même milieu. Le milieu interstellaire est un milieu avec différentes phases, qui peut être diffus et froid, ou alors plus chaud et dense. Il ne correspond qu'à 10% de la matière baryonique (hors matière noire) de la galaxie. La formation stellaire commence dans un nuage de gaz au sein d'une Galaxie. Ces nuages ou *nébuleuses* sont des nuages moléculaires, principalement composés de gaz (99%) et de poussière. On retrouve en majorité des molécules composées d'hydrogène (à 99.9 %), du carbone et de l'oxygène. Ce sont des milieux denses et très froids. Plusieurs éléments peuvent déclencher la formation stellaire : l'énergie dégagée par une supernova, des chocs causés par un front d'ionisation, des interactions avec des galaxies, la collision de nuages, etc. Le nuage va se fragmenter et la température de ces fragments va augmenter pour former des cœurs pré-stellaires. Chaque cœur en rotation va accréter de la matière : celle-ci va tomber dans le cœur et déclencher la formation d'une proto-étoile, avec un disque formé de la matière qui est restée en rotation autour du cœur (Kippenhahn et al. 2013).

1.2.1.2 Séquence principale

Les étoiles passent la plus grande partie de leur vie (10 milliards d'années, pour une étoile de 1 $M_\odot$ à la métallicité solaire) sur la séquence principale (MS, *main sequence*). Il s'agit de la zone grise au centre de la Fig. 1.2. La position des étoiles sur la MS dépend de leur masse : on retrouve de bas en haut du diagramme (sur la MS) les étoiles des moins massives aux plus massives. C'est la phase de vie la plus stable de l'étoile, dans laquelle se trouve le Soleil. 90% des étoiles sont sur cette branche. Elles fusionnent en leur cœur de l'hydrogène en hélium. Les réactions de fusion vont émettre de grandes quantités d'énergie qui se propageront ensuite par rayonnement et convection. Une différence importante entre les étoiles de faible masse et de masse intermédiaire va être la répartition des zones convectives et radiatives sous la photosphère : radiative au centre et convective autour pour les étoiles de faible masse, l'inverse pour les autres.

1.2.1.3 Étoiles froides évoluées

Sous-géantes et géantes rouges

En sortie de séquence principale, les étoiles passent par la phase des géantes. En quittant la MS, elles passent d'abord par la phase transitoire des sous-géantes, avant d'atteindre la branche des géantes rouges. Lorsqu'une étoile a épuisé ses réserves d'hydrogène dans son cœur, celui-ci devient très dense et la combustion de l'hydrogène s'accélère, fusionnant en couche à l'extérieur du cœur. L'enveloppe devient convective, et la pression de radiation augmente, ce qui entraîne l'extension des couches externes, le rayon de l'étoile augmente considérablement et sa température diminue. L'étoile connaît un premier "dredge-up" (dragage), l'enveloppe convective s'enfonce dans l'enveloppe. Par convection, les produits de la nucléosynthèse remontent à travers l'enveloppe convective. La fin de cette phase est marquée par le "flash de l'hélium", quand l'hélium va lui-même fusionner au cœur de l'étoile. Et enfin quand cette fusion devient stable, l'étoile entre dans une nouvelle phase.

Branche horizontale des géantes

L'étoile va suivre la *branche horizontale* des géantes (HB sur le diagramme HR). C'est une courte phase de sa vie qui dure 100 millions d'années. Leur enveloppe extérieure convective devient plus profonde, les éléments produits par fusion arrivent du cœur à la surface et deviennent visibles dans les spectres stellaires. Cette phase est caractérisée par la fusion en couche de l'hydrogène et de l'hélium au cœur. La température au cœur devient assez importante pour déclencher un processus triple α qui permet la formation du carbone au cœur et de l'oxygène. Avant d'entrer dans la phase AGB, un nouveau dregde-up se produit. La matière du cœur de l'étoile se mélange aux couches extérieures, changeant la composition de la surface. Il s'agit du deuxième dredge-up, et les éléments plus profonds de l'enveloppe (He et N) sont transportés à la surface stellaire par convection et sont alors éjectés par le vent stellaire.

Branche Asymptotique des géantes

Les étoiles de faible masse deviennent ensuite des étoiles AGB *Asymptotic Giant Branch*, la branche asymptotique des géantes (en haut à droite du diagramme HR), les étoiles étudiées en détail dans cette thèse.

Les étoiles froides évoluées présentent un taux de perte de masse important, qui contribue à enrichir le milieu interstellaire et donc à recycler la matière dans l'Univers. Le Soleil a un taux de perte de masse de l'ordre de 10^{-10} $M_\odot$/an alors que ces étoiles éjectent jusqu'à 10^{-4} $M_\odot$/an (Höfner & Olofsson 2018). Les mécanismes comme le champ magnétique stellaire, les vents stellaires, et la convection, à l'origine de ce phénomène de perte de masse, sont encore mal compris. En revanche, ils peuvent être contraints grâce aux observations et à des modèles de ces étoiles et de leur enveloppe circumstellaire (CSE). On retrouve différent type d'étoile : les étoiles de type M qui sont oxygénées (C/O<1), les étoiles de type C qui sont carbonées (C/O>1) et les étoile de type S (C/O$\sim$1).

Intérieur de l'étoile

Dans cette thèse, nous nous intéressons donc en détail aux étoiles AGB de type M. Ce sont des éléments importants dans l'Univers et pour le recyclage de la matière. Les AGB (mais aussi les RSG, *red super giant*, leur contrepartie massive) apportent par leurs éjections de matière 85% du gaz et 35% de la poussière de source stellaire au milieu interstellaire. La nucléosynthèse des éléments dans les étoiles AGB est primordiale pour comprendre l'origine des éléments. Ce sont des étoiles froides, avec une température effective autour de 3000 K, avec un rayon de plusieurs centaines de rayons solaires ($R_\odot$) et une luminosité de l'ordre de 1000 $L_\odot$. Elles sont composées d'un cœur dégénéré de carbone et d'oxygène. L'hélium fusionne ensuite en couche autour du cœur. S'en suit une région interne composée majoritairement d'hélium. On retrouve ensuite une couche d'hydrogène en fusion (Herwig 2005, et Fig. 1.3). Lorsque la température de l'enveloppe augmente, la combustion de l'hydrogène reprend. Dans cette phase, la combustion est instable, ce qui entraîne des pulses thermiques, cycliques (TP). Lors de cette phase, le contenu chimique s'enrichit en carbone et en éléments formés par le processus *s* de capture de neutrons, qui permet la formation d'isotopes (notamment du soufre, qui sera étudié dans cette thèse). La phase AGB permet donc la formation de nombreux éléments qui seront ensuite réinjectés au milieu interstellaire et ainsi participent grandement à l'enrichissement chimique de la Galaxie.

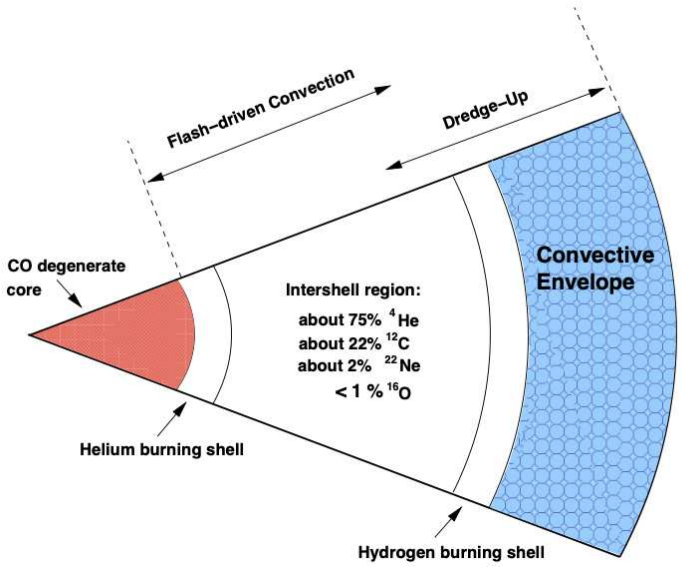


FIGURE 1.3 – Coupe de l'intérieur d'une étoile AGB (Karakas & Lugaro 2010).

L'enveloppe circumstellaire

Ces étoiles sont entourées d'une large et dense enveloppe de gaz appelée l'enveloppe circumstellaire, représentée en Fig. 1.4. L'enveloppe circumstellaire se forme par les éjections de l'étoile et se maintient grâce aux vents forts. Ces vents se propagent grâce à la pression de radiation sur les grains présents dans l'enveloppe (Willson 2000). Cette enveloppe est constituée principalement de gaz, mais aussi de poussières. C'est un milieu très riche, puisque plus de 80 molécules différentes et 15 espèces de poussières ont pu être

observées (Höfner & Olofsson 2018). Au-dessus de la photosphère de l'étoile (sa surface), se trouve une atmosphère très étendue ($\sim 10^3 R_\star$) et froide, où les températures permettent la formation (condensation) des poussières et des molécules. L'activité convective à la surface de l'étoile va permettre de lancer les vents. Les poussières joueraient ensuite un rôle majeur dans la propagation de ceux-ci par pression de radiation. Leur présence, proche de la photosphère de l'étoile, permet de propager le vent après qu'il ait été lancé par la pulsation de l'étoile au niveau des cellules convectives à sa surface. La composition de ces poussières est toujours incertaine. Elles sont difficiles à observer. Jusqu'à présent, les modèles utilisaient des grains de silicate avec du fer (de l'olivine), mais ces grains condensent trop loin de l'étoile pour être efficaces au bon endroit. Il a été mis en évidence la nécessité d'avoir des grains sans fer (forsterite et enstatite). Par leur porosité et le fait qu'ils aient une surface effective plus importante, cela permet à la pression de radiation de propager les vents. Ils se condensent aussi plus proches de l'étoile (2-3 $R_\star$) ce qui en fait de meilleurs candidats pour la propagation du vent (Höfner 2008; Norris et al. 2012; Bladh & Höfner 2012).

Dans les enveloppes des étoiles de type M où C/O<1 (AGB oxygénées), on retrouve principalement des espèces composées d'oxygène comme le CO, H_2O, SiO dans les régions internes (10 $R_\star$ - 100 $R_\star$). Dans l'enveloppe externe (au delà de 100 $R_\star$), par réaction photochimique (réaction de la matière sous le rayonnement) et l'interaction avec le milieu interstellaire (MIS), on retrouve du OH et du Si :

$$H_2O \rightarrow OH + H$$

$$SiO \rightarrow Si + O$$

Pour les étoiles carbonées (avec C/O>1), on retrouve des éléments majoritairement carbonés comme le CO, C_2H_2, et HCN dans les régions internes. Comme pour les étoiles oxygénées, par photochimie, ces molécules sont dissociées :

$$C_2H_2 \rightarrow C_2 + H$$

$$HCN \rightarrow CN + H$$

On trouve également les étoiles de type S, qui ont un rapport C/O $\sim$ 1.

La pulsation

Ces étoiles, à cause de leur grande enveloppe convective, sont très actives (variation de leur rayon et de leur luminosité). Comme le Soleil, elles ont une période de pulsation. Le Soleil a une période d'activité sur un cycle de 11 ans, mais les étoiles AGB (comme les étoiles RSG) ont une périodicité beaucoup plus courte de l'ordre de quelques centaines de jours (et avec beaucoup plus d'amplitude que le Soleil). Nous pouvons facilement observer cette variabilité avec les courbes de luminosité. En Fig. 1.5, nous avons un exemple de la variabilité d'une étoile AGB : U Herculis (U Her). Elle a une période de pulsation d'environ 400 jours. Les pulsations sont détectables grâce à la variation de luminosité de l'étoile.

Le changement de luminosité s'explique par la variation du rayon de l'étoile, comme on peut le voir en Fig. 1.5 en bas.

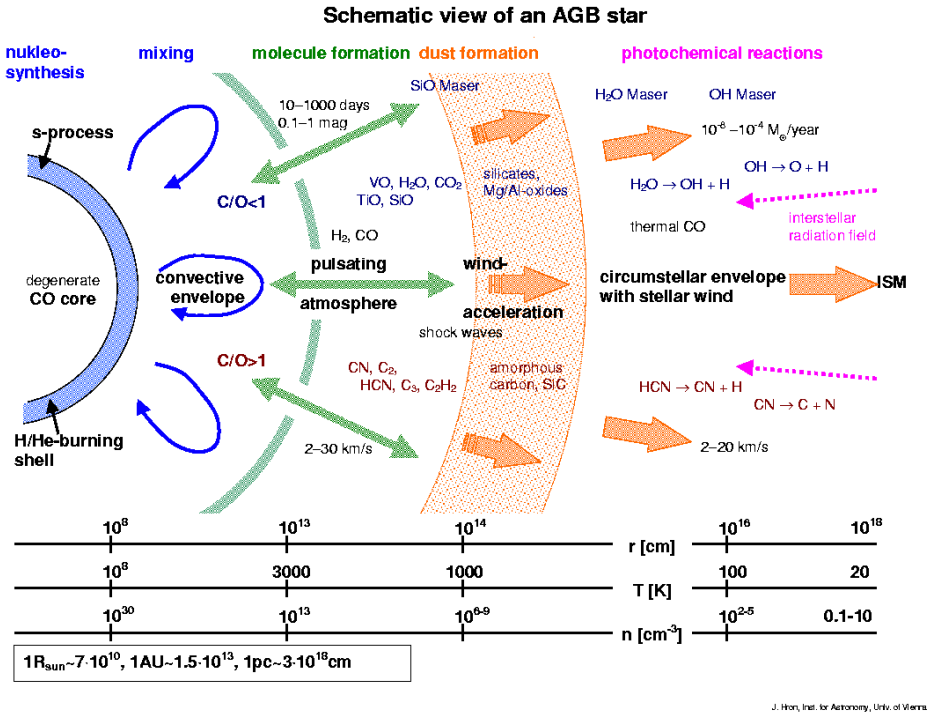


FIGURE 1.4 – Coupe d'une étoile AGB avec son enveloppe circumstellaire. (J. Hron)

1ère phase :

Les couches externes de l'étoile étant opaques, elles piègent le rayonnement, ce qui conduit à un réchauffement des couches externes. L'hélium He est ionisé en He^+ et He^{++}. Les électrons libérés par l'ionisation se dispersent et l'opacité augmente. La base de la couche opaque absorbe donc la lumière venant du centre, la température et la pression augmentent. Cette augmentation engendre l'extension de l'étoile et ainsi, une hausse de la luminosité.

2ème phase :

Les couches deviennent plus transparentes à cause de l'extension de l'étoile lors de l'étape précédente. L'opacité diminue et les photons piégés jusqu'ici quittent la couche. La lumière et la chaleur peuvent s'échapper. Les ions He^{++} se recombinent en He^+. Le gaz refroidit et retombe, ce qui entraîne la contraction de la couche externe et une diminution du rayon de l'étoile.

Il y a différents types d'étoile AGB selon leur pulsation. Les étoiles de type Mira, comme *o* Ceti (Mira) ou U Her et GY Aql (étudiées dans cette thèse), présentent une variation de leur luminosité très régulière de l'ordre d'une année. On retrouve également les semi-régulières, qui ont une périodicité moins marquée (de type SRa et SRb) et les irrégulières (Lb).

La morphologie de l'enveloppe

On recense une grande variété de formes d'enveloppe qui, comme on peut le voir en Fig. 1.6, ne sont ni symétriques, ni sphériques. Des observations ALMA ont mis en évidence des structures en spirale notamment autour de l'étoile CW Leonis (Decin et al. 2015).

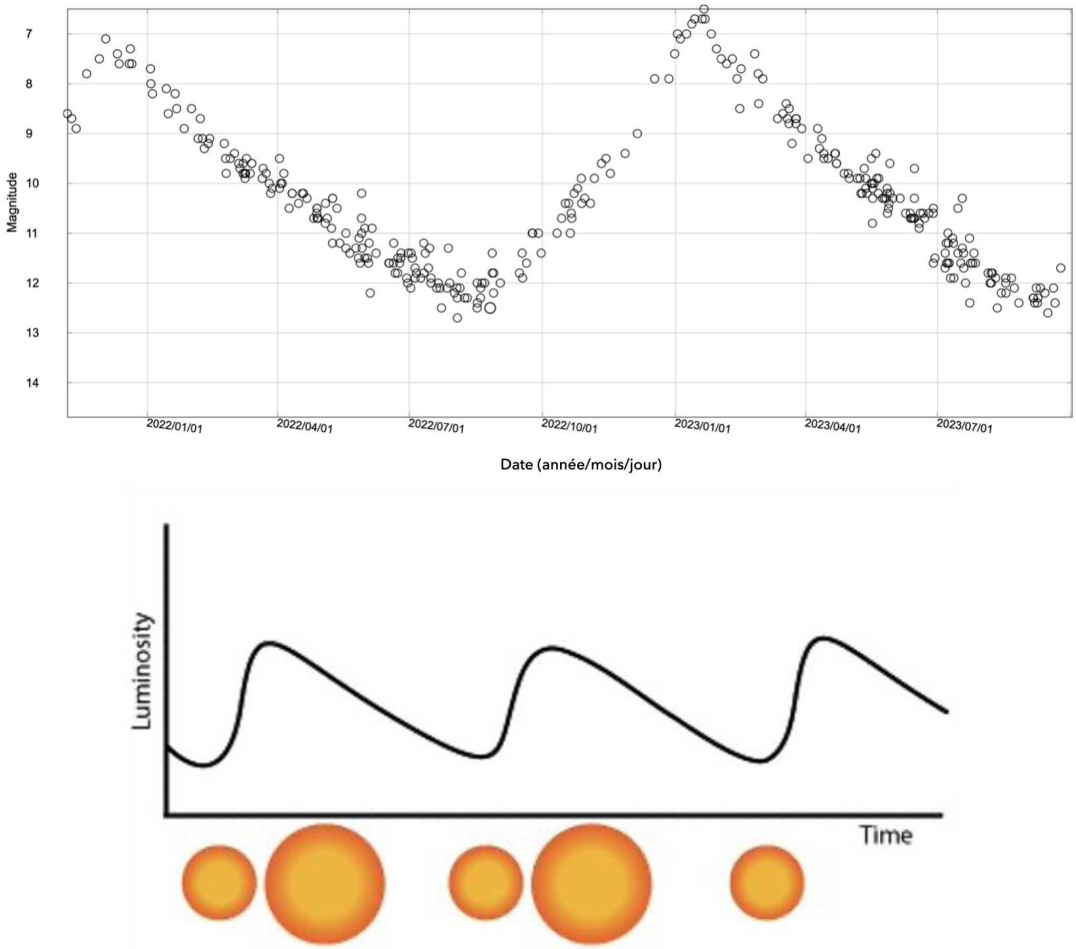


FIGURE 1.5 – **Haut :** Courbe de luminosité de U Her, la magnitude en fonction de la date (année/mois/jour) https://www.aavso.org. **Bas :** Évolution de la luminosité dans le temps avec le changement de rayon. (Teachers Notes Booklet 3 : Stellar Distances, https://sci.esa.int/documents/34439/36575/1567255185947-Teacher%27s-Notes-Booklet-3.pdf).

On retrouve par ailleurs des structures non sphériques dans la plupart des nébuleuses planétaires, le prochain stade évolutif des étoiles AGB (Sahai et al. 2011). Le champ magnétique a longtemps été pensé comme le responsable de ces formes (Vlemmings & van Langevelde 2008), mais il a été ensuite prouvé que celui-ci n'était pas assez fort pour expliquer de telles structures. Il faudrait un champ magnétique supérieur à 10 Gauss (1 Gauss = 10^{-4} Tesla) (Soker & Zoabi 2002) et le champ magnétique dans l'enveloppe n'est pas si important (Herpin et al. 2006) (détails en section suivante). Le large programme ATOMIUM a permis de mettre un autre élément clé en évidence pour l'explication de ces formes : la présence d'un compagnon orbitant autour de l'étoile (Decin et al. 2020; Homan et al. 2020), comme on peut le voir en Fig. 1.7. Il peut s'agir d'une planète géante ou bien d'une autre étoile. La présence d'un compagnon pourrait entraîner le gaz autour de l'étoile et former ces structures (El Mellah et al. 2020).

1.2.1.4 Etoiles Post-AGB

Après la phase AGB, les étoiles continuent de brûler de l'hydrogène en fines couches sur les parties externes de l'étoile. Leur cœur est composé de carbone et d'oxygène. La

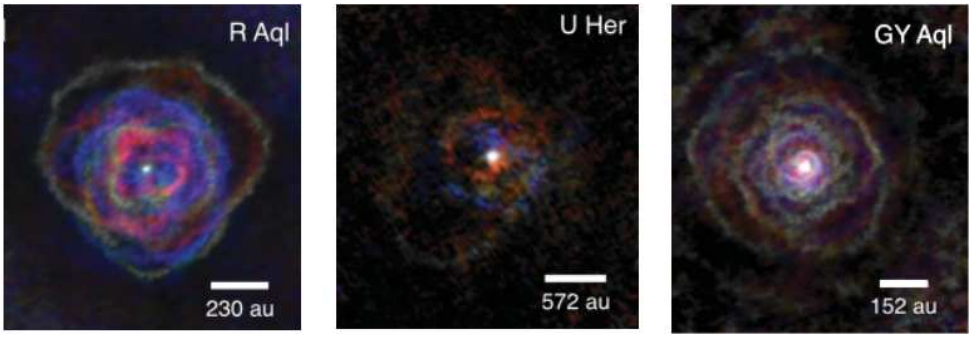


FIGURE 1.6 – CSE de 3 étoiles AGB : R Aql, U Her et GY Aql. Carte d'émission du ^{12}CO (J=2-1) obtenue avec la bande 6 d'ALMA, observation du projet ATOMIUM (Gottlieb et al. 2022) avec une résolution spatiale entre 0.2" et 0.5".

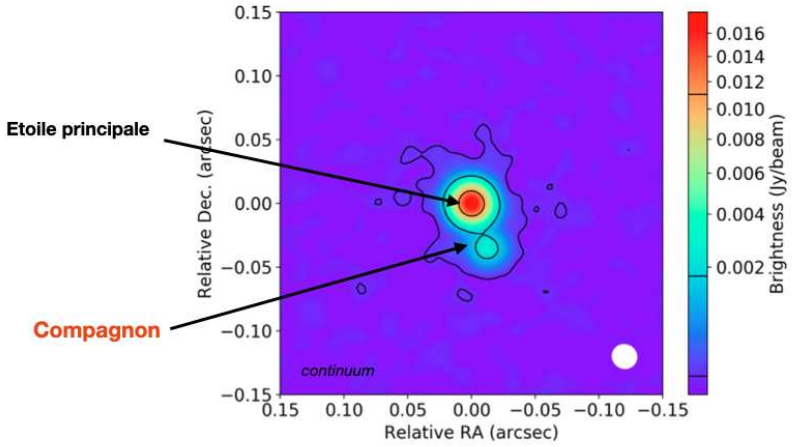


FIGURE 1.7 – Émission continuum de l'enveloppe de π^1Gru (Homan et al. 2020) mettant en évidence la présence d'un compagnon autour de cette étoile.

température augmente fortement mais à luminosité constante, elles se déplacent à gauche du diagramme HR. Ces étoiles ne sont pas assez massives pour commencer à fusionner le carbone. Les étoiles vont finir par expulser leurs couches externes et former une nébuleuse planétaire. C'est une phase de vie courte de l'étoile qui dure environ 10000 ans. Ce stade d'évolution des étoiles est caractérisé par une perte de masse importante. Elles sont des sources significatives de noyaux lourds pour l'enrichissement du milieu interstellaire. Elles expulsent de la matière avec un taux de perte de masse $10^{-6} - 10^{-8}$ $M_\odot$/an (Kudritzki et al. 1997). Les couches sont composées de gaz ionisé par les photons UV provenant de la source centrale chaude. Ce gaz s'étend à des vitesses de 100-300 km/s au début et vont ensuite ralentir à 10-30 km/s (Kahn 1983; Krtička et al. 2020). On observe des formes très variées (voir Fig. 1.8), comme pour les enveloppes à la phase précédente. Comme pour les AGB, la rotation ne permet pas d'expliquer cette diversité et cette asymétrie. L'idée de l'impact du champ magnétique avait aussi été pensée (Vlemmings & van Langevelde 2008) mais nous avons vu que celui-ci n'était pas assez important. On peut également penser à la présence d'un compagnon pour les expliquer (Soker & Zoabi 2002).

Le cœur de l'étoile épuise rapidement son carburant nucléaire et se contracte considérablement : il reste une naine blanche. Ces étoiles ont un cœur de carbone et d'oxygène.

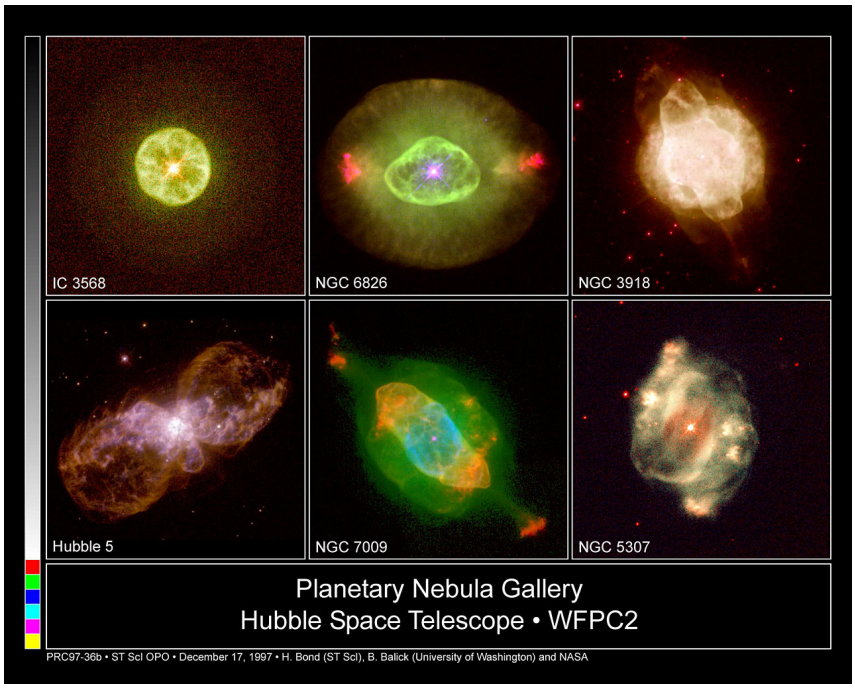


FIGURE 1.8 – Diversité des nébuleuses planétaires. Source : H. Bond (ST ScI), B. Balick (University of Washington) et NASA/ESA. https://esahubble.org/images/opo9738b/

Les naines blanches sont situées en bas à gauche du diagramme HR. Elles ont un rayon similaire à celui de la Terre pour une masse d'environ 70% du Soleil, mais la température de ces étoiles peut aller de 4000 à 150 000 K. Elles vont lentement se refroidir jusqu'à s'éteindre et devenir des naines noires, mais ce phénomène n'a pas encore été observé car l'Univers est trop jeune par rapport au temps nécessaire pour arriver à cette phase.

1.2.2 Étoiles Massives

Les étoiles avec une masse supérieure à 8 $M_\odot$ suivent une vie différente. Elles ont des luminosités supérieures à $10^3 L_\odot$, leur durée de vie est beaucoup plus courte. De plus, leur mécanisme de formation est encore mal compris (Motte et al. 2018). Elles pourraient se former par *accrétion compétitive*, c'est-à-dire, lors de la fusion de plusieurs cœurs moins massifs par la contraction globale d'un amas (Bonnell et al. 2004, voir Fig. 1.9). Elles pourraient aussi se former à partir d'un cœur pré-stellaire isolé (McKee & Tan 2003, voir Fig. 1.10), par la convergence de flots turbulents. On part d'un réservoir de masse finie, alimenté en turbulence et assez massif pour former une étoile massive. Ce réservoir va ensuite s'effondrer et former un cœur protostellaire massif. Elles arrivent sur la séquence principale du diagramme HR dès leur phase de proto-étoile (on les retrouve en haut à gauche du diagramme HR).

Ce sont des étoiles beaucoup plus lumineuses que les étoiles de faible masse. Au cœur des étoiles massives, la température et la pression sont suffisamment élevées pour permettre la fusion du carbone (à la fin de la vie de l'étoile), ainsi que celle d'éléments plus lourds. Par la suite, elles évoluent en super-géantes rouges RSG avec des éléments lourds au cœur et des éléments de plus en plus légers dans les couches extérieures. Elles ont un taux de perte de masse très important (10^{-6} à 10^{-4} $M_\odot$/an)., elles ont donc un rôle majeur dans l'enrichissement du milieu interstellaire. Les mécanismes derrière la perte de masse sont également mal compris à ce jour. Cela pourrait être expliqué par la présence de

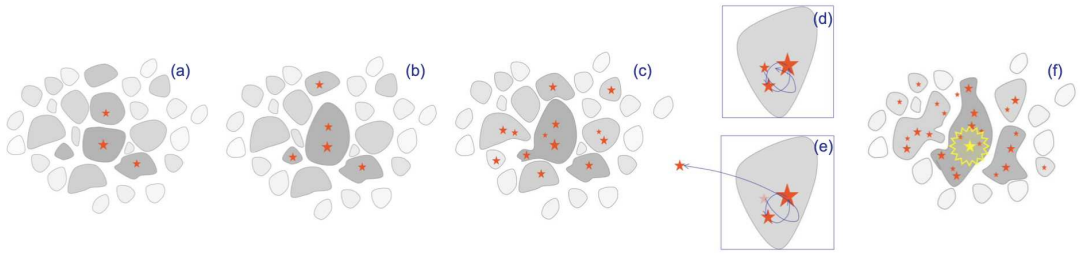


FIGURE 1.9 – Illustration de scénario de formation des étoiles massives par accrétion compétitive. (a) : Des clumps s'effondrent pour former des étoiles. (b) : Fusion des clumps pendant l'effondrement. (c) : Plusieurs proto-étoiles se retrouvent dans un clump. (d) : Influence sur la croissance en masse des proto-étoiles par accrétion. (e) : Éjection des proto-étoiles de faible masse. (f) : Formation d'étoiles massives. (Klessen et al. 2005)

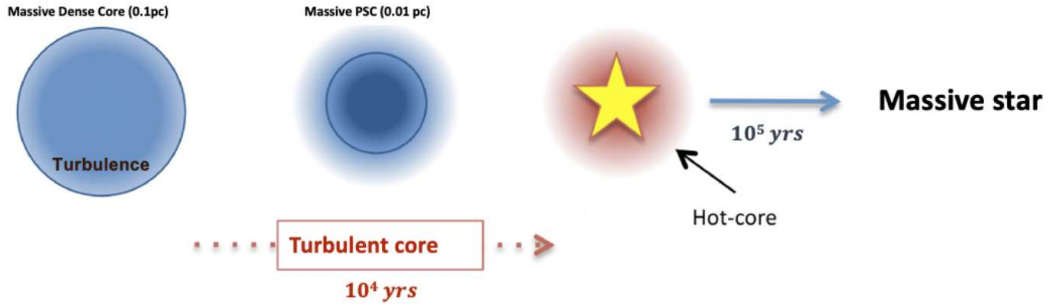


FIGURE 1.10 – Illustration de scénario de formation des étoiles massives par flots turbulents. On a un nuage massif dense alimenté en turbulence. La turbulence fait s'effondrer le nuage et forme le cœur pré-stéllaire. Cela va donner une proto-étoile (hot core), et donnera l'étoile massive (Molet 2019).

cellules de convection à la surface (Josselin & Plez 2007, observation spectroscopique). Ces mouvements convectifs génèrent une pression turbulente qui diminue fortement la gravité effective. Cette diminution, combinée à la pression radiative pourrait être à l'origine de la perte de masse dans les étoiles supergéantes rouges. La perte de masse pourrait aussi s'expliquer avec le champ magnétique, qui a été détecté autour de ces étoiles (Aurière et al. 2010, détection autour de Bételgeuse avec l'instrument NARVAL/TBL). Ce champ génère des ondes d'Alfvén qui permettent au vent de se propager le long des lignes de champs magnétiques dans l'atmosphère stellaire (Airapetian et al. 2010). Ces étoiles sont très actives avec des phénomènes de convection très importants, visibles à la surface de l'étoile, où les simulations (Freytag et al. 2012; Chiavassa et al. 2022) nous montrent de larges cellules convectives, et nous les observons notamment pour Bételgeuse en interférométrie (Montargès et al. 2016) et en spectropolarimetrie (López Ariste et al. 2018).

Les étoiles massives avec une masse de 8 à 15 $M_\odot$, vont ensuite évoluer en supergéantes bleues, avec une luminosité allant de $10^3 L_\odot$ à $10^6 L_\odot$. Leur fin de vie donne lieu à des événements forts en énergie. Ces étoiles peuvent finir en supernovae (SN) ; elles vont expulser leur enveloppe et il ne restera plus qu'une étoile à neutrons. Les étoiles encore plus massives vont finir en supernova à effondrement de cœur, dit de type II (SN2), ou Ib et Ic, voire en trou noir selon la masse de l'étoile (Kippenhahn et al. 2013).

1.3 Champ magnétique des étoiles

1.3.1 Champ magnétique Solaire

Le Soleil est une étoile de la séquence principale, au milieu de sa vie. C'est une étoile active comme le montre son activité magnétique. Comme les étoiles de faible masse, il est composé d'un cœur où l'hydrogène fusionne en hélium, d'une zone radiative et d'une zone convective. La surface de l'étoile est appelée la photosphère. Son atmosphère est constituée de la chromosphère (avec épaisseur de l'ordre du millier de kilomètres) et de la couronne (la couche la plus externe de l'atmosphère solaire qui s'étend sur plusieurs millions de kilomètres) (cf. Fig. 1.11).

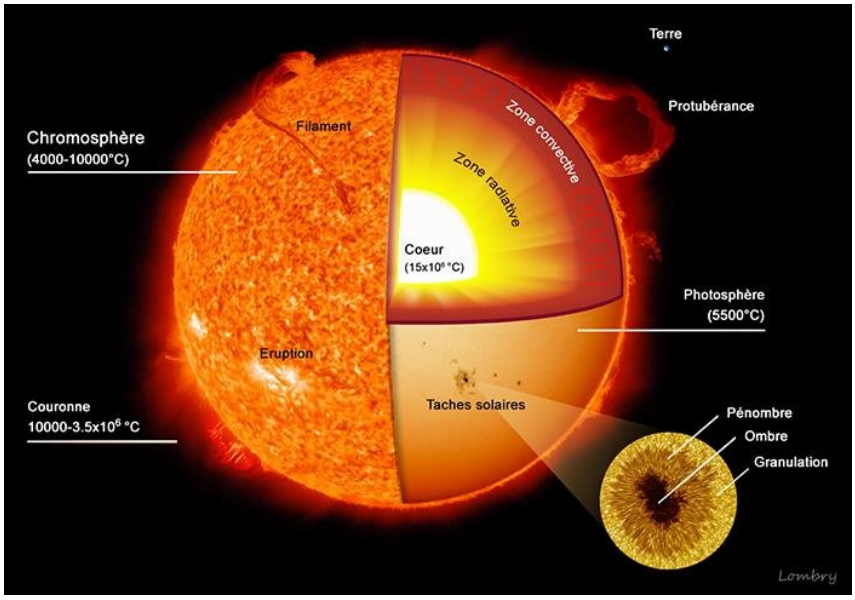


FIGURE 1.11 – Représentation en coupe de la structure du Soleil (T. Lombry).

Le Soleil est une étoile active, qui génère un champ magnétique autour de lui. Le champ magnétique est produit dans la zone de transition entre la zone radiative et la zone convective, appelée *tacholine*. Il est soumis à des processus de dynamo qui conduisent à une activité à la surface et dans l'atmosphère, notamment dans la chromosphère, où l'on peut voir des filaments, des éruptions (Fig. 1.12) et des éjections de matière. Cela génère aussi une activité périodique de 11 ans environ. À son pic d'activité, on peut voir à sa surface de nombreuses "taches solaires" ainsi qu'une grande activité à la chromosphère de l'étoile.

La lumière visible qui nous vient du Soleil est principalement émise par la photosphère (comme on peut le voir en Fig. 1.12 à droite) : la couche la plus froide et la plus profonde de l'atmosphère et également la zone la plus froide, autour de 5000 K. La photosphère est composée de *granules* plus brillantes et plus chaudes que la moyenne de la photosphère entourées de zones plus froides (voir Figure 1.11 en bas à droite). Elles sont dues à l'activité de la zone convective en dessous et ont un temps de vie d'environ 10 minutes. On distingue des zones beaucoup plus sombres et froides (environ 3900 K), beaucoup plus larges que les granules citées précédemment. Ce sont les taches solaires et elles ont une taille typique de quelques milliers de kilomètres. On peut facilement les observer sur la photosphère comme on les voit en Fig. 1.12 à gauche. Elles se forment à la recombinaison

des lignes de champs magnétique créées par la rotation différentielle du Soleil. Le champ magnétique au niveau des taches solaires est très élevé et peut atteindre 3000 Gauss. La matière ionisée va se déplacer le long des lignes de champ. On retrouve un champ ascendant de matière et la matière à la surface circule difficilement, ce qui entraîne une baisse de la température et devient donc plus sombre que le reste de la photosphère.

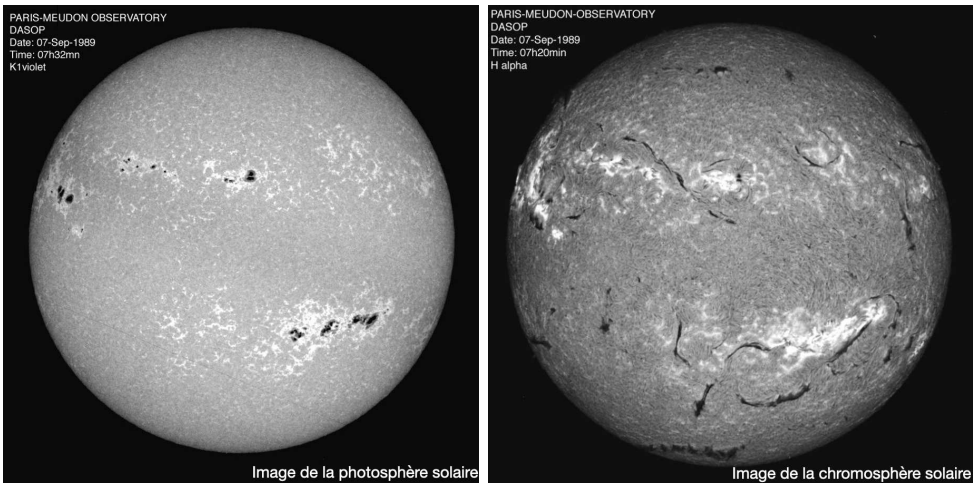


FIGURE 1.12 – Image du Soleil dans les bandes CaII K1 et Hα. BASS 2000, BAse de données Solaire Sol, Observatoire de Paris. https://bass2000.obspm.fr/home.php

La vitesse de rotation des fluides dans la photosphère de l'étoile n'est pas la même selon la latitude. La vitesse est plus élevée à l'équateur qu'aux pôles et c'est ce phénomène qui entraîne la génération du champ magnétique pour le Soleil.

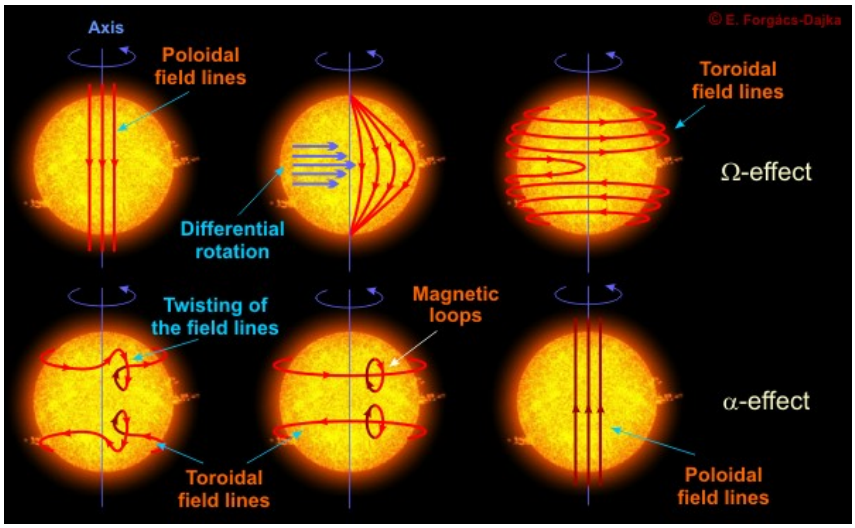


FIGURE 1.13 – Illustration de la dynamo solaire. En haut : l'effet Ω et en bas α. E. Forgács-Dajka, https://stark.konkoly.hu/stellar_activity.html

La Fig. 1.13 illustre l'effet $\alpha - \Omega$ (Charbonneau 2010). Le champ magnétique du Soleil est initialement poloïdal. À cause de la rotation différentielle, la matière à l'équateur a une vitesse angulaire plus importante, ce qui entraîne le champ magnétique et le transforme en un champ toroïdal : c'est l'effet Ω. Les mouvements du plasma dans la couche convective

tordent les lignes de champ toroïdal en boucles. C'est l'effet α, qui agit localement sur les lignes de champ magnétique et va de nouveau créer un champ poloïdal mais inversé. La combinaison $\alpha - \Omega$ est ce qu'on appelle la dynamo solaire.

1.3.2 Champ magnétique des étoiles AGB

Les étoiles froides évoluées présentent un taux élevé de perte de masse, qui contribue à l'enrichissement du milieu interstellaire et, par conséquent, au recyclage de la matière dans l'Univers. Le champ magnétique et la dynamique photosphérique/atmosphérique peuvent être impliqués dans le déclenchement de cette importante perte de masse. Des études ont révélé que ces objets présentent un champ magnétique qui s'étend au-delà de leur surface. L'origine de ce champ magnétique fait encore l'objet de débats, avec des mécanismes impliquant une dynamo turbulente, la convection, la pulsation stellaire et les points froids. Ces mécanismes peuvent être contraints grâce à l'observation de diverses transitions moléculaires dans l'enveloppe circumstellaire.

Nos connaissances sur le champ magnétique autour de ces étoiles sont assez limitées, et la mesure directe du champ magnétique est difficile. Une mesure importante dans l'étoile de type S χ Cyg par Lèbre et al. (2014) a permis de mesurer un fort champ magnétique proche de la photosphère de l'étoile, entre 2 et 3 Gauss. D'autres mesures ont confirmé la présence d'un champ magnétique important par des mesures d'émission de masers[5] SiO, H_2O et OH (Herpin et al. 2006; Vlemmings et al. 2002; Rudnitski et al. 2010). Nous pouvons aussi étudier cela par effet Zeeman avec le CN (Duthu et al. 2017) ou encore par effet Goldreich-Kylafis avec le CO (Vlemmings et al. 2012).

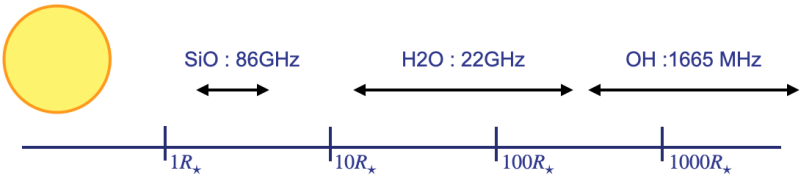


FIGURE 1.14 – Représentation de la localisation des différents masers autour d'une étoile AGB.

L'étude de différentes molécules permet de tracer le champ magnétique à différentes distances de l'étoile comme on peut le voir en Fig.1.14. Les molécules ne vont pas se former ou être excitées à la même distance de l'étoile. En étudiant le rayonnement de plusieurs d'entre elles, sensibles au champ magnétique, nous pouvons avoir une compréhension globale du champ magnétique.

Dans cette thèse, nous avons utilisé le polarimètre XPol installé sur le télescope de 30m de l'IRAM (voir Sec. 5). Nous avons observé l'émission de la raie du maser ^{28}SiO v = 1, J = 2-1 et obtenu des mesures spectroscopiques simultanées des 4 paramètres de Stokes (voir Sec. 2). La molécule SiO présente une émission maser polarisée. Cette émission forte nous permet de déduire le champ magnétique comme il sera développé en Sec. 5. Sous l'effet d'un champ magnétique, nous pouvons retrouver des motifs particuliers qui

5. Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation.

permettent de mettre en évidence la présence du champ magnétique.

Il y a plusieurs hypothèses étudiées aujourd'hui quant aux origines du champ magnétique stellaire :

— dynamo de type Solaire (entraînée par la rotation différentielle de l'étoile) avec compagnon,
— dynamo turbulente générée par la convection.

Dans le cas d'une dynamo solaire, il s'agit d'une dynamo de type $\alpha-\Omega$, un champ magnétique azimutal qui est amplifié par la rotation différentielle de l'étoile. Mais la vitesse de rotation attendue pour les étoiles AGB n'est pas assez importante pour créer de tels effets (Soker 2002). De plus, les lignes de recombinaison devraient créer une émission dans les rayons X que l'on n'observe pas. Cependant, la présence d'un compagnon pourrait accélérer la rotation de l'étoile (Vlemmings, W. H. T. et al. 2018) et donc former tout de même un effet dynamo comme le Soleil. Le compagnon pourrait accélérer le gaz, et donc augmenter les vitesses de rotation du gaz et entraîner un effet dynamo classique.

L'effet de dynamo turbulente $\alpha^2-\Omega$ peut quant à lui créer un faible champ magnétique à la surface de l'étoile. La composante radiale du champ peut alors être fortement renforcée à un endroit spécifique près de la surface, au-dessus des taches magnétiques froides (Priest 2012). Elles sont liées à la convection à l'intérieur de l'étoile, et donc peuvent être corrélées à la présence de points froids à la surface.

Ces phénomènes produisent un champ magnétique qui influence l'émission moléculaire. Cela va notamment créer un effet Zeeman pour les espèces diamagnétiques. Cet effet entraîne la séparation en énergie de niveaux atomiques dégénérés. L'élargissement des raies nous donne une mesure de l'intensité du champ magnétique. Cependant, dans le cas des observations réalisées lors de cette thèse, nous étudions le SiO qui est une espèce paramagnétique, la multiplication des raies n'est pas observée. Le champ magnétique est mesurable avec l'observation des formes de "S" [6] dans les données (Elitzur 1996). Mais d'autres effets comme le pompage anisotropique du maser pourraient aussi expliquer les formes observées (Nedoluha & Watson 1990). Ces hypothèses seront étudiées également en Sec. 5.

1.3.3 Champ magnétique des étoiles RSG

Un champ magnétique a été détecté autour des RSG avec des observations spectroscopiques. Une première mesure a été faite autour de Bételgeuse (Aurière et al. 2010), où le champ longitudinal détecté est d'environ 1 Gauss et augmenterait dans le temps (sur la durée de leurs observations). Une autre mesure plus récente (Mathias et al. 2018), a été faite avec la polarisation circulaire où ils ont mesuré un champ magnétique à la surface d'environ 1 Gauss qui varie sur une période de 2000 jours, comme on peut le voir en Fig. 1.15. Cela a été fait avec les spectromètres ESPaDOnS [7] et NARVAL au TBL [8]. Des mesures ont également été faites dans d'autres étoiles (Tessore et al. 2017, CE Tau, μ Cep et α Ori) où ils ont détecté des faibles signatures Zeeman d'origine stellaire. La

6. Sous la forme de dérivée de gaussiennes. On y retrouve donc deux pics, qui forment un "S", dans un sens ou dans l'autre, dans les données (voir chapitre 5).
7. Echelle SpectroPolarimetric Device for the Observation of Stars au Canada-France-Hawaï Telescope
8. Télescope Bernard Lyot

composante longitudinale des champs détectés est de l'ordre du Gauss pour CE Tau, μ Cep, et d'un ordre de grandeur de plus pour α Ori.

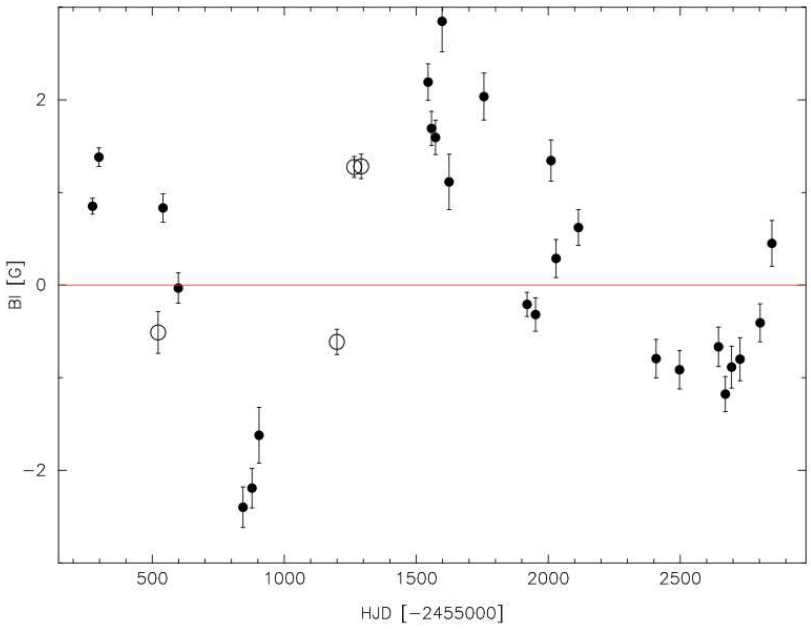


FIGURE 1.15 – Variation du champ magnétique de Bételgeuse sur 8 saisons avec ESPaDOnS et NARVAL (Mathias et al. 2018).

La présence de cellules convectives géantes à la surface pourrait expliquer le champ magnétique mesuré. Un motif convectif a été identifié sur Bételgeuse (Chiavassa et al. 2010). Cette étoile est une variable irrégulière, la convection peut jouer un rôle important dans la compréhension de la variabilité. La convection dans les étoiles RSG produit des granules à grande échelle causant des inhomogénéités de surface observables. Haubois et al. (2009) ont observé deux points brillants à la surface de cette même étoile, qui sont des signatures potentielles de cellules convectives. Ces cellules convectives ont été finalement observées par Montargès et al. (2016) et López Ariste et al. (2018) avec des observations en interférométrie au VLTI (Very Large Telescope Interferometer) et en spectroscopie avec le TBL. Les modèles de convection stellaire (Freytag et al. 2017; Chiavassa et al. 2024, CO5BOLD) ont aussi permit de mettre en évidence la présence de ces cellules géantes et la variabilité de la surface stellaire.

En Fig. 1.16, nous voyons la présence de points chauds et froids, et une surface représentative de l'activité stellaire par convection. Cela montre l'importance du phénomène mais aussi la variabilité car 200 jours séparent les deux modèles. La variabilité stellaire est importante à prendre en compte dans les modèles.

1.4 Objectifs de la thèse

Nous voulons comprendre les processus physiques qui dominent dans le lancement et la propagation des vents, les interactions dynamiques et physiques. Pour cela, il faudrait pouvoir cartographier la matière dans la région de formation des vents, à l'interaction entre la convection et l'atmosphère de l'étoile, ainsi que dans l'enveloppe, pour comprendre la

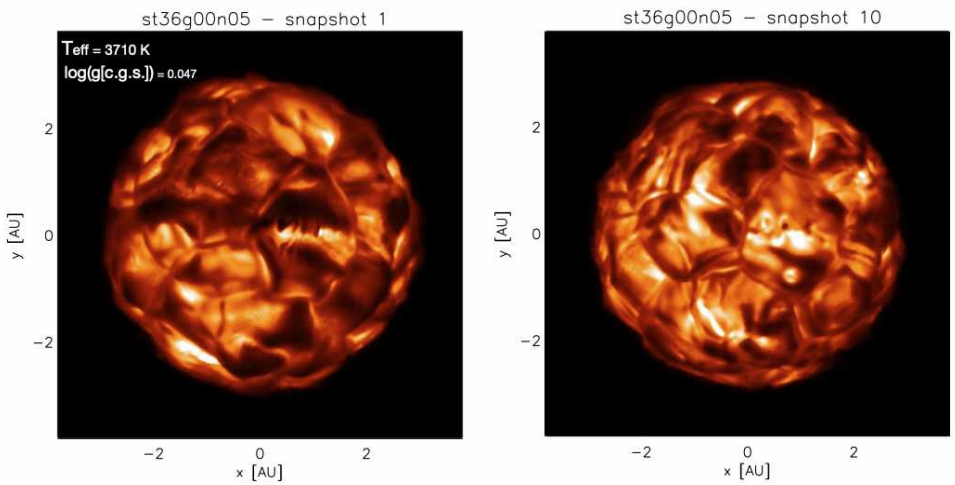


FIGURE 1.16 – Exemple de deux snapshots de simulation de convection stellaire d'une étoile RSG avec le code CO5BOLD et traitées par le code de transfert radiatif Optim3D (Chiavassa et al. 2009) espacées de 200 jours (Chiavassa et al. 2022).

géométrie, la cinématique et les composants de l'enveloppe.

Un des objectifs de ce travail de recherche est donc d'essayer de reproduire les émissions continuum et moléculaires de ces enveloppes. Avec le code de transfert radiatif MCFOST (Pinte et al. 2006, 2009), nous pourrons introduire dans les modèles les types de poussières que nous pensons nécessaires à la propagation des vents (Bladh & Höfner 2012, justification des grains sans fer). Les étoiles évoluées étudiées ici sont des variables de type Mira : quelle influence peut donc avoir la variabilité de l'étoile, selon des modèles stellaires comme CO5BOLD (Freytag et al. 2012) ? Ce modèle nous permettra de contraindre la composition des poussières et leur distribution. Nous travaillerons avec un modèle hydrodynamique (El Mellah et al. 2020) pour étudier l'influence d'un compagnon.

Nous voulons également comprendre l'origine du champ magnétique des étoiles évoluées. Nous estimerons le champ magnétique proche de la photosphère avec l'émission polarisée du maser SiO et essayerons de le contraindre spatialement et temporellement pour comprendre son origine.

La première partie de cette thèse sera consacrée à l'explication des outils permettant l'étude des étoiles évoluées : la radio-astronomie, dans le chapitre 2, et le transfert radiatif dans le chapitre 3. Nous verrons ensuite le modèle utilisé pour reproduire les enveloppes des étoiles dans le chapitre 4 où seront étudiés les différents paramètres du modèle et les résultats de simulations. Dans le chapitre 5, nous verrons comment calculer le champ magnétique des observations du maser SiO, la méthode de calibration, et nous conduirons une discussion autour de l'origine du champ magnétique. Dans le chapitre 6, nous présenterons les conclusions et nous proposerons des perspectives à ce travail, à savoir l'utilisation de modèles stellaires 3D dans le modèle de transfert radiatif ainsi que l'étude de variabilité temporelle du champ magnétique.

Chapitre 2

Radio Astronomie

Everything is better under the stars,
I suppose

Radio Silence - Alice Oseman

Sommaire

2.1 Histoire de la Radio Astronomie 20
2.2 Théorie des Antennes 22
2.3 Fonctionnement d'un radiotéléscope 24
2.3.1 L'antenne IRAM 30m 24
2.3.2 Détection hétérodyne 25
2.3.3 Frontend et Backend 26
2.3.4 Procédures observationnelles 28
2.3.5 Observation Polarimétrique 29
2.4 Interférométrie 30
2.4.1 Pourquoi faire de l'interférométrie ? 30
2.4.2 Principes observationnels 32
2.4.3 ALMA 34

2.1 Histoire de la Radio Astronomie

La radio astronomie connaît ses débuts avec la découverte des ondes radio par Heinrich Hertz en 1889. Une onde radio est une onde électromagnétique avec une fréquence allant de quelques kHz à 300 GHz. Les premières tentatives d'observation de ces ondes en astronomie se sont portées sur le Soleil. En 1895, les astronomes Oliver Lodge et Henri Deslandres ont tenté d'observer le Soleil. Ils pensaient que l'activité solaire était d'origine électrique et devrait être observable dans ce domaine de fréquence. La radio astronomie débute vraiment en 1933 avec Karl Jansky, qui observa un signal de périodicité égale à la rotation de la Terre dans la Voie Lactée. En 1937, Groote Reber construit le premier radiotélescope (à but astronomique), une antenne parabolique de 9m. L'étude de cette gamme de longueurs d'ondes s'est cependant principalement développée pendant la Seconde Guerre mondiale autour des travaux sur les radars. Dans la seconde moitié du XXe siècle, un très grand nombre de télescopes sont construits et la radio astronomie connaît un essor important. Nous pouvons notamment noter la construction de l'antenne Lovell

en Angleterre au Jodrell Bank Observatory en 1957, d'un diamètre de 76 m, l'antenne la plus grande au moment de sa construction. Cet instrument permit d'observer le premier anneau d'Einstein par lentille gravitationnelle en 1988. Cette antenne fait partie du European VLBI Network, un réseau de 22 antennes en Europe, qui a une très grande résolution spatiale, et aussi du réseau e-Merlin en Angleterre. En France, la station de radio astronomie de Nançay est inaugurée en 1956. Son radiotélescope est le 4ème plus grand au monde. La France est aussi impliquée dans ce domaine avec l'Institut de Radio-Astronomie Millimétrique (IRAM), avec le radiotélescope de 30 m en Espagne sur la Sierra Nevada et l'interféromètre NOEMA, dont les 12 antennes de 15 m de diamètre sont situées sur le plateau de Bure dans les Alpes. En 2011 s'achève la construction de l'interféromètre ALMA (Atacama Large Millimeter/Submillimiter Array), le plus grand interféromètre radio du monde, un réseau de 66 antennes pouvant être séparées de 16 kilomètres.

Le développement instrumental de la radio astronomie est toujours d'actualité avec de nouveaux projets toujours en discussion et en construction. Nous pouvons par exemple citer SKA (Square Kilometre Array), actuellement en construction, sur 2 sites, en Australie (SKA-low) et en Afrique du Sud (SKA-mid), qui observera dans une gamme de fréquence entre 50 MHz - 350 MHz (SKA-low) et 350 MHz - 15.4 GHz (SKA-mid). Il sera plus sensible dans cette gamme de fréquence que les autres télescopes qui existent aujourd'hui et scannera le ciel beaucoup plus rapidement [1].

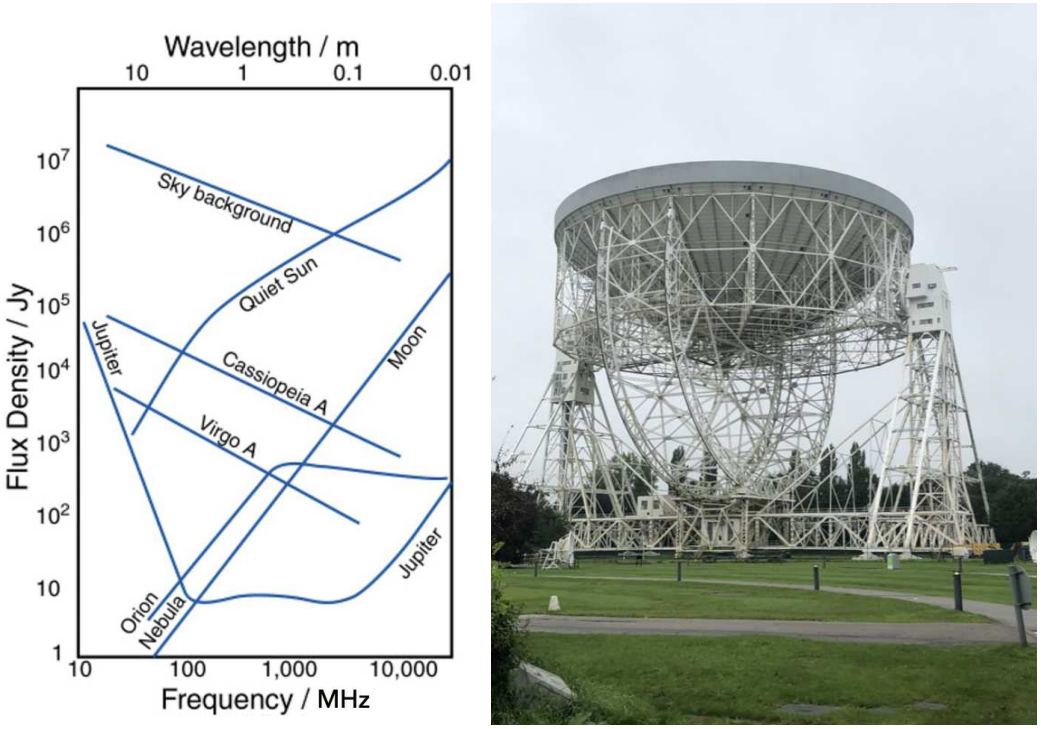


FIGURE 2.1 – **Gauche :** Exemple de sources observables en radio (Krauss 1996). **Droite :** L'antenne Lovell, VLBI, Jodrell Bank Observatory.

Avec la radio astronomie, nous pouvons observer un grand nombre de processus physiques, le Système Solaire, le milieu interplanétaire, le milieu interstellaire, les zones de

1. https://www.skao.int/en/explore/telescopes

formation d'étoiles avec des nuages moléculaires comme celui de la nébuleuse d'Orion, les pulsars, les galaxies et l'environnement des étoiles évoluées. Des exemples d'objets étudiés en radio sont présentés en Fig. 2.1, avec leur flux observé et le domaine de longueur d'onde dans lequel on les observe.

2.2 Théorie des Antennes

Dans cette partie et la suivante, nous allons présenter quelques bases de la radio astronomie avec la théorie des antennes et le fonctionnement d'un radio télescope, en particulier celui de l'antenne 30m de l'IRAM. Cette partie se base sur la présentation de Robert Lucas à l'IRAM mm school [2], sur la documentation d'EMIR [3], des resources de l'IRAM [4] et Wilson et al. (2013) "*Tools for Radio Astronomy*".

Le rayonnement électromagnétique dans le domaine radio est un phénomène ondulatoire de propagation de champs électrique et magnétique orthogonaux à la direction de propagation de l'onde. On peut détecter cette onde avec des antennes.

On définit la puissance dP interceptée par une surface dA par :

$$dP = I_\nu \cos(\theta)\ dA\ d\nu\ d\Omega \tag{2.1}$$

qui dépend de l'intensité spécifique I_ν aussi appelée *brillance*. θ est l'angle d'incidence, dA la surface collectrice, et $d\Omega$ la diamètre angulaire de la source (voir Fig 2.2).

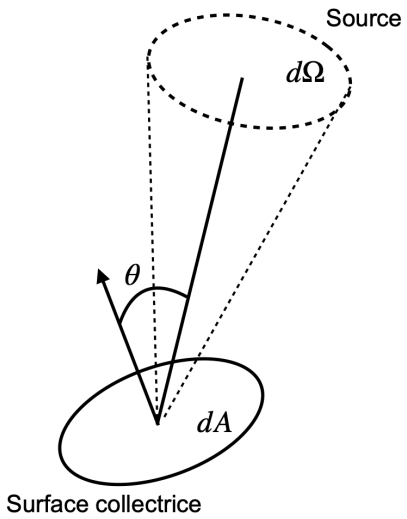


FIGURE 2.2 – Illustration de la brillance

La brillance est conservée sur toute la ligne de visée et ne dépend pas de la distance.

Pour une source non résolue, on va mesurer le flux :

$$S_\nu = \int_\Omega I_\nu \cos(\theta) d\Omega \tag{2.2}$$

2. https://web-archives.iram.fr/IS/IS2004/presentations/lucas-22nov04.pdf
3. https://publicwiki.iram.es/EmirforAstronomers
4. https://iram-institute.org

qui dépend de la distance de la source, et est mesuré en Jansky Jy (1 Jy = 10^{-26} W m^{-2} Hz^{-1}) où ν est la fréquence en s^{-1}.

En partant de la Loi de Planck :

$$B_\nu(T) = \frac{2h\nu^3}{c^2}\frac{1}{e^{h\nu/kT}-1} \tag{2.3}$$

avec c la vitesse de la lumière (en m/s), h la constante de Planck (en J.s), k la constante de Boltzmann (en J/K) et T la température (en K), on définit la température de brillance T_B qui correspond à la température d'un corps noir avec la même intensité spécifique :

$$I_\nu = B_\nu(T_B) \tag{2.4}$$

En se plaçant dans l'approximation de Rayleigh-Jeans ($h\nu << kT$), on obtient

$$B_\nu(T) = \frac{2\nu^2}{c^2}kT \tag{2.5}$$

Ainsi, on peut exprimer la brillance en unité de température :

$$I_\nu = \frac{2k}{\lambda^2}T_B \tag{2.6}$$

Et le flux en fonction de la température de brillance, si on considère une source gaussienne :

$$S = \frac{2k\Omega}{\lambda^2}T_B \tag{2.7}$$

$$= \frac{2k\pi\theta^2}{4\ln(2)\lambda^2}T_B \tag{2.8}$$

Ω est l'angle solide et θ la taille du lobe primaire à mi-hauteur $\theta = \theta_{\rm mb} = 1.22\lambda/D$ (voir représentation en Fig. 2.3). D est le diamètre de l'antenne.

Le diagramme de rayonnement de l'antenne est constitué d'un lobe principal (main beam) et de lobes secondaires (voir Fig. 2.3).

On peut définir la surface effective $A_{\rm eff}$, qui est la section efficace où la densité de puissance est reçue par l'antenne par :

$$A_{\rm eff}\Omega_A = \lambda^2 \tag{2.9}$$

où Ω_A est la puissance totale détectée par tous les lobes avec $\Omega_A = \pi\frac{\theta^2_{\rm mb}}{4\ln(2)}$.

On définit alors le rapport de puissance qui passe par les lobes "avants", la *forward efficiency* comme :

$$F_{\rm eff} = \frac{\Omega_{2\pi}}{\Omega_A} \tag{2.10}$$

où $\Omega_{2\pi}$ est la puissance détectée par les lobes avants.

La puissance détectée par le lobe principal est $\Omega_{\rm mb}$ et on écrit le rendement au lobe principal (le pourcentage de puissance détectée par le lobe principal sur celle totale) :

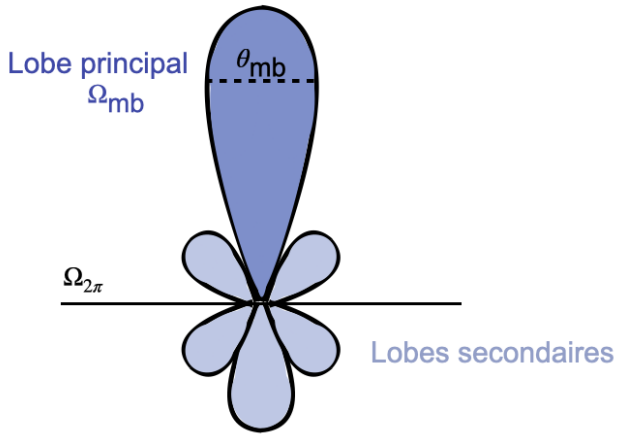


FIGURE 2.3 – Représentation des lobes primaires et secondaires.

$$B_{\text{eff}} = \frac{\Omega_{\text{mb}}}{\Omega_{2\pi} F_{\text{eff}}} = \frac{\Omega_{\text{mb}}}{\Omega_A} \tag{2.11}$$

On peut alors définir la température d'antenne en fonction de la température *main beam* :

$$T_A^\star = \frac{B_{\text{eff}}}{F_{\text{eff}}} T_{\text{mb}} \tag{2.12}$$

Et enfin, pour une source ponctuelle, nous passons du Kelvin au Jansky avec :

$$S_\nu = \frac{2k\Omega_A}{\lambda^2} T_A^\star \tag{2.13}$$

2.3 Fonctionnement d'un radiotéléscope

2.3.1 L'antenne IRAM 30m

L'Institut de Radio Astronomie Millimétrique a été fondé en 1979 par le CNRS (Centre National de la Recherche Scientifique) et le MPG (Max Planck Gesellschaft). L'Espagne rejoint la collaboration en 1990 avec l'IGN (Instituto Geográfico Nacional). Il y a deux observatoires : NOEMA (NOrthern Extended Millimeter Array) dans les Alpes françaises et le radio télescope de 30m sur la Sierra Nevada en Espagne, construit en 1985. Dans cette thèse, l'antenne de 30m a été utilisée pour des observations du maser SiO et son fonctionnement sera donc développé dans cette partie. Cette antenne observe de 73 à 350 GHz. En Fig. 2.4, nous avons une photo de l'antenne et la transmission atmosphérique sur site à 2 et 4 mm de vapeur d'eau, avec les fréquences de certaines molécules et le domaine d'observation des récepteurs.

Les antennes peuvent avoir différentes structures, présentées en Fig. 2.5. L'antenne de l'IRAM 30m est dans la configuration (c), dite de Nasmyth. Une explication plus approfondie est présentée en Sec. 2.3.5.

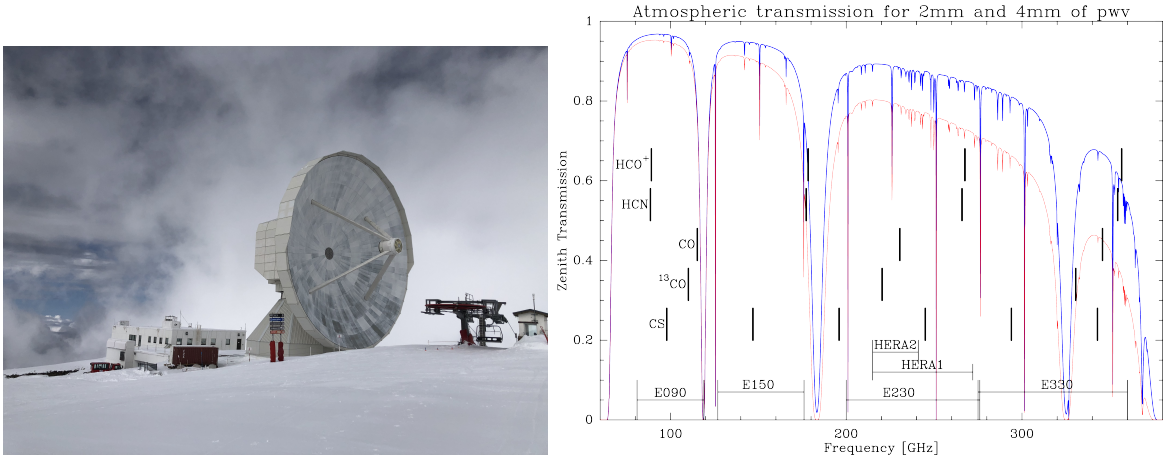


FIGURE 2.4 – **Gauche :** Antenne 30m de l'IRAM. **Droite :** Transmission Atmosphérique en radio pour le site de l'IRAM 30m. https://publicwiki.iram.es/EmirforAstronomers

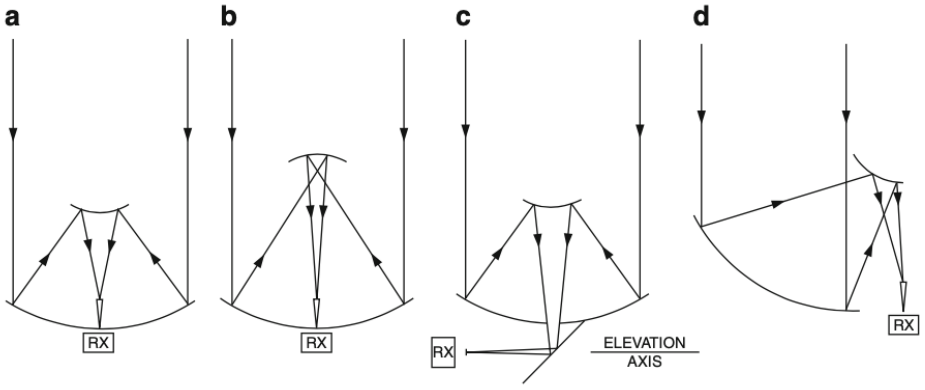


FIGURE 2.5 – Les différents types d'antenne. RX est l'emplacement du récepteur. (a) : configuration Cassegrain, (b) Gregory, (c) Nasmyth, (d) offset Cassegrain (Wilson et al. 2013).

2.3.2 Détection hétérodyne

L'IRAM 30m est doté d'un récepteur hétérodyne ; EMIR (Eight MIxer Receiver) et anciennement, Hera, et d'une caméra continuum NIKA2. Dans cette thèse, nous avons utilisé EMIR, qui sera présenté en détail ici.

Un détecteur hétérodyne est un récepteur où la fréquence du signal reçu ν_S est transposée à une fréquence plus basse pour pouvoir amplifier le signal. Un oscillateur local LO vient ajouter un fort signal monochromatique de fréquence ν_{LO} au signal reçu initialement. On va ensuite appliquer un filtre à partir d'une fréquence intermédiaire ν_{IF}. Ce traitement du signal se fait par un "mélangeur" ou "mixeur", un élément non linéaire (un schéma est en Fig 2.6 représentant les différentes fréquences). Après le mélange, le signal créé sera celui envoyé aux backends (voir Sec. 2.3.3) puis à l'ordinateur.

Le signal reçu par l'antenne s'écrit sous la forme :

$$U(t) = E\cos(2\pi\nu_S t + \phi) \tag{2.14}$$

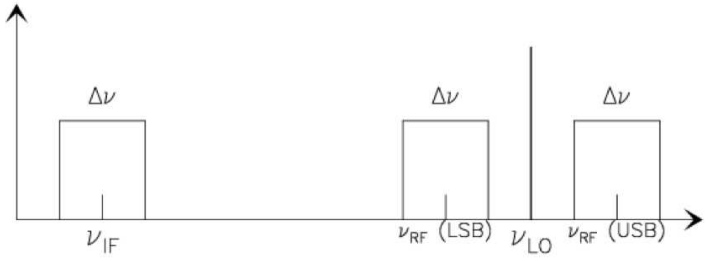


FIGURE 2.6 – Explication du mélangeur. On y voit la fréquence $\nu_{\rm IF}$, et les fréquences en sorties du mélangeur (LSB et USB) autour de $\nu_{\rm LO}$. https://web-archives.iram.fr/IS/IS2004/presentations/lucas-22nov04.pdf

t est le temps, ϕ la phase de l'onde et E son intensité. L'oscillateur local produit un signal de fréquence $\nu_{\rm LO}$, de phase $\phi_{\rm LO}$ et d'intensité Q :

$$U_{\rm LO}(t) = Q\cos(2\pi\nu_{\rm LO}t + \phi_{\rm LO}) \tag{2.15}$$

Le mélangeur non-linéaire crée un signal :

$$I(t) = a_0 + a_1(U(t) + U_{\rm LO}(t)) + a_2(U(t) + U_{\rm LO}(t))^2 + ... \tag{2.16}$$

avec a_i des constantes. En insérant un filtre à la sortie du mélangeur, nous pouvons sélectionner uniquement les termes tels que :

$$\nu_{\rm IF} - \Delta\nu/2 \leq |\nu_S - \nu_{\rm LO}| \leq \nu_{\rm IF} + \Delta\nu/2 \tag{2.17}$$

avec $\nu_{\rm IF}$ suffisamment différent de $\nu_{\rm LO}$, ce qui crée un signal

$$I(t) \propto EQ\cos(\pm(2\pi(\nu_S - \nu_{\rm LO})t + \phi - \phi_{\rm LO}) \tag{2.18}$$

La fréquence du signal en sortie est $\nu_{\rm IF} = |\nu_S - \nu_{\rm LO}|$. Ce signal est amplifiable avec deux mélanges possibles : la *Upper Side Band* USB et la *Lower Side Band* LSB, la bande latérale supérieure, et la bande latérale inférieure, que l'on retrouve sur la figure 2.6 autour de $\nu_{\rm LO}$.

2.3.3 Frontend et Backend

Le récepteur (frontend) utilisé pour les observations faites dans cette thèse est EMIR, dont les caractéristiques sont décrites dans la Tab. 2.1 pour les bandes à 3 et 1 mm.

Fréquence GHz	$F_{\rm eff}$ %	$B_{\rm eff}$ %	$A_{\rm eff}$ %	θ $''$	$S/T_A^\star$ Jy/K
86	95	81	64	28.5	5.9
230	92	59	46	10.7	7.8

TABLE 2.1 – Paramètres du récepteur EMIR à 86 GHz (SiO v=1 J=2-1) et à 230 GHz (CO J=2-1).

Ainsi, on a $T_A = \frac{1}{1.17}T_{\rm mb}$ et $S({\rm Jy}) = T_A^\star \times 5.9$ à 86 GHz.

EMIR offre 4 bandes d'observations à 3, 2, 1.3 et 0.9 mm appelées respectivement E090, E150, E230 et E330. Chacune des bandes offre deux canaux de polarisation horizontal (H) et vertical (V). Elles sont constituées des bandes USB *upper* et LSB *lower* qui font environ 8 GHz de large et sont espacées de 8 GHz. Elles sont elles-mêmes divisées en deux sous bandes de 4 GHz : *inner* et *outer* (voir Fig. 2.7).

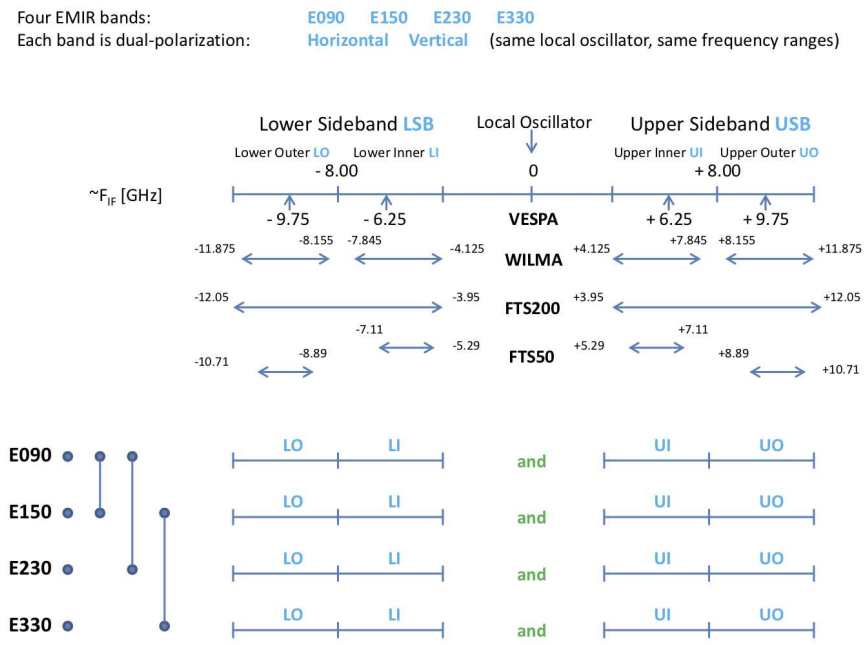


FIGURE 2.7 – Représentation des bandes d'EMIR (E090, E150, E230 et E330) avec leurs possibilités de combinaison. On retrouve également les bandes supérieure et inférieure LSB et USB et leurs sous-divisions LO, LI et UI, UO. https://publicwiki.iram.es/EmirforAstronomers

Il est possible d'utiliser deux bandes simultanément pour observer deux fréquences sur la même région du ciel : E090 et E150, E090 et E230, E150 et E330. Par exemple, dans la section 5, les bandes E090 et E230 sont utilisées pour observer le maser SiO v=1 J=2-1 et le CO J=2-1.

Après être passé par le récepteur (EMIR), le signal reçu par l'antenne est traité par les backends (illustration en Fig. 2.9). Ils servent à analyser le signal et renvoient les informations à l'ordinateur. Plusieurs backends sont utilisables pour le 30m : FTS, WILMA et VESPA.

FTS : (Fast Fourier Transform Spectrometers) est constitué de 24 modules FTS avec une résolution spectrale modulable entre 50 et 200 kHz sur une bande passante de 32 GHz.

WILMA : (The Wideband Line Multiple Autocorrelator), 18 bandes IF de 1 GHz avec une résolution spectrale entre 100 et 1100 MHz.

VESPA : (Versatile Spectrometric and Polarimetric Array) est notamment utilisé pour les observations en polarimétrie avec XPol (voir Sec. 2.3.5). C'est un autocorrélateur

de 4096 canaux séparés en 6 bandes. La séparation des différentes bandes peut induire des effets de plateforming dans les spectres observés.

En Fig. 2.8, nous pouvons voir un exemple de couverture spectrale avec les backends FTS et VESPA.

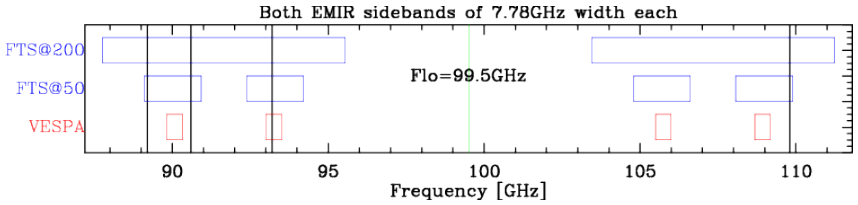


FIGURE 2.8 – Exemple de gamme de fréquence d'observation des backends FTS et VESPA. https://publicwiki.iram.es/EmirforAstronomers

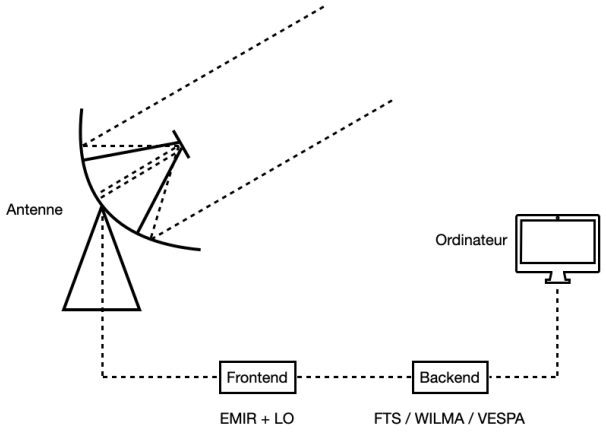


FIGURE 2.9 – Fonctionnement d'une antenne radio.

2.3.4 Procédures observationnelles

Dans cette partie, nous allons voir les différentes étapes de calibration et réglages du télescope nécessaires pour les observations.

Calibration

Pour observer, nous avons besoin de connaître la loi qui relie le nombre de photons reçus à la température. La calibration se fait avec une charge froide et une charge chaude. Le comptage sur une charge chaude à une température proche de celle du milieu environnant et le comptage sur une charge froide à une température proche de celle de l'azote liquide sont mesurés et moyennés sur les canaux du backend utilisé.

Focus

Cette étape sert de "mise au point". Cela permet d'ajuster la distance du miroir secondaire au miroir primaire. Pour ajuster le focus, il est nécessaire d'avoir une source très brillante dans le ciel. Nous utilisons une planète par exemple, un pulsar ou une autre source brillante.

Pointage
Le pointage nous permet de diriger l'antenne correctement et de pointer au mieux sur la source. Dans cette étape, on va chercher, en faisant une croix sur l'objet, le maximum d'intensité d'une source proche de celle qu'on veut observer pour avoir les mêmes conditions atmosphériques.

ON/OFF
Les observations nous donnent un spectre "ON - OFF". Le "ON" correspond au signal qui provient de la source. Le "OFF" correspond à un signal hors de la source. On soustrait ensuite le signal "OFF" au signal "ON" afin d'améliorer la ligne de base, qui est mauvaise à cause des perturbations atmosphériques et à l'instrumentation. Retirer le OFF permet de nettoyer ces bruits (il reste cependant des résidus que l'on soustrait ensuite, avec CLASS par exemple [5]). Il existe plusieurs méthodes pour récupérer le OFF :

- Changement de fréquence : le "OFF" est une observation sur la source, mais à une autre fréquence dépourvue de signal.
- Changement de position de l'antenne : on pointe l'antenne à côté de la source pour récupérer un endroit sans signal.
- Utilisation du Wobbler : plutôt que de tourner toute l'antenne, on peut incliner le second miroir pour se déplacer à côté de la source. Cette solution nécessite que la source ne soit pas trop étendue.

Pour les observations en Sec. 5, nous avons utilisé le Wobbler. Cela permet donc d'incliner le miroir secondaire de 0 à 240", avec une période typique de 2 secondes [6].

2.3.5 Observation Polarimétrique

En considérant une onde électromagnétique, on la décrit par ses composantes verticale et horizontale (deux composantes orthogonales) :

$$e_{\mathrm{H}}(z,t) = E_{\mathrm{H}}\mathrm{e}^{(j(wt-kz))} \tag{2.19}$$

$$e_{\mathrm{V}}(z,t) = E_{\mathrm{V}}\mathrm{e}^{(j(wt-kz-\delta)} \tag{2.20}$$

où δ est la différence de phase entre les deux composantes.

Les paramètres de Stokes (illustrés en Fig. 2.10) permettent de décrire la polarisation de l'onde reçue :

$$\begin{aligned} I &= \langle E_{\mathrm{H}}^2\rangle + \langle E_{\mathrm{V}}^2\rangle \\ Q &= \langle E_{\mathrm{H}}^2\rangle - \langle E_{\mathrm{V}}^2\rangle \\ U &= 2\langle E_{\mathrm{H}}E_{\mathrm{V}}\cos\delta\rangle \\ V &= 2\langle E_{\mathrm{H}}E_{\mathrm{V}}\sin\delta\rangle \end{aligned} \tag{2.21}$$

Avec ces paramètres, nous pouvons en déduire :
— la polarisation circulaire $p_{\mathrm{C}} = V/I$
— la polarisation linéaire $p_{\mathrm{L}} = \sqrt{Q^2+U^2}/I$
— l'angle de polarisation $\chi = \frac{\arctan(U/Q)}{2}$

5. CLASS : Continuum and Line Analysis Single-dish Software, https://www.iram.fr/IRAMFR/GILDAS/doc/html/class-html/class.html

6. La période peut être plus courte, nous sommes cependant contraints par la vitesse d'inclinaison du miroir. A 2 Hz, l'angle maximal est de $\pm 45''$.

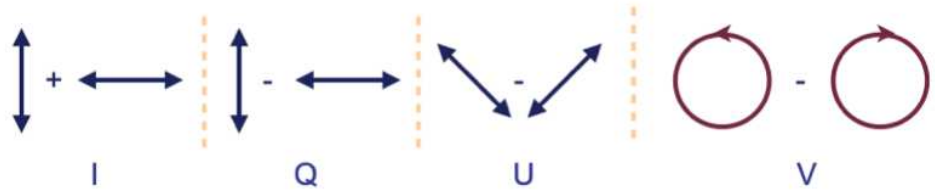


FIGURE 2.10 – Représentation des paramètres de Stokes. I l'intensité du signal, Q et U les polarisations linéaire, et V la polarisation circulaire.

Pour récupérer les deux polarisations du signal, nous utilisons XPol (Thum et al. 2008), le polarimètre utilisable avec le backend VESPA. Dans le mode polarimètrique de VESPA, il existe 3 combinaisons de résolution spectrale (kHz) et largeur de bande (MHz) res/largeur : 40/120, 80/240, et 320/480.

δ dans les équations 2.21 est l'angle dans le plan du ciel. Or, quand nous récupérons les polarisations, elles sont dans le plan de la cabine de Nasmyth. L'angle de polarisation τ mesuré dans la cabine de Nasmyth s'écrit :

$$\tau = 90^\circ + \chi + \underbrace{\epsilon + \eta}_{\delta} \tag{2.22}$$

χ est l'angle de polarisation dans le plan du ciel, ϵ est l'élévation et η l'angle parallactique. Nous pouvons facilement calculer δ et donc en déduire l'angle de polarisation dans le référentiel du ciel.

Le faisceau arrivant à l'antenne passe d'abord par EMIR avant de passer par XPol. Ce dernier est composé de plusieurs miroirs et récepteurs, tel que nous pouvons le voir en Fig. 2.11.

Les récepteurs à 3 mm A100 et B100 (sur la Fig. 2.11), situés dans la cabine Nasmyth, voient le sous-réflecteur à travers une série d'éléments optiques. Les miroirs M3, M4 et M5 amènent le faisceau entrant à la grille G3, qui réfléchit la polarisation verticale vers A100 et transmet la polarisation horizontale vers B100. Les deux interféromètres Martin-Puplett (MPI) peuvent être utilisés pour faire changer la direction de polarisation afin de la faire correspondre aux orientations des récepteurs. Lorsque le miroir M5 est retiré du faisceau ($\leftrightarrow$ sur la figure), les récepteurs voient M6, qui focalise les faisceaux pour le système de calibration, équipé des charges ambiante et froide (expliquées précédemment). La grille G5 est utilisée pour la calibration de la phase δ.

2.4 Interférométrie

2.4.1 Pourquoi faire de l'interférométrie ?

La résolution d'un télescope est de $\theta = 1.22\lambda/D$ où D est le diamètre du télescope et λ la longueur d'onde observée. Nous sommes donc contraints physiquement par ce paramètre. Des antennes de plus en plus grandes sont construites pour pouvoir observer des

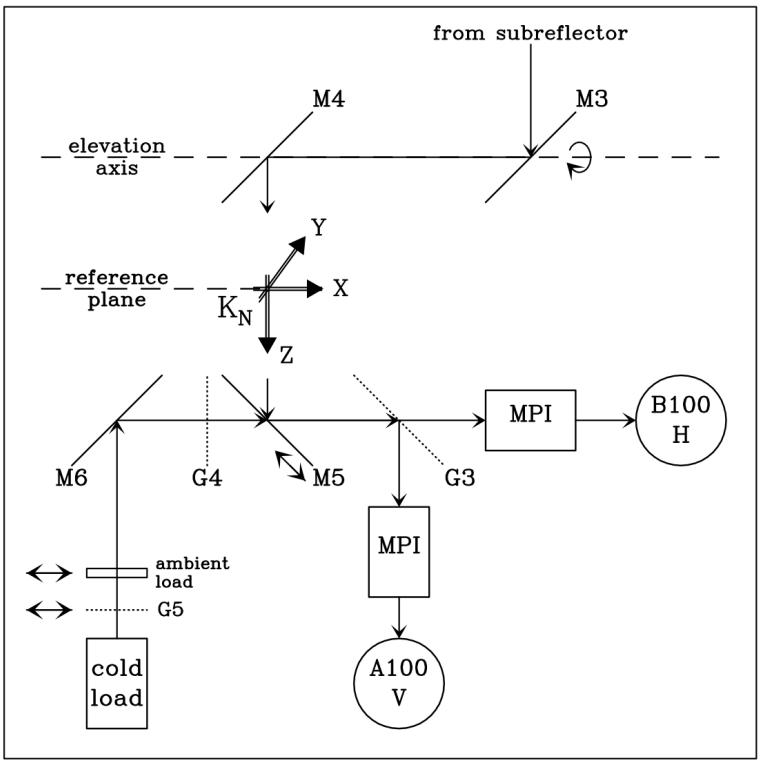


FIGURE 2.11 – Schéma des chemins optiques dans la cabine Nasmyth du télescope de 30m (Thum et al. 2008).

objets plus lointains ou avec une meilleure résolution angulaire.

Il y a de grands télescopes orientables tels que le radio télescope de Effelsberg de 100m en Allemagne. Inauguré en 1972, il observe entre 300 MHz et 90 GHz, il permet notamment l'observation de pulsars, de sites de formation d'étoiles, les jets de matières émis par les trous noirs ainsi que les sources radio dans notre galaxie. Il existe un autre télescope de 100 m aux États-Unis : le Green Bank Telescope (GBT), qui observe entre 0.1 et 116 GHz. Il permet également d'observer un grand nombre d'objets et peut observer 85% du ciel. Il est donc utilisé pour des relevés grand champ, complémentairement à d'autres télescopes.

Il existe des télescopes avec des diamètres encore plus importants, mais non-orientables. Le radio télescope d'Arecibo faisait 305m de diamètre sur l'île de Porto Rico. Il a ouvert en 1963, mais s'est cependant effondré en 2020. En 2021, le radio télescope sphérique de cinq cents mètres d'ouverture ou FAST, a eut sa première lumière en Chine. Avec un tel diamètre, elle est la plus grande antenne au monde. Bien sûr il y a aussi le grand radiotélescope de Nançay en France.

Il existe cependant un moyen plus simple en termes d'architecture et contraintes matérielles : l'interférométrie. Plutôt que de construire une seule antenne, nous pouvons disposer un champ d'antennes qui reproduit la surface d'une seule grande antenne. Ce principe est illustré en Fig. 2.12.

Pour la radio astronomie, il existe plusieurs réseaux d'antennes tels que :

— NOEMA : au plateau de Bure en France, 12 antennes de 15 m,

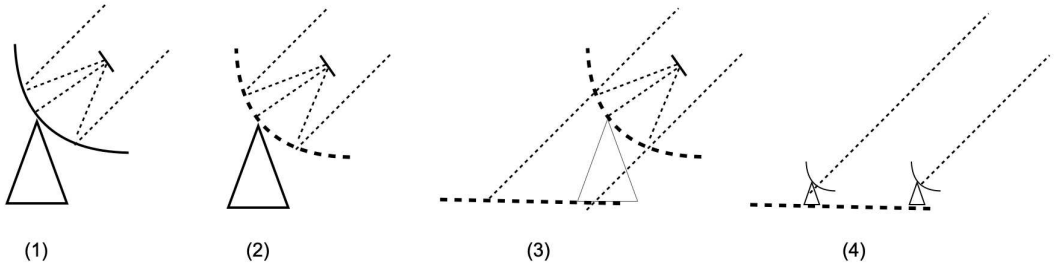


FIGURE 2.12 – Principe de l'interférométrie avec deux antennes. On peut considérer une antenne (1), et discrétiser sa surface (2). On peut imaginer les plus petits morceaux de la surface collectrice projetés au sol (3) et placer plusieurs petites antennes à la place d'une seule (4).

— VLA : au Nouveau-Mexique au États-Unis, 27 antennes de 15 m,
— ALMA : dans le désert d'Atacama au Chili, 66 antennes de 7 à 12 m.

2.4.2 Principes observationnels

Le fonctionnement est similaire à celui d'une seule antenne, cependant, il induit un délai géométrique entre les signaux reçus par les antennes dû à leur espacement, τ_g, comme illustré en Fig. 2.13.

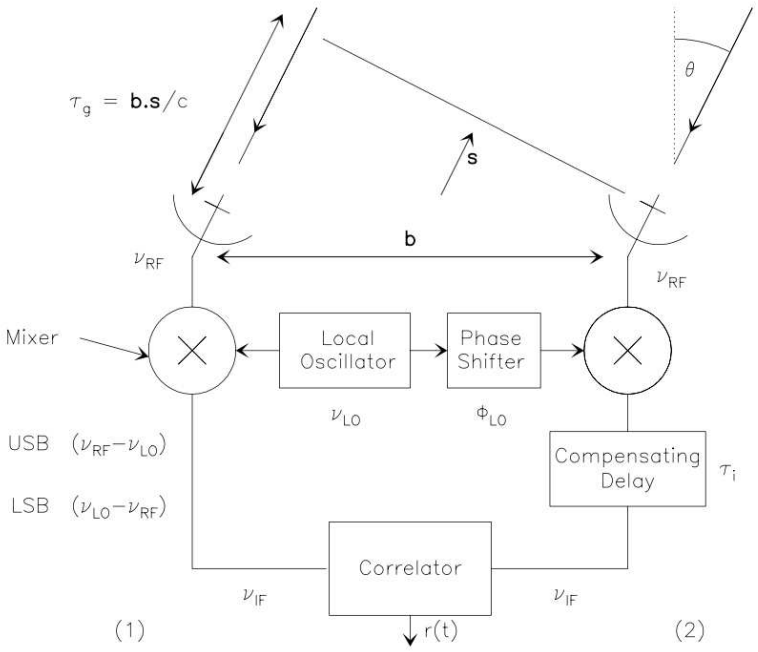


FIGURE 2.13 – Schéma explicatif du délai entre 2 antennes en réseaux et du traitement du signal. https://web-archives.iram.fr/IS/IS2004/presentations/lucas-22nov04.pdf

Un interféromètre permet de mesurer les visibilités V. Cela correspond à la transformée de Fourier de la distribution de la luminosité du ciel, le contraste entre les franges d'interférence. La visibilité est mesurée dans le plan (u, v), on récupère la visibilité complexe

V avec une phase ϕ_V :

$$V = \int I(\vec{s}) \times e^{-2i\pi(\vec{B}\vec{s}/\lambda)} d\Omega = |V| \times e^{i\phi_V} \tag{2.23}$$

où $\vec{B}$ est le vecteur de ligne de base. ϕ est la phase des franges, qui peut être perturbée par l'atmosphère.

En considérant un système à deux antennes, elles reçoivent chacune le signal :

$$r_1 = v_1 \cos(2\pi\nu(t - \tau_g)) \tag{2.24}$$
$$r_2 = v_2 \cos(2\pi\nu t) \tag{2.25}$$

où τ_g est le délai induit par le décalage des antennes (voir Fig. 2.13). Avec une onde plane incidente, la sortie $r(t)$ du corrélateur est

$$r(t) = v_1 v_2 \cos(2\pi\nu\tau_g) \tag{2.26}$$

Si on se place dans la bande supérieure USB, les changements de phase des signaux d'entrée, avant d'atteindre le corrélateur, sont les suivants (avec les délais instrumentaux τ_i et géométriques τ_g, voir Fig. 2.13) :

$$\phi_1 = 2\pi\nu\tau_g = 2\pi(\nu_{\mathrm{LO}} + \nu_{\mathrm{IF}})\tau_g \tag{2.27}$$
$$\phi_2 = 2\pi\nu_{\mathrm{IF}}\tau_i + \phi_{\mathrm{LO}} \tag{2.28}$$

En notant $\Delta\tau = \tau_g - \tau_i$ l'erreur de suivi de délais, en sortie du corrélateur nous obtenons :

$$r = |V| \cos(\phi_1 - \phi_2 - \phi_V) \tag{2.29}$$
$$r_{\mathrm{USB}} = |V| \cos(2\pi(\nu_{\mathrm{LO}}\tau_g + \nu_{\mathrm{IF}}\Delta\tau) - \phi_V - \phi_{\mathrm{LO}} \tag{2.30}$$
$$r_{\mathrm{LSB}} = |V| \cos(2\pi(\nu_{\mathrm{LO}}\tau_g - \nu_{\mathrm{IF}}\Delta\tau) - \phi_V - \phi_{\mathrm{LO}} \tag{2.31}$$

Si nous comparons notre réseau d'antennes à un télescope d'une seule antenne, notre surface observatrice est composée de plusieurs points, mais ne couvre pas toute une surface. Pour reconstituer au mieux une image, il nous faudrait un très grand nombre d'antennes. On appelle *ligne de base* le vecteur $\vec{B}$ entre deux antennes. Il y a N(N-1)/2 lignes de base avec N antennes. On appelle le plan (u, v) le plan que recouvrent toutes les lignes de base du réseau, où u et v sont les deux vecteurs de ligne de base projetés sur un plan perpendiculaire à ligne de visée de la source (voir Fig. 2.14). On veut remplir au maximum ce plan (u, v). Pour cela, on utilise la rotation de la Terre, qui permet de balayer le plan (u, v).

La distance entre les antennes va permettre d'avoir une résolution spatiale plus grande qu'avec une antenne unique. Les antennes peuvent être mises dans différentes configurations, ce qui permet d'exploiter plusieurs résolutions spatiales et donc de sonder différentes tailles de structures. Des antennes proches permettent de voir de grandes structures alors que des antennes plus éloignées vont permettre de mettre en évidence de plus petites structures avec une meilleure résolution.

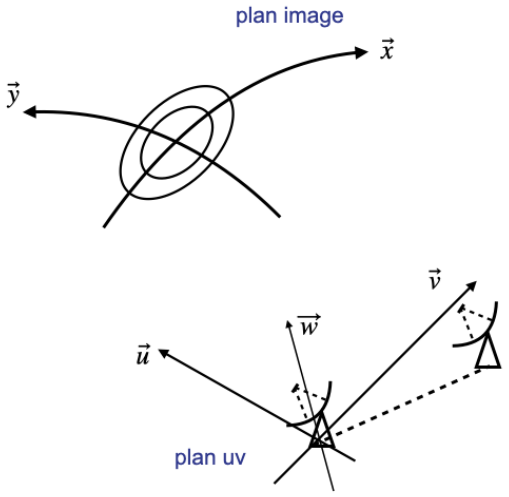


FIGURE 2.14 – Schéma du plan (u, v).

2.4.3 ALMA

Dans cette thèse, nous avons utilisé des données de l'interféromètre ALMA : Atacama Large Millimeter/submillimeter Array, situé sur le Plateau de Chajnantor dans le désert d'Atacama au Chili à 5000m d'altitude. Le réseau est constitué de 54 antennes de 12 m et 12 antennes de 7 m qui observent entre 0.32 et 3.6 mm de longueur d'onde. La distance entre les antennes peut varier de 150 mètres à 16 kilomètres, dans différentes configurations, ce qui permet d'atteindre des résolutions spatiales jusqu'à 20 mas (milliarcseconde). ALMA permet d'avoir des cubes de données avec une résolution spectrale qui varie entre 3.8 kHz et 15.6 MHz sur 10 bandes de fréquences observationnelles (voir Fig. 2.15). La bande 1 commence à 35 GHz et la bande 10 va jusqu'à 950 GHz.

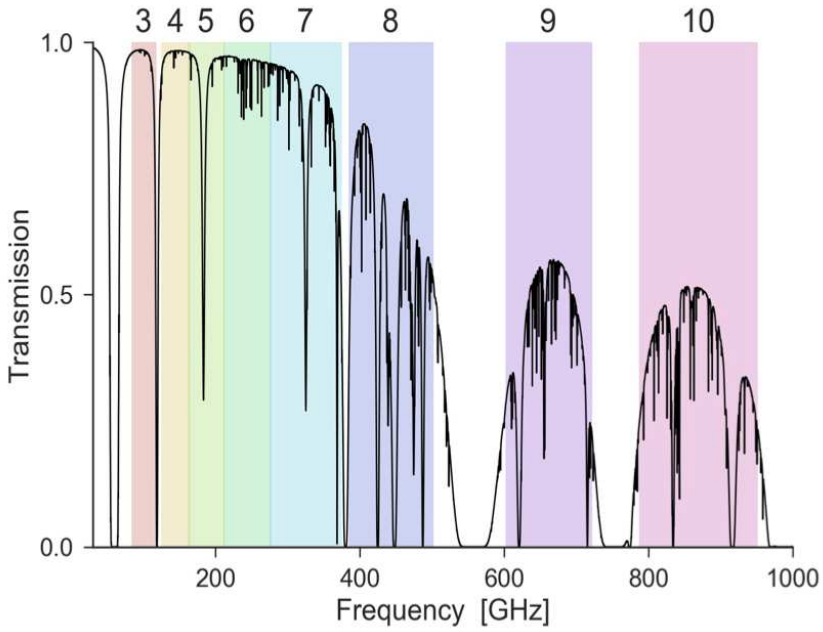


FIGURE 2.15 – Transmission Atmosphérique à ALMA et les bandes d'observations. https://science.nrao.edu/science/meetings/2017/umichigan17/ALMA_Overview.pdf

Chapitre 3

Le code MCFOST et transfert radiatif

Hope may be a dream. But she will fight to make it real

This Is How You Lose the Time War
Amal El-Mohtar et Max Gladstone

Sommaire

3.1 Présentation de MCFOST 36
3.2 Équations et Calculs en Transfert Radiatif 38
3.2.1 Introduction et définitions 38
3.2.2 Méthode Monte-Carlo et Ray-Tracing 40
3.2.3 Calcul de la température 44
3.2.3.1 Équations générales 44
3.2.3.2 Température des grains dans MCFOST 45
3.2.4 SED 46
3.2.4.1 Introduction 46
3.2.4.2 Calculs des images dans MCFOST 46
3.3 Paramètres du code MCFOST 48
3.3.1 Description des paramètres 49
3.3.2 Fichiers extérieurs et options 50
3.3.3 Sorties et observables 52

Pour contraindre des paramètres physiques et essayer de comprendre le lancement des vents dans la CSE des étoiles évoluées, nous pouvons utiliser un code de transfert radiatif pour produire des observables telles que la SED, le continuum ou les émissions moléculaires. Pour cela, dans cette thèse, nous avons utilisé le code MCFOST. Cette partie présente le code ainsi que les méthodes de calculs utilisées et les équations de transfert radiatif à résoudre pour produire les observables.

3.1 Présentation de MCFOST

MCFOST (Pinte et al. 2006, 2009) est un code de transfert radiatif, qui permet de modéliser le continuum et l'émission moléculaire. Il a été initialement écrit pour modéliser les disques protoplanétaires mais peut être étendu à l'étude des étoiles évoluées.

Il s'agit d'un code basé sur une méthode de Monte Carlo et de Ray-Tracing pour la modélisation des SED et de cartes d'émission continuum et moléculaire. Il est utilisable en 2D et en 3D. Il ne s'agit pas d'une "vraie" 3D : c'est une demi-sphère qui est modélisée et complétée par symétrie. Il a été initialement conçu pour modéliser la CSE des jeunes objets stellaires et des disques planétaires. Le code a été comparé et validé avec d'autres codes : MCMAX, RADMC, (Pinte et al. 2009) pour la modélisation de la SED et du continuum et d'autres pour les émissions atomiques et moléculaire avec TURBOspectrum et ProDiMo (Pinte et al. 2009; Garufi et al. 2014; Tessore et al. 2021). C'est un code open-source, écrit en Fortran90. Il est disponible sur GitHub [1] et la documentation est disponible en ligne [2]. Pour le traitement des données, il existe un module python *pymcfost* [3] (non utilisé dans cette thèse) qui permet de lancer le code et d'afficher les résultats. Un avantage important de ce code est qu'il est possible de le paralléliser (avec un protocole Open MP) et donc, de gagner un temps considérable de calcul. Son intérêt majeur est qu'il traite en même temps l'émission du continuum (poussières) et les émissions des raies moléculaires.

Les entrées et sorties du code seront développées en détail dans les parties suivantes. Il faut principalement en entrée un fichier de paramètres qui va permettre de caractériser la grille sur laquelle le modèle va tourner, l'étoile (ou les étoiles), son environnement, les molécules que nous voulons étudier, et les propriétés des poussières. Ce fichier nous permet de modéliser des structures de densité automatiquement. Cela est particulièrement adapté pour les disques mais ce n'est pas le cas pour les enveloppes. Pour modéliser de telles structures, nous pouvons ajouter un fichier externe, avec la densité et la vitesse du gaz, ainsi que des abondances moléculaires pour modéliser un environnement tel que nous le voulons pour les enveloppes des étoiles évoluées.

En sortie, MCFOST renvoie des fichiers FITS (Flexible Image Transport System). Il calcule la SED observée de la ou des sources stellaires et de l'environnement. Il nous permet donc d'avoir la SED par composant de l'enveloppe : la contribution de l'étoile, celle du gaz, celle des poussières (voir exemple en Fig. 3.1, gauche). Il nous renvoie également la carte de température des poussières suivant la même grille que celle définie dans le fichier de paramètres (voir exemple en Fig. 3.1, droite). Il crée les images continuum ou d'émission moléculaire/atomique 2D à certaines longueurs d'onde demandées, dans des directions d'observation, et peut aussi modéliser les émissions moléculaires dans un fichier 3D (image en 2D, possible sur plusieurs directions et une dimension en fréquence). Il peut également sortir la structure de densité des poussières et du gaz, les opacités, l'albedo, la densité de colonne et beaucoup d'autres options sont disponibles.

Comme dit précédemment, le code, même si utilisé principalement pour des disques d'objets jeunes, a été utilisé à d'autres occasions et comparé à d'autres codes, pour des objets autres que ceux initialement prévus. Nous pouvons mentionner l'utilisation pour :

- la modélisation de la CSE de naines brunes dans la région du taureau (Guieu et al. 2007).
- la modélisation d'un disque de débris (β Leo) (Churcher et al. 2011) pour reproduire la SED,

1. https://github.com/cpinte/mcfost
2. https://ipag.osug.fr/~pintec/mcfost/docs/html/index.html
3. https://github.com/cpinte/pymcfost

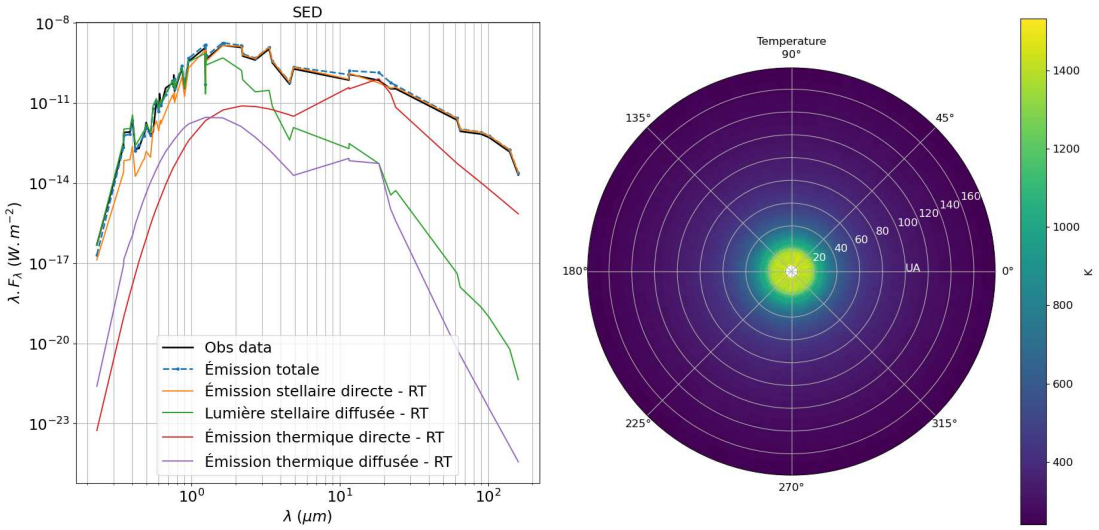


FIGURE 3.1 – Exemple de sortie de MCFOST. **Gauche :** SED modélisée avec les différentes composantes **Droite :** Carte de température.

- la modélisation de la SED d'un disque de gaz (Tilling et al. 2012),
- la modélisation de l'émissivité des poussières en comparaison avec d'autres codes : DustEM, SKIRT, DIRTY, TRADING et DART-Ray, pour des grains chauffés stochastiquement (SHGs) (Camps et al. 2015),
- la modélisation de HL TAURI, un disque autour d'une étoile jeune (Pinte et al. 2015), avec une comparaison avec des observations ALMA,
- la modélisation de la polarisation d'une galaxie spirale (Peest et al. 2017),
- la modélisation de la couche intérieure de poussières autour de Bételgeuse (Haubois et al. 2019), pour l'analyse des poussières et reproduction de la SED,
- la modélisation du continuum autour du disque de débris HD 141560 (Singh et al. 2021).

Le code tourne sur une grille spatiale qui peut être définie en coordonnées cylindriques ou sphériques, ce qui permet de modéliser facilement les disques mais aussi les enveloppes circumstellaires. Les propriétés des poussières sont définies localement et donc chaque cellule contient sa propre population de poussières. Dans le cas où il y a plusieurs types de poussière, si nous utilisons un fichier de densité, la distribution des poussières doit être la même pour toutes.

3.2 Équations et Calculs en Transfert Radiatif

3.2.1 Introduction et définitions

Ce chapitre se base sur : Dullemond (2013), Rybicki & Lightman (1991) et Taillard (2023). Le transfert radiatif décrit la propagation d'un photon dans un milieu, comment il se déplace et réagit avec la matière. L'interaction entre une onde électromagnétique et la matière se décrit par l'énergie des photons : $E = h\nu$, où $h = 6.626 \times 10^{-34}$ m^2.kg/s est la constante de Planck, et ν la fréquence. Lors de son parcours, un photon peut réagir en étant absorbé ou diffusé et ré-émis dans une autre direction. Ces phénomènes font varier

l'énergie du système. Dans cette partie, nous aurons besoin de définir plusieurs grandeurs, en commençant par la luminosité totale L, l'énergie totale rayonnée par un objet par unité de temps qui correspond à la somme des luminosités monochromatiques L_ν :

$$L = \int_0^\infty L_\nu d\nu \tag{3.1}$$

On peut la définir avec le flux F, comme l'énergie reçue sur une surface dA :

$$L = \int F dA \tag{3.2}$$

On définit également la densité de flux F_ν qui est l'énergie monochromatique intégrée sur l'angle solide Ω d'une source, par unité de surface dA, par unité de temps et par unité de fréquence :

$$F_\nu = \int_\Omega \frac{dE_\nu}{dA\ dt\ d\nu} = \int_\Omega I_\nu \cos(\theta) d\omega \tag{3.3}$$

Ceci nous permet d'introduire l'intensité spécifique I_ν. Il s'agit de l'intensité du faisceau, transportant l'énergie dE_ν dans une direction, à travers une surface dA perpendiculaire à la direction de propagation du faisceau, provenant d'un angle solide $d\omega$, pendant un temps dt, autour d'une bande de fréquence $d\nu$ à une fréquence spécifique ν. Cela est représenté en Fig. 2.2, où θ est l'angle d'incidence du faisceau. Ainsi l'énergie du rayonnement s'écrit :

$$dE_\nu = I_\nu \cos(\theta)\ dA\ dt\ d\nu\ d\omega \tag{3.4}$$

On définit aussi l'intensité spécifique totale, intégrée sur les fréquences ou les longueurs d'ondes :

$$I = \int_0^\infty I_\nu d\nu = \int_0^\infty I_\lambda d\lambda \tag{3.5}$$

Nous définissons également le moment zéro du champ de rayonnement, que l'on appelle l'intensité moyenne J_ν. C'est la moyenne angulaire de I_ν. Pour un champ de rayonnement homogène et isotrope, on a $J_\nu = I_\nu$.

$$J_\nu = \frac{1}{4\pi} \int I_\nu d\omega \tag{3.6}$$

Et la pression de radiation s'écrit :

$$p_\nu = \frac{1}{c} \int I_\nu \cos(\theta) d\omega \tag{3.7}$$

Pour décrire la propagation du faisceau dans le milieu, nous avons besoin de l'équation de transfert. Elle décrit la propagation du faisceau à travers une surface $ds = dA\cos(\theta)$.

$$\frac{dI_\nu}{ds} = j_\nu - \alpha_\nu I_\nu \tag{3.8}$$

Le premier terme j_ν correspond au terme d'émission et $\alpha_\nu I_\nu$ à l'extinction. j_ν est le coefficient d'émission local, qui correspond à la quantité d'énergie émise à la fréquence ν. On la définit avec :

$$dE_\nu = j_\nu dV\ dt\ d\nu\ d\omega \tag{3.9}$$

avec dE_ν l'énergie ajoutée sous forme de photons à un faisceau d'angle solide $d\omega$, sur la largeur de bande $d\nu$, pendant un temps dt, dans le volume dV. α_ν est le coefficient d'extinction local, ce qui correspond à l'énergie absorbée à une fréquence $d\nu$. Sur une couche d'épaisseur ds, le taux d'absorption à travers un milieu absorbant correspond à l'épaisseur optique τ_ν :

$$\tau_\nu = \int \alpha_\nu ds \tag{3.10}$$

Si $\tau_\nu > 1$, on dit alors que le milieu est optiquement épais, la plupart des photons sont absorbés. Le rapport entre le coefficient d'émission j_ν et le coefficient d'extinction α_ν est la fonction source :

$$S_\nu = \frac{j_\nu}{\alpha_\nu} \tag{3.11}$$

L'équation de transport (Eq. 3.8) peut alors s'écrire :

$$\frac{dI_\nu}{\alpha_\nu ds} = \frac{j_\nu}{\alpha_\nu} - I_\nu \tag{3.12}$$

Et avec la fonction source, on obtient :

$$\frac{dI_\nu}{d\tau} = S_\nu - I_\nu \tag{3.13}$$

En considérant les conditions initiales, $\tau_\nu = 0$ et $I_\nu = I_\nu(0)$, l'intensité avant que les photons traversent le milieu absorbant, nous résolvons l'équation de transport. La solution s'écrit :

$$I_\nu(\tau_\nu) = I_\nu(0)e^{-\tau_\nu} + \int_0^{\tau_\nu} S_\nu e^{-(\tau_\nu - \tau')} d\tau' \tag{3.14}$$

avec $\tau_\nu - \tau'$ la différence d'épaisseur optique entre le point d'émission et le point calculé.

3.2.2 Méthode Monte-Carlo et Ray-Tracing

Comme dit précédemment, le transfert radiatif étudie le parcours et le rayonnement d'un photon émis par la source. Il parcourt une certaine distance et il interagit avec la matière par différents phénomènes pendant ce trajet. Il faut donc déterminer depuis la source, la direction de l'émission et la distance parcourue par le photon avant un évènement. La méthode Monte-Carlo consiste à suivre l'évolution d'un paquet de photons qui se propage stochastiquement, partant de l'étoile, à travers l'enveloppe suivant les équations du transfert radiatif. Les quantités observables produites telles que la SED et les images à une certaine longueur d'onde sont calculées à partir des sorties en intensité en intégrant la fonction source estimée avec la méthode Monte-Carlo. Cette partie est basée sur Wood et al. (2013).

Cette méthode nous permet de calculer la distance L parcourue par un paquet de photons entre deux interactions. Lorsqu'une particule est éclairée par un faisceau de lumière aux caractéristiques spécifiques, la quantité et la distribution angulaire de la lumière diffusée par la particule, ainsi que la quantité absorbée, dépendent de la nature de la particule, c'est-à-dire de sa forme, de sa taille et des matériaux qui la composent. Les photons interagissent alors selon les sections efficaces de diffusion et d'absorption des particules

du milieu. Les sections efficaces correspondent à l'aire effective qu'un grain présente pour interagir avec un photon ou une particule. Une section efficace, σ (en m^2), représente une mesure de la probabilité qu'une particule interagisse avec une autre, ce qui entraine une perte d'énergie soit par diffusion, soit par absorption.

Nous partons d'une énergie totale donnée (celle de la source) et il faut la répartir entre les paquets de photons. Chaque paquet est émis dans une direction et a une énergie liée à l'intensité spécifique I_ν (exprimée en $W/m^2/Hz$). L'intensité spécifique du champ de rayonnement est définie comme l'énergie rayonnante dE_ν, traversant une surface dA, suivant un angle θ (comme montré en Fig. 2.2 et en Eq. 3.4), dans un angle solide $d\Omega$, dans une gamme de fréquences $d\nu$ dans le temps dt. En considérant un milieu homogène avec des particules qui soit diffusent soit absorbent la lumière, de densité n (m^{-3}), le différentiel d'intensité sur une longueur dl (m) est :

$$dI_\nu = -I_\nu n\sigma dl \tag{3.15}$$

Ce qui nous donne la relation entre l'intensité entrante et sortante :

$$I_\nu(l) = I_\nu(0)e^{-n\sigma l} \tag{3.16}$$

La fraction de photons diffusés/absorbés par unité de longueur est donc $n\sigma$, le coefficient d'absorption volumique. Cela nous permet de définir l'opacité κ :

$$n\sigma = \rho\kappa \tag{3.17}$$

avec ρ la densité de masse de la particule. Il en découle la distance moyenne entre deux interactions pour un photon $1/n\sigma$. On appelle ça le *libre parcours moyen*. La probabilité qu'un photon interagisse (soit par diffusion soit par absorption par le milieu) sur une longueur dl est donc $n\sigma dl$. La probabilité opposée, qu'il n'arrive rien au photon sur dl est donc $1 - n\sigma dl$. En considérant une longueur totale parcourue L, on cherche à connaître la probabilité qu'il parcourt toute cette longueur sans que le photo nn'interagisse. Pour cela on divise L en N plus petites sections de même longueur. Cette probabilité est donc de :

$$P(L) = (1 - n\sigma L/N)^N = e^{-n\sigma L} = e^{-\tau} \tag{3.18}$$

Ce qui nous amène à la définition de l'épaisseur optique $\tau = n\sigma L$, que l'on peut aussi définir comme :

$$\tau = \int_0^L n\sigma dl \tag{3.19}$$

Après avoir parcouru la distance L, il reste à savoir de quelle manière le photon interagit. Il peut donc soit être diffusé, soit absorbé. Cela est déterminé par l'albédo. L'albédo est la probabilité que le photon soit diffusé :

$$A = \frac{n_d\sigma_d}{n_d\sigma_d + n_a\sigma_a} \tag{3.20}$$

avec $n_{d/a}$ la densité des particules diffusées et absorbées et $\sigma_{d/a}$ leur section efficace.

La distance L expliquée précédemment est calculée en intégrant l'épaisseur optique jusqu'à ce que l'équation suivante soit vérifiée :

$$\tau_\lambda = \int_0^L \kappa^{\text{ext}}(\lambda, r)\rho(\vec{r})dl \tag{3.21}$$

$\vec{r}$ correspond à la position, est un vecteur à 2 ou 3 dimensions selon la grille modélisée. κ^{ext} est l'opacité d'extinction donnée par :

$$\kappa^{\text{ext/sca}}(\lambda, \vec{r}) = \int_{a_{\min}}^{a_{\max}} \pi a^2 Q_{\text{ext/sca}}(\lambda, a) f(a, \vec{r}) da \tag{3.22}$$

avec $Q_{\text{ext/sca}}$ les coefficients d'extinction ou de diffusion [4], a la taille des grains et $f(a, \vec{r})$ les distributions locales [5] de taille et de composition. Dans la théorie de Mie, nous pouvons écrire les sections efficaces d'absorption et de diffusion. La section d'absorption est la section transversale de l'onde plane incidente dont l'énergie est égale à l'énergie absorbée par une sphère, une particule. Les sections efficaces d'absorption et de diffusion sont liées aux coefficients correspondants de la section efficace géométrique de la particule. Ainsi,

$$\sigma_{\text{abs}} = Q_{\text{abs}} A_s = Q_{\text{abs}} \pi a^2 \tag{3.23}$$

avec $Q_{\text{abs}} = Q_{\text{ext}} - Q_{\text{sca}}$ et A_s la surface de la particule absorbante/diffusante et a son rayon. Les coefficients $Q_{\text{ext/sca/abs}}$ s'écrivent à partir de l'indice de réfraction complexe $m = n + ik$ (Kataoka et al. 2014; Bohren & Huffman 2008). En écrivant $x = \frac{2\pi a}{\lambda}$, on a :

$$Q_{\text{ext}} = 4x\text{Im}\left\{\frac{m^2-1}{m^2+2}\left[1 + \frac{x^5}{15}\left(\frac{m^2+1}{m^2+2}\right)\frac{m^4+27m^2+38}{2m^2+3}\right]\right\} + \frac{8}{3}x^4\text{Re}\left\{\left(\frac{m^2-1}{m^2+2}\right)^2\right\} \tag{3.24}$$

$$Q_{\text{sca}} = \frac{8}{3}x^4\left(\frac{m^2-1}{m^2+2}\right)^2 \tag{3.25}$$

En considérant $|m|x << 1$ (Bohren & Huffman 2008), dans l'équation 3.24, le terme $(m^2 - 1/m^2 + 2)$ entre crochets est de l'ordre de l'unité. Q_{abs} s'écrit donc :

$$Q_{\text{abs}} = 4x\text{Im}\left\{\frac{m^2-1}{m^2+2}\right\}\left[1 + \frac{4x^3}{3}\text{Im}\left\{\frac{m^2-1}{m^2+2}\right\}\right] \tag{3.26}$$

avec x suffisamment petit, $\frac{4x^3}{3}\text{Im}\left\{\frac{m^2-1}{m^2+2}\right\} << 1$, et finalement :

$$Q_{\text{abs}} = 4x\text{Im}\left\{\frac{m^2-1}{m^2+2}\right\} \tag{3.27}$$

Méthode de diffusion :

À l'équation 3.21, nous déterminons la distance L entre deux interactions en intégrant l'opacité optique. Quand la position $\vec{r}$ est déterminée, la probabilité que ce soit de la diffusion plutôt qu'une absorption est estimée avec l'albédo local à la position $\vec{r}$:

4. La diffusion correspond au terme *scattering*, et donc sera abrégée par *sca* dans les indices des équations.

5. le terme "local" fait référence aux propriétés d'une seule cellule.

$$P_{\rm sca} = A(\lambda, \vec{r}) = \frac{\kappa^{\rm sca}}{\kappa^{\rm ext}} = \frac{\int_{a_{\rm min}}^{a_{\rm max}} \pi a^2 Q_{\rm sca}(\lambda, a) f(a, \vec{r}) da}{\int_{a_{\rm min}}^{a_{\rm max}} \pi a^2 Q_{\rm ext}(\lambda, a) f(a, \vec{r}) da} \tag{3.28}$$

Pourquoi travailler avec des paquets de photons ?

Une étoile comme le Soleil produit 10^{45} photons par seconde, un nombre beaucoup trop important pour une simulation numérique avec des temps de calculs raisonnables. À la place, on va travailler numériquement avec des paquets de photons. Le nombre de paquets utilisé est un paramètre de MCFOST et résulte d'un compromis entre temps de calcul et précision. Tout au long de la thèse, nous avons choisi de mettre 10^7 paquets de photons dans les simulations [6], qui après des tests, nous donne des temps de calcul qui restent raisonnables, tout en ayant une résolution acceptable dans la carte de température calculée.

Chaque paquet va représenter une certaine quantité d'énergie par seconde. Si on reprend notre exemple du Soleil, avec 10^7 paquets, cela signifie que chaque paquet aura une énergie de $10^{-7} L_\odot$.

Méthode de Ray-Tracing :

En plus d'une méthode Monte Carlo, MCFOST utilise aussi une méthode de Ray-Tracing pour le calcul de la SED et des images. Lorsque l'intensité spécifique est connue en chaque point du modèle, cette méthode utilise une solution formelle des équations de transfert radiatif qui sont utilisées pour produire les observables. Il s'agit de calculer les variations de l'intensité spécifique d'un faisceau sur une direction. On suit les trajectoires de rayons de lumière à travers un milieu en prenant en compte les interactions qu'il va subir. Les rayons partent d'une source de rayonnement et se propagent en ligne droite jusqu'à ce qu'ils rencontrent un élément et vont interagir avec en étant absorbés, diffusés ou ré-émis. Les changements en intensité de chaque interaction sont pris en compte pour déterminer la distribution finale de l'intensité (Steinacker et al. 2013). Le ray-tracing peut être utilisé en combinaison avec des méthodes de Monte Carlo pour produire des SED et des cartes d'émission. Lorsque la diffusion est isotrope, seule l'intensité spécifique moyenne et la structure de température sont nécessaires pour calculer la fonction source. Ces deux quantités peuvent être facilement estimées à l'aide d'une méthode de Monte Carlo (Lucy 1999, et voir sous-partie suivante).

Après un premier calcul de Monte Carlo de l'intensité moyenne totale et de la structure de la température (calcul détaillé après), les SED et des cartes peuvent être produites en intégrant la fonction source sur les rayons provenant de l'observateur. Dans ce cas, la méthode de Monte Carlo n'est utilisée que pour estimer l'intensité spécifique (et pour la température) mais le ray-tracing est utilisé pour les SED/images.

6. Des tests ont été effectués entre 10^5 et 10^9 paquets de photons. Si on prend 10^5 paquets, nous allons avoir une moins bonne résolution et plus d'artefacts (des points plus chauds ou plus froids côte-à-côte) dans les cartes de température et dans les images, mais les temps de calcul seront raccourcis. À l'inverse, si nous en prenons 10^9, la carte de température sera "lissée" mais les temps de calculs extrêmement rallongés.

3.2.3 Calcul de la température

3.2.3.1 Équations générales

Dans MCFOST, nous serons amenés à calculer la température des grains dans l'enveloppe pour calculer l'émission continuum. Pour cela, nous supposons l'équilibre radiatif, c'est-à-dire que les grains absorbent autant d'énergie que ce qu'ils émettent. Ils peuvent être chauffés par l'absorption de radiations stellaires ou par collision avec d'autres particules du milieu. Ici, nous considérerons uniquement le chauffage radiatif. Pour le refroidissement, il s'agit d'émission infrarouge par les grains (Dullemond 2013).

Pour calculer le taux de refroidissement Γ_-, nous partons de l'énergie émise par le grain E_ν :

$$dE_\nu = j_\nu \; dm \; d\omega \; d\nu \; dt \tag{3.29}$$

avec dm l'élément de masse, $d\nu$ la fréquence, $d\omega$ l'angle solide et dt le temps. j_ν est le coefficient d'énergie monochromatique qui est défini comme une constante dans l'équation 3.9. On réécrit l'énergie émise dans l'angle solide Ω :

$$dE_\nu = j_\nu \; dm \; d\nu \; dt \int_\Omega d\omega \tag{3.30}$$

En considérant que le milieu est isotrope, nous avons $\int_\Omega dw = 4\pi$. De plus, en utilisant la loi de Kirchoff, le coefficient d'émission local s'écrit $j_\nu = \kappa_\nu^{\rm abs} B_\nu(T)$, où $\kappa_\nu^{\rm abs}$ est le coefficient d'absorption du grain, tel que défini dans l'équation 3.22 pour $\kappa_\nu^{\rm ext/sca}$, et $B_\nu(T_{\rm grain})$ la loi de Planck à la température des grains $T_{\rm grain}$. On obtient donc :

$$dE_\nu = 4\pi \; \kappa_\nu^{\rm abs} B_\nu(T_{\rm grain}) \; dm \; d\nu \; dt \tag{3.31}$$

En prenant l'énergie émise par unité de masse dm par unité de temps dt, on a :

$$d\Gamma_- = \frac{dE_\nu}{dm \; dt} = 4\pi\kappa_\nu^{\rm abs} \; B_\nu(T_{\rm grain}) \; d\nu \tag{3.32}$$

Et alors le taux de refroidissement s'écrit :

$$\Gamma_- = 4\pi \int_0^\infty d\nu \; \kappa_\nu^{\rm abs} \; B_\nu(T_{\rm grain}) \tag{3.33}$$

Nous pouvons également calculer le taux de chauffage Γ_+ avec l'énergie absorbée par les grains. Celle-ci s'écrit :

$$dE_\nu = \kappa_\nu^{\rm abs} I_\nu \cos(\theta) \; dm \; d\nu \; dt \; d\Omega \tag{3.34}$$

En exprimant le flux incident $F_\nu^\star = \int_\Omega I_\nu \cos(\theta) d\omega$ (noté $F_\nu^\star$ car la source de rayonnement des grains dans notre cas est une source stellaire et donc la totalité du flux provient de l'étoile), l'énergie absorbée dans l'angle solide Ω s'écrit :

$$dE_\nu = \kappa_\nu^{\rm abs} F_\nu^\star dm \; d\nu \; dt \tag{3.35}$$

Comme pour l'énergie émise, on calcule l'énergie absorbée par unité de masse et de temps et on obtient :

$$d\Gamma_+ = \frac{dE\nu}{dm \; dt} = \kappa_\nu^{\rm abs} F_\nu^\star d\nu \tag{3.36}$$

Nous pouvons aussi exprimer $F_\nu^\star$ avec l'intensité moyenne, $F_\nu^\star = 4\pi J_\nu$ et ainsi nous écrivons le taux de chauffage :

$$\Gamma_+ = 4\pi \int_0^\infty d\nu \; \kappa_\nu^{\rm abs} J_\nu \tag{3.37}$$

L'équilibre radiatif s'écrit $\Gamma_- = \Gamma_+$, c'est-à-dire, qu'il y a autant d'énergie apportée au système que ce qu'il en est perdue. Ceci s'écrit donc :

$$4\pi \int_0^\infty \kappa_\nu^{\rm abs} B_\nu(T_{\rm grain}) \; d\nu = 4\pi \int_0^\infty d\nu \; \kappa_\nu^{\rm abs} J_\nu \tag{3.38}$$

3.2.3.2 Température des grains dans MCFOST

Le calcul de la température des grains dans MCFOST se base sur l'équilibre radiatif montré précédemment. Selon Lucy (1999) et Pinte et al. (2006), on suit un paquet de photons γ, de longueur d'onde λ, passant à travers une cellule en ayant parcouru la distance δl_γ calculée. On exprime l'intensité moyenne de la cellule :

$$J_\nu = \frac{1}{4\pi V_i} \sum_\gamma \epsilon \Delta l_\gamma \tag{3.39}$$

où V_i est le volume de la cellule, et ϵ la luminosité individuelle du paquet, Δl_γ la distance parcourue par le paquet dans la cellule. On peut exprimer ϵ en fonction de la luminosité de l'étoile $\epsilon = L_\star / N$ avec N le nombre de paquets de photons. Cela nous donne pour l'intensité spécifique :

$$J_\nu = \frac{1}{4\pi V_i} \sum_\gamma \frac{L_\star}{N} \Delta l_\gamma = \frac{L_\star}{4\pi V_i N} \sum_\gamma \Delta l_\gamma \tag{3.40}$$

On peut alors réécrire l'équation 3.38 :

$$\int_0^\infty \kappa_\nu^{\rm abs} B_\nu(T_{\rm grain}) \; d\nu = \frac{1}{4\pi V_i N} \int_0^\infty L_\star \kappa_\nu^{\rm abs}(\nu) d\nu \sum_\gamma \Delta l_\gamma \tag{3.41}$$

En considérant l'étoile comme un corps noir, on a $L_\star = 4\pi R_\star^2 B_\nu(T_\star)$

$$\int_0^\infty \kappa_\nu^{\rm abs} B_\nu(T_{\rm grain}) \; d\nu = \frac{4\pi R_\star^2}{4\pi V_i N} \int_0^\infty B_\nu(T_\star) \kappa_\nu^{\rm abs}(\nu) d\nu \sum_\gamma \Delta l_\gamma \tag{3.42}$$

Et en introduisant l'opacité moyenne de Planck κ_P :

$$\kappa_P = \frac{\pi}{\sigma T^4} \int_0^\infty \kappa_\nu^{\rm abs} B_\nu(T) d\nu \tag{3.43}$$

Donc,

$$\int_0^\infty B_\nu(T_\star) \kappa_\nu^{\rm abs}(\nu) d\nu = \frac{\sigma T^4 \kappa_P}{\pi} \tag{3.44}$$

Et alors, nous pouvons réécrire dans l'équation 3.42, :

$$\int_0^\infty \kappa_\nu^{\rm abs} B_\nu(T_{\rm grain}) \; d\nu = (\sigma T^4 \kappa_P / \pi) \; \frac{R_\star^2}{V_i N} \sum_\gamma \Delta l_\gamma \tag{3.45}$$

Le terme $\frac{R_\star^2}{V_i N} \sum_\gamma \Delta l_\gamma$ se simplifie (Lucy 1999; Niccolini et al. 2003; Pinte et al. 2006). Pour MCFOST, cela revient à résoudre :

$$\int_0^\infty \kappa_\nu^{\rm abs} B_\nu(T_{\rm grain})\ d\nu = \sigma T^4 \kappa_P / \pi \tag{3.46}$$

Résoudre cette équation pour trouver $T_{\rm grain}$ demande un temps de calcul très long. Pour la résoudre, le code échantillone (en logarithme) $N_T = 1000$ valeurs de température, de $1K$ à la température de sublimation pour trouver une gamme de température, et résout ensuite l'équation dans cette gamme.

3.2.4 SED

3.2.4.1 Introduction

Une distribution spectrale de l'énergie (*spectral energy distribution SED*) représente l'énergie émise par une étoile (ou une source lumineuse) en fonction de la longueur d'onde/de la fréquence. Les SED des étoiles peuvent être approximées par un ou plusieurs corps noirs. C'est un objet "idéal" qui absorbe toute la lumière qu'il reçoit. On l'écrit avec la loi de Planck :

$$B_\nu(T) = \frac{2h\nu}{c^2} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \tag{3.47}$$

en W.m^{-2}.sr^{-1}.Hz^{-1} qui s'exprime ici en fonction de la fréquence avec $h = 6.62607015 \times 10^{-34}$ J.s la constante de Planck, c la vitesse de la lumière et $k = 1.380649 \times 10^{-23}$ J/K la constante de Boltzmann. Nous pouvons aussi l'écrire en fonction de la longueur d'onde :

$$B_\lambda(T) = \frac{2hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{hc}{kT\lambda}} - 1} \tag{3.48}$$

en W.m^{-3}.sr^{-1}. En Figure 3.2, nous voyons la fonction de Planck pour des corps à différentes températures. Nous retrouvons notamment la courbe pour le Soleil à 5770 K et pour une étoile AGB autour de 3000 K.

Le pic de ces courbes est calculable avec la loi de déplacement de Wien, qui nous permet de remonter à la température effective du corps :

$$\lambda_{\rm max} T = 2.897 \times 10^{-3} \tag{3.49}$$

où $\lambda_{\rm max}$ est en mètre. On peut également à partir de la loi de Planck retrouver la loi de Stephan-Boltzmann qui nous donne la température des étoiles en les approximant par un corps noir :

$$L = 4\pi R^2 \sigma T^4 \tag{3.50}$$

avec $\sigma \sim 5.670 \times 10^{-8}$J.s^{-1}.m^{-2}.K^{-4} la constante de Stephan-Bolztmann.

3.2.4.2 Calculs des images dans MCFOST

La méthode de calcul expliquée ici se base sur Pinte et al. (2006). Pour calculer la SED, MCFOST utilise différents échantillonnages du champ de rayonnement, c'est-à-dire différentes stratégies pour définir l'énergie d'un paquet de photons. L'énergie d'un paquet, et donc le nombre de photons qu'il contient, est choisie et optimisée en fonction

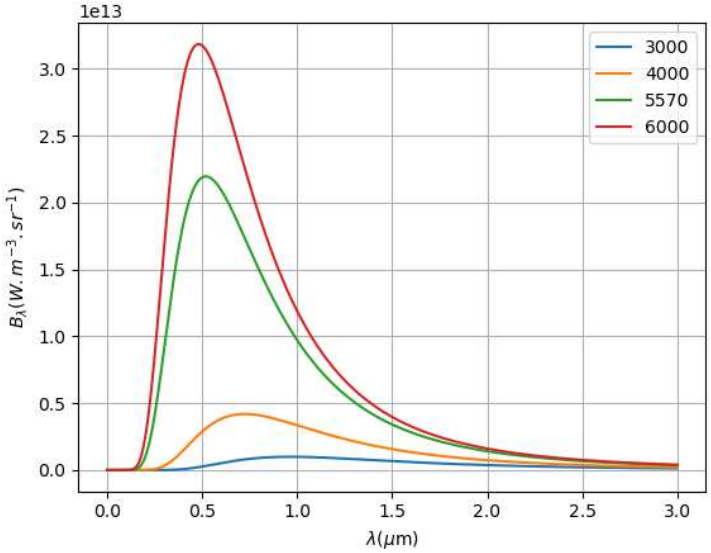


FIGURE 3.2 – Loi de Planck en fonction de la longueur d'onde pour des corps à différentes températures en K.

des objectifs de calcul, qui va dépendre de l'équilibre entre le temps de calcul disponible et la précision voulue. Le calcul de la SED nécessite de calculer la température, tel que c'est expliqué précédemment. Les paquets de photons sont générés et calculés un par un au niveau de la photosphère de l'étoile et se propagent jusqu'à ce qu'ils sortent de la grille de calcul. Si le paquet de photons est diffusé, le vecteur de propagation d'un paquet est modifié, mais pas sa longueur d'onde. Quand il est absorbé, le paquet, s'il est ré-émis ensuite, l'est de manière isotrope, mais à une longueur d'onde différente calculée en fonction de la température de la cellule dans laquelle s'est passée l'interaction. La température est alors corrigée selon la méthode décrite dans Bjorkman & Wood (2001) [7]. Tous les paquets ont ici la même luminosité :

$$\epsilon = L_\star / N_{\gamma,\text{step 1}} \tag{3.51}$$

avec $N_{\gamma,\text{step, 1}}$ le nombre de paquet de photons générés à cette étape pour le calcul de la température. A la fin de cette étape, on réutilise la méthode d'intensité moyenne par Lucy (1999) en Eq. 3.46.

La prochaine étape part de cette nouvelle grille de température calculée. Dans cette étape, les paquets de photons seront toujours dispersés et non absorbés. $N_{\gamma,\text{step 2}}$ paquets sont générés. A chaque interaction, l'intensité est pondérée par la probabilité de diffusion du paquet. Cela permet de prendre en compte l'énergie qui aurait été perdue lors d'une absorption. Ainsi, tous les photons qui sortent de la grille contribuent à la SED. Afin d'éviter de générer des paquets de photons très épais optiquement qui ne pourraient s'échapper de l'enveloppe sans une quantité immense d'énergie, une "zone sombre" est définie pour chaque longueur d'onde. Cette zone sombre comprend toutes les cellules

7. Comme on utilise une méthode Monte Carlo, les paquets de photons sont suivis individuellement et donc nous pouvons facilement déterminer où leur énergie est absorbée. Lorsque le paquet est absorbé, il chauffe une cellule et augmente sa température. Pour rester dans l'équilibre radiatif, le paquet absorbé est immédiatement ré-émis. Pour corriger la température de la cellule, la fréquence du paquet ré-émis est choisie de manière à corriger la température du spectre précédemment émis par la cellule.

dont la profondeur optique est d'au moins $\tau_\lambda = 30$ dans toutes les directions, ce qui empêcherait les photons de sortir de la grille[8]. Aucun paquet de photons n'est émis de cette zone. On donne alors un poids $w_i(\lambda) = 0$ à la cellule en question pour avoir une probabilité d'émission de zéro. Un poids $w_i(\lambda) = 1$ est attribué aux cellules situées au-dessus de la limite de la zone sombre. Les paquets qui entreraient dans cette zone sombre sont supprimés, ayant une chance nulle d'en sortir. Des paquets à une longueur d'onde λ sont émis aléatoirement depuis l'étoile et par l'enveloppe. La probabilité qu'un paquet soit émis par l'étoile est

$$P_\star = \frac{L_\star(\lambda)}{L_\star(\lambda) + \sum_i w_i(\lambda) L_i(\lambda)} \tag{3.52}$$

et la probabilité qu'il soit émis par l'enveloppe, par une cellule i est :

$$P_i = \frac{w_i(\lambda) L_i(\lambda)}{L_\star(\lambda) + \sum_i w_i(\lambda) L_i(\lambda)} \tag{3.53}$$

avec $L_\star(\lambda) = 4\pi^2 R_\star^2 B_\lambda(T_\star)$ et $L_i(\lambda) = 4\pi\kappa_i^{\rm abs} B_\lambda(T_i) \int_{V_i} \rho(r) dV$, et V_i le volume de la cellule et ρ la densité de masse.

La luminosité des paquets est déterminée par l'énergie totale de l'étoile et l'enveloppe :

$$\epsilon_\lambda = \frac{L_\star(\lambda) \sum_i w_i(\lambda) L_i(\lambda)}{N_{\gamma,\text{step 2}}} \tag{3.54}$$

3.3 Paramètres du code MCFOST

MCFOST nécessite un certain nombre de paramètres et de fichiers d'entrée qui seront détaillés dans cette section. La Fig. 3.3 récapitule les fichiers en entrée et sortie.

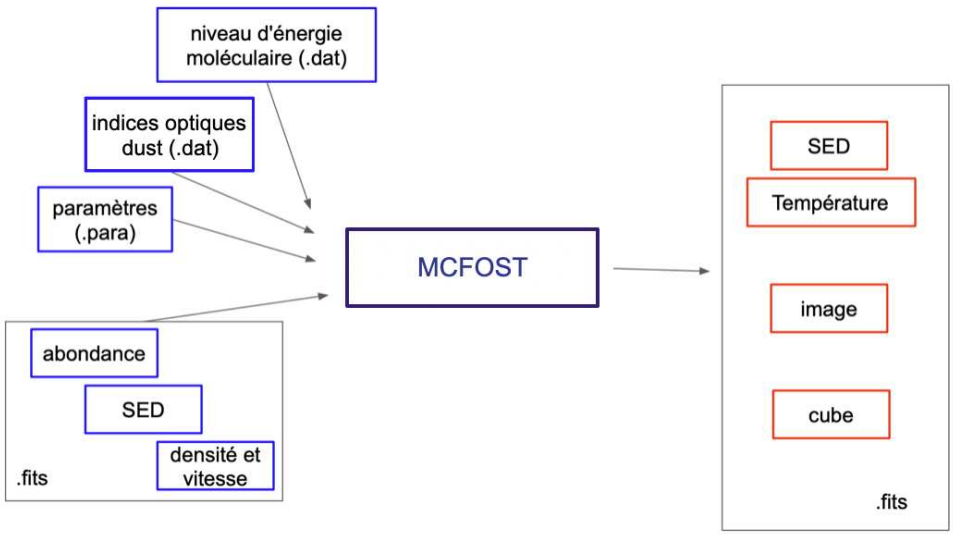


FIGURE 3.3 – Récapitulatif des fichiers d'entrées et de sorties de MCFOST.

8. Valeur définie par le code pour limiter le temps de calcul.

3.3.1 Description des paramètres

Pour faire tourner MCFOST, un fichier de paramètres doit être rempli pour définir la grille du modèle et les conditions physiques et chimiques du milieu. Un exemple est montré en annexe A. Dans cette section, nous développerons les paramètres nécessaires pour définir ces conditions. La documentation complète est disponible sur https://ipag.osug.fr/~pintec/mcfost/docs/html/parameter_file.html. Nous ne présenterons pas l'intégralité des paramètres, cependant, nous préciserons les paramètres importants et nécessaires à la réalisation de l'étude présentée.

Les conditions de calcul du transfert radiatif constituent les premiers paramètres à définir. Il faut fixer :

- Le nombre de paquets de photons (comme expliqué précédemment) pour le calcul de la température. Ce nombre influe sur le temps de calcul et inversement sur la "résolution" des données.
- Le nombre de paquets de photons par longueur d'onde dans le calcul de la SED. De même, ce paramètre influe sur la qualité/résolution des résultats et sur le temps de calcul.
- Le nombre de paquets de photons utilisés dans le calcul des images.

La source émet donc des paquets de photons à certaines longueurs d'onde. Les calculs sont faits par longueur d'onde. On peut rentrer un fichier externe avec les longueurs d'ondes étudiées ou bien définir une grille automatiquement par le code. On définit donc les bornes minimale et maximale de λ, et le nombre de longueurs d'onde échantillonnées, elles sont espacées de manière logarithmique.

La grille de calcul du modèle peut être définie en coordonnées cylindriques ou sphériques. Elle peut être définie en trois dimensions : n_rad, le nombre de cellules dans la dimension radiale qui sont espacées de manière logarithmique, n_z, le nombre de cellules dans la direction verticale et n_az pour de la 3D, le nombre de cellules dans la direction azimutale (voir Fig. 3.4). Les cellules sont espacées entre $R_{\rm in}$ et $R_{\rm out}$, le premier rayon de condensation des poussières, et le rayon final de grille.

Les images produites sont de taille (nx, ny) pixels sur une certaine taille en UA (unité astronomique). Elles sont produites en calculant l'émission suivant une certaine direction. Cette direction est définissable dans le fichier de paramètres et permet de créer des images dans plusieurs directions dans un même calcul de MCFOST en même temps.

Concernant les méthodes de diffusion, deux sont possibles dans MCFOST. Le calcul se fait soit par estimation des propriétés moyennes de la poussière par taille de grain ou bien par cellule de la grille. MCFOST peut également choisir automatiquement la méthode et choisir seul la plus appropriée pour le calcul en cours. Nous opterons pour cette option. La fonction de phase[9] peut être calculée suivant la théorie de Mie ou de Henyey-Greenstein (nous utiliserons la théorie de Mie).

Des options sont disponibles pour modéliser la distribution de densité d'un disque. Ici,

9. La fonction de phase représente la distribution des angles dans lesquels les photons sont diffusés après leur interaction avec les particules du milieu.

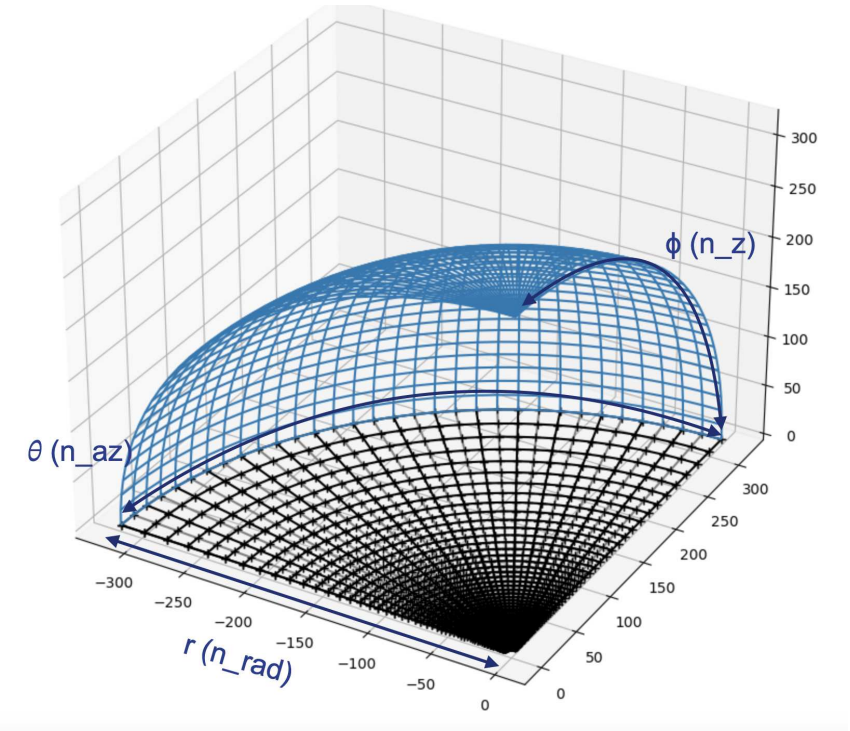


FIGURE 3.4 – Illustration d'un quart de grille sphérique sur laquelle travaille MCFOST.

nous utilisons un fichier extérieur pour modéliser une enveloppe circumstellaire. Il faut tout de même donner la quantité de poussière totale de l'environnement modélisé en $M_\odot$. Le fichier de densité externe est sans unité. Les densités par cellules sont définies par le code, distribuées en fonction de la quantité totale de poussière.

Concernant les poussières, MCFOST permet de rentrer plusieurs types de poussières dans l'enveloppe. Chaque type de poussière nécessitera un fichier extérieur pour ses propriétés optiques. Cela sera développé dans la sous-partie 4.1.1.2. On fournit également la porosité, la proportion, la fraction volumique et la distribution de taille (celle si peut être aussi rentrée dans un fichier externe).

MCFOST permet de calculer l'émission moléculaire. Pour modéliser l'émission, on fournit le profil de raie moléculaire, sa largeur et la vitesse turbulente. Les spectres sont calculés entre deux vitesses à définir. On peut fixer une abondance constante sur la grille ou bien la définir manuellement, avec un fichier extérieur. C'est ce que nous ferons pour rentrer des lois spécifiques d'abondance qui prennent en compte certains phénomènes physiques.

Enfin, on donne les propriétés de la ou des sources, avec le nombre d'étoiles, leur position, leur masse, leur température effective et leur rayon.

3.3.2 Fichiers extérieurs et options

Longueur d'onde et SED :

Dans notre cas, nous rentrons un fichier externe pour définir les longueurs d'onde traitées. Nous rentrons les mêmes longueurs d'onde que celles de la SED observée. Ces

données sont récupérées sur VizieR [10] qui nous donne le flux en fonction de la longueur d'onde, en réunissant plusieurs observations dans un certain rayon autour des coordonnées de la source. Cela nous permettra plus tard de pouvoir comparer la SED générée par MCFOST et celle observationnelle. Nous pouvons également rentrer la SED de l'étoile, que MCFOST utilise pour calculer la luminosité ainsi qui sert pour la convergence du code dans le calcul de la SED totale de l'environnement modélisé.

Densité :

Pour modéliser la structure de la CSE de notre étoile, nous rentrons un fichier externe de densité, qui comportera aussi les informations sur la vitesse du gaz. Le fichier de densité est un fichier FITS et il est en 4 dimensions : (n_rad, nz, n_az, n_grains) où n_rad, nz et n_az sont les dimensions de la grille, et n_grains le nombre de type de grains dans l'enveloppe. Cela permet de mettre une distribution de densité différente pour chaque type de grain, et notamment d'introduire leurs différents rayons de condensation.

Ce fichier peut contenir plusieurs HDU (*header data unit*, qui peut être vu comme une extension du fichier) qui seront traités selon la présence de certains mots-clés et leur valeur associée.

S'il y a plus d'une taille de grain, le mot-clé read_n_a doit être égal à 1. Alors, le code lit le second HDU et l'associe à la distribution de taille des grains. Ce fichier FITS est à 1 dimension, de taille n_grains (défini dans le fichier de paramètres) en μm. Ces tailles de grains doivent être données par ordre croissant (et correspondre à l'ordre du cube de données de densité, et dans le même ordre que le fichier de paramètres).

On peut également rentrer, dans un autre HDU, la distribution de densité du gaz, si nous la voulons différente de celle des poussières. La densité du gaz peut être transmise en fixant le mot-clé read_gas_density à 1. Cet HDU supplémentaire doit donc être transmis, et donne la densité du gaz en 3 dimensions : n_rad, nz, n_az. Comme pour le fichier de densité de poussière, le fichier est en 3D mais peut être utilisé en 2D en fixant n_a=1. La masse totale de gaz est fixée par le fichier de paramètres et sert de norme pour les unités de la distribution, et par le rapport gaz/poussière. Si le mot-clé read_gas_density est fixé à 0 ou est absent, le code estimera que le gaz suit la même distribution spatiale que celle des plus petits grains dans le fichier avec le rapport gaz/poussière défini.

Dans un autre HDU, on peut fournir le champ de vitesse du gaz, en coordonnées cartésiennes ou cylindriques. Il peut être transmis en fixant read_gas_velocity à 1 (pour des coordonnées cartésiennes) ou à 2 (pour des coordonnées cylindriques). Les données sont en 4 dimensions : (n_rad, nz, n_az, 3). La dernière dimension correspond à v_x, v_y, v_z en coordonnées cartésiennes, ou alors v_r, v_phi, v_z en coordonnées cylindriques, qui doit être en m/s. Si le champ de vitesse n'est pas fourni, MCFOST supposera un champ de vitesse képlérien.

Voici un exemple de structure de fichier avec n_rad = 122, nz = 64, n_az = 128, avec trois types de grain dans l'enveloppe :

10. http://vizier.cds.unistra.fr/vizier/sed/

Filename : density/GYAql_extra_tot.fits

No.	Name	Ver	Type	Cards	Dimensions	Format	
0	PRIMARY	1	PrimaryHDU	10	(122, 64, 128, 3)	float64	→ densité
1		1	ImageHDU	7	(3,)	float64	→ taille des grains
2		1	ImageHDU	9	(122, 64, 128, 3)	float64	→ vitesse du gaz

Indice optique :

Les indices optiques des poussières sont nécessaires pour calculer la température. Nous utilisons la base de données du Laboratoire d'Astrophysique de l'AIU Jena *Database of Optical Constants for Cosmic Dust*[11]. qui nous donne les indices de réfraction $m = n + ik$.

Ces fichiers se présentent en trois colonnes. La première est la longueur d'onde en μm. La seconde est la partie réelle du coefficient de réfraction n. Enfin, la dernière colonne est la partie imaginaire de l'indice de réfraction, k. Des indices optiques, le code peut calculer les coefficients d'absorption et d'émission, comme il a été expliqué plus haut pour le calcul de la température.

Fichier moléculaire :

MCFOST fournit des fichiers moléculaires depuis la base de données LAMDA[12] qui fournit les données atomiques et moléculaires nécessaires au calcul de l'excitation. Cela nous donne les données d'un certain nombre d'espèces avec les niveaux d'énergies, les poids statistiques, les coefficients A d'Einstein et les coefficients de taux de collision.

Abondance :

On rentre l'abondance moléculaire par rapport au H_2 (X(A)/X(H_2)). Le fichier doit avoir les mêmes dimensions que le fichier de densité (n_rad, nz, n_az). Nous pouvons donc aussi rentrer une structure 3D.

3.3.3 Sorties et observables

Nous récupérons principalement 4 fichiers :
- la SED,
- la carte de température des grains,
- le cube d'émission moléculaire,
- les images d'émission de l'enveloppe à une longueur d'onde donnée (continuum ou émission moléculaire).

D'autres options nous permettent d'avoir un fichier de la structure en densité générée par le code. Dans notre cas nous rentrons un fichier extérieur qui est normalisé avec la masse de poussière dans l'enveloppe, donc nous n'utilisons pas les options pour générer automatiquement la structure de l'enveloppe. Cependant, cette option nous permet de récupérer un fichier de densité des poussières et du gaz avec des unités. MCFOST nous

11. https://www.astro.uni-jena.de/Laboratory/OCDB/crsilicates.html
12. https://home.strw.leidenuniv.nl/~moldata/

permet aussi de récupérer la densité de colonne, l'opacité ou encore l'albédo.

Concernant les 4 fichiers énoncés au début, ce sont des fichiers FITS que nous traiterons avec le module python *astropy*. La SED est un fichier en deux dimensions. La première nous donne le flux en $W.m^{-2}$ en fonction de la longueur d'onde en μm. La deuxième dimension correspond à différentes composantes de la SED, comme elle serait reçue par un observateur à une certaine distance (définie dans le fichier de paramètres) :

— la SED totale (la somme de toutes les composantes),
— l'émission stellaire directe, c'est-à-dire le spectre de l'étoile seule,
— la lumière stellaire diffusée, donc la lumière de l'étoile qui est diffusée par les poussières,
— l'émission thermique directe, qui est l'émission des poussières,
— l'émission thermique diffusée, qui est l'émission diffusée provenant de l'enveloppe.

La carte de température est un fichier en deux ou trois dimensions, correspondant à la grille sur laquelle le modèle a tourné. La température est en Kelvin.

Pour l'émission moléculaire, il s'agit d'un cube de données. Il y a deux dimensions pour la carte. Nous récupérons l'émission en 2D suivant une direction. La troisième dimension nous donne le spectre en fonction de la vitesse.

Les images sont des fichiers en 2D, qui comme l'émission moléculaire, correspondent à une émission en regardant le modèle dans une direction. Pour les images comme pour le cube, MCFOST nous permet de définir la direction dont on veut récupérer l'information et de le faire pour plusieurs directions dans un même run.

Chapitre 4

Modélisation de la CSE

I can see the stars again m'lady

The Titan Curse - Rick Riordan

Sommaire

4.1 Modélisation d'une enveloppe circumstellaire 55
4.1.1 Propriétés des poussières 55
4.1.1.1 Composition et proportions 55
4.1.1.2 Indices optiques 57
4.1.1.3 Extinction 57
4.1.2 Distribution des poussières et modèle hydrodynamique 59
4.1.3 Loi d'abondance moléculaire 61
4.2 Outils de comparaison aux observations 62
4.2.1 Images - convolution 62
4.2.2 Spectre et aire intégrée 62
4.3 Présentation du projet ATOMIUM 63
4.4 Cas d'étude : GY Aql 66
4.4.1 Étude observationelle à partir des cartes ALMA 67
4.4.1.1 Étude des raies 67
4.4.1.2 Vitesse des vents 74
4.4.1.3 Rapports isotopiques 75
4.4.2 Modélisation avec MCFOST 84
4.4.2.1 Paramètres initiaux 84
4.4.2.2 Premier modèle et résultats 87
4.4.2.3 Étude paramétrique pour la détermination de paramètres 90
4.4.2.4 Rapport isotopique et autres molécules carbonées . . . 94
4.4.3 Étude temporelle du modèle 96
4.4.3.1 Modèle stellaire CO5BOLD 96
4.4.3.2 Utilisation et correction des SED 98
4.4.3.3 Résultats 99
4.5 Conclusion 101

Comprendre la dynamique physique du phénomène de perte de masse autour des étoiles évoluées est un enjeu important pour comprendre le recyclage de la matière dans l'Univers. De nombreux éléments sont à prendre en compte et à étudier, comme le champ magnétique, la composition des poussières, leur distribution, ou encore la présence d'un compagnon. Beaucoup de choses sont encore incomprises pour expliquer les formes des CSE et leur dynamique. Cette partie présentera le travail réalisé pour modéliser la CSE. L'objectif est d'utiliser un code de transfert radiatif et de se rapprocher au mieux des observations pour contraindre des paramètres physiques et comprendre les propriétés physiques de la matière autour de l'étoile. Nous avons utilisé le code MCFOST, introduit dans le chapitre précédent, pour reproduire les observations du projet ATOMIUM présentées ci-après. Ce travail a été fait pour une étoile du programme en particulier : GY Aql. Une étude sur les poussières a été faite dans le but de reproduire l'émission continuum, ainsi que l'évaluation de la distance de l'étoile. Nous avons travaillé avec un modèle hydrodynamique pour l'ajout d'un compagnon dans les modèles de transfert radiatif afin de reproduire l'émission moléculaire. Enfin, une partie sur l'étude de la variabilité d'un modèle stellaire (CO5BOLD) sera présentée.

4.1 Modélisation d'une enveloppe circumstellaire

4.1.1 Propriétés des poussières

4.1.1.1 Composition et proportions

Les grains ont un rôle important dans le lancement des vents. Dans Höfner (2008), on définit deux conditions pour estimer si un type de grain permet de lancer les vents :

— qu'ils aient une opacité moyenne de flux par masse suffisamment élevée,
— qu'ils se forment en quantité suffisante dans l'environnement d'une atmosphère pulsante à la distance requise pour avoir un rôle efficace.

Nous pouvons vérifier la première condition avec :

$$K_H > K_{\text{crit}} = \frac{4\pi c G M_\star}{L_\star} \tag{4.1}$$

où K_H est le flux d'opacité moyen, $M_\star$ et $L_\star$ la masse et la luminosité de l'étoile, c la vitesse de la lumière et G la constante de gravitation.

La seconde condition nécessite de vérifier deux éléments : la distance à laquelle les grains condensent (rayon de condensation) et la vitesse à laquelle les grains croissent (donc la quantité de poussière) dans ces conditions physiques. Le rayon de condensation dépend de la température de condensation des grains et d'un paramètre p [1] qui dépend du grain (voir éq. 4.2). La quantité de poussière dépend elle de la densité et de l'abondance des matières nécessaires à la formation des grains.

Avec des modèles hydrodynamiques, Höfner (2008) montre que les vents dans les étoiles AGB (de type M) peuvent être alimentés par pression de radiation sur des grains de silicate sans fer. Ils ont une section efficace de scattering/diffusion assez importante pour compenser leur faible section efficace d'absorption, ce qui conduit à l'accélération par radiation des grains. Ils permettent ainsi de propager et lancer les vents dans l'enveloppe.

1. p provient de $\kappa_{\text{abs}} \propto \lambda^{-p}$, κ_{abs} est le coefficient d'efficacité d'absorption des grains.

Il est en effet indispensable d'avoir des grains de silicate sans fer pour avoir une distance de condensation en dessous de $10R_\star$, suffisamment proche pour lancer les vents, ce qui n'est pas possible avec des grains avec fer (voir Tab. 4.1, le cas de l'Olivine). Höfner (2008) déduit que la taille des grains est comprise entre 0.1 et 1 μm, une taille suffisante pour être efficace.

Dans Norris et al. (2012), les auteurs ont observé la CSE proche de trois étoiles AGB. Ils ont estimé des tailles de grains de 0.3 μm, avec une taille de grain uniforme. C'est cette taille que nous utiliserons plus tard dans le modèle.

Bladh & Höfner (2012) ont confirmé que les grains de silicates avec fer ne peuvent pas avoir un rôle déterminant dans le lancement des vents par leurs propriétés optiques (étudiées en infrarouge proche) et par leur rayon de condensation. Le TiO_2 est également exclu à cause de l'abondance trop faible du Ti (critère 2 dans Höfner 2008). D'autres espèces sont envisagées comme le SiO_2 et Al_2O_3, mais ne semblent pas probables à cause des grandes incertitudes sur leur détection avec des données optiques et de la couverture incomplète des longueurs d'onde. Des travaux supplémentaires sont nécessaires.

Nous considérons donc la forsterite (Mg_2SiO_4) et l'enstatite ($MgSiO_3$) comme grains dans l'enveloppe. Nous ajoutons également, plus loin, l'olivine, avec fer, qui est tout de même très abondante dans l'enveloppe. Nous vérifions leur rayon de condensation R_c par :

$$\frac{R_c}{R_\star} = \frac{1}{2}\left(\frac{T_c}{T_\star}\right)^{-\frac{4+p}{2}} \tag{4.2}$$

qui dépend du rayon et de la température de l'étoile ($R_\star$ et $T_\star$), de la température de condensation des grains T_c, et du paramètre p (Lamers & Cassinelli 1999) propre à chaque type de poussière. Les rayons calculés sont présentés en Tab. 4.1, en utilisant $T_c = 1100$K pour les trois types de grains (Bladh & Höfner 2012).

	Forsterite	Enstatite	Olivine
Formule	Mg_2SiO_4	$MgSiO_3$	$[MgFe]_2SiO_4$
p	-0.9	-0.5	2.3
$R_c[R_\star]$	2.25	2.72	10.60

TABLE 4.1 – Propriétés des poussières dans une CSE.

Pour leur proportion, nous utilisons les travaux de Bladh et al. (2017) et Woitke et al. (2018), qui nous donnent l'abondance χ en fonction de la température, de 100 K jusqu'à leur température de condensation avec le code `GGCHEM` :

- $\chi_{\text{Forsterite}} = 0.693$
- $\chi_{\text{Olivine}} = 0.030$
- $\chi_{\text{Enstatite}} = 0.277$

Pour appliquer le modèle, il nous manque la quantité de poussière totale dans l'enveloppe. Nous partons de la quantité de gaz qui s'exprime en fonction de la densité ρ :

$$M_{\text{gas}} = \int \rho \, 4\pi r_e^2 dr \tag{4.3}$$

Or, la densité de gaz dans l'enveloppe s'écrit aussi en fonction du taux de perte de masse $\dot{M}$, l'extension maximale de l'enveloppe r_e et de la vitesse maximale des vents (vitesse limite) v_∞ :

$$\rho = \frac{\dot{M}}{4\pi r_e^2 v_\infty} \tag{4.4}$$

Nous avons donc :

$$M_{\rm gas} = \frac{\dot{M}}{4\pi r_e^2 v_\infty} \int 4\pi r_e^2 dr \tag{4.5}$$

$$M_{\rm gas} = \frac{\dot{M}}{v_\infty} \int_{R_{\rm min}}^{R^{\rm max}} dr = \frac{\dot{M} r_e}{v_\infty} \tag{4.6}$$

En introduisant le rapport gaz sur poussière R tel que $R \times M_d = M_{\rm gas}$, nous estimons la masse de poussière dans l'enveloppe M_d :

$$M_d = \frac{\dot{M} r_e}{R v_\infty} \tag{4.7}$$

Le rapport gaz sur poussière R est typiquement égal à 100 mais c'est un paramètre libre qui sera contraint avec la comparaison aux observations.

4.1.1.2 Indices optiques

Nous avons donc choisi d'introduire de la forsterite, de l'enstatite et de l'olivine dans nos modèles. Pour calculer la température, il faut résoudre l'équation d'équilibre radiatif (Eq. 3.38), et donc les propriétés d'absorption des grains que l'on calcule à partir des indices optiques. Nous avons pris ces propriétés sur la base de données OCDB [2] :

— Forsterite : Fabian et al. (2001); Zeidler et al. (2011)
— Enstatite : Jaeger et al. (1998)
— Olivine : Zeidler et al. (2011)

Ceux-ci s'expriment en fonction de la longueur d'onde, mais aussi en fonction de la température du milieu. On voit en Fig. 4.1, les indices optiques n et k, qui changent avec la température.

La température dans l'enveloppe modélisée va de la température de condensation des grains (1100 K) jusqu'à environ 100 K. Nous avons décidé de mettre les indices récupérés à la plus haute température disponible (295 K) pour modéliser au mieux les premières cellules qui correspondent à la région interne de l'enveloppe et donc à la région de formation des vents.

4.1.1.3 Extinction

Quand nous comparons les sorties de MCFOST aux observations, notamment pour la SED, les rayons sont passés au travers du milieu interstellaire (MIS). Ce milieu peut absorber certaines longueurs d'onde et donc quand nous regardons les sorties de MCFOST, elles peuvent être légèrement surestimées comparées aux observations.

2. https://www.astro.uni-jena.de/Laboratory/OCDB/crsilicates.html

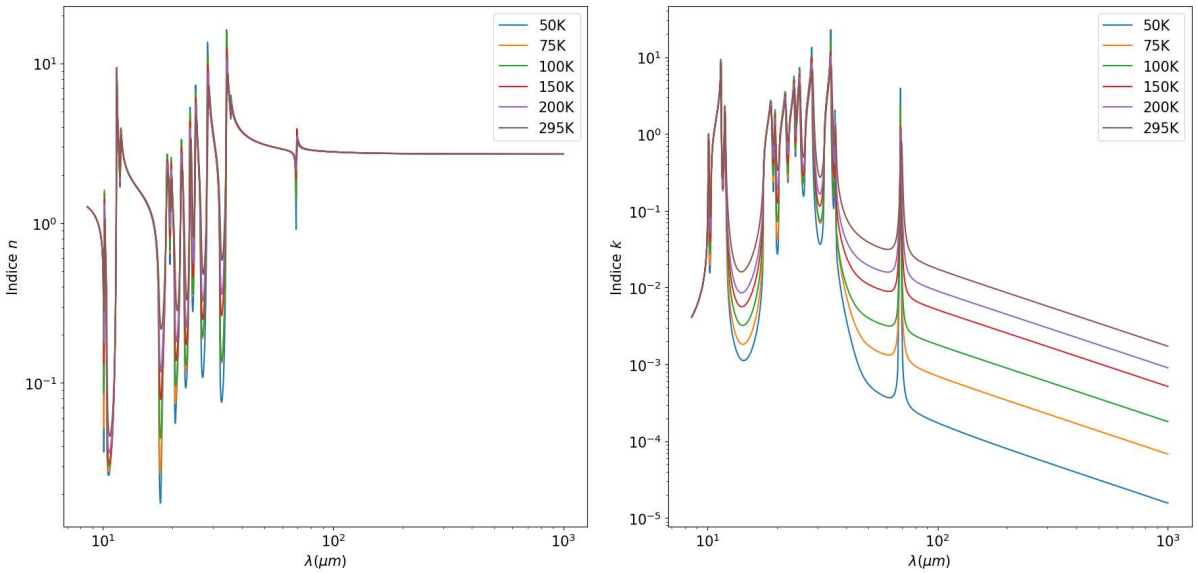


FIGURE 4.1 – Indice optique de réfraction de la forsterite. **Gauche :** Indice n, partie réelle de l'indice de réfraction. **Droite :** Indice k, partie imaginaire de l'indice de réfraction.

D'après les travaux de Truong et al. (2022), nous avons pour le rayonnement propre à l'étoile :

$$I_{\lambda,0} = B(\lambda, T_\star) \tag{4.8}$$

Cela correspond à la SED de l'étoile. En prenant en compte l'extinction, nous avons :

$$I_\lambda = I_{\lambda,0} \times e^{-\tau_\lambda} \tag{4.9}$$

où $\tau_\lambda = A_\lambda/1.086$ [3]. Pour estimer A_λ, nous avons utilisé un module python [4], qui utilise les résultats de Cardelli et al. (1989), qui dépendent de A_V (l'extinction totale) et de R_V (= A(V)/E(B— V) [5]). Nous utiliserons $R_V = 3.1$ (Cardelli et al. 1989). En utilisant le modèle de Arenou et al. (1992) [6], pour une étoile à 500 pc, de type M à une latitude de $-16°$ dans le ciel, cela nous donne $A_V = 0.41$.

En Fig. 4.2, nous voyons à gauche le rapport A_λ/A_V et l'extinction en bleu. Dans les plus petites longueurs d'onde, il y a un effet, mais au delà du micromètre, $e^{-\tau_\lambda} \sim 1$ et donc n'a pas d'effet sur la SED. A droite, nous avons la comparaison de la SED observée avec celle modélisée en prenant en compte ou non l'extinction. Nous voyons que l'extinction a un effet, même si faible, dans les plus petites longueurs d'ondes. Mais elle n'a globalement pas d'effet important dans notre étude. Elle sera tout de même prise en compte.

3. On écrit $A_\lambda = -2.5\log_{10}\left(\frac{F_\lambda(\tau_\lambda)}{F_\lambda(0)}\right) = -2.5\log_{10}(e^{-\tau}) = 1.086\ \tau_\lambda$, $F_\lambda(0)$ étant le flux sans extinction
4. https://extinction.readthedocs.io/en/latest/api/extinction.ccm89.html
5. R_V compare les extinctions totales. Il est égal à A(V)/E(B-V). Il s'agit de l'extinction totale A(V) divisée par l'extinction E(B-V)=(A(B)-A(V)), l'excès de couleur. A(B) et A(V) sont les extinctions dans les bandes B et V
6. https://wwwhip.obspm.fr/cgi-bin/afm

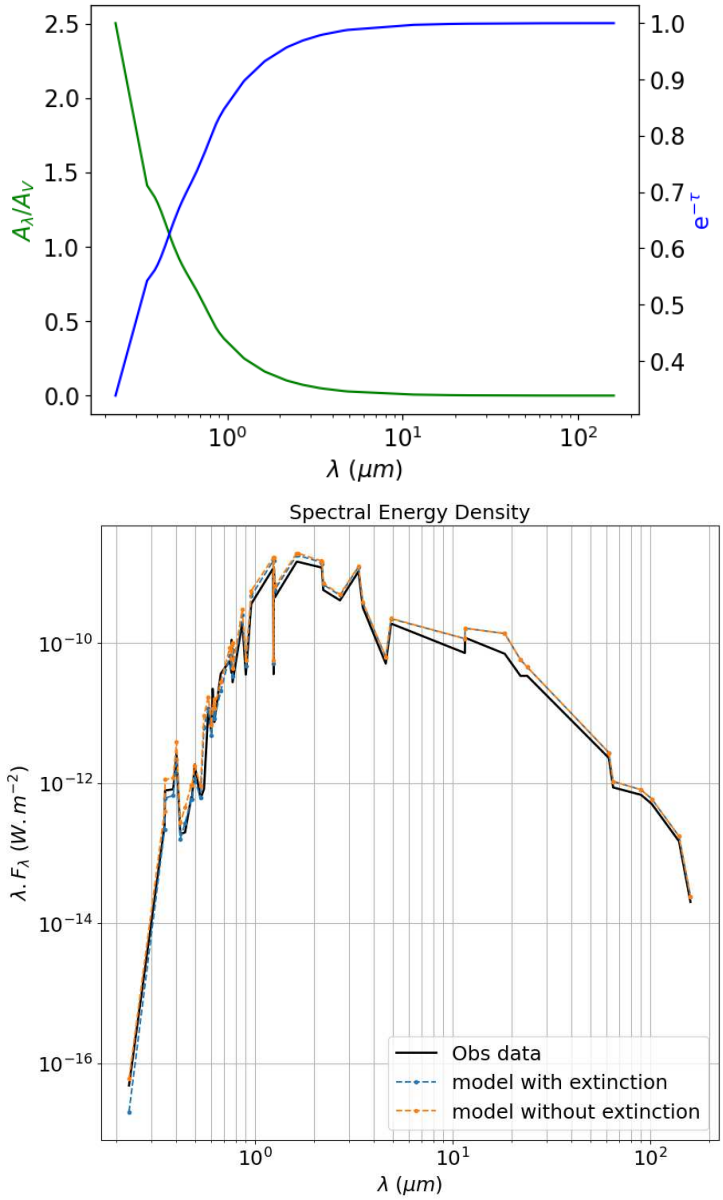


FIGURE 4.2 – **Haut :** Rapport A_λ/A_V avec $A_V = 0.41$ en vert et l'extinction en fonction de la longueur d'onde en bleu. **Bas :** Comparaison entre la SED observée et les SED modélisées par MCFOST en prenant en compte ou non l'extinction par le MIS.

4.1.2 Distribution des poussières et modèle hydrodynamique

Pour modéliser une enveloppe, nous mettons en entrée un fichier de densité externe, indispensable pour la suite de notre étude. Comme introduit précédemment, MCFOST calcule la température à partir de l'opacité, des paramètres stellaires et de la distribution en densité des poussières. Ce calcul se fait sur une grille 2D ou 3D. Pour modéliser les observations, nous allons implémenter un fichier de densité en 3D simulé et fourni par El Mellah et al. (2020), illustré en Fig. 4.3. La grille de cette simulation a 64x32x128 cellules en r, θ, ϕ, avec comme bornes :

— r dans [1,60], avec le rayon de condensation comme échelle de longueur : 64 valeurs
— θ entre 0 et $\pi/2$: 64 valeurs
— ϕ entre 0 et 2π : 128 valeurs

On suppose que la densité est symétrique par rapport au plan orbital en $\theta = \pi/2$. Le fichier est agrandi en 64x64x128 par symétrie suivant θ ($\rho[\theta = 0 \rightarrow \theta = \pi/2] = \rho[\theta = \pi \rightarrow \theta = \pi/2]$). MCFOST crée une autre symétrie entre $\theta = \pi$ et $\theta = 2\pi$, ainsi le fichier final est de taille 64x128x128.

Nous allons donc rentrer dans MCFOST la même grille, avec $R_{in} = R_c$ et $R_{out} = 60R_c$. Il faut donc déterminer R_c. Pour cela, nous utiliserons l'équation 4.2, qui dépend de la température de l'étoile modélisée et du type de poussière.

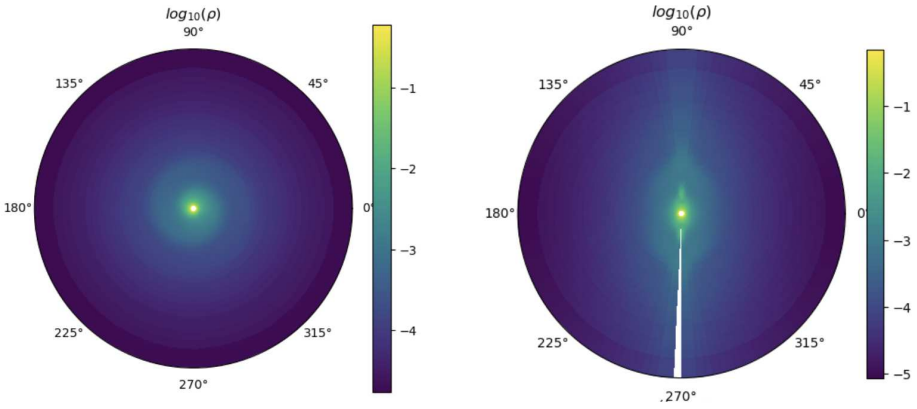


FIGURE 4.3 – Distribution de densité de poussière en sortie du modèle hydrodynamique (sans unité) en face-on et egde-on.

Pour le profil en vitesse, nous implémentons la loi de Lamers & Cassinelli (1999) :

$$v(r) = v_0 + (v_\infty - v_0)\left(1 - \frac{R_c}{r}\right)^\beta \tag{4.10}$$

avec β entre ~ 0.7 (pour les étoiles avec un faible taux de perte de masse) et ~ 0.5 (pour celles avec un fort taux de perte de masse) (Elitzur & Ivezić 2001). Nous prenons $\beta = 0.5$ (GY Aql ayant un fort taux de perte de masse), v_0 est la vitesse du gaz au rayon de condensation des poussières R_c, et v_∞ la vitesse de libération du champ gravitationnel de l'étoile.

Pour déterminer la vitesse terminale v_∞ du gaz, nous avons besoin de définir Γ, le rapport des forces gravitationnelle et radiative, tel que :

$$\Gamma = \frac{< \kappa_d > L_\star}{4\pi c G M_\star} \frac{v_g}{R v_d} \tag{4.11}$$

avec $< \kappa_d >$ le flux d'opacité moyen, $M_\star$ et $L_\star$ la masse et la luminosité de l'étoile, G la constante gravitationnelle, c la vitesse de la lumière, R le rapport gaz sur poussière, v_g et v_d la vitesse du gaz et des poussières. Si Γ ne dépend pas de la distance (que le rapport vitesse du gaz sur vitesse des poussière reste constant $v_g = v_d$), et en supposant un scénario dit SCRA (Steady Circumstellar Radiative Acceleration) [7], on écrit la vitesse terminale v_∞ de la forme suivante selon Höfner & Olofsson (2018) :

7. Le scénario SCRA suppose que les éjections dans la CSE sont stables, sphériques et symétriques, et que les grains sont accélérés par pression de radiation. (Höfner & Olofsson 2018)

$$v_\infty = \sqrt{\frac{2GM_\star}{R_c}(\Gamma - 1) + v_0^2} \tag{4.12}$$

qui peut aussi se déterminer observationellement. v_0 peut être supposée égale à la vitesse du son (Höfner & Olofsson 2018) et s'écrit donc :

$$v_0 = \sqrt{\frac{\gamma k T_{\rm subl}}{m_{\rm mol}}} \tag{4.13}$$

avec k la constante de Boltzmann, γ le coefficient adiabatique, et $m_{\rm mol}$ la masse de la molécule qui domine la pression thermique (ici s'agit principalement de la pression de radiation, comme la forsterite est dominante dans l'enveloppe, nous calculons le v_0 de celle-ci) . Dans notre cas, nous trouvons $v_0 = 2.5$ km/s.

4.1.3 Loi d'abondance moléculaire

Comme expliqué dans le chapitre précèdent, MCFOST va pouvoir créer des cartes d'émission moléculaire. Il faut fournir en entrée un fichier décrivant les transitions et les niveaux d'énergies modélisés, ainsi que l'abondance moléculaire dans l'enveloppe. Nous pouvons typiquement modéliser l'abondance par une loi gaussienne :

$$\chi = \chi_0 e^{-(R/R_{\rm ref})^2} \tag{4.14}$$

χ_0 est l'abondance en $R_{\rm ref}$, un rayon de référence, et r le rayon dans l'enveloppe.

Selon Schöier et al. (2013), cette loi peut être utilisée pour des molécules telles que le HCN. Pour le CO, nous avons utilisé une loi selon Mamon et al. (1988), qui inclut la photodissociation, en tenant compte des effets de la poussière, de l'auto-écrantage et celui du H_2, ainsi que des réactions d'échange chimique.

$$\chi = \chi_0 \exp\left(-\ln(2) \times \left(\frac{r}{r_{\rm p}}\right)^\alpha\right) \tag{4.15}$$

où $r_{\rm p}$ est la distance à laquelle l'abondance vaut la moitié de χ_0, le rayon de photo-dissociation. Selon Danilovich et al. (2015), χ_0 vaut 3×10^{-4}. Nous estimons $r_{\rm p}$ et α avec Schöier & Olofsson (2001), calculés à partir de fits analytiques des résultats de Stanek et al. (1995) et Kwan & Webster (1993) :

$$r_{\rm p} = 5.4 \times 10^{16} \left(\frac{\dot{M}}{10^{-6}}\right)^{0.65} \left(\frac{v_\infty}{15}\right)^{-0.55} \left(\frac{\chi_0}{8 \times 10^{-4}}\right)^{0.55} + 7.5 \times 10^{18} \left(\frac{v_\infty}{15}\right) \tag{4.16}$$

$$\alpha = 2.79 \left(\frac{\dot{M}}{10^{-6}}\right)^{0.09} \left(\frac{15}{v_\infty}\right)^{0.09} \tag{4.17}$$

avec $\dot{M}$ le taux de perte de masse, exprimé en $M_\odot$/an.

4.2 Outils de comparaison aux observations

4.2.1 Images - convolution

Les sorties des images de MCFOST sont en W.m^{-2}. Si nous voulons les comparer aux observations ALMA, il faut faire une conversion d'unité mais également prendre en compte le lobe du télescope. Le lobe ALMA est un lobe gaussien. Nous allons convoluer les sorties de MCFOST par ce même lobe pour avoir des résultats comparables.

Pour cela, nous commençons par définir plusieurs variables :
- pixsize : la taille d'un pixel, en degrés dans les headers des fichiers d'observation. Nous le convertissons en arcsec en le multipliant par 3600,
- bmin, bmaj et bpa : les paramètres du lobe. Les tailles des deux axes de l'ellipse et son orientation (en arcsec pour bmin et bmaj, et en degrés pour bpa),
- FWHM_to_σ : qui permet de passer la taille du lobe en déviation standard avant la rotation, en pixel (nous modélisons le beam à partir des déviations standards).

On a FWHM_to_σ = 1 / $2\sqrt{2\ln(2)}$. On définit alors :

$$\sigma_x = (\text{bmin/pixsize}) \times \text{FWHM_to_}\sigma \tag{4.18}$$

$$\sigma_y = (\text{bmaj/pixsize}) \times \text{FWHM_to_}\sigma \tag{4.19}$$

On modélise le lobe par un kernel gaussien en 2 dimensions avec comme paramètres σ_x, σ_y et bpa$\times\frac{\pi}{180}$. On convolue l'image par ce lobe. Pour passer des W.m^2 en Jy, on multiplie l'intensité du flux modélisé par $10^{26}/\nu$, avec ν la fréquence. Les images ALMA sont en Jy/beam. On va donc calculer l'aire du beam à partir de l'aire d'un pixel = bmin x bmaj $\times\frac{\pi}{4\ln(2)}$. Pour finir, on multiplie l'image produite par MCFOST par aire du lobe / aire d'un pixel et ainsi nous pouvons comparer les cartes observées et modélisées.

4.2.2 Spectre et aire intégrée

Nous récupérons les spectres depuis les cartes en Jy/beam (voir la conversion présentée avant). Pour calculer le flux, il faut prendre en compte la taille du lobe pour avoir le flux en Jy et non en Jy/beam, et donc faire l'inverse de la dernière opération expliquée précédemment, c'est à dire multiplier par aire d'un pixel / aire du lobe. Ce qui nous donne le flux en Jy. Pour avoir le flux dans un rayon, il suffit ensuite d'additionner l'intensité des pixels compris dans le rayon défini. En faisant cela pour chaque fréquence étudiée, nous construisons le spectre. Nous faisons ça pour les cartes modélisées mais aussi pour les cartes observées pour construire le spectre d'émission des molécules.

Nous ne comparons pas directement les spectres, mais les aires intégrées. Nous calculons donc l'aire sous le spectre. Nous pouvons faire ça pour plusieurs rayons, et ainsi voir l'évolution de l'aire intégrée en fonction du rayon.

4.3 Présentation du projet ATOMIUM

Le large programme ALMA ATOMIUM [8] (PI : L. Decin) est mené depuis 2018 (ALMA id : 2018.1.00659.L) et a été observé dans le cycle 6 (Gottlieb et al. 2022). Le but de ce projet est de comprendre la dynamique du gaz et la formation des poussières autour des étoiles évoluées. Nous voulons déterminer les propriétés morpho-cinétiques et chimiques des vents, éclaircir les changements de phase, identifier les processus chimiques dominants pour comprendre les phénomènes de perte de masse de ces étoiles. C'est un projet majeur pour la compréhension de la dynamique des étoiles évoluées. Un échantillon de 17 sources a été observé. Il est composé de 14 étoiles AGB (riches en oxygène) et de 3 RSG (AH Sco, KW Sgr et VX Sgr), elles sont décrites en Tab. 4.2. Les observations continuum et raies sont séparées en 15 cubes de données donnant une couverture spectrale de 27 GHz (voir Fig. 4.4), avec une résolution spectrale d'environ 1.3 km/s, couvrant plusieurs bandes de fréquences entre 213.83 et 269.71 GHz.

L'originalité de ce projet réside dans la très haute résolution spatiale atteinte jusqu'à 25 mas pour les observations en configuration étendue. Cette configuration avec des antennes plus espacées, a de plus grandes lignes de base et donc donne une meilleure résolution angulaire. Le projet inclut aussi des observations en configuration médium et compacte. Les trois configurations donnent des résolutions différentes :

— *extended* / étendue - haute résolution, taille du beam $\sim 0.02'' - 0.05''$,
— *mid* / médium moyenne résolution, taille du beam $\sim 0.2'' - 0.5''$,
— *compact* / compacte - basse résolution, taille du beam $\sim 0.8'' - 1.4''$.

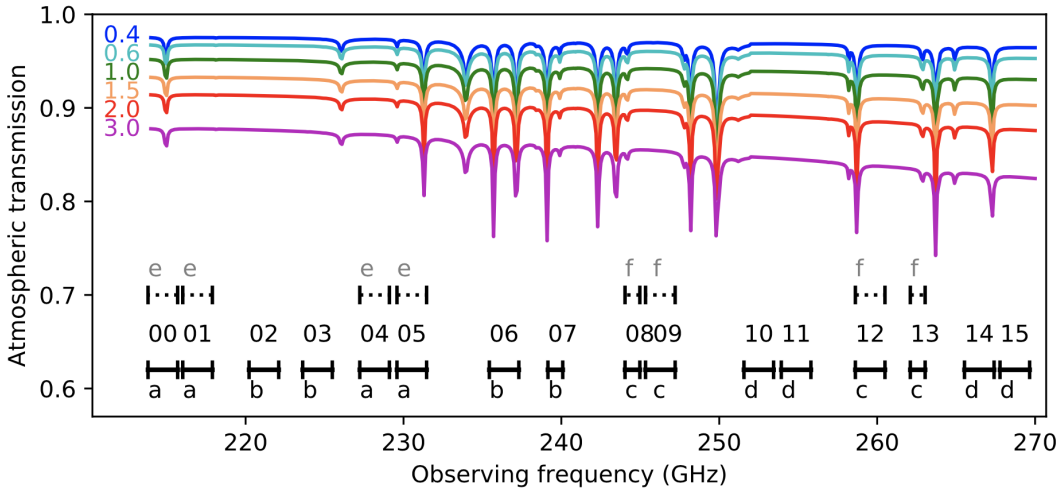


FIGURE 4.4 – Chaque barre noire représente la couverture de fréquence d'une fenêtre spectrale (spw). Les lignes colorées représentent le pourcentage de transmission atmosphérique pour des valeurs d'eau précipitable (PWV), en mm (Gottlieb et al. 2022).

Les cartes avec différentes résolutions spatiales permettent de mettre en évidence certaines structures complexes. L'échantillon est présenté en Tab. 4.2. Dans la Fig. 4.5 (Decin et al. 2020), nous voyons les cartes d'émission (moment 0) du ^{12}CO composées des images en channel map centrées sur la vitesse de la raie (blanc). En bleu et rouge, nous voyons les cartes en vitesse blue et redshiftée. Nous remarquons la variété des enveloppes, non symé-

8. https://astro-atomium.github.io

Source	Type[1]	$\dot{M}$[2] [$M_\odot$/an]	P [jours]	T_{eff} [K]	Diamètre[3] [mas]	d [pc]	$v_{LSR}^{(3)}$ [km/s]
S Pav	M-SRa	1.3×10^{-7} (a)	381(a)	3100(b)	12.0	190(d,e,f)	-18.2
RW Sco	M-Mira	1.3×10^{-7} (g)	389(g)	3300(b)	4.9	560(e)	-69.7
T Mic	M-SRb	1.4×10^{-7} (a)	347(a)	3300(b)	9.3	175(f)	25.5
R Hya	M-Mira	1.8×10^{-7} (i)	366(h)	2100(i)	23.0	126(f)	-10.1
SV Aqr	M-LPV	2.7×10^{-7} (a)	-	3400(b)	4.4	445(f)	6.7
U Her	M-Mira	3.2×10^{-7} (j)	402(h)	3100(c)	11.0	266(f,k)	-14.9
U Del	M-SRb	3.7×10^{-7} (a)	119(d)	2800(c)	7.9	330(d,e,h)	-6.8
V PsA	M-SRb	4.8×10^{-7} (a)	148(a)	2400(a)	13.0	278(d,e)	-11.1
π^1 Gru	S-SRb	9.2×10^{-7} (l)	150(i)	2300(i)	21.0	164(e)	-11.7
R Aql	M-Mira	1.6×10^{-6} (j)	268(h)	2800(i)	12.0	230(d,e,h)	47.2
GY Aql	M-Mira	4.1×10^{-6} (c)	468(h)	2900(f)	11.4(w)	410(f)	34.0
W Aql	S-Mira	2.7×10^{-6} (n)	479(h)	2800(c)	11.0	375(d,e,f)	-21.6
KW Sgr	RSG-SRc	3.6×10^{-6} (p)	647(o)	3700(c)	3.9	2400(q)	-4.4
IRC-10529	M-Mira	1.0×10^{-5} (i)	680(i)	2700(i)	6.5	930(f,i)	-16.3
AH Sco	RSG-SRc	1.0×10^{-5} (s)	738(r)	3700(c)	5.8	2260(t)	-2.3
IRC+10011	M-Mira	1.9×10^{-5} (i)	660(i)	2700(i)	6.5	740(f)	10.1
VX Sgr	RSG-SRc	6.0×10^{-5} (i)	732(u)	3500(c)	8.8	1560(v)	5.7

TABLE 4.2 – Description des sources ATOMIUM (classées par ordre croissant de taux de perte de masse) à partir de Wallström et al. (2024)
Notes : [1]Type spectral/pulsation. SR correspond à *semiregular*, celles avec une périodicité stable sont SRa, celles avec des cycles différents sont SRb. SRc sont les semi-régulières de type RSG. LPV est *long-period variable* où aucune périodicité n'a été observée. [2]Taux de perte de masse [3] tirés de Gottlieb et al. (2022), estimés à partir d'observations en optique. les vitesses sont celles estimées à partir des observations ALMA.
Références : [a]Olofsson et al. (2002) ; [b]Marigo et al. (2008) ; [c]Gottlieb et al. (2022) ; [d]Gaia Collaboration (2018) ; [e]Bailer-Jones et al. (2021) ; [f]Andriantsaralaza et al. (2022) ; [g]Groenewegen et al. (1999) ; [h]Perryman et al. (1997) ; [i]De Beck et al. (2010) ; [j]Young (1995) ; [k]Vlemmings & van Langevelde (2007) ; [l]Doan et al. (2017) ; [m]Loup et al. (1993) ; [n]Ramstedt et al. (2017) ; [o]Wittkowski et al. (2017) ; [p]Mauron & Josselin (2011) ; [q]Arroyo-Torres et al. (2013) ; [r]Kiss et al. (2006) ; [s]Jura & Kleinmann (1990) ; [t]Chen & Shen (2008) ; [u]Samus' et al. (2017) ; [v]Chen et al. (2007) ; [w] observation de M. Montargès avec PIONIER

triques et en spirale, ce qui peut indiquer la présence d'un compagnon autour de ces étoiles.

Le projet ATOMIUM a permis d'accroître nos connaissances sur les lancements des vents et l'explication des structures observées. Un résultat sur l'étoile π^1Gru (Homan et al. 2020) a mis en évidence la présence d'un compagnon autour de celle-ci. Un premier compagnon a été détecté à 440 UA et un deuxième beaucoup plus proche (<10 UA). Dans l'émission continuum, on retrouve 2 maxima séparés de 0.04 arcsec (6 UA) (voir Fig. 4.6 gauche). L'émission en CO a révélé un accroissement en densité contenu dans une spirale inclinée de $\sim 38° \pm 3$ avec la ligne de visée. Les observations en HCN ont révélé les même structures, en accord avec un compagnon à 0.04 arcsec. Ils en ont déduit un compagnon de $\sim 1.1 M_\odot$. Ce papier a aussi permis de calculer l'accélération des vents.

Une autre étude centrée sur R Hya, une étoile avec un compagnon éloigné déjà connu, (à 3500 UA), a permis d'identifier un autre compagnon avec les cartes de CO et SiO

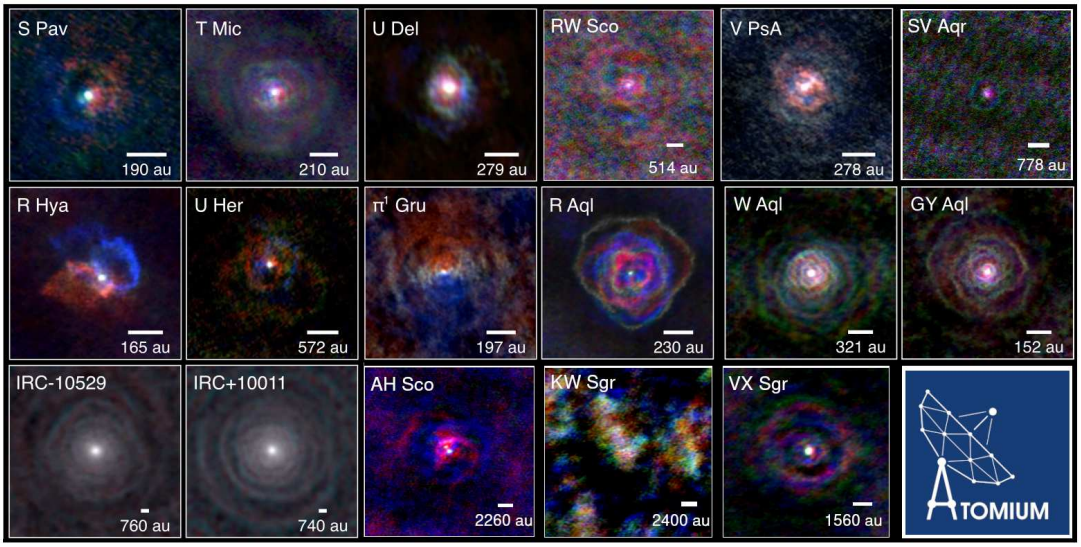


FIGURE 4.5 – Observation ALMA des sources ATOMIUM en ^{12}CO. Les couleurs sont en vitesse Doppler (Decin et al. 2020).

(Homan et al. 2021), qui révèlent une structure multi-couches avec une large ellipse, dominée par deux "bulles" creuses/cavités en direction opposée à l'AGB. Les observations en SiO semblent indiquer la présence d'une onde de choc qui se propage dans l'enveloppe. La distribution de densité semble aussi indiquer la présence d'un compagnon proche de l'étoile (6 UA) de ~ 0.65 M$_\odot$.

Dans Danilovich et al. (2021), les émissions moléculaires autour de W Aql (AGB de type S, C/O $\sim$ 1) ont permis de calculer les abondances de AlCl et AlF, observés pour la première fois pour une étoile AGB de type-S. L'abondance de AlF est supérieure à l'abondance solaire du fluor, indiquant que le fluor synthétisé dans l'étoile AGB a déjà été éjecté dans l'enveloppe circumstellaire, et qu'il pourrait participer à la formation des poussières.

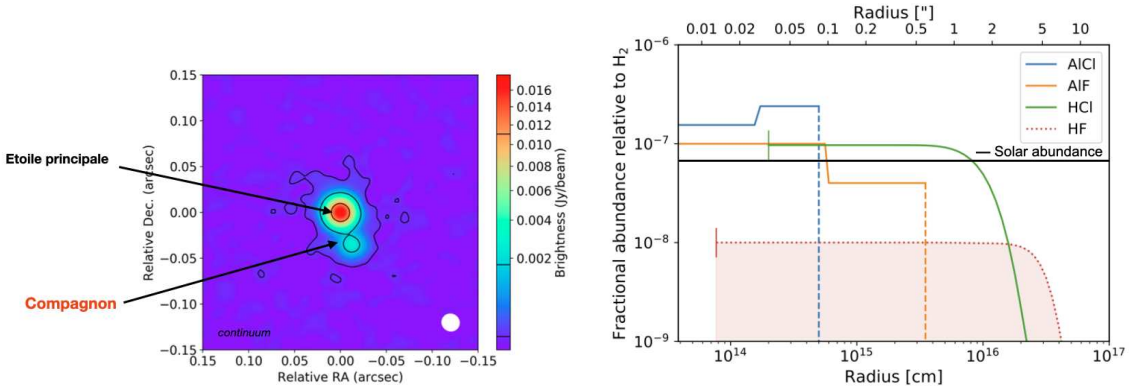


FIGURE 4.6 – **Gauche :** Sources ATOMIUM, observation de la raie CO (2-1). Carte en vitesse blue-red shift (Homan et al. 2020). **Droite :** abondance de F dans W Aql (Danilovich et al. 2021; Asplund et al. 2009).

L'eau est présente dans une grande partie de l'enveloppe de ces étoiles. Cette molécule

présente une émission maser, détectée dans Etoka et al. (2022) et Baudry et al. (2023) que l'ont retrouve entre quelques rayons stellaires et quelques centaines de rayons stellaires. Les émissions révèlent un influx de matière et une cinématique complexe influencée par la binarité.

Les observations ATOMIUM ont aussi été cumulées à des observations en optique avec SPHERE/VLT traçant les régions de formation des poussières. Les observations de la polarisation linéaire révèlent des environnements circumstellaires des poussières principalement sous forme de "grumeaux" (*clumps*) (Montargès et al. 2023).

Danilovich et al. (2024) (annexe E.2) ont concentré leur étude sur W Aquilae, un système binaire avec l'étoile AGB et un compagnon de la séquence principale. Avec une analyse chimique et dynamique, nous avons pu déterminer les paramètres orbitaux de cette binaire à longue période et révéler une orbite très excentrique, ce qui pourrait expliquer la variété des structures circumstellaires observées.

Wallström et al. (2024) (annexe E.3) ont permis d'appuyer le fait que ce sont des environnements très riches. Nous avons détecté 291 transitions de 24 molécules différentes et leurs isotopologues, avec notamment les premières détections dans les étoiles AGB/RSG oxygénées de PO v=1, SO_2 v=1 et v=2, et des transitions à hautes énergies de H_2O.

4.4 Cas d'étude : GY Aql

GY Aql est une étoile oxygénée située dans la constellation de l'aigle (19h 50m 06.33s ; -07° 36' 52.46") . C'est une étoile variable de type Mira [9] avec une période de pulsation de 468 jours. Sa température effective est de 2900 K, on estime sa distance à 410 pc et sa luminosité à 9600 $L_\odot$. Elle fait partie de l'échantillon ATOMIUM.

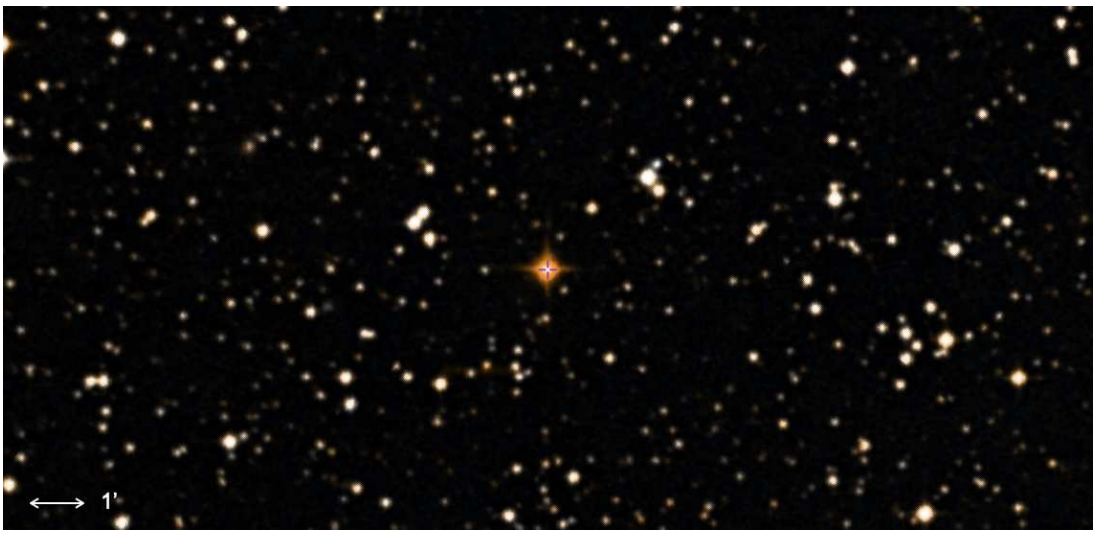


FIGURE 4.7 – Image de GY Aql avec le survey DSS http://cdsportal.u-strasbg.fr/?target=V*%20GY%20Aql

9. Étoile de la branche AGB avec une période de pulsation régulière de quelques centaines de jours.

Il a été calculé un taux de perte de masse $\dot{M} = 4.1 \times 10^{-6} M_{\odot}$/an par Loup et al. (1993) à partir de :

$$\dot{M} = 1.26 \times 10^{-6}\ T_{\rm mb} \times v_e^2\ d^2 \left(\frac{f}{10^{-4}}\right)^{-0.85} M_{\odot}/yr \tag{4.20}$$

avec d la distance de la source et f l'abondance du CO. Cependant, comme mentionné en fin de Sec. 4.1.1.1, nous recalculerons ce taux après avoir contraint les paramètres R et M_d.

4.4.1 Étude observationelle à partir des cartes ALMA

4.4.1.1 Étude des raies

Nous avons cherché à automatiser l'étude des 15 cubes de données de GY Aql. Nous voulons extraire un certain nombre de résultats comme la taille de l'émission et les caractéristiques des émissions intégrées : le flux, la taille à 3σ de la raie (FWZI, Full Width at Zero Intensity), et les caractéristiques des cartes de moment 0. Pour cela, nous avons développé un code sous python qui donne en sortie toutes ces caractéristiques avec le moins d'interaction possible de la part de l'utilisateur à partir des fichiers FITS. Nous présenterons ici les résultats pour un choix de raies moléculaires. L'ensemble des espèces détectées est présenté dans Wallström et al. (2024).

Étendue de l'émission

Dans les Tab. 4.3 et 4.4, nous présentons les résultats pour un choix de raies que nous avons identifiées, certaines dans plusieurs configurations. Nous commençons par récupérer les spectres intégrés dans plusieurs rayons. La Fig. 4.8 représente les spectres de l'émission du ^{12}CO pour différentes configurations et différents rayons d'extraction autour de l'étoile. Pour chaque configuration, nous cherchons à quel rayon elle présente une intensité maximale. Ainsi, pour l'émission extended (configuration étendue), le spectre maximal correspond à celui extrait dans 1 arcsec. En mid (configuration medium), nous voyons qu'après 8 arcsec, l'émission diminue. Au delà de ce rayon, l'émission est diluée, donc nous déterminons que l'étendue de l'émission est de 8 arcsec. Pour la configuration compacte, nous voyons qu'au delà de 10 arcsec l'émission est diluée.

Largeur et vitesse des émissions

Nous déterminons le bruit des spectres en dehors de la raie (σF) et ainsi, nous pouvons mesurer la largeur FWZI à 3σ. I_spectra donne l'aire sous la courbe des spectres, cette valeur est utilisée dans le calcul des rapports isotopiques qui sera développé par la suite.

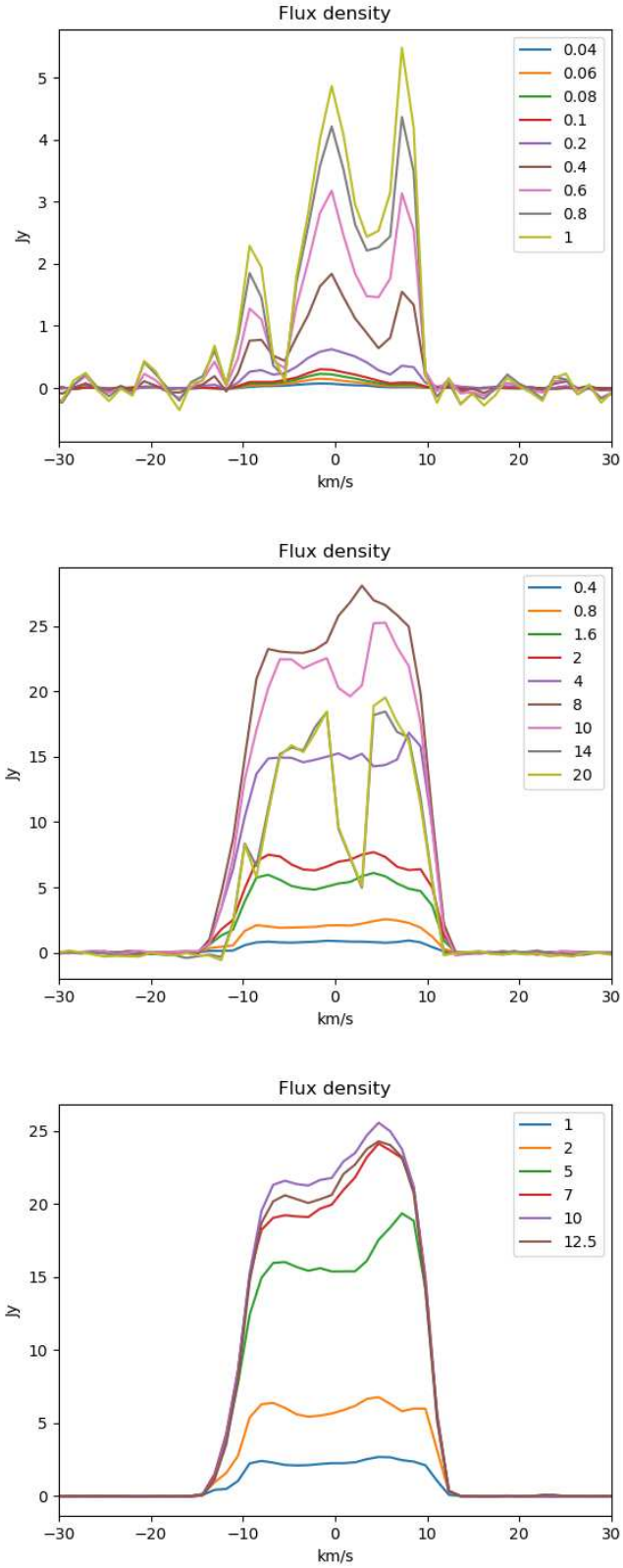


FIGURE 4.8 – Spectres intégrés du ^{12}CO (2-1) pour les configurations étendue, médium et compacte dans plusieurs rayons d'extraction exprimés en arcsec.

Line name	freq [GHz]	Res	Ap [“]	Imax [Jy/beam]	rms [Jy/beam]	Fp [Jy]	σF [Jy]	I_spectra [Jy.km/s]	σI [Jy.km/s]	FWZI [km/s]	FWHM [km/s]
^{12}CO J2-1	230,53	C	10	1,55E+00	3,22E-03	25,56	1,84E-02	463,86	3,22E-03	-13.08 to 12.35	19,07
		M	8	4,10E-01	3,26E-03	28,11	9,18E-02	517,72	3,26E-03	-13.63 to 11.80	19,07
		E	1	1,68E-02	4,58E-04	5,48	1,56E-01	56,46	4,58E-04	-9.28 to 8.52	11,44
^{13}CO J2-1	220,39	M	8	4,14E-02	1,78E-03	3,14	5,97E-02	53,71	1,78E-03	-10.64 to 11.97	21,28
		E	0,1	8,60E-03	4,81E-04	0,05	1,33E-02	0,439	4,81E-04	-0.15 to 2.51	5,31
HCN J3-2	265,88	M	10	5,00E-01	8,87E-03	3,08	2,12E-01	40,69	8,87E-03	-10.49 to 8.26	12,12
		E	0,4	3,61E-02	9,02E-04	1,37	9,98E-02	20,76	9,02E-04	-7.66 to 7.77	13,22
H^{13}CN J3-2	259,01	C	5	1,32E-01	2,58E-03	0,23	1,40E-02	3,54	2,58E-03	-9.63 to 9.61	15,84
		M	2	5,84E-02	4,06E-03	0,32	1,08E-01	4,64	4,06E-03	-9.04 to 6.81	14,71
CS J5-4	244,93	C	5	1,87E-01	2,17E-03	0,26	1,05E-02	4,26	2,17E-03	-9.11 to 8.85	14,36
		M	4	8,49E-02	3,30E-03	0,43	9,91E-02	5,63	3,30E-03	-9.14 to 5.23	10,77
		E	0,4	1,24E-02	6,84E-04	0,26	5,49E-02	2,64	6,84E-04	-7.91 to 2.87	11,97
H_2S	216,71	M	0,8	2,88E-02	2,28E-03	0,05	2,58E-02	0,29	2,28E-03	-5.85 to 2.27	2,70
SiO v0 J5-4	217,10	C	7	3,36E+00	2,71E-03	8,73	1,93E-02	114,56	2,71E-03	-12.92 to 12.74	10,80
		M	4	8,46E-01	2,49E-03	8,38	9,41E-02	109,21	2,49E-03	-11.59 to 11.36	8,102
		E	1	1,65E-02	5,60E-04	9,48	1,31E-01	139,60	5,60E-04	-11.58 to 11.38	12,15
SiO v1 J5-4	215,59	E	1	3,39E+00	4,83E-04	8,51	1,47E-01	29,54	4,83E-04	-4.63 to 4.88	1,36
		M	10	1,73E+00	1,84E-03	1,85	7,21E-02	7,07	1,84E-03	-4.78 to -0.70	1,36
		C	10	5,58E+00	1,91E-03	5,92	1,77E-02	19,51	1,91E-03	-5.96 to 6.28	1,35
^{29}SiO v0 J5-4	214,38	C	5	1,13E+00	2,05E-03	1,95	1,44E-02	25,20	2,05E-03	-10.90 to 10.98	10,93
		M	4	4,94E-01	2,08E-03	2,19	9,16E-02	25,34	2,08E-03	-8.08 to 8.33	10,94
		E	1	1,41E-02	4,85E-04	3,68	1,52E-01	49,78	4,85E-04	-6.79 to 9.62	10,93

TABLE 4.3 – Paramètres des émission moléculaires détectées dans GY Aql. Imax la valeur maximale de l'émission, rms est le bruit, Fp la valeur maximale du spectre extrait dans l'étendue maximale, σF est le bruit du spectre extrait, I_spectra la valeur de l'aire intégrée, σI l'erreur sur l'aire (=σF x FWZI), FWZI la largeur au delà de 3 σ de la raie, FWHM la largeur à mi-hauteur.

Line name	freq [GHz]	Res	Ap [“]	Imax [Jy/beam]	rms [Jy/beam]	Fp [Jy]	σF [Jy]	I_spectra [Jy.km/s]	σI [Jy.km/s]	FWZI [km/s]	FWHM [km/s]
SO 5(5)-4(4)	215,22	C	5	2,61E-01	1,89E-03	0,58	1,23E-02	8,84	1,89E-03	-10.20 to 10.24	16,34
		M	2	1,07E-01	1,94E-03	0,70	6,84E-02	9,74	1,94E-03	-10.29 to 10.14	16,34
		E	1	1,08E-02	4,31E-04	1,00	1,32E-01	13,89	4,31E-04	-7.50 to 10.21	13,61
SO 6(5)-5(4)	251,82	M	1,6	1,37E-01	6,01E-03	0,83	1,38E-01	10,97	6,01E-03	-7.13 to 8.00	15,13
		E	0,2	1,61E-02	6,70E-04	0,22	1,96E-02	2,18	6,70E-04	-2.75 to 5.40	5,82
^{34}SO 6(5)-5(4)	246,66	C	2	3,66E-02	1,87E-03	0,04	1,21E-02	0,44	1,87E-03	-8.02 to 7.43	13,07
		M	2	4,11E-02	2,94E-03	0,0	2,03E-02	0,90	2,94E-03	-2.62 to 0.95	1,18
Si^{33}S v0 J12-11	214,74	M	0,4	2,52E-02	2,08E-03	1,33e-2	4E-03	0,20	2,08E-03	2.3 to 6.1	1,50
Si^{33}S v0 J12-11	214,74	M	0,4	2,52E-02	2,08E-03	1,33e-2	4E-03	0,20	2,08E-03	2.3 to 6.1	1,50
Si^{34}S v0 J14-13	247,14	C	2	4,64E-02	1,97E-03	0,05	4,50E-03	0,56	1,97E-03	-7.93 to 5.11	7,11
		M	0,8	4,34E-02	2,96E-03	0,08	2,06E-02	0,81	2,96E-03	-6.14 to 4.53	8,30
^{30}SiS v0 J14-13	227,58	C	2	4,70E-02	2,86E-03	0,04	7,23E-03	0,34	2,86E-03	-5.16 to 3.86	5,15
		M	0,8	4,10E-02	3,24E-03	0,07	1,11E-02	0,62	3,24E-03	-6.19 to 4.11	6,44
^{30}SiS v0 J15-14	262,58	C	2	5,74E-02	2,69E-03	0,05	6,58E-03	0,44	2,69E-03	-7.05 to 4.12	7,81
		M	0,8	6,38E-02	4,54E-03	0,08	1,28E-02	0,68	4,54E-03	-5.93 to 5.24	7,81
^{29}SiS v0 J15-14	267,24	M	0,8	1,35E-01	7,37E-03	0,11	2,43E-02	1,08	7,37E-03	-10.02 to 5.34	8,77
		E	0,1	1,77E-02	7,97E-04	0,07	2,27E-02	0,27	7,97E-04	-7.04 to -0.46	3,29
^{34}SO 6(6)-5(5)	253,20	M	0,5	1,64E-02	5,01E-03	4,6e-2	1,30E-02	0,39	5,01E-03	S/N too poor	10,46
^{33}SO 6(6)-5(5)	259,28	C	2	5,24E-02	2,51E-03	0,02	5,40E-03	0,20	2,51E-03	-5.5 to 4.6	14,31
SiS J14-13	254,10	M	0,8	3,90E-01	5,47E-03	1,00	1,28E-01	11,68	5,47E-03	-5.22 to 7.47	10,38
		E	0,4	2,04E-02	6,34E-04	0,88	6,86E-02	11,09	6,34E-04	-7.29 to 6.55	10,38
SiS J13-12	235,96	M	0,8	3,19E-01	2,54E-03	0,72	9,92E-03	9,22	2,54E-03	-10.22 to 7.18	11,18
		E	1	1,41E-02	4,90E-04	1,57	1,60E-01	21,20	4,90E-04	-7.81 to 5.85	9,93

TABLE 4.4 – Paramètres des émission moléculaires détectées dans GY Aql. Imax la valeur maximale de l'émission, rms est le bruit, Fp la valeur maximale du spectre extrait dans l'étendue maximale, σF est le bruit du spectre extrait, I_spectra la valeur de l'aire intégrée, σI l'erreur sur l'aire (=σF x FWZI), FWZI la largeur au delà de 3 σ de la raie, FWHM la largeur à mi-hauteur.

Exploitation des cartes de moment 0

Nous déterminons les cartes de moment 0 :

$$M_0 = \int_{v_{\min}}^{v_{\max}} I_v dv \tag{4.21}$$

avec $v_{\min}$ et $v_{\max}$ les valeurs de FWZI trouvées précédemment. Cela permet de mesurer l'intensité intégrée sur la raie spectrale. Les cartes de moment 0, comme montrées en Fig. 4.9, nous donneront des informations sur la vitesse des vents dans l'enveloppe. Nous pouvons en effet récupérer le pic d'intensité, et donc la taille de l'émission à mi-hauteur du moment 0 (R_{max} FWHM dans les Tab. 4.5 et 4.6).

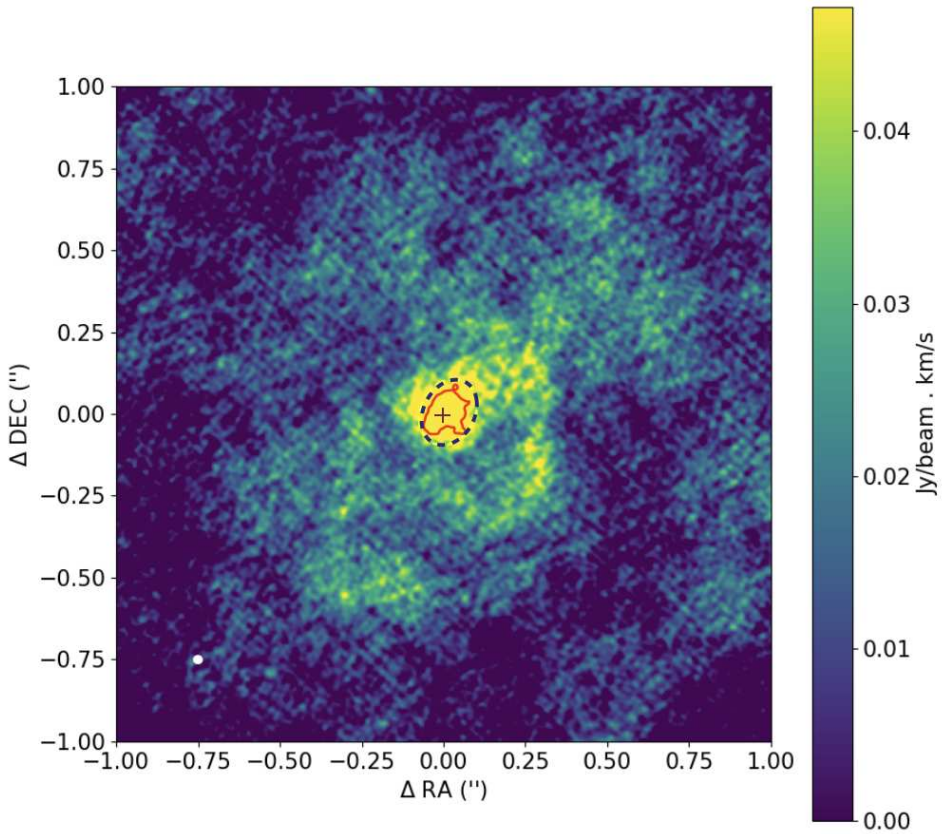


FIGURE 4.9 – Carte de moment 0 du ^{12}CO en configuration extended. Le tracé rouge correspond au contour à mi-hauteur FWHM. Le contour noir en pointillés est une ellipse ajustant le contour à mi-hauteur, la croix noire correspond à la position de l'étoile.

Line name	freq	Res	Ap	M0 Flux max	M0 rms	M0 Flux Total	M0 R_{max} 3σ	M0 R_{max} FWHM	M0 flux in FWHM
	[GHz]		["]	[Jy/beam.km/s]	[Jy/beam.km/s]	[Jy/beam.km/s]	["]	["]	[Jy/beam.km/s]
^{12}CO J2-1	230,53	C	10	30,20	2,66E-01	137,06	7,70" x 7,75"	1,35" x 1,31"	59,90
		M	8	6,41	2,01E-01	128,82	4.00" x 4,29"	0,56" x 0,51"	31,50
		E	1	0,14	8,82E-03	38,07	0,61" x 0,85"	0,10" x 0,09"	6,99
^{13}CO J2-1	220,39	M	8	0,51	3,08E-02	9,92	3,39" x 3,43"	0,49" x 0,38"	2,60
		E	0,1	0,02	2,92E-03	0,29	0,1" x 0,1"	0,1" x 0,1"	0,49
HCN J=3-2	265,88	M	10	3,41	1,40E-01	19,60	2" x 2"	0,41" x 0,38"	0,00
		E	0,4	0,20	1,29E-02	8,42	0,20" x 0,44"	0,07" x 0,13"	5,46
H^{13}CN J3-2	259,01	C	5	1,77	4,39E-02	2,63	2,5" x 3"	0,94" x 0,90"	0,90
		M	2	0,84	5,20E-02	2,05	1" x 1,2"	0,50" x 0,40"	0,25
CS J5-4	244,93	C	5	2,71	3,62E-02	3,52	3" x 3,4"	0,90" x 0,93"	1,47
		M	4	0,92	4,41E-02	0,02	1,5" x 1,5"	0,47" x 0,39"	0,05
		E	0,4	0,03	7,70E-03	0,68	0,39" x 0,46"	-	-
H_2S	216,71	M	0,8	0,93	1,94E-01	0,18	0,4" x 0,5"	x	x
SiO v0 J5-4	217,10	C	7	46,84	1,99E-01	82,29	5,5" x 6,5"	1,19" x 1,24"	63,12
		M	4	10,10	6,54E-02	84,22	4" x 4"	0,53" x 0,51"	48,94
		E	1	0,17	1,32E-02	120,06	0,76" x 1,03"	0,26" x 0,35"	54,09
SiO v1 J5-4	215,59	E	1	9,18	1,35E-02	22,04	0,32" x 0,58"	0,03" x 0,03"	0,03
		M	10	4,55	2,74E-02	4,67	1" x 1"	0,28" x 0,22"	-0,00
		C	10	18,21	6,45E-02	17,26	6,11" x 4,58"	0,88" x 0,84"	4,04
^{29}SiO v0 J5-4	214,38	C	5	14,05	6,31E-02	20,33	4" x 4,5"	1,06" x 1,08"	4,62
		M	4	4,16	3,94E-02	20,00	2,5" x 3"	0,42" x 0,38"	13,18

TABLE 4.5 – Étude des moments 0. M0 Flux max est le maximum de l'émission, M0 rms le bruit, M0 R_{max} 3σ est la taille de l'ellipse fittée autour du contour à 3σ et M0 R_{max} FWHM est la taille de l'ellipse fittée autour du contour de la largeur à mi-hauteur.

Line name	freq	Res	Ap	M0 Flux max	M0 rms	M0 Flux Total	M0 R_{max} 3σ	M0 R_{max} FWHM	M0 flux in FWHM
	[GHz]		["]	[Jy/beam.km/s]	[Jy/beam.km/s]	[Jy/beam.km/s]	["]	["]	[Jy/beam.km/s]
SO 5(5)-4(4)	215,22	C	5	4,03	3,67E-02	6,81	4,5" x 4,7"	1,13" x 1,24"	0,46
		M	2	1,24	2,32E-02	0,49	3" x 2"	0,44" x 0,42"	0,04
		E	1	0,06	6,24E-03	5,21	0,28" x 0,42"	0,27" x 0,29"	5,09
SO 6(5)-5(4)	251,82	M	1,6	1,36	7,71E-02	8,17	1" x 1,3"	0,39" x 0,30"	0,93
		E	0,2	0,07	4,43E-03	1,44	0,39" x 0,54"	0,09" x 0,04"	0,88
^{34}SO 6(5)-5(4)	246,66	C	2	0,19	3,29E-02	0,30	1,5" x 1,7"	5,65" x 8,51"	0,30
		M	2	0,06	1,92E-02	0,00	0,02" x 15,84"	10,40" x 9,35"	-0,21
Si^{33}S v0 J12-11	214,74	M	0,4	0,31	7,45E-02	0,83	0,4" x 0,4"	-	-
Si^{33}S v0 J12-11	214,74	M	0,4	0,31	7,45E-02	0,83	0,4" x 0,4"	-	-
Si^{34}S v0 J14-13	247,14	C	2	0,40	2,40E-02	0,34	1,9" x 2,5"	0,42" x 0,39"	0,00
		M	0,8	0,28	1,96E-02	0,37	0,7" x 0,7"	0,17" x 0,12"	-0,00
^{30}SiS v0 J14-13	227,58	C	2	0,05	3,70E-02	-0,00	1,3" x 1,7"	1,19" x 5,94"	-0,01
		M	0,8	0,20	3,39E-02	0,41	0,4" x 0,4"	3,76" x 5,51"	0,30
^{30}SiS v0 J15-14	262,58	C	2	0,35	2,31E-02	0,41	6,30" x 9,95"	0,74" x 0,86"	0,01
		M	0,8	0,29	1,37E-02	0,61	11,76" x 6,04"	12,15" x 7,54"	0,61
^{29}SiS v0 J15-14	267,24	M	0,8	0,51	6,96E-02	0,46	11,82" x 6,75"	10,92" x 10,05"	0,55
		E	0,1	0,04	3,22E-03	-0,04	0,69" x 0,50"	0,61" x 0,56"	-0,88
^{34}SO 6(6)-5(5)	253,20	M	0,5	0,50	1,40E-01	0,57	0,15" x 0,12"	-	-
^{33}SO 6(6)-5(5)	259,28	C	2	0,05	1,37E-02	0,03	0,76" x 1,1"	-	-
SiS J14-13	254,10	M	0,8	3,78	8,45E-02	8,68	0,9" x 1,1"	0,33" x 0,28"	7,16
		E	0,4	0,13	1,01E-02	6,18	0,29" x 0,67"	0,10" x 0,15"	3,66
SiS J13-12	235,96	M	0,8	3,46	4,17E-02	8,85	1,4" x 1,3"	0,34" x 0,28"	4,87
		E	1	0,12	7,63E-03	7,34	0,27" x 0,43"	0,08" x 0,09"	3,26

TABLE 4.6 – Étude des moments 0. M0 Flux max est le maximum de l'émission, M0 rms le bruit, M0 R_{max} 3σ est la taille de l'ellipse fittée autour du contour à 3σ et M0 R_{max} FWHM est la taille de l'ellipse fittée autour du contour de la largeur à mi-hauteur.

4.4.1.2 Vitesse des vents

A partir des Tab. 4.3 et 4.4, nous allons pouvoir déterminer la vitesse des vents dans l'enveloppe. Le mécanisme de lancement des vents n'est pas encore bien compris. La pression de radiation sur les grains semble être une explication (Bladh & Höfner 2012). Le profil de vitesse des vents des AGB et des RSG peut être approximé par la loi de vitesse dite de type β (Lamers & Cassinelli 1999) :

$$v(r) = v_0 + (v_\infty - v_0)\left(1 - \frac{R_c}{r}\right)^\beta \tag{4.22}$$

Des valeurs faibles de β décrivent une situation avec une forte accélération du vent. Pour les étoiles AGB riches en carbone, β est d'environ 0.5 (Decin et al. 2015), en raison des grains de poussière de carbone très opaques qui facilitent le transfert de quantité de mouvement des photons. Pour les étoiles AGB riches en oxygène (comme GY Aql), les vents semblent avoir une moins forte accélération et des valeurs de β comprises entre 1 et 5 ont été dérivées (Decin et al. 2010; Khouri et al. 2014; Van de Sande et al. 2018; Decin et al. 2018; Gottlieb et al. 2022). Cela pourrait s'expliquer par la transparence des grains de silicate comparée aux grains carbonés.

Pour chaque molécule, nous récupérons l'étendue de leur émission. Nous pouvons extraire le spectre dans ce rayon et tracer le profil de vitesse. En récupérant la largeur de la raie (FWZI) au niveau de 3 fois le bruit, nous avons les limites en vitesse pour calculer le moment 0. Sur la carte de moment 0, nous extrayons la taille du contour à mi hauteur M0 R_{max} FWHM et nous avons ainsi un rayon en fonction de la largeur de la vitesse dans laquelle il a été calculé. Dans la Fig. 4.10, nous traçons la vitesse (FWZI/2) du vent en fonction du rayon.

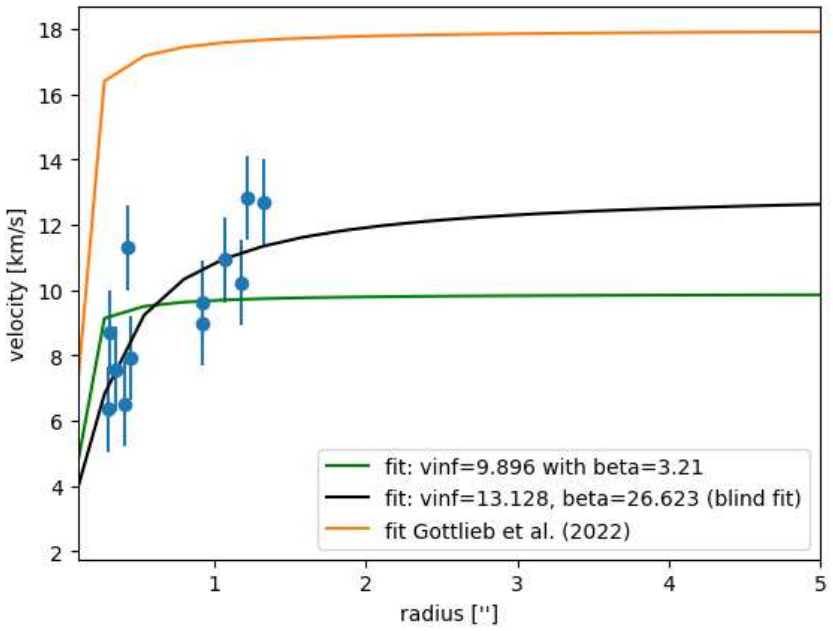


FIGURE 4.10 – Vitesse des vents dans l'enveloppe. Les points bleus correspondent aux observations. La courbe verte fit v_∞ avec $\beta = 3.21$ de Gottlieb et al. (2022). La courbe noire est notre propre fit. La courbe orange est un fit "attendu" avec $\beta = 3.21$, $v_\infty = 18$ km/s de Gottlieb et al. (2022).

Nous avons donc différents points sur ce graphique avec les mesures faites sur GY Aql sur les molécules présentées dans les Tab. 4.3 et 4.4. Nous avons différentes courbes pour les fits effectués. Le but est de déterminer v_∞ comme décrit dans l'équation 4.22. La première courbe en vert nous donne $v_\infty = 9.90$ km/s en utilisant le β qui avait été déterminé dans Gottlieb et al. (2022). Nous voyons que cela ne suit pas bien nos points. En noir nous avons essayé d'ajuster v_∞ et β. Nous trouvons des valeurs plus élevées pour les deux paramètres mais cela permet un meilleur ajustement. Finalement en orange, nous avons tracé la courbe avec les paramètres trouvés par Gottlieb et al. (2022) avec leur détermination de vitesse des vents. Les points de cette étude sont plus élevés que les nôtres (avec notamment des points à 5-6 " à 18 km/s que nous ne retrouvons pas). Avec notre étude, nous avons constaté que les émissions à mi-hauteur du moment 0 ne sont pas si étendues et que les raies sont beaucoup moins larges que celles mesurées par Gottlieb et al. (2022).

4.4.1.3 Rapports isotopiques

L'étude des raies montrée précédemment nous a permis d'identifier les isotopes de certaines molécules, en particulier de CO, HCN, SO, SiS et SiO. Nous allons donc pouvoir en déduire des rapports isotopiques qui peuvent nous donner des informations sur l'environnement où s'est formé l'étoile et sur la nucléosynthèse dans l'étoile. Les rapports isotopiques de deux éléments a et b peuvent être déduits à partir du rapport des aires intégrées $\int I dv$ de raies moléculaires (chacune contenant un de ces éléments), de fréquences respectives ν_a et ν_b, à partir de la formule suivante (voir Decin et al. 2018; Wallström et al. 2024) :

$$\frac{^aX}{^bX} = \frac{\int I_a dv}{\int I_b dv} \left(\frac{\nu^a}{\nu^b}\right)^{-2} \tag{4.23}$$

Ceci n'est valable qu'aux conditions suivantes :

- il n'y a pas (raies optiquement minces) ou il y a la même correction pour l'épaisseur optique des raies.
- il n'y a pas ou il y a le même effet de pompage radiatif.
- les deux raies sont excitées dans la même région.

Ces limitations sont souvent formulées ensemble de telle sorte que la méthode des rapports d'intensités de raies n'est valable que dans l'hypothèse d'une émission optiquement mince en LTE.

Afin de satisfaire ces conditions, dans la suite nous utilisons des raies optiquement minces [10] (si ce n'est pas le cas ou si il y a un doute nous le mentionnons) impliquant des niveaux d'énergie comparables (donc probablement excitées dans la même région), si possible de tailles spatiales d'émission comparables (étant donnée la haute résolution spatiale que nous avons). Nous supposons que le pompage de chacune de ces raies est identique.

Les intensités intégrées sont issues des Tab. 4.3 et 4.4 (I_spectra) et sont extraites dans une région de rayon A_p centrée sur la source englobant la totalité de l'émission. La

10. une raie est considérée optiquement mince en première approximation si les niveaux d'énergie impliqués dans la transition sont très élevés et si le profil de raie observé ne semble pas saturé. L'opacité de la raie ne peut être déterminée rigoureusement que par l'utilisation d'un modèle.

même configuration ALMA est utilisée pour les deux raies considérées. Les incertitudes sur l'aire intégrée sont celles du fit gaussien de la raie, ou à défaut sont le produit de l'incertitude sur I par la largeur FWZI de la raie. L'incertitude relative des abondances est la somme des incertitudes relatives des aires intégrées (on suppose l'incertitude sur les fréquences négligeable).

a) Étude du CO

Comme nous le voyons en Fig. 4.11, les émissions du ^{12}CO et du ^{13}CO présentent des structures spiralées (ceci pourrait s'expliquer par la présence d'un compagnon). Nous pouvons étudier les rapports isotopiques du CO dans l'enveloppe et nous verrons si celui-ci change entre les bras et le centre de l'enveloppe.

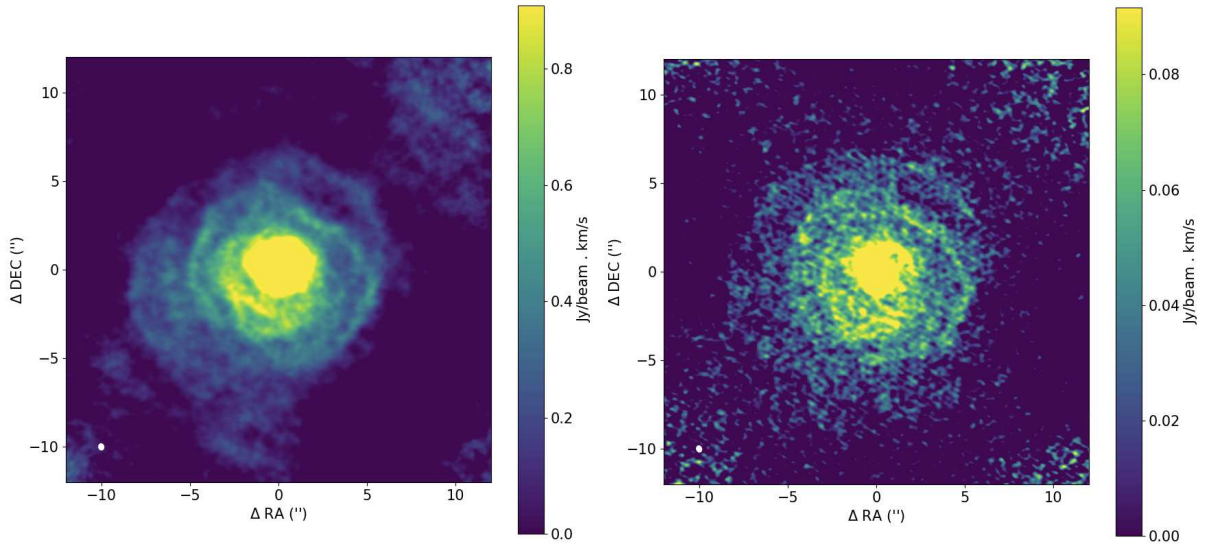


FIGURE 4.11 – Carte de moment 0 du ^{12}CO (à gauche) et du ^{13}CO (à droite) en configuration médium.

L'étude des différents rapports isotopiques fournit des informations sur l'histoire de l'enrichissement du milieu interstellaire. En particulier, le rapport ^{12}C sur ^{13}C trace l'évolution stellaire et la nucléosynthèse dans l'étoile. Le ^{12}C est directement produit dans le processus α-triple où deux noyaux d'hélium fusionnent pour former du ^{8}Be. La capture d'une particule α supplémentaire par le noyau de béryllium produit du ^{12}C (Timmes et al. 1995; Milam et al. 2009) [11]. Le ^{13}C est créé à partir du ^{12}C, dans le cycle carbone-azote-oxygène (CNO), qui convertit l'hydrogène en hélium avec le ^{12}C comme catalyseur (Burbidge et al. 1957; Clayton 1983).

Le rapport ^{12}C sur ^{13}C peut être utilisé aussi pour retracer le taux de formation stellaire passé, l'environnement dans lequel l'étoile s'est formée (Prantzos et al. 1996; Greaves & Holland 1997). Pour les étoiles carbonées et oxygénées, Milam et al. (2009) ont montré dans leur échantillon un ratio de 25–90 et 10-35 respectivement. Une étude plus récente nous montre aussi pour les étoiles oxygénées, de type S, et carbonées, un rapport d'abondance de 13, 26 et 34 respectivement, dans leur enveloppe circumstellaire (Ramstedt &

11. $^{4}_{2}$He + $^{4}_{2}$He → $^{8}_{4}$Be puis $^{8}_{4}$Be + $^{4}_{2}$He → $^{12}_{6}$C

Olofsson 2014).

Les raies de ^{12}CO et ^{13}CO sont utilisées pour déterminer une approximation de ce rapport. En traçant les rapports des intensités des raies de ^{12}CO et ^{13}CO, et de H^{13}CN et H^{12}CN, nous pouvons estimer les rapports d'abondance (Schöier & Olofsson 2000) :

$$\frac{I(^{12}\mathrm{CO})}{I(^{13}\mathrm{CO})} = (0.6 \pm 0.2)\frac{^{12}\mathrm{C}}{^{13}\mathrm{C}} \tag{4.24}$$

Nous devrions retrouver un ratio de 13 en moyenne pour une étoile de type M (Ramstedt & Olofsson 2014), et Vlemmings et al. (2013) ont observé une différence de ratio dans leurs observations : 15 au centre et 8 dans les bras.

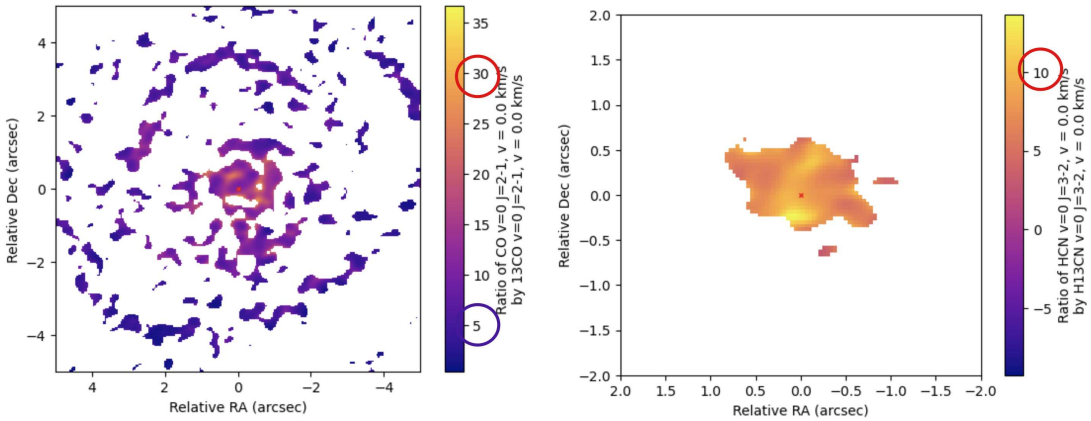


FIGURE 4.12 – Rapport d'abondance dans GY Aql. Carte ATOMIUM en configuration médium. **Gauche :** Rapport des émissions de ^{12}CO et ^{13}CO J=2-1, v=0 km/s. **Droite :** Rapport des émissions de H^{12}CN et H^{13}CN J=3-2, v=0 km/s.

Sur la Fig. 4.12, nous voyons effectivement que le rapport des deux n'est pas le même au centre que dans les bras. Dans notre cas, nous observons un rapport autour de 5 dans les bras et de 30 dans le centre, ce qui est cohérent avec leurs résultats. Vlemmings et al. (2013) expliquent que cela est dû à la photodissociation et le fractionnement chimique. Le ^{12}CO est détruit à un rythme plus lent que le ^{13}CO au coeur, ce qui fait augmenter le ratio. En dessous de 35 K, dans les bras, le fractionnement chimique favorise la création de ^{13}CO ce qui implique une baisse du rapport ^{12}C/^{13}C. Le fractionnement chimique du CO nous est donné par Watson et al. (1976) et Milam et al. (2009).

$$^{13}\mathrm{C}^{+} + {}^{12}\mathrm{CO} \rightleftharpoons {}^{12}\mathrm{C}^{+} + {}^{13}\mathrm{CO} + \Delta E \tag{4.25}$$

où ΔE correspond à l'énergie à 35 K. A haute température, les taux de réaction sont égaux dans les deux sens. Cependant, à basse température, le taux de réaction qui forme le ^{12}CO diminue, ce qui favorise la formation du ^{13}CO à partir du ^{12}CO. Ainsi, à basse température, cela entraîne une baisse du rapport ^{12}CO/^{13}CO. L'opacité des raies pourrait aussi jouer un rôle, n'étant pas forcement la même au centre que dans les parties externes de l'enveloppe.

b) Rapports isotopiques de S

À partir des raies de SO, ^{33}SO et ^{34}SO

On considère les raies suivantes :

a- ^{34}SO 6(5)-5(4)

ν =246.66347 GHz, E_{up}=49.9 K, optiquement mince

En configuration compacte, dans $A_p = 2$", $\int Idv = 0.44 \pm 0.03$ Jy/km s^{-1}

b- ^{33}SO 6(7)-5(6)

ν =259.282276 GHz, E_{up}=47.1 K, optiquement mince

En configuration compacte, dans $A_p = 2$", $\int Idv = 0.20 \pm 0.03$ Jy/km s^{-1}

c- SO 6(5)-5(4)

ν =251.826 GHz, E_{up}=50.7 K, supposée optiquement mince

En configuration médium, dans $A_p = 1.6$", $\int Idv = 11.0 \pm 0.2$ Jy/km s^{-1}

À partir des raies a et b, on déduit l'abondance ^{34}S/^{33}S :

$$X(\frac{^{34}S}{^{33}S}) = \frac{\int I_a dv}{\int I_b dv} \left(\frac{\nu^a}{\nu^b}\right)^{-2} = \frac{0.44}{0.20} \times \left(\frac{246.66347}{259.282276}\right)^{-2} = 2.4 \pm 0.5 \quad (4.26)$$

À partir des raies c et a, on déduit l'abondance ^{32}S/^{34}S :

$$X(\frac{^{32}S}{^{34}S}) = \frac{10.97}{0.44} \times \left(\frac{251.826}{246.66347}\right)^{-2} = 24 \pm 3 \quad (4.27)$$

À partir des raies c et b, on déduit l'abondance ^{32}S/^{33}S :

$$X(\frac{^{32}S}{^{33}S}) = \frac{10.97}{0.20} \times \left(\frac{251.826}{259.282276}\right)^{-2} = 58 \pm 10 \quad (4.28)$$

Il faut faire attention aux rapports $X(\frac{^{32}S}{^{34}S})$ et $X(\frac{^{32}S}{^{33}S})$ qui sont calculés en utilisant une raie SO dont l'opacité est incertaine et dont le flux intégré est obtenu à partir d'une observation en configuration médium, donc différente (même si la zone d'émission est identique et de même taille). Ces valeurs ne sont donc qu'indicatives faute de modèle.

A partir des raies de SiS, Si^{33}S et Si^{34}S

On considère les raies suivantes :

a- Si^{33}S v=0 J=12-11

ν =214.741 GHz, E_{up}=67 K, optiquement mince

En configuration médium, dans $A_p = 0.4$", $\int Idv = 0.20 \pm 0.04$ Jy/km s^{-1}

b- Si^{34}S v=0 J=14-13

ν =247.146 GHz, E_{up}=89 K, optiquement mince

En configuration médium, dans $A_p = 0.8$", $\int Idv = 0.56 \pm 0.06$ Jy/km s^{-1}

c- SiS v=0 J=14-13

ν =254.1032108 GHz, E_{up}=91.5 K, opacité incertaine - optiquement épais ?

En configuration médium, dans $A_p = 0.8$", $\int Idv = 11.7 \pm 0.3$ Jy/km s^{-1}

d- SiS v=0 J=13-12

ν =235.961GHz, E_{up}=79.3 K, opacité incertaine - optiquement épais ?

En configuration médium, dans $A_p = 0.8$", $\int Idv = 9.2 \pm 0.3$ Jy/km s^{-1}

À partir des raies a et b, on déduit l'abondance ^{34}S/^{33}S :

$$X(\frac{^{34}S}{^{33}S}) = \frac{0.56}{0.20} \times \left(\frac{247.146}{214.741}\right)^{-2} = 2.2 \pm 0.6 \tag{4.29}$$

À partir des raies c et b, on déduit l'abondance ^{32}S/^{34}S :

$$X(\frac{^{32}S}{^{34}S}) = \frac{11.7}{0.56} \times \left(\frac{254.1032108}{247.146}\right)^{-2} = 19.7 \pm 2.6 \tag{4.30}$$

À partir des raies d et a, on déduit l'abondance ^{32}S/^{33}S :

$$X(\frac{^{32}S}{^{33}S}) = 38.2 \pm 8.8 \tag{4.31}$$

Ici aussi, les rapports $X(\frac{^{32}S}{^{34}S})$ et $X(\frac{^{32}S}{^{33}S})$ sont calculés en utilisant des raies SO dont l'opacité est incertaine. Les énergies des raies utilisées sont aussi un peu différentes. Ces valeurs ne sont donc qu'indicatives.

Le rapport d'abondance $X(\frac{^{34}S}{^{33}S})$ est à peu près identique à partir des isotopologues de SO (2.4 ± 0.5) et des isotopologues de SiS (2.2 ± 0.6) ce qui rend le résultat robuste et nos hypothèses validées.

Par contre, les rapports $X(\frac{^{32}S}{^{34}S})$ et $X(\frac{^{32}S}{^{33}S})$ diffèrent. Dans le cas des calculs avec S, l'opacité de la raie du SO 6(5)-5(4) est probablement un soucis. En ce qui concerne les calculs à partir du SiS, la même réserve peut s'appliquer aux raies SiS v=0 J=14-13 et SiS v=0 J=13-12. On peut aussi noter que dans ce dernier cas des raies SiS, les niveaux d'énergie utilisés par couple de raie ne sont pas idéaux, pas exactement comparables. Néanmoins, les deux valeurs du rapport $X(\frac{^{32}S}{^{34}S})$ concordent, le rapport $X(\frac{^{32}S}{^{33}S})$ est plus incertain.

c) Rapports isotopiques de Si

On utilise dans ce cas les raies suivantes du SiS et de ses isotopologues rares :

a- SiS v=0 J=14-13

ν =254.1032108 GHz, E_{up}=91.5 K, opacité incertaine - optiquement épais ?

En configuration médium, dans $A_p = 0.8$", $\int Idv = 11.7 \pm 0.3$ Jy/km s^{-1}

b- ^{29}SiS v=0 J=15-14

ν =267.242GHz, E_{up}=102.6 K, optiquement mince

En configuration médium, dans $A_p = 0.8$", $\int Idv = 1.08 \pm 0.16$ Jy/km s^{-1}

c- ^{30}SiS v=0 J=14-13

ν =227.589 GHz, E_{up}=88.3 K, optiquement mince
En configuration médium, dans $A_p = 0.8$", $\int Idv = 0.62 \pm 0.06$ Jy/km s^{-1}

d- ^{30}SiS v=0 J=15-14
ν =262.585GHz, E_{up}=100.8 K, optiquement mince
En configuration médium, dans $A_p = 0.8$", $\int Idv = 0.68 \pm 0.06$ Jy/km s^{-1}

A partir des raies b et d, on déduit l'abondance ^{29}Si/^{30}Si :

$$X(\frac{^{29}Si}{^{30}Si}) = \frac{1.08}{0.68} \times \left(\frac{267.242}{262.585}\right)^{-2} = 1.53 \pm 0.35 \tag{4.32}$$

A partir des raies a et c, on déduit l'abondance ^{28}Si/^{30}Si :

$$X(\frac{^{28}Si}{^{30}Si}) = \frac{11.7}{0.62} \times \left(\frac{254.1032}{227.589}\right)^{-2} = 15.1 \pm 1.8 \tag{4.33}$$

A partir des raies a et b, on déduit l'abondance ^{28}Si/^{29}Si :

$$X(\frac{^{28}Si}{^{29}Si}) = \frac{11.7}{1.08} \times \left(\frac{254.1032}{267.242}\right)^{-2} = 12.0 \pm 2.0 \tag{4.34}$$

La raie du SiS étant peut-être optiquement épaisse, les rapports avec le ^{28}Si ne sont qu'indicatifs.

d) Discussion

L'estimation des rapports isotopiques peut éventuellement aider à contraindre la masse et l'âge de l'étoile, ainsi que l'environnement dans lequel celle-ci est née. La Tab. 4.7 regroupe nos estimations et les valeurs trouvées dans GY Aql, dans d'autres étoiles évoluées et les valeurs que donnent les modèles.

En ce qui concerne Si, les rapports sont à peu près analogues à ceux trouvés dans d'autres objets, même si les valeurs trouvées dans IK Tau par Danilovich et al. (2019) sont plus grandes, mais en contradiction avec Velilla Prieto et al. (2017). Par contre, on note qu'alors que le rapport ^{29}Si/^{30}Si est égal à la valeur solaire et comparable à ce qui a été trouvé dans un échantillon de dix AGB M-type (1.60±0.3), les rapports ^{28}Si/^{29}Si et ^{28}Si/^{30}Si sont inférieurs aux rapports solaires, ce qui traduit une surabondance d'éléments plus lourds.

Pour le soufre, l'abondance du ^{34}S par rapport à l'isotopologue principal est quasi-solaire, en accord avec ce qui est trouvé dans R Dor, W Aql ou IRC-10529, mais plus faible que dans IRC+10011. Par contre, nous avons clairement une surabondance du ^{33}S avec un rapport ^{33}S/^{32}S, 2 à 3 fois plus important que la valeur solaire ou que dans IK Tau. Comparé au ^{34}S, on voit bien que le ^{33}S est deux fois plus abondant que la valeur solaire ou celle trouvée pour IK Tau, 3 fois même plus élevée que dans R Dor.

GY Aql présente donc une abondance d'éléments lourds plus élevée que le Soleil si nous nous basons sur le Si et le S, avec surtout une surabondance de ^{33}S, notamment comparé à IK Tau ou R Dor.

Danilovich et al. (2019) interprètent les faibles rapports ^{28}Si/^{29}Si et ^{28}Si/^{30}Si trouvés par Brunner et al. (2018) dans W Aql comme un indicateur d'une plus grande métallicité de cette étoile, en se basant sur les modèles de Kobayashi et al. (2011). Nous pourrions donc supposer qu'il en est de même pour GY Aql.

Les mécanismes de production de S, Si et de leurs isotopes sont différents :

— ^{28}Si, ^{32}S et ^{34}S sont produits par la fusion de l'oxygène au coeur de l'étoile si celle-ci est suffisamment massive et dans les supernovae de type II par nucléosynthèse explosive (Anders & Grevesse 1989; Hughes et al. 2008). Pour les étoiles non massives, l'abondance de ces éléments reflète donc les abondances du nuage dans lequel les étoiles se sont formées. L'abondance du ^{34}S dépend de la métallicité de l'étoile (Woosley & Weaver 1995).

— ^{29}Si et ^{30}Si sont formés en quantités similaires (rapport d'environ 1.5, comme trouvé ici pour GY Aql) à partir du ^{25}Mg et ^{26}Mg durant la fusion du Ne[12] (Woosley & Weaver 1995) et également durant l'effondrement du cœur des SN de type II, le rapport ^{29}Si/^{30}Si dépendant de la masse du progéniteur (Timmes et al. 1995; Zinner et al. 2006; Kobayashi et al. 2011). On note également que de faibles quantités de ces isotopes rares sont formées à parts égales à partir du ^{28}Si dans les enveloppes de He en fusion.

A priori le rapport ^{29}Si/^{30}Si ne varie pas durant la phase AGB et doit donc refléter lui aussi les conditions du nuage de formation de l'étoile. Toutefois, l'abondance de ces isotopes peut augmenter durant la phase AGB par capture lente des neutrons (Zinner et al. 2006, s-process). Aussi, la surabondance de ^{29}Si et ^{30}Si trouvée dans GY Aql peut être interprétée comme liée à l'enrichissement du nuage natal par une explosion de supernova.

L'abondance de l'isotope rare ^{33}S peut augmenter durant la phase AGB par le processus de capture lente des neutrons (s-process) selon Hughes et al. (2008) et Danilovich et al. (2020), mais par contre, les rapports ^{32}S/^{33}S et ^{32}S/^{34}S restent à peu près constants (Karakas & Lugaro 2016). Un gradient en fonction de la distance galactocentrique est observé pour ^{32}S/^{33}S et ^{32}S/^{34}S mais pas pour ^{34}S/^{33}S (Yan et al. 2023, environ 4.35). Nous pouvons donc avancer l'hypothèse que la surabondance de ^{33}S vient d'une capture lente des neutrons plus longue dans le temps du fait que GY Aql serait plus évoluée que IK Tau ou R Dor.

12. ${}^{22}_{10}\mathrm{Ne} + {}^{4}_{2}\mathrm{He} \rightarrow {}^{25}_{12}\mathrm{Mg} + \mathrm{n}$, les processus-s sont des processus très longs, sur plusieurs milliers d'années qui se déroulent pendant la phase AGB, ce qui permet de former des éléments plus lourds.

Ratio	GY Aql	IK Tau[a]	R Dor[b,c,d]	W Hya[e]	W Aql[f,g]	+10011[f]	-10529[f]	Solar[h]	Modèle[i]
$^{28}Si/^{29}Si$	12 ±2*	25 ±10	12.6	-	11.6			19.7	?
		11							
$^{28}Si/^{30}Si$	15.1 ±1.8*	40 ±8	20.0	-	13			29.9	?
		16							
$^{29}Si/^{30}Si$	1.5 ±0.3	1.7 ±0.3	1.58	0.99	1.5±0.5	1.7±0.1	1.2±0.1	1.51	?
$^{32}S/^{33}S$	58 ±10*	190 ±35	-	-	-			125	126
	38.2 ±8.8*								
$^{32}S/^{34}S$	24 ±3*	37 ±14	21.6	-	16.7±5.6	9±5	25±12	22	?
	19.7 ±2.6*	12.5							
$^{34}S/^{33}S$	2.4 ±0.5	5.3 ±0.8	7.8 ±0.7	-	2.5±1.9			5.5	5.2
	2.2 ±0.6								

TABLE 4.7 – Rapports isotopiques moyens dérivés de SiS et SO dans GY Aql, avec comparaison aux valeurs de la littérature pour le Soleil, d'autres étoiles AGB et le modèle de N. Lagarde (Lagarde et al. 2012) (pour une étoile de 6 $M_\odot$ au début de l'AGB). Le signe "⋆" indique une incertitude liée à l'opacité de la raie utilisée pour le calcul.
Notes.[a] Danilovich et al. (2019) pour la première valeur et Velilla Prieto et al. (2017) pour la deuxième estimation, [b] De Beck & Olofsson (2018), [c] Danilovich et al. (2016), [d] Decin et al. (2018), [e] Peng et al. (2013), [f] Wallström et al. (2024), [g] Brunner et al. (2018), [h] Asplund et al. (2009), [i]Lagarde N. *priv. comm.*

L'abondance du ^{33}S est assez différente entre GY Aql et IK Tau. Comme évoqué précédemment, les s-process et l'âge de l'étoile pourraient expliquer cette différence. Grâce à des modèles d'évolution stellaire, nous voulons essayer de comprendre cette variation, en identifiant ce qui pourrait impacter le changement des rapports ^{32}S/^{33}S et ^{34}S/^{33}S. Les caractéristiques des deux étoiles sont données dans la Tab. 4.8.

	GY Aql	IK Tau[(a)]
L [$L_\odot$]	7000[(b)]	7700
R [mas, cm]	11, 9.05e13[(c)]	10, 3.8e13
$\dot{M}$ [$M_\odot$/an]	5×10^{-5} [(d)]	5×10^{-6}
T [K]	2900[(e)]	3100
M [$M_\odot$]	3-6[(f)]	1-1.5

TABLE 4.8 – Paramètres des deux étoiles : GY Aql et IK Tau
Notes.[(a)] Decin et al. (2018), [(b)] calculée à partir de la SED observée et à la distance d= 410 pc, [(c)] observation de M. Montargès avec PIONIER, [(d)] explication en Sect. 4.4.2.3, [(e)] Andriantsaralaza et al. (2022), [(f)] approximation sur le diagramme HR.

Dans la Tab. 4.8, nous remarquons que les masses de ces étoiles sont différentes et assez incertaines. Les rapports prédits par les modèles semblent ne pas changer drastiquement durant la vie de l'étoile. En effet, avec la base de données de modèles d'évolution stellaire FRUITY [13] (FUNs Repository of Updated Isotopic Tables & Yields Karakas & Lugaro 2016), après le second dredge-up, nous retrouvons les rapports isotopiques solaires, ce qui nous indique que ces rapports ne varient pas ou peu. Avec le modèle STAREVOL et les résultats de Lagarde et al. (2012), nous voyons une très faible variation lors du second dredge-up et pendant les pulses thermiques (3ème dredge-up). En effet, pendant ce dragage, l'enveloppe convective s'enfonce dans l'étoile et fait remonter des éléments chimiques vers la surface, ce qui peut donc faire varier les rapports isotopiques du ^{32}S, ^{33}S et ^{34}S. Lorsque l'hélium est épuisé au centre de l'étoile, sa combustion s'enclenche dans une coquille entourant le noyau dégénéré de carbone et d'oxygène. Les couches superficielles se dilatent et l'enveloppe convective mélange les couches externes avec de la matière transformée par la combustion de l'hydrogène et de l'hélium, entraînant une modification des abondances de surface pour certains éléments chimiques. Ce phénomène est appelé le second dredge-up. La profondeur maximale de ce second dredge-up est représentée par les lignes pointillées sur la Fig. 4.13 et dépend de la masse et de la métallicité de l'étoile [14]. Ceci pourrait induire une variation des abondances de surface en fonction de ces deux propriétés stellaires. Cependant, en utilisant les modèles évolutifs publiés par Lagarde et al. (2012), nous avons conclu que ces variations sont très faibles, voire négligeables, et ne permettent pas d'expliquer les différences observées dans les rapports ^{32}S/^{33}S et ^{34}S/^{33}S entre ces deux étoiles.

À l'avenir, nous pourrions explorer plusieurs pistes à l'aide de modèles d'évolution stellaire. Nous pourrions étudier si la rotation ou d'autres processus de transport des éléments chimiques à l'intérieur des étoiles peuvent modifier les profils internes de ces éléments. Cela nous permettrait de déterminer si les différences observées dans les rapports

13. http://fruity.oa-teramo.inaf.it/modelli.pl à partir du code d'évolution stellaire FUNs (FUll Network stellar)
14. Pour nos étoiles, nous considérons la métalicité solaire Z=0.014

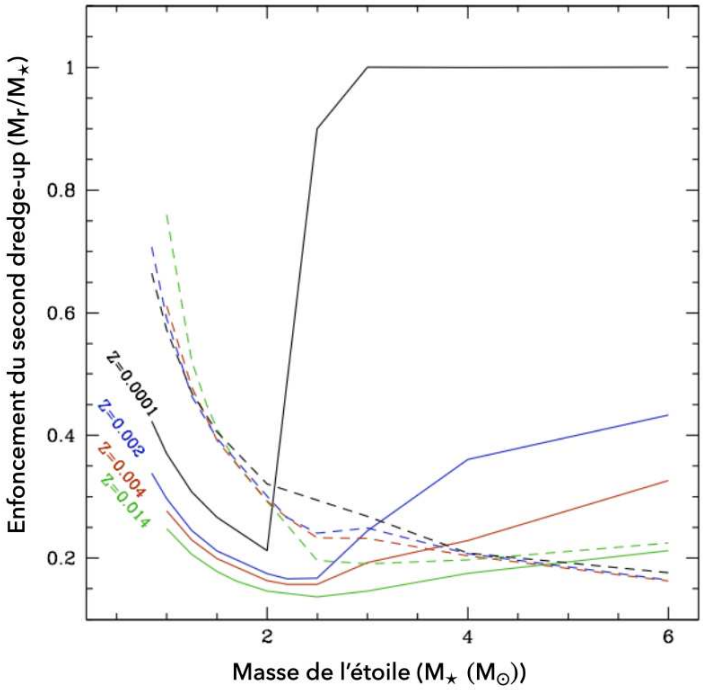


FIGURE 4.13 – Profondeur maximale en masse de l'enveloppe convective par rapport à la masse stellaire totale atteinte (de 0 = coeur à 1 = surface) en fonction de la masse stellaire initiale. Les courbes pleines correspondent au premier dredge-up et celles en pointillées au second lors du premier et du second dragage, pour différentes métallicités, comme indiqué par les couleurs des courbes. Thèse de Lagarde (2012), tiré des modèles de Lagarde et al. (2012).

$^{32}S/^{33}S$ et $^{34}S/^{33}S$ sont la signature d'un mélange particulier. Ce point reste un aspect ouvert de ma thèse, à explorer en collaboration avec des modélisateurs.

4.4.2 Modélisation avec MCFOST

4.4.2.1 Paramètres initiaux

Nous voulons reproduire les observations décrites précédemment. Il nous faut donc déterminer les paramètres initiaux que nous allons mettre dans le modèle pour caractériser l'étoile et son environnement. Pour la quantité de poussière, nous utilisons l'équation 4.7, avec initialement $R = 100$. Nous prenons $\dot{M} = 4.1 \times 10^{-6} M_\odot$/an, $v_e = 18$ km/s (Gottlieb et al. 2022). r_e, la taille de l'émission, est prise à partir des données observationnelles (10" pour le CO). Dans le fichier de paramètres de MCFOST, nous rentrons la vitesse turbulente, $v_{\rm turb} = 1.5$ km/s (Gottlieb et al. 2022). Il faut aussi rentrer le profil de la raie, en particulier sa largeur : la FWHM (*full width at half maximum*, la largeur à mi-hauteur) qui dépend de la vitesse thermique et turbulente :

$$\mathrm{FWHM} = 2\sqrt{2\ln(2\sigma)} \tag{4.35}$$

avec σ :

$$\sigma = \sqrt{v_{\rm ther}^2 + v_{\rm turb}^2} \tag{4.36}$$

La vitesse turbulente a été introduite juste au-dessus. La vitesse thermique est définie

par $v_{\rm ther} = \sqrt{2kT/m}$ qui vaut 1.2 km/s Gottlieb et al. (2022) (avec m la masse de la molécule). Au final, nous obtenons une largeur à mi-hauteur de 3.28 km/s.

Distance et Rayon

La distance de l'étoile et son rayon sont des paramètres cruciaux pour construire un modèle réaliste et significatif. Au cours de ces dernières années, une tension critique sur la distance et la taille angulaire de l'étoile est apparue. En utilisant 152 pc mesuré par Gaia DR2, et en appliquant la loi de Stefan-Boltzmann, Gottlieb et al. (2022) ont calculé le rayon physique de l'étoile à partir des données du continuum radio d'ATOMIUM à 1mm. Ils ont ainsi estimé une taille angulaire de 20 mas, mais cette estimation prend également en compte une partie de l'enveloppe de poussières. Une autre mesure indépendante utilisant les données ATOMIUM a estimé à 14 mas le rayon angulaire stellaire (A. Richards, *priv. comm.*) mais elle est probablement encore surestimée. En adoptant cette distance de 152 pc dans notre modèle, la SED dérivée ne correspond pas à l'observation (voir Fig. 4.14, courbe jaune). L'utilisation de la distance de Gaia DR3, 1965^{+1322}_{-952} pc (Gaia Collaboration, 2023) ne correspond pas non plus à l'observation. Les erreurs sont considérables et même en prenant en dessous de la valeur estimée (1400 pc), nous sommes loin de l'observation (voir Fig. 4.14, courbe rouge). Ces grandes incertitudes sur la distance proviennent de la variabilité de l'étoile, de l'enveloppe de poussière qui l'entoure et de sa grande taille angulaire. En utilisant l'estimation du diamètre angulaire de 20 mas et 152 pc, nous obtenons une valeur irréaliste pour le rayon d'une étoile AGB, environ 800 $R_\odot$. Avec 14 mas, nous avons $R = 320$ $R_\odot$, ce qui est plus réaliste. Nous utiliserons ce rayon comme valeur initiale dans les premiers tests avec MCFOST.

Fin 2022, Andriantsaralaza et al. (2022) ont proposé une nouvelle estimation de la distance de 410 ± 40 pc, à partir d'une nouvelle relation période-luminosité bolométrique pour les variables Mira riches en oxygène de la Galaxie. Cette loi est dérivée d'un modèle par transfert radiatif `DUSTY` de l'émission stellaire et de l'émission de poussières.

$$M_{\rm bol} = (-3.31 \pm 0.24)[\log P - 2.5] + (-4.317 \pm 0.060). \tag{4.37}$$

Avec P la période de pulsation de l'étoile. Cette relation nous donne la magnitude bolométrique, qui est directement reliée à la luminosité.

Pour estimer les paramètres de l'étoile, son rayon, sa distance, sa luminosité, nous pouvons utiliser un processus itératif pour se rapprocher au mieux d'une solution cohérente et comparable aux observations, ces paramètres étant tous liés. Nous pouvons récupérer la luminosité de l'étoile en partant de sa SED observée sur Vizier [15] :

$$L = 4\pi r^2 \int \text{SED} \tag{4.38}$$

avec la SED en W.m^{-2}.μm^{-1}. Nous pouvons comparer cette luminosité avec celle trouvée par MCFOST pour l'étoile modélisée. Le code nous donne une luminosité de 7645 $L_\odot$, et pour la SED observée, à 152, 410 et 1400 pc, nous obtenons 1049, 7639, 89069 $L_\odot$. Notre modèle est donc cohérent avec la méthode utilisée dans Andriantsaralaza et al. (2022) (voir Fig. 4.14, courbe verte) et une distance de 410 pc. En utilisant donc cette nouvelle distance, la sortie de notre modèle MCFOST s'ajuste mieux à l'observation (Fig.

15. http://vizier.cds.unistra.fr/vizier/sed/

4.14).

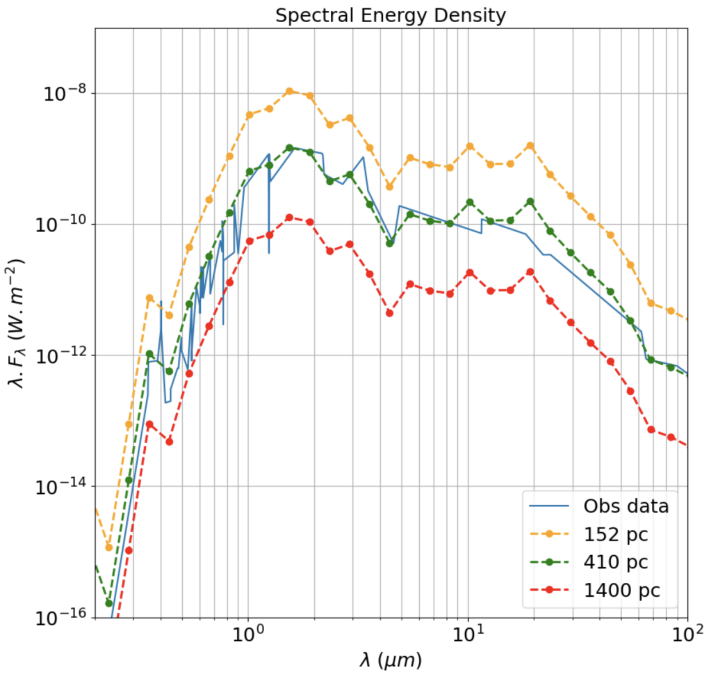


FIGURE 4.14 – Comparaison des SED modélisées avec celle observée. La SED en bleue correspond à celle observée. Les courbes en jaune, vert et rouge correspondent aux SED modélisées par MCFOST pour différentes distances : à 152, 410 et 1400 pc avec $T_{\rm eff} = 3100$ K et $R = 320$ R$_\odot$.

Une mesure plus récente par M. Montargès (*priv. comm.*) avec l'instrument PIONER au VLTI donne un diamètre angulaire de 11 mas ce qui donne avec $d = 410$ pc, un rayon de 500 $R_\odot$ que nous utiliserons désormais dans le code. Avec ces nouveaux paramètres : 11 mas, cela donne, avec $d = 410$ pc, un rayon $R = 500 R_\odot$ pour $T_{\rm eff} = 2900$ K (Andriantsaralaza et al. 2022). Nous pouvons essayer de contraindre de nouveau la distance avec différents tests grâce à MCFOST en regardant la SED modélisée et la comparant à l'observation.

La Fig. 4.15 nous montre les différents tests effectués. Ils nous ont permis de converger vers une distance de 550 pc. A partir de la loi de Stephan-Boltzmann, de la SED observée et de la mesure de 11 mas pour le diamètre angulaire, nous estimons le rayon à 600 R$_\odot$. Ce résultat peut être un peu élevé pour une étoile AGB.

Taille du Modèle

La première cellule du modèle est le premier rayon auquel les grains condensent $R_c = R_{\rm in}$. Pour la forsterite, qui condense en premier (voir Tab. 4.1), $R_c = 2.24 R_\star$, ce qui nous donne dans le cas de GY Aql $R_{\rm in} = 5.29$ UA et $R_{\rm out} = 317$ UA en respectant la grille du modèle hydrodynamique. Les cartes ALMA étant plus grandes que ça, il faudra agrandir le modèle. Cela sera présenté dans la partie suivante. Les rayons dans MCFOST doivent être espacés de manière logarithmique.

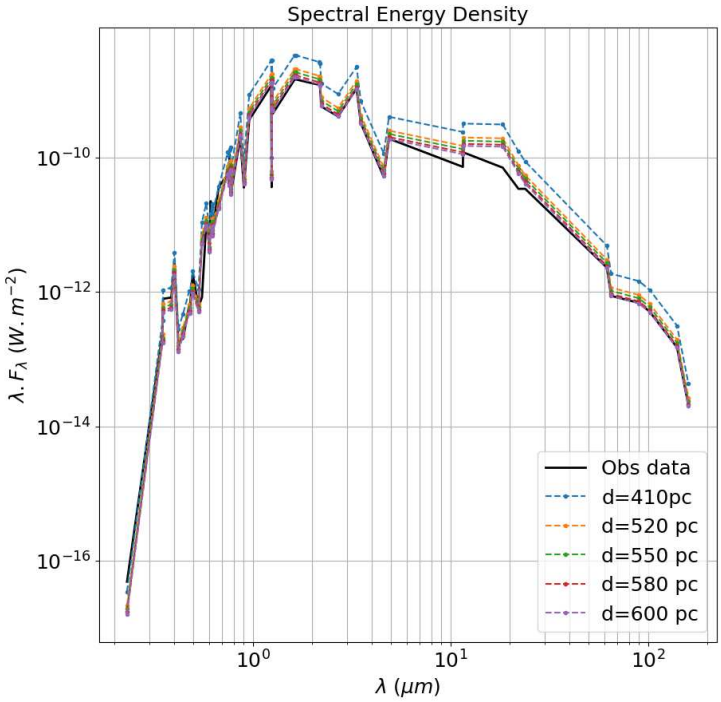


FIGURE 4.15 – Comparaison des SED modélisées avec celle observée. La courbe noire en trait plein correspond à la SED observée. Les courbes en couleur correspondent aux SED modélisées par MCFOST avec les derniers paramètres pour l'étoile : $T_{\rm eff} = 2900$ K et $R = 500$ R$_\odot$ pour différentes distances.

4.4.2.2 Premier modèle et résultats

Les premiers tests avec MCFOST ont été faits avec un taux de perte de masse de 4.1×10^{-6} M$_\odot$/an, la valeur qui a été calculée dans Gottlieb et al. (2022), et $v_\infty = 18$ km/s pour écrire le fichier d'abondance. A partir des équations 4.16 et 4.17, nous avons $r_p = 8.03 \times 10^{16}$ cm et $\alpha = 2.53$.

La quantité de poussière initialement mise dans le code est calculée à partir de l'équation 4.7 avec le taux de perte de masse précédemment cité, et $R = 1000$, $M_d = 1.4 \times 10^{-5}$M$_\odot$ [16]. Nous essayerons par la suite de contraindre ce paramètre avec le modèle en le comparant aux observations. La quantité de poussière, comme le ratio gaz/poussière sont des paramètres variables et modifiables en entrée de MCFOST. Il s'agit donc de trouver un jeu de paramètres qui reproduira les observations. Le meilleur jeu de paramètres nous permettra d'estimer R et M_d, et donc, le taux de perte de masse de l'étoile.

Nous pouvons déjà tester quelques valeurs pour ces deux paramètres pour voir leur influence sur les spectres modélisés. Un test antérieur avait été fait avec le modèle de distribution de poussières avant agrandissement. Nous avons trouvé un jeu de paramètres qui reproduit l'observation jusqu'à un certain rayon, la limite du modèle hydrodynamique. Ce résultat est montré en Fig. 4.16. Nous avons utilisé $R = 1500$ et $M_d = 5 \times 10^{-6}$M$_\odot$.

On représente en Fig. 4.16 le résultat du modèle initial (courbe verte) pour l'émission

16. Nous avons utilisé $R = 1000$, car avec $R = 100$, on avait une quantité de poussière plus importante avec une SED en sortie de MCFOST qui ne correspondait pas à la SED observée.

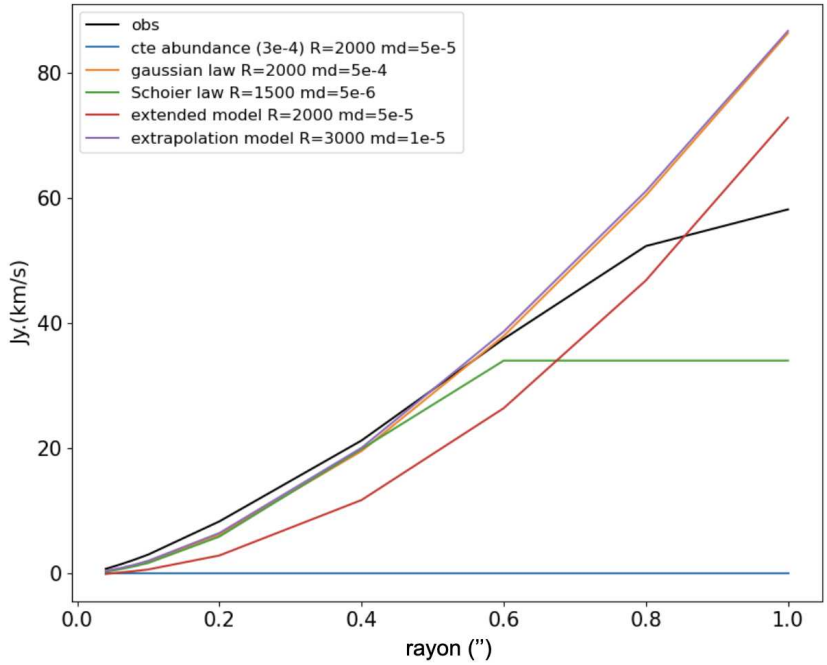


FIGURE 4.16 – Émission du ^{12}CO, aire de spectre en Jy.km/s en fonction du rayon dans lequel on intègre. La courbe noire correspond à l'observation ALMA en configuration extended. La courbe verte correspond au modèle hydrodynamique avant son agrandissement. La courbe bleue correspond à un modèle avec une abondance constante. Les autres courbes sont celles avec le modèle hydrodynamique agrandi, avec des paramètres R et M_d différents.

du ^{12}CO comparé à l'observation en noir à différentes distances de l'étoile dans l'enveloppe. On voit qu'à partir de 0.6", le modèle décroche par rapport à l'observation, sous forme d'un plateau. La distribution de poussières étant proportionelle à celle du gaz moléculaire (avec le rapport gaz sur poussière R), nous en déduisons que notre modèle est trop petit : la taille de la simulation actuelle va de 1 à 60 R_c (1 arcsec), elle n'est pas adaptée. Nous allons donc agrandir le modèle.

Le fichier va de 1 à 60 $R_{\rm in}$, avec une distance de 550 pc et $R_{\rm in} = 5.29$ UA, ce qui nous donne $R_{\rm out} = 317$ UA. Or, les cartes observationnelles vont jusqu'à 13120 UA (carte mid : 600 x 600 pixels, la carte fait 24").

Un premier test avait été fait en agrandissant simplement la spirale initiale d'un certain facteur pour obtenir la taille voulue (courbe orange de la Fig. 4.17). Ce résultat n'était pas satisfaisant aux petites échelles et comme on peut le voir en Fig. 4.17, le profil de densité proche de l'étoile ne correspondait pas au modèle qui reproduit l'observation (courbe bleue dans les profils de densité et Fig. 4.16 courbe verte avec le plateau).

Pour agrandir le modèle, il faut espacer les rayons de façon logarithmique, tout en gardant le même espacement dans les 64 premiers rayons de la simulation initiale, et donc trouver le nombre de rayons à échantillonner. Si on considère a_0 le rayon initial ($R_{\rm in}$), cela revient à chercher une suite géométrique de raison c (qui vaut 1.06606, calculée à partir de l'échantillonnage précédent), on cherche quel N (nombre de rayon) est nécessaire pour atteindre a_N, notre rayon final (13120 UA) :

$$a_N = a_0 c^N \tag{4.39}$$

$$N = \frac{\ln(a_N/a_0)}{\ln(c)} \tag{4.40}$$

Il nous faut donc $N = 122$, la nouvelle taille de notre simulation. Il faut alors extrapoler la spirale du rayon 64 au rayon 122. Nous avons ainsi essayé de reproduire les structures que l'on voit dans les observations. La Fig. 4.18 illustre la reproduction de la spirale extrapolée en ^{12}CO. Les traits de couleurs permettent de mettre en évidence les structures reproduites dans la spirale extrapolée à comparer avec les structures vues dans celle observée (image de gauche). On va maintenant appliquer ce modèle étendu au ^{12}CO.

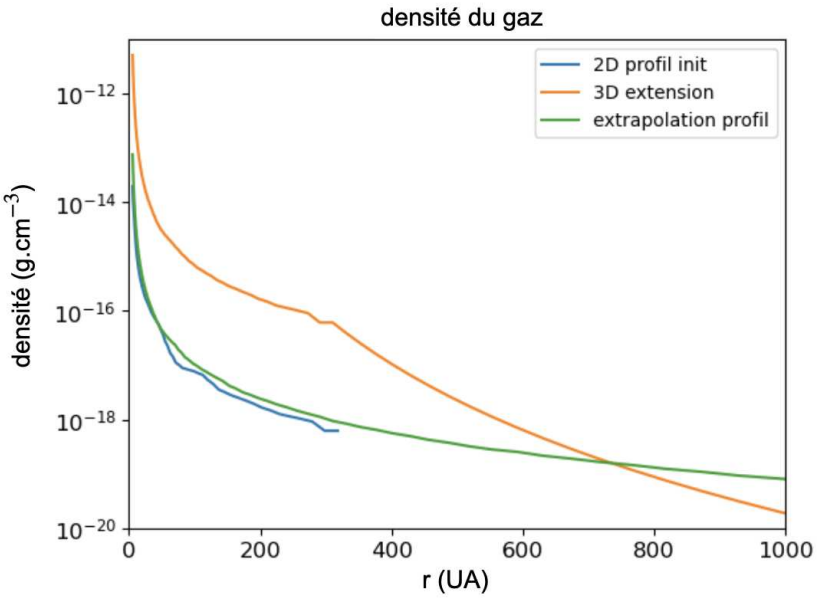


FIGURE 4.17 – Profils de densité en fonction du rayon. La courbe bleue correspond au modèle initial avant agrandissement, la orange à celui avec un facteur d'agrandissement des structures et en vert le modèle extrapolé pour correspondre aux observations.

Nous avons donc agrandi le modèle hydrodynamique, ce qui donne les courbes rouge et violette sur la Fig. 4.16. Ces tests, qui reproduisent la configuration étendue ALMA nous donnent $R = 3000$ et $M_d = 1 \times 10^{-5}$M$_\odot$ ou $R = 2000$ et $M_d = 5 \times 10^{-5}$M$_\odot$. Nous pourrions conclure sur un jeu de paramètres. Mais, quand nous les appliquons aux configurations médium et compacte (qui donnent des cartes plus grandes), nous obtenons des résultats différents, comme nous pouvons le voir en Fig. 4.19.

La Fig. 4.19 nous montre les résultats de MCFOST pour l'émission du CO avec différents R et M_d. Ceux qui donnaient un bon résultat (qui reproduit l'observation) en étendue ($R = 2000$ et $M_d = 5 \times 10^{-5}$ M$_\odot$) sont représentés en bleu et nous voyons que ceux-ci ne permettent pas de reproduire l'observation. La Fig. 4.16 (configuration étendue) et la Fig. 4.19 (médium et compacte) montrent qu'un jeu de paramètres différent est nécessaire pour fitter les différentes configurations. Les configurations médium et compacte (même taille de cartes, mais avec une résolution différente) donnent le même résultat. Cela nous

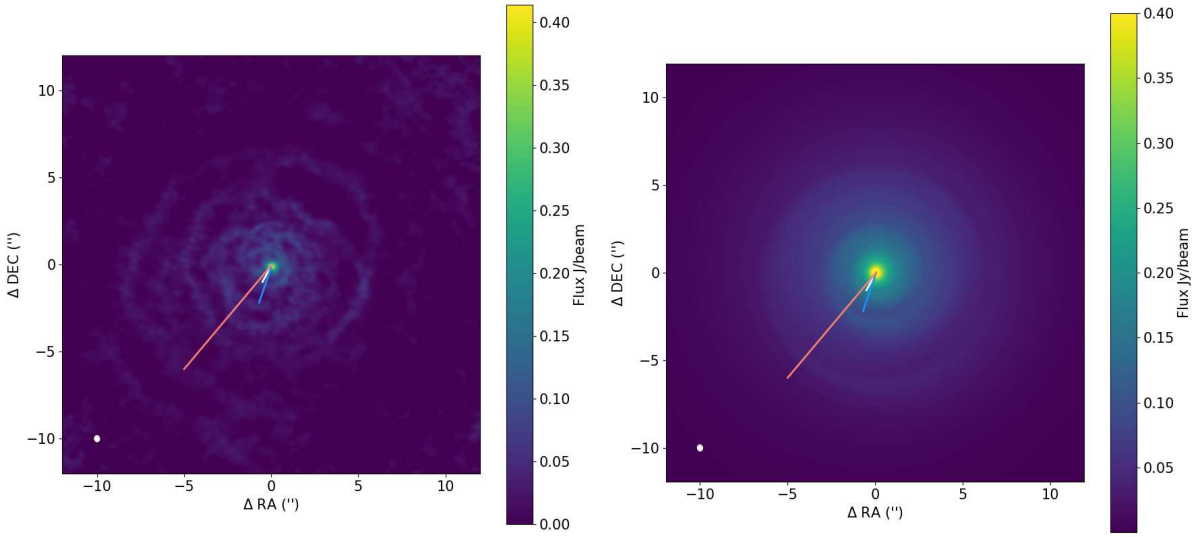


FIGURE 4.18 – **Gauche :** Observation ATOMIUM de la raie ^{12}CO J=2-1 en configuration mid. **Droite :** Émission du ^{12}CO J=2-1 par MCFOST avec en entrée la nouvelle distribution de poussière extrapolée. Les traits rouge et bleu sont là pour représenter la position des structures que nous voulons reproduire.

amène à nous demander s'il est possible de trouver un jeu de paramètres qui conviendrait à toutes les configurations.

Quand nous calculons l'aire intégrée, nous récupérons le fichier "cube" de MCFOST. Ce fichier nous fournit une image suivant une direction. Nous avons donc testé si en regardant dans d'autres directions, nous reproduisons mieux la courbe d'aire intégrée. Ce n'est pas le cas, les résultats restent très similaires et sont présentés en annexe B.1. Un autre test à faire est de faire varier α et r_p dans la loi d'abondance utilisée. Dans Mamon et al. (1988), nous voyons qu'une gamme de valeurs pour α et r_p est possible pour notre étoile (selon son taux de perte de masse), et de plus avec les erreurs faites sur le taux de perte de masse, les valeurs de ces deux paramètres ne sont pas exactes et peuvent légèrement varier. Nous avons donc aussi testé si une variation légère des paramètres pour la loi d'abondance change les résultats en sortie de MCFOST. Les comparaisons des résultats sont en annexe B.2 et nous montrent que ceux-ci influent peu sur les modèles. Nous pouvons donc jouer sur R et M_d pour reproduire les observations.

4.4.2.3 Étude paramétrique pour la détermination de paramètres

Nous allons tester différents rapports $R = 100, 500, 1000, 1500, 2000, 2500$ et 3000, et quantités de poussière $M_d = 1e^{-6}$, $5e^{-6}$, $1e^{-5}$, $5e^{-5}$ et $1e^{-4}$ $M_\odot$. Pour quantifier l'efficacité d'un modèle, nous calculons la *root mean square error*, RMSE, qui quantifie l'écart entre le modèle et l'observation :

$$\mathbf{RMSE} = \sqrt{\frac{\Sigma x_{m,i} - x_{o,i}}{N}} \tag{4.41}$$

avec N le nombre de points, i allant de 1 à N, x_m la valeur de la courbe du modèle, x_o la valeur de la courbe observationnelle. 35 (5x7) modèles ont donc été lancés et l'erreur à l'observation quantifiée. Les résultats sont en Tab. 4.9.

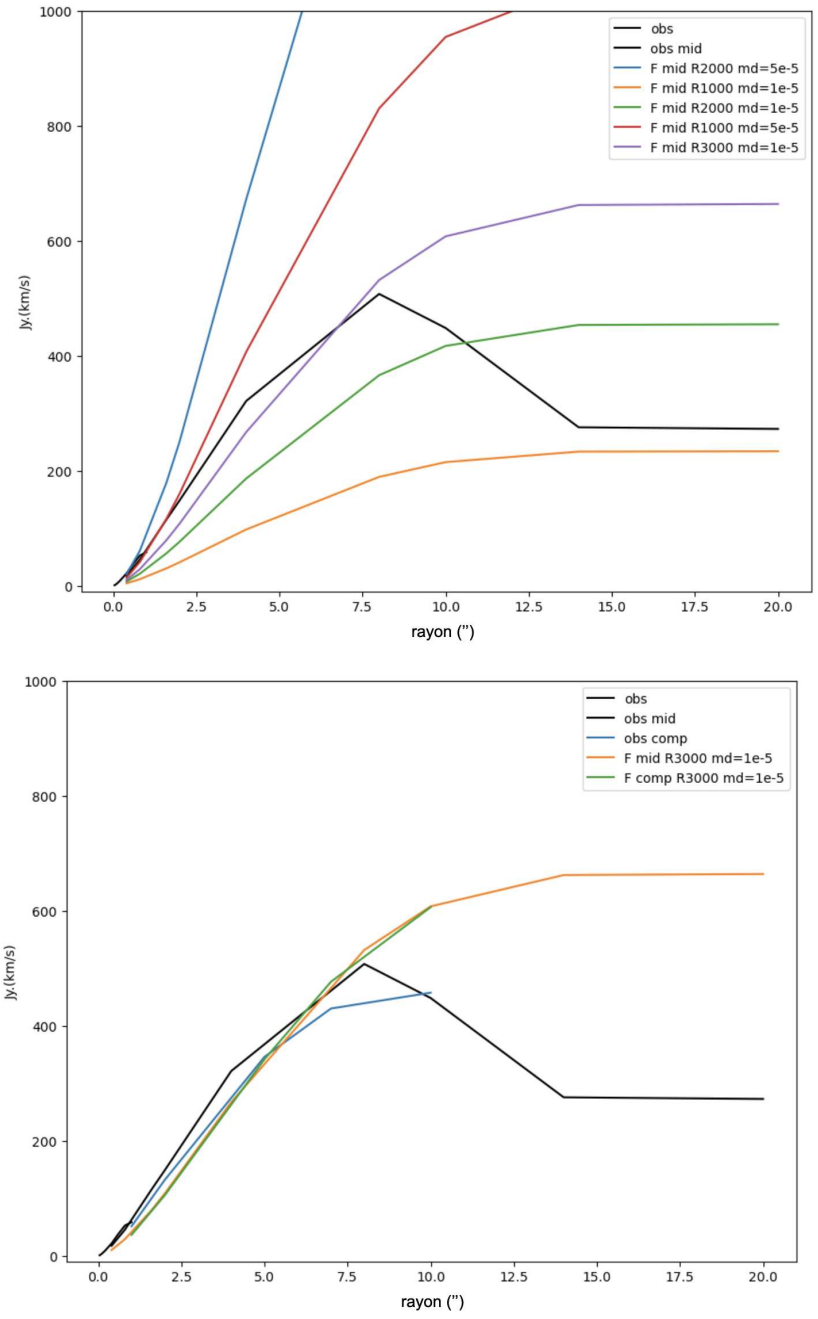


FIGURE 4.19 – Émission du ^{12}CO, aire de spectre en Jy.km/s en fonction du rayon dans lequel on intègre. Les courbes noires correspondent aux observations. **Haut :** Résultats en configuration médium. **Bas :** Résultats en configuration compacte. Les courbes de couleurs sont les résultats avec différents jeux de paramètres R et M_d.

Nous pouvons essayer de contraindre la quantité de poussières M_d dans l'enveloppe à partir de la SED. Plus il y a de poussières, plus elles vont émettre. Nous allons donc ajuster la quantité de poussières pour correspondre au mieux à l'observation. On calcule la RMSE pour chacune des 5 valeurs de M_d testées (R ne faisant pas varier l'émission des poussières).

La solution avec $M_{dust} = 1e^{-6}$ $M_\odot$ semble plus satisfaisante. Cependant, tous les modèles donnent un résultat acceptable. En Fig. 4.20, nous voyons la SED du meilleur modèle

M_{dust} ($M_\odot$)	$1e^{-6}$	$5e^{-6}$	$1e^{-5}$	$5e^{-5}$	$1e^{-4}$
RMSE	$4.93e^{-11}$	$5.51e^{-11}$	$6.29e^{-11}$	$1.13e^{-10}$	$1.47e^{-10}$

TABLE 4.9 – RMSE entre observations et modèles pour différentes valeurs de M_{dust}.

(M_{dust} = $1e^{-6}$ $M_\odot$) et du "pire" (M_{dust} = $1e^{-4}$ $M_\odot$). Les deux courbes sont proches de l'observation. Elles ne vont donc pas suffire à discriminer une solution.

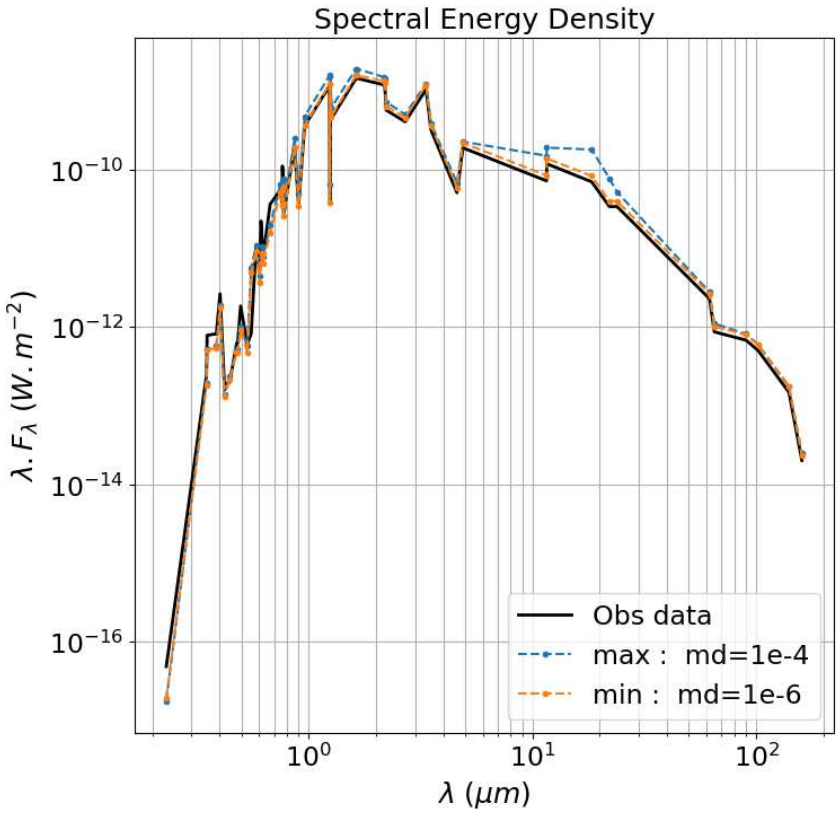


FIGURE 4.20 – SED $\lambda.F_\lambda$ [W.m^{-2}] en fonction de la longueur d'onde λ en μm. La courbe noire correspond à l'observation. La courbe orange est le résultat du modèle correspondant le mieux à l'observation (M_d = $1e^{-6}$ $M_\odot$). La courbe bleue est le résultat du modèle le plus éloigné de l'observation (M_d = $1e^{-4}$ $M_\odot$).

Nous pouvons explorer une autre sortie du code pour essayer de contraindre des paramètres. Nous allons utiliser les émissions du ^{12}CO. Nous comparerons l'aire intégrée du spectre dans plusieurs rayons, en configuration médium et étendue. Comme vu précédemment, les deux configurations fittent aux observations avec des paramètres différents. Nous avons donc mené une nouvelle étude afin d'identifier un jeu de paramètres offrant le meilleur compromis pour les deux configurations en faisant varier R et M_{dust}.

La Fig. 4.21 présente les résultats de cette étude. Pour les deux configurations, nous comparons les courbes des aires intégrées en fonction du rayon. Plus la valeur s'approche du bleu, plus le modèle est proche de l'observation.

Nous avons décidé de prendre un compromis avec la case encadrée en rouge. Ce ne sont pas les jeux de paramètres qui donnent les meilleurs résultats (cases vertes) pour

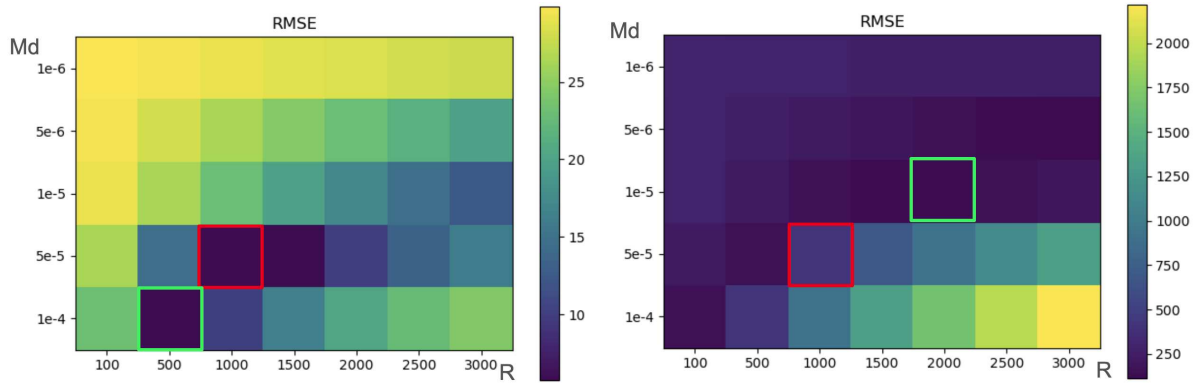


FIGURE 4.21 – RMSE entre les courbes d'aire intégrée en fonction du rayon de l'observation et des modèles. Les cases vertes correspondent au meilleur modèle de chaque configuration. Les cases rouges correspondent au compromis fait entre les deux configurations. **Gauche :** En configuration étendue. **Droite :** En configuration médium.

chacune des configurations mais donnent un résultat proche de l'observation. Le jeu de paramètres final nous donne : $R = 1000$ et M_d =5e^{-5} $M_\odot$. À partir de l'équation 4.7, nous pouvons recalculer le taux de perte de masse de l'étoile, comme on le voit en Tab. 4.10.

M_{dust} \ R	100	500	1000	1500	2000	2500	3000
1e-6	6.520e-8	3.260e-7	6.520e-7	9.780e-7	1.304e-6	1.630e-6	1.956e-6
5e-6	3.260e-7	1.630e-6	3.260e-6	4.890e-6	6.520e-6	8.150e-6	9.780e-6
1e-5	6.520e-7	3.260e-6	6.520e-6	9.780e-6	1.304e-5	1.630e-5	1.956e-5
5e-5	3.260e-6	1.630e-5	3.260e-5	4.890e-5	6.520e-5	8.150e-5	9.780e-5
1e-4	6.520e-6	3.260e-5	6.520e-5	9.780e-5	1.304e-4	1.630e-4	1.956e-4

TABLE 4.10 – Grille de paramètres testés en R et M_{dust}. Les valeurs sont le taux de perte de masse en $M_\odot$/an calculés à partir des paramètres. Les cases bleues correspondent aux meilleurs modèles (corrélation avec l'aire intégrée du CO) en configuration étendue, en rouge pour la configuration médium et en violet là où les des deux configurations fonctionnent. La case encadrée en rouge correspond à notre compromis.

Le choix de paramètres adoptés donne $\dot{M} = 3.26 \times 10^{-5}$ $M_\odot$, une nouvelle estimation pour le taux de perte de masse de l'étoile. Ainsi nous pouvons reconstruire un fichier d'abondance pour le ^{12}CO avec cette nouvelle valeur, qui sera utilisée pour tous les prochains modèles. En utilisant les équations 4.17 et 4.16, nous obtenons $\alpha = 3.17$ et r_p =3.71e+17 cm respectivement. Avec ces paramètres, nous reproduisons le flux intégré observé (voir Fig. 4.23 courbe bleue pour le "compromis", qui est tout de même moins bon que la courbe orange qui correspond au meilleur modèle pour la configuration étendue) mais également la structure en spirale que nous avions montré en Fig. 4.11 dans les cartes de moment 0. Ces structures sont aussi visibles dans les cartes en vitesse. Nous comparons en Fig. 4.22 l'observation et la carte modélisée en configuration médium à la vitesse de la source. Nous voyons que nous reproduisons la structure spiralée. Même si précédemment et en annexe B.1, il est montré que la direction de l'image ne modifie que légèrement le flux, il influe grandement les formes de la CSE dans les cartes d'intensité. Le modèle hydrodynamique implémenté pour prendre en compte la binarité nous semble nécessaire pour expliquer ces structures.

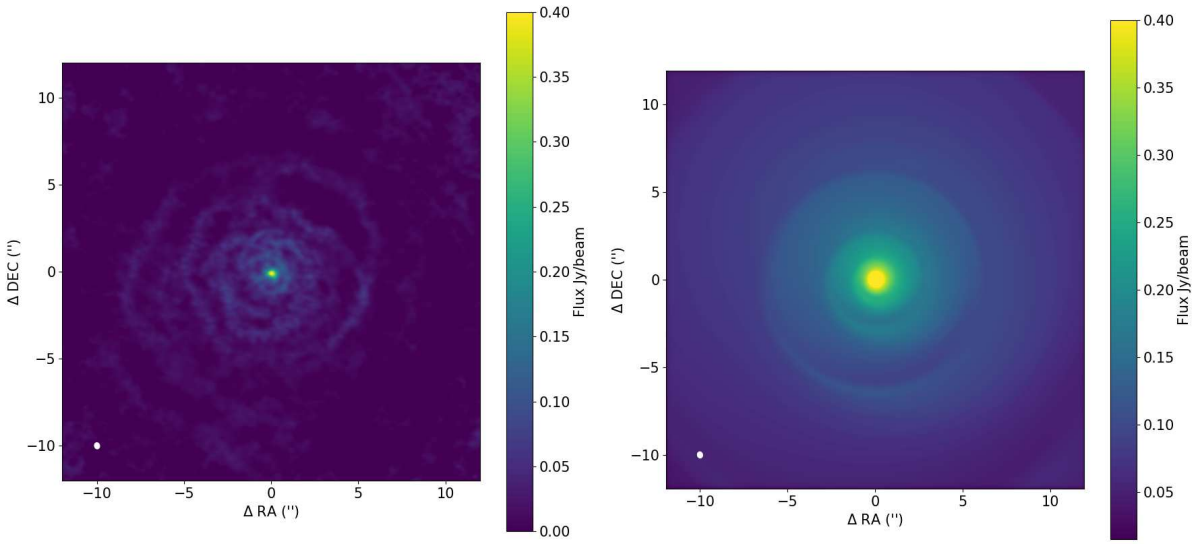


FIGURE 4.22 – Comparaison de l'observation (à gauche) et du modèle (à droite) de la carte d'intensité d'émission du ^{12}CO à v=0 km/s, en configuration médium.

4.4.2.4 Rapport isotopique et autres molécules carbonées

CO : Le ^{12}CO est une molécule très abondante dans les enveloppes circumstellaires. Nous pouvons aussi modéliser ses isotopologues, en particulier le ^{13}CO. Pour son abondance, on peut utiliser la même que celle du ^{12}CO, en la divisant par 13 (Ramstedt & Olofsson 2014, rapport 12/13 dans les enveloppes des étoiles de type M). Nous allons tester deux valeurs de rapport d'abondance : 13 et 30 (en raison des rapports d'abondances de 30 trouvés dans les observations ALMA dans le centre de l'enveloppe).

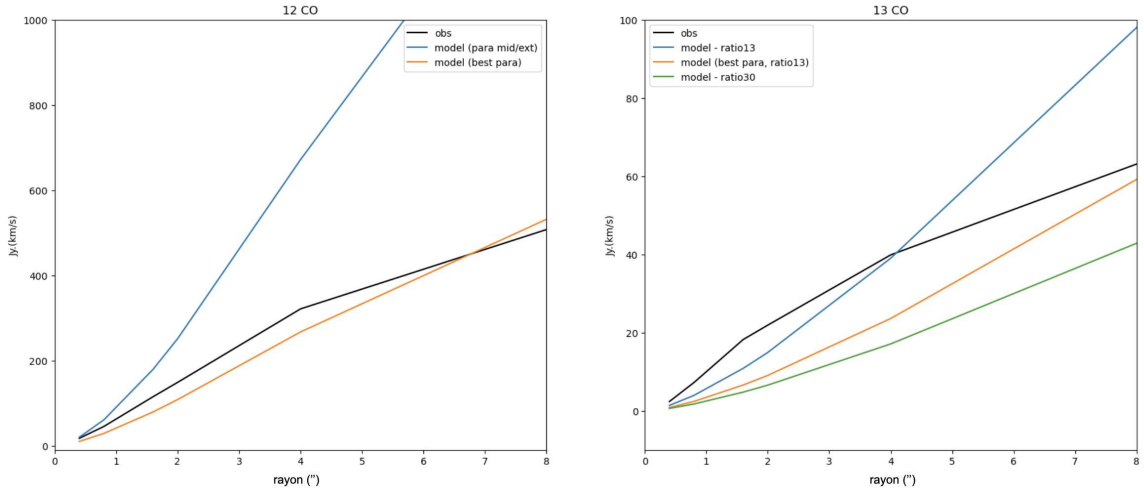


FIGURE 4.23 – Courbes de flux intégré dans différents rayons du ^{12}CO et du ^{13}CO. Les courbes en noir sont les flux observés. Les courbes bleues correspondent aux modèles avec le jeu de paramètres "compromis" entre les deux configurations étudiées. En orange, nous avons le meilleur modèle de la configuration médium. Pour le ^{13}CO, il y a une courbe en plus en vert, qui correspond aux mêmes paramètres qu'en bleu mais avec un rapport d'abondance différent (=30).

En Fig. 4.23, nous avons les résultats du modèle pour le ^{12}CO et le ^{13}CO comparés aux observations. Pour le ^{12}CO, nous arrivons bien à reproduire l'émission, comme nous l'avions vu dans la section précédente avec l'étude paramétrique. L'allure de la courbe pour le ^{13}CO n'est par contre pas exactement reproduite. Mais nous voyons qu'en utilisant un rapport d'abondance de 13 (courbe orange) cela donne un meilleur résultat qu'en prenant 30 (courbe verte). Ce rapport d'abondance semble donc reproduire les observations. Ce sont les résultats en configuration médium, mais nous pouvons faire le même exercice pour la configuration étendue, comme nous le montrons en Fig. 4.24. Le rapport de ^{12}CO sur ^{13}CO égal à 13 fonctionne. Ce rapport est en accord avec Ramstedt & Olofsson (2014) et proche de celui de Vlemmings et al. (2013) dans les bras.

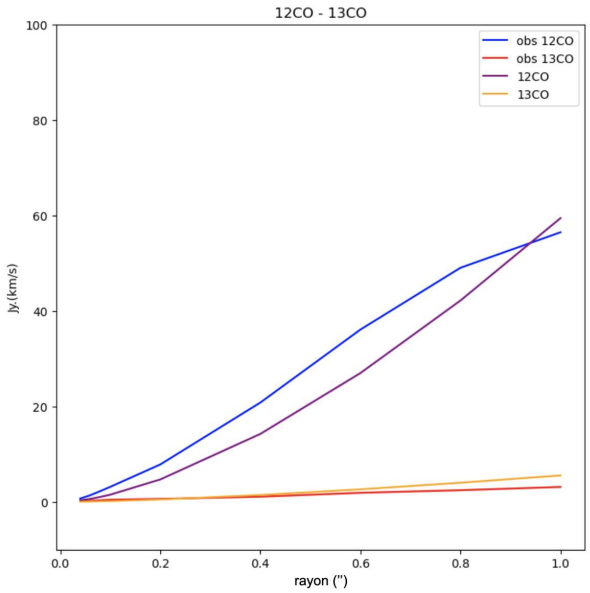


FIGURE 4.24 – Courbes de flux intégré dans différents rayons du ^{12}CO et du ^{13}CO en configuration étendue. La courbe bleue est le flux du ^{12}CO observé, celle en violet correspond au modèle. La courbe rouge est le flux du ^{13}CO observé, celle en orange correspond au modèle.

Pour calculer le rapport du ^{12}C/^{13}C, nous nous intéressons également à d'autres molécules. Nous considérons ici le HCN, dont nous allons modéliser l'émission.

Son abondance est décrite par l'équation 4.14. $R_{\rm ref} = R_{\rm HCN}$ est calculé à partir de Schöier et al. (2013) :

$$\log(R_{\rm HCN}) = 19.9 + 0.55 \log\left(\frac{\dot{M}}{v_\infty}\right) \tag{4.42}$$

Dans leur étude, Schöier et al. (2013) ont calculé χ_0 pour 25 étoiles de type M. La valeur moyenne est de 1.2×10^{-7}, valeur que nous utiliserons pour créer le fichier d'abondance. Pour le H^{13}CN, nous ferons comme pour le ^{13}CO, nous utiliserons la même loi divisée par 13.

Comme pour le CO nous avons modélisé les émissions du H^{12}CN et du H^{13}CN en Fig. 4.25. Les résultats sont moins concluants que pour le CO. La loi d'abondance a besoin

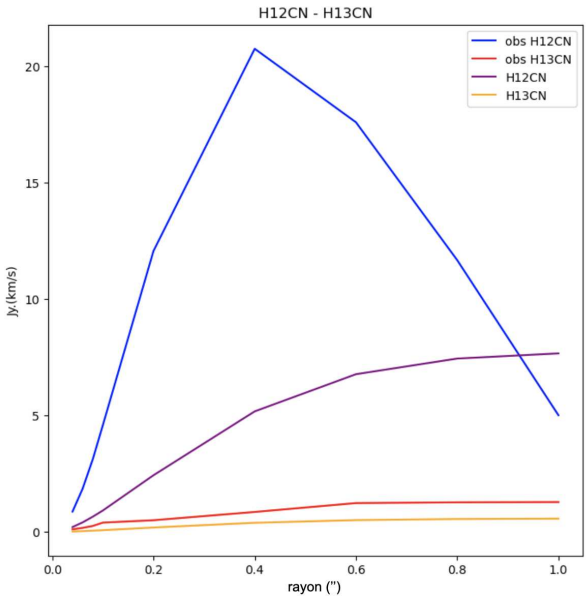


FIGURE 4.25 – Courbes de flux intégré dans différents rayons du $H^{12}CN$ et du $H^{13}CN$ en configuration étendue. La courbe bleue est le flux du $H^{12}CN$ observé, celle en violet correspond au modèle. La courbe rouge est le flux du $H^{13}CN$ observé, celle en orange correspond au modèle.

d'être mieux contrainte. Notamment l'émission en $H^{12}CN$ en étendue semble avoir une étendue maximale de 0.4 arcsec, comme le montraient également les Tab. 4.3 et 4.4. La loi d'abondance ne reproduit pas cette étendue, d'autres modèles d'abondance seraient nécessaires pour le modéliser.

4.4.3 Étude temporelle du modèle

4.4.3.1 Modèle stellaire CO5BOLD

Les étoiles évoluées étudiées sont des étoiles très actives, et comme nous le verrons aussi en Sect. 5 pour U Her, GY Aql est une étoile de type Mira, et donc variable. Ces étoiles sont des étoiles pulsantes et variables avec des périodes de 100 à 1000 jours environ. Les couches externes étant opaques, elles piègent une partie du rayonnement émis par l'étoile ce qui augmente la température et permet l'ionisation de l'hélium. La pression monte, ce qui entraîne une dilatation de l'étoile. Ainsi, sa luminosité s'accroît et son opacité diminue. Les photons et les ions prisonniers dans l'enveloppe peuvent alors s'échapper. La température et la pression baissent, l'étoile se contracte et sa luminosité diminue. Le rayonnement est de nouveau piégé et ainsi commence une nouvelle période de pulsation. Ce phénomène contribue au fort taux de perte de masse et il s'observe par la variation de luminosité. Il y a plusieurs catégories d'étoiles évoluées, basées sur la régularité et l'amplitude de la variation de luminosité : les irrégulières, les semi-régulières et les Mira (AGB) qui sont régulières et avec une forte amplitude, comme on peut le voir en Fig. 4.26 avec la courbe de luminosité de GY Aql.

On peut se demander quelle est l'influence de ces périodes de pulsations sur les vents stellaires et donc sur les éjections de matière. Jusqu'à présent dans MCFOST, nous modélisons une étoile avec une certaine luminosité. Celle-ci est calculée à partir d'une SED

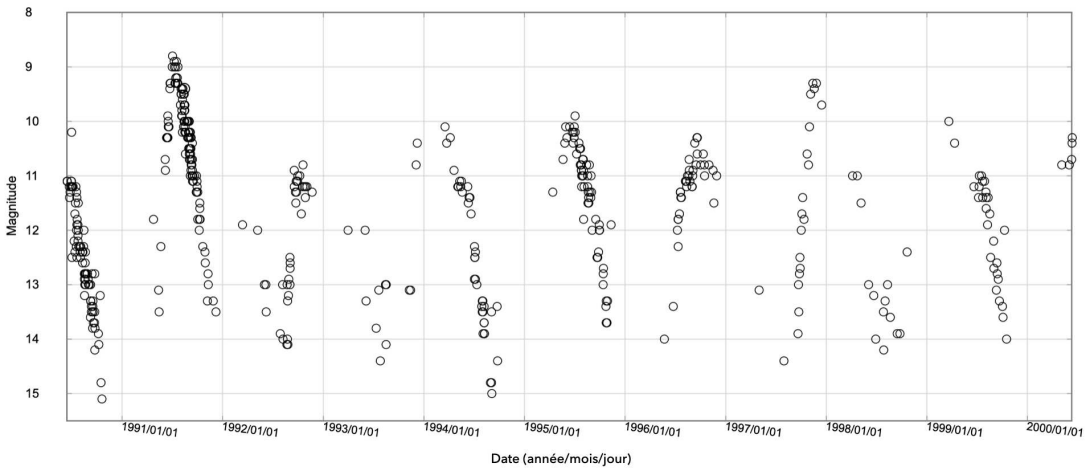


FIGURE 4.26 – Courbe de variabilité de la luminosité de GY Aql, la magnitude apparente en fonction de la date (année/mois/jour). https://www.aavso.org

que nous mettons en entrée et de la distance de la source. Pour GY Aql, nous mettions la SED récupérée sur la base de données VizieR [17]. Cette base nous permet de récupérer des points mesurés dans un certain rayon autour de la source. Ces mesures sont faites à différentes périodes et donc mélangent plusieurs phases de l'étoile. Nous nous sommes demandés si cette SED moyennée dans le temps était le meilleur moyen de modéliser la SED et si en prenant la variabilité de l'étoile, cela aurait un impact dans nos modèles. Ces questions ont fait l'objet d'un stage de L3 au LAB, par Léa Etchechoury (Université Côte d'Azur), que j'ai encadré.

Pour étudier l'impact de la variabilité de l'étoile, nous utilisons les sorties du modèle de convection stellaire CO5BOLD "COnservative COde for the COmputation of COmpressible COnvection in a BOx of L Dimensions with l=2,3", un code pour modéliser la convection de surface solaire et stellaire en 1, 2 et 3 dimensions, développé par Freytag et al. (2017); Chiavassa et al. (2024). Le code CO5BOLD permet de modéliser l'activité stellaire pour des étoiles AGB et des RSG. Avec un code de transfert radiatif (Chiavassa et al. 2009, Optim3D), cela nous permet de créer des observables qui peuvent être utilisées dans MCFOST et sont fournies par A. Chiavassa.

Nous avons un certain nombre de modèles disponibles en fonction de la luminosité et de la température effective des étoiles de la collaboration PEPPER [18]. Ces modèles sont représentés en fonction des deux paramètres en Fig. 4.27. Nous voyons que nous n'avons pas de modèle disponible à la bonne luminosité et à la bonne température. En rouge, nous avons mis en évidence deux modèles qui pourraient convenir : un à la bonne température et un à la bonne luminosité.

17. http://vizier.cds.unistra.fr/vizier/sed/

18. PEPPER est un projet financé par l'ANR qui vise à construire une description cohérente et complète du mécanisme de perte de masse dans les étoiles froides évoluées. https://www.oca.eu/fr/welcome-to-anr-pepper

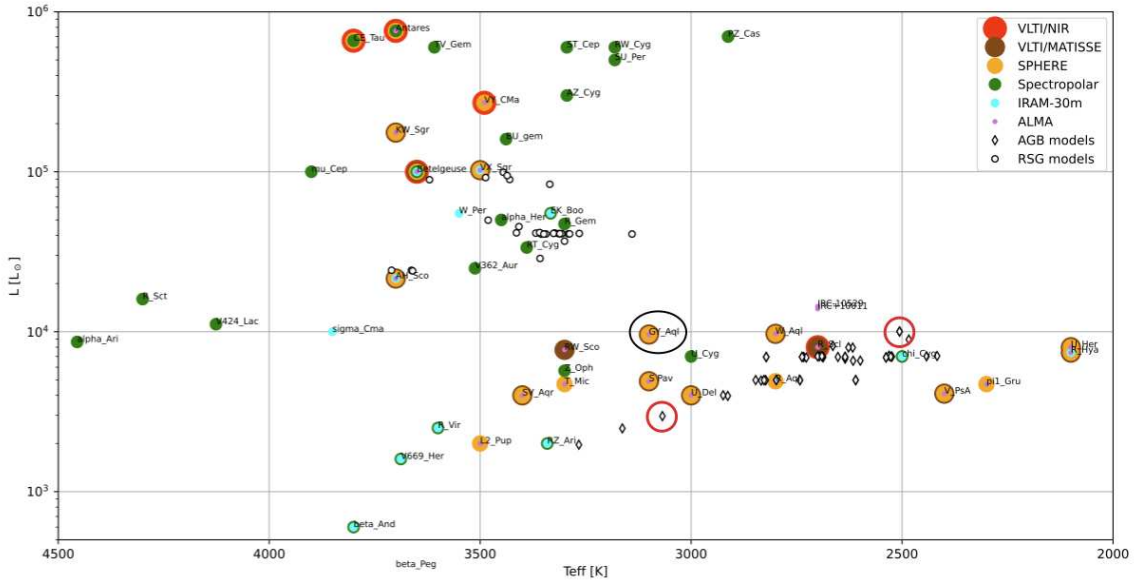


FIGURE 4.27 – Graphique positionnant des étoiles AGB et RSG de la collaboration PEPPER en fonction de leur luminosité et de leur température. Nous voyons les observations faites (cercle de couleur autour des étoiles pour différents instruments) et les modèles disponibles : les losanges pour les AGB et les cercles pour les RSG.

4.4.3.2 Utilisation et correction des SED

Dans ces modèles, nous avons considéré une distance de 410 pc estimée par Andriantsaralaza et al. (2022) avec un rayon de 500 $R_\odot$ [19]. Nous corrigeons les deux modèles par un facteur de correction directement issu de la loi de Stephan-Boltzmann avec $L \propto R^2T^4$. On écrit $L_{\rm obs} = 4\pi\sigma R_{\rm obs}^2 T^4$ et $L_{\rm mod} = 4\pi\sigma R_{\rm mod}^2 T^4$ avec $R_{\rm obs}$ le rayon observé (14 mas) et $R_{\rm mod}$ le rayon modélisé (qui respecte la loi de Stephan-Boltzmann). Les températures étant égales, nous pouvons donc en déduire un facteur de correction ϵ pour le modèle à la bonne température : $L_{\rm obs} = \epsilon L_{\rm mod}$ avec $\epsilon = (R_{\rm obs}^2)/(R_{\rm mod}^2)$. Pour le modèle à la bonne luminosité, en considérant les luminosités modèle/observation égales, nous obtenons : $T_{\rm obs} = \omega T_{\rm mod}$ avec ω le facteur correctif tel que $\omega = \sqrt{R_{\rm mod}/R_{\rm obs}}$.

En Fig. 4.28, nous voyons les SED en sortie de Optim3D, qui serviront à modéliser l'étoile dans MCFOST. Nous comparons les modèles avec les observations en noir. Cette SED observée est une collection d'observations à des époques différentes, donc une moyenne dans le temps. Les modèles décrivent l'évolution de la luminosité sur 10 ans répartis en 119 spectres (étiquetés de 0 à 119). Nous avons choisis de montrer les SED modélisées à trois temps différents suffisamment espacés et à des phases différentes (la phase 0 correspond aux temps 75.2 ans pour le modèle avec la bonne luminosité et 29.4 ans pour le modèle avec la bonne température, la phase 0.5 correspond aux temps 81.8 et 31.9 ans, la phase 0.25 correspond aux temps 84.1 et 35.4 ans [20]). Les SED ont été corrigées de ϵ et ω, et nous voyons qu'avec la correction, nous sommes proche de l'observation.

Cependant, le graphique en Fig. 4.27 ne prend pas en compte la dernière mesure de distance par Andriantsaralaza et al. (2022) et celle de notre étude (qui a estimé la distance

19. Estimation à partir de la distance et de la luminosité.
20. Les temps correspondent aux années écoulées depuis le début de la simulation.

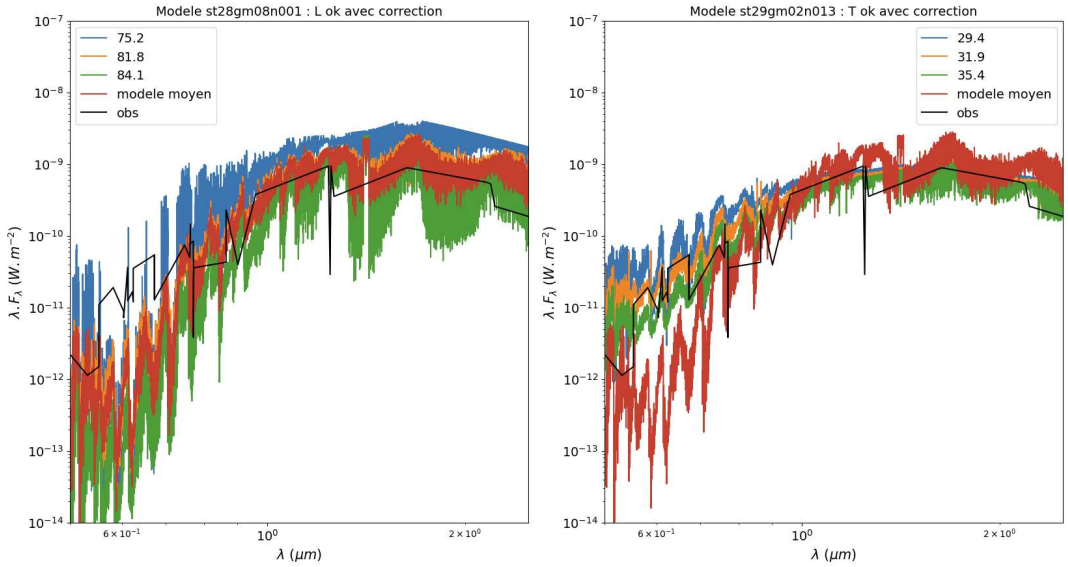


FIGURE 4.28 – SED des modèles à trois temps différents (en bleu 75.2 et 29.4 ans phase=0, orange 81.8 et 31.0 ans phase=0.25 et vert 84.1 et 35.4 ans phase 0.5). La SED moyennée sur l'ensemble des modèles est en rouge. En noir est représentée la SED observée. La figure de gauche correspond au modèle avec la bonne luminosité. Celle de droite correspond au modèle à la bonne température.

à 550 pc). La luminosité depend de la distance de la source. La Fig. 4.27 nous montre les modèles en fonction de la luminosité et de la température. La distance étant incertaine, nous préférons donc utiliser le modèle à la bonne température. Nous utiliserons donc les sorties de ce modèle.

4.4.3.3 Résultats

Comme dans la section précédente, nous modélisons la CSE de GY Aql avec cette fois ci en entrée les modèles stellaires de CO5BOLD. Nous n'avons pas utilisé les modèles hydrodynamiques pour la densité mais une loi (eq. 4.4) avec un rapport gaz sur poussière égal à 100. La variabilité dans le modèle stellaire se voit dans les cartes de températures modélisées. En Fig.4.29, nous voyons la température en fonction de la distance à l'étoile. La courbe noire correspond à la moyenne des 119 spectres. Les barres d'erreur en bleu nous donnent l'étendue des valeurs calculées sur l'ensemble des spectres. L'écart de température se voit proche de l'étoile. Il est causé par la variation de température due à la pulsation. Plus loin l'écart diminue fortement, dans notre cas après 40 UA les valeurs varient moins. On voit ainsi que l'impact de la pulsation se fait proche de l'étoile et que plus loin l'impact devient faible.

Sur la Fig. 4.30, la courbe violette nous donne la variation de luminosité sur toute la durée de la simulation. La période de pulsation est d'environ 60 jours, ce qui est beaucoup plus court que celle observée pour GY Aql qui est de 468 jours. Le modèle n'est donc pas particulièrement adapté à cette étoile. De plus, la luminosité est plus importante que celle observée qui est d'environ 7000 $L_\odot$ [21], le modèle est plus lumineux. Mais, cela nous permet tout de même de mesurer l'impact de la variabilité dans les sorties de MCFOST. Après

21. calculée à partir de la SED observée et de la distance d= 410 pc

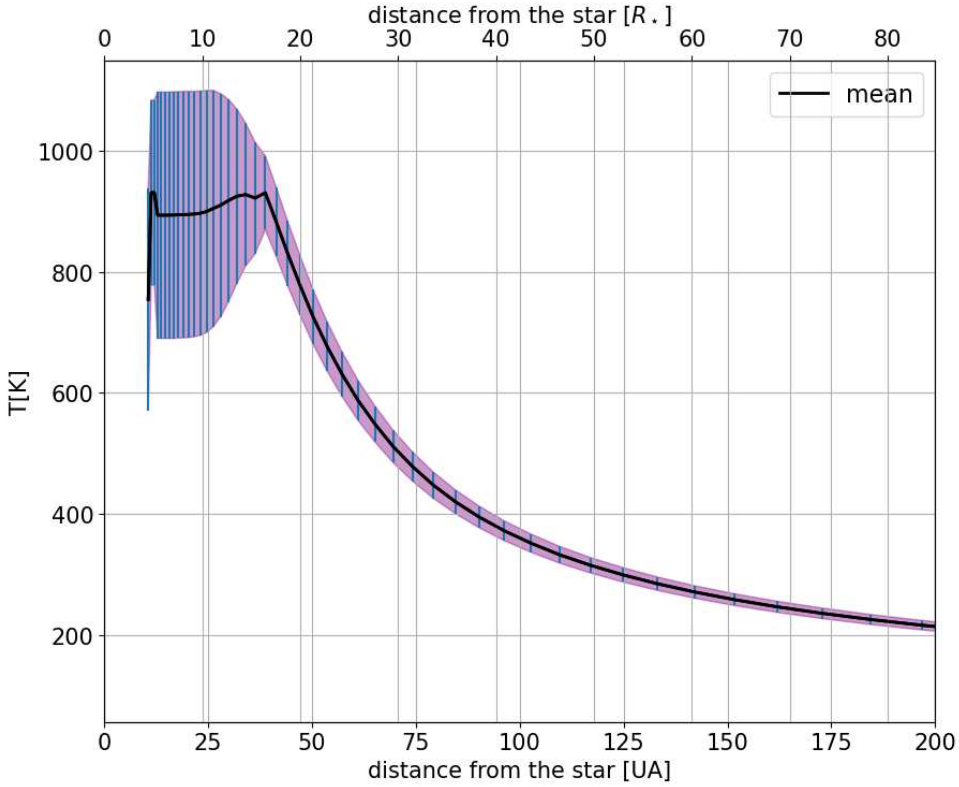


FIGURE 4.29 – Évolution de la température calculée par MCFOST en fonction de la distance à l'étoile. La courbe noire correspond à la moyenne de tous les modèles, les barres verticales bleues correspondent à l'étendue de tous les modèles.

avoir calculé la carte de température, nous pouvons mesurer l'émission continuum. Nous récupérons l'aire intégrée dans un contour à 3σ de l'observation du continuum à 1350 μm (0.028", 0.029", 32.06°) et nous regardons son évolution dans le temps, en la mesurant dans les 119 modèles. Ce résultat est montré en Fig. 4.30.

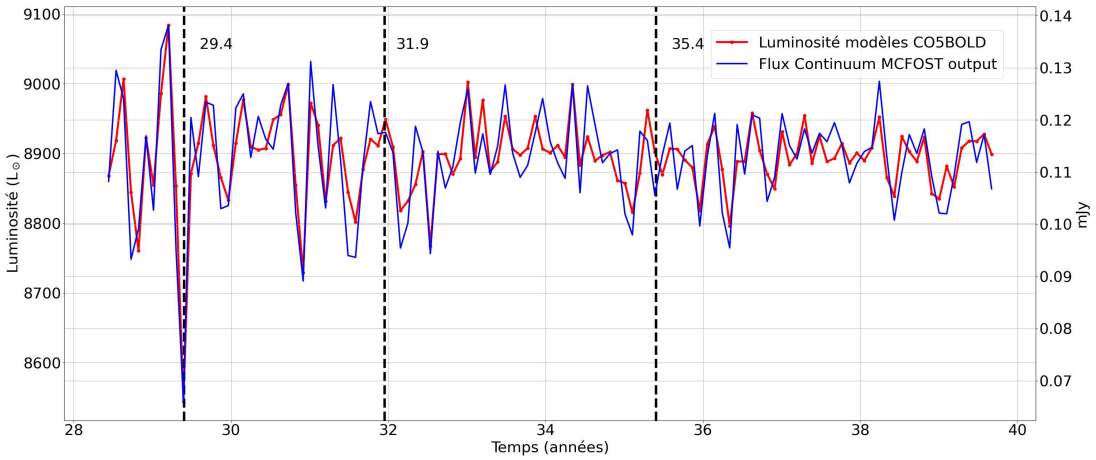


FIGURE 4.30 – Luminosité (courbe violette) du modèle CO5BOLD et flux de d'émission continuum (courbe bleue) de MCFOST en fonction du temps.

Nous voyons que les courbes de luminosité et d'émission continuum ont la même allure et suivent les mêmes pulsations, avec un écart notable en amplitude pour l'émission

continuum, ce qui nous montre que les variations de luminosité ont bien un impact dans les modèles. Les pulsations ont une grande influence sur les vents stellaires et donc la CSE.

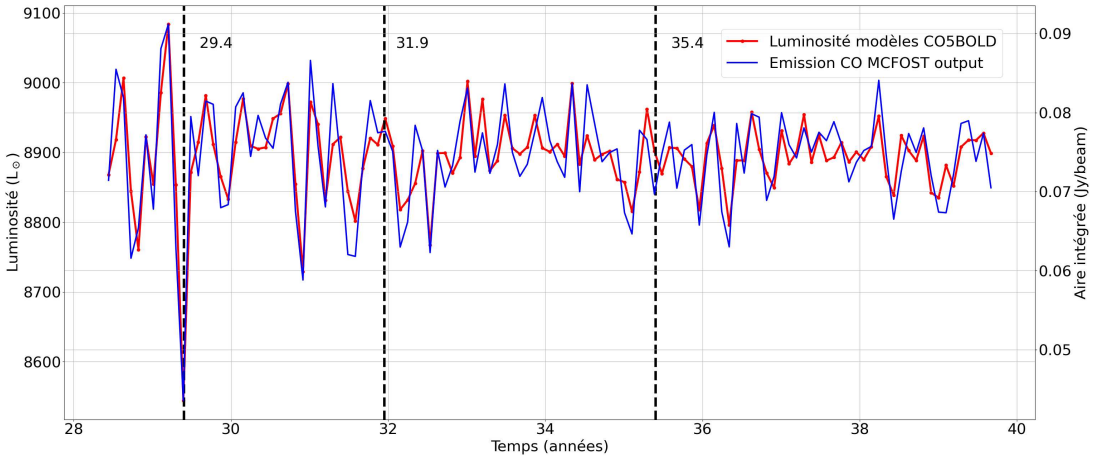


FIGURE 4.31 – Luminosité (courbe violette) du modèle CO5BOLD et flux de d'émission moléculaire du ^{12}CO (courbe bleue) de MCFOST en fonction du temps.

Nous pouvons faire la même chose pour l'émission du CO : récupérer l'émission intégrée dans un rayon et voir si un impact est notable en fonction du temps. Nous voyons ce résultat en fig. 4.31. Encore une fois, les deux courbes correspondent très bien. Actuellement, pour modéliser les CSE on ne donne aux modèles qu'une SED moyennée dans le temps alors qu'en fonction de quand l'étoile est regardée elle sera bien différente au vu des variations de luminosité. Utiliser une SED moyennée ne semble pas être une bonne solution. Il faudrait prendre en compte la pulsation si nous voulons nous rapprocher au mieux des observations.

4.5 Conclusion

Nous avons présenté les méthodes de traitement des sorties du code MCFOST afin de les comparer aux données ALMA. Nous avons déterminé la composition des poussières et leurs propriétés optiques, et également caractérisé l'extinction par le milieu entre la source modélisée et l'observateur.

Notre objectif était de reproduire les observations à haute résolution angulaire du large programme ATOMIUM. Nous nous sommes concentrés sur une étoile AGB : GY Aql, qui présente une forme spiralée dans ses émissions. En caractérisant les émissions moléculaires, nous avons pu déterminer la vitesse des vents dans l'enveloppe, qui s'est avérée inférieure à ce qui avait été montré dans d'autres études. Nous avons également déterminé les rapports isotopiques du ^{12}CO et du ^{13}CO, qui varient dans l'enveloppe. En outre, nous avons étudié les isotopes du soufre, en particulier le ^{33}S. Des modèles d'évolution stellaire sont nécessaires pour essayer de comprendre ces rapports isotopiques.

Nous avons utilisé et étendu un modèle hydrodynamique pour prendre en compte la binarité et former les spirales en émission moléculaire observées dans le projet ATOMIUM. Grâce à MCFOST, nous avons déterminé la distance et le rayon de GY Aql à partir des SED. En comparant les émissions de flux intégrés, nous avons pu contraindre le

rapport gaz sur poussière et la quantité totale de poussière dans l'enveloppe. Nous avons constaté que différents paramètres peuvent reproduire les observations pour les configurations étendue et médium. Une étude paramétrique a donc été menée pour trouver un jeu des paramètres qui satisfait les deux configurations. Avec les paramètres trouvés, nous avons estimé le taux de perte de masse de l'étoile et pu reproduire les émissions du ^{12}CO, ^{13}CO, et H^{12}CN, H^{13}CN. Pour le CO, nous avons effectivement reproduit la spirale observée et l'intensité de l'émission en utilisant une loi d'abondance prenant en compte la photodissociation. Cependant, pour le HCN, nous n'avons pas reproduit l'émission intégrée, suggérant que des modèles d'abondance chimique prenant en compte d'autres paramètres seraient nécessaires.

Nous nous sommes aussi intéressés à la variabilité de l'étoile et comment cela pouvait impacter les sorties de MCFOST. En utilisant les modèles de convection stellaire et de transfert radiatif CO5BOLD et Optim3D, nous récupérons des modèles stellaires à mettre dans MCFOST pour différentes phases de pulsation de l'étoile. Nous avons vu que cela impactait les modèles : la température proche de la photosphère, l'émission continuum et moléculaire. Pour reproduire aux mieux les observations, la prise en compte de la phase est importante.

Ainsi, notre travail a permis de mieux comprendre la dynamique et la composition chimique de l'enveloppe circumstellaire de GY Aql, tout en mettant en évidence les perspectives de recherche future pour affiner ces modèles et observations avec des modèles chimiques et d'évolution stellaire.

Chapitre 5

Polarisation et champ magnétique

Les étoiles sont éclairées pour que chacun puisse un jour retrouver la sienne.

Le Petit Prince - A. de St Exupéry

Sommaire

5.1 Introduction . . . 104
5.2 Observations . . . 106
5.3 Réduction de données et calibration . . . 108
5.3.1 Paramètres de Stokes . . . 108
5.3.2 Polarisation instrumentale . . . 110
5.3.2.1 Suppression des fuites instrumentales de Stokes I vers Stokes V . . . 110
5.3.2.2 Suppression des fuites instrumentales de Stokes I vers Stokes Q et U . . . 112
5.4 Analyse des données et méthode . . . 113
5.4.1 Analyse des composantes de Stokes I et V . . . 113
5.4.2 Calcul des incertitudes . . . 116
5.4.3 Description des signaux Stokes I et V observés . . . 118
5.4.4 Saturation de la raie maser . . . 120
5.4.5 Estimation du champ magnétique . . . 123
5.4.5.1 Maser saturé . . . 123
5.4.5.2 Maser non saturé . . . 124
5.4.5.3 Détermination de l'angle d'incidence du faisceau maser 124
5.5 Résultats . . . 126
5.5.1 Polarisation observée et excitation du maser . . . 126
5.5.2 Intensité du champ magnétique . . . 129
5.6 Discussion . . . 130
5.7 Conclusions . . . 134

Ce chapitre est majoritairement traduit de l'article A&A Marinho et al. (2024), disponible en annexe E.1.

5.1 Introduction

Après avoir quitté la séquence principale, les étoiles de type solaire (0.8-8 $M_\odot$) passent par différentes phases avant le stade de la nébuleuse planétaire (e.g. Herwig 2005). La phase AGB dure moins de quelques millions d'années, mais c'est l'une des phases les plus intéressantes en termes de chimie et de dynamique. Au-delà de la photosphère, les objets AGB abritent une véritable usine chimique dans CSE, où plus de 80 molécules et 15 espèces de poussières ont été découvertes (Höfner & Olofsson 2018; Decin et al. 2018). Cette phase AGB est également caractérisée par une perte de masse importante ($10^{-6} - 10^{-4}$ $M_\odot$ /yr, Höfner & Olofsson 2018) qui fait de ces objets les principaux contributeurs à l'enrichissement chimique du milieu interstellaire et au recyclage de la matière dans l'Univers. Ceci s'applique également à leurs homologues massives, les RSG (Ekström et al. 2012; De Beck et al. 2010).

Les étoiles froides évoluées fournissent donc une forte rétroaction mécanique et radiative à leur environnement hôte (Langer 2012). Les taux élevés de perte de masse des étoiles AGB seraient le résultat d'un mécanisme d'accélération du vent basé sur la pression de radiation exercée sur les grains de poussière qui se sont formés dans la partie interne de la CSE (à quelques rayons stellaires) et qui sont soulevés par la pulsation stellaire (Bladh & Höfner 2012). Il n'existe pas de scénario cohérent pour les RSG. Les mécanismes exacts qui déclenchent et façonnent les vents violents des étoiles froides évoluées doivent encore être mieux caractérisés. Cela nécessite des études plus approfondies des couches subphotosphériques où la convection et la pulsation agissent, de l'atmosphère où de forts chocs rayonnants se produisent, et de la région de formation des vents où la poussière se condense et où l'accélération du rayonnement se produit. Outre la convection stellaire, la pulsation et la pression de rayonnement sur la poussière, il a été proposé que les champs magnétiques jouent un rôle important par l'entraînement du vent par ondes Alfvén (voir par exemple, Cranmer & Saar 2011; Höfner & Olofsson 2018), mais qu'ils façonnent également ce vent (voir Pascoli & Lahoche 2008; Dorch 2004, pour les étoiles évoluées pulsantes AGB et pour les RSG, respectivement). Si les champs sont suffisamment forts, ils pourraient même contribuer à extraire le moment angulaire (cf. le cas des étoiles de la séquence principale froides, Bouvier 2009). Le magnétisme et la dynamique photosphérique contribuent donc tous deux à entretenir les vents (Lèbre et al. 2014, 2015; López Ariste et al. 2019), mais l'importance relative du champ magnétique pour la dynamique photosphérique et atmosphérique est encore mal connue. La connaissance de l'intensité et de la géométrie du champ magnétique est encore limitée. L'origine du champ magnétique en tant que dynamo astrophysique possible dans ces étoiles serait très probablement très différente de la dynamo ($\alpha - \omega$) qui est à l'œuvre dans les étoiles de type solaire parce que celles-ci tournent lentement, et que seules quelques cellules de convection sont présentes à leur surface à un moment donné (Freytag et al. 2002; Aurière et al. 2010). Pour ces rotateurs lents (avec un nombre de Rossby élevé, jusqu'à $\sim$ 100, Charbonnel et al. 2017; Josselin et al. 2015), les dynamos classiques $\alpha - \omega$ dans lesquelles la composante toroïdale du champ magnétique est amplifiée par la rotation ne sont en effet pas attendues. Au contraire, une dynamo turbulente/convective ($\alpha^2 - \omega$) peut générer un champ magnétique local faible jusqu'à 0.01 Gauss, qui est ensuite amplifié par la pulsation stellaire et les points froids pour former un champ magnétique à grande échelle (Soker 2002). Dans le cas des RSGs, une dynamo locale à petite échelle générant un champ fort avec un faible facteur de remplissage est favorisée d'après les simulations numériques (Dorch 2004). Si la convection ne peut pas générer de champs magnétiques globaux, des champs locaux restent donc

possibles et peuvent conduire à la génération d'événements épisodiques de perte de masse (comme celui observé sur Bételgeuse par Montargès et al. 2021).

Des champs magnétiques de faible intensité (d'environ 1-10 Gauss à la surface stellaire ou à quelques rayons stellaires) ont été identifiés et observés pendant plusieurs années dans les RSG et les AGB. Au cours de la dernière décennie, les spectropolarimètres optiques modernes ESPaDOnS/CFHT [1] et NARVAL/TBL) ont apporté de nombreuses informations sur le magnétisme de surface stellaire dans le diagramme de Hertzsprung-Russel (e.g., Aurière et al. 2010; Lèbre et al. 2014; Tessore et al. 2017). Dans le régime radio, l'estimation polarimétrique de l'intensité du champ magnétique dans la CSE des étoiles évoluées a été possible, par exemple, grâce à l'instrument XPOL à l'IRAM-30m (e.g., Herpin et al. 2006), au réseau VLBA (e.g., Kemball et al. 2011; Assaf et al. 2013), ou maintenant avec ALMA (e.g., Vlemmings et al. 2017). À partir des propriétés du rayonnement, telles que la polarisation linéaire, l'angle de polarisation et la polarisation circulaire des émissions de masers de différentes molécules, l'intensité du champ magnétique le long de la ligne de visée peut être déduite dans la CSE de ces objets (voir par exemple la revue de Vlemmings 2011) : des zones les plus internes (c.-à-d quelques rayons stellaires du centre de l'objet) via les masers SiO (Herpin et al. 2006) aux couches les plus externes (c'est-à-dire plusieurs milliers de rayons stellaires) via les masers OH pour les étoiles oxygénées (Rudnitski et al. 2010), ou via l'effet Zeeman CN pour les objets carbonés (Duthu et al. 2017). En particulier, les masers de SiO sont excités à proximité de l'étoile (voir, par exemple, Cotton et al. 2011) dans les petites cellules de gaz, où le SiO n'a pas encore été appauvri sur les grains à de plus grandes distances (Lucas et al. 1992; Sahai & Bieging 1993). Les régions de SiO et de poussière se chevauchent parfois dans la proche CSE (Wittkowski et al. 2007). Les masers de SiO présentent une polarisation linéaire et circulaire, probablement due au champ magnétique intrinsèque du gaz stellaire (Vlemmings 2011).

De nombreux résultats et détections positives ont été obtenus sur le champ magnétique de surface à partir de la polarisation circulaire optique des étoiles AGB de type M (y compris les variables Mira pulsantes, Lèbre et al. 2014; Konstantinova-Antova et al. 2014) et RSG (Aurière et al. 2010; Tessore et al. 2017), révélant des champs faibles (c'est-à-dire jusqu'à l'ordre du Gauss) et variables ou transitoires. À partir de la polarisation circulaire dans le régime radio, le champ magnétique a été estimé à environ quelques Gauss à quelques rayons stellaires dans la CSE (Herpin et al. 2006). Toutes ces contraintes observationnelles favorisent un champ magnétique qui décroît avec une loi en $1/r$ dans toute la CSE (Duthu et al. 2017). Les observations interférométriques ALMA de la polarisation linéaire du SiO ont apporté de nouvelles informations. Ces observations ont révélé une structure de champ magnétique compatible avec une configuration de champ toroïdal (Vlemmings et al. 2017). En extrapolant cette loi à la photosphère, nous nous attendons à un champ magnétique de quelques Gauss à la surface des étoiles Mira pour une configuration de champ magnétique toroïdal (Pascoli & Lahoche 2008). Ceci a été confirmé par la toute première détection d'un champ magnétique à la surface d'une étoile Mira, χ Cyg, (2-3 Gauss, Lèbre et al. 2014). Le champ magnétique de surface semble varier sur des échelles de temps allant de quelques semaines à quelques années, en accord avec l'échelle de temps des schémas convectifs pour les RSG (e.g., Mathias et al. 2018), ou dans le cas des étoiles pulsantes (Mira et RV Tauri [2]) avec la dynamique atmosphérique, tandis

1. Echelle SpectroPolarimetric Device for the Observation of Stars
2. RV Tauri est une classe de pulsation d'étoile, qui présentent des variations de luminosité avec une

que les ondes de choc qui se propagent périodiquement vers l'extérieur de l'atmosphère stellaire peuvent localement renforcer le champ magnétique par compression (e.g., Lèbre et al. 2014, 2015; Sabin et al. 2014; Georgiev et al. 2023).

L'origine du champ magnétique de surface observé dans ces étoiles froides évoluées, ainsi que l'impact de l'intensité du champ sur l'environnement stellaire et l'évolution ultérieure, n'ont pas encore été complètement caractérisés. Comme il est difficile de mesurer le champ magnétique sur la surface stellaire de ces objets, un bon moyen de faire progresser notre connaissance de la configuration du champ est d'estimer l'intensité du champ magnétique à différents endroits de la CSE, en particulier aussi près que possible de la photosphère, et par conséquent, l'intensité de son origine possible. Nous présentons dans ce chapitre de nouvelles observations de masers SiO autour de six étoiles froides évoluées avec une calibration améliorée afin d'estimer plus précisément l'intensité du champ magnétique dans la région interne de l'enveloppe à 2-5 rayons stellaires, là où les masers de SiO sont observés. Dans la Sect. 5.2, nous présentons les observations et les mesures spectroscopiques simultanées des quatre paramètres de Stokes. La section 5.3 présente l'analyse des données et explique la calibration de nos données, en mettant l'accent sur l'élimination de la polarisation instrumentale. La méthode que nous avons utilisée pour calculer les estimations du champ magnétique est présentée dans la Sect. 5.4. Dans la Sect. 5.5, nous présentons les résultats pour la polarisation et le champ magnétique. Dans la Sect. 5.6, nous discutons de la variabilité et de l'origine du champ magnétique. Des informations complémentaires sont données en annexe C et D.

5.2 Observations

Nous avons observé l'émission de la raie maser ^{28}SiO v = 1, J = 2-1 à 86.2434277 GHz dans un échantillon d'étoiles froides évoluées (voir Tab. 5.1) en mars 2022 et en mai 2022 au télescope de 30m de l'IRAM installé sur le Pico Veleta en Espagne (voir Sec. 2). Des mesures spectroscopiques simultanées des quatre paramètres de Stokes I, Q, U, et V ont été obtenues en utilisant le polarimètre XPOL (Thum et al. 2008). Le récepteur EMIR E090 a été connecté au backend VESPA, configuré en mode polarimétrie avec une largeur de bande de 120 MHz et une séparation des canaux de 40 kHz (c'est-à-dire ∼0,139 km s^{-1} à 86 GHz). EMIR (Eight MIxer Receiver) est l'un des quatre récepteurs hétérodynes à double polarisation disponibles au 30 m (pour plus de détails, voir le guide de l'utilisateur d'EMIR). Le réseau de spectromètres polyvalents (VESPA) est l'un des sept backends disponibles pour EMIR [3]. En tant que spectromètre à autocorrélation, il a été redessiné pour assurer également la corrélation croisée des signaux de polarisation linéaire orthogonaux enregistrés par EMIR, tout en fournissant simultanément des spectres dans les quatre paramètres de Stokes [4]. Le pointage a été régulièrement vérifié sur une source de continuum proche ; la précision est meilleure que 3 arcsec (Greve et al. 1996). Le focus a été ajusté sur une planète disponible. Afin d'obtenir des lignes de bases spectrales planes, nous avons utilisé le mode de commutation Wobbler vers un OFF à une distance de 80 arcsec (voir les procédures observationelles en Sec. 2.3.4).

alternance de minima plus ou moins profonds.

3. https://publicwiki.iram.es/Backends et Sect. 2.8
4. https://publicwiki.iram.es/PolarimetryforAstronomers

Star	RA (J2000) (h m s)	DEC (J2000) (° ’ ”)	Type	d (pc)	v_{LSR} (km/s)	L ($L_\odot$)	T_{eff} (K)	dM/dt ($M_\odot$/an)	ϕ
o Ceti[a]	02:19:20.79	-02:58:39.50	Mira	107	+46.96	6099	2193	2.5×10^{-7}	0.55
R Leo[b]	09:47:33.49	+11:25:43.82	Mira	100	0.0	5617	2890	9.2×10^{-7}	0.85
U Her[b,c]	16:25:47.47	+18:53:32.86	Mira	271	-16.48	8000	3000	5.9×10^{-7}	0.25/0.45
R Aql[b,c]	19:06:22.25	+08:13:48.01	Mira	234/308	+47.0	4900	2800	1.1×10^{-6}	0.90
χ Cyg[b]	19:50:33.92	+32:54:50.61	Mira	180	+11.2	7813	2000	2.4×10^{-7}	0.90
μ Cep[d,e]	21:43:30.46	+58:46:48.16	RSG	390/1818	+27.95	35000	3750	2.0×10^{-6}	-

TABLE 5.1 – Liste des sources observées, (a) De Beck et al. (2010) ; (b) Andriantsaralaza et al. (2022) ; (c) Gottlieb et al. (2022) ; (d) Montargès et al. (2019) ; (e) Maercker et al. (2022).

La température du système à bande latérale unique du récepteur était de 105-110 K pour les deux sessions d'observation. Les temps d'intégration étaient de 3.1, 2.0, 4.2, 3.2, 8.9, 1.9 et 0.2 heures pour χ Cyg, μ Cep, o Ceti, R Aql, R Leo, U Her (mars), et U Her (mai), conduisant à des rms de 6.5, 8, 6, 7, 5, 7.5, et 24 mK, respectivement, à la résolution spectrale nominale. Les efficacités du faisceau avant (forward efficiency) et du faisceau principal (main beam efficiency) étaient respectivement de 0.95 et 0.81 ; la largeur du lobe à mi-hauteur était de 29". Le facteur de conversion Jy/K est de 5.9.

Des observations dédiées de la nébuleuse du Crabe (une source bien caractérisée et fortement polarisée linéairement) ont été réalisées pour vérifier la calibration de l'angle de polarisation (voir Thum et al. 2008), ainsi que des observations de planètes avec une émission thermique non polarisée (sur Uranus) pour estimer la polarisation instrumentale le long de l'axe optique résultant d'une fuite du signal. L'alignement entre les polarisations verticale et horizontale est parfait depuis l'installation d'un transducteur ortho-mode à cornet unique en 2016. Les lobes secondaires polarisés n'affectent pas nos observations car nos sources ne sont pas étendues (la région du maser SiO, dont la taille est inférieure à 0.1 seconde d'arc, e.g. Cotton et al. 2006, est très faible par rapport au lobe du télescope). La méthode générale utilisée pour la polarimétrie SiO en single-dish a été décrite dans Herpin et al. (2006). Cependant, depuis 2015, la polarisation instrumentale V a fortement augmenté en raison d'une fuite substantielle du signal Stokes I dans le signal Stokes V (Duthu et al. 2017). Un schéma de calibration amélioré a donc été utilisé ici pour minimiser cette contamination et est présenté dans la Sect.5.3.2.

Notre échantillon est présenté dans la Tab. 5.1 (la phase stellaire ϕ est donnée dans la colonne 10) et se compose de cinq étoiles de type Mira (R Aql, o Ceti, χ Cyg, U Her, et R Leo) et d'une RSG (μ Cep). U Her a été observée en mars et en mai 2022. Toutes les sources sont connues pour leur forte émission de maser SiO. R Leo et χ Cyg ont déjà été observés par Herpin et al. (2006) en mode polarimétrique.

5.3 Réduction de données et calibration

5.3.1 Paramètres de Stokes

À partir des polarisations horizontale et verticale et de leur différence de phase relative, nous pouvons déterminer simultanément les quatre paramètres de Stokes :

$$\begin{array}{rcl} I & = & \langle E_{\rm H}^2 \rangle + \langle E_{\rm V}^2 \rangle \\ Q & = & \langle E_{\rm H}^2 \rangle - \langle E_{\rm V}^2 \rangle \\ U & = & 2\langle E_{\rm H} E_{\rm V} \cos\delta \rangle \\ V & = & 2\langle E_{\rm H} E_{\rm V} \sin\delta \rangle \end{array} , \tag{5.1}$$

avec δ la différence de phase entre les composantes horizontale et verticale $E_{\rm H}$ et $E_{\rm V}$ (e.g. Landi Degl'Innocenti & Landolfi 2004).

Comme les polarisations sont mesurées dans le repère du référentiel de la cabine Nasmyth, les paramètres de Stokes Q et U ont été tournés vers le système équatorial pour corriger la rotation parallactique. La calibration de la différence de phase entre les signaux polarisés orthogonalement a été déterminée automatiquement pendant les observations en injectant un signal provenant d'un bain d'azote liquide passant à travers une grille de fils

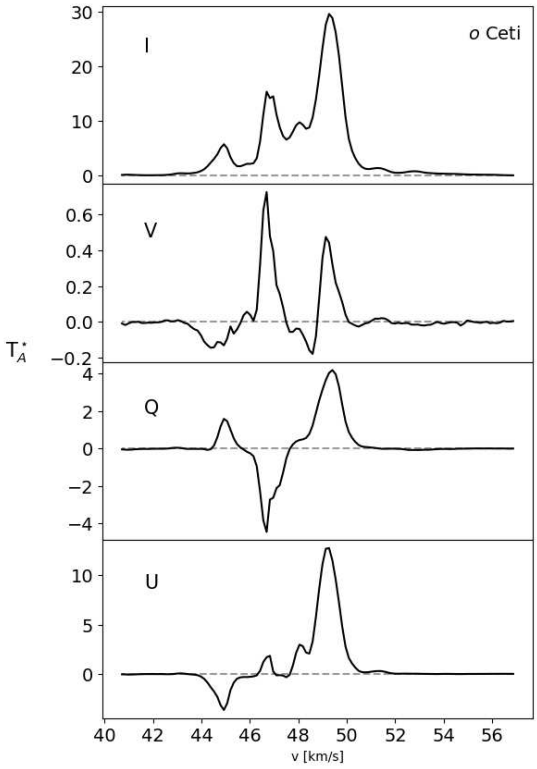


FIGURE 5.1 – Paramètres de Stokes observés (non corrigés de la polarisation instrumentale) I, V, Q et U pour o Ceti (en unités $T_A^\star$ [K]), avec une résolution spectrale de 0.139 km s^{-1}, centrée sur la transition SiO.

(Thum et al. 2008), puis appliquée par un traitement de données hors ligne dédié. Un exemple des spectres I, Q, U, et V est montré sur la Fig. 5.1 pour o Ceti.

La réduction des données a été effectuée à l'aide du logiciel CLASS [5]. La première étape consiste à supprimer des lignes de base linéaires de tous les spectres individuellement. Dans un second temps, nous avons corrigé les polarisations mesurées pour tenir compte de la fuite instrumentale de Stokes I vers Q, U, et V. La méthode est décrite dans la Sec. 5.3.2. La troisième étape consiste à calculer la moyenne des spectres, en optimisant la sensibilité, pour un paramètre de Stokes donné, afin de former un seul spectre à analyser.

À partir de ces spectres, nous avons calculé la fraction de polarisation circulaire ($p_{\rm C}$), la fraction de polarisation linéaire ($p_{\rm L}$) et l'angle de polarisation (χ). Ils sont définis comme suit (Landi Degl'Innocenti & Landolfi 2004) :

$$\begin{aligned} p_{\rm C} &= V/I \\ p_{\rm L} &= \sqrt{Q^2+U^2}/I \\ \chi &= \tfrac{1}{2}\mathrm{atan2}(U,Q) = \tfrac{1}{2}\mathrm{Arg}(U+iQ) \end{aligned} \tag{5.2}$$

Le signal astronomique que nous avons obtenu était un mélange incohérent de paramètres de Stokes Q, U et V remplissant le lobe d'observation, c'est-à-dire provenant de lignes de visée légèrement différentes. L'utilisation de la fonction tangente inverse à quatre quadrants au lieu de la fonction arctangente permet d'éviter les ambiguïtés de 90° qui

5. http://www.iram.fr/IRAMFR/GILDAS/

surviennent lorsqu'une polarisation significative de Stokes U est mesurée en même temps qu'une valeur de Stokes Q insignifiante et de signe indéfini. En raison de la modulation de Stokes Q et U dans un repère du référentiel de Nasmyth non corotant, cette situation ne peut être évitée et se produit fréquemment.

5.3.2 Polarisation instrumentale

La plupart des télescopes astronomiques et leurs instruments souffrent de conversions erronées de Stokes I en Stokes Q, U, et V, et de conversions entre ces trois derniers paramètres. Les raisons de ces conversions sont multiples et proviennent principalement de l'optique asymétrique du télescope (par exemple, les conceptions Nasmyth telles que celle de l'IRAM-30m) et du système de réimagerie des récepteurs, ainsi que des cornets d'alimentation des récepteurs. Pour une discussion, nous nous référons à Thum et al. (2008, et les autres références qui y figurent), qui ont démontré la conversion instrumentale extrêmement faible de l'optique de l'IRAM-30m de Stokes I en Stokes V (élément de matrice de Müller $M_{\rm IV}$ au niveau du millième, même en dehors de l'axe optique, après optimisation de l'orientation de la grille de division du faisceau). En décembre 2015, la bande E090 d'EMIR a été équipée d'un transducteur ortho-mode qui divise les polarisations linéaires orthogonales uniquement dans le cornet d'alimentation. Ses imperfections induisent une polarisation instrumentale allant jusqu'à $M_{\rm IV} = 2.7\%$, dérivée des observations de la planète Uranus non polarisée. La calibration de l'angle de polarisation est aussi bonne que $\pm 0.5°$, ce qui correspond à l'incertitude de l'orientation de la grille de fils dans l'unité d'étalonnage de phase. Une conversion erronée de Stokes U à V peut survenir dans la calibration de la phase, mais elle est inférieure à $M_{\rm UV} \leq 1\%$. À partir des observations de la nébuleuse du Crabe effectuées au début et à la fin de chaque période, nous avons mesuré un angle de polarisation stable de 145-146° qui correspond à ce qui est attendu (Aumont et al. 2010; Ritacco et al. 2018). Ceci démontre que les conversions instrumentales entre la polarisation linéaire et circulaire sont sous contrôle. Par souci de concision, nous utilisons donc "polarisation instrumentale" comme synonyme des fuites de Stokes I en Q, U et V, en nous référant à des conversions spécifiques avec les éléments de la matrice de Müller $M_{\rm IQ}$, $M_{\rm IU}$ et $M_{\rm IV}$. Dans ce qui suit, nous décrivons la méthode permettant de déterminer la polarisation instrumentale et de l'éliminer des spectres de Stokes. Il est important de noter que ces étapes de calibration ont été appliquées par scan, c'est-à-dire aux spectres de cycles ON-OFF d'une durée typique de quatre minutes. Ceci est dû au fait que la polarisation instrumentale se produit principalement dans la cabine Nasmyth, et donc, si elle est exprimée dans des repères de référence célestes, elle dépend de l'élévation. Les spectres finaux ont ensuite été obtenus en faisant la moyenne des scans calibrés.

5.3.2.1 Suppression des fuites instrumentales de Stokes I vers Stokes V

Un spectre de Stokes V donné est composé d'un signal astronomique, $V^\star$, et d'une fuite instrumentale de Stokes I, c'est-à-dire, $V = V^\star + M_{\rm IV} \cdot I$. Notre récupération de $V^\star$ s'est déroulée comme :

1. Comme le terme $M_{\rm IV}$ est connu pour être quasi-achromatique, il peut être quantifié pour chaque scan par la régression linéaire de Stokes I et V. En faisant la moyenne des spectres avec $|M_{\rm IV}| < 1\%$, nous avons obtenu un spectre de Stokes V astronomique préliminaire presque pur, $\tilde{V}^\star$.

	σ_V (mK)	Temps d'intégration (heure)
o Ceti	1.9	4.2
R Leo	1.1	8.9
U Her (March)	2.4	1.9
U Her (May)	6.9	0.2
R Aql	5.1	3.2
χ Cyg	3.8	3.1
μ Cep	4.8	2.0

TABLE 5.2 – Incertitudes globales (écarts-types) de Stokes V dérivées de la méthode de Monte Carlo, y compris les incertitudes liées à l'élimination de la contamination instrumentale.

2. $\tilde{V}^\star$ a été soustrait de chaque spectre Stokes V. La série de spectres résiduels ΔV qui en résulte est alors largement dominée par les termes de fuite $M_{\rm IV} \cdot I$. Les estimations de $M_{\rm IV}$ ont été déterminées au niveau du scan par régression linéaire de Stokes I et ΔV.
3. Dans la dernière étape, nous avons calculé $V^\star = V - M_{\rm IV} I$. Les séries de spectres corrigés avec un bruit de base $\sigma_{\rm rms}$ obtenues de cette manière ont finalement été moyennées avec une pondération optimisant la sensibilité de $1/\sigma^2_{\rm rms}$.

Une démonstration de cet algorithme est présentée dans la Fig. 5.2.

La polarisation instrumentale résiduelle dans les spectres de Stokes V nettoyés provient principalement des incertitudes $\Delta M_{\rm IV}$ des paramètres $M_{\rm IV}$ obtenus de cette manière et a été estimée en appliquant les mêmes étapes d'étalonnage à des spectres de Stokes V synthétiques d'un $V^\star$ sous-jacent connu a priori. Nous énumérons ces étapes ci-dessous :

1. Comme modèle de données pour une cible donnée, nous avons utilisé son spectre $V^\star_{\rm rvm}$ produit par le code *rvm* (voir la section 5.4.1). Pour chaque balayage du total des $N_{\rm obs}$ observations, nous avons ajouté un bruit de base de l'écart-type $\sigma_{\rm rms}$ et une contribution instrumentale $(M_{\rm IV} + \Delta M_{\rm IV})I$. Les $N_{\rm obs}$ réalisations des spectres de bruit synthétiques et des paramètres $\Delta M_{\rm IV}$ ont été obtenues à partir de distributions gaussiennes ayant les mêmes écarts types que ceux déterminés lors des étapes de calibration décrites ci-dessus.
2. Nous avons décontaminé cet ensemble de $N_{\rm obs}$ spectres simulés et déduit la meilleure estimation $\hat{V}^\star$ du spectre astronomique de Stokes V en utilisant la même procédure de nettoyage que celle décrite ci-dessus.
3. Nous avons répété cette procédure dix fois pour obtenir l'écart-type parmi les spectres $\hat{V}^\star$ pour chaque canal de vitesse et nous l'avons attribué au canal correspondant du spectre $V^\star_{\rm rvm}$.

Pour toutes les sources, nous avons appliqué cette méthode de Monte Carlo. Nous avons obtenu des écarts-types $\sigma_{\rm V}$ d'environ quelques mK que nous listons dans la Tab. 5.2. Ils dépassent ceux du bruit radiométrique dans les spectres de Stokes V originaux et reflètent l'incertitude résiduelle dans la détermination des paramètres $M_{\rm IV}$.

Nous soulignons que le test précédent de reproductibilité de la correction requise pour R Aql indique que les $B_{\rm Z} \times \cos(\theta_2)$ ne sont pas concluants. Le fait que l'incertitude du

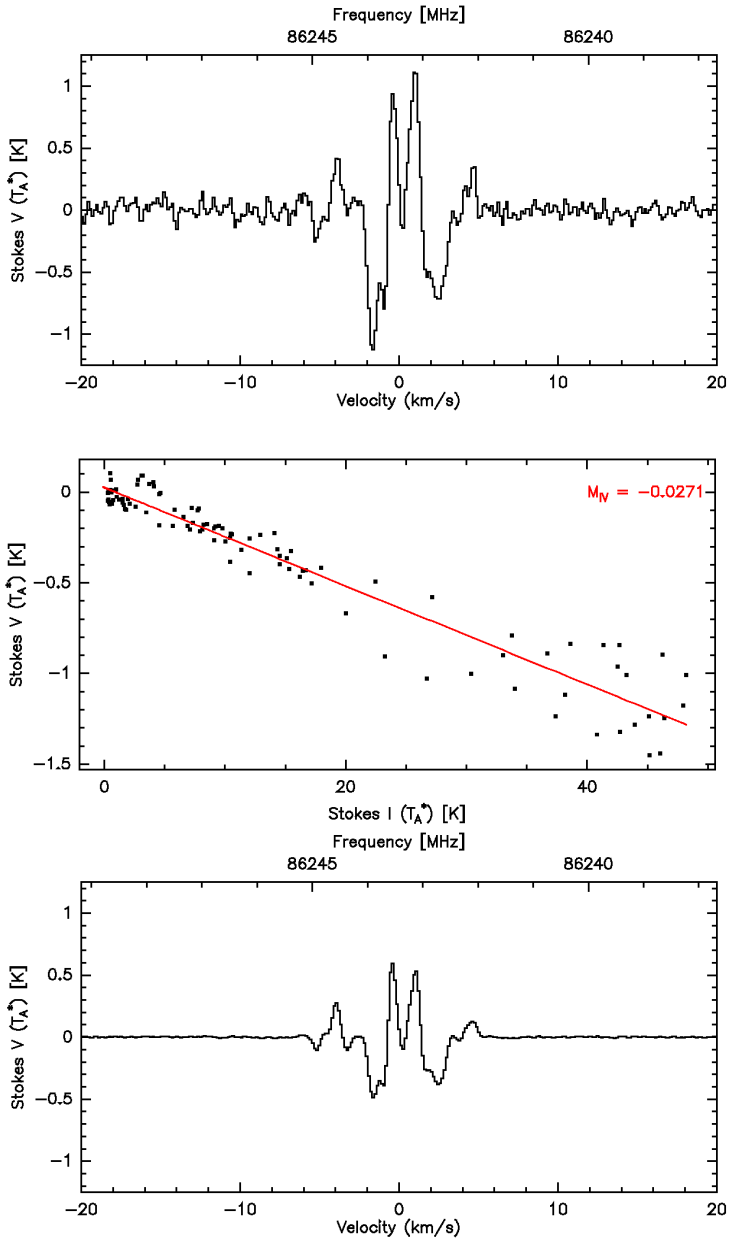


FIGURE 5.2 – Illustration de notre méthode pour supprimer la polarisation instrumentale dans les spectres de Stokes V pour R Leo. **Haut :** Moyenne des spectres Stokes V à faible fuite ($|M_{\mathrm{IV}}| < 0.01$). **Centre :** Exemple de corrélation entre $V_{\mathrm{instr}} = M_{\mathrm{IV}} \cdot I$ et Stokes I. La pente de la régression est $M_{\mathrm{IV}} = -0.0271$. **Bas :** Spectre de Stokes V final, nettoyé et moyenné. L'échelle verticale est la même que pour le spectre ci-dessus.

spectre $V^{\star}_{\mathrm{rvm}}$ ne soit basée que sur le bruit radiométrique n'a qu'une importance formelle ; aucune limitation n'est liée à la procédure d'élimination des termes M_{IV}.

5.3.2.2 Suppression des fuites instrumentales de Stokes I vers Stokes Q et U

L'élimination de la fuite de Stokes I vers la polarisation linéaire est conceptuellement plus facile parce que dans le repère de référence céleste (où l'angle de polarisation est mesuré dans le système équatorial du nord vers l'est selon la convention de l'IAU, IAU 1973), la polarisation astronomique dépend explicitement de la rotation parallactique ou, plus précisément, de la différence χ_0 entre l'élévation du télescope ε et l'angle parallac-

tique η, tandis que la contribution instrumentale reste fixe dans le repère de référence de la cabine Nasmyth. Pour le récepteur EMIR, la transformation des décalages de coordonnées célestes définis dans le repère équatorial $(\Delta\alpha\cos\delta, \Delta\delta)$ à ceux définis dans le repère Nasmyth est donnée par :

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} \cos\chi_0 & \sin\chi_0 \\ -\sin\chi_0 & \cos\chi_0 \end{pmatrix}. \tag{5.3}$$

L'application du formalisme de la matrice de cohérence (e.g., Wiesemeyer et al. 2014, autres références) permet alors d'obtenir la transformation correspondante du plan équatorial de la sphère de Poincaré dans le référentiel de Nasmyth (indice N), avec la représentation suivante des paramètres de Stokes Q et U :

$$\begin{array}{rclcrcl} Q_\mathrm{N} & = & M_\mathrm{IQ} I & + & Q^*_\mathrm{eq}\cos 2\chi_0 & + & U^*_\mathrm{eq}\sin 2\chi_0, \\ U_\mathrm{N} & = & M_\mathrm{IU} I & - & Q^*_\mathrm{eq}\sin 2\chi_0 & + & U^*_\mathrm{eq}\cos 2\chi_0, \end{array} \tag{5.4}$$

où les exposants * se réfèrent comme dans la Sect. 5.3.2.1 aux paramètres de Stokes astronomiques, et où M_IQ et M_IU sont les éléments de la matrice de Müller pour la conversion erronée de Stokes I en Q et U. La connaissance de la nature exacte des termes M_IQ et M_IU n'est pas nécessaire ici, si ce n'est que leur origine est située dans la cabine Nasmyth, et qu'ils sont quasi-achromatiques sur les profils de raies ici. Les travaux de mise en service antérieurs (Thum et al. 2008) ont montré que ces conditions préalables étaient remplies. Sous l'hypothèse bien justifiée que l'émission dans les paramètres de Stokes Q^* et U^* est spatialement non résolue et stationnaire à l'échelle de temps d'un intervalle d'angle d'une heure, et en assurant un échantillonnage suffisant de $2\chi_0$, ils peuvent être séparés de la contamination instrumentale en ajustant des courbes sinusoïdales aux flux intégrés dans les raies en utilisant les Eq. 5.4. Un exemple est présenté sur la Fig. D.1. Des déviations systématiques mineures indiquent une autre contribution instrumentale à la polarisation mesurée qui est fixe dans le système horizontal et provient donc du miroir primaire ou secondaire du télescope. Ces contributions se sont avérées insignifiantes.

5.4 Analyse des données et méthode

5.4.1 Analyse des composantes de Stokes I et V

Les spectres SiO Stokes I sont montrés dans la Fig. 5.3 pour R Aql et sont présentés en Fig. 5.4 pour les autres sources. Tous les profils de raies du SiO sont complexes, mais peuvent être reproduits en assemblant plusieurs composantes gaussiennes du maser centrées à différentes vitesses. Les composantes individuelles sont relativement étroites, bien que certaines d'entre elles soient légèrement plus larges que les largeurs de raies thermiques, d'environ 1 à 1.2 km s^{-1}, dans les régions de maser SiO où nous nous attendons à ce que la température du gaz soit d'environ 1000 à 1500 K. Nous avons décomposé le signal de Stokes I en plusieurs fonctions gaussiennes, en supposant que le profil d'intensité I peut être ajusté par :

$$I(v) = \sum_{k=1}^{n} A_k e^{-\frac{(v-v_{0,k})^2}{\Delta v^2_{D,k}}}, \tag{5.5}$$

avec $v_{0,k}$ et $\Delta v_{D,k}$ la vitesse centrale et la largeur Doppler, respectivement, pour chaque composante k, et A_k un coefficient de pondération.

Nous avons développé un code basé sur l'algorithme *relevance vector machine* (rvm) tel que décrit dans Tipping & Faul (2003). Ce code adapte le signal à la meilleure combinaison linéaire d'entrées tirées d'un dictionnaire. Dans notre cas, le dictionnaire était composé de fonctions gaussiennes de différentes largeurs (full width at half maximum, FWHM) qui ont été choisies dans une gamme de deux valeurs, Δv_a et Δv_b, échantillonnées en 50 valeurs. Elles ont été définies pour chaque étoile et centrées sur une gamme de vitesses (200 valeurs entre v_0 et v_1). Le terme *dictionnaire* est utilisé pour souligner qu'il n'y a pas d'exigence d'orthogonalité entre les différents éléments du dictionnaire. Sans cette exigence, le problème algébrique n'a pas de solution unique. Le code *rvm* résout ce problème par marginalisation bayésienne. Le code attribue un poids à tous les composants du dictionnaire (A_k), en optimisant la vraisemblance marginale. D'une certaine manière, l'algorithme recherche la combinaison linéaire avec le plus petit nombre d'entrées du dictionnaire qui satisfont les contraintes de bruit, en accord avec le bruit observé dans nos données.

Des ajustements initiaux ont été effectués avec le logiciel CLASS afin d'obtenir une première idée des intervalles pour les largeurs et les vitesses. Ces paramètres ont ensuite été utilisés comme première estimation des plages dans le code *rvm*. Les intervalles ont été ajustés itérativement pour maximiser la corrélation entre l'ajustement et les spectres observés.

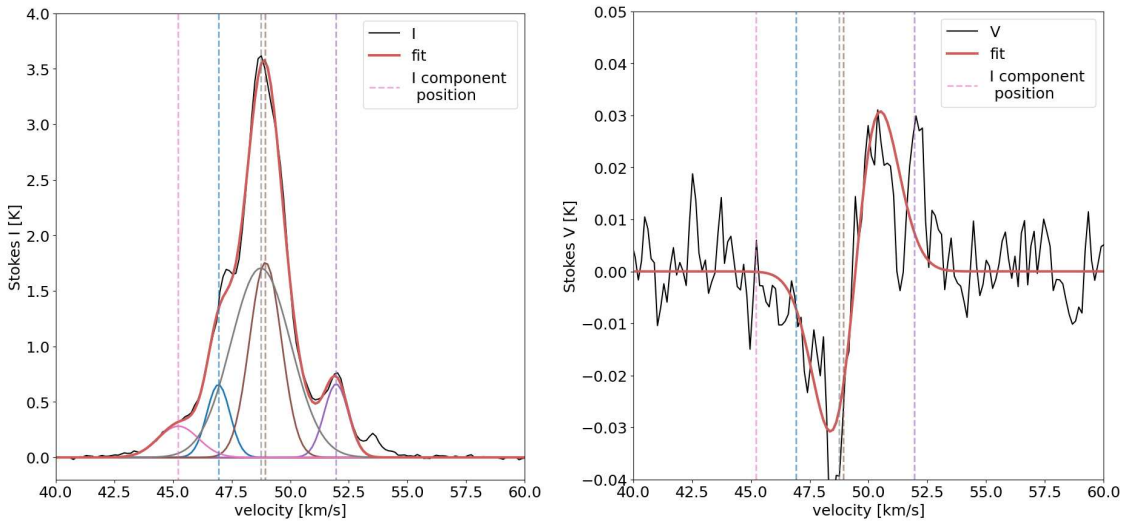


FIGURE 5.3 – Décomposition de Stokes I et V pour R Aql (résolution spectrale de 0.139 $\mathrm{km\,s^{-1}}$). **Gauche** : Les données de Stokes I sont représentées en noir, et l'ajustement global est représenté en rouge. Les lignes verticales pointillées colorées sont les positions du centre des fonctions gaussiennes individuelles utilisées dans l'ajustement, tracées en différentes couleurs. **Droite** : Les données de Stokes V nettoyées de la polarisation instrumentale sont représentées en noir (Sect. 5.3.2), et l'ajustement est représenté en rouge. Les lignes verticales en pointillés colorés montrent les composantes gaussiennes individuelles de I issues de la procédure d'ajustement de Stokes I (panneau de gauche).

En supposant toujours que la polarisation circulaire trouve son origine dans l'effet Zeeman, nous avons utilisé une décomposition analogue pour les profils de Stokes V. Comme le SiO est une molécule non paramagnétique, les champs magnétiques typiques que l'on s'attend à trouver dans la CSE correspondent à ce que l'on appelle le régime

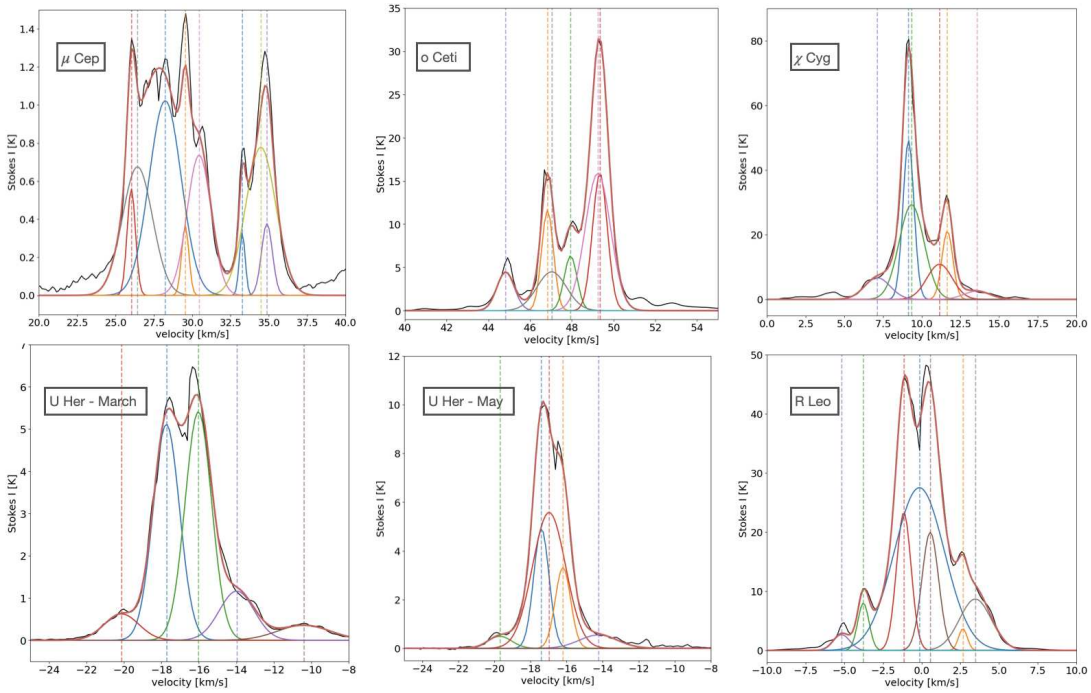


FIGURE 5.4 – Résultats de l'ajustement de la décomposition du signal de Stokes I en plusieurs fonctions gaussiennes telles que dérivées par le code rvm pour μ Cep, o Ceti, χ Cyg, U Her, et R Leo (pour R Aql, voir Fig.5.3).

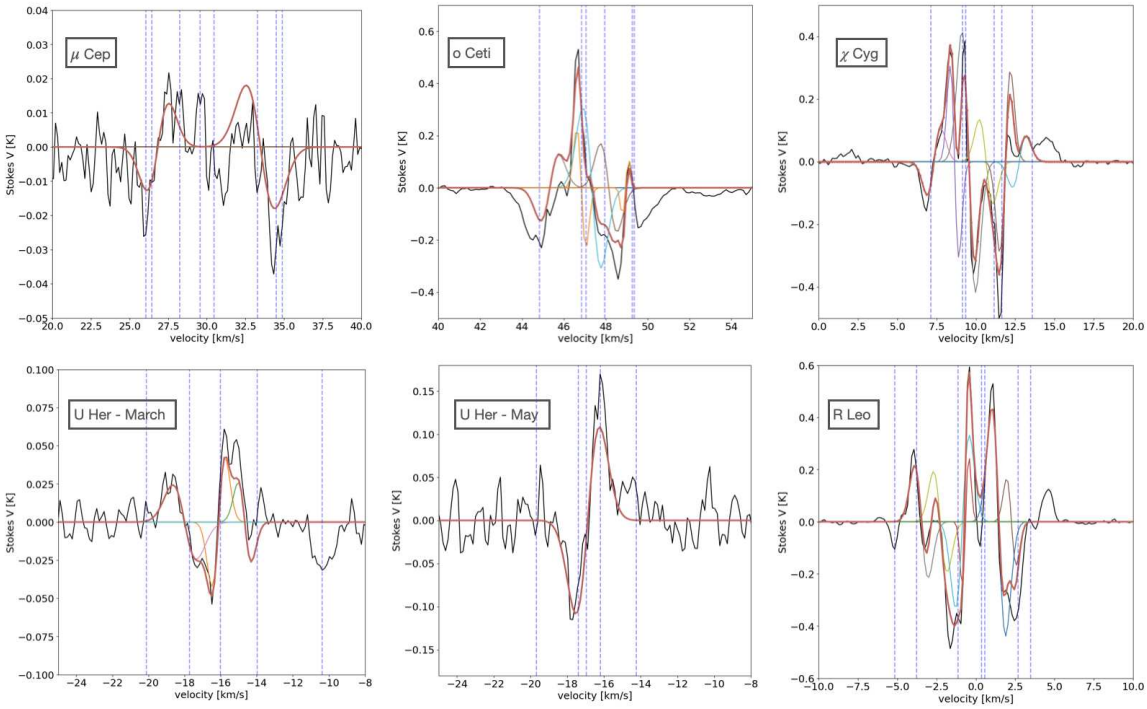


FIGURE 5.5 – Spectres de Stokes V pour toutes les sources sauf R Aql. Les données Stokes V nettoyées de la polarisation instrumentale sont représentées en noir (Sect. 5.3.2), et l'ajustement est présenté en rouge. Les lignes violettes en pointillés sont les positions des composantes gaussiennes individuelles I issues de la procédure d'ajustement de Stokes I.

Zeeman champ faible, pour lequel la séparation Zeeman (dégénérescence des raies sous l'effet d'un champ magnétique) est beaucoup plus petite que la largeur de raie Doppler intrinsèque Δv_D. Ceci est indépendant de toute augmentation de la largeur de raie dans la théorie du maser, mais nous décrivons l'impact de la saturation du maser ci-dessous. Dans le régime de champ faible, tout signal de Stokes V peut être modélisé en toute sécurité par :

$$V(v) = f(B)\frac{dI}{dv}, \tag{5.6}$$

où $f(B)$ est une fonction de l'intensité du champ magnétique et des paramètres de la transition, par rapport à l'intensité associée. Comme dans le cas du paramètre de Stokes observé I, le paramètre observé V est décomposé en sous-composantes V_i, qui sont des dérivées de fonctions gaussiennes qui, lorsqu'elles sont additionnées, correspondent au profil V. Notre algorithme *rvm* détermine les poids attribués à tous les V_i dont la combinaison pondérée correspond au V observé. Tous les profils ont été traités ici comme on le ferait avec des mesures Zeeman thermiques, mais l'amplification du maser peut modifier les profils des raies (la saturation du maser est étudiée dans la section 5.4.4).

Les résultats de l'ajustement pour Stokes I et V sont donnés dans les Tab. 5.4-5.5 et sont montrés dans la Fig. 5.3 pour R Aql et dans les Fig. 5.4 (Stokes I) et 5.5 (Stokes V) pour les autres sources.

5.4.2 Calcul des incertitudes

Pour calculer les incertitudes δB du champ magnétique déduit, nous avons calculé les incertitudes δV des paramètres de Stokes V après la suppression de la polarisation instrumentale comme décrit ci-dessus. Nous avons considéré deux sources principales d'incertitudes :

- La méthode de Monte Carlo décrite dans 5.3.2.1 inclut l'incertitude globale de Stokes V pour chaque canal de vitesse, c'est-à-dire qu'elle reflète à la fois le bruit radiométrique et l'incertitude dans l'élimination des termes $M_{\rm IV}$ (voir σ_V dans la Tab. 5.2). Il en résulte une incertitude $\delta V_{\rm inst}$ dans l'ajustement *rvm* qui doit être quantifiée.
- La deuxième source d'incertitude est la différence (résiduelle), $\delta V_{\rm res}$, entre l'ajustement et les spectres nettoyés $V^\star$ (voir Sec. 5.3.2.1).

Nous pouvons quantifier la première incertitude à partir des écarts-types $\sigma_{\rm V}$, déterminés dans la Sect. 5.3.2.1, qui se propage dans les paramètres de la méthode d'ajustement de Stokes V et, par conséquent, dans les estimations du champ magnétique. Pour déterminer cette première incertitude, nous avons défini trois spectres, à savoir le spectre issu de la méthode de nettoyage et deux spectres s'écartant du spectre nettoyé de $\pm\sigma_{\rm V}$. Nous avons appliqué le code *rvm* à ces trois spectres pour déterminer s'il existe des différences dans les paramètres des fonctions gaussiennes (largeur des vitesses, vitesses centrales et amplitudes) utilisées dans l'ajustement. Nous trouvons une différence de 0.3 $\mathrm{km\,s^{-1}}$, dans la vitesse centrale pour U Her en mai et de 0.1 $\mathrm{km\,s^{-1}}$pour les trois sources μ Cep, o Ceti, et U Her (mars), alors qu'il n'y a pas de différence pour les autres objets. Nous avons également déterminé la différence correspondante $\delta V_{\rm inst}$ entre les plus grandes excursions introduites dans les intensités des pics $V_{\rm peak}$; elle s'élève à 7 mK.

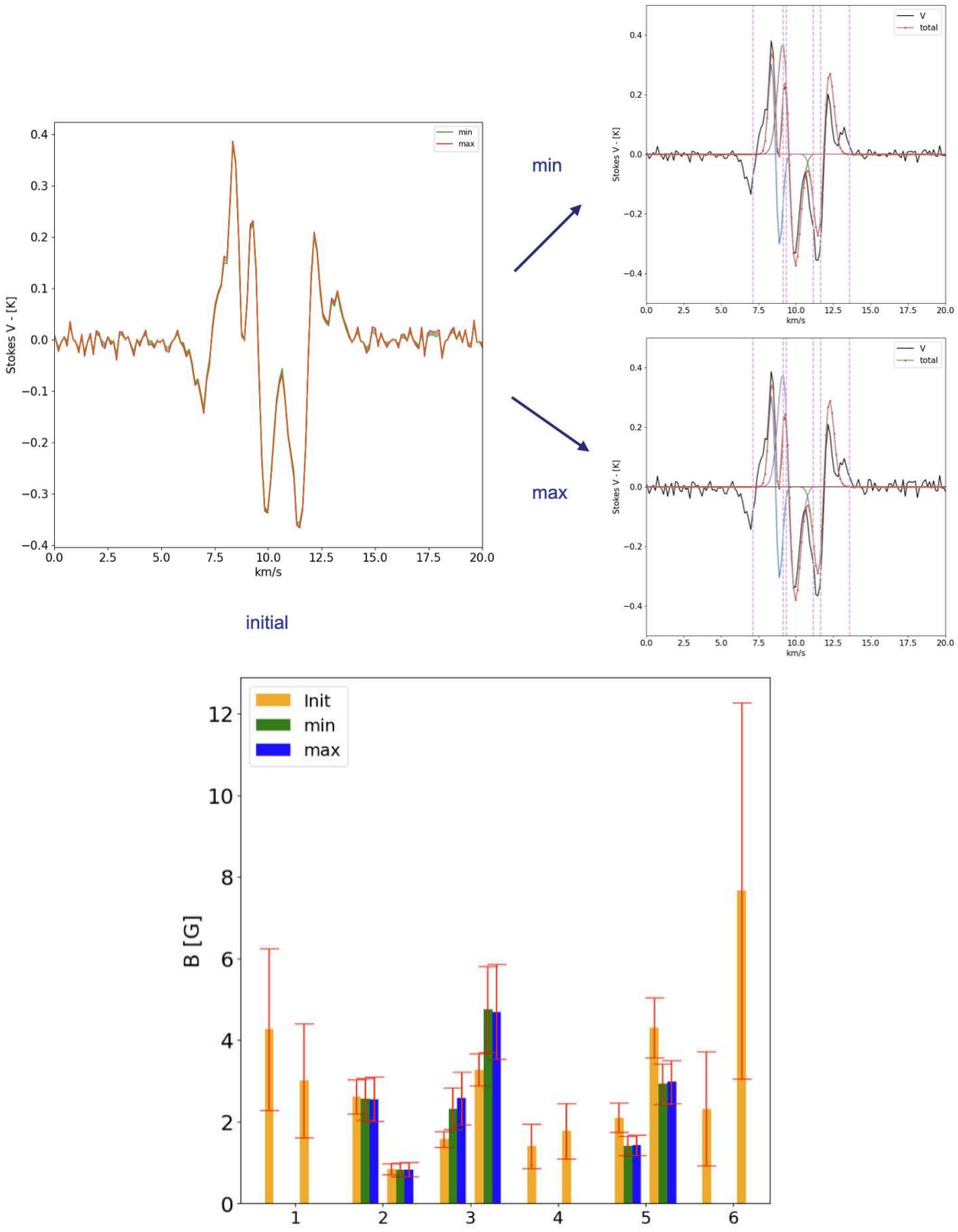


FIGURE 5.6 – Illustration de l'algorithme de vérification des erreurs dans le calcul du champ magnétique avec la méthode Monte Carlo présentée en Sec. 5.3.2.1.

Cette méthode est développée en Fig. 5.6 pour χ Cyg. La première image représente le spectre Stokes V $+\sigma_V$ en rouge et $-\sigma_V$ en vert. Nous obtenons deux décompositions en gaussiennes différentes et, pouvons voir comment le bruit a pu impacter nos résultats de fit. Ceux ci sont présentés pour χ Cyg (écart nul) et U Her (mars, écart de 0.1 km/s) en Tab. 5.3.

Source	V [km/s]	$V+\sigma_V$ [km/s]	$V-\sigma_V$ [km/s]
χ Cyg	7.3	-	-
	8.548	8.643	8.643
	9.548	9.547	9.548
	10.7	-	-
	11.859	11.859	11.859
	12.8	-	-
U Her	-17.994	-17.909	-17.90
	-16.115	-16.115	-16.116
	-14.663	-14.748	-14.749

TABLE 5.3 – Position v_0 des composantes trouvées par le code rvm en km/s pour deux sources : χ Cyg et U Her (mars). Les lignes avec "-" signifient que la composante n'est pas détectée dans le spectre.

Avec cette décomposition pour les trois spectres, nous pouvons maintenant voir l'écart sur les valeurs de champ magnétique, que nous voyons pour chaque pic de chaque composante pour χ Cyg en Fig. 5.6 sur l'image de droite. Le champ magnétique a ici été calculé avec la méthode d'Elitzur (voir Sec. 5.4.5.1). La figure du bas nous donne les valeurs de champ magnétique. Nous voyons que les valeurs entre les trois spectres sont assez similaires et restent dans les barres d'erreur. Cela valide notre méthode comme les fits sont très proches et les valeurs de champ magnétique aussi.

Pour estimer $\delta V_{\rm res}$, nous avons mesuré l'erreur quadratique ($\delta V_{\rm res} = \sqrt{\sum_{i=1}^{N}(x_i^m - x_i^d)^2/N}$, avec x^m les valeurs ajustées et x^d les données d'observation). Pour R Aql, μ Cep, et U Her (observation de mars), nous trouvons $\delta V_{\rm res} \sim 7$ mK et pour U Her (observation de mai), R Leo, o Ceti, et χ Cyg 24, 28, 28, et 33 mK, respectivement.

Ainsi, pour obtenir l'incertitude totale δV dans Stokes V, nous avons ajouté $\delta V_{\rm inst}$ et $\delta V_{\rm res}$ en quadrature. Les résultats sont reportés dans la Tab. 5.5. Leurs rapports signal/bruit élevés montrent que les spectres de Stokes I sont exempts d'erreurs. Pour les deux régimes (c'est-à-dire saturé et non saturé), les incertitudes dans les estimations du champ magnétique sont alors données par $\delta B/B = \delta V/V$.

5.4.3 Description des signaux Stokes I et V observés

Nos résultats d'ajustement (voir Fig. 5.3 pour R Aql 5.5 pour la décomposition de Stokes V, 5.4 pour celle de Stokes I, et Tab. 5.4, 5.5) montrent que les profils des raies du maser SiO sont globalement bien reproduits par notre procédure. Des exceptions peuvent être trouvées dans les composantes faibles les plus bleues et les plus rouges de l'intensité totale I, par exemple à $\sim$54 km s^{-1}pour R Aql, mais aussi pour χ Cyg, o Ceti, ou U Her (pour les données de mai). Certaines émissions larges dans les ailes dans μ Cep, χ Cyg, ou o Ceti (y compris la composante 1) ne sont pas reproduites non plus. Ceci n'a pas d'impact sur nos résultats car la polarisation de ces composantes est faible et dans le bruit. Les amplitudes de toutes les composantes de Stokes I détectées sont bien supérieures à 10σ et ont une largeur $\sim$1 km s^{-1} ou moins, comme attendu de l'émission de maser (e.g.

Star	rms (mJy)	v ($km\,s^{-1}$)	Flux (Jy)	Δv ($km\,s^{-1}$)	S/N	T_B (10^7 K)	R (s^{-1})	R/Γ
R Aql	43	45.2	1.7	1.2	14	0.8−1.4	0.2−0.4	0.04-0.08
		46.9	3.9	0.7	32	1.7−3.1	0.5−0.9	0.1−0.2
		48.7	10.1	1.8	83	4.5−8.1	1.3−2.3	0.3−0.5
		48.9	10.4	1.0	85	4.6−8.4	1.3−2.3	0.3−0.5
		52.0	3.9	0.7	32	1.7−3.1	0.5−0.9	0.1−0.2
μ Cep	46	26.0	3.3	0.4	25.0	4.1−89.9	1.1−25	0.2−5
		26.4	4.0	1.4	31	5.0−109.0	1.4−30.3	0.3−6.1
		28.2	6.0	1.5	46	7.5−163.4	2.1−45.4	0.4−9.1
		29.5	2.1	0.3	16	2.6−57.2	0.7−15.9	0.1−3.2
		30.5	4.3	1.1	33	5.4−117.1	1.5−32.5	0.3−6.5
		33.3	1.9	0.3	15	2.4−51.8	0.7−14.4	0.1−2.9
		34.5	4.6	1.4	35	5.8−125.3	1.6−34.8	0.3−7.0
		34.9	2.2	0.5	17	2.8−59.9	0.8−16.6	0.2−3.3
o Ceti	36	44.8	26.2	0.6	260	2.5	0.7	0.1
		46.8	68.7	0.4	682	6.5	1.8	0.4
		47.0	26.5	1.0	263	2.5	0.7	0.1
		47.9	37.4	0.4	372	3.6	1.0	0.2
		49.2	93.8	0.9	932	8.9	2.5	0.5
		49.3	93.7	0.5	931	8.9	2.5	0.5
χ Cyg	38	7.1	39.4	1.2	366	10.5	2.9	0.6
		9.1	290.2	0.5	2693	77.6	21.6	4.3
		9.3	172.7	1.1	1603	46.2	12.8	2.6
		11.2	64.2	1.2	596	17.2	4.9	1.0
		11.7	124.3	0.5	1154	33.2	9.3	1.9
		13.6	15.1	1.2	140	4.0	1.1	0.2
U Her (mars)	45	-20.1	3.7	1.3	29	2.2	0.6	0.1
		-17.7	30.2	1.0	240	18.3	5.1	1.0
		-16.0	31.9	1.0	254	19.3	5.4	1.1
		-14.0	6.9	1.3	55	4.2	1.2	0.2
		-10.4	2.1	2.0	17	1.3	0.4	0.1
U Her (mai)	140	-19.7	2.9	0.9	73	1.8	0.5	0.1
		-17.4	29.0	0.6	731	17.5	4.9	1.0
		-17.0	32.9	1.3	830	19.9	5.5	1.1
		-16.2	19.6	0.6	495	11.9	3.3	0.7
		-14.2	3.2	1.5	81	1.0	0.3	0.1
R Leo	29	-5.2	15.8	0.7	196	1.3	0.4	0.1
		-3.8	47.2	0.5	587	3.9	1.1	0.2
		-1.2	137.6	0.7	1710	11.3	3.1	0.6
		-0.2	162.3	2.3	2018	13.4	3.7	0.7
		0.6	117.9	0.8	1465	9.7	2.7	0.5
		2.7	21.6	0.4	268	1.8	0.5	0.1
		3.5	51.3	1.5	637	4.2	1.2	0.2

TABLE 5.4 – Description des composantes de Stokes I pour chaque source et les taux de saturation associés. Nous avons considéré deux distances différentes pour μ Cep et R Aql (voir Tab. 5.1).

Richards et al. 2020). Cependant, une composante centrale dans R Leo a une largeur de 2.3 $km\,s^{-1}$, mais cela pourrait être dû à une sous-estimation (trop faible) des autres

composantes de part et d'autre. Nous soulignons que l'émission de maser dans U Her a changé entre les deux périodes d'observation. Pour cette source, les profils sont différents, bien que nous ayons identifié le même nombre de composantes (cinq), mais à des vitesses différentes. La dernière composante à -10.4 $\mathrm{km\,s^{-1}}$, en mars n'a pas d'équivalence en mai. Les premières composantes à -20.1 $\mathrm{km\,s^{-1}}$, (mars) et -19.7 $\mathrm{km\,s^{-1}}$, (mai) ont la même intensité et la même largeur. Entre les composantes à -17.7/-17.4 $\mathrm{km\,s^{-1}}$ et -16.0/-16.2 $\mathrm{km\,s^{-1}}$, qui sont plus faibles en mai, le code a trouvé une composante supplémentaire plus grande ($\Delta v = 1.3$ $\mathrm{km\,s^{-1}}$), à -17.0 $\mathrm{km\,s^{-1}}$, en mai (voir Fig. 5.4).

Deux types de profils V sont globalement observés dans notre échantillon : des profils simples avec une ou deux composantes Zeeman bien séparées (R Aql et U Her en mai, et μ Cep) et des profils plus complexes avec plus de composantes, dont certaines se chevauchent. U Her en mars se situe entre les deux cas et ne présente pas le profil antisymétrique simple observé en mai. Il est important de noter que toutes les composantes I ne sont pas associées à des profils Zeeman V antisymétriques caractéristiques. La raison pourrait être la complexité du champ magnétique dans notre lobe assez large. Les signatures Zeeman dans les Stokes V qui peuvent être associées à une composante Stokes I sont décalées (en bleu ou en rouge) de quelques 0.1 $\mathrm{km\,s^{-1}}$, et donc, en général, plus que notre incertitude sur les ajustements (voir Sect. 5.4.2) et comparable à la séparation des canaux ou la dépassant. Ce décalage de vitesse est donc réel, mais nous ne pouvons pas l'expliquer par un modèle simple associant les composantes physiques du maser à des pics d'émission et à un champ magnétique. Nous ne pouvons pas exclure, sur la base de notre travail, que d'autres théories sans interprétation Zeeman standard pourraient conduire à des profils complexes avec d'éventuels décalages de vitesse.

Les spectres de Stokes V de R Aql et U Her (données de mai) présentent une signature Zeeman unique bien définie qui est décalée vers le rouge par rapport à la composante I correspondante. μ Cep présente deux signatures Zeeman bien séparées, également décalées vers le rouge, mais avec un faible S/N. L'ajustement pour U Her (données de mars) indique trois composantes, mais compte tenu du S/N, seule la composante centrale (en orange sur la Figure 5.5), qui est à peu près identique à celle détectée en mai, peut être considérée comme fiable. Les profils V de χ Cyg, R Leo, et o Ceti sont constitués de cinq ou six composantes chacun, la plupart associées à des composantes I, mais avec des décalages de vitesse notables. o Ceti présente de larges signaux négatifs V dans les parties les plus bleues et les plus rouges des profils V, qui ne peuvent pas être ajustés par les profils Zeeman. Les composantes extrêmes dans R Leo ne peuvent pas non plus être reproduites.

Nous pouvons supposer que μ Cep, U Her, et R Aql présentent moins de composantes V parce que l'émission du maser SiO est plus faible que celle des autres objets, c'est-à-dire que le S/N n'est pas suffisant pour révéler d'autres composantes V possibles.

5.4.4 Saturation de la raie maser

La théorie des raies maser cosmiques prévoit une croissance exponentielle de l'intensité de la raie jusqu'à ce que l'inversion de population atteigne un niveau critique de saturation, au-delà duquel l'émission rayonnée augmente linéairement le long de l'axe de propagation et tend à être diffusée (voir par exemple Goldreich & Kwan 1974). Une façon pratique d'estimer si les conditions de saturation du maser s'appliquent consiste à comparer le taux d'émission stimulée de la transition du maser, R, avec le taux de décroissance,

Star	#	v ($\mathrm{km\,s^{-1}}$)	Δv ($\mathrm{km\,s^{-1}}$)	$\lvert V_{\mathrm{peak}}\rvert$ (K)	δV (mK)	S/N
R Aql	1	49.5	2.1	0.03	10	2.5
μ Cep	1	26.9	1.4	0.013	11	0.9
	2	33.5	1.9	0.018		1.2
o Ceti	1	45.3	0.9	0.13	29	13
	2	46.9	0.4	0.22		25
	3	47.3	0.9	0.30		32
	4	48.1	0.8	0.17		18
	5	49.0	0.2	0.10		15
χ Cyg	1	7.3	0.9	0.11	34	10
	2	8.6	0.5	0.31		31
	3	9.6	0.9	0.42		40
	4	10.7	0.9	0.13		13
	5	11.9	0.7	0.29		29
	6	12.8	0.9	0.08		8.0
U Her	1	-18.0	1.3	0.024	11	2.0
(mars)	2	-16.1	0.7	0.04		3.5
	3	-14.7	0.7	0.026		2.1
U Her	1	-16.9	1.3	0.11	25	2.5
(mai)						
R Leo	1	-3.5	0.9	0.21	29	33
	2	-2.3	0.9	0.19		30
	3	-0.9	0.9	0.33		51
	4	-0.7	0.4	0.24		42
	5	1.5	0.9	0.44		68
	6	2.3	0.6	0.17		26

TABLE 5.5 – Caractéristiques des composantes de l'ajustement gaussien dans les spectres de Stokes V observés pour chaque source. Le # est le numéro associé à chaque composantes. v est la position centrale de la fonction gaussienne, Δv est la séparation entre les deux pics du motif Zeeman (voir Eq. 5.9) (appelés par la suite "a" et "b"), $\lvert V_{\mathrm{peak}}\rvert$ est l'intensité du pic, δV est le bruit associé à la composante, calculé dans la Sect. 5.4.2, et S/N est le rapport signal/bruit (par rapport à l'aire intégrée).

Γ, des niveaux du maser. La saturation est observée lorsque R dépasse Γ.

Le taux d'émission stimulé est calculé à partir de :

$$R = \frac{AkT_b\Delta\Omega}{4\pi h\nu}, \tag{5.7}$$

où k et h sont les constantes de Boltzmann et de Planck, T_b est la température de brillance, $A = 2,891 \times 10^{-5} s^{-1}$, le coefficient d'Einstein pour l'émission spontanée de la transition SiO v= 1, J=2-1, ν la fréquence de la raie, et $\Delta\Omega$ l'angle solide du faisceau (le rapport de la surface d'un spot maser typique à la surface du nuage maser).

Le calcul de R pour la transition SiO v=1, J=2-1 dépend essentiellement de l'estimation de $\Delta\Omega$ et de T_b. $\Delta\Omega$ a été estimé à partir des cartes interférométriques de SiO à 43 GHz dans la transition v=1, J=1-0 observée dans une étoile Mira typique sur plusieurs époques (Assaf et al. 2013) ; la moyenne sur toutes les époques est d'environ 5 $\times 10^{-2}$,

mais nous notons que les rayons minimum et maximum peuvent varier de 2 $\times 10^{-2}$ à près de 0,1 à différentes époques. Nous avons supposé que $\Delta\Omega = 5 \times 10^{-2}$ est également représentatif de l'angle de rayonnement pour la transition SiO v=1, J=2-1. Pour estimer T_b en l'absence de cartes à haute résolution spatiale des sources observées, nous nous sommes appuyés sur les mesures existantes effectuées dans une grande variété d'étoiles de type tardif. Nous avons adopté 1 UA pour la taille typique des maser, comme dans Pérez-Sánchez & Vlemmings (2013), et T_b dépend alors de la distance à la source et de la densité de flux totale observée.

$$\frac{T_b}{[\mathrm{K}]} = \frac{S(\nu)}{[\mathrm{Jy}]} \left(\frac{\Sigma^2}{[\mathrm{mas}^2]} \right)^{-1} \xi_\nu \tag{5.8}$$

avec S_ν la densité de flux, $\xi \simeq 8.24 \times 10^7$ mas^2.K/Jy pour la fréquence du maser étudié [6], un facteur constant qui prend en compte un facteur de proportionnalité de la gaussienne, Σ la taille angulaire du maser (1 UA) calculée avec les distances de Gaia Collaboration (2018) et Andriantsaralaza et al. (2022). Les valeurs estimées de T_b sont d'environ 1-160 10^7 K (voir Tab. 5.4, avec deux valeurs différentes pour deux distances possibles dans R Aql et μ Cep), ce qui est en accord avec la nature maser de ces émissions. Les valeurs dérivées de R sont données dans la Tab. 5.4.

Le taux de désexcitation des niveaux maser peut être estimé approximativement sans décrire aucun schéma de pompage si l'on reconnaît que l'excitation collisionnelle des états vibrationnels suivie d'une décroissance radiative est essentielle pour expliquer les masers de SiO observés dans l'état v=1 et au-dessus (Elitzur 1992). À 86 GHz dans l'état v=1, nous obtenons ainsi une valeur approximative de Γ à partir du taux d'émission spontanée A(v=1→0) = 5 s^{-1} (Hedelund & Lambert 1972), qui reste très supérieur au taux de désexcitation collisionnelle, C(v=1-0), quelques 10^{-3} à 10^{-4} s^{-1} pour les conditions de température et de densité attendues dans les régions où l'on observe le SiO. La densité doit rester inférieure à environ 10^{12} cm^{-3} pour éviter l'extinction par collision du maser SiO.

Malgré les incertitudes sur les valeurs de R et Γ, nous avons donc obtenu une estimation du degré de saturation du maser émetteur pour chaque composante d'intensité et chaque étoile (voir Tab. 5.4). Sur cette base, nous proposons quelles étoiles sont dans le cas non saturé ($R < \Gamma$) ou dans le cas saturé ($R > \Gamma$). Le résultat a été utilisé pour préférer l'une ou l'autre des théories décrites dans la Sec. 5.4.5 pour calculer le champ magnétique.

Nos résultats montrent que seuls χ Cyg, μ Cep (dans le cas de la plus grande distance), et U Her sont saturés. Étant donné que nous avons déduit des limites inférieures, nous avons considéré ces objets comme fortement saturés et les autres comme juste saturés. Il est communément admis dans la littérature que les masers de SiO circumstellaires sont dans le régime saturé ou fortement saturé (e.g., Kemball et al. 2009). Nous avons tout de même considéré les deux cas pour chaque étoile.

6. Cette valeur est obtenue pour $\nu = 86.243442$ GHz. ξ dépend de la fréquence : $\xi \simeq 6.1305 \times 10^{11} \frac{\nu}{\mathrm{GHz}}^{-2}$ mas^2.K/Jy

5.4.5 Estimation du champ magnétique

Le calcul de l'intensité du champ magnétique par l'effet Zeeman diffère selon la saturation de l'émission du maser. Le champ magnétique a été calculé à partir des deux pics trouvés pour Stokes V avec notre code *rvm*. Avec les décompositions gaussiennes utilisées dans l'équation 5.5, les extrema d'intensité sont observés à :

$$v_{\rm peak} = v \pm \frac{1}{\sqrt{2}}\Delta v_{\rm D}. \tag{5.9}$$

Les deux pics, notés a et b (voir Tab. 5.8), sont séparés par $\Delta v = \sqrt{2}\Delta v_{\rm D}$ (voir Tab. 5.5).

5.4.5.1 Maser saturé

Dans un maser saturé, les vecteurs de Stokes fractionnés se propageant dans le nuage de gaz sont constants. L'équation de transfert radiatif pour les vecteurs de Stokes admet très peu de situations avec un vecteur de Stokes constant et se propageant non nul. Ces solutions ont été étudiées en profondeur par Elitzur (1996), tandis que d'autres théories ont été proposées (voir Herpin et al. 2006, pour une brève discussion).

Nous écrivons le rapport x_B entre le déplacement Zeeman Δv_B et la largeur de la raie Doppler $\Delta v_{\rm D}$, tous deux en $\mathrm{km\,s^{-1}}$:

$$x_B = \Delta v_B / \Delta v_{\rm D} \tag{5.10}$$

pour l'effet Zeeman en écrivant explicitement $\Delta v_B = 14 g \lambda_0 B$, où g est le facteur de Landé en termes de magnéton de Bohr (où g pour la molécule diamagnétique SiO est $8.44 \cdot 10^{-5}$; voir l'annexe C), $\lambda_0 = 0,34785$ cm la longueur d'onde de l'émission du maser SiO v=1 J=2-1, et B l'intensité du champ magnétique en Gauss.

Dans le régime de saturation et pour le rapport $x_B < 1$ (qui est approprié pour les espèces moléculaires diamagnétiques), Elitzur (1996) a trouvé que x_B est proportionnel à la polarisation circulaire fractionnelle $p_{\rm C}$ au pic du paramètre Stokes V, selon la loi suivante :

$$x_B = \frac{3\sqrt{2}}{16} p_{\rm C} \cos\theta_1, \tag{5.11}$$

où θ_1 est l'angle entre la direction du champ magnétique et le faisceau incident arrivant à la molécule de SiO.

Herpin et al. (2006) ont suivi une approche similaire pour estimer l'intensité du champ magnétique à partir de leurs valeurs observées de $p_{\rm C}$. Cependant, ils ont utilisé $g = 10^{-3}$, de sorte que leurs estimations de l'intensité du champ doivent être réévaluées en utilisant $g = 8.44 \cdot 10^{-5}$ pour la comparaison avec notre nouvelle étude (voir Sect. 5.6). À partir de Δv_B ci-dessus et de l'Eq. 5.11, nous obtenons au pic, $v_{\rm peak}$, du paramètre Stokes V :

$$\frac{B}{\cos\theta_1} \simeq 645 \Delta v_{\rm D} p_{\rm C}(v_{\rm peak}) \tag{5.12}$$

L'équation 5.12 a été utilisée pour déduire l'intensité du champ magnétique en Gauss, notée $B_{\rm E}$ dans la suite, lorsque $p_{\rm C}$ et $\Delta v_{\rm D}$ sont connus. L'incertitude restante dans la détermination de l'intensité du champ provient de θ_1 (Sect. 5.4.5.3).

5.4.5.2 Maser non saturé

Lorsque le maser n'est pas saturé et que les vecteurs de Stokes fractionnés ne sont pas constants le long du trajet optique, l'approximation typique du champ faible s'applique. Le décalage de la fréquence Zeeman d'un niveau donné est proportionnel à la fréquence de Larmor :

$$\nu_L = \frac{\mu}{h} B \tag{5.13}$$

où h est la constante de Planck. Le magnéton μ est souvent le magnéton de Bohr. Pour la molécule diamagnétique SiO, cependant, tous les moments angulaires électroniques sont nuls et la seule contribution aux moments angulaires totaux provient des moments angulaires associés à la rotation de la masse totale de la molécule. Ces moments sont exprimés en unités du magnéton nucléaire. Il est cependant courant de réécrire les formules en termes de magnéton de Bohr et de redéfinir le facteur de Landé en conséquence. Les détails se trouvent dans l'annexe C. Nous adoptons cette convention ci-dessous et, comme dans le cas du maser saturé, nous écrivons toutes les formules en termes de magnéton de Bohr.

Dans l'approximation du champ faible, on peut démontrer que le profil de la raie de Stokes V est proportionnel à la dérivée du profil d'intensité (voir aussi Eq. 5.6) :

$$V(v) = \Delta v_B \cos\theta_2 \frac{dI}{dv}(v) \tag{5.14}$$

où θ_2 est l'angle entre la direction du champ magnétique et le faisceau émis (vers l'observateur). Nous pouvons exprimer V en fonction de B, l'axe des vitesses étant échantillonné avec une séparation des canaux de 0,139 km/s :

$$V(v) \simeq 14 g \lambda_0 B \cos\theta_2 \frac{dI}{dv}(v) \frac{1}{0.139} \tag{5.15}$$

Une fois de plus, nous avons supposé que le profil de la raie de chaque composante du maser est gaussien, ce qui nous permet de récupérer l'intensité du champ magnétique à partir des amplitudes maximales des Stokes V et I :

$$B \cos\theta_2 \simeq 338 \frac{V(v_{\text{peak}})}{d_v I(v_{\text{peak}})} \tag{5.16}$$

d_v étant la dérivée en fonction de la vitesse $= \frac{\delta}{\delta_v}$.

Dans le cas non saturé, l'intensité du champ magnétique est notée B_{Z} dans ce qui suit.

5.4.5.3 Détermination de l'angle d'incidence du faisceau maser

Les deux angles différents, θ_1 et θ_2, définis précédemment pour les cas saturés et non saturés, respectivement, sont difficiles à déterminer à moins d'avoir accès à des informations indépendantes sur la direction du champ. Comme x_B est inférieur à 1, toutes les composantes Zeeman se chevauchent et seul le cas de polarisation de type 0 décrit dans Elitzur (1996) s'applique. En suivant le raisonnement d'Elitzur, nous pouvons calculer

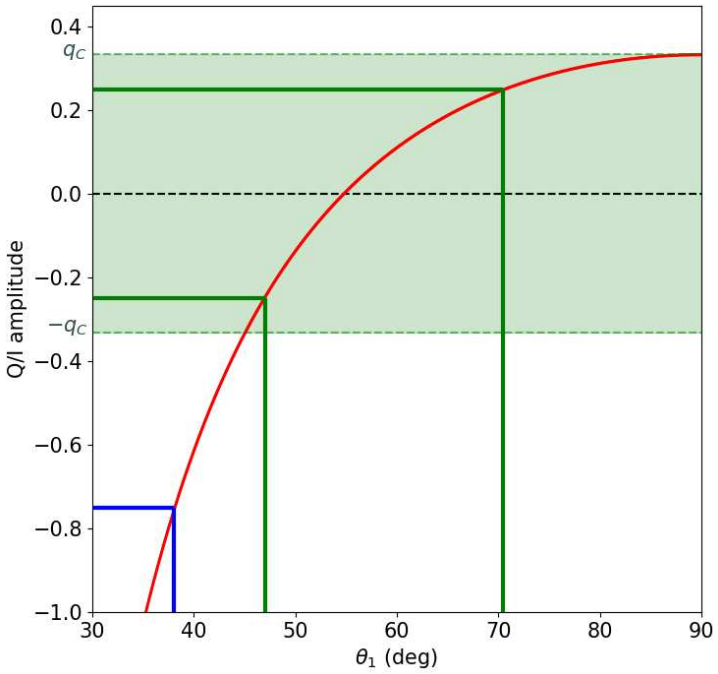


FIGURE 5.7 – Rapport $q = Q/I$ en fonction de l'angle θ_1 (Eq. 5.17). La zone verte ($|q| < q_c$) contient deux solutions pour l'angle, comme le montre l'exemple avec $|q| = 0.25$, les deux lignes vertes. Au-delà de cette zone (exemple en bleu), une seule solution est possible.

l'angle θ_1 dans le cas saturé en utilisant nos résultats de polarisation linéaire.

Dans l'approximation du champ faible, il n'y a pas de polarisation linéaire dans la raie du maser (voir l'article de Watson 2009). Une approximation de second ordre peut être proposée pour la polarisation linéaire, mais elle ne décrit pas correctement les profils de polarisation linéaire. La polarisation linéaire due à l'effet Zeeman est généralement inférieure d'un ordre de grandeur à la polarisation circulaire (Pérez-Sánchez & Vlemmings 2013) et présente une polarisation nette nulle sur la longueur d'onde (voir Landi Degl'Innocenti & Landolfi 2004). On pourrait affirmer que nous observons des géométries très spécifiques qui offrent de grandes amplitudes à la polarisation linéaire sous l'effet Zeeman : les champs transversaux à la ligne de visée. Cependant, il semble incongru d'accepter que nous observions systématiquement des champs transversaux. L'effet Zeeman ne peut pas produire des profils de type gaussien dans l'approximation du champ faible pour la polarisation linéaire, tels que ceux observés ici (e.g. Wiebe & Watson 1998; Watson 2009). La rotation de Faraday [7] peut produire une polarisation linéaire nette, mais pour ce faire, les champs magnétiques impliqués seraient trop forts pour être décrits dans l'approximation du champ faible, et alors, la polarisation circulaire ne peut pas être expliquée dans son amplitude ni dans sa forme. Nous pouvons conclure sans risque que, sous l'hypothèse de l'approximation du champ faible, la polarisation linéaire observée doit être due à un autre mécanisme physique que l'effet Zeeman, comme nous le verrons plus loin dans la section

7. Nous entendons par là une rotation de Faraday à l'intérieur de la source qui modifie les propriétés de la polarisation radio en présence d'un champ magnétique. Les électrons mélangés au nuage de SiO et à l'enveloppe circumstellaire pourraient faire tourner l'onde de SiO polarisée linéairement ; on espère que ce dernier effet est faible étant donné les courtes distances impliquées, à moins que l'intensité du champ ne soit forte.

5.5.1. D'autre part, la théorie d'Elitzur montre qu'il faut s'attendre à un signal de polarisation linéaire en même temps qu'un signal de polarisation circulaire. Une fois de plus, dans l'hypothèse d'un profil de raie gaussien et suivant Elitzur (1996), dans un système de coordonnées aligné sur le champ magnétique projeté dans le plan du ciel, $q = Q/I$ est donné par :

$$q = 1 - 2\frac{3 - 2R_1}{(2R_1 + 1)\sin^2\theta_1} \tag{5.17}$$

avec R_1 fonction de x_B (défini dans l'Eq. 5.10) et de l'argument de fréquence sans dimension x défini dans Elitzur (1996) :

$$x = (v - v_0)/\Delta v_D \tag{5.18}$$

Les valeurs numériques de x_b sont faibles et R_1 n'est donc pas sensible aux valeurs exactes de Δv_B et Δv_D . Ceci est utilisé pour déduire la valeur critique de q lorsque θ_1 approche 90° près du centre de la ligne SiO où $x = 0$:

$$R_1 = 1 - x_B^2(1 - 2x^2). \tag{5.19}$$

La dépendance de q par rapport à θ_1 est illustrée sur la Fig. 5.7. Compte tenu de nos rapports S/N typiques, et en raison de la dépendance quadratique de B et des faibles valeurs de l'intensité du champ attendues, la relation illustrée dans cette figure est indépendante de l'intensité du champ. Une valeur de q nous fournit une estimation indépendante de θ_1.

Cette polarisation linéaire q est perpendiculaire au plan formé par la direction du faisceau incident et le vecteur du champ magnétique, et aucun autre signal de polarisation linéaire n'est attendu. Nous ignorons quelle est cette direction dans les composantes du maser, et nous avons donc ignoré comment cette polarisation linéaire est projetée dans les directions de nos instruments pour Stokes Q et Stokes U. La polarisation totale mesurée $p_{\rm L}$ doit être l'amplitude totale de la polarisation linéaire émise q dans la théorie d'Elitzur, à l'exception de son signe. Comme nous n'avons accès qu'à la valeur absolue de $p_{\rm L}$ à partir de nos observations, deux situations différentes peuvent se produire en fonction de la valeur mesurée de $p_{\rm L}$ par rapport à une valeur critique q_C définie par $\lim_{\theta_1 \to +90^\circ} q = 0,33$:

- $|q| > q_c$: La solution pour l'angle θ_1 est unique (voir l'exemple en bleu en Fig. 5.7).
- $|q| < q_c$: Il y a deux solutions pour θ_1 (voir l'exemple en vert), et donc, deux solutions pour l'intensité du champ magnétique.

5.5 Résultats

5.5.1 Polarisation observée et excitation du maser

Les fractions de polarisation circulaire et linéaire dérivées pour chaque composante V identifiée dans chaque étoile sont données dans les colonnes 6 et 7 de la Tab. 5.8 pour chaque composante détectée. Les autres colonnes présentent les estimations du champ magnétique qui sont discutées dans la section suivante.

Deux régimes de polarisation linéaire sont observés dans notre échantillon. μ Cep, R Aql, et U Her présentent pour la plupart des niveaux faibles du paramètre $p_{\rm L}$ ($< 25\%$),

alors que d'autres étoiles montrent des valeurs élevées, jusqu'à 60%. Nos niveaux de polarisation peuvent être comparés à ceux de Herpin et al. (2006). Les fractions de polarisation linéaire sont similaires dans ces deux travaux. Cependant, alors qu'ils ont mesuré une valeur absolue moyenne de la polarisation circulaire de 9% et 5% dans les Miras et les variables semi-régulières, respectivement, nous n'avons que 1.9% dans notre échantillon (composé de cinq Miras et de la RSG μ Cep). Nous notons également que plusieurs composantes de Herpin et al. (2006) ont des valeurs de p_C inférieures ou égales à 2%. Le niveau de polarisation plus faible observé dans la RSG (Herpin et al. 2006) est également confirmé en p_L pour μ Cep, mais pas en polarisation circulaire car cette étoile présente la fraction p_C la plus élevée de notre échantillon. Une comparaison spécifique peut être faite pour R Leo et χ Cyg, qui sont observés dans les deux études, même si le profil de la raie maser en Stokes I a fortement changé entre les deux époques d'observation. La fraction de polarisation linéaire atteint le même niveau de 30% et 40% pour R Leo et χ Cyg (avec des valeurs plus élevées pour certaines composantes). La polarisation circulaire est nettement plus faible dans notre cas (2.3% maximum, contre 10-20%).

Ces valeurs pourraient nous éclairer sur l'origine de la polarisation observée en relation avec l'effet Zeeman ou d'autres effets. Nous pouvons étudier les mécanismes qui pourraient produire les fractions de polarisation linéaires observées. Dans le cas d'un pompage isotrope des niveaux d'énergie donnant lieu à l'émission du maser (e.g. Nedoluha & Watson 1990) et pour un maser modérément saturé, p_L supérieur à 15%, jusqu'à 25%, ne peut être généré qu'avec des configurations d'angles particulières (un angle θ_2 plus grand que 45°). Dans des conditions de pompage anisotrope, des valeurs p_L beaucoup plus élevées peuvent être obtenues, mais aucune valeur p_C élevée ne peut être générée (see Lankhaar & Vlemmings 2019). Des mécanismes non-Zeeman peuvent également conduire à une polarisation circulaire. Asensio Ramos et al. (2005), en tenant compte de l'effet Hanle, ont montré que des changements dans les conditions d'anisotropie du rayonnement peuvent entraîner une rotation de l'angle de position du vecteur électrique (EVPA) et le pompage anisotrope d'un maser dichroïque. Plusieurs variantes des mécanismes de pompage anisotrope (e.g. Western & Watson 1983; Wiebe & Watson 1998; Watson 2009) ou de la diffusion résonante anisotrope d'un gaz SiO d'avant-plan magnétisé (Houde 2014) ont été proposées pour le cas non-Zeeman également. Ces mécanismes non-Zeeman ont été écartés dans certains environnements spécifiques, et sur la base d'observations à très haute résolution spatiale (VLBI) de l'EVPA (voir par exemple Kemball et al. 2009; Richter et al. 2016; Tobin et al. 2019). Plusieurs théories de maser polarisé ont été développées avec succès, mais aucune ne peut expliquer complètement tous les cas observés.

Comme indiqué par Wiebe & Watson (1998), les mécanismes non-Zeeman dans les masers non saturés devraient conduire à une relation proportionnelle entre p_C et p_L (puisque p_C serait créé à partir de p_L) avec $\overline{p_C} \leq \overline{p_L}^2/4$. Herpin et al. (2006) ont trouvé une fonction linéaire entre les deux polarisations, mais avec une grande dispersion. Notre échantillon ne révèle aucune corrélation (voir Fig. 5.8, sauf peut-être pour R Leo). La seconde condition ($\overline{p_C} \leq \overline{p_L}^2/4$) n'est pas remplie non plus (voir Tab. 5.6), comme l'ont également observé Richter et al. (2016) et Tobin et al. (2019), sauf pour χ Cyg. Étant donné que l'émission du maser dans cette étoile est définitivement saturée (voir Tab. 5.4), nous avons adopté le scénario Zeeman pour l'ensemble de l'échantillon. Néanmoins, nous notons qu'un gradient de vitesse le long du chemin de propagation, mais toujours compatible avec une amplification cohérente du maser SiO dans certaines sources, pourrait augmenter p_C et pourrait même produire des spectres de Stokes V non antisymétriques (Nedoluha & Watson 1994).

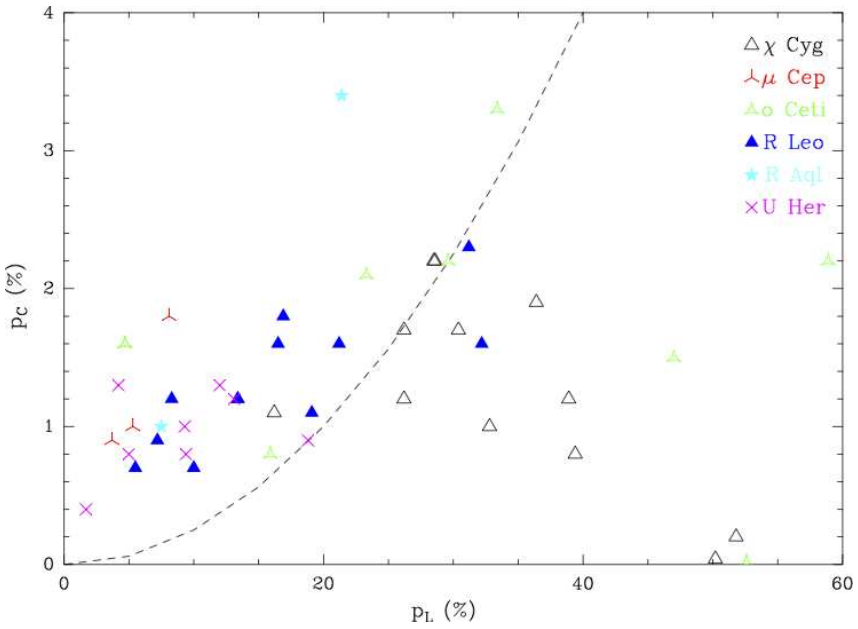


FIGURE 5.8 – Polarisation fractionnelle absolue p_C en fonction de p_L pour l'ensemble de l'échantillon et toutes les composantes du maser. La ligne en pointillés correspond à $p_C = {p_L}^2/4$.

Star	$\overline{p_C}$	$\overline{p_L}^2/4$
R Aql	0.022	0.005
μ Cep	0.042	0.001
o Ceti	0.022	0.019
χ Cyg	0.013	0.028
U Her		
(mars)	0.009	0.002
(mai)	0.012	0.004
R Leo	0.013	0.006

TABLE 5.6 – Taux de polarisation circulaire moyen $\overline{p_C}$ et $\overline{p_L}^2/4$ moyen pour chaque étoile.

Nous avons considéré l'angle de polarisation χ tel que défini par l'équation 5.2. Tout d'abord, nous soulignons qu'en raison de notre résolution spatiale limitée, les paramètres de Stokes sous-jacents Q et U sont des quantités moyennées sur le faisceau. Par conséquent, s'il y avait deux spots de maser séparés spatialement dans notre faisceau principal, chacune avec un EVPA différent, mais émettant à la même vitesse, nous ne serions pas en mesure d'interpréter rigoureusement l'angle χ mesuré. Seules les observations VLBI pourraient séparer deux taches maser de ce type et tracer avec précision l'EVPA dans toute la photosphère. Comme l'explique Tobin et al. (2019), un angle entre la propagation du maser et la ligne de visée plus petit ou plus grand que l'angle de van Vleck (55°) déterminera si le champ magnétique est parallèle ou perpendiculaire à l'EVPA, respectivement. Comme dans les études précédentes (e.g. Herpin et al. 2006; Kemball et al. 2011; Tobin et al. 2019), des sauts de χ sont observés pour certaines sources à travers le profil SiO : R Leo ($\sim 70° - 160°$), o Ceti ($\sim 35° - 70° - 140°$), et R Aql ($\sim 95° - 180°$). Le comportement dans U Her est plus erratique, c'est-à-dire que nous n'observons pas de sauts de $\pi/2$

moyennés par le faisceau, alors que des rotations claires de $\pi/2$ sont rapportées dans les publications VLBI. Ceci peut à nouveau être expliqué par les effets d'étalement du faisceau dans nos données. Une rotation de ce type, ainsi que la dépendance de la polarisation linéaire fractionnelle par rapport à l'angle entre le champ magnétique et la ligne de visée, est prédite dans les masers linéaires et saturés qui sont pompés de manière isotrope (Goldreich et al. 1973; Elitzur 2002). Ces modèles et les observations polarimétriques VLBI de TX Cam (Kemball et al. 2011) tendent à exclure le modèle proposé par Asensio Ramos et al. (2005), au moins pour cet objet. Cependant, nous soulignons également que, bien que le modèle du maser de Goldreich et al. (1973) semble adéquat, une certaine rotation de Faraday doit être invoquée pour expliquer la rotation régulière de l'EVPA (voir Kemball et al. 2011; Tobin et al. 2019). Enfin, nous mentionnons que les changements dans l'EVPA pourraient également résulter d'un changement rapide des orientations du champ magnétique au-dessus des taches magnétiques froides sur la photosphère stellaire (Soker 2002) (en supposant qu'il existe un lien physique entre les taches photosphériques et les couches atmosphériques supérieures où l'on observe le SiO).

Avec le taux de saturation, nous avons montré que nous pouvions estimer que χ Cyg, μ Cep (dans le cas de la plus grande distance), et U Her sont saturés. Malgré des polarisations linéraires, assez élevés dans o Ceti et R Leo, nous n'avons pas le taux de saturation qui montrerait qu'elles sont saturées. Pour ces deux sources, nous entrons en contradiction, nous ne pouvons pas estimer dans quel régime de saturation nous sommes. R Aql et μ Cep de leur côté ne semblent pas saturées. Or nous avons vu que des mécanismes non-Zeeman dans les masers non saturés devraient conduire à une relation proportionnelle entre p_C et p_L avec $\overline{p_C} \leq \overline{p_L}^2/4$ mais cette condition n'est pas vérifié pour les deux sources. Nous concluons donc que R Aql et μ Cep présentent des maser non saturés avec un mécanisme Zeeman. Nous résumons les conclusions de saturation en Tab. 5.7.

χ Cyg	saturé
U Her	saturé
o Ceti	indéterminé
R Leo	indéterminé
μ Cep	non saturé
R Aq	non saturé

TABLE 5.7 – Bilan de saturation pour toutes les sources

5.5.2 Intensité du champ magnétique

En appliquant la méthode décrite dans la Sect. 5.4.5, nous avons obtenu des estimations de l'intensité du champ magnétique en visibilité directe B_E et $B_Z\cos(\theta_2)$ pour les cas saturés et non saturés pour chaque étoile (voir Tab. 5.8, Fig. 5.9 pour les sources fortement saturés, Fig. 5.10 pour les sources indeterminés et Fig. 5.11). Comme expliqué dans la Sect. 5.4.1, nous avons calculé l'intensité du champ magnétique aux deux pics de chaque profil V antisymétrique détecté, ce qui a donné deux valeurs extrêmes de B pour chaque composante Zeeman (a et b dans la Tab. 5.8). Les valeurs dans le cas non saturé sont généralement plus élevées.

Alors que l'angle θ_2 dans le cas non saturé reste inconnu, dans le cas saturé l'angle θ_1 a été estimé, avec deux solutions quand la polarisation linéaire est inférieure à la valeur critique (voir la section 5.4.5.3). Il en résulte deux possibilités pour $B_{\rm E}$. Ces deux solutions de θ_1 ont été utilisées pour calculer $B_{\rm E}$ dans la Tab. 5.8. Nous ne pouvons pas exclure que la polarisation linéaire observée comprenne une contribution de mécanismes non Zeeman, ce qui conduirait à une surestimation de $p_{\rm L}$, générée sous l'action de l'effet Zeeman et donc de θ_1. Dans ce cas, les valeurs de $B_{\rm E}$ de la Tab. 5.8 doivent être considérées comme des limites inférieures.

Au moins deux objets, χ Cyg et U Her, peuvent être considérés comme donnant lieu à des masers saturés (voir les colonnes 6 et 7 de la Tab. 5.8). Pour χ Cyg, $B_{\rm E}$ varie entre 0.7 et 4.3 Gauss pour les composantes 1-5. Nous notons que les résultats $B_{\rm Z} \times \cos(\theta_2)$ pour le cas non saturé sont du même ordre de grandeur (légèrement plus élevés pour la composante 1). Les résultats pour la composante 6 sont moins fiables, compte tenu de la grande incertitude et de la différence d'estimation entre les deux pics a et b (voir Figure 5.9). Nous avons donc exclu cette composante de la suite de la discussion. Pour U Her, le champ magnétique ($B_{\rm E}$) est d'environ 0.9-1.5 Gauss en mars et entre 2.4-5.1 Gauss en mai en considérant la composante centrale 2, à une vitesse similaire pour les deux périodes. Les deux autres composantes latérales (1 et 3) observées en mars ont de grandes incertitudes et n'ont pas été détectées en mai (voir Fig. 5.9).

Si l'on considère que tous les autres objets présentent une émission maser non saturée (voir la section 5.4.4, les résultats sont illustrés en Fig. 5.10 et 5.11), nous supposons que $B_{\rm Z} \times \cos(\theta_2)$ fournit une estimation fiable du champ, bien que θ_2 reste inconnu ; des valeurs ad hoc indicatives de θ_2, par exemple 45°, peuvent être envisagées. Les estimations du champ magnétique (en supposant que $\theta_2 = 45°$) diffèrent d'une étoile à l'autre et d'une composante à l'autre. Dans le cas de R Aql, le spectre Stokes V est largement dominé par la fuite instrumentale de Stokes I dans Stokes V (voir la section 5.3.2.1). Nous considérons donc que $B_{\rm Z} \times \cos(\theta_2) = 8.2$ Gauss comme indiqué dans la Tab. 5.8 est une limite supérieure de l'intensité du champ dans le cas non saturé. Pour les deux objets R Leo et *o* Ceti, le champ magnétique en termes de quantité $B_{\rm Z} \times \cos(\theta_2)$ est respectivement de 2.0-32.1 et de 0.8-31.0 Gauss. La composante 1 de *o* Ceti (>100 Gauss) a été écartée car nous n'avons pas réussi à l'ajuster avec la dérivée d'une fonction gaussienne (voir Fig. 5.4 et Fig. 5.5). Il est donc possible qu'elle ne soit pas façonnée par un effet Zeeman, auquel cas le champ magnétique estimé ne serait pas pertinent.

En raison du très faible rapport S/N pour les composantes V dans μ Cep (voir Tab. 5.5), les incertitudes de champ sont trop importantes et ne sont pas prises en compte dans notre discussion.

5.6 Discussion

Depuis les années 1990, divers scénarios impliquant une rotation stellaire lente, la présence d'un compagnon et un champ magnétique faible ont été proposés pour expliquer comment la géométrie de la CSE peut être façonnée dans les étoiles évoluées (voir par exemple Soker & Harpaz 1992). Toutes les études ont rapporté que l'intensité du champ magnétique est trop faible pour dominer la dynamique du gaz (Balick & Frank 2002; Her-

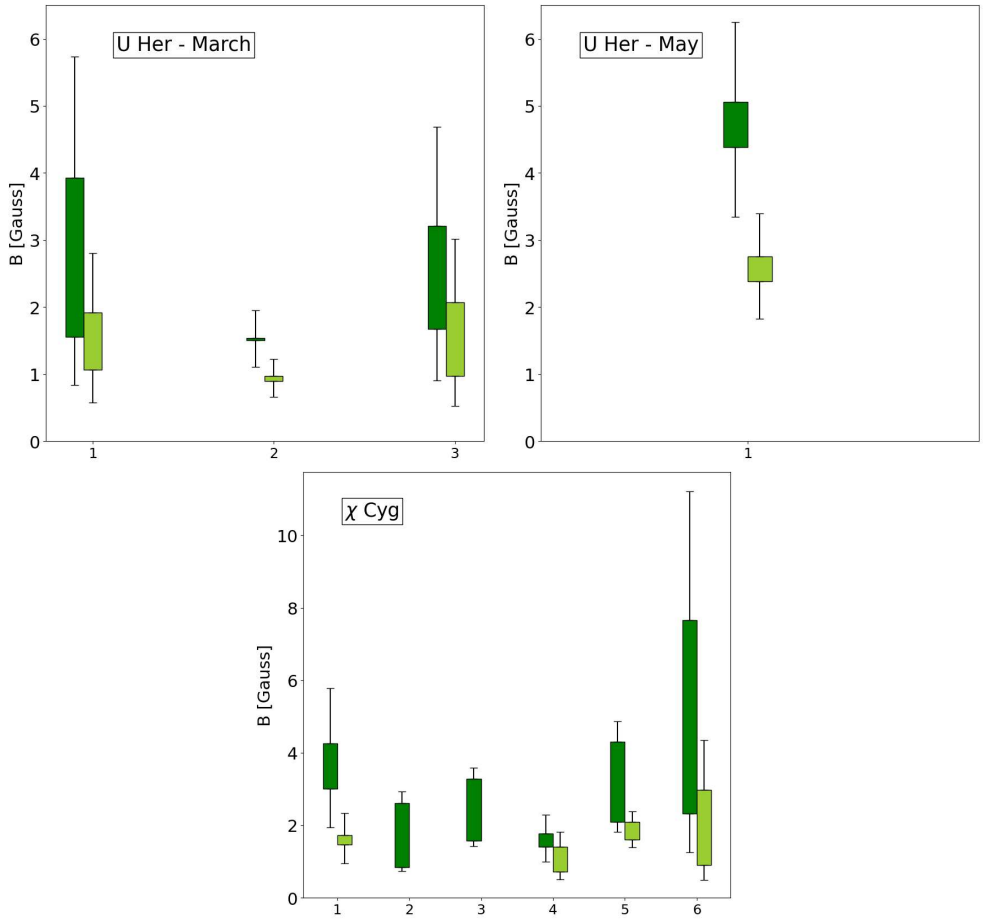


FIGURE 5.9 – Valeurs du champ magnétique pour U Her pour les deux périodes d'observation et χ Cyg, calculées à partir de l'Eq. 5.12 avec deux solutions d'angle θ_1 (vert foncé et vert clair), lorsque la polarisation linéaire est inférieure à 33% (voir Sect. 5.4.5.3 et Fig. 5.7). Sur l'axe des x, les nombres correspondent aux composantes gaussiennes, comme décrit dans la deuxième colonne de la Tab. 5.8. La longueur de la barre correspond à la différence entre le champ magnétique calculé au premier et au deuxième pic de la dérivée de la composante gaussienne.

pin et al. 2006; Vlemmings et al. 2017). Néanmoins, un champ modéré d'environ 1 Gauss à la surface stellaire peut jouer le rôle d'un catalyseur ou d'un agent collimateur (Soker 1998; Blackman et al. 2001; Greaves 2002). Le rôle d'un compagnon dans l'évolution de la morphologie de l'enveloppe, sans qu'il soit nécessaire d'invoquer un champ magnétique, a été récemment démontré par Decin et al. (2020).

L'intensité du champ magnétique diminue avec l'augmentation de la distance r à la photosphère et peut être exprimée comme une loi de puissance qui dépend de sa géométrie (Parker 1958; Matt et al. 2000; Meyer et al. 2021), en r^{-1}, r^{-2}, et r^{-3} pour un champ toroïdal, poloïdal, et dipolaire, respectivement. En comparant leurs résultats aux estimations de champ dérivées des masers OH et H_2O plus éloignés dans la CSE, Herpin et al. (2006), Duthu et al. (2017) et Vlemmings et al. (2017) ont conclu qu'un champ magnétique toroïdal était dominant (voir également ci-dessous). Une combinaison d'un champ toroïdal et d'un champ poloïdal n'est cependant pas exclue (voir Meyer et al. 2021, par exemple pour les RSG).

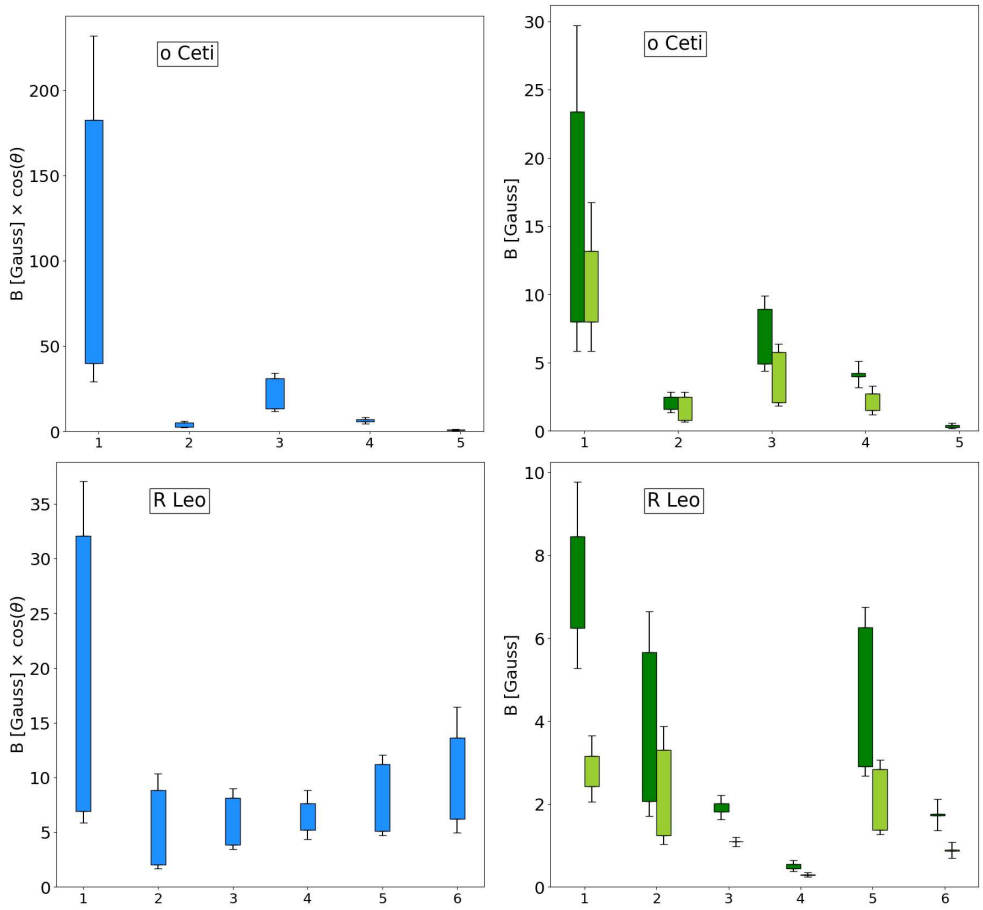


FIGURE 5.10 – Valeurs du champ magnétique pour *o* Ceti et R Leo, calculées à partir des Eq. 5.12 et 5.16. Sur l'axe des x, les nombres correspondent aux composantes gaussiennes, comme décrit dans la deuxième colonne de la Tab. 5.8.

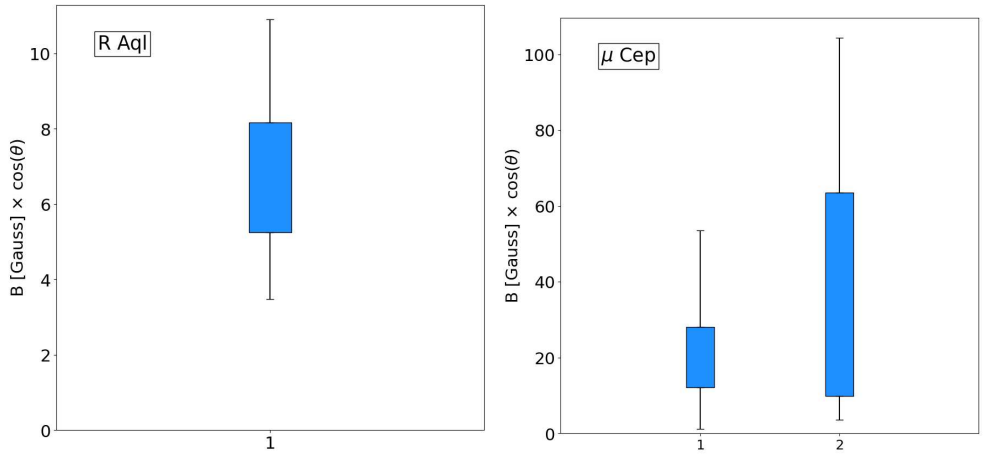


FIGURE 5.11 – Valeurs du champ magnétique pour R Aql et μ Cep, calculées à partir de l'Eq. 5.16. Sur l'axe des x, les nombres correspondent aux composantes gaussiennes, comme décrit dans la deuxième colonne de la Tab. 5.8.

Dans ce qui suit, nous comparons nos nouvelles observations et nos nouveaux calculs à ceux de Herpin et al. (2006), qui n'ont pris en compte que l'émission de maser saturé. Tout d'abord, nous soulignons que les intensités de champ dérivées dans leur étude doivent être

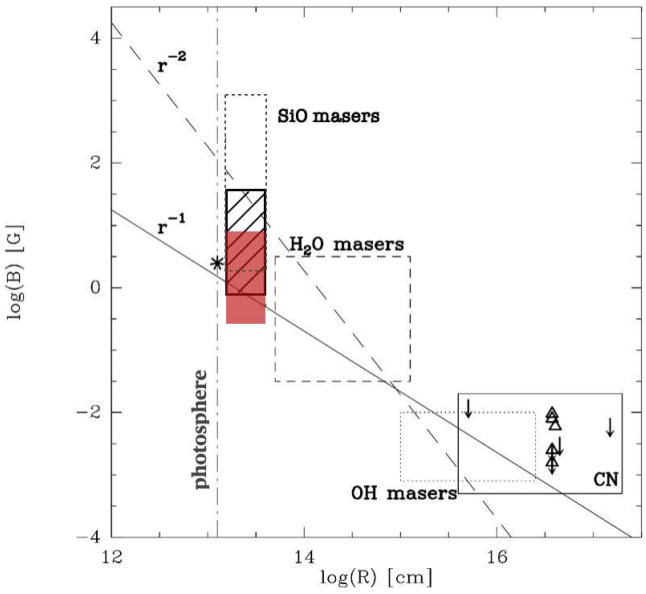


FIGURE 5.12 – Évolution du champ avec la distance (adapté de Vlemmings et al. 2012; Duthu et al. 2017). Les quatre boîtes montrent les masers SiO (la boîte rouge représente les résultats de ce travail pour un maser saturé, la boîte hachurée pour un maser non saturé en utilisant $\theta_2 = 45°$, la boîte en pointillé les résultats de Herpin et al. (2006)), les masers H_2O et OH, et le CN. Les champs magnétiques r^{-2} de type solaire et r^{-1} toroïdal sont discutés dans la Sect. 5.6. L'étoile proche de la boîte du maser SiO correspond au champ magnétique mesuré par Lèbre et al. (2014) dans χ Cyg. La ligne verticale en pointillés indique la surface stellaire pour les Miras.

augmentées parce qu'un facteur de Landé erroné ($g = 10^{-3}$ au lieu de 8.44×10^{-5}) et une longueur d'onde erronée ont été utilisés. Le facteur correctif est de 9.924. Les intensités de champ magnétique obtenues ici sont donc inférieures à celles obtenues par Herpin et al. (2006) pour la même région circumstellaire où l'émission radio du SiO est observée (2-5 $R_\star$ de la photosphère, d'après la carte VLBI du SiO). Herpin et al. (2006) ont trouvé une valeur moyenne de ∼34 Gauss (qui inclut le facteur correctif ci-dessus), alors que nos estimations actuelles sont inférieures à 32 Gauss (en excluant les résultats peu fiables de la Tab. 5.8), et elles montrent une valeur moyenne de 2.5 Gauss pour le cas saturé et de 12.4 Gauss pour le cas non saturé, en supposant $\theta_2 = 45°$. Lorsque nous ne considérons, comme dans Herpin et al. (2006), que le cas saturé, nos estimations du champ magnétique varient de 0.3 à 8.9 Gauss. Nous concentrons maintenant la comparaison sur χ Cyg et R Leo, qui ont été observés dans les deux études. Alors que pour R Leo (en adoptant $\theta_1 = 45°$), B a été estimé par Herpin et al. (2006) à 41-45 Gauss dans le cas saturé après réévaluation, nous trouvons ici des valeurs plus faibles : $B_E \sim 0.3-8.5$ G et $B_Z \sim 2.8-4$ G (à $\theta_2 = 45°$ pour l'intervalle 2.0-32.1 G dans la Tab. 5.8) pour les cas saturé et non saturé, respectivement. Les deux observations sont séparées par plus de 20 ans, et non seulement l'activité stellaire, mais aussi le champ magnétique peuvent avoir changé pendant cette période. Ceci est valable pour tous les objets. Nous soulignons néanmoins qu'en dépit des incertitudes sur le degré de saturation des masers (ce qui entraîne une incertitude sur B), notre méthode d'étalonnage minutieuse et la procédure d'ajustement des composantes Zeeman conduisent à des estimations raisonnables du champ magnétique. Le cas de χ Cyg est également illustratif. Le champ (B_E) est de 0.7-4.3 Gauss, ce qui est à comparer avec l'ancienne estimation de Herpin et al. (2006) de 48.6 Gauss (0-85.4 Gauss, après

réévaluation de l'intensité du champ). Compte tenu de la mesure de 2-3 Gauss effectuée par Lèbre et al. (2014) à la surface de χ Cyg, nous pourrions nous attendre à un champ de 0.5-1.5 ou 0.1-0.8 Gauss dans la couche de SiO si le champ variait comme $1/r$ ou $1/r^2$, respectivement. Nos résultats sont donc en accord avec un champ poloïdal, mais n'excluent pas non plus une composante toroïdale, au moins localement. Cette comparaison doit être prise avec précaution, compte tenu du fait que les deux mesures sont très éloignées dans le temps. La variation du champ observée dans U Her sur une période de deux mois souligne ce point. En outre, pour la RSG μ Cep, nous avons obtenu des valeurs de champ magnétique supérieures à celles estimées par Tessore et al. (2017) à la surface stellaire (1 Gauss). Le fait que ces deux valeurs ne soient pas compatibles avec un champ qui diminue avec l'augmentation de la distance peut à nouveau souligner la variabilité temporelle du champ magnétique.

La Fig. 5.12 reprend toutes les mesures de champ magnétique de la littérature. Nos nouvelles mesures fournissent de nouvelles contraintes pour la région de la couche de SiO à quelques rayons stellaires et semblent exclure un champ poloïdal global, en particulier lorsque nous supposons que toutes les émissions maser sont saturées. Néanmoins, sur la base de nos observations de χ Cyg, nous ne pouvons pas exclure un champ poloïdal proche de la surface de cette étoile qui évolue en un champ toroïdal dominant dans la région du maser SiO, comme proposé par Meyer et al. (2021) dans les étoiles supergéantes.

5.7 Conclusions

Nous avons réalisé de nouvelles observations polarimétriques du maser SiO avec l'instrument XPOL à l'IRAM-30m dans un nouvel échantillon d'étoiles évoluées froides. En appliquant une nouvelle méthode de réduction des données, nous avons supprimé la majeure partie de la polarisation instrumentale pour déduire des fractions de polarisation circulaire et linéaire avec une grande précision. À partir de ces résultats et de ceux de la théorie des masers, nous avons obtenu des intensités de champ magnétique (allant de quelques Gauss à plusieurs dizaines de Gauss) qui contraignent mieux la région de la coquille de SiO au-dessus de la photosphère stellaire. Un champ poloïdal global peut être exclu.

De plus, nos observations de l'intensité du champ magnétique dans U Her sur une période de deux mois suggèrent un lien possible avec la phase stellaire, c'est-à-dire avec l'activité de la pulsation/photosphérique.

Star	#	$p_{\rm L}$ (%)	$p_{\rm C}$ (%)	χ (°)	$B_{\rm E}$ (Gauss)	$B_{\rm E}$ ($2^{\rm nd}$ solution) (Gauss)	$B_{\rm Z} \times \cos(\theta_2)$ (Gauss)	Comment
R Aql	1 - a	7.5	-1.0	179.5	(6.1 ± 2.0)	(3.7 ± 1.3)	(5.3 ± 1.8)	*
	- b	21.4	3.4	95.3	(21.6 ± 7.3)	(9.8 ± 3.3)	(8.2 ± 2.8)	*
μ Cep	1 - a	4.5	-0.9	143.6	(3.7 ± 3.4)	(2.4 ± 2.2)	(12.2 ± 11.1)	*
	- b	5.3	1.0	133.8	(4.3 ± 3.9)	(2.7 ± 2.4)	(28.1 ± 25.6)	*
	2 - a	7.9	14.0	145.4	(76.9 ± 49.4)	(43.3 ± 27.8)	(63.6 ± 40.1)	*
	- b	8.1	-1.8	117.6	(10.4 ± 6.7)	(6.1 ± 3.9)	(9.9 ± 6.4)	*
o Ceti	1 - a	58.9	-2.2	147.5	(8.0 ±2.1)		(40.0 ± 10.8)	*
	- b	9.6	6.2	136.4	(23.4 ± 6.3)	(13.2 ± 3.6)	(182.5 ± 49.5)	*
	2 - a	33.4	3.3	76.1	2.5 ± 0.4		2.7 ± 0.42	
	- b	15.9	0.8	77.1	1.6 ± 0.3	0.8 ± 0.1	5.2 ± 0.8	
	3 - a	23.3	2.1	65.6	4.9 ± 0.5	2.1 ± 0.2	31.0 ± 3.4	
	- b	4.7	-1.6	29.9	8.9 ± 1.0	5.8 ± 0.6	13.2 ± 1.5	
	4 - a	4.7	-1.6	29.9	4.2 ± 0.9	2.7 ± 0.8	7.0 ± 1.5	
	- b	29.6	-2.2	33.9	4.0 ± 0.8	1.5 ± 0.3	5.7 ± 1.2	
	5 - a	47.0	-1.5	35.3	0.4 ± 0.2		1.0 ± 0.4	
	- b	52.6	0.0	36.4	0.3 ± 0.1		0.8 ± 0.3	
χ Cyg	1 - a	26.2	-1.7	38.7	4.3 ± 1.5	1.7 ± 0.6	10.1 ± 3.6	
	- b	16.2	1.1	12.4	3.0 ± 1.1	1.5 ± 0.5	7.5 ± 2.7	
	2 - a	36.4	1.9	26.7	2.6 ± 0.3		2.4 ± 0.3	
	- b	50.2	0.0	33.9	0.9 ± 0.1		1.2 ± 0.1	
	3 - a	51.8	0.2	33.9	1.6 ± 0.2		2.5 ± 0.2	
	- b	39.4	-0.8	34.8	3.3 ± 0.3		2.6 ± 0.2	
	4 - a	32.8	-1.0	32.8	1.4 ± 0.4	1.4 ± 0.4	1.8 ± 0.5	
	- b	26.2	-1.2	25.9	1.8 ± 0.5	0.7 ± 0.2	2.4 ± 0.7	
	5 - a	38.9	-1.2	34.0	2.1 ± 0.3		5.3 ± 0.7	
	- b	30.4	1.7	30.2	4.3 ± 0.6	1.6 ± 0.2	2.6 ± 0.3	
	6 - a	28.5	2.2	28.9	(2.3 ± 1.1)	(0.9 ± 0.4)	(1.0 ± 0.5)	*
	- b	28.6	2.2	22.3	(7.7 ± 3.5)	(3.0 ± 1.4)	(47.8 ± 22.1)	*
U Her	1 - a	18.8	0.9	136.7	3.9 ± 1.8	1.9 ± 0.9	2.2 ± 1.0	
(mars)	- b	1.7	-0.4	93.1	1.6 ± 0.7	1.1 ± 0.5	11.8 ± 5.5	
	2 - a	9.4	-0.8	177.9	1.5 ± 0.4	0.9 ± 0.2	10.5 ± 2.8	
	- b	5.0	0.8	170.6	1.5 ± 0.4	1.0 ± 0.3	5.9 ± 1.6	
	3 - a	9.3	1.0	115.8	1.7 ± 0.8	1.0 ± 0.5	2.3 ± 1.1	
	- b	4.2	-1.3	51.0	3.2 ± 1.5	2.0 ± 1.0	9.8 ± 4.5	
U Her	1 - a	13.1	-1.2	162.3	4.4 ± 1.0	2.4 ± 0.6	4.9 ± 1.2	
(mai)	- b	12.0	1.3	7.8	5.1 ± 1.2	2.8 ± 0.7	17.1 ± 4.0	
R Leo	1 - a	31.2	2.3	79.2	6.3 ± 1.0	2.4 ± 0.4	6.9 ± 1.1	
	- b	32.2	-1.6	21.1	8.5 ± 1.3	3.2 ± 0.5	32.1 ± 5.0	
	2 - a	10.0	0.7	15.1	5.7 ± 1.0	3.3 ± 0.6	8.8 ± 1.5	
	- b	8.3	-1.2	152.7	2.1 ± 0.4	1.2 ± 0.2	2.0 ± 0.4	
	3 - a	7.2	-0.9	164.7	1.8 ± 0.2	1.1 ± 0.1	3.9 ± 0.4	
	- b	13.4	1.2	72.2	2.0 ± 0.2	1.1 ± 0.1	8.1 ± 0.8	
	4 - a	5.5	-0.7	179.7	0.4 ± 0.1	0.3 ± 0.1	7.6 ± 1.2	
	- b	13.4	1.2	72.2	0.6 ± 0.1	0.3 ± 0.1	5.2 ± 0.8	
	5 - a	19.1	1.1	164.1	2.9 ± 0.2	1.4 ± 0.1	5.1 ± 0.4	
	- b	21.2	-1.6	166.2	6.3 ± 0.5	2.8 ± 0.2	11.2 ± 0.9	
	6 - a	16.9	-1.8	171.0	1.7 ± 0.4	0.9 ± 0.2	6.2 ± 1.3	
	- b	16.5	-1.6	173.9	1.8 ± 0.4	0.9 ± 0.2	13.6 ± 2.8	

TABLE 5.8 – Taux de polarisation, angles et valeurs du champ magnétique pour toutes les composantes et toutes les étoiles dans les cas saturé et non saturé. Le # est le numéro des composantes décrites dans la Tab. 5.5, les deux pics pour chaque composante sont représentés par a et b, séparés par Δv. p_L, p_C, et χ sont la polarisation linéaire, la polarisation circulaire, et l'angle de polarisation, respectivement. B_E est la valeur du champ magnétique calculée avec l'équation 5.12, la deuxième solution pour $p_L < 33\%$ (voir la section 5.4.5.3). B_Z dans la colonne 8 résulte de l'Eq. 5.16 et dépend encore de l'angle. L'astérisque dans la dernière colonne indique des résultats peu fiables.

Chapitre 6

Synthèse et perspectives

It's delightful when your imagination come true isn't it ?

Anne of Green Gables
L. M. Montgomery

Sommaire

6.1 Conclusions 136
6.1.1 Observation et modélisation de la CSE 136
6.1.2 Champ magnétique 138
6.2 Perspectives 138
6.2.1 Origines du champ magnétique 138
6.2.1.1 Dynamo Turbulente 138
6.2.1.2 Proposals et objectifs 139
6.2.2 Modélisation de l'émission moléculaire 143
6.2.3 Modèle chimique et évolution stellaire 147
6.2.4 SED 3D dans MCFOST 148

6.1 Conclusions

6.1.1 Observation et modélisation de la CSE

Le projet ATOMIUM nous permet d'étudier en détail les enveloppes des étoiles évoluées. Nous essayons d'expliquer les processus de lancement des vents et les structures très variées que nous observons. Notre étude s'est concentrée sur GY Aql, une étoile AGB de type Mira présentant une structure spiralée.

Nous avons développé un code pour traiter les données du projet ATOMIUM, ce qui nous a permis de caractériser les émissions moléculaires de plusieurs espèces. Nous avons pu déterminer la vitesse des vents dans l'enveloppe, qui s'est avérée inférieure à ce qui avait été montré dans d'autres études. De plus, nous avons calculé des rapports isotopiques, fournissant des informations sur les conditions de formation de l'étoile, la synthèse des éléments en son sein, et le déplacement de la matière par convection à la surface. En particulier, nous avons étudié les rapports isotopiques du ^{12}CO et du ^{13}CO, qui varient

dans l'enveloppe, plus importants au cœur que dans les bras de la spirale. Nous avons également analysé les isotopes du soufre, notamment le ^{33}S. Des modèles d'évolution stellaire sont nécessaires pour essayer de comprendre ces rapports isotopiques. Avec un code de transfert radiatif, nous voulons reproduire ces observations et déterminer les paramètres nécessaires pour les reproduire et certains paramètres de l'étoile.

Il a fallu déterminer quelles poussières étaient nécessaires au lancement des vents. Nous avons conclu sur la nécessité d'avoir des grains sans fer, qui condensent à 2-3 rayons stellaires, et donc, suffisamment proches pour permettre de propager les vents par pression de radiation. Un travail préliminaire a permis de caractériser les propriétés optiques des poussières et l'extinction du milieu interstellaire dans la direction de la source modélisée. Utilisant le code de transfert radiatif MCFOST, nous avons modélisé l'émission continuum, fournissant une nouvelle estimation de la distance et du rayon de l'étoile.

Les observations ALMA ont révélé une structure en spirale dans les émissions en CO suggérant la présence d'un compagnon, qui pourrait expliquer cette forme. Nous avons donc utilisé un modèle hydrodynamique, qui donne la distribution en densité des poussières autour d'une étoile AGB avec un compagnon. Avec ce modèle, les émissions moléculaires du CO ont été modélisées. Nous comparons les modèles et les observations avec les flux intégrés. Ces flux dépendent principalement du rapport gaz sur poussière et de la quantité de poussière totale dans l'enveloppe. En reproduisant les émissions dans deux configurations ALMA différentes, nous avons constaté que différents jeux de ces paramètres ajustent mieux les observations. Nous avons donc mené une étude paramétrique pour déterminer un jeu de paramètres satisfaisant les deux configurations. Ainsi, nous avons pu calculer le taux de perte de masse de l'étoile à partir des paramètres trouvés. Nous avons aussi essayé de modéliser le HCN. Il nous manque des modèles chimiques pour reproduire d'autres molécules.

Les étoiles Mira, comme GY Aql sont des étoiles variables. Nous avons mené une étude de la variabilité de l'étoile pour déterminer comment celle-ci impacte les modèles. Nous avons utilisé le modèle de convection stellaire CO5BOLD et les sorties du code de transfert radiatif Optim3D, pour avoir des observables de modèle stellaire que nous pouvons rentrer dans MCFOST. Ces modèles nous ont permis de modéliser l'étoile à différentes phases de pulsation et cette pulsation impacte la température des grains proches de la photosphère, l'émission continuum et moléculaire. Actuellement, nous modélisons l'étoile à partir d'observations moyennées dans le temps, or pour reproduire les observations au mieux, il faudra prendre en compte ces modèles.

Ce travail a permis de mieux comprendre la dynamique et la composition chimique de l'enveloppe circumstellaire de GY Aql. Il sera nécessaire à l'avenir de prendre en compte la variabilité de l'étoile dans les modèles et d'utiliser des modèles chimiques pour reproduire un plus grand nombre de molécules. Des modèles d'évolution stellaires seront également nécessaires pour expliquer toutes nos observations et notamment les rapports isotopiques.

6.1.2 Champ magnétique

Une partie de cette thèse s'est concentrée sur l'étude du champ magnétique autour des étoiles évoluées. Celui-ci peut jouer un rôle dans le lancement des vents par les ondes d'Alfvén, mais son impact n'est pas encore bien compris. L'intensité du champ magnétique peut être utilisée dans des simulations MHD et dans les modèles stellaires.

Notre étude s'est portée sur six étoiles évoluées, 5 AGB et une RSG. Les observations ont été faites avec l'IRAM-30m en polarimétrie. Nous avons étudié la raie maser SiO à 86 GHz, qui nous permet de mesurer le champ magnétique proche de la photosphère. Il a fallu caractériser la polarisation instrumentale : la fuite de Stokes I dans les autres paramètres. Avec un code *rvm*, nous avons cherché à décomposer en gaussienne le signal et en dérivées de gaussienne le Stokes V. À partir des taux de saturation des masers, nous déterminons le champ magnétique dans deux situations : les masers saturés et non saturés. Dans les deux cas, nous relions le champ magnétique directement aux valeurs de Stokes I et V. Le champ magnétique a été estimé de quelques Gauss à quelques dizaines de Gauss. Le maser SiO étant excité entre 2 à 4 rayons stellaires, en comparant nos valeurs de champ magnétique à d'autres observations, nous pouvons caractériser l'évolution du champ magnétique dans l'enveloppe, qui semble décroître en $1/r$. Cela exclut un champ poloïdal global. Notre méthode a également permis de calculer les incertitudes.

Pour une de nos sources, U Her, nous avons pu avoir deux périodes d'observation et voir une augmentation du champ magnétique sur cet intervalle de temps. Nous voulons étudier l'impact de la phase et de l'activité stellaire sur les valeurs de champ magnétique. Malgré les progrès accomplis ici, l'origine précise du champ magnétique observé à la surface et dans les couches circumstellaires internes des étoiles AGB et RSG reste encore à caractériser. En particulier, un suivi du champ magnétique pour déterminer la dépendance en phase stellaire de la polarisation et des observations quasi-simultanées avec VLTI et/ou CHARA pour détecter les points froids et suivre l'activité photosphérique sont à l'étude.

6.2 Perspectives

6.2.1 Origines du champ magnétique

6.2.1.1 Dynamo Turbulente

L'origine du champ magnétique autour des étoiles évoluées est encore débattue, mais des mécanismes impliquant une dynamo turbulente $\alpha^2 - \omega$ dans les étoiles AGB et une amplification par la convection, la pulsation stellaire, et les taches froides peuvent être invoqués (Lèbre et al. 2014). Comme l'a déjà proposé Schwarzschild (1975) pour les étoiles géantes, la composante radiale du champ peut alors être fortement renforcée à un endroit spécifique près de la surface au-dessus des taches magnétiques froides (Priest 1987). La composante tangentielle du champ B peut être amplifiée par la compression des chocs due à la pulsation stellaire (Hartquist & Dyson 1997). Un champ magnétique de 1 à 10 Gauss peut donc être atteint à proximité des taches magnétiques froides, puis diminuer en intensité selon la loi $1/r^2$ (Soker 2002). Le même scénario s'applique aux étoiles RSG avec une influence plus forte de leurs éléments convectifs plus importants. Comme expliqué dans la Sect. 5.5.1, même la rotation EVPA observée dans les caractéristiques SiO pourrait être expliquée par une orientation du champ magnétique qui change rapidement

au-dessus des points froids.

Les variations du champ magnétique observées dans U Her sur une échelle de deux mois (phases stellaires 0.25 et 0.45) suggèrent un lien possible avec la phase stellaire, c'est-à-dire avec la pulsation et l'activité photosphérique. Il est intéressant de noter que pour U Her, Baudry et al. (2023) ont également identifié et cartographié de fortes variations temporelles de la raie de l'eau v_2=2 à 268 GHz aux phases 0.13, 0.80 et 0.92 sur la base des données ALMA. Cette raie est excitée dans les régions internes de la CSE où les masers SiO sont observés. Nous mentionnons également que Rosales-Guzmán et al. (2023) ont observé des changements structurels à 3 $R_\star$ dans la CSE de Mira R Car (période = 310 jours) à un intervalle d'un mois dans les données GRAVITY/VLTI. Ces changements sont probablement liés à l'activité photosphérique. Des observations quasi-simultanées de la photosphère stellaire (pour détecter les points froids) et de la polarimétrie (pour mesurer l'intensité du champ) sont nécessaires pour prouver tout lien potentiel. Des observations interférométriques polarimétriques avec ALMA ou le VLA nous permettraient idéalement d'associer spatialement les spots stellaires aux régions où le champ B est renforcé. Le rôle de la pulsation pourrait également être étudié en surveillant le champ magnétique en fonction de la phase stellaire.

6.2.1.2 Proposals et objectifs

Observations avec l'IRAM 30m

Nous avons observé U Her à deux mois d'intervalle, nous souhaiterions recouvrir plus de phases avec un suivi/monitoring de l'étoile sur sept mois. En échantillonnant la phase entre 0.2 et 0.6 (comme le montrent les barres verticales de couleur en Fig. 6.1 qui représentent les différents temps d'observation) nous recouvririons une grande partie de la variabilité stellaire et cela nous permettrait donc de mettre en évidence un lien entre cette activité et le champ magnétique, s'il existe.

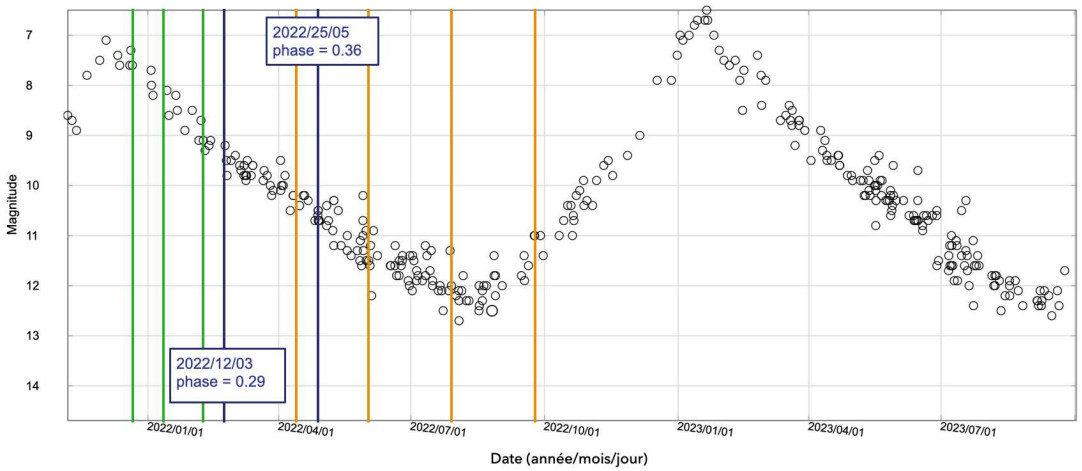


FIGURE 6.1 – Variation de luminosité de U Her, magnitude en fonction de la date (année/mois/jour) https://www.aavso.org. Les lignes verticales correspondent aux temps d'observations. Celles en bleu sont les deux observations faites en 2022. Les observations de 2024 sont en vert pour les observations déjà réalisées, et en orange pour celles qui sont prévues.

Nous souhaitons donc utiliser l'IRAM-30m pour mesurer le champ magnétique en 2024 (colonne 2 de la Tab. 6.1). Nous souhaitons également voir s'il y a une corrélation entre la présence de points froids à la surface de l'étoile et l'intensité du champ magnétique, ce qui nous permettrait de vérifier si la dynamo turbulente peut être à l'origine du champ magnétique de ces étoiles. Pour cela, en 2025 (colonne 3), nous pourrions utiliser le VLTI qui nous donnerait des images de la surface de l'étoile et donc nous permettrait de vérifier la présence de points froids.

	IRAM 2024	VLTI 2025
Mars	0.11	0.21
Avril	0.19	0.28
Mai	0.26	0.36
Juin	0.34	0.43
Juillet	0.41	0.50
Août	0.49	0.59
Septembre	0.57	X

TABLE 6.1 – Phase de U Her en fonction de la période d'utilisation des instruments. "X" signifie que la source n'est pas visible par le télescope.

Le projet d'observation avec l'IRAM-30m a été accepté et nous avons pu observer de mars à fin avril 2024. Le projet doit continuer à partir d'août (le télescope étant momentanément fermé pour des travaux de maintenance, nous ne pouvons pas l'utiliser pour recouvrir mai-juin-juillet). Les premières données nous montrent que l'on retrouve bien les motifs attendus en Stokes V mais elles doivent encore être calibrées et nettoyées de la polarisation instrumentale. Pour le moment, nous avons 3 temps d'observations :

— 4-5 mars 2024
— 3-4 avril 2024
— 21-22-23 avril 2024

ce qui nous permettra déjà de voir une évolution du champ magnétique.

Observations avec le VLTI

Nous avons l'intention de reconstruire des images de U Her pour identifier des structures à la surface de l'étoile. PIONIER, observant dans la bande H, est le meilleur instrument pour atteindre la photosphère. Avec ses lignes de base courtes, le VLTI nous offre la possibilité d'échantillonner le premier lobe de la fonction de visibilité, ce qui est essentiel pour reconstruire une image. Comme la taille typique des cellules de convection s'échelonne avec la hauteur de l'échelle de pression (Schwarzschild 1975), la taille des granules pour les étoiles AGB est comparable au rayon stellaire : ces étoiles n'hébergent que quelques cellules convectives. Pour les étoiles AGB proches, ces caractéristiques photosphériques sont observables par interférométrie optique (voir par exemple Paladini et al. (2018) et Rosales-Guzmán et al. (2023)). Jusqu'à présent, seules trois étoiles RSG ont fait l'objet de séries temporelles résolues dans l'espace (Montargès et al. 2018, 2021; Norris et al. 2021) et Fig. 6.2). Ces observations sur les RSG ont montré que l'échelle de temps de l'évolution du schéma convectif et les tailles typiques sont comparables aux prédictions des simulations 3D d'hydrodynamique radiative (RHD) (Chiavassa et al. 2011). Les simulations peuvent lancer le vent stellaire (Freytag & Höfner 2023), mais il n'y a pas eu d'observations de séries temporelles qui permettraient de caractériser l'évolution de la convection dans le temps, en particulier pendant le cycle de pulsation qui différencie

les étoiles AGB des RSG. De plus, une caractéristique fondamentale est absente dans les simulations 3D RHD d'étoiles froides évoluées : leur champ magnétique, et la façon dont les dynamos locales du modèle convectif participent au processus de lancement du vent. Avec une observation par mois, nous serions en mesure d'échantillonner différentes phases de pulsation (de 0.21 à 0.59), sans renouveler complètement le schéma convectif (échelle de temps de $\sim$ 1 an selon les simulations, Chiavassa et al. 2011).

Avec de telles observations, nous pourrons déduire les diamètres angulaires des visibilités, pour estimer comment la taille de l'étoile change pendant le cycle de pulsation. Les images seront reconstruites par les algorithmes `Squeeze`, `Mira`, et `OITOOLS.jl`. Cette approche multi-algorithmes limitera les biais de reconstruction. L'évolution du motif convectif sera quantifiée par une image de différence, et par l'évolution de la distribution spatiale du spectre de puissance (Paladini et al. 2018), permettant de mesurer directement l'évolution de la taille des cellules convectives. Ces différentes quantités peuvent être comparées directement à des observables similaires dérivées des simulations 3D RHD. Nous tenterons de corréler l'évolution de l'intensité du champ magnétique avec les évolutions de la convection afin de prouver que le champ magnétique est corrélé avec l'activité photosphérique.

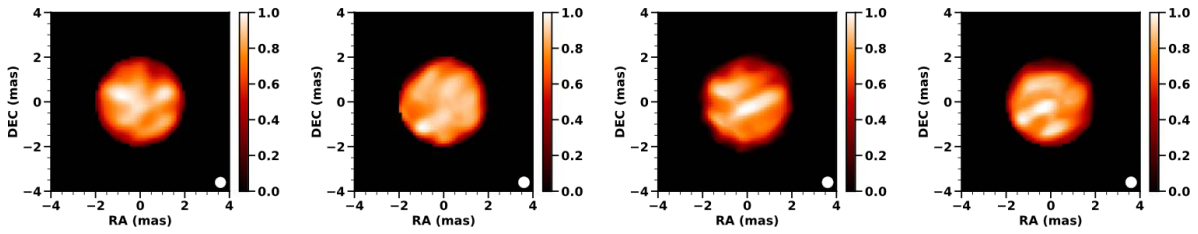


FIGURE 6.2 – Evolution de la surface de la supergéante rouge AZ Cyg. Images reconstruites avec `OITOOLS.jl` à partir des observations de CHARA/MIRC-X en (de gauche à droite) 2011, 2014, 2015, 2016 (Norris et al. 2021).

Le proposal VLTI doit être soumis pour 2025.

Extension de l'échantillon d'étoiles

La synergie entre la théorie (modèles MHD et RHD 3D de Freytag et al. 2017; El Mellah et al. 2020) et l'observation (combinaison de différents instruments) est au cœur de notre approche afin de révéler une vision globale du fond de l'atmosphère jusqu'à l'environnement circumstellaire, pour comprendre les phénomènes de perte de masse. L'importance du champ magnétique par rapport à la dynamique de la photosphère est encore mal connue alors que le champ magnétique devrait être un agent potentiel dans le processus de perte de masse et dans la formation du vent (Pascoli & Lahoche 2008).

Nous voulons étendre notre étude du champ magnétique à un plus grand nombre d'étoiles et contraindre la variation de son intensité avec la distance à la photosphère pour trois étoiles d'ATOMIUM. Cette nouvelle estimation de l'intensité du champ magnétique pourra être utilisée à l'avenir dans les simulations MHD (El Mellah et al. 2020). Elle fournira une nouvelle contrainte pour les modèles stellaires basés sur CO5BOLD (Freytag et al. 2017; Chiavassa et al. 2024) pour les mettre plus tard en relation avec les simulations 3D de transfert radiatif des observations ALMA mettant en œuvre une

description détaillée de la dynamique stellaire.

Dans l'échantillon ATOMIUM, nous avons sélectionné trois étoiles AGB de type Mira avec une émission maser SiO forte et connue : GY Aql, IRC+10011 et IRC-10529 :

— observations ALMA : Gottlieb et al. (2022); Wallström et al. (2024), raie maser SiO v=1 J=5-4,

— observations MOPRA (Fig. 6.3) : Indermuehle et al. (2011), raie maser SiO v=1 J=2-1.

MOPRA est une antenne de 22m située en Australie, qui observe entre 2.6 mm et 20 cm. Elle a déjà été utilisée pour la raie maser que nous observons pour calculer le champ magnétique (voir Fig. 6.3 Indermuehle et al. 2011).

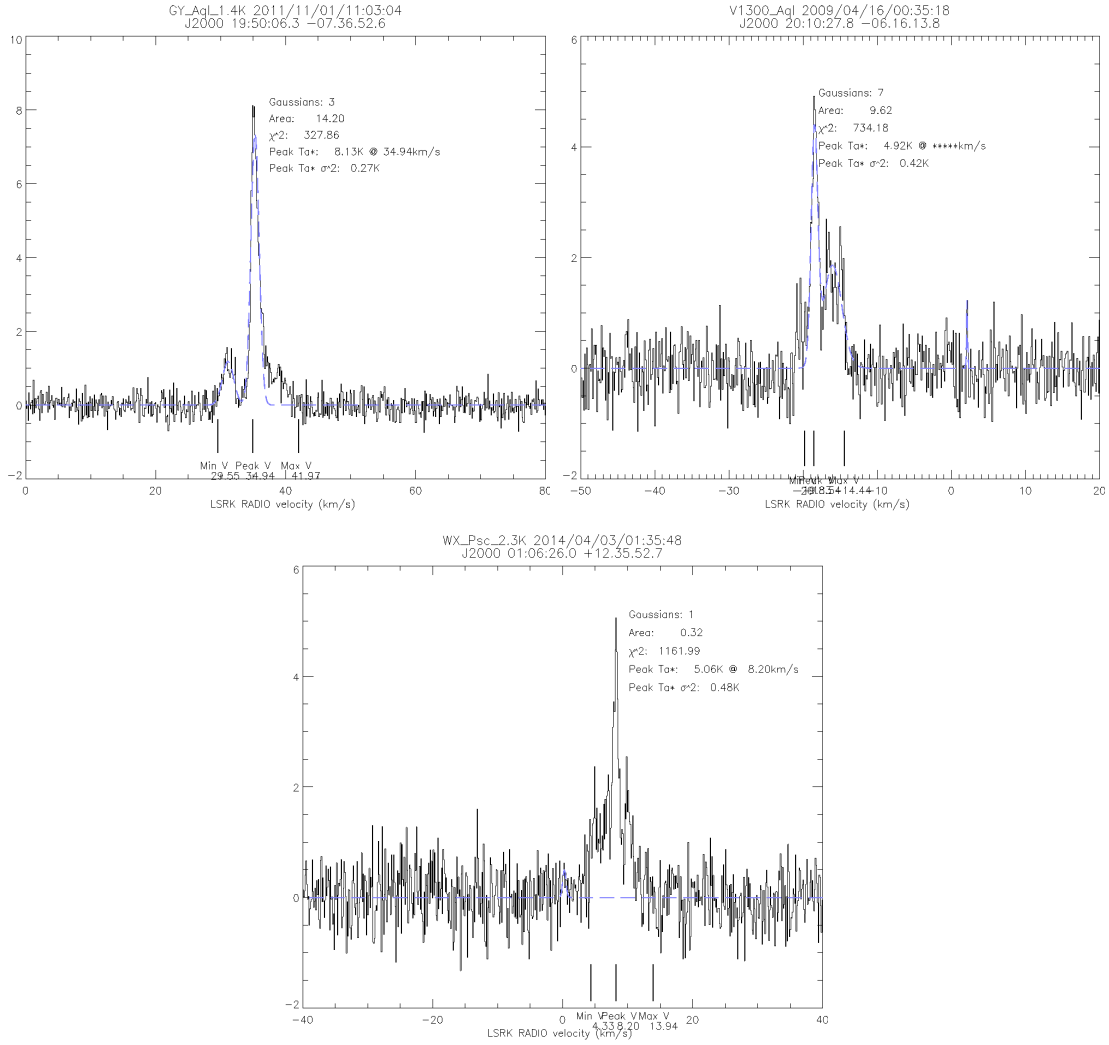


FIGURE 6.3 – Observations MOPRA de GY Aql, IRC-10529, IRC+10011, de la raie maser SiO v=1 J=2-1 (Indermuehle et al. 2011) en $T_A^\star$.

Les spectres MOPRA nous permettent d'estimer le temps nécessaire pour une sensibilité voulue. Avec les observations du chapitre 5, nous savons qu'il nous faut un SNR d'environ 1000. Il nous faut donc estimer quelle sera $T_A^\star$ pour ces 3 sources. Nous décomposons cela en plusieurs étapes :

— 1 / Nous passons de la température d'antenne en température main beam

$$T_{mb} = T_A^\star \times \frac{F_{\text{eff}}}{B_{\text{eff}}} \tag{6.1}$$

— 2 / On passe ensuite en densité de flux (K → Jy), pour MOPRA, il s'agit de multiplier T_{mb} par 22.

— 3 / Il nous faut la densité de flux qu'on obtiendrait avec l'IRAM. Pour cela il nous faut la taille des lobes (29 arcsec pour l'IRAM, 36 arsec pour MOPRA), cela suppose que la température de brillance est la même.

$$\frac{S_I}{S_M} = \frac{T_B^I}{T_B^M} \times \frac{\theta_I^2}{\theta_M^2} \Rightarrow S_I = S_M \frac{29^2}{36^2} \tag{6.2}$$

— 4 / Avec le flux, nous passons en température d'antenne de l'IRAM

À la fin, il suffit de multiplier les températures obtenues avec MOPRA par 4.87 pour estimer ce que nous aurons avec l'IRAM. En prenant des valeurs minimales sur les pics des figures 6.3 et avec un SNR de 1000, nous estimons la sensibilité souhaitée.

Source	$T_A^\star$ (MOPRA) [K]	$T_A^\star$ (IRAM)	sensibilité [mK]
GY Aql	1	4.87	4
IRC-10529	1.5	7.31	6
IRC+10011	1.3	6.33	7

TABLE 6.2 – Estimation des sensibilités à l'IRAM-30m à partir des valeurs obtenues avec MOPRA.

Un proposal à l'IRAM-30m en ce sens a été classé B pour ce prochain semestre.

6.2.2 Modélisation de l'émission moléculaire

Une première perspective sera de continuer la modélisation de l'émission moléculaire d'autres espèces. En Sec. 4, nous avons modélisé les émissions du CO et du HCN pour estimer le rapport $^{12}C/^{13}C$. Nous pouvons également nous intéresser au CS.

Lindqvist et al. (1988), ont cherché du CS dans l'enveloppe de 31 étoiles oxygénées, l'ont détecté dans 4, et ont déduit χ_0 :

— NML tau, $\chi_0 = 3 \times 10^{-7}$

— TX Cam, $\chi_0 = 5 \times 10^{-7}$

— IRAS 2131+5631, $\chi_0 = 13 \times 10^{-7}$

— IRAS 2227+5435, $\chi_0 = 10 \times 10^{-7}$

Nous calculons la loi d'abondance avec l'équation 4.14. Massalkhi et al. (2019) qui nous permet de calculer R_{CS} :

$$\log(R_{\text{CS}}) = 19.65 + 0.48 \log\left(\frac{\dot{M}}{v_\infty}\right) \tag{6.3}$$

Cette loi est dérivée de celle pour le SiO de González Delgado et al. (2003) et adaptée au CS de sorte que la quantité de soufre dans CS et SiS ne dépasse pas l'abondance solaire du soufre $\chi_0(\text{CS}) + \chi_0(\text{SiS}) \leq 2.6 \times 10{-}5$ (Asplund et al. 2009). Enfin Massalkhi et al. (2020), ont observé trois étoiles riches en oxygène et ont trouvé en moyenne $\log(\chi_0) = -8 \pm 0.6$. Pour le ^{13}CS, encore une fois, nous utilisons la même abondance que celle du ^{12}CS divisée par 13.

Les fichiers avec les niveaux d'énergies sont directement fournis par MCFOST et proviennent de la base de données LAMDA Leiden Atomic and Molecular Database[1]. Le fichier d'énergie du ^{13}CS n'est cependant pas disponible. Nous l'avons recréé à partir de Splatalogue, la base de données de spectroscopie en astrophysique[2] et de la base de données de l'université du Maryland[3], réunissant plusieurs bases de données. Nous avons récupéré les niveaux d'énergies et les fréquences. Pour les taux de collisions, nous avons gardé ceux du ^{12}CS.

Il nous faudrait également modéliser le ^{13}CS, mais nous rencontrons des problèmes avec le code pour extraire les spectres d'émission et donc nous n'avons pas les flux intégrés. Il faudra pour la suite approfondir l'étude du ^{13}CS.

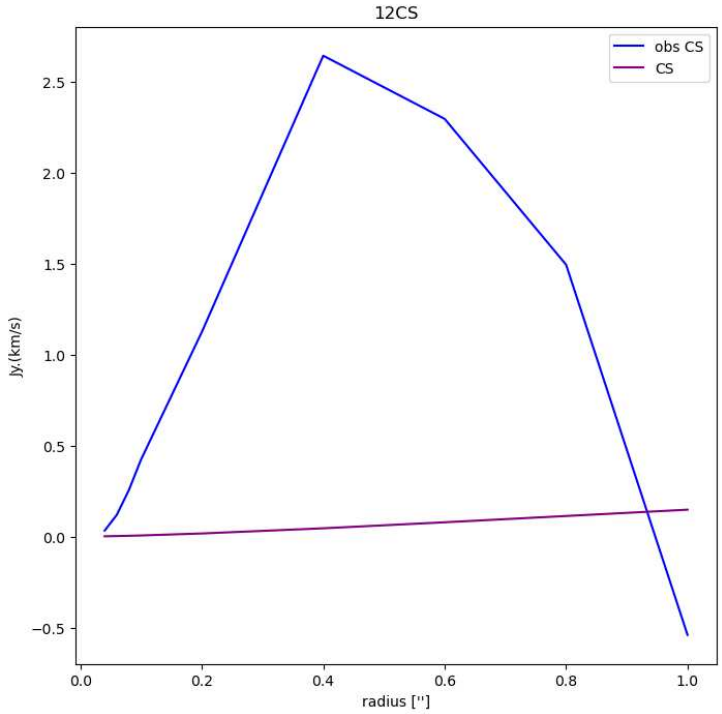


FIGURE 6.4 – Courbes de flux intégrés dans différents rayons du ^{12}CS en configuration extended. La courbe bleue est le flux observé, celle en violet correspond au modèle.

En Fig. 6.4, nous voyons la comparaison entre l'émission observée et celle modélisée. Comme pour le HCN, l'étendue de l'émission du CS est de 0.4", ce que ne reproduit pas notre loi d'abondance. Il faudra donc travailler avec des modèles chimiques pour implémenter une loi d'abondance qui permettrait de reproduire cela.

Par ailleurs, en traitant les données ALMA, nous avons vu des motifs intéressants dans les cartes d'émission, notamment pour le SiO. En Fig. 6.5, nous mettons en évidence la présence d'une "cavité". Nous pourrions avec MCFOST essayer de voir ce qu'il faudrait pour reproduire un tel motif, comme paramètres, ou comme modèle hydrodynamique en entrée.

1. https://home.strw.leidenuniv.nl/~moldata/
2. https://splatalogue.online/
3. https://www.astro.umd.edu/rareas/lma/lgm/mol2.html

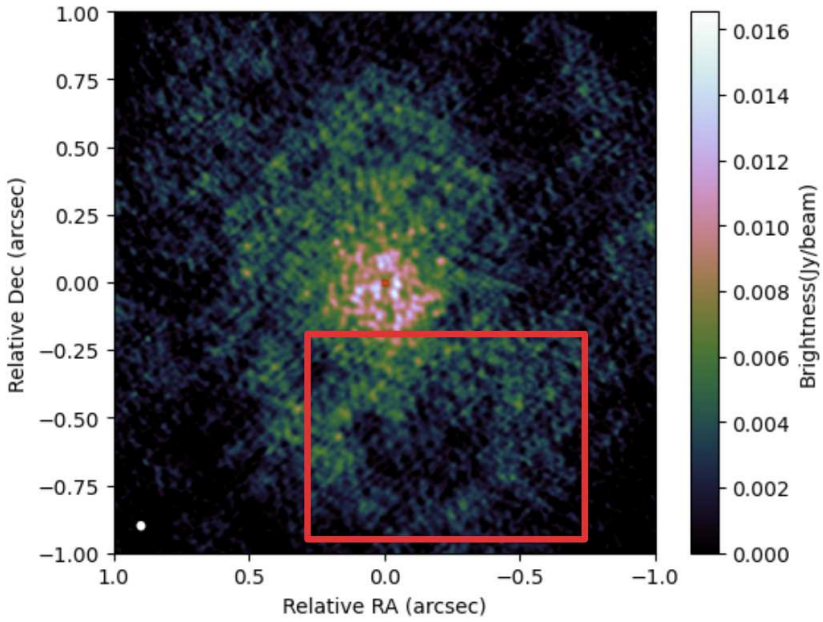


FIGURE 6.5 – Carte d'émission du SiO v=0 J=5-4 à v=0 km/s en configuration extended

Le SiO présente également une raie maser observée avec ALMA. Les channels map du SiO v=1 J=5-4 sont montrées en Fig. 6.6. Nous remarquons une émission axée inclinée de 125° jusqu'à -2 km/s. Cet axe change à partir de -0.7 km/s et est incliné de 45°. Baudry et al. (2023) ont observé la raie maser de l'eau dans GY Aql. Dans cette émission maser, nous remarquons ces mêmes axes, tracés pour le SiO et l'eau en Fig. 6.7.

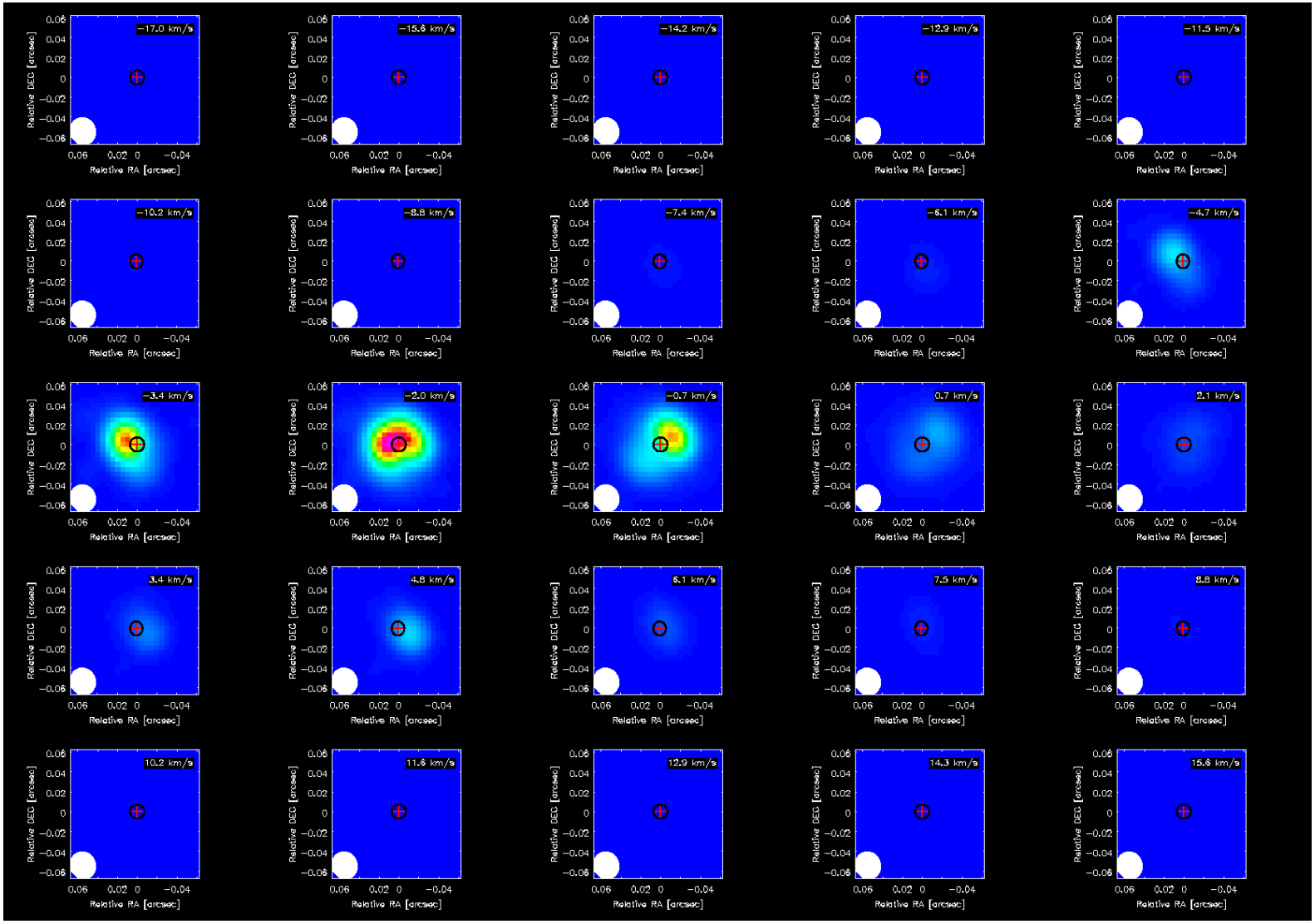


FIGURE 6.6 – Cartes d'émission du SiO v=1 J=5-4 en channel map en configuration extended

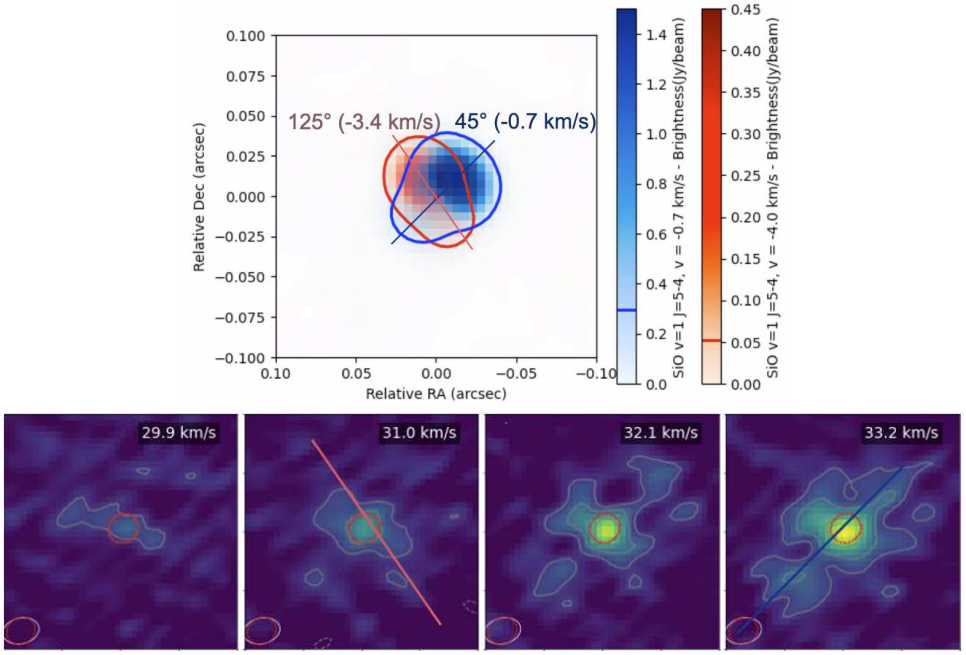


FIGURE 6.7 – **Haut :** Carte d'émission du SiO v=1 J=5-4 à -0.7 km/s (bleu) et -3.4 km/s (rouge). **Bas :** Carte d'émission de H_2O à 268 GHz (Baudry et al. 2023, cartes non centrées sur la vitesse de la source à 34 km/s), avec en rouge et bleu les axes de la figure du haut.

Il serait intéressant de travailler avec des modèles capables de traiter les masers et d'essayer de reproduire les observations de ces deux masers.

6.2.3 Modèle chimique et évolution stellaire

En Sect. 4, nous avons voulu reproduire l'émission du ^{12}CO et du ^{13}CO. Dans les observations ALMA, nous avons remarqué une différence dans le rapport isotopique entre le centre de l'enveloppe et les bras de la spirale. Avec MCFOST, nous n'arrivons pas pour le moment à reproduire cette différence. Il nous faudra travailler avec des modèles chimiques pour comprendre cette différence dans la formation et la dissociation de ces molécules, pour déterminer les lois d'abondances et ainsi reproduire l'émission avec MCFOST. Avec d'autres molécules carbonées comme le HCN et le CS, il nous faudra également des modèles chimiques pour les reproduire. Cela peut se faire en collaboration avec V. Wakelam (LAB) avec l'utilisation du code NAUTILUS. Ce projet pourra aussi se continuer en collaboration avec M. Agundez et G. Quintana-Lacaci (CSIS) grâce au développement et à l'utilisation d'un modèle chimique autour des étoiles évoluées.

Un point important que nous avons relevé en traitant les données ALMA de GY Aql était la surabondance du ^{33}S par rapport au ^{32}S et ^{34}S comparée à d'autres étoiles AGB. Plusieurs hypothèses ont été envisagées pour expliquer cette surabondance : la métallicité, la masse, la rotation et l'âge de l'étoile. Aucun de ces paramètres n'induit dans les modèles un changement significatif des rapports isotopiques. Il faudra travailler davantage avec des modèles d'évolution stellaire comme STAREVOL avec N. Lagarde (LAB), pour comprendre ce phénomène. Avec ces modèles, nous pouvons modéliser la distribution et l'abondance des éléments dans l'intérieur de l'étoile et voir comment le dregde-up les ramène à la surface. Nous pourrions notamment comparer des modèles avec

et sans s-process, qui permettent de former sur des temps longs du ^{33}S et essayer de reproduire nos observations.

6.2.4 SED 3D dans MCFOST

Nous avons pu ici étudier l'importance de la phase de l'étoile et de sa variabilité. Cela joue probablement un rôle sur l'intensité du champ magnétique. Les pulsations sont à l'origine du lancement des vents, et donc prendre en compte la variabilité de l'étoile dans les modèles est important. Les étoiles évoluées présentent des cellules de convection à leur surface et donc ne sont pas tout à fait symétriques. Or, dans MCFOST, les photons partant de l'étoile suivent tous la même loi, selon la luminosité et donc la SED fournie en entrée. Avec les modèles CO5BOLD, nous voyons qu'il y a des points chauds et froids à la surface. Prendre un modèle 1D de l'étoile ne semble pas être la solution la plus réaliste.

Nous voudrions implémenter une SED 3D dans MCFOST. Il nous faut donc la SED à chaque point de la surface et dans toutes les directions. Nous avons commencé à modifier MCFOST pour être capable de traiter ce type de données. Pour simplifier le problème, nous pouvons considérer qu'à chaque point de l'étoile, le photon suit la même loi dans toutes les directions. MCFOST commence par choisir un point au hasard à la surface de l'étoile (x, y, z), et émet un paquet de photons à une longueur d'onde, dans une direction aléatoire. Dans l'utilisation actuelle de MCFOST, le paquet a le même flux, peu importe la position de départ. Pour prendre en compte un modèle 3D, la position d'émission du paquet est importante. Selon la position, il faudra choisir la SED correspondante dans un fichier d'entrée. Le photon sera ensuite émis dans une direction.

Dans l'adaptation du code qui a été commencé, pour limiter le temps de calcul et l'utilisation de la mémoire, le fichier avec les SED ne doit être lu qu'une fois et non à chaque émission d'un photon. Il faut écrire une fonction en plus dans le code pour récupérer les spectres. Plutôt que de traiter $x \times y \times z$ spectres, nous pouvons considérer un spectre moyen et, pour chaque position, un facteur correctif à appliquer sur le spectre moyen. Ensuite, à l'émission d'un paquet, utiliser le spectre corrigé. Le fichier d'entrée devra se présenter sous la forme d'un fichier FITS avec deux HDU (λ, flux) et (x, y, z, correction). Pour être cohérent avec le code, x, y, et z devront aller de 0 à 1 et λ devront être les mêmes que le fichier d'entrée définissant les longueurs d'onde traitées.

Pour le moment, le code CO5BOLD ne peut pas nous fournir de tels fichiers, mais cela sera mis en place dès que possible et est fortement envisagé pour la suite.

Bibliographie

Airapetian, V., Carpenter, K. G., & Ofman, L. 2010, ApJ, 723, 1210

Anders, E. & Grevesse, N. 1989, Geochim. Cosmochim. Acta, 53, 197

Andriantsaralaza, M., Ramstedt, S., Vlemmings, W. H. T., & De Beck, E. 2022, A&A, 667, A74

Arenou, F., Grenon, M., & Gomez, A. 1992, A&A, 258, 104

Arroyo-Torres, B., Wittkowski, M., Marcaide, J. M., & Hauschildt, P. H. 2013, A&A, 554, A76

Asensio Ramos, A., Landi Degl'Innocenti, E., & Trujillo Bueno, J. 2005, ApJ, 625, 985

Asplund, M., Grevesse, N., Sauval, A. J., & Scott, P. 2009, ARA&A, 47, 481

Assaf, K. A., Diamond, P. J., Richards, A. M. S., & Gray, M. D. 2013, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 431, 1077

Aumont, J., Conversi, L., Thum, C., et al. 2010, A&A, 514, A70

Aurière, M., Donati, J. F., Konstantinova-Antova, R., et al. 2010, A&A, 516, L2

Bailer-Jones, C. A. L., Rybizki, J., Fouesneau, M., Demleitner, M., & Andrae, R. 2021, AJ, 161, 147

Balick, B. & Frank, A. 2002, ARA&A, 40, 439

Baudry, A., Wong, K. T., Etoka, S., et al. 2023, A&A, 674, A125

Bjorkman, J. E. & Wood, K. 2001, ApJ, 554, 615

Blackman, E. G., Frank, A., & Welch, C. 2001, ApJ, 546, 288

Bladh, S. & Höfner, S. 2012, A&A, 546, A76

Bladh, S., Paladini, C., Höfner, S., & Aringer, B. 2017, A&A, 607, A27

Bohren, C. F. & Huffman, D. R. 2008, Absorption and scattering of light by small particles (John Wiley & Sons)

Bonnell, I. A., Vine, S. G., & Bate, M. R. 2004, MNRAS, 349, 735

Bouvier, J. 2009, in EAS Publications Series, Vol. 39, EAS Publications Series, ed. C. Neiner & J. P. Zahn, 199–209

Brunner, M., Danilovich, T., Ramstedt, S., et al. 2018, A&A, 617, A23

Burbidge, E. M., Burbidge, G. R., Fowler, W. A., & Hoyle, F. 1957, Rev. Mod. Phys., 29, 547

Camps, P., Misselt, K., Bianchi, S., et al. 2015, A&A, 580, A87

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

Charbonneau, P. 2010, Living Reviews in Solar Physics, 7, 3

Charbonnel, C., Decressin, T., Lagarde, N., et al. 2017, A&A, 605, A102

Chen, X. & Shen, Z. Q. 2008, in The Art of Modeling Stars in the 21st Century, ed. L. Deng & K. L. Chan, Vol. 252, 247–248

Chen, X., Shen, Z.-Q., & Xu, Y. 2007, Chinese J. Astron. Astrophys., 7, 531

Chiavassa, A., Freytag, B., Masseron, T., & Plez, B. 2011, A&A, 535, A22

Chiavassa, A., Haubois, X., Young, J. S., et al. 2010, A&A, 515, A12

Chiavassa, A., Kravchenko, K., & Goldberg, J. A. 2024, Living Reviews in Computational Astrophysics, 10, 2

Chiavassa, A., Kudritzki, R., Davies, B., Freytag, B., & de Mink, S. E. 2022, A&A, 661, L1

Chiavassa, A., Plez, B., Josselin, E., & Freytag, B. 2009, A&A, 506, 1351

Churcher, L. J., Wyatt, M. C., Duchêne, G., et al. 2011, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 417, 1715

Clayton, D. D. 1983, Principles of stellar evolution and nucleosynthesis

Cotton, W. D., Ragland, S., & Danchi, W. C. 2011, ApJ, 736, 96

Cotton, W. D., Vlemmings, W., Mennesson, B., et al. 2006, A&A, 456, 339

Cranmer, S. R. & Saar, S. H. 2011, ApJ, 741, 54

Danilovich, T., De Beck, E., Black, J. H., Olofsson, H., & Justtanont, K. 2016, A&A, 588, A119

Danilovich, T., Malfait, J., Van de Sande, M., et al. 2024, Nature Astronomy, 8, 308

Danilovich, T., Richards, A. M. S., Decin, L., Van de Sande, M., & Gottlieb, C. A. 2020, MNRAS, 494, 1323

Danilovich, T., Richards, A. M. S., Karakas, A. I., et al. 2019, MNRAS, 484, 494

Danilovich, T., Teyssier, D., Justtanont, K., et al. 2015, A&A, 581, A60

Danilovich, T., Van de Sande, M., Plane, J. M. C., et al. 2021, A&A, 655, A80

Davis, R. E. & Muenter, J. S. 1974, J. Chem. Phys., 61, 2940

De Beck, E., Decin, L., de Koter, A., et al. 2010, A&A, 523, A18

De Beck, E. & Olofsson, H. 2018, A&A, 615, A8

Decin, L., Justtanont, K., De Beck, E., et al. 2010, A&A, 521, L4

Decin, L., Montargès, M., Richards, A. M. S., et al. 2020, Science, 369, 1497

Decin, L., Richards, A. M. S., Danilovich, T., Homan, W., & Nuth, J. A. 2018, A&A, 615, A28

Decin, L., Richards, A. M. S., Neufeld, D., et al. 2015, A&A, 574, A5

Doan, L., Ramstedt, S., Vlemmings, W. H. T., et al. 2017, A&A, 605, A28

Dorch, S. B. F. 2004, A&A, 423, 1101

Dullemond, C. 2013, Radiative Transfer in Astrophysics. Theory, Numerical Methods and Applications, Tech. rep., Tech. rep.(University of Heidelberg)

Duthu, A., Herpin, F., Wiesemeyer, H., et al. 2017, A&A, 604, A12

Ekström, S., Georgy, C., Eggenberger, P., et al. 2012, A&A, 537, A146

El Mellah, I., Bolte, J., Decin, L., Homan, W., & Keppens, R. 2020, A&A, 637, A91

Elitzur, M. 1992, ARA&A, 30, 75

Elitzur, M. 1996, The Astrophysical Journal, 457, 415

Elitzur, M. 2002, in Astrophysical Spectropolarimetry, ed. J. Trujillo-Bueno, F. Moreno-Insertis, & F. Sánchez, 225–264

Elitzur, M. & Ivezić, Ž. 2001, MNRAS, 327, 403

Etoka, S., Baudry, A., Richards, A. M. S., et al. 2022, in The Origin of Outflows in Evolved Stars, ed. L. Decin, A. Zijlstra, & C. Gielen, Vol. 366, 199–203

Fabian, D., Henning, T., Jäger, C., et al. 2001, A&A, 378, 228

Freytag, B. & Höfner, S. 2023, A&A, 669, A155

Freytag, B., Liljegren, S., & Höfner, S. 2017, A&A, 600, A137

Freytag, B., Steffen, M., & Dorch, B. 2002, Astronomische Nachrichten, 323, 213

Freytag, B., Steffen, M., Ludwig, H. G., et al. 2012, Journal of Computational Physics, 231, 919

Gaia Collaboration. 2018, A&A, 616, A1

Garufi, A., Podio, L., Kamp, I., et al. 2014, A&A, 567, A141

Georgiev, S., Lèbre, A., Josselin, E., et al. 2023, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 522, 3861

Goldreich, P., Keeley, D. A., & Kwan, J. Y. 1973, ApJ, 179, 111

Goldreich, P. & Kwan, J. 1974, ApJ, 190, 27

González Delgado, D., Olofsson, H., Kerschbaum, F., et al. 2003, A&A, 411, 123

Gottlieb, C. A., Decin, L., Richards, A. M. S., et al. 2022, A&A, 660, A94

Greaves, J. S. 2002, A&A, 392, L1

Greaves, J. S. & Holland, W. S. 1997, A&A, 327, 342

Greve, A., Panis, J. F., & Thum, C. 1996, A&AS, 115, 379

Groenewegen, M. A. T., Baas, F., Blommaert, J. A. D. L., et al. 1999, A&AS, 140, 197

Guieu, S., Pinte, C., Monin, J. L., et al. 2007, A&A, 465, 855

Hartquist, T. W. & Dyson, J. E. 1997, A&A, 319, 589

Haubois, X., Norris, B., Tuthill, P. G., et al. 2019, A&A, 628, A101

Haubois, X., Perrin, G., Lacour, S., et al. 2009, A&A, 508, 923

Hedelund, J. & Lambert, D. L. 1972, Astrophys. Lett., 11, 71

Herpin, F., Baudry, A., Thum, C., Morris, D., & Wiesemeyer, H. 2006, A&A, 450, 667

Herwig, F. 2005, ARA&A, 43, 435

Herwig, F. 2005, Annual Review of Astronomy and Astrophysics, 43

Höfner, S. 2008, A&A, 491, L1

Höfner, S. & Olofsson, H. 2018, A&A Rev., 26, 1

Homan, W., Montargès, M., Pimpanuwat, B., et al. 2020, A&A, 644, A61

Homan, W., Pimpanuwat, B., Herpin, F., et al. 2021, A&A, 651, A82

Honerjäger, R. & Tischer, R. 1974, Zeitschrift Naturforschung Teil A, 29, 1695

Houde, M. 2014, ApJ, 795, 27

Hughes, G. L., Gibson, B. K., Carigi, L., et al. 2008, MNRAS, 390, 1710

IAU. 1973, Transactions of the International Astronomical Union, 15, 165–167

Indermuehle, B., Edwards, P., Brooks, K., & Urquhart, J. 2011, M426

Jaeger, C., Molster, F. J., Dorschner, J., et al. 1998, A&A, 339, 904

Josselin, E., Lambert, J., Aurière, M., Petit, P., & Ryde, N. 2015, in Polarimetry, ed. K. N. Nagendra, S. Bagnulo, R. Centeno, & M. Jesús Martínez González, Vol. 305, 299–300

Josselin, E. & Plez, B. 2007, A&A, 469, 671

Jura, M. & Kleinmann, S. G. 1990, ApJS, 73, 769

Kahn, F. D. 1983, in Planetary Nebulae, ed. L. H. Aller, Vol. 103, 305–315

Karakas, A. I. & Lugaro, M. 2010, PASA, 27, 227

Karakas, A. I. & Lugaro, M. 2016, ApJ, 825, 26

Kataoka, A., Okuzumi, S., Tanaka, H., & Nomura, H. 2014, A&A, 568, A42

Kemball, A. J. & Diamond, P. J. 1997, The Astrophysical Journal, 481, L111

Kemball, A. J., Diamond, P. J., Gonidakis, I., et al. 2009, ApJ, 698, 1721

Kemball, A. J., Diamond, P. J., Richter, L., Gonidakis, I., & Xue, R. 2011, ApJ, 743, 69

Khouri, T., de Koter, A., Decin, L., et al. 2014, A&A, 561, A5

Kippenhahn, R., Weigert, A., & Weiss, A. 2013, Stellar Structure and Evolution

Kiss, L. L., Szabó, G. M., & Bedding, T. R. 2006, MNRAS, 372, 1721

Klessen, R. S., Ballesteros-Paredes, J., & Vázquez-Semadeni, E. 2005, in Protostars and Planets V Posters, 8415

Kobayashi, C., Karakas, A. I., & Umeda, H. 2011, MNRAS, 414, 3231

Konstantinova-Antova, R., Aurière, M., Charbonnel, C., et al. 2014, in Magnetic Fields throughout Stellar Evolution, ed. P. Petit, M. Jardine, & H. C. Spruit, Vol. 302, 373–376

Krtička, J., Kubát, J., & Krtičková, I. 2020, A&A, 635, A173

Kudritzki, R. P., Mendez, R. H., Puls, J., & McCarthy, J. K. 1997, in IAU Symposium, Vol. 180, Planetary Nebulae, ed. H. J. Habing & H. J. G. L. M. Lamers, 64.K

Kwan, J. & Webster, Z. 1993, ApJ, 419, 674

Lagarde, N. 2012, Theses, University of Geneva

Lagarde, N., Decressin, T., Charbonnel, C., et al. 2012, A&A, 543, A108

Lamers, H. J. G. L. M. & Cassinelli, J. P. 1999, Introduction to Stellar Winds

Landi Degl'Innocenti, E. & Landolfi, M. 2004, Astrophysics and Space Science Library, Vol. 307, Polarization in Spectral Lines (Springer)

Langer, N. 2012, ARA&A, 50, 107

Lankhaar, B. & Vlemmings, W. 2019, A&A, 628, A14

Lèbre, A., Aurière, M., Fabas, N., et al. 2014, A&A, 561, A85

Lèbre, A., Aurière, M., Fabas, N., et al. 2015, in Polarimetry, ed. K. N. Nagendra, S. Bagnulo, R. Centeno, & M. Jesús Martínez González, Vol. 305, 47–52

Lindqvist, M., Nyman, L. A., Olofsson, H., & Winnberg, A. 1988, A&A, 205, L15

López Ariste, A., Mathias, P., Tessore, B., et al. 2018, A&A, 620, A199

López Ariste, A., Tessore, B., Carlín, E. S., et al. 2019, A&A, 632, A30

Loup, C., Forveille, T., Omont, A., & Paul, J. F. 1993, A&AS, 99, 291

Lucas, R., Bujarrabal, V., Guilloteau, S., et al. 1992, A&A, 262, 491

Lucy, L. B. 1999, A&A, 344, 282

Maercker, M., Khouri, T., Mecina, M., & De Beck, E. 2022, A&A, 663, A64

Mamon, G. A., Glassgold, A. E., & Huggins, P. J. 1988, ApJ, 328, 797

Marigo, P., Girardi, L., Bressan, A., et al. 2008, A&A, 482, 883

Marinho, L., Herpin, F., Wiesemeyer, H., et al. 2024, arXiv e-prints, arXiv :2405.12103

Massalkhi, S., Agúndez, M., & Cernicharo, J. 2019, A&A, 628, A62

Massalkhi, S., Agúndez, M., Cernicharo, J., & Velilla-Prieto, L. 2020, A&A, 641, A57

Mathias, P., Aurière, M., López Ariste, A., et al. 2018, A&A, 615, A116

Matt, S., Balick, B., Winglee, R., & Goodson, A. 2000, ApJ, 545, 965

Mauron, N. & Josselin, E. 2011, A&A, 526, A156

McKee, C. F. & Tan, J. C. 2003, ApJ, 585, 850

Meyer, D. M. A., Mignone, A., Petrov, M., et al. 2021, MNRAS, 506, 5170

Milam, S. N., Woolf, N. J., & Ziurys, L. M. 2009, ApJ, 690, 837

Molet, J. 2019, Theses, Université de Bordeaux

Montargès, M., Cannon, E., de Koter, A., et al. 2023, A&A, 671, A96

Montargès, M., Cannon, E., Lagadec, E., et al. 2021, Nature, 594, 365

Montargès, M., Homan, W., Keller, D., et al. 2019, MNRAS, 485, 2417

Montargès, M., Kervella, P., Perrin, G., et al. 2016, A&A, 588, A130

Montargès, M., Norris, R., Chiavassa, A., et al. 2018, A&A, 614, A12

Motte, F., Bontemps, S., & Louvet, F. 2018, Annual Review of Astronomy and Astrophysics, 56, 41

Nedoluha, G. E. & Watson, W. D. 1990, ApJ, 354, 660

Nedoluha, G. E. & Watson, W. D. 1994, ApJ, 423, 394

Niccolini, G., Woitke, P., & Lopez, B. 2003, A&A, 399, 703

Norris, B. R. M., Tuthill, P. G., Ireland, M. J., et al. 2012, Nature, 484, 220

Norris, R. P., Baron, F. R., Monnier, J. D., et al. 2021, ApJ, 919, 124

Olofsson, H., González Delgado, D., Kerschbaum, F., & Schöier, F. L. 2002, A&A, 391, 1053

Paladini, C., Baron, F., Jorissen, A., et al. 2018, Nature, 553, 310

Parker, E. N. 1958, ApJ, 128, 664

Pascoli, G. & Lahoche, L. 2008, PASP, 120, 1267

Peest, C., Camps, P., Stalevski, M., Baes, M., & Siebenmorgen, R. 2017, A&A, 601, A92

Peng, T. C., Humphreys, E. M. L., Testi, L., et al. 2013, A&A, 559, L8

Pérez-Sánchez, A. F. & Vlemmings, W. H. T. 2013, A&A, 551, A15

Perryman, M. A. C., Lindegren, L., Kovalevsky, J., et al. 1997, A&A, 323, L49

Pinte, C., Dent, W. R. F., Ménard, F., et al. 2015, The Astrophysical Journal, 816, 25

Pinte, C., Harries, T. J., Min, M., et al. 2009, A&A, 498, 967

Pinte, C., Ménard, F., Duchêne, G., & Bastien, P. 2006, A&A, 459, 797

Prantzos, N., Aubert, O., & Audouze, J. 1996, A&A, 309, 760

Priest, E. R. 1987, Solar magneto-hydrodynamics.

Priest, E. R. 2012, Solar magnetohydrodynamics, Vol. 21 (Springer Science & Business Media)

Ramstedt, S., Mohamed, S., Vlemmings, W. H. T., et al. 2017, A&A, 605, A126

Ramstedt, S. & Olofsson, H. 2014, A&A, 566, A145

Richards, A. M. S., Sobolev, A., Baudry, A., et al. 2020, Advances in Space Research, 65, 780

Richter, L., Kemball, A., & Jonas, J. 2016, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 461, 2309

Ritacco, A., Macías-Pérez, J. F., Ponthieu, N., et al. 2018, A&A, 616, A35

Rosales-Guzmán, A., Sanchez-Bermudez, J., Paladini, C., et al. 2023, A&A, 674, A62

Rudnitski, G. M., Pashchenko, M. I., & Colom, P. 2010, Astronomy Reports, 54, 400

Rybicki, G. B. & Lightman, A. P. 1991, Radiative processes in astrophysics (John Wiley & Sons)

Sabin, L., Wade, G. A., & Lèbre, A. 2014, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 446, 1988

Sahai, R. & Bieging, J. H. 1993, AJ, 105, 595

Sahai, R., Morris, M. R., & Villar, G. G. 2011, AJ, 141, 134

Samus', N. N., Kazarovets, E. V., Durlevich, O. V., Kireeva, N. N., & Pastukhova, E. N. 2017, Astronomy Reports, 61, 80

Schöier, F. L. & Olofsson, H. 2000, A&A, 359, 586

Schöier, F. L. & Olofsson, H. 2001, A&A, 368, 969

Schöier, F. L., Ramstedt, S., Olofsson, H., et al. 2013, A&A, 550, A78

Schwarzschild, M. 1975, ApJ, 195, 137

Singh, G., Bhowmik, T., Boccaletti, A., et al. 2021, A&A, 653, A79

Soker, N. 1998, MNRAS, 299, 1242

Soker, N. 2002, MNRAS, 336, 826

Soker, N. & Harpaz, A. 1992, PASP, 104, 923

Soker, N. & Zoabi, E. 2002, MNRAS, 329, 204

Stanek, K. Z., Knapp, G. R., Young, K., & Phillips, T. G. 1995, ApJS, 100, 169

Steinacker, J., Baes, M., & Gordon, K. D. 2013, ARA&A, 51, 63

Taillard, A. 2023, PhD thesis, Université de Bordeaux

Tessore, B., Lèbre, A., Morin, J., et al. 2017, A&A, 603, A129

Tessore, B., Pinte, C., Bouvier, J., & Ménard, F. 2021, A&A, 647, A27

Thum, C., Wiesemeyer, H., Paubert, G., Navarro, S., & Morris, D. 2008, PASP, 120, 777

Tilling, I., Woitke, P., Meeus, G., et al. 2012, A&A, 538, A20

Timmes, F. X., Woosley, S. E., & Weaver, T. A. 1995, ApJs, 98, 617

Tipping, M. E. & Faul, A. C. 2003, in Proceedings of Machine Learning Research, Vol. R4, Proceedings of the Ninth International Workshop on Artificial Intelligence and Statistics, ed. C. M. Bishop & B. J. Frey (PMLR), 276–283, reissued by PMLR on 01 April 2021.

Tobin, T. L., Kemball, A. J., & Gray, M. D. 2019, ApJ, 871, 189

Truong, B., Tram, L. N., Hoang, T., et al. 2022, ApJ, 936, 101

Van de Sande, M., Decin, L., Lombaert, R., et al. 2018, A&A, 609, A63

Velilla Prieto, L., Sánchez Contreras, C., Cernicharo, J., et al. 2017, A&A, 597, A25

Vlemmings, W. H. T. 2011, in Asymmetric Planetary Nebulae 5 Conference, ed. A. A. Zijlstra, F. Lykou, I. McDonald, & E. Lagadec, 89

Vlemmings, W. H. T., Diamond, P. J., & van Langevelde, H. J. 2002, A&A, 394, 589

Vlemmings, W. H. T., Khouri, T., Martí-Vidal, I., et al. 2017, A&A, 603, A92

Vlemmings, W. H. T., Maercker, M., Lindqvist, M., et al. 2013, A&A, 556, L1

Vlemmings, W. H. T., Ramstedt, S., Rao, R., & Maercker, M. 2012, A&A, 540, L3

Vlemmings, W. H. T. & van Langevelde, H. J. 2007, A&A, 472, 547

Vlemmings, W. H. T. & van Langevelde, H. J. 2008, A&A, 488, 619

Vlemmings, W. H. T., Khouri, T., De Beck, E., et al. 2018, A&A, 613, L4

Wallström, S. H. J., Danilovich, T., Müller, H. S. P., et al. 2024, A&A, 681, A50

Watson, W. D. 2009, in Revista Mexicana de Astronomia y Astrofisica Conference Series, Vol. 36, Revista Mexicana de Astronomia y Astrofisica Conference Series, 113–120

Watson, W. D., Anicich, V. G., & Huntress, W. T., J. 1976, ApJl, 205, L165

Western, L. R. & Watson, W. D. 1983, ApJ, 275, 195

Wiebe, D. S. & Watson, W. D. 1998, ApJ, 503, L71

Wiesemeyer, H., Hezareh, T., Kreysa, E., et al. 2014, PASP, 126, 1027

Willson, L. A. 2000, ARA&A, 38, 573

Wilson, T. L., Rohlfs, K., & Hüttemeister, S. 2013, Tools of Radio Astronomy

Wittkowski, M., Arroyo-Torres, B., Marcaide, J. M., et al. 2017, A&A, 597, A9

Wittkowski, M., Boboltz, D. A., Ohnaka, K., Driebe, T., & Scholz, M. 2007, A&A, 470, 191

Woitke, P., Helling, C., Hunter, G. H., et al. 2018, A&A, 614, A1

Wood, K., Whitney, B., Bjorkman, J., & Wolff, M. 2013, The Astronomy Group of University of St Andrews

Woosley, S. E. & Weaver, T. A. 1995, ApJS, 101, 181

Yan, Y. T., Henkel, C., Kobayashi, C., et al. 2023, A&A, 670, A98

Young, K. 1995, ApJ, 445, 872

Zeidler, S., Posch, T., Mutschke, H., Richter, H., & Wehrhan, O. 2011, A&A, 526, A68

Zinner, E., Nittler, L. R., Gallino, R., et al. 2006, ApJ, 650, 350

Table des figures

1.1 Cycle de vie des étoiles. https://imagine.gsfc.nasa.gov/educators/lessons/xray_spectra/ . . . 3
1.2 Diagramme d'Hertzsprung-Russell. On retrouve la séquence principale en diagonale au centre. Le Soleil (1 $M_\odot$) qui, au cours de sa vie, va suivre une évolution sur le diagramme HR, représentée par la ligne bleue claire pour sa phase de proto-étoile, et en bleue foncée de la séquence principale jusqu'à ce qu'il devienne une naine blanche. (T. Lombry) . . . 4
1.3 Coupe de l'intérieur d'une étoile AGB (Karakas & Lugaro 2010). . . . 7
1.4 Coupe d'une étoile AGB avec son enveloppe circumstellaire. (J. Hron) . . . 9
1.5 **Haut :** Courbe de luminosité de U Her, la magnitude en fonction de la date (année/mois/jour) https://www.aavso.org. **Bas :** Évolution de la luminosité dans le temps avec le changement de rayon. (Teachers Notes Booklet 3 : Stellar Distances, https://sci.esa.int/documents/34439/36575/1567255185947-Teacher%27s-Notes-Booklet-3.pdf). . . . 10
1.6 CSE de 3 étoiles AGB : R Aql, U Her et GY Aql. Carte d'émission du ^{12}CO (J=2-1) obtenue avec la bande 6 d'ALMA, observation du projet ATOMIUM (Gottlieb et al. 2022) avec une résolution spatiale entre 0.2" et 0.5". . . . 11
1.7 Émission continuum de l'enveloppe de π^1Gru (Homan et al. 2020) mettant en évidence la présence d'un compagnon autour de cette étoile. . . . 11
1.8 Diversité des nébuleuses planétaires. Source : H. Bond (ST ScI), B. Balick (University of Washington) et NASA/ESA. https://esahubble.org/images/opo9738b/ . . . 12
1.9 Illustration de scénario de formation des étoiles massives par accrétion compétitive. (a) : Des clumps s'effondrent pour former des étoiles. (b) : Fusion des clumps pendant l'effondrement. (c) : Plusieurs proto-étoiles se retrouvent dans un clump. (d) : Influence sur la croissance en masse des proto-étoiles par accrétion. (e) : Éjection des proto-étoiles de faible masse. (f) : Formation d'étoiles massives. (Klessen et al. 2005) . . . 13
1.10 Illustration de scénario de formation des étoiles massives par flots turbulents. On a un nuage massif dense alimenté en turbulence. La turbulence fait s'effondrer le nuage et forme le cœur pré-stéllaire. Cela va donner une proto-étoile (hot core), et donnera l'étoile massive (Molet 2019). . . . 13
1.11 Représentation en coupe de la structure du Soleil (T. Lombry). . . . 14
1.12 Image du Soleil dans les bandes CaII K1 et Hα. BASS 2000, BAse de données Solaire Sol, Observatoire de Paris. https://bass2000.obspm.fr/home.php . . . 15
1.13 Illustration de la dynamo solaire. En haut : l'effet Ω et en bas α. E. Forgács-Dajka, https://stark.konkoly.hu/stellar_activity.html . . . 15

1.14 Représentation de la localisation des différents masers autour d'une étoile AGB. . . . 16
1.15 Variation du champ magnétique de Bételgeuse sur 8 saisons avec ESPaDOnS et NARVAL (Mathias et al. 2018). . . . 18
1.16 Exemple de deux snapshots de simulation de convection stellaire d'une étoile RSG avec le code CO5BOLD et traitées par le code de transfert radiatif Optim3D (Chiavassa et al. 2009) espacées de 200 jours (Chiavassa et al. 2022). . . . 19

2.1 **Gauche :** Exemple de sources observables en radio (Krauss 1996). **Droite :** L'antenne Lovell, VLBI, Jodrell Bank Observatory. . . . 21
2.2 Illustration de la brillance . . . 22
2.3 Représentation des lobes primaires et secondaires. . . . 24
2.4 **Gauche :** Antenne 30m de l'IRAM. **Droite :** Transmission Atmosphérique en radio pour le site de l'IRAM 30m. https://publicwiki.iram.es/EmirforAstronomers . . . 25
2.5 Les différents types d'antenne. RX est l'emplacement du récepteur. (a) : configuration Cassegrain, (b) Gregory, (c) Nasmyth, (d) offset Cassegrain (Wilson et al. 2013). . . . 25
2.6 Explication du mélangeur. On y voit la fréquence $\nu_{\rm IF}$, et les fréquences en sorties du mélangeur (LSB et USB) autour de $\nu_{\rm LO}$. https://web-archives.iram.fr/IS/IS2004/presentations/lucas-22nov04.pdf . . . 26
2.7 Représentation des bandes d'EMIR (E090, E150, E230 et E330) avec leurs possibilités de combinaison. On retrouve également les bandes supérieure et inférieure LSB et USB et leurs sous-divisions LO, LI et UI, UO. https://publicwiki.iram.es/EmirforAstronomers . . . 27
2.8 Exemple de gamme de fréquence d'observation des backends FTS et VESPA. https://publicwiki.iram.es/EmirforAstronomers . . . 28
2.9 Fonctionnement d'une antenne radio. . . . 28
2.10 Représentation des paramètres de Stokes. I l'intensité du signal, Q et U les polarisations linéaire, et V la polarisation circulaire. . . . 30
2.11 Schéma des chemins optiques dans la cabine Nasmyth du télescope de 30m (Thum et al. 2008). . . . 31
2.12 Principe de l'interférométrie avec deux antennes. On peut considérer une antenne (1), et discrétiser sa surface (2). On peut imaginer les plus petits morceaux de la surface collectrice projetés au sol (3) et placer plusieurs petites antennes à la place d'une seule (4). . . . 32
2.13 Schéma explicatif du délai entre 2 antennes en réseaux et du traitement du signal. https://web-archives.iram.fr/IS/IS2004/presentations/lucas-22nov04.pdf . . . 32
2.14 Schéma du plan $(u,\, v)$. . . . 34
2.15 Transmission Atmosphérique à ALMA et les bandes d'observations. https://science.nrao.edu/science/meetings/2017/umichigan17/ALMA_Overview.pdf . . . 35

3.1 Exemple de sortie de MCFOST. **Gauche :** SED modélisée avec les différentes composantes **Droite :** Carte de température. . . . 38
3.2 Loi de Planck en fonction de la longueur d'onde pour des corps à différentes températures en K. . . . 47

3.3 Récapitulatif des fichiers d'entrées et de sorties de MCFOST. 48
3.4 Illustration d'un quart de grille sphérique sur laquelle travaille MCFOST. . 50

4.1 Indice optique de réfraction de la forsterite. **Gauche :** Indice n, partie réelle de l'indice de réfraction. **Droite :** Indice k, partie imaginaire de l'indice de réfraction. 58
4.2 **Haut :** Rapport A_λ/A_V avec $A_V = 0.41$ en vert et l'extinction en fonction de la longueur d'onde en bleu. **Bas :** Comparaison entre la SED observée et les SED modélisées par MCFOST en prenant en compte ou non l'extinction par le MIS. 59
4.3 Distribution de densité de poussière en sortie du modèle hydrodynamique (sans unité) en face-on et egde-on. 60
4.4 Chaque barre noire représente la couverture de fréquence d'une fenêtre spectrale (spw). Les lignes colorées représentent le pourcentage de transmission atmosphérique pour des valeurs d'eau précipitable (PWV), en mm (Gottlieb et al. 2022). 63
4.5 Observation ALMA des sources ATOMIUM en ^{12}CO. Les couleurs sont en vitesse Doppler (Decin et al. 2020). 65
4.6 **Gauche :** Sources ATOMIUM, observation de la raie CO (2-1). Carte en vitesse blue-red shift (Homan et al. 2020). **Droite :** abondance de F dans W Aql (Danilovich et al. 2021; Asplund et al. 2009). 65
4.7 Image de GY Aql avec le survey DSS `http://cdsportal.u-strasbg.fr/?target=V*%20GY%20Aql` 66
4.8 Spectres intégrés du ^{12}CO (2-1) pour les configurations étendue, médium et compacte dans plusieurs rayons d'extraction exprimés en arcsec. 68
4.9 Carte de moment 0 du ^{12}CO en configuration extended. Le tracé rouge correspond au contour à mi-hauteur FWHM. Le contour noir en pointillés est une ellipse ajustant le contour à mi-hauteur, la croix noire correspond à la position de l'étoile. 71
4.10 Vitesse des vents dans l'enveloppe. Les points bleus correspondent aux observations. La courbe verte fit v_∞ avec $\beta = 3.21$ de Gottlieb et al. (2022). La courbe noire est notre propre fit. La courbe orange est un fit "attendu" avec $\beta = 3.21$, $v_\infty = 18$ km/s de Gottlieb et al. (2022). 74
4.11 Carte de moment 0 du ^{12}CO (à gauche) et du ^{13}CO (à droite) en configuration médium. 76
4.12 Rapport d'abondance dans GY Aql. Carte ATOMIUM en configuration médium. **Gauche :** Rapport des émissions de ^{12}CO et ^{13}CO J=2-1, v=0 km/s. **Droite :** Rapport des émissions de H^{12}CN et H^{13}CN J=3-2, v=0 km/s. 77
4.13 Profondeur maximale en masse de l'enveloppe convective par rapport à la masse stellaire totale atteinte (de 0 = coeur à 1 = surface) en fonction de la masse stellaire initiale. Les courbes pleines correspondent au premier dredge-up et celles en pointillées au second lors du premier et du second dragage, pour différentes métallicités, comme indiqué par les couleurs des courbes. Thèse de Lagarde (2012), tiré des modèles de Lagarde et al. (2012). 84
4.14 Comparaison des SED modélisées avec celle observée. La SED en bleue correspond à celle observée. Les courbes en jaune, vert et rouge correspondent aux SED modélisées par MCFOST pour différentes distances : à 152, 410 et 1400 pc avec $T_{\rm eff} = 3100$ K et $R = 320$ R$_\odot$. 86

4.15 Comparaison des SED modélisées avec celle observée. La courbe noire en trait plein correspond à la SED observée. Les courbes en couleur correspondent aux SED modélisées par MCFOST avec les derniers paramètres pour l'étoile : $T_{\rm eff} = 2900$ K et $R = 500$ $R_\odot$ pour différentes distances. . . . 87
4.16 Émission du ^{12}CO, aire de spectre en Jy.km/s en fonction du rayon dans lequel on intègre. La courbe noire correspond à l'observation ALMA en configuration extended. La courbe verte correspond au modèle hydrodynamique avant son agrandissement. La courbe bleue correspond à un modèle avec une abondance constante. Les autres courbes sont celles avec le modèle hydrodynamique agrandi, avec des paramètres R et M_d différents. 88
4.17 Profils de densité en fonction du rayon. La courbe bleue correspond au modèle initial avant agrandissement, la orange à celui avec un facteur d'agrandissement des structures et en vert le modèle extrapolé pour correspondre aux observations. 89
4.18 **Gauche :** Observation ATOMIUM de la raie ^{12}CO J=2-1 en configuration mid. **Droite :** Émission du ^{12}CO J=2-1 par MCFOST avec en entrée la nouvelle distribution de poussière extrapolée. Les traits rouge et bleu sont là pour représenter la position des structures que nous voulons reproduire. 90
4.19 Émission du ^{12}CO, aire de spectre en Jy.km/s en fonction du rayon dans lequel on intègre. Les courbes noires correspondent aux observations. **Haut :** Résultats en configuration médium. **Bas :** Résultats en configuration compacte. Les courbes de couleurs sont les résultats avec différents jeux de paramètres R et M_d. 91
4.20 SED $\lambda.F_\lambda$ [W.m^{-2}] en fonction de la longueur d'onde λ en μm. La courbe noire correspond à l'observation. La courbe orange est le résultat du modèle correspondant le mieux à l'observation ($M_d = 1e^{-6}$ $M_\odot$). La courbe bleue est le résultat du modèle le plus éloigné de l'observation ($M_d = 1e^{-4}$ $M_\odot$). 92
4.21 RMSE entre les courbes d'aire intégrée en fonction du rayon de l'observation et des modèles. Les cases vertes correspondent au meilleur modèle de chaque configuration. Les cases rouges correspondent au compromis fait entre les deux configurations. **Gauche :** En configuration étendue. **Droite :** En configuration médium. 93
4.22 Comparaison de l'observation (à gauche) et du modèle (à droite) de la carte d'intensité d'émission du ^{12}CO à v=0 km/s, en configuration médium. . . . 94
4.23 Courbes de flux intégré dans différents rayons du ^{12}CO et du ^{13}CO. Les courbes en noir sont les flux observés. Les courbes bleues correspondent aux modèles avec le jeu de paramètres "compromis" entre les deux configurations étudiées. En orange, nous avons le meilleur modèle de la configuration médium. Pour le ^{13}CO, il y a une courbe en plus en vert, qui correspond aux mêmes paramètres qu'en bleu mais avec un rapport d'abondance différent (=30). 94
4.24 Courbes de flux intégré dans différents rayons du ^{12}CO et du ^{13}CO en configuration étendue. La courbe bleue est le flux du ^{12}CO observé, celle en violet correspond au modèle. La courbe rouge est le flux du ^{13}CO observé, celle en orange correspond au modèle. 95
4.25 Courbes de flux intégré dans différents rayons du H^{12}CN et du H^{13}CN en configuration étendue. La courbe bleue est le flux du H^{12}CN observé, celle en violet correspond au modèle. La courbe rouge est le flux du H^{13}CN observé, celle en orange correspond au modèle. 96

4.26 Courbe de variabilité de la luminosité de GY Aql, la magnitude apparente en fonction de la date (année/mois/jour). https://www.aavso.org 97
4.27 Graphique positionnant des étoiles AGB et RSG de la collaboration PEPPER en fonction de leur luminosité et de leur température. Nous voyons les observations faites (cercle de couleur autour des étoiles pour différents instruments) et les modèles disponibles : les losanges pour les AGB et les cercles pour les RSG. 98
4.28 SED des modèles à trois temps différents (en bleu 75.2 et 29.4 ans phase=0, orange 81.8 et 31.0 ans phase=0.25 et vert 84.1 et 35.4 ans phase 0.5). La SED moyennée sur l'ensemble des modèles est en rouge. En noir est représentée la SED observée. La figure de gauche correspond au modèle avec la bonne luminosité. Celle de droite correspond au modèle à la bonne température. 99
4.29 Évolution de la température calculée par MCFOST en fonction de la distance à l'étoile. La courbe noire correspond à la moyenne de tous les modèles, les barres verticales bleues correspondent à l'étendue de tous les modèles. 100
4.30 Luminosité (courbe violette) du modèle CO5BOLD et flux de d'émission continuum (courbe bleue) de MCFOST en fonction du temps. 100
4.31 Luminosité (courbe violette) du modèle CO5BOLD et flux de d'émission moléculaire du ^{12}CO (courbe bleue) de MCFOST en fonction du temps. . 101

5.1 Paramètres de Stokes observés (non corrigés de la polarisation instrumentale) I, V, Q et U pour o Ceti (en unités $T_A^\star$ [K]), avec une résolution spectrale de 0.139 km s^{-1}, centrée sur la transition SiO. 109
5.2 Illustration de notre méthode pour supprimer la polarisation instrumentale dans les spectres de Stokes V pour R Leo. **Haut :** Moyenne des spectres Stokes V à faible fuite ($|M_{\rm IV}| < 0.01$). **Centre :** Exemple de corrélation entre $V_{\rm instr} = M_{\rm IV} \cdot I$ et Stokes I. La pente de la régression est $M_{\rm IV} = -0.0271$. **Bas :** Spectre de Stokes V final, nettoyé et moyenné. L'échelle verticale est la même que pour le spectre ci-dessus. 112
5.3 Décomposition de Stokes I et V pour R Aql (résolution spectrale de 0.139 km s^{-1}). **Gauche** : Les données de Stokes I sont représentées en noir, et l'ajustement global est représenté en rouge. Les lignes verticales pointillées colorées sont les positions du centre des fonctions gaussiennes individuelles utilisées dans l'ajustement, tracées en différentes couleurs. **Droite** : Les données de Stokes V nettoyées de la polarisation instrumentale sont représentées en noir (Sect. 5.3.2), et l'ajustement est représenté en rouge. Les lignes verticales en pointillés colorés montrent les composantes gaussiennes individuelles de I issues de la procédure d'ajustement de Stokes I (panneau de gauche). 114
5.4 Résultats de l'ajustement de la décomposition du signal de Stokes I en plusieurs fonctions gaussiennes telles que dérivées par le code rvm pour μ Cep, o Ceti, χ Cyg, U Her, et R Leo (pour R Aql, voir Fig.5.3). 115
5.5 Spectres de Stokes V pour toutes les sources sauf R Aql. Les données Stokes V nettoyées de la polarisation instrumentale sont représentées en noir (Sect. 5.3.2), et l'ajustement est présenté en rouge. Les lignes violettes en pointillés sont les positions des composantes gaussiennes individuelles I issues de la procédure d'ajustement de Stokes I. 115

5.6 Illustration de l'algorithme de vérification des erreurs dans le calcul du champ magnétique avec la méthode Monte Carlo présentée en Sec. 5.3.2.1. 117
5.7 Rapport $q = Q/I$ en fonction de l'angle θ_1 (Eq. 5.17). La zone verte ($|q| < q_c$) contient deux solutions pour l'angle, comme le montre l'exemple avec $|q| = 0.25$, les deux lignes vertes. Au-delà de cette zone (exemple en bleu), une seule solution est possible. 125
5.8 Polarisation fractionnelle absolue p_C en fonction de p_L pour l'ensemble de l'échantillon et toutes les composantes du maser. La ligne en pointillés correspond à $p_C = {p_L}^2/4$. 128
5.9 Valeurs du champ magnétique pour U Her pour les deux périodes d'observation et χ Cyg, calculées à partir de l'Eq. 5.12 avec deux solutions d'angle θ_1 (vert foncé et vert clair), lorsque la polarisation linéaire est inférieure à 33% (voir Sect. 5.4.5.3 et Fig. 5.7). Sur l'axe des x, les nombres correspondent aux composantes gaussiennes, comme décrit dans la deuxième colonne de la Tab. 5.8. La longueur de la barre correspond à la différence entre le champ magnétique calculé au premier et au deuxième pic de la dérivée de la composante gaussienne. 131
5.10 Valeurs du champ magnétique pour *o* Ceti et R Leo, calculées à partir des Eq. 5.12 et 5.16. Sur l'axe des x, les nombres correspondent aux composantes gaussiennes, comme décrit dans la deuxième colonne de la Tab. 5.8. 132
5.11 Valeurs du champ magnétique pour R Aql et μ Cep, calculées à partir de l'Eq. 5.16. Sur l'axe des x, les nombres correspondent aux composantes gaussiennes, comme décrit dans la deuxième colonne de la Tab. 5.8. 132
5.12 Évolution du champ avec la distance (adapté de Vlemmings et al. 2012; Duthu et al. 2017). Les quatre boîtes montrent les masers SiO (la boîte rouge représente les résultats de ce travail pour un maser saturé, la boîte hachurée pour un maser non saturé en utilisant $\theta_2 = 45°$, la boîte en pointillé les résultats de Herpin et al. (2006)), les masers H_2O et OH, et le CN. Les champs magnétiques r^{-2} de type solaire et r^{-1} toroïdal sont discutés dans la Sect. 5.6. L'étoile proche de la boîte du maser SiO correspond au champ magnétique mesuré par Lèbre et al. (2014) dans χ Cyg. La ligne verticale en pointillés indique la surface stellaire pour les Miras. 133

6.1 Variation de luminosité de U Her, magnitude en fonction de la date (année/mois/jour) `https://www.aavso.org`. Les lignes verticales correspondent aux temps d'observations. Celles en bleu sont les deux observations faites en 2022. Les observations de 2024 sont en vert pour les observations déjà réalisées, et en orange pour celles qui sont prévues. 139
6.2 Evolution de la surface de la supergéante rouge AZ Cyg. Images reconstruites avec `OITOOLS.jl` à partir des observations de CHARA/MIRC-X en (de gauche à droite) 2011, 2014, 2015, 2016 (Norris et al. 2021). 141
6.3 Observations MOPRA de GY Aql, IRC-10529, IRC+10011, de la raie maser SiO v=1 J=2-1 (Indermuehle et al. 2011) en $T_A^\star$. 142
6.4 Courbes de flux intégrés dans différents rayons du ^{12}CS en configuration extended. La courbe bleue est le flux observé, celle en violet correspond au modèle. 144
6.5 Carte d'émission du SiO v=0 J=5-4 à v=0 km/s en configuration extended 145

6.6 Cartes d'émission du SiO v=1 J=5-4 en channel map en configuration extended 146
6.7 **Haut :** Carte d'émission du SiO v=1 J=5-4 à -0.7 km/s (bleu) et -3.4 km/s (rouge). **Bas :** Carte d'émission de H_2O à 268 GHz (Baudry et al. 2023, cartes non centrées sur la vitesse de la source à 34 km/s), avec en rouge et bleu les axes de la figure du haut. 147

B.1 Flux du ^{12}CO en fonction du rayon en configuration mid. Chaque courbe correspond à une direction verticale et azimutale, allant de 0 à 90°. 172
B.2 Flux du ^{12}CO en fonction du rayon en configuration mid. Chaque image correspond à un r_p, et dans chacune, les courbes représentent différentes valeurs de α. 174
B.3 Flux du ^{12}CO en fonction du rayon en configuration mid. Chaque image correspond à un α, et dans chacune, les courbes représentent différentes valeurs de r_p. 175

D.1 Séparation de la polarisation linéaire astronomique des contributions instrumentales pour l'exemple de R Leo. Les lignes pleines rouges et bleues montrent les ajustements par moindres carrés des paramètres de Stokes fractionnés Q_N/I et U_N/I (points rouges et bleus, respectivement) de R Leo en fonction de $\chi_0 = \varepsilon - \eta$, moyennés sur un intervalle de vitesse encadrant le pic d'émission I de Stokes (0.68 à 2.04km s^{-1}) et exprimés dans le cadre de référence de Nasmyth. Les lignes pointillées indiquent les contributions instrumentales fractionnelles correspondantes. Pour plus de détails, voir l'article en Annexe E.1. 179

Liste des tableaux

2.1 Paramètres du récepteur EMIR à 86 GHz (SiO v=1 J=2-1) et à 230 GHz (CO J=2-1). 26

4.1 Propriétés des poussières dans une CSE. 56

4.2 Description des sources ATOMIUM (classées par ordre croissant de taux de perte de masse) à partir de Wallström et al. (2024)
Notes : [(1)]Type spectral/pulsation. SR correspond à *semiregular*, celles avec une périodicité stable sont SRa, celles avec des cycles différents sont SRb. SRc sont les semi-régulières de type RSG. LPV est *long-period variable* où aucune périodicité n'a été observée. [(2)]Taux de perte de masse [(3)] tirés de Gottlieb et al. (2022), estimés à partir d'observations en optique. les vitesses sont celles estimées à partir des observations ALMA.
Références : [(a)]Olofsson et al. (2002) ; [(b)]Marigo et al. (2008) ; [(c)]Gottlieb et al. (2022) ; [(d)]Gaia Collaboration (2018) ; [(e)]Bailer-Jones et al. (2021) ; [(f)]Andriantsaralaza et al. (2022) ; [(g)]Groenewegen et al. (1999) ; [(h)]Perryman et al. (1997) ; [(i)]De Beck et al. (2010) ; [(j)]Young (1995) ; [(k)]Vlemmings & van Langevelde (2007) ; [(l)]Doan et al. (2017) ; [(m)]Loup et al. (1993) ; [(n)]Ramstedt et al. (2017) ; [(o)]Wittkowski et al. (2017) ; [(p)]Mauron & Josselin (2011) ; [(q)]Arroyo-Torres et al. (2013) ; [(r)]Kiss et al. (2006) ; [(s)]Jura & Kleinmann (1990) ; [(t)]Chen & Shen (2008) ; [(u)]Samus' et al. (2017) ; [(v)]Chen et al. (2007) ; [(w)] observation de M. Montargès avec PIONIER 64

4.3 Paramètres des émission moléculaires détectées dans GY Aql. Imax la valeur maximale de l'émission, rms est le bruit, Fp la valeur maximale du spectre extrait dans l'étendue maximale, σF est le bruit du spectre extrait, I_spectra la valeur de l'aire intégrée, σI l'erreur sur l'aire (=σF x FWZI), FWZI la largeur au delà de 3 σ de la raie, FWHM la largeur à mi-hauteur. 69

4.4 Paramètres des émission moléculaires détectées dans GY Aql. Imax la valeur maximale de l'émission, rms est le bruit, Fp la valeur maximale du spectre extrait dans l'étendue maximale, σF est le bruit du spectre extrait, I_spectra la valeur de l'aire intégrée, σI l'erreur sur l'aire (=σF x FWZI), FWZI la largeur au delà de 3 σ de la raie, FWHM la largeur à mi-hauteur. 70

4.5 Étude des moments 0. M0 Flux max est le maximum de l'émission, M0 rms le bruit, M0 R_{max} 3σ est la taille de l'ellipse fittée autour du contour à 3σ et M0 R_{max} FWHM est la taille de l'ellipse fittée autour du contour de la largeur à mi-hauteur. 72

4.6 Étude des moments 0. M0 Flux max est le maximum de l'émission, M0 rms le bruit, M0 R_{max} 3σ est la taille de l'ellipse fittée autour du contour à 3σ et M0 R_{max} FWHM est la taille de l'ellipse fittée autour du contour de la largeur à mi-hauteur. 73

4.7 Rapports isotopiques moyens dérivés de SiS et SO dans GY Aql, avec comparaison aux valeurs de la littérature pour le Soleil, d'autres étoiles AGB et le modèle de N. Lagarde (Lagarde et al. 2012) (pour une étoile de 6 $M_\odot$ au début de l'AGB). Le signe "$\star$" indique une incertitude liée à l'opacité de la raie utilisée pour le calcul. 82
4.8 Paramètres des deux étoiles : GY Aql et IK Tau
Notes.$^{(a)}$ Decin et al. (2018), $^{(b)}$ calculée à partir de la SED observée et à la distance d= 410 pc, $^{(c)}$ observation de M. Montargès avec PIONIER, $^{(d)}$ explication en Sect. 4.4.2.3, $^{(e)}$ Andriantsaralaza et al. (2022), $^{(f)}$ approximation sur le diagramme HR. 83
4.9 RMSE entre observations et modèles pour différentes valeurs de M_{dust}. . . . 92
4.10 Grille de paramètres testés en R et M_{dust}. Les valeurs sont le taux de perte de masse en $M_\odot$/an calculés à partir des paramètres. Les cases bleues correspondent aux meilleurs modèles (corrélation avec l'aire intégrée du CO) en configuration étendue, en rouge pour la configuration médium et en violet là où les des deux configurations fonctionnent. La case encadrée en rouge correspond à notre compromis. 93

5.1 Liste des sources observées, (a) De Beck et al. (2010) ; (b) Andriantsaralaza et al. (2022) ; (c) Gottlieb et al. (2022) ; (d) Montargès et al. (2019) ; (e) Maercker et al. (2022). 107
5.2 Incertitudes globales (écarts-types) de Stokes V dérivées de la méthode de Monte Carlo, y compris les incertitudes liées à l'élimination de la contamination instrumentale. 111
5.3 Position v_0 des composantes trouvées par le code rvm en km/s pour deux sources : χ Cyg et U Her (mars). Les lignes avec "-" signifient que la composante n'est pas détectée dans le spectre. 118
5.4 Description des composantes de Stokes I pour chaque source et les taux de saturation associés. Nous avons considéré deux distances différentes pour μ Cep et R Aql (voir Tab. 5.1). 119
5.5 Caractéristiques des composantes de l'ajustement gaussien dans les spectres de Stokes V observés pour chaque source. Le # est le numéro associé à chaque composantes. v est la position centrale de la fonction gaussienne, Δv est la séparation entre les deux pics du motif Zeeman (voir Eq. 5.9) (appelés par la suite "a" et "b"), $|V_{peak}|$ est l'intensité du pic, δV est le bruit associé à la composante, calculé dans la Sect. 5.4.2, et S/N est le rapport signal/bruit (par rapport à l'aire intégrée). 121
5.6 Taux de polarisation circulaire moyen $\overline{p_C}$ et $\overline{p_L}^2/4$ moyen pour chaque étoile. 128
5.7 Bilan de saturation pour toutes les sources 129
5.8 Taux de polarisation, angles et valeurs du champ magnétique pour toutes les composantes et toutes les étoiles dans les cas saturé et non saturé. Le # est le numéro des composantes décrites dans la Tab. 5.5, les deux pics pour chaque composante sont représentés par a et b, séparés par Δv. p_L, p_C, et χ sont la polarisation linéaire, la polarisation circulaire, et l'angle de polarisation, respectivement. B_E est la valeur du champ magnétique calculée avec l'équation 5.12, la deuxième solution pour $p_L < 33\%$ (voir la section 5.4.5.3). B_Z dans la colonne 8 résulte de l'Eq. 5.16 et dépend encore de l'angle. L'astérisque dans la dernière colonne indique des résultats peu fiables. 135

6.1 Phase de U Her en fonction de la période d'utilisation des instruments. "X" signifie que la source n'est pas visible par le télescope. 140
6.2 Estimation des sensibilités à l'IRAM-30m à partir des valeurs obtenues avec MOPRA. 143

Acronymes

AGB - Asymptotic Giant Branch
ALMA - Atacama Large Millimeter/submillimeter Array
CO5BOLD - COnservative COde for the COmputation of COmpressible COnvection in a BOx of L Dimensions with l=2,3
CSE - CircumStellar Envelope
EVPA - Electric Vector Position Angle
FWHM - Full Width at Half Maximum
FWZI - Full Width at Zero Intensity
HB - Horizontal Branch
HDU - Header Data Unit
HR - Hertzsprung-Russell
IRAM - Institut de RadioAstronomie Millimétrique
MB - Mean Beam
MIS - Milieu InterStellaire
MHD - Magnéto HydroDynamique
MS - Main Sequence
RSG - Red Super Giant
SED - Spectral Energy Distribution
TBL - Télescope Bernard Lyot
TP - Thermic Pulse
VLTI - Very Large Telescope Interferometer

Annexe A

Exemple de fichier de paramètres pour MCFOST

```
    3.0 mcfost version

#Number of photon packages
1e8      nbr_photons_eq_th : T computation
1e6      nbr_photons_lambda : SED computation
1e5      nbr_photons_image : images computation

#Wavelength
50   0.1  3000.0      n_lambda, lambda_min, lambda_max [μm]
T T F      compute temperature ? compute sed ? use default wavelength grid for output ?
GY_Aql_wv_red.lambda      wavelength file (if previous parameter is F)
T T      separation of different contributions ? stokes parameters ?

#Grid geometry and size
2            1 = cylindrical, 2 = spherical
122 64 128 20      n_rad (log distribution), nz (or n_theta), n_az, n_rad_in

#Maps
400 400 1100      grid (nx,ny), size [AU] of the map
0. 0. 1 T         RT : imin, imax, n_incl, centered ?
0 0. 1            RT : az_min, az_max, n_az angles
550               distance (pc)
0.                disk PA

#Scattering method
0      0=auto, 1=grain prop, 2=cell prop
1    1=exact phase function, 2=hg function with same g (2 implies the loss of polarizarion)

#Symmetries
F      image symmetry
F      central symmetry
F      axial symmetry (important only if N_phi > 1)

#Disk physics
```

0 0.00 1.0 dust_settling (0=no settling, 1=parametric, 2=Dubrulle, 3=Fromang), exp_strat, a_strat (for parametric settling)
F dust radial migration
1.0 sublimate dust
F hydostatic equilibrium
F 1e-5 viscous heating, alpha_viscosity

#Number of zones : 1 zone = 1 density structure + corresponding grain properties
1 needs to be 1 if you read a density file (phantom or fits file)

#Density structure
3 zone type : 1 = disk, 2 = tappered-edge disk, 3 = envelope, 4 = debris disk, 5 = wall
5e-5 1000 dust mass, gas-to-dust mass ratio
10. 1000.0 2 scale height, reference radius (AU), unused for envelope, vertical profile exponent (only for debris disk)
5.29 0.0 13120 30. Rin, edge, Rout, Rc (AU) Rc is only used for tappered-edge & debris disks (Rout set to 8*Rc if Rout==0)
1.125 flaring exponent, unused for envelope
-5 -0.1 surface density exponent (or -gamma for tappered-edge disk or volume density for envelope), usually < 0, -gamma_exp (or alpha_in & alpha_out for debris disk)

#Grain properties
3 Number of species
Mie 1 2 0.0 0.693 0.9 Grain type (Mie or DHS), N_components, mixing rule (1 = EMT or 2 = coating), porosity, mass fraction, Vmax (for DHS)
forsterite_c.dat 1 Optical indices file, volume fraction
1 Heating method : 1 = RE + LTE, 2 = RE + NLTE, 3 = NRE
0.3 0.3 0 1 amin, amax [mum], aexp, n_grains (log distribution)

Mie 1 2 0.0 0.277 0.9)
enstatite_c.dat 1
1
0.31 0.31 0 1

Mie 1 2 0.0 0.030 0.9
Olivine.dat 1.0
1
0.32 0.32 0 1

#Molecular RT settings
T T T 3.28 lpop, laccurate_pop, LTE, profile width [km/s]
3 Turbulence velocity [km/s]
1 Number of molecules
co.dat 6 molecular data filename, level max up to which NLTE populations are calculated
1200.0 959 vmax [km/s], number of velocity bins betwen 0 and vmax
F 1.e-4 abundance_GYAql_Shoier_12CO_mod.fits.gz cst molecule abundance ?, abundance, abundance file

T 1 ray tracing ?, number of lines in ray-tracing
2 transition numbers

#Star properties
1 Number of stars
2900.0 507 1.0 0.0 0.0 0.0 F Temp, radius (solar radius),M (solar mass),x,y,z (AU), is a blackbody ?
spectrum_GYAql_obs_corr.fits.gz
External file 0.0 2.2 fUV, slope_fUV

Annexe B

Émission modélisée du CO

Dans cette annexe, nous présenterons des résultats additionnels au chapitre 4. Nous utilisons les mêmes paramètres qu'en Sect. 4.4.2.2, les premiers tests avec MCFOST. Les runs sont donc faits avec : $\dot{M} = 4.1 \times 10^{-6}$, $v_\infty = 18$ km/s, $r_p = 8.03 \times 10^{16}$ cm, $\alpha = 2.53$, $R = 1000$ et $\mathrm{M}_d = 1.4 \times 10^{-5}$. Avant de voir l'impact important de M_d et R dans le flux intégré de CO, nous pouvons vérifier l'influence de deux autres paramètres : la direction dans laquelle l'image est générée, α et r_p dans la loi d'abondance.

B.1 Variation suivant la ligne de visée

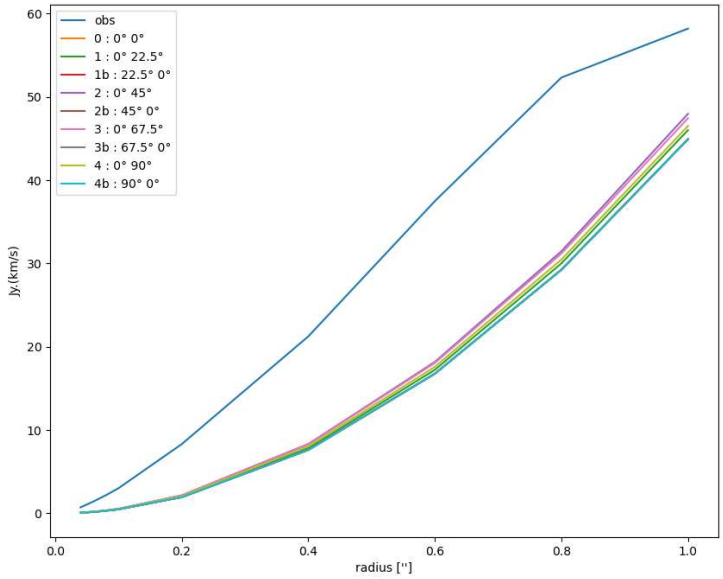


FIGURE B.1 – Flux du ^{12}CO en fonction du rayon en configuration mid. Chaque courbe correspond à une direction verticale et azimutale, allant de 0 à 90°.

Si la direction n'influe pas le flux intégré, elle influe sensiblement les structures dans les images produites. La spirale permet de reproduire les motifs observés.

B.2 Variation dans la loi d'abondance

Nous voulons vérifier si cette gamme de paramètres influe sur nos résultats. Nous utilisons les équations 4.17 et 4.16 pour déterminer α et r_p, mais cela donne des valeurs sans intervalle d'erreur sur les paramètres calculés. Mais dans Mamon et al. (1988), il est montré qu'une gamme de valeurs est correcte pour modéliser la loi d'abondance du ^{12}CO :

— α = 2, 2.1, 2.2, 2.3, 2.4, 2.5, 2.6
— r_p = 8e16, 8.5e16, 9e16, 9.5e16, 1e17, 1.5e17, 2e17 cm

Nous allons donc vérifier si cela a un impact dans les flux modélisés. Les résultats sont montrés en Fig. B.2, où chaque image est pour une valeur de r_p en faisant varier α, et en Fig. B.3, où chaque image est pour une valeur de α en faisant varier r_p.

Nous voyons que faire varier ces deux paramètres n'a que peu d'influence sur les sorties de MCFOST. La gamme de valeur acceptable pour la loi d'abondance donne les mêmes résultats, donc même en utilisant les équations pour déterminer les paramètres, sans barre d'erreur, nous voyons qu'autour des paramètres choisis les résultats ne changent pas.

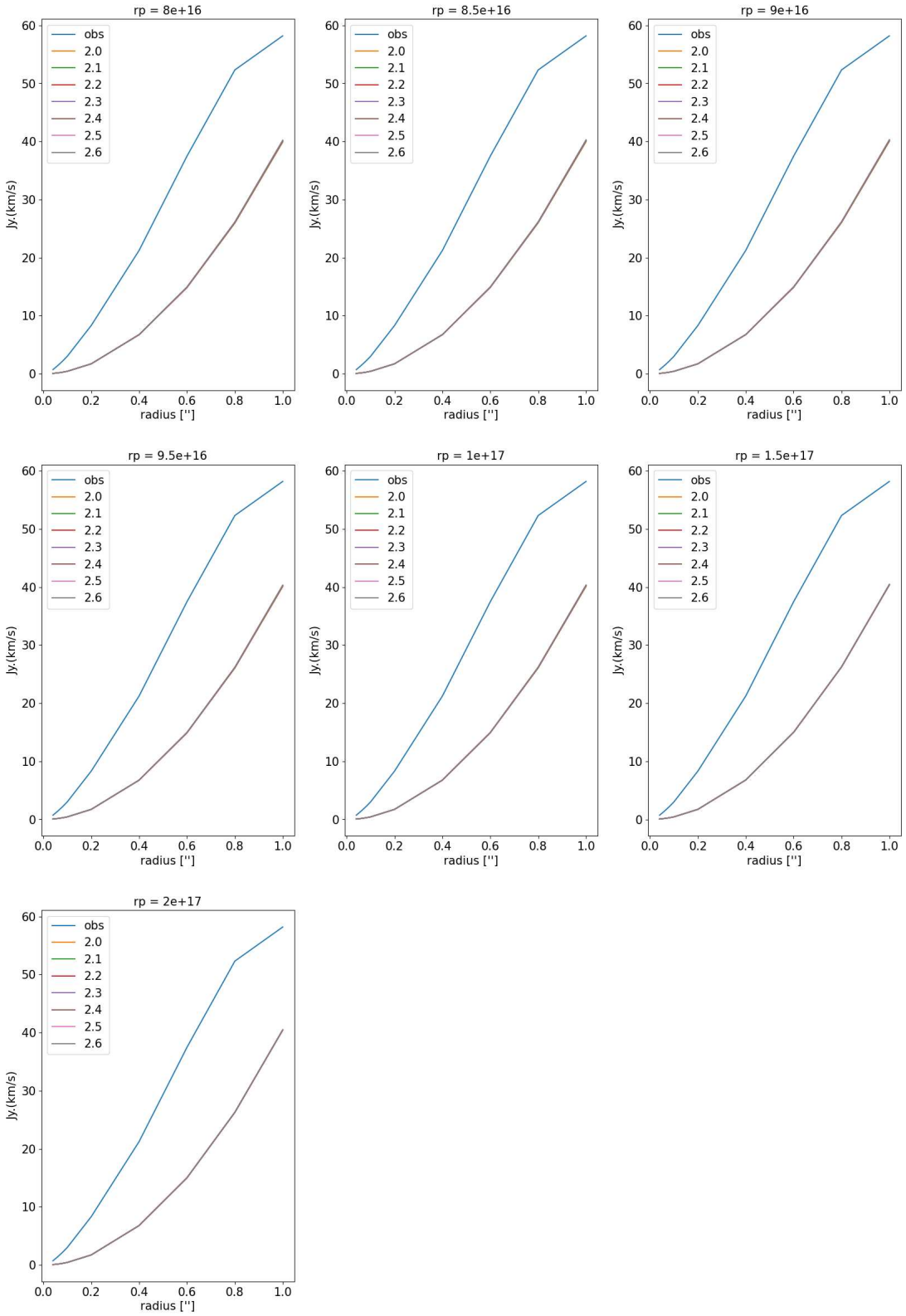


FIGURE B.2 – Flux du ^{12}CO en fonction du rayon en configuration mid. Chaque image correspond à un r_p, et dans chacune, les courbes représentent différentes valeurs de α.

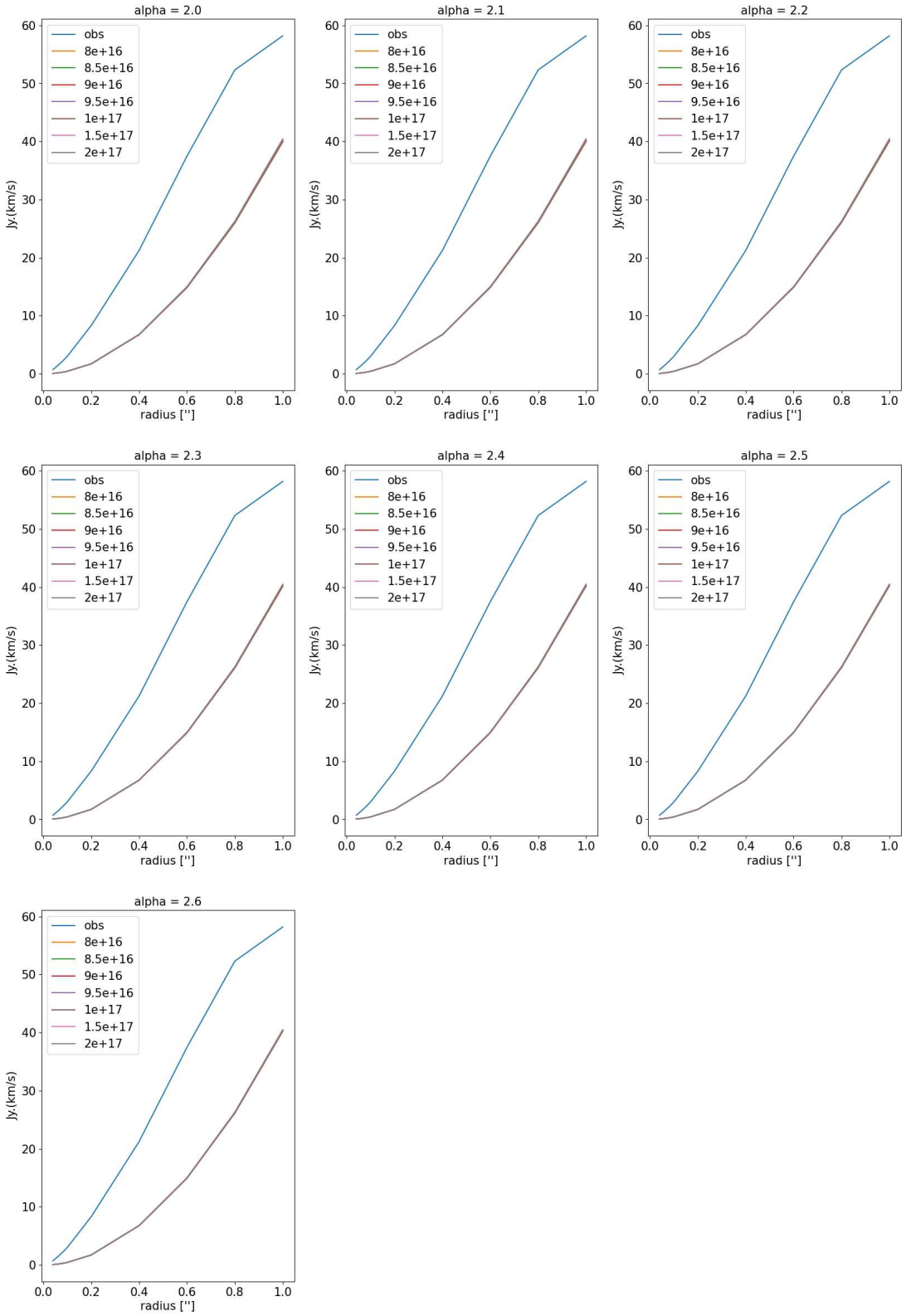


FIGURE B.3 – Flux du ^{12}CO en fonction du rayon en configuration mid. Chaque image correspond à un α, et dans chacune, les courbes représentent différentes valeurs de r_p.

Annexe C

Facteur de Landé de la raie maser SiO

Dans cette annexe, nous rappelons quelques notions de base utilisées pour décrire l'effet Zeeman dans les molécules et définissons la valeur appropriée du facteur de Landé, g, à utiliser dans la transition SiO observée dans ce travail.

La fréquence de Larmor peut être utilisée pour décrire le déplacement Zeeman d'un niveau (dans le domaine de l'énergie) ou une transition Zeeman (dans le domaine de la fréquence) jusqu'à un facteur gyromagnétique appelé facteur de Landé. Ceux qui impliquent l'électron produisent un effet proportionnel au magnéton de Bohr, qui, en unités SI, est donné par

$$\mu_B = \frac{eh}{4\pi m_e},$$

et ceux impliquant la molécule entière pour lesquels le magnéton nucléaire est pertinent,

$$\mu_N = \frac{eh}{4\pi m_p}.$$

Les deux magnétons sont liés par le rapport de masse proton/électron $m_p/m_e = 1836$.

La molécule étudiée ici, SiO, est diamagnétique (son état électronique fondamental est $^1\Sigma^+$), et par conséquent, tous ses moments angulaires électroniques sont nuls. La fréquence de Larmor en termes de magnéton nucléaire doit être utilisée,

$$\nu_L = \frac{\mu_N}{h} B = 762.31 \cdot B[G]$$

(pour référence, nous rappelons la fréquence de Larmor commune en termes de magnéton de Bohr $\nu_L = 1.3996 \times 10^6 \cdot B[G]$).

En appelant déplacement Zeeman le déplacement d'un niveau d'énergie par rapport à sa position de champ zéro, nous définissons la division Zeeman comme la séparation entre deux composantes généralement symétriques de la division Zeeman en utilisant la règle de sélection $\Delta M_J = \pm 1$ ou 0 , où M_J est la projection du moment J le long de l'axe du champ magnétique (excluant 0 à 0 pour $\Delta J = 0$). Les mesures de laboratoire (Davis & Muenter 1974; Honerjäger & Tischer 1974) coïncident en attribuant $g \approx 0.155$ pour toutes les transitions rotationnelles J de SiO dans le premier état vibrationnel v=1. Le facteur de Landé est légèrement différent, 0.154 dans l'état v = 0 (non observé ici). (Il existe également un terme énergétique faible qui dépend du champ magnétique en raison de l'anisotropie de la susceptibilité magnétique de la molécule de SiO Davis & Muenter

1974, il peut être numériquement ignoré ici). Le déplacement Zeeman des transitions SiO v=1, en termes de magnéton nucléaire, est donc de $g\nu_L = 118.16 \cdot B[G]$ et la division Zeeman est le double de cette valeur.

Nous avons défini un facteur explicite de Landé incluant la correction appropriée du magnéton de Bohr au magnéton nucléaire comme suit

$$g_B = \frac{1}{1836} g = 8.4 \cdot 10^{-5}.$$

Nous notons que cette méthode a également été utilisée dans Elitzur (1996) (voir son équation sans dimension 1.1, où le facteur de Landé doit tenir compte du facteur 1/1836 pour les molécules diamagnétiques, cependant. La largeur Doppler d'Elitzur est également la moitié de la largeur totale de la raie Doppler à demi-intensité), et également utilisée dans Kemball & Diamond (1997); Kemball et al. (2009) ou dans Asensio Ramos et al. (2005).

Dans ce travail, la fréquence Zeeman est le double du déplacement Zeeman, c'est-à-dire

$$g\Omega = 2g\nu_L.$$

Pour les raies du SiO qui nous intéressent, nous avons en Hz

$$g\Omega = 1524.6 \; gB[G]$$

.

Annexe D

Élimination de la polarisation instrumentale

Dans la Fig. D.1, nous démontrons la séparation de la polarisation linéaire astronomique des contributions instrumentales pour l'exemple de R Leo en ajustant des ondes sinusoïdales, décalées par les polarisations instrumentales, aux paramètres de Stokes fractionnaires Q_{N}/I et U_{N}/I (tels que définis dans le système Nasmyth, c'est-à-dire, par rapport à la cabine du récepteur ; voir Sect. 5.3.2.2), en fonction de l'angle χ_0.

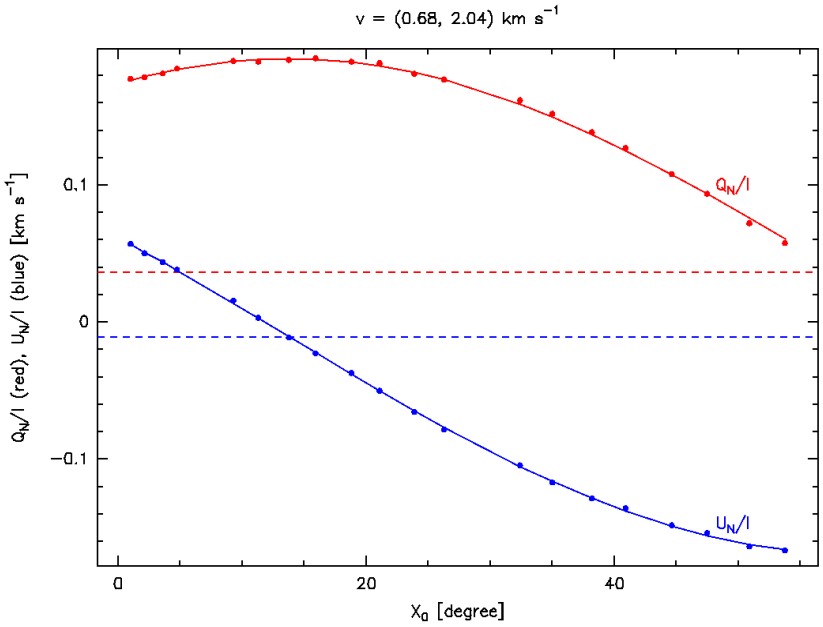


FIGURE D.1 – Séparation de la polarisation linéaire astronomique des contributions instrumentales pour l'exemple de R Leo. Les lignes pleines rouges et bleues montrent les ajustements par moindres carrés des paramètres de Stokes fractionnés Q_N/I et U_N/I (points rouges et bleus, respectivement) de R Leo en fonction de $\chi_0 = \varepsilon - \eta$, moyennés sur un intervalle de vitesse encadrant le pic d'émission I de Stokes (0.68 à 2.04km s^{-1}) et exprimés dans le cadre de référence de Nasmyth. Les lignes pointillées indiquent les contributions instrumentales fractionnelles correspondantes. Pour plus de détails, voir l'article en Annexe E.1.

Annexe E

Articles

E.1 SiO maser polarization and magnetic field in evolved cool stars

Astronomy & Astrophysics manuscript no. output
May 23, 2024
©ESO 2024

SiO maser polarization and magnetic field in evolved cool stars

L. Marinho,[1] F. Herpin,[1] H. Wiesemeyer,[2], A. López Ariste[3], A. Baudry[1], A. Asensio Ramos[4], A. Lèbre[5], P. Mathias[6], and M. Montargès[7]

[1] Laboratoire d'astrophysique de Bordeaux, Univ. Bordeaux, CNRS, B18N, allée Geoffroy Saint-Hilaire, 33615 Pessac, France. e-mail: louise.marinho@u-bordeaux.fr
[2] Max-Planck-Institut für Radioastronomie, Auf dem Hügel 69, 53121 Bonn, Germany
[3] IRAP, Université de Toulouse, CNRS, CNES, UPS, 14 Av. E. Belin, 31400 Toulouse, France,
[4] Instituto de Astrofísica de Canarias, La Laguna
[5] LUPM, Université de Montpellier, CNRS, place Eugène Bataillon, 34095 Montpellier, France
[6] IRAP, Université de Toulouse, CNRS, UPS, CNES, 57 avenue d'Azereix, 65000 Tarbes, France
[7] LESIA, Observatoire de Paris, Université PSL, CNRS, Sorbonne Université, Université Paris Cité, 5 place Jules Janssen, 92195 Meudon, France

Accepted in A&A 16th May 2024

ABSTRACT

Context. Both magnetic fields and photospheric/atmospheric dynamics can be involved in triggering the important mass loss observed in evolved cool stars. Previous works have revealed that these objects exhibit a magnetic field extending beyond their surface. The origin of this magnetic field is still under debate with mechanisms involving a turbulent dynamo, convection, stellar pulsation, and cool spots.
Aims. Our goal is to estimate the magnetic field strength in the inner circumstellar envelope of six evolved cool stars (five Miras and one Red Supergiant). Combining this work with previous studies, we tentatively constrain the global magnetic field type observed and shed light on the mechanisms at its origin.
Methods. Using the XPOL polarimeter installed at the IRAM-30 m telescope, we observed the ^{28}SiO v = 1, J = 2-1 maser line emission and obtained simultaneous spectroscopic measurements of the four Stokes parameters. Applying a careful calibration method for Stokes Q, U, and V, we derive estimates of the magnetic field strength from the circular and linear polarization fractions considering the saturated and unsaturated maser cases under the Zeeman hypothesis.
Results. Magnetic field strengths from several Gauss up to several tens of Gauss are derived. These new and more accurate measurements constraining the field strength in the 2-5 stellar radii region better than previous studies and seem to exclude a global poloidal magnetic field type. A combination of a toroidal and a poloidal field is nevertheless not excluded. A variation of the magnetic field strength over a two-months timescale is observed in one Mira star which suggests a possible link to the stellar phase, i.e. with pulsation/photospheric activity.

Key words. masers – polarization – stars: evolution – stars: late-type – stars: magnetic field – radio lines: stars

1. Introduction

After leaving the main sequence, solar-type stars (0.8-8 $M_\odot$) will go through different phases prior to the planetary nebula stage (e.g. Herwig 2005). The Asymptotic Giant Branch (AGB) phase, even if lasting less than a few million years, is one of the most interesting in terms of chemistry and dynamics. AGB objects harbor in their circumstellar envelope (hereafter CSE), beyond the photosphere, a true chemical factory where more than 80 molecules and 15 dust species have been discovered (Höfner & Olofsson 2018; Decin et al. 2018). This AGB phase is, in addition, characterized by a massive mass loss (10^{-6} – 10^{-4} $M_\odot$ /yr, Höfner & Olofsson 2018) making these objects the main contributors to the chemical enrichment of the interstellar medium and the recycling of the matter in the Universe. This also applies to their massive counterparts, the Red Supergiants (RSG, Ekström et al. 2012; De Beck et al. 2010).

Evolved cool stars are hence providing strong mechanical and radiative feedback on their host environment (Langer 2012). The high mass loss rates of AGB stars are thought to be the result of a wind acceleration mechanism based on radiation pressure on dust grains formed in the inner part of the CSE (at a few stellar radii) and levitated by stellar pulsation (Bladh & Höfner 2012). For the RSGs no consistent scenario exists. The exact mechanisms that trigger and shape the strong winds of evolved cool stars still need further characterization. This requires deeper studies of sub-photospheric layers where convection and pulsation act, of the atmosphere where strong radiating shocks occur, and of the wind-forming region where dust condensates and radiation acceleration happens. In addition to the stellar convection, pulsation, and radiation pressure on dust, magnetic fields have been proposed to play a significant role through Alfvén-wave driving of the wind (see for instance, Cranmer & Saar 2011; Höfner & Olofsson 2018), but also in shaping the wind (see Pascoli & Lahoche 2008; Dorch 2004, for pulsating evolved stars (AGBs) and for RSGs, respectvely); if they are strong enough, they could even help in extracting the angular momentum (cf. the case of the cool main sequence stars, Bouvier 2009). Hence both magnetism and photospheric dynamics contribute in sustaining winds (Lèbre et al. 2014, 2015; López Ariste et al. 2019), but the relative importance of the magnetic field for the photospheric/atmospheric dynamics is still poorly known. Nevertheless, the knowledge of the magnetic field strength and geometry

is still limited and its origin as a possible astrophysical dynamo in these stars would most likely be very different from the dynamo ($\alpha - \omega$) at work in solar-type stars, due to both their slow rotation and the fact that only a few convection cells are present at their surface at any given time (Freytag et al. 2002; Aurière et al. 2010). For those slow rotators (with high Rossby number, up to $\sim$ 100, Charbonnel et al. 2017; Josselin et al. 2015), classical $\alpha - \omega$ dynamos, where the toroidal component of the magnetic field is amplified by rotation, are indeed not expected. On the contrary, a turbulent/convective dynamo ($\alpha^2 - \omega$) can generate a local weak magnetic field up to 0.01 Gauss which is then amplified by stellar pulsation and cool spots to a large-scale magnetic field (Soker 2002). In the case of RSGs, a local small-scale dynamo generating a strong field with a small filling factor is favored from numerical simulations (Dorch 2004). Hence, while convection cannot generate global magnetic fields, local fields remain possible and may lead to the generation of (at least) local episodic mass loss events (such as the one observed on Betelgeuse by Montargès et al. 2021).

Low-intensity magnetic fields (of the order of 1-10 Gauss at the stellar surface or at a few stellar radii) have been identified and monitored over several years in RSGs and AGBs. Over the last decade, modern optical spectropolarimeters (CFHT/ESPaDOnS, TBL/Narval) have brought a lot of information on the stellar surface magnetism across the Hertzsprung-Russel diagram (e.g., Aurière et al. 2010; Lèbre et al. 2014; Tessore et al. 2017). In the radio regime, the polarimetric estimation of the magnetic field strength in the CSE of evolved stars has been possible thanks, for instance, to the XPOL instrument at the IRAM-30m (e.g., Herpin et al. 2006), the VLBA array (e.g., Kemball et al. 2011; Assaf et al. 2013), or now with ALMA (e.g., Vlemmings et al. 2017). From the radiation properties, such as linear polarization, the angle of polarization, and the circular polarization of maser emissions of different molecules, the magnetic field strength along the line of sight can be derived in the CSE of these objects (see e.g. review of Vlemmings 2011): from the innermost zones (i.e., a few stellar radii from the center of the object) via the SiO masers (Herpin et al. 2006), to the outermost layers (i.e., several thousand stellar radii) via OH masers for oxygen stars (Rudnitski et al. 2010), or via CN Zeeman effect for carbonaceous objects (Duthu et al. 2017). In particular, SiO masers are excited close to the star (see e.g. Cotton et al. 2011), in small gas cells, where SiO has not yet been depleted onto grains at further distances (Lucas et al. 1992; Sahai & Bieging 1993); SiO and dust regions are sometimes overlapping in the near-CSE (Wittkowski et al. 2007). SiO masers exhibit linear and circular polarization which is likely due to the intrinsic stellar gas magnetic field (Vlemmings 2011).

Many results and positive detections have been obtained on the surface magnetic field from optical circular polarization of M spectral type AGB (including the pulsating Mira variables, Lèbre et al. 2014; Konstantinova-Antova et al. 2014) and RSG stars (Aurière et al. 2010; Tessore et al. 2017) revealing weak (i.e., down to the Gauss level) and variable or transient fields. From circular polarization in the radio regime, the magnetic field has been estimated at a few stellar radii in the CSE to be of the order of a few Gauss (Herpin et al. 2006). All these observational constraints favor a magnetic field strength decreasing with a 1/r law throughout the CSE (Duthu et al. 2017). New insights came from ALMA interferometric observations of SiO linear polarization, revealing a magnetic field structure consistent with a toroidal field configuration (Vlemmings et al. 2017). Extrapolating this law towards the photosphere, for a toroidal magnetic field configuration (Pascoli & Lahoche 2008), one can expect a magnetic field strength of a few Gauss at the surface of Mira stars. This was confirmed by the very first detection of a magnetic field at the surface of a Mira star, χ Cyg, (2-3 Gauss, Lèbre et al. 2014). The surface magnetic field appears to vary on timescales of weeks to years, in agreement with the convective patterns timescale for RSGs (e.g., Mathias et al. 2018), or in the case of pulsating stars (Mira and RV Tauri stars) with the atmospheric dynamics, while the shock waves periodically propagating outward the stellar atmosphere may locally enhance the magnetic field through compression (e.g., Lèbre et al. 2014, 2015; Sabin et al. 2014; Georgiev et al. 2023).

The origin of the observed surface magnetic field in those evolved cool stars, as well as the impact of the field strength on the stellar environment and subsequent evolution, remain to be fully characterized. Considering the difficulty to measure the magnetic field on the stellar surface of these objects, estimating its strength at different locations of the CSE, especially as close as possible to the photosphere, is a good way to advance our knowledge of the field configuration, and therefore of its possible origin. In this paper, we present new SiO maser-line single-dish observations of six evolved cool stars, with improved calibration, in order to more accurately estimate the magnetic field strength in the inner region of the envelope, at 2-5 stellar radii where SiO masers are observed. In Sect. 2, we present the observations and simultaneous spectroscopic measurements of the four Stokes parameters. Section 3 presents the data analysis and explains the calibration of our data, with emphasis on the removal of the instrumental polarization. The method that we used to derive the magnetic field estimates is presented in Sect. 4. In Sect. 5, we present the polarization and magnetic field results. In Sect. 6 we discuss the variability and origin of the magnetic field. The concluding remarks are developed in Sect. 7. Further information is given in four Appendices.

2. Observations

We observed the ^{28}SiO v = 1, J = 2-1 maser-line emission at 86.2434277 GHz in a sample of evolved cool stars (see Table 1) in March 2022 and May 2022 at the IRAM-30m telescope on Pico Veleta, Spain. Simultaneous spectroscopic measurements of the four Stokes parameters I, Q, U, and V have been obtained using the XPOL polarimeter (Thum et al. 2008). The EMIR front-end band E090 was connected to the VESPA backend, set up in polarimetry mode with a 120 MHz bandwidth and a channel separation of 40 kHz (i.e. $\sim$0.139 km s^{-1} at 86 GHz). EMIR (Eight MIxer Receiver) is one of the four dual-polarization heterodyne receivers available at the 30m facility (for more details, see the EMIR user guide[1]). VESPA (The Versatile SPectrometer Array) is one of the seven available backends for EMIR[2]. As an auto-correlation spectrometer, it was redesigned to also cross-correlate the orthogonal linear polarization signals recorded by EMIR, while it simultaneously delivers spectra in all four Stokes parameters[3]. The pointing was regularly checked on a nearby continuum source; accuracy is better than 3″(Greve et al. 1996). The focus was adjusted on an available planet. In order to obtain flat spectral baselines, we used the wobbler switching mode with a throw of 80″. The single sideband system temperature of the receiver was 105-110 K for both sessions. The integration times were 3.1, 2.0, 4.2, 3.2, 8.9, 1.9, and 0.2 hours for χ Cyg, μ Cep, o Ceti, R Aql, R Leo, U Her (March), and U Her (May) leading

[1] https://publicwiki.iram.es/EmirforAstronomers
[2] https://publicwiki.iram.es/Backends
[3] https://publicwiki.iram.es/PolarimetryforAstronomers

Table 1. List of the observed sources

Star	RA (J2000) (h m s)	DEC (J2000) (° ' ")	Type	d (pc)	v_{LSR} (km s^{-1})	L ($L_\odot$)	T_{eff} (K)	dM/dt ($M_\odot$/yr)	ϕ
o Ceti[a]	02:19:20.79	-02:58:39.50	Mira (M5-9IIIe+DA)	107	+46.96	6099	2193	2.5×10^{-7}	0.55
R Leo[b]	09:47:33.49	+11:25:43.82	Mira (M7-9eB)	100	0.0	5617	2890	9.2×10^{-7}	0.85
U Her[b,c]	16:25:47.47	18:53:32.86	Mira (M6.5-8+eB)	271	-16.48	8000	3000	5.9×10^{-7}	0.25/0.45
R Aql[b,c]	19:06:22.25	08:13:48.01	Mira (M6-9eB)	234/308	+47.0	4900	2800	1.1×10^{-6}	0.90
χ Cyg[b]	19:50:33.92	+32:54:50.61	Mira (S6-9/1-2eB)	180	+11.2	7813	2000	2.4×10^{-7}	0.90
μ Cep[d,e]	21:43:30.46	+58:46:48.16	RSG (M2-IaB)	390/1818	+27.95	35000	3750	2.0×10^{-6}	-

References. (a) De Beck et al. (2010); (b) Andriantsaralaza et al. (2022); (c) Gottlieb et al. (2022); (d) Montargès et al. (2019); (e) Maercker et al. (2022).

to rms of 6.5, 8, 6, 7, 5, 7.5, and 24 mK, respectively, at the nominal spectral resolution. The forward and main-beam efficiencies were 0.95 and 0.81, respectively; the half-power beam width was 29″. The Jy/K conversion factor is 5.9.

Dedicated observations of the Crab Nebula (a well-characterized and strongly linearly polarized source) have been performed to verify the polarization angle calibration (see Thum et al. 2008) as well as planet observations with an unpolarized thermal emission (on Uranus) to estimate the instrumental polarization along the optical axis resulting from a feed leakage. The alignment between vertical and horizontal polarizations is perfect since the installation of an ortho-mode transducer with a single horn in 2016. The presence of polarized sidelobes does not affect our observations because our sources are not extended (the SiO maser region, below typically 0.1 arcseconds in size, e.g. Cotton et al. 2006, is very small compared to the telescope beam). The general methodology used for single dish SiO polarimetry has been described in Herpin et al. (2006). However, since 2015 the *V* instrumental polarization has strongly increased due to a substantial leakage of the Stokes *I* signal into the Stokes *V* (Duthu et al. 2017). An improved calibration scheme has then been used in the present work to minimize this contamination and is presented in Sect.3.2.

Our sample is shown in Table 1 (the stellar phase ϕ is given in column 10) and consists of five Mira-type stars (R Aql, *o* Ceti, χ Cyg, U Her, and R Leo) and one RSG (μ Cep). All sources are known to exhibit strong SiO maser emission. R Leo and χ Cyg have already been observed by Herpin et al. (2006) in polarimetric mode. Note that U Her was observed in both March and May 2022.

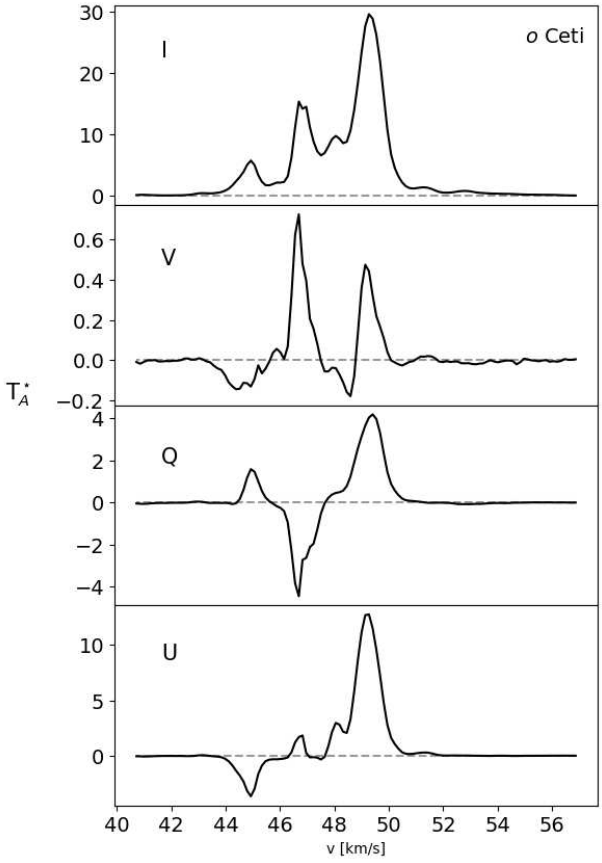


Fig. 1. Observed Stokes parameters (not corrected for instrumental polarization) *I*, *V*, *Q*, and *U* for *o* Ceti (in $T_A^\star$ units [K]), spectral resolution of 0.139 km s^{-1} centered on the SiO transition.

3. Data reduction and calibration

3.1. Stokes parameters

From the horizontal and vertical polarizations and their relative phase shift, we can simultaneously determine the four Stokes parameters:

$$\begin{aligned} I &= \langle E_{\rm H}^2 \rangle + \langle E_{\rm V}^2 \rangle \\ Q &= \langle E_{\rm H}^2 \rangle - \langle E_{\rm V}^2 \rangle \\ U &= 2\langle E_{\rm H} E_{\rm V} \cos\delta \rangle \\ V &= 2\langle E_{\rm H} E_{\rm V} \sin\delta \rangle \end{aligned} \quad (1)$$

with δ the phase difference between horizontal and vertical components $E_{\rm H}$ and $E_{\rm V}$ (e.g. Landi Degl'Innocenti & Landolfi 2004).

As polarizations are measured in the Nasmyth cabin reference frame, Stokes parameters *Q* and *U* are then rotated to the equatorial system to correct for the parallactic rotation. The calibration of the phase difference between the orthogonally polarized signals is automatically determined during the observations, by injecting a signal from a liquid-nitrogen bath passing through a well-specified wire grid (Thum et al. 2008), and applied by dedicated offline data-processing. An example of *I*, *Q*, *U*, *V* spectra is shown in Fig. 1 for *o* Ceti.

The data reduction was made with the CLASS[4] package. The first step consists of removing linear baselines from all individ-

[4] http://www.iram.fr/IRAMFR/GILDAS/

ual spectra. In a second step, we correct the measured polarizations for the instrumental leakage from Stokes I to Q, U, and V; the used methodology is described in Sect. 3.2. The third step consists of averaging, under sensitivity-optimizing weighting, all spectra for a given Stokes parameter to form a single spectrum to be analyzed.

From those, we can compute the fractional circular polarization (p_C), the fractional linear polarization (p_L), and the angle of polarization (χ). These are defined as (Landi Degl'Innocenti & Landolfi 2004):

$$\begin{aligned} p_C &= V/I \\ p_L &= \sqrt{Q^2+U^2}/I \\ \chi &= \tfrac{1}{2}\mathrm{atan2}(U,Q) = \tfrac{1}{2}\mathrm{Arg}(U+iQ) \end{aligned} \quad (2)$$

The astronomical signal that we get is an incoherent mixture of Stokes Q, U, and V parameters filling the observing beam, i.e., originating from slightly different sight-lines. The use of the four-quadrant inverse tangent function instead of the arctangent function avoids 90° ambiguities arising when a significant polarization in Stokes U is measured together with an insignificant Stokes Q value of undefined sign. Owing to the modulation of Stokes Q and U in a non-corotating Nasmyth reference frame, such a situation is unavoidable and frequent.

3.2. Instrumental Polarization

Most astronomical telescopes and their instrumentation suffer from spurious conversions from Stokes I into Stokes Q, U, and V, and among the three latter. The reasons for these conversions are manifold and mainly originate in the asymmetric optics of the telescope (e.g., Nasmyth designs like that of the IRAM-30m) and the re-imaging system of the receivers, and in the receiver feed horns. For a discussion, we refer to Thum et al. (2008, and further references therein), demonstrating the extremely low instrumental conversion of the IRAM-30m optics from Stokes I into Stokes V (Müller matrix element M_{IV} at the per-mil level even outside the optical axis, after optimization of the orientation of the beam-splitting grid). In December 2015, the E090 band of EMIR was equipped with an ortho-mode transducer splitting the orthogonal linear polarizations only in the feed horn. Its imperfections induce an instrumental polarization of up to $M_{IV} = 2.7\%$, derived from observations of the unpolarized planet Uranus. Calibration of the polarization angle is as good as ±0°.5, which is the uncertainty of the orientation of the wire grid in the phase-calibration unit. A spurious conversion from Stokes U to V may arise in the phase calibration, but is shown to fall below $M_{UV} \lesssim 1\%$. From the Crab Nebula observations performed at the beginning and end of each period, we derive a stable polarization angle of 145-146° in agreement with what is expected (Aumont et al. 2010; Ritacco et al. 2018). This demonstrates that the instrumental conversions between linear and circular polarization are under control. For brevity, we therefore use *instrumental polarization* as a synonym for the leakages from Stokes I into Q, U, and V, referring to specific conversions with the Müller matrix elements M_{IQ}, M_{IU}, and M_{IV}. In the following, we describe the method used to determine the instrumental polarization and to remove it from the Stokes spectra. It is important to note that these calibration steps are applied scan-wise, i.e., to spectra of typically four-minute long on-off cycles. This is because the instrumental polarization arises predominantly in the Nasmyth cabin and, therefore, if expressed in celestial reference frames depends on elevation. Final spectra are subsequently obtained by averaging the calibrated scans.

Table 2. Global uncertainties (standard deviations) of Stokes V derived from the Monte-Carlo method, including uncertainties in the removal of instrumental contamination.

	σ_V (mK)	Integration time (hour)
o Ceti	1.9	4.2
R Leo	1.1	8.9
U Her (March)	2.4	1.9
U Her (May)	6.9	0.2
R Aql	5.1	3.2
χ Cyg	3.8	3.1
μ Cep	4.8	2.0

3.2.1. Removal of instrumental leakage from Stokes I to Stokes V

A given Stokes V spectrum is composed of an astronomical signal, $V^\star$, and an instrumental leakage from Stokes I, i.e., $V = V^\star + M_{IV} \cdot I$. Our recovery of $V^\star$ then proceeds as follows:

1. Since the M_{IV} term is known to be quasi-achromatic, it can be quantified, for each scan, by the linear regression of Stokes I and V. By averaging only spectra with $|M_{IV}| < 1\%$, we obtain an almost pure, preliminary astronomical Stokes V spectrum, $\tilde{V}^\star$.
2. $\tilde{V}^\star$ is subtracted from each Stokes V spectrum. The resulting scan series of residual spectra ΔV is then largely dominated by the leakage terms $M_{IV} \cdot I$. Estimates of M_{IV} are scan-wise determined by linear regression of Stokes I and ΔV.
3. In the final step, we compute $V^\star = V - M_{IV} I$. The thus obtained series of corrected spectra with baseline noise σ_{rms} are finally averaged with a sensitivity-optimizing $1/\sigma^2_{rms}$ weighting.

A demonstration of this algorithm is shown in Fig. A.1. The residual instrumental polarization in the cleaned Stokes V spectra mainly arises in the uncertainties ΔM_{IV} of the thus obtained parameters M_{IV} and is estimated by applying the same calibration steps to synthetic Stokes V spectra of an underlying $V^\star$ known a priori:

1. As data model for a given target, we use its $V^\star_{rvm}$ spectrum produced by the *rvm* code (see Sect. 4.1). For each scan out of the total of N_{obs} observations we add baseline noise of standard deviation σ_{rms} and an instrumental contribution $(M_{IV} + \Delta M_{IV})I$. The N_{obs} realizations of the synthetic noise spectra and ΔM_{IV} parameters are obtained from Gaussian distributions of the same standard deviations as those determined in the calibration steps described above.
2. We decontaminate this set of N_{obs} simulated spectra and deduce the best estimate $\hat{V}^\star$ of the astronomical Stokes V spectrum, using the same cleaning procedure as described above.
3. We repeat this procedure ten times to obtain for each velocity channel the standard deviation among the $\hat{V}^\star$ spectra, and assign it to the corresponding channel of the $V^\star_{rvm}$ spectrum.

For all sources, we apply this Monte-Carlo method and we obtain standard deviations σ_V of the order of a few mK, reported in Table 2. They exceed those of the radiometric noise in the original Stokes V spectra and reflect the residual uncertainty in the determination of the M_{IV} parameters. We underline that for R

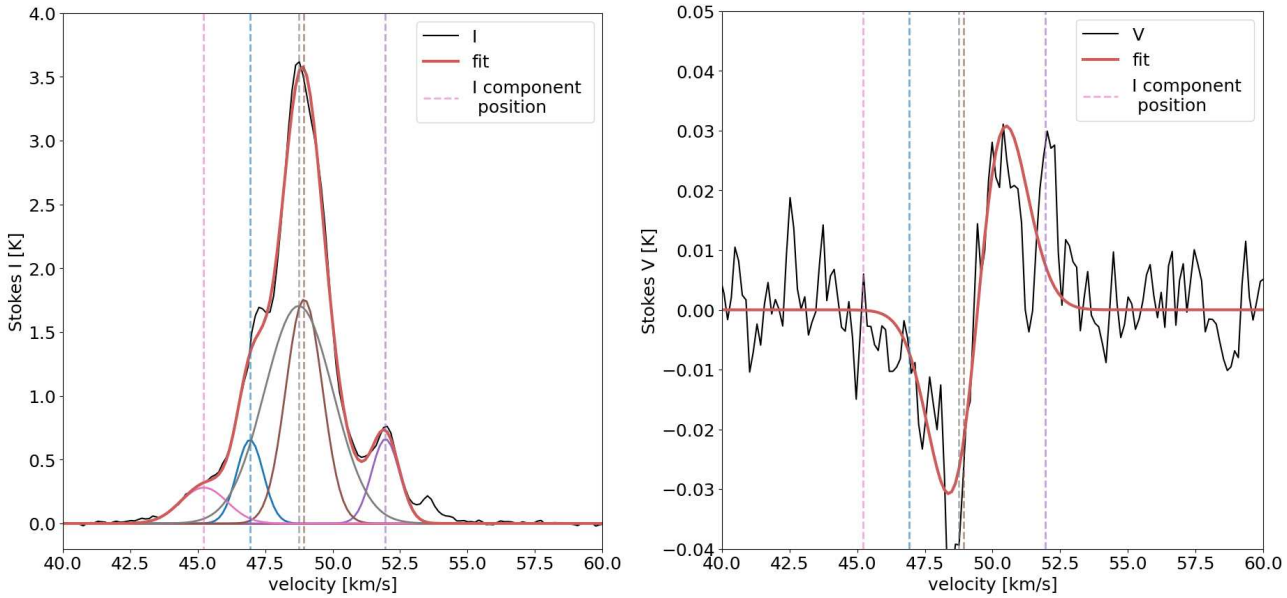


Fig. 2. Decomposition of Stokes I and V for R Aql (spectral resolution of 0.139 km s^{-1}). **Left**: In black the Stokes I data, in red the global fit; the vertical colored dashed lines are the positions of the center of the individual Gaussian functions used in the fit, plotted in various colors. **Right**: In black, the Stokes V data cleaned from instrumental polarization (Sect. 3.2), the fit is in red; the vertical dashed colored lines show the individual Gaussian I components from Stokes I fitting procedure (left panel).

Aql, the previous test for the reproducibility of the required correction indicates that the derived $B_Z \times \cos(\theta_2)$ is inconclusive. It is only formally significant the $V^{\star}_{\rm rvm}$ spectrum uncertainty is only based on the radiometric noise; there are no limitations linked to the procedure removing the $M_{\rm IV}$ terms.

3.2.2. Removal of instrumental leakage from Stokes I to Q and U

The removal of the leakage from Stokes I to linear polarization is conceptually easier because in the celestial reference frame (where the polarization angle is measured in the equatorial system from the north towards the east following the IAU convention, IAU 1973) the astronomical polarization explicitly depends on the parallactic rotation, or, to be more precise, on the difference χ_0 between the telescope's elevation ε and the parallactic angle η, whereas the instrumental contribution remains fixed in the reference frame of the Nasmyth cabin. For the EMIR receiver, the transformation from celestial coordinate offsets defined in the equatorial frame $(\Delta\alpha\cos\delta, \Delta\delta)$ to those defined in the Nasmyth frame is given by

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} \cos\chi_0 & \sin\chi_0 \\ -\sin\chi_0 & \cos\chi_0 \end{pmatrix}. \tag{3}$$

The application of the coherency matrix formalism (e.g., Wiesemeyer et al. 2014, further references therein) then yields the corresponding transformation of the equatorial plane of the Poincaré sphere to the Nasmyth reference frame (subscript N), with the following representation of the Stokes Q and U parameters:

$$\begin{aligned} Q_{\rm N} &= M_{\rm IQ} I + Q^{*}_{\rm eq}\cos 2\chi_0 + U^{*}_{\rm eq}\sin 2\chi_0, \\ U_{\rm N} &= M_{\rm IU} I - Q^{*}_{\rm eq}\sin 2\chi_0 + U^{*}_{\rm eq}\cos 2\chi_0, \end{aligned} \tag{4}$$

where the superscripts * refer as in Sect. 3.2.1 to the astronomical Stokes parameters, and where $M_{\rm IQ}$ and $M_{\rm IU}$ are the Müller matrix elements for the spurious conversion of Stokes I into Q and U. The knowledge of the exact nature of the $M_{\rm IQ}$ and $M_{\rm IU}$ terms is not required here, except that their origin is located in the Nasmyth cabin, and that they are quasi-achromatic across the lines profiles here. From previous commissioning work (Thum et al. 2008), these prerequisites are known to be fulfilled. Under the well-justified premise that the emission in the Stokes parameters Q^* and U^* is spatially unresolved and stationary on the timescale of an hour-angle interval, and ensuring sufficient sampling of $2\chi_0$, they can be separated from the instrumental contamination by fitting sinusoidal curves to the line-integrated fluxes using Eq. 4. An example is shown in Fig. A.2. Minor, systematic deviations hint at another instrumental contribution to the measured polarization that is fixed in the horizontal system and therefore arises from the telescope's primary or secondary mirror. These contributions were found to be insignificant.

4. Data analysis and method

4.1. Stokes I and V components analysis

The SiO Stokes I spectra are shown in Fig. 2 for R Aql and in Appendix B (Fig. B.1) for the other sources. All SiO line profiles are complex, but can be reproduced by assembling several Gaussian maser components centered at different velocities. The individual components are relatively narrow, although some of them are slightly broader than the thermal linewidths, of the order of 1 to 1.2 km s^{-1} in SiO maser regions where we expect the gas temperature to be around 1000 to 1500 K. We have decomposed the Stokes I signal into multiple Gaussian functions, assuming that the intensity profile I can hence be fitted by:

$$I(v) = \sum_{k=1}^{n} A_k e^{-\frac{(v-v_{0,k})^2}{\Delta v^2_{D,k}}} \tag{5}$$

with $v_{0,k}$ and $\Delta v_{D,k}$ respectively the central velocity and Doppler width for each component k, and A_k a weight coefficient.

We have developed a code based on the Relevance Vector Machines (rvm) algorithm as described in Tipping & Faul (2003). This code fits the signal to the best linear combination of entries taken from a dictionary. In our case, the dictionary is made of Gaussian functions of various widths (Full Width at Half Maximum, FWHM), that are chosen in a range of two values, Δv_a and Δv_b, sampled in 50 values. They are defined for each star and centered over a range of velocities (200 values between v_0 and v_1). The term *dictionary* is used to emphasize that there is no requirement of orthogonality among the different elements of the dictionary. Lacking such a requirement, the algebraic problem has no unique solution. *rvm* solves this issue by Bayesian marginalization. The code assigns a weight to all the components of the dictionary (A_k), optimizing the marginal likelihood. In a sense, the algorithm seeks the linear combination with the smallest number of dictionary entries which satisfies noise constraints, consistent with the noise observed in our data.

Initial fits were made with the CLASS package to get a first idea of ranges for widths and velocities. Those parameters were then used as a first guess for the ranges in the *rvm* code. The ranges were adjusted iteratively to maximize the correlation between the fit and the observed spectra. he results are not sensitive to the adopted ranges provided that they remain within reasonable values. The FWHM ranges differ slightly for each source, but they typically are between 0.3 and 2 km s^{-1}. The fit result is more sensitive to the noise level put in the algorithm, i.e. the Stokes *rms*, that will constrain the number of components used in the fit.

Always assuming that circular polarization has its origin in the Zeeman effect, an analogous decomposition is used for Stokes V profiles. Since SiO is a non-paramagnetic molecule, the typical magnetic fields expected to be found in the CSE correspond to the so-called weak-splitting Zeeman regime, for which Zeeman splitting is much smaller than the intrinsic Doppler line width Δv_D. This is independent of any line width growing in the maser theory, but we will describe later the impact of maser saturation. In the weak field regime, any Stokes V signal can be safely modelled:

$$V(v) = f(B)\frac{dI}{dv} \tag{6}$$

where $f(B)$ is a function of the magnetic field intensity and the parameters of the transition, with respect to the associated intensity. As in the case of the observed Stokes parameter I, the observed parameter V is broken down into subcomponents V_i that are derivative of Gaussian functions which, when added together, fit the V profile. Our *rvm* algorithm determines the weights assigned to all V_i whose weighted combination fits the observed V. All profiles are treated here as one would do with thermal Zeeman measurements, but of course maser amplification may modify the line profiles (maser saturation will be considered in Sect. 4.4).

Fit results on Stokes I and V are given in Tables 3-4 and are shown in Fig. 2 for R Aql and in Fig. B.1 (Stokes I) and 3 (Stokes V) for the other sources.

4.2. Computation of uncertainties

To compute the uncertainties δB of the inferred magnetic field, we need to compute the uncertainties δV of the Stokes V parameters after the removal of the instrumental polarization as described above. We consider two main sources of uncertainties:

- The Monte-Carlo method described in 3.2.1 includes the Stokes V global uncertainty for each velocity channel, i.e., reflects both the radiometric noise and the uncertainty in the removal of the $M_{\rm IV}$ terms (see σ_V in Tab. 2). This entails an uncertainty $\delta V_{\rm inst}$ in the *rvm* fit which needs to be quantified.
- The difference ("residual"), $\delta V_{\rm res}$, between the fit and the cleaned spectra $V^\star$ (see Sec. 3.2.1).

We can quantify the first uncertainty from the standard deviations $\sigma_{\rm V}$ as determined in Sect. 3.2.1, which propagates into the parameters of the Stokes V fitting method and, consequently, to the magnetic field estimates. To determine this first uncertainty, we define three spectra, namely the cleaning-method spectrum and two spectra deviating from the cleaned one by $\pm\sigma_{\rm V}$. We apply the *rvm* code to these three spectra to see if there are differences in the parameters of the Gaussian functions (velocity widths, central velocities, and amplitudes) used in the fit. We find a difference of 0.3 km s^{-1} in the central velocity for U Her in May and 0.1 km s^{-1} for the three sources μ Cep, o Ceti, and U Her (March), while there is no difference for the other objects. We also determine the corresponding difference $\delta V_{\rm inst}$ between the largest excursions introduced in the peak intensities $V_{\rm peak}$; it amounts to 7 mK.

To estimate $\delta V_{\rm res}$, we measure the *Root Mean Square Error* ($\delta V_{\rm res} = \sqrt{\sum_{i=1}^{N}(x_i^m - x_i^d)^2/N}$ with x^m the fitted values and x^d the observational data). For R Aql, μ Cep, and U Her (March observation) we find $\delta V_{\rm res} \sim 7$ mK and for U Her (May observation), R Leo, Ceti and χ Cyg 24, 28, 28 and 33 mK, respectively.

To obtain the total uncertainty δV in Stokes V we add $\delta V_{\rm inst}$ and $\delta V_{\rm res}$ in quadrature; the results are reported in Table 4. Thanks to their large signal-to-noise ratios, we assume the Stokes I spectra to be free from errors. For both regimes (i.e., saturated and unsaturated), uncertainties in the magnetic field estimates are then given by $\delta B/B = \delta V/V$.

4.3. Description of the observed Stokes I and V signals

Our fit results (see Figs. 2 for R Aql, 3 for the V decomposition, B.1 for I, and Tables 3, 4) show that the SiO maser line profiles are globally well reproduced by our procedure. Exceptions can be found in the bluest and reddest weak features of the total intensity I, as for instance at ∼54 km s^{-1} for R Aql, but also for χ Cyg, o Ceti, or U Her (for the May data). Some broad wing emissions in μ Cep, χ Cyg, or o Ceti (including component #1) are not reproduced either. This has no impact on our results as the polarization of these components is weak, within the noise. All detected Stokes I components have amplitudes well above 10σ and are ∼1 km s^{-1} (or less) broad, as expected from maser emission (e.g. Richards et al. 2020). However, one central component in R Leo has a width of 2.3 km s^{-1} but might be due to an underestimation (too weak) of the other components on both sides. We underline that the maser emission in U Her has changed between the two epochs of observation. For this source, the profiles are different, although we identify the same number of components (five) but at different velocities. Indeed, the last component at -10.4 km s^{-1} in March has no equivalence in May. The first components at -20.1 km s^{-1} (March) and -19.7 km s^{-1} (May) have the same intensity and width. Between the components at -17.7/-17.4 km s^{-1} and -16.0/-16.2 km s^{-1}, which are weaker in May, the code has found for May an additional, larger (Δv = 1.3 km s^{-1}), component at -17.0 km s^{-1} (See Figure B.1).

Two types of V profiles are globally observed within our sample: single profiles with 1-2 well-separated Zeeman components (R Aql, U Her in May, and μ Cep) and more complex profiles with more components, some of them overlapping. U Her

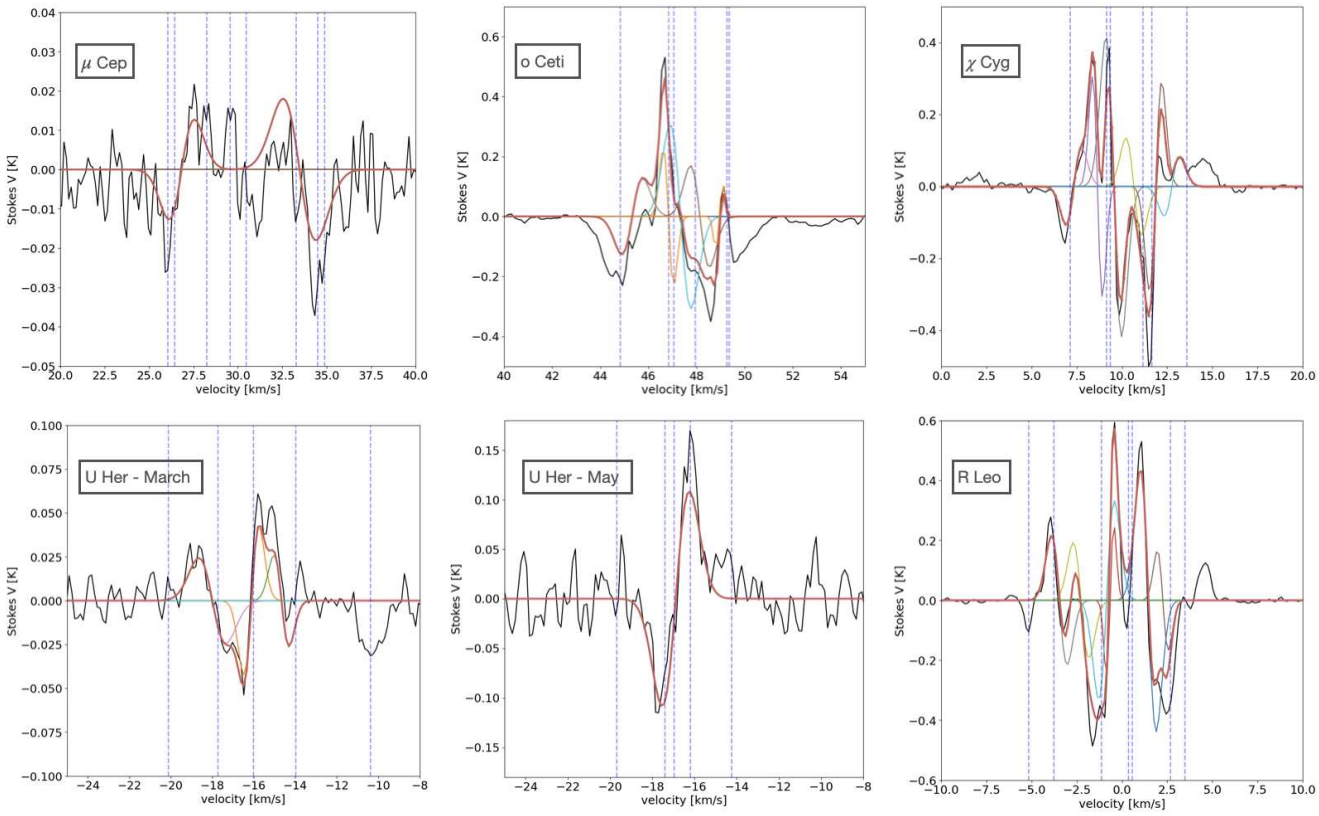


Fig. 3. Stokes *V* spectra for all sources, except R Aql. In black, the Stokes *V* data cleaned from instrumental polarization (Sect. 3.2), the fit in red; the dashed purple lines are the positions of the individual Gaussian *I* components from Stokes *I* fitting procedure.

in March is between the two cases and does not exhibit the simple anti-symmetric profile observed in May. It is important to note that not all *I* components are associated with characteristic anti-symmetric Zeeman *V* profiles; this could perhaps be due to the complexity of the magnetic field within our rather large radio beamwidth. The Zeeman features in Stokes *V* that can be associated with a Stokes *I* component are (blue- or red-) shifted by a few 0.1 km s^{-1}, hence in general more than our uncertainty on the fits (see Sect. 4.2) and comparable to or more than the channel separation. This velocity shift is thus real, but we cannot explain it with a simple model associating physical maser components with emission peaks and a magnetic field. We cannot exclude from the present work that other theories without standard Zeeman interpretation could lead to complex profiles with possible velocity shifts.

The *V* spectra for R Aql and U Her (May data) exhibit a well-defined single Zeeman signature, red-shifted from the corresponding *I* component. μ Cep exhibits two well-separated Zeeman signatures, also red-shifted, but with a low S/N. The fit for U Her (March data) indicates three components, but considering the S/N, only the central one (in orange in Figure 3), roughly identical to that detected in May, can be trusted. The *V* profiles for χ Cyg, R Leo, and *o* Ceti are made of 5 or 6 components each, most of them associated with *I* components though with noticeable velocity shifts. *o* Ceti exhibits broad negative *V* signals in the bluest and reddest sides of the *V* profiles, which cannot be fitted by Zeeman profiles. Extreme components in R Leo cannot be reproduced either.

We may speculate that μ Cep, U Her, and R Aql exhibit less *V* components because of weaker SiO maser emission, compared to that of other objects, i.e., the S/N is not sufficient to reveal other possible *V* components.

4.4. Maser line saturation

The cosmic maser line theory predicts an exponential growth of the line intensity until the population inversion reaches a critical saturation level, beyond which the radiated emission increases linearly along the propagation axis and tends to be 'beamed' (see e.g. Goldreich & Kwan 1974). A convenient way to estimate if the maser saturation conditions apply consists in comparing the stimulated emission rate of the maser transition, *R*, with the decay rate, Γ, from the maser levels. Saturation is observed when R exceeds Γ.

The stimulated emission rate is derived from:

$$R = \frac{AkT_b\Delta\Omega}{4\pi h\nu} \tag{7}$$

where k and h are the Boltzmann's and Planck's constants, T_b is the brightness temperature, $A = 2.891 \times 10^{-5} s^{-1}$, the Einstein coefficient for spontaneous emission of transition SiO v= 1, J=2-1, ν the line frequency, and $\Delta\Omega$ the beaming solid angle (the ratio of the surface area of a typical maser spot to the area of the masing cloud).

Deriving R for the v= 1, J=2-1 SiO transition depends critically on the estimate of $\Delta\Omega$ and T_b. $\Delta\Omega$ was estimated from the interferometric maps of SiO at 43 GHz in the v=1, J=1-0 transition observed in one typical Mira star over several epochs (Assaf et al. 2013); the average over all epochs is about 5×10^{-2}, but we note that the minimum and maximum beaming can vary from 2×10^{-2} to nearly 0.1 at different epochs. We assume here that

Table 3. Description of the *I* components for each source and associated saturation rates.

Star	rms	v	Flux	Δv	S/N	T_B	R	R/Γ
	(mJy)	(km s^{-1})	(Jy)	(km s^{-1})		(10^7 K)	(s^{-1})	
R Aql	43	45.2	1.7	1.2	14	0.8–1.4	0.2–0.4	0.04-0.08
		46.9	3.9	0.7	32	1.7–3.1	0.5–0.9	0.1–0.2
		48.7	10.1	1.8	83	4.5–8.1	1.3–2.3	0.3–0.5
		48.9	10.4	1.0	85	4.6–8.4	1.3–2.3	0.3–0.5
		52.0	3.9	0.7	32	1.7–3.1	0.5–0.9	0.1–0.2
μ Cep	46	26.0	3.3	0.4	25.0	4.1–89.9	1.1–25	0.2–5
		26.4	4.0	1.4	31	5.0–109.0	1.4–30.3	0.3–6.1
		28.2	6.0	1.5	46	7.5–163.4	2.1–45.4	0.4–9.1
		29.5	2.1	0.3	16	2.6–57.2	0.7–15.9	0.1–3.2
		30.5	4.3	1.1	33	5.4–117.1	1.5–32.5	0.3–6.5
		33.3	1.9	0.3	15	2.4–51.8	0.7–14.4	0.1–2.9
		34.5	4.6	1.4	35	5.8–125.3	1.6–34.8	0.3–7.0
		34.9	2.2	0.5	17	2.8–59.9	0.8–16.6	0.2–3.3
o Ceti	36	44.8	26.2	0.6	260	2.5	0.7	0.1
		46.8	68.7	0.4	682	6.5	1.8	0.4
		47.0	26.5	1.0	263	2.5	0.7	0.1
		47.9	37.4	0.4	372	3.6	1.0	0.2
		49.2	93.8	0.9	932	8.9	2.5	0.5
		49.3	93.7	0.5	931	8.9	2.5	0.5
χ Cyg	38	7.1	39.4	1.2	366	10.5	2.9	0.6
		9.1	290.2	0.5	2693	77.6	21.6	4.3
		9.3	172.7	1.1	1603	46.2	12.8	2.6
		11.2	64.2	1.2	596	17.2	4.9	1.0
		11.7	124.3	0.5	1154	33.2	9.3	1.9
		13.6	15.1	1.2	140	4.0	1.1	0.2
U Her	45	-20.1	3.7	1.3	29	2.2	0.6	0.1
(March)		-17.7	30.2	1.0	240	18.3	5.1	1.0
		-16.0	31.9	1.0	254	19.3	5.4	1.1
		-14.0	6.9	1.3	55	4.2	1.2	0.2
		-10.4	2.1	2.0	17	1.3	0.4	0.1
U Her	140	-19.7	2.9	0.9	73	1.8	0.5	0.1
(May)		-17.4	29.0	0.6	731	17.5	4.9	1.0
		-17.0	32.9	1.3	830	19.9	5.5	1.1
		-16.2	19.6	0.6	495	11.9	3.3	0.7
		-14.2	3.2	1.5	81	1.0	0.3	0.1
R Leo	29	-5.2	15.8	0.7	196	1.3	0.4	0.1
		-3.8	47.2	0.5	587	3.9	1.1	0.2
		-1.2	137.6	0.7	1710	11.3	3.1	0.6
		-0.2	162.3	2.3	2018	13.4	3.7	0.7
		0.6	117.9	0.8	1465	9.7	2.7	0.5
		2.7	21.6	0.4	268	1.8	0.5	0.1
		3.5	51.3	1.5	637	4.2	1.2	0.2

Notes. We considered for μ Cep and R Aql two different distances (see Table 1)

$\Delta\Omega = 5\times10^{-2}$ is also representative of the beaming angle for the SiO v=1, J=2-1 transition. To estimate T_b in the absence of high spatial resolution maps of the observed sources, we can rely on the existing measurements made in a broad variety of late type stars. Adopting here 1 au for the maser typical sizes as in Pérez-Sánchez & Vlemmings (2013), T_b then depends on the distance to the source and the observed total flux density. The estimated T_b is of the order of 1-160 10^7 K (see Table 3, with two different values for two possible distances in R Aql and μ Cep), strongly concurring with the maser nature of these emissions. Derived values of R are given in Table 3.

The decay rate from the maser levels may be grossly estimated without describing any pumping scheme, provided we recognize that collisional excitation of vibrational states followed by radiative decay is essential to explain the observed SiO masers in the v=1 state and above (Elitzur 1992). At 86 GHz in the v=1 state, we thus get an approximate value of Γ from the spontaneous emission rate A(v=1→0) = 5 s^{-1} (Hedelund & Lambert 1972) which remains much higher than the collisional de-excitation rate, C(v=1-0) a few times 10^{-3} to 10^{-4} s^{-1} for temperature and density conditions expected in regions where SiO is observed. Of course, the density must remain below very roughly 10^{12} cm^{-3} to avoid collisional quenching of the SiO maser.

Despite the uncertainties on the values of R and Γ, we thus get an estimate of the degree of saturation of the emitting maser for each intensity component and each star (see Table 3). We hence propose which stars are in the unsaturated ($R < \Gamma$) or in

Table 4. Characteristics of Gauss-fitted components to the observed Stokes *V* spectrum for each source

Star	#	v ($km\,s^{-1}$)	Δv ($km\,s^{-1}$)	$\lvert V_{peak}\rvert$ (K)	δV (mK)	S/N
R Aql	1	49.5	2.1	0.03	10	2.5
μ Cep	1	26.9	1.4	0.013	11	0.9
	2	33.5	1.9	0.018		1.2
o Ceti	1	45.3	0.9	0.13	29	13
	2	46.9	0.4	0.22		25
	3	47.3	0.9	0.30		32
	4	48.1	0.8	0.17		18
	5	49.0	0.2	0.10		15
χ Cyg	1	7.3	0.9	0.11	34	10
	2	8.6	0.5	0.31		31
	3	9.6	0.9	0.42		40
	4	10.7	0.9	0.13		13
	5	11.9	0.7	0.29		29
	6	12.8	0.9	0.08		8.0
U Her	1	-18.0	1.3	0.024	11	2.0
(March)	2	-16.1	0.7	0.04		3.5
	3	-14.7	0.7	0.026		2.1
U Her	1	-16.9	1.3	0.11	25	2.5
(May)						
R Leo	1	-3.5	0.9	0.21	29	33
	2	-2.3	0.9	0.19		30
	3	-0.9	0.9	0.33		51
	4	-0.7	0.4	0.24		42
	5	1.5	0.9	0.44		68
	6	2.3	0.6	0.17		26

Notes. # is the number associated to each component. v is the central position of the gaussian function, Δv is the separation between the two peaks of the Zeeman pattern (see Eq. 8) (later called "a" and "b"), $\lvert V_{peak}\rvert$ is the intensity of the peak, δV the noise associated to the component, calculated in Sect. 4.2, and S/N the signal-to-noise ratio (relative to the integrated area).

the saturated cases ($R > \Gamma$). The result is used to prefer either one or other of the theories described in Sect. 4.5 to compute the magnetic field.

Our results show that only χ Cyg, μ Cep (in the case of the larger distance), and U Her are saturated. But considering that we derived lower limits, we deem those objects to be strongly saturated and the others to be just saturated. It is commonly admitted in the literature that circumstellar SiO masers are in the saturated or strongly saturated regime (e.g., Kemball et al. 2009). We will nevertheless consider both cases for each star.

4.5. Magnetic field estimate

The computation of the magnetic field strength via the Zeeman effect differs according to the saturation of the maser emission. The magnetic field is computed from the two peaks found for Stokes *V* with our *rvm* code. With the Gaussian decompositions used in Eq. 5 the intensity extrema are observed at:

$$v_{peak} = v \pm \frac{1}{\sqrt{2}}\Delta v_{\rm D} \tag{8}$$

the two peaks, noted a and b (see Table 5), being separated by $\Delta v = \sqrt{2}\Delta v_{\rm D}$ (see Table 4).

4.5.1. The case of a saturated maser

In a saturated maser, the fractional Stokes vectors propagating through the masing cloud are constant. The radiative transfer equation for the Stokes vectors admits very few situations with a non-zero constant and propagating Stokes vector. These solutions have been thoroughly studied by Elitzur (1996), while other theories have been proposed (see Herpin et al. 2006, for a brief discussion).

Let us write the ratio x_B of the Zeeman shift Δv_B to the Doppler line-width $\Delta v_{\rm D}$ both in $km\,s^{-1}$,

$$x_B = \Delta v_B / \Delta v_{\rm D} \tag{9}$$

for the Zeeman effect by explicitly writing $\Delta v_B = 14 g \lambda_0 B$, where g is the Landé factor in terms of the Bohr's magneton (where g, for the diamagnetic molecule SiO, is $8.44 \cdot 10^{-5}$, see Appendix C), $\lambda_0 = 0.34785$ cm the wavelength of the SiO v=1 J=2-1 maser emission, and B the magnetic field strength in Gauss.

Under the saturation regime and for the ratio $x_B < 1$ (which is appropriate for diamagnetic molecular species), Elitzur (1996) found that x_B is proportional to the fractional circular polarization $p_{\rm C}$ at the peak of the Stokes *V* parameter according to the law:

$$x_B = \frac{3\sqrt{2}}{16} p_{\rm C} \cos\theta_1 \tag{10}$$

where θ_1 is the angle between the magnetic field direction and the incident beam arriving at the SiO molecule.

Herpin et al. (2006) have followed a similar approach to estimate the magnetic field strength from their observed values of $p_{\rm C}$. However, they used $g = 10^{-3}$, so that their field strength estimates must be reevaluated using $g = 8.44 \cdot 10^{-5}$ for comparison with our new study (see Sect. 6). From Δv_B above and Eq. 10 we get at the peak, $v_{\rm peak}$, of the Stokes *V* parameter:

$$\frac{B}{\cos\theta_1} \simeq 645 \Delta v_{\rm D} p_{\rm C}(v_{\rm peak}) \tag{11}$$

Eq. 11 is used to derive the magnetic field strength in Gauss, noted $B_{\rm E}$ in the following, when $p_{\rm C}$ and $\Delta v_{\rm D}$ are known. The remaining uncertainty in the determination of the field intensity comes from θ_1 discussed in Sect. 4.5.3.

4.5.2. The case of an unsaturated maser

Whenever the maser is unsaturated and the fractional Stokes vectors are not constant along the optical path, the typical weak-field approximation applies. The Zeeman frequency shift of a given level is proportional to the Larmor frequency,

$$\nu_L = \frac{\mu}{h} B, \tag{12}$$

where h is the Planck's constant. The magneton μ is often the Bohr's magneton. But for the diamagnetic molecule SiO all electronic angular momenta are zero and the only contribution to the total angular momenta comes from angular momenta associated with the rotation of the total mass of the molecule and those momenta are expressed in units of the nuclear magneton. It is however not uncommon to rewrite formulae in terms of the Bohr magneton and re-define accordingly the Landé factor. Details can be found in the Appendix C. In what follows we adopt such a convention and, as in the case of the saturated maser, we write all formulae in terms of the Bohr magneton.

Table 5. Polarization rates, angles, and magnetic field values for all components and all stars for both saturated and unsaturated cases.

Star	#	p_L (%)	p_C (%)	χ (°)	B_E (Gauss)	B_E (2nd solution) (Gauss)	$B_Z \times \cos(\theta_2)$ (Gauss)	Comment
R Aql	1 - a	7.5	-1.0	179.5	(6.1 ± 2.0)	(3.7 ± 1.3)	(5.3 ± 1.8)	*
	- b	21.4	3.4	95.3	(21.6 ± 7.3)	(9.8 ± 3.3)	(8.2 ± 2.8)	*
μ Cep	1 - a	4.5	-0.9	143.6	(3.7 ± 3.4)	(2.4 ± 2.2)	(12.2 ± 11.1)	*
	- b	5.3	1.0	133.8	(4.3 ± 3.9)	(2.7 ± 2.4)	(28.1 ± 25.6)	*
	2 - a	7.9	14.0	145.4	(76.9 ± 49.4)	(43.3 ± 27.8)	(63.6 ± 40.1)	*
	- b	8.1	-1.8	117.6	(10.4 ± 6.7)	(6.1 ± 3.9)	(9.9 ± 6.4)	*
o Ceti	1 - a	58.9	-2.2	147.5	(8.0 ±2.1)		(40.0 ± 10.8)	*
	- b	9.6	6.2	136.4	(23.4 ± 6.3)	(13.2 ± 3.6)	(182.5 ± 49.5)	*
	2 - a	33.4	3.3	76.1	2.5 ± 0.4		2.7 ± 0.42	
	- b	15.9	0.8	77.1	1.6 ± 0.3	0.8 ± 0.1	5.2 ± 0.8	
	3 - a	23.3	2.1	65.6	4.9 ± 0.5	2.1 ± 0.2	31.0 ± 3.4	
	- b	4.7	-1.6	29.9	8.9 ± 1.0	5.8 ± 0.6	13.2 ± 1.5	
	4 - a	4.7	-1.6	29.9	4.2 ± 0.9	2.7 ± 0.8	7.0 ± 1.5	
	- b	29.6	-2.2	33.9	4.0 ± 0.8	1.5 ± 0.3	5.7 ± 1.2	
	5 - a	47.0	-1.5	35.3	0.4 ± 0.2		1.0 ± 0.4	
	- b	52.6	0.0	36.4	0.3 ± 0.1		0.8 ± 0.3	
χ Cyg	1 - a	26.2	-1.7	38.7	4.3 ± 1.5	1.7 ± 0.6	10.1 ± 3.6	
	- b	16.2	1.1	12.4	3.0 ± 1.1	1.5 ± 0.5	7.5 ± 2.7	
	2 - a	36.4	1.9	26.7	2.6 ± 0.3		2.4 ± 0.3	
	- b	50.2	0.0	33.9	0.9 ± 0.1		1.2 ± 0.1	
	3 - a	51.8	0.2	33.9	1.6 ± 0.2		2.5 ± 0.2	
	- b	39.4	-0.8	34.8	3.3 ± 0.3		2.6 ± 0.2	
	4 - a	32.8	-1.0	32.8	1.4 ± 0.4	1.4 ± 0.4	1.8 ± 0.5	
	- b	26.2	-1.2	25.9	1.8 ± 0.5	0.7 ± 0.2	2.4 ± 0.7	
	5 - a	38.9	-1.2	34.0	2.1 ± 0.3		5.3 ± 0.7	
	- b	30.4	1.7	30.2	4.3 ± 0.6	1.6 ± 0.2	2.6 ± 0.3	
	6 - a	28.5	2.2	28.9	(2.3 ± 1.1)	(0.9 ± 0.4)	(1.0 ± 0.5)	*
	- b	28.6	2.2	22.3	(7.7 ± 3.5)	(3.0 ± 1.4)	(47.8 ± 22.1)	*
U Her	1 - a	18.8	0.9	136.7	3.9 ± 1.8	1.9 ± 0.9	2.2 ± 1.0	
(March)	- b	1.7	-0.4	93.1	1.6 ± 0.7	1.1 ± 0.5	11.8 ± 5.5	
	2 - a	9.4	-0.8	177.9	1.5 ± 0.4	0.9 ± 0.2	10.5 ± 2.8	
	- b	5.0	0.8	170.6	1.5 ± 0.4	1.0 ± 0.3	5.9 ± 1.6	
	3 - a	9.3	1.0	115.8	1.7 ± 0.8	1.0 ± 0.5	2.3 ± 1.1	
	- b	4.2	-1.3	51.0	3.2 ± 1.5	2.0 ± 1.0	9.8 ± 4.5	
U Her	1 - a	13.1	-1.2	162.3	4.4 ± 1.0	2.4 ± 0.6	4.9 ± 1.2	
(May)	- b	12.0	1.3	7.8	5.1 ± 1.2	2.8 ± 0.7	17.1 ± 4.0	
R Leo	1 - a	31.2	2.3	79.2	6.3 ± 1.0	2.4 ± 0.4	6.9 ± 1.1	
	- b	32.2	-1.6	21.1	8.5 ± 1.3	3.2 ± 0.5	32.1 ± 5.0	
	2 - a	10.0	0.7	15.1	5.7 ± 1.0	3.3 ± 0.6	8.8 ± 1.5	
	- b	8.3	-1.2	152.7	2.1 ± 0.4	1.2 ± 0.2	2.0 ± 0.4	
	3 - a	7.2	-0.9	164.7	1.8 ± 0.2	1.1 ± 0.1	3.9 ± 0.4	
	- b	13.4	1.2	72.2	2.0 ± 0.2	1.1 ± 0.1	8.1 ± 0.8	
	4 - a	5.5	-0.7	179.7	0.4 ± 0.1	0.3 ± 0.1	7.6 ± 1.2	
	- b	13.4	1.2	72.2	0.6 ± 0.1	0.3 ± 0.1	5.2 ± 0.8	
	5 - a	19.1	1.1	164.1	2.9 ± 0.2	1.4 ± 0.1	5.1 ± 0.4	
	- b	21.2	-1.6	166.2	6.3 ± 0.5	2.8 ± 0.2	11.2 ± 0.9	
	6 - a	16.9	-1.8	171.0	1.7 ± 0.4	0.9 ± 0.2	6.2 ± 1.3	
	- b	16.5	-1.6	173.9	1.8 ± 0.4	0.9 ± 0.2	13.6 ± 2.8	

Notes. # is the number of the components described in Table 4, the two peaks for each component are represented by "a" and "b", separated by Δv. p_L, p_C, and χ are respectively the linear polarization, the circular polarization and the angle of polarization. B_E is the magnetic field value computed with Eq. 11, the second solution for $p_L < 33\%$ (see Sect. 4.5.3). B_Z in column 8 is resulting from Eq. 15 and is still depending on the angle. The $*$ in the last column indicates unreliable results.

Under the weak field approximation, it can be demonstrated that the expected Stokes V line profile is proportional to the derivative of the intensity profile (see also Eq. 6):

$$V(v) = \Delta v_B \cos\theta_2 \frac{dI}{dv}(v) \quad (13)$$

where θ_2 is the angle between the magnetic field direction and the emitted beam (towards the observer). We can express V as a function of B with the velocity axis sampled with 0.139 km/s channel separation.

$$V(v) \simeq 14 g \lambda_0 B \cos\theta_2 \frac{dI}{dv}(v) \frac{1}{0.139} \quad (14)$$

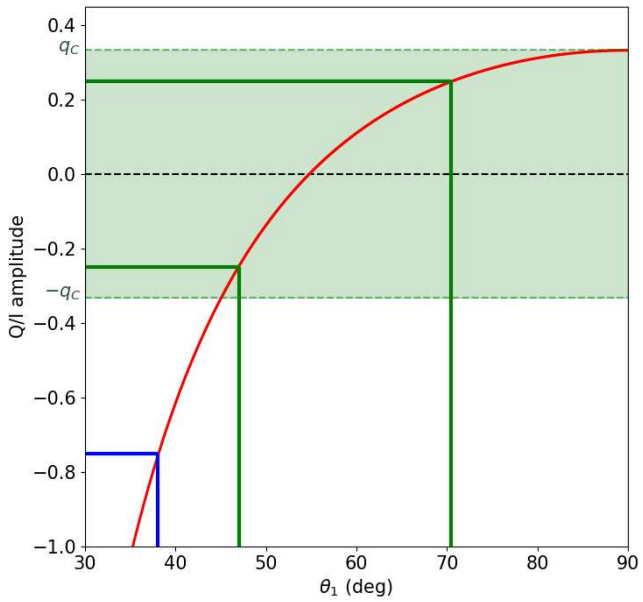


Fig. 4. Ratio $q = Q/I$ vs the angle θ_1 (Eq. 16). In the green zone ($|q| < q_c$), there are two solutions for the angle, as we can see with the example with $|q| = 0.25$, the two green lines. Out of this zone (example in blue) there is one solution only.

Once again, we assume that the line profile of each maser component is Gaussian, allowing us to retrieve the magnetic field strength from the peak amplitudes of Stokes V and I:

$$B\cos\theta_2 \simeq 338\frac{V(v_{\rm peak})}{d_v I(v_{\rm peak})} \quad (15)$$

d_v being the derivative with respect to the velocity $= \frac{\delta}{\delta_v}$.

In the unsaturated case, the magnetic field strength will be noted B_Z in the following.

4.5.3. Determination of the angle of incidence of the maser beam

The two different angles, θ_1 and θ_2, defined earlier for the saturated and unsaturated cases respectively are not easily determined unless we have access to independent information on the field direction. As x_B is less than one, all Zeeman components overlap and only the 'Type 0' polarization case described in Elitzur (1996) applies. Following Elitzur's reasoning, in the saturated case, we can compute angle θ_1 using our linear polarization results.

Under the weak field approximation, there is no linear polarization in the maser line (see review by Watson 2009). A second order approximation can be proposed for linear polarization, but it does not describe correctly the linear polarization profiles. Linear polarization due to the Zeeman effect is in general one order of magnitude smaller than circular polarization (Pérez-Sánchez & Vlemmings 2013) and has zero net polarization over wavelength (see Landi Degl'Innocenti & Landolfi 2004). One could claim that we observe the very specific geometries that afford large amplitudes to linear polarization under the Zeeman effect: fields transverse to the line of sight. But accepting that we systematically observed transverse fields appears as incongruous. And in no case the Zeeman effect under the weak field approximation can produce Gaussian-like profiles for linear polarization as those observed here (e.g. Wiebe & Watson 1998; Watson 2009). Faraday rotation [5] can produce net linear polarization, but in order to do so the magnetic fields involved would be too large to be described under the weak field approximation, and then it is circular polarization that could not be explained neither in its amplitude nor in its shape. We can safely conclude that, under the hypothesis of the weak field approximation, the observed linear polarization must be due to another physical mechanism than the Zeeman effect, as we further discuss in section 5.1. On the other hand, Elitzur's theory shows that a linear polarization signal is to be expected together with the circular polarization one. Once more assuming a Gaussian line profile, and following (Elitzur 1996), in a coordinate system that is aligned with the sky-plane projected magnetic field, $q = Q/I$ is given by:

$$q = 1 - 2\frac{3 - 2R_1}{(2R_1 + 1)\sin^2\theta_1} \quad (16)$$

with R_1 a function of x_B (defined in Eq. 9) and of the dimensionless frequency argument x defined in Elitzur (1996). The numerical values of x_b being small, R_1 is not sensitive to the exact values of Δv_B and Δv_D and this is used below to derive the critical value of q when θ_1 approaches 90° near the SiO line center where $x = 0$.

$$R_1 = 1 - x_B^2(1 - 2x^2) \quad (17)$$

The dependence of q with θ_1 is shown in Fig 4. Given our typical S/N ratios, and due to the quadratic dependence of B and the weak values of the field strength expected, the relationship shown on this figure is independent of field strength. A value of q provides us with an independent estimate of θ_1.

This linear polarization q is perpendicular to the plane formed by the incident beam direction and the magnetic field vector, and no other linear polarization signal is expected. We ignore what this direction is in any maser component, and we therefore ignore how this linear polarization is projected into our instruments directions for Stokes Q and Stokes U. But the total polarization $p_{\rm L}$ measured must be the total amplitude of the emitted linear polarization q in Elitzur's theory, except for its sign. Since we only have access to the absolute value of $p_{\rm L}$ from our observations, two different situations may occur depending on the measured value of $p_{\rm L}$ with respect to a critical value q_C defined by $\lim_{\theta_1 \to +90^\circ} q = 0.33$:

- $|q| > q_c$: the solution for the angle θ_1 is unique (see example in blue in Fig. 4).
- $|q| < q_c$, there are two solutions for θ_1 (see example in green), and hence two solutions for the magnetic field strength.

5. Results

5.1. Observed polarization and maser excitation

The circular and linear polarization fractions derived for each identified V component in each star are given in columns 6 and 7 of Table 5 for each detected component. The other columns present the magnetic field estimates that will be discussed in the next section.

[5] We mean in-source Faraday rotation resulting in a modification of the radio polarization properties in the presence of a magnetic field. Electrons mixed up with the SiO cloud and in the circumstellar envelope could rotate the SiO linearly polarized wave; the latter effect is hopefully small given the short distances involved, unless the field intensity is large.

Two regimes for the linear polarization are observed in our sample. μ Cep, R Aql, and U Her mostly exhibit low levels of the p_L parameter (< 25%) while other stars show high p_L values, up to 60%. Our polarization levels can be compared with those of Herpin et al. (2006). The linear polarization fractions are similar in these two works. However, while they measured an average absolute value of circular polarization of 9% and 5% in Miras and semi-regular variables, respectively, we have only 1.9% in our sample (composed of 5 Miras and the RSG μ Cep). We also note that several components in Herpin et al. have p_C-values around or below 2%. The lower level of polarization observed in supergiants (Herpin et al. 2006) is also confirmed in p_L for μ Cep but not in circular polarization as this star exhibits the highest p_C fraction in our sample. A specific comparison can be done for R Leo and χ Cyg observed in both studies, even if the Stokes I maser line profile has deeply changed between the two observation epochs. The linear polarization fraction reaches the same 30% and 40% level for R Leo and χ Cyg (with some higher values for some components). The circular polarization is definitely lower in our case (2.3% maximum, compared to 10-20%).

These values might shed light on the origin of the observed polarization in relation with the Zeeman or other effects. We can investigate which mechanisms could produce the observed linear polarization fractions. In the case of isotropic pumping of the energy levels giving rise to maser emission (e.g. Nedoluha & Watson 1990) and for a moderately saturated maser, p_L greater than 15%, up to 25%, can be generated only with peculiar angle configurations (angle θ_2 larger than 45°). Under anisotropic pumping conditions, much higher p_L values can be achieved, but no high p_C values can be generated (see Lankhaar & Vlemmings 2019). Actually, non-Zeeman mechanisms may also lead to circular polarization. Asensio Ramos et al. (2005), considering the Hanle effect, showed that changes in the radiation anisotropy conditions can result in the rotation of the electric vector position angle (EVPA) and in the anisotropic pumping of a 'dichroic' maser. Several variations of anisotropic pumping mechanisms (e.g. Western & Watson 1983; Wiebe & Watson 1998; Watson 2009) or anisotropic resonant scattering of a magnetized foreground SiO gas (Houde 2014), have been proposed for the non-Zeeman case too. Such non-Zeeman mechanisms have been ruled out in some specific environments, and on the basis of very high spatial resolution observations (VLBI) of the EVPA (see e.g. Kemball et al. 2009; Richter et al. 2016; Tobin et al. 2019). Several polarized maser theories have successfully been developed but, obviously, none can fully explain all the cases observed.

As indicated by Wiebe & Watson (1998), non-Zeeman mechanisms in unsaturated masers should lead to a proportional relation between p_C and p_L (as p_C would be created from p_L) with $\overline{p_C} \leq \overline{p_L}^2/4$. Herpin et al. (2006) found a linear function between the two polarizations, but with a large spread. Actually, our sample does not reveal any correlation (see Fig. 5, except maybe for R Leo). The second condition ($\overline{p_C} \leq \overline{p_L}^2/4$) is not fulfilled either (see Table D.1), as also observed by Richter et al. (2016) and Tobin et al. (2019), except for χ Cyg. Considering that the maser emission in this star is definitely saturated (see Table 3), we adopt the Zeeman scenario for the whole sample. Nevertheless, we note that the presence of a velocity gradient along the propagation path, but still consistent with coherent SiO maser amplification in some sources, could enhance p_C and might even produce non anti-symmetric Stokes V spectra (Nedoluha & Watson 1994).

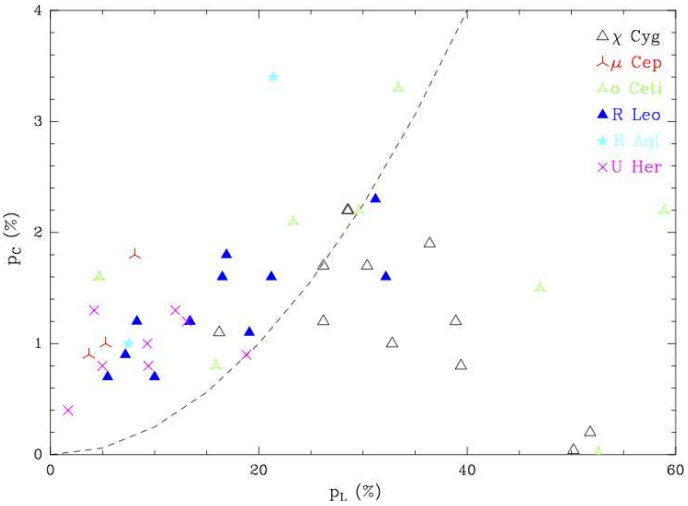


Fig. 5. Absolute fractional polarization p_C versus p_L for the whole sample and all maser components. The dashed line corresponds to $p_C = {p_L}^2/4$.

Now we consider the polarization angle χ as defined by Eq. 2. First, we underline that owing to our limited spatial resolution, the underlying Stokes Q and U parameters are beam-averaged quantities. Hence, if there were two spatially separated maser spots within our main beam, each one with a different EVPA but emitting at the same velocity, we would not be able to make any rigorous interpretation of the measured χ angle. Only VLBI observations could separate two such maser spots and accurately trace the EVPA throughout the photosphere. As explained by Tobin et al. (2019), an angle between the maser propagation and the line of sight smaller or larger than the van Vleck angle (55°) will determine if the magnetic field is, respectively, parallel or perpendicular to the EVPA. As in past studies (e.g. Herpin et al. 2006; Kemball et al. 2011; Tobin et al. 2019), some χ jumps are observed for some sources across the SiO profile: R Leo (~ 70° − 160°), o Ceti (~ 35° − 70° − 140°), and R Aql (~ 95° − 180°). The behavior in U Her is more erratic, i.e., we do not observe beam-averaged $\pi/2$ jumps while clear $\pi/2$ rotations are reported in VLBI publications; again, this can be explained by beam-smearing effects in our data. Such a rotation together with the dependence of the fractional linear polarization with the angle between the magnetic field and the line of sight is predicted in 'linear' and saturated masers that are isotropically pumped (Goldreich et al. 1973; Elitzur 2002). These models and the VLBI polarimetric observations of TX Cam (Kemball et al. 2011) tend to rule out, at least in this object, the model proposed by Asensio Ramos et al. (2005). However, we also point out that although the Goldreich et al. (1973) maser model seems adequate, some Faraday rotation must be invoked to explain the smooth rotation of the EVPA (see Kemball et al. 2011; Tobin et al. 2019). Finally, we mention that changes in the EVPA could also result from rapidly changing magnetic field orientations above cool magnetic spots on the stellar photosphere (Soker 2002) (assuming that there are physical connections between photospheric spots and the upper atmospheric layers where SiO is observed).

5.2. Magnetic field strength

Applying the method described in Sect. 4.5 we derive for each star estimates of the line-of-sight magnetic field strength B_E and $B_Z \times \cos(\theta_2)$ for both the saturated and unsaturated cases (see

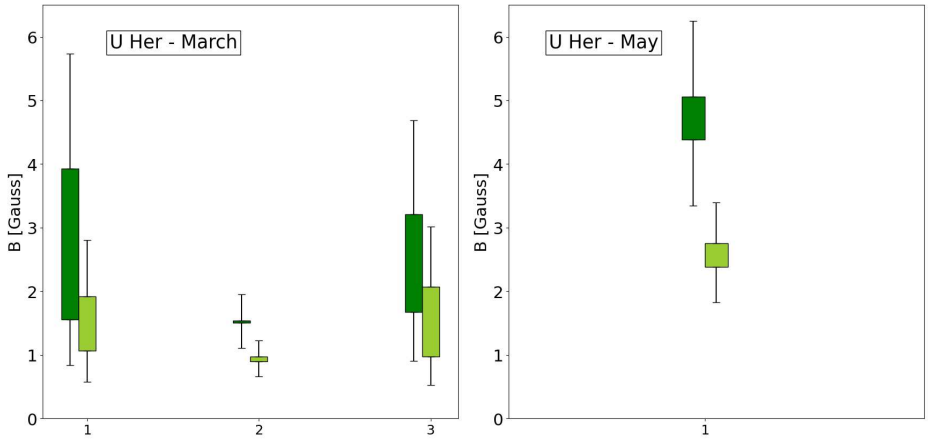


Fig. 6. Magnetic field values for U Her for the two observation periods, computed from Eq. 11 with two θ_1 angle solutions, (dark and light green), when the linear polarization is below 33% (see Sect. 4.5.3 and Fig. 4). On the x-axis, the numbers correspond to the Gaussian components, as described in the second column of the Table 5. The bar length corresponds to the difference between the magnetic field computed at the first peak of the derivative of the Gaussian component and the second one.

Table 5, Fig. 6, and Appendix D). As explained in Sect. 4.1, we compute the magnetic field strength at the two peaks of each detected anti-symmetric V profile, which results in two extreme values of B for each Zeeman component ("a" and "b" in the Table 5). Values in the unsaturated case are generally larger.

While the angle θ_2 in the unsaturated case remains unknown, in the saturated case the angle θ_1 has been estimated, with sometimes two solutions when the linear polarization is lower than the critical value (see Sect. 4.5.3), hence leading to two possibilities for $B_{\rm E}$. These two solutions for the same angle θ_1 have been used to derive $B_{\rm E}$ in Table 5. We cannot exclude that the observed linear polarization might include a contribution from non-Zeeman mechanisms, hence leading to some overestimation of $p_{\rm L}$, generated under the action of the Zeeman effect and hence of θ_1; in that case $B_{\rm E}$ values in Table 5 should be considered as lower limits.

At least two objects, χ Cyg and U Her can be considered as giving rise to saturated masers (see columns 6 and 7 in Table 5). For χ Cyg, $B_{\rm E}$ varies between 0.7 and 4.3 Gauss for components 1-5. We note that the results $B_{\rm Z} \times \cos(\theta_2)$ for the unsaturated case are of the same order of magnitude (a bit higher for component # 1). Results for component #6 are less reliable, considering the large uncertainty and difference in the estimate between the two peaks a and b (see Figure D.1). We then exclude this component in the further discussion. For U Her, the magnetic field ($B_{\rm E}$) is around 0.9-1.5 Gauss in March and between 2.4-5.1 Gauss in May considering the central component #2, at a similar velocity for both periods. The two other side components (#1 and #3) observed in March have large uncertainties and are not detected in May (see Fig. 6).

Considering that all other objects exhibit unsaturated maser emission (see Sect. 4.4), we assume that $B_{\rm Z} \times \cos(\theta_2)$ provides a reliable estimate of the field although θ_2 remains unknown; indicative ad-hoc values of θ_2, for instance 45°, can be considered. Estimates of the magnetic field (assuming $\theta_2 = 45°$) differ from star to star and component to component. In the case of R Aql, the Stokes V spectrum is largely dominated by the instrumental leakage of Stokes I into Stokes V (see Sect. 3.2.1). We therefore consider that $B_{\rm Z} \times \cos(\theta_2) = 8.2$ Gauss as given in Table 5 is an upper limit of the field intensity in the unsaturated case. For the two objects R Leo and o Ceti, the magnetic field in terms of the quantity $B_{\rm Z} \times \cos(\theta_2)$ is 2.0-32.1 and 0.8-31.0 Gauss, respectively. The component #1 of o Ceti has been discarded because we did not succeed in fitting this component with the derivative of a Gaussian function (see Sect. 4.3 and Fig. 3).Therefore, it may not be shaped by any Zeeman effect, in which case the estimated magnetic field would not be relevant.

Because of the very low S/N for the V components in μ Cep (see Table 4), the field uncertainties are too large and not taken into account in our discussion.

6. Discussion

Since the 1990s, various scenarios implying slow stellar rotation, the presence of a companion, and a weak magnetic field have been proposed to tentatively explain how the geometry of the CSE can be shaped in evolved stars (see for instance Soker & Harpaz 1992). All studies report a too weak magnetic field strength to dominate the dynamics of the gas (Balick & Frank 2002; Herpin et al. 2006; Vlemmings et al. 2017). Nevertheless, a moderate field of the order of 1 Gauss at the stellar surface can play the role of a catalyst or a collimating agent (Soker 1998; Blackman et al. 2001; Greaves 2002). Actually the role of a companion in shaping the envelope, without the need to invoke a magnetic field, has been recently demonstrated by Decin et al. (2020).

The strength of the magnetic field decreases with increasing distance r from the photosphere and can be expressed as a power law that depends on its geometry (Parker 1958; Matt et al. 2000; Meyer et al. 2021), in r^{-1}, r^{-2}, and r^{-3} for a toroidal, poloidal, and dipole field respectively. When comparing their results to field estimates derived from the OH and H_2O masers farther away in the CSE, Herpin et al. (2006), Duthu et al. (2017), and Vlemmings et al. (2017) concluded that a toroidal magnetic field was dominant (see also later in this section). A combination of a toroidal and a poloidal field is nevertheless not excluded (see Meyer et al. 2021, for instance for RSGs).

In the following, we compare our newer observations and calculations to those in Herpin et al. (2006), who had considered saturated maser emission only. First of all, we point out that the field intensities derived in Herpin et al. must be increased because an erroneous Landé factor ($g = 10^{-3}$ instead of 8.44×10^{-5}) and an erroneous wavelength were used; the corrective factor is 9.924. The magnetic field strengths derived here are thus lower than in Herpin et al. (2006) for the same circumstellar region where the SiO radio emission is observed (2-5 $R_\star$

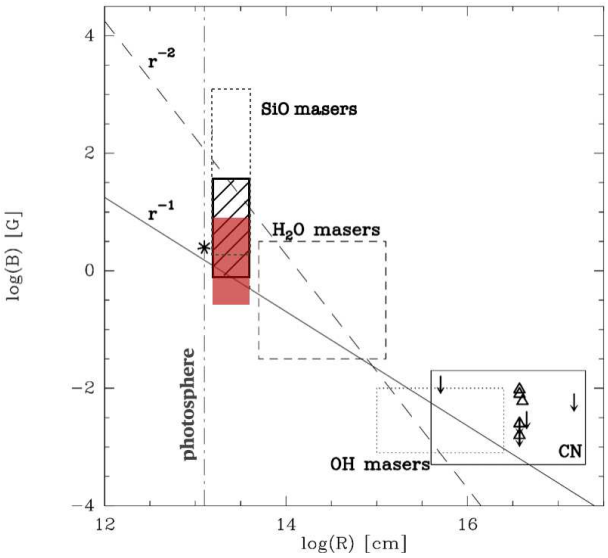


Fig. 7. Evolution of the field strength with the distance (adapted from Vlemmings 2012; Duthu et al. 2017). The four boxes show the SiO masers (the red box represents the results of this work for saturated maser, the hatched box for unsaturated maser using $\theta_2 = 45°$, the dotted box the results from Herpin et al. (2006)), the H_2O and OH masers, and CN. The r^{-2} solar-type and r^{-1} toroidal magnetic fields are discussed in Sect. 6. The star close to the SiO maser box is for the magnetic field measured by Lèbre et al. (2014) in χ Cyg. The vertical dashed line indicates the stellar surface for the Miras.

from the photosphere according to SiO VLBI map). Herpin et al. (2006) found a mean value of ∼34 Gauss (which includes the corrective factor above), while our current estimates are below 32 Gauss (excluding the unreliable results in Table 5), and show a mean value of 2.5 Gauss for the saturated case, and 12.4 Gauss for the unsaturated one, assuming $\theta_2 = 45°$. If we consider, as in Herpin et al. (2006) the saturated case only, our magnetic field estimates range from 0.3 to 8.9 Gauss. We now focus the comparison on χ Cyg and R Leo, observed in both studies. While for R Leo (adopting $\theta_1 = 45°$) B was estimated by Herpin et al. (2006) to be, after re-evaluation, 41-45 Gauss in the saturated case, we find somewhat lower values here: $B_E \sim 0.3 - 8.5$ G and $B_Z \sim 2.8 - 4$ G (at $\theta_2 = 45°$ for the 2.0-32.1 G interval in Table 5) for the saturated and unsaturated cases, respectively. Of course, and this argument stands for all objects, both observations are separated by more than twenty years and not only the stellar activity but also the magnetic field may have changed during this period. We nevertheless stress that, despite uncertainties in the degree of maser saturation (resulting in an uncertainty to use on the B-formula), our careful calibration method and Zeeman component fitting procedure lead to reasonable magnetic field estimates. The case of χ Cyg is also illustrative, the field (B_E) being 0.7-4.3 Gauss, to be compared with the former estimate from Herpin et al. (2006) of 48.6 Gauss (0-85.4 Gauss, after re-evaluation of the field intensity). Considering the 2-3 Gauss measurement by Lèbre et al. (2014) at the surface of χ Cyg, we could expect in the SiO layer a field strength of 0.5-1.5 or 0.1-0.8 Gauss if the field would vary as $1/r$ or $1/r^2$, respectively. Our results hence agree with a poloidal field, but do not rule out a toroidal component either, at least locally. This comparison has to be taken with caution, considering again that both measurements are well separated in time. The field strength variation observed in U Her over a 2-month period emphasizes this point. In addition, for the RSG μ Cep we derive upper magnetic field values larger that what Tessore et al. (2017) estimated at the stellar surface (1 Gauss). The fact that these two values are not compatible with a field strength decreasing with increasing distance may underline again the time variability of the magnetic field.

More generally, in Fig. 7 we revisit all magnetic-field measurements gathered from the literature. Our new measurements provide new constraints for the SiO shell region at a few stellar radii and seem to exclude a global poloidal field, specially if we assume all maser emissions are saturated. Nevertheless, based on our χ Cyg observations, we cannot exclude a poloidal field close to the surface of this star evolving into a dominant toroidal field in the SiO maser region, as proposed by Meyer et al. (2021) in supergiant stars.

The origin of this magnetic field is still debated, but mechanisms involving an $\alpha^2 - \omega$ turbulent dynamo in AGB stars, and amplification by convection, stellar pulsation and cool spots can be invoked (Lèbre et al. 2014). As already proposed by Schwarzschild (1975) for giant stars, the radial component of the field can then be strongly enhanced at a specific location near the surface above cool magnetic spots (Priest 1987). The tangential B field component can be amplified by shock compression due to the stellar pulsation (Hartquist & Dyson 1997). Hence, a magnetic field of 1-10 Gauss can be reached in the vicinity of cool magnetic spots, then decreasing in intensity to the $1/r^2$ law (Soker 2002). The same scenario applies in RSG stars with a stronger influence of their larger convective elements. Actually, as explained in Sect. 5.1, even the EVPA rotation seen in SiO features could be explained by a magnetic field orientation rapidly changing above cool spots.

The magnetic field variations observed in the AGB U Her over a two-months scale (stellar phases 0.25 and 0.45) suggest a possible link with the stellar phase, i.e. with pulsation/photospheric activity. It is interesting to note that for U Her, using ALMA, Baudry et al. (2023) have also identified and mapped strong time variations of the 268 GHz v2=2 line of water at phases 0.13, 0.80 and 0.92; this line is excited in regions of the inner CSE where the SiO masers are observed. We also mention that (Rosales-Guzmán et al. 2023) have seen with GRAVITY/VLTI structural changes at 3 $R_\star$ in the CSE of the Mira R Car (period= 310 days) on a one-month interval, probably linked to the photospheric activity. Quasi-simultaneous observations of the stellar photosphere (to detect cool spots) and polarimetry (to measure the field strength) are needed to prove any potential link. Actually, polarimetric interferometric observations with ALMA or the next-generation VLA would ideally allow us to spatially associate stellar spots with B-field enhanced regions. The role of pulsation could also be studied with a monitoring of the magnetic field with the stellar phase.

7. Conclusions

We have performed new polarimetric SiO maser observations with the XPOL instrument at the IRAM-30m in a new sample of cool evolved stars. Applying a new data reduction methodology, we have removed most of the instrumental polarization to derive circular and linear polarization fractions with a high accuracy. From those and maser theory results, we obtain magnetic field strengths (ranging from a few Gauss up to several tens of Gauss) that better constrain the SiO shell region above the stellar photosphere. A global poloidal field can be excluded.

Moreover, our observations of the magnetic field strength in U Her over a 2-month period suggest a possible link with the stellar phase, i.e. with pulsation/photospheric activity.

Despite the advances accomplished here, the precise origin of the observed magnetic field at the surface and in the inner circumstellar layers of AGB stars and Red Supergiants still remains to be fully characterized. In particular, a monitoring of the magnetic field to check the stellar-phase dependence of the polarization and quasi-simultaneous observations with VLTI and/or CHARA to detect cool spots and to follow the photospheric activity is under consideration. In addition, since the present results still suffer from moderate spatial resolution, ALMA polarimetric observations above the photosphere would also be most desirable.

Acknowledgements. This work is funded by the French National Research Agency (ANR) project PEPPER (ANR-20-CE31- 0002). MM acknowledges funding from the Programme Paris Région fellowship supported by the Région Ile-de-France. This project has received funding from the European Union's Horizon 2020 research and innovation program under the Marie Skłodowska-Curie Grant agreement No. 945298. We would like to thank IRAM staff at Granada (Spain) for their support. We also thank the referee for his careful reading and his useful comments and suggestions.

References

Andriantsaralaza, M., Ramstedt, S., Vlemmings, W. H. T., & De Beck, E. 2022, A&A, 667, A74
Asensio Ramos, A., Landi Degl'Innocenti, E., & Trujillo Bueno, J. 2005, ApJ, 625, 985
Assaf, K. A., Diamond, P. J., Richards, A. M. S., & Gray, M. D. 2013, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 431, 1077
Aumont, J., Conversi, L., Thum, C., et al. 2010, A&A, 514, A70
Aurière, M., Donati, J. F., Konstantinova-Antova, R., et al. 2010, A&A, 516, L2
Balick, B. & Frank, A. 2002, ARA&A, 40, 439
Baudry, A., Wong, K. T., Etoka, S., et al. 2023, A&A, 674, A125
Blackman, E. G., Frank, A., & Welch, C. 2001, ApJ, 546, 288
Bladh, S. & Höfner, S. 2012, A&A, 546, A76
Bouvier, J. 2009, in EAS Publications Series, Vol. 39, EAS Publications Series, ed. C. Neiner & J. P. Zahn, 199–209
Charbonnel, C., Decressin, T., Lagarde, N., et al. 2017, A&A, 605, A102
Cotton, W. D., Ragland, S., & Danchi, W. C. 2011, ApJ, 736, 96
Cotton, W. D., Vlemmings, W., Mennesson, B., et al. 2006, A&A, 456, 339
Cranmer, S. R. & Saar, S. H. 2011, ApJ, 741, 54
Davis, R. E. & Muenter, J. S. 1974, J. Chem. Phys., 61, 2940
De Beck, E., Decin, L., de Koter, A., et al. 2010, A&A, 523, A18
Decin, L., Montargès, M., Richards, A. M. S., et al. 2020, Science, 369, 1497
Decin, L., Richards, A. M. S., Danilovich, T., Homan, W., & Nuth, J. A. 2018, A&A, 615, A28
Dorch, S. B. F. 2004, A&A, 423, 1101
Duthu, A., Herpin, F., Wiesemeyer, H., et al. 2017, A&A, 604, A12
Ekström, S., Georgy, C., Eggenberger, P., et al. 2012, A&A, 537, A146
Elitzur, M. 1992, ARA&A, 30, 75
Elitzur, M. 1996, The Astrophysical Journal, 457, 415
Elitzur, M. 2002, in Astrophysical Spectropolarimetry, ed. J. Trujillo-Bueno, F. Moreno-Insertis, & F. Sánchez, 225–264
Freytag, B., Steffen, M., & Dorch, B. 2002, Astronomische Nachrichten, 323, 213
Georgiev, S., Lèbre, A., Josselin, E., et al. 2023, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 522, 3861
Goldreich, P., Keeley, D. A., & Kwan, J. Y. 1973, ApJ, 179, 111
Goldreich, P. & Kwan, J. 1974, ApJ, 190, 27
Gottlieb, C. A., Decin, L., Richards, A. M. S., et al. 2022, A&A, 660, A94
Greaves, J. S. 2002, A&A, 392, L1
Greve, A., Panis, J. F., & Thum, C. 1996, A&AS, 115, 379
Hartquist, T. W. & Dyson, J. E. 1997, A&A, 319, 589
Hedelund, J. & Lambert, D. L. 1972, Astrophys. Lett., 11, 71
Herpin, F., Baudry, A., Thum, C., Morris, D., & Wiesemeyer, H. 2006, A&A, 450, 667
Herwig, F. 2005, ARA&A, 43, 435
Höfner, S. & Olofsson, H. 2018, A&A Rev., 26, 1
Honerjäger, R. & Tischer, R. 1974, Zeitschrift Naturforschung Teil A, 29, 1695
Houde, M. 2014, ApJ, 795, 27
IAU. 1973, Transactions of the International Astronomical Union, 15, 165–167
Josselin, E., Lambert, J., Aurière, M., Petit, P., & Ryde, N. 2015, in Polarimetry, ed. K. N. Nagendra, S. Bagnulo, R. Centeno, & M. Jesús Martínez González, Vol. 305, 299–300
Kemball, A. J. & Diamond, P. J. 1997, The Astrophysical Journal, 481, L111
Kemball, A. J., Diamond, P. J., Gonidakis, I., et al. 2009, ApJ, 698, 1721
Kemball, A. J., Diamond, P. J., Richter, L., Gonidakis, I., & Xue, R. 2011, ApJ, 743, 69
Konstantinova-Antova, R., Aurière, M., Charbonnel, C., et al. 2014, in Magnetic Fields throughout Stellar Evolution, ed. P. Petit, M. Jardine, & H. C. Spruit, Vol. 302, 373–376
Landi Degl'Innocenti, E. & Landolfi, M. 2004, Astrophysics and Space Science Library, Vol. 307, Polarization in Spectral Lines (Springer)
Langer, N. 2012, ARA&A, 50, 107
Lankhaar, B. & Vlemmings, W. 2019, A&A, 628, A14
Lèbre, A., Aurière, M., Fabas, N., et al. 2014, A&A, 561, A85
Lèbre, A., Aurière, M., Fabas, N., et al. 2015, in Polarimetry, ed. K. N. Nagendra, S. Bagnulo, R. Centeno, & M. Jesús Martínez González, Vol. 305, 47–52
López Ariste, A., Tessore, B., Carlín, E. S., et al. 2019, A&A, 632, A30
Lucas, R., Bujarrabal, V., Guilloteau, S., et al. 1992, A&A, 262, 491
Maercker, M., Khouri, T., Mecina, M., & De Beck, E. 2022, A&A, 663, A64
Mathias, P., Aurière, M., López Ariste, A., et al. 2018, A&A, 615, A116
Matt, S., Balick, B., Winglee, R., & Goodson, A. 2000, ApJ, 545, 965
Meyer, D. M. A., Mignone, A., Petrov, M., et al. 2021, MNRAS, 506, 5170
Montargès, M., Cannon, E., Lagadec, E., et al. 2021, Nature, 594, 365
Montargès, M., Homan, W., Keller, D., et al. 2019, MNRAS, 485, 2417
Nedoluha, G. E. & Watson, W. D. 1990, ApJ, 354, 660
Nedoluha, G. E. & Watson, W. D. 1994, ApJ, 423, 394
Parker, E. N. 1958, ApJ, 128, 664
Pascoli, G. & Lahoche, L. 2008, PASP, 120, 1267
Pérez-Sánchez, A. F. & Vlemmings, W. H. T. 2013, A&A, 551, A15
Priest, E. R. 1987, Solar magneto-hydrodynamics.
Richards, A. M. S., Sobolev, A., Baudry, A., et al. 2020, Advances in Space Research, 65, 780
Richter, L., Kemball, A., & Jonas, J. 2016, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 461, 2309
Ritacco, A., Macías-Pérez, J. F., Ponthieu, N., et al. 2018, A&A, 616, A35
Rosales-Guzmán, A., Sanchez-Bermudez, J., Paladini, C., et al. 2023, A&A, 674, A62
Rudnitski, G. M., Pashchenko, M. I., & Colom, P. 2010, Astronomy Reports, 54, 400
Sabin, L., Wade, G. A., & Lèbre, A. 2014, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 446, 1988
Sahai, R. & Bieging, J. H. 1993, AJ, 105, 595
Schwarzschild, M. 1975, ApJ, 195, 137
Soker, N. 1998, MNRAS, 299, 1242
Soker, N. 2002, MNRAS, 336, 826
Soker, N. & Harpaz, A. 1992, PASP, 104, 923
Tessore, B., Lèbre, A., Morin, J., et al. 2017, A&A, 603, A129
Thum, C., Wiesemeyer, H., Paubert, G., Navarro, S., & Morris, D. 2008, PASP, 120, 777
Tipping, M. E. & Faul, A. C. 2003, in Proceedings of Machine Learning Research, Vol. R4, Proceedings of the Ninth International Workshop on Artificial Intelligence and Statistics, ed. C. M. Bishop & B. J. Frey (PMLR), 276–283, reissued by PMLR on 01 April 2021.
Tobin, T. L., Kemball, A. J., & Gray, M. D. 2019, ApJ, 871, 189
Vlemmings, W. H. T. 2011, in Asymmetric Planetary Nebulae 5 Conference, ed. A. A. Zijlstra, F. Lykou, I. McDonald, & E. Lagadec, 89
Vlemmings, W. H. T. 2012, in Cosmic Masers - from OH to H0, ed. R. S. Booth, W. H. T. Vlemmings, & E. M. L. Humphreys, Vol. 287, 31–40
Vlemmings, W. H. T., Khouri, T., Martí-Vidal, I., et al. 2017, A&A, 603, A92
Watson, W. D. 2009, in Revista Mexicana de Astronomia y Astrofisica Conference Series, Vol. 36, Revista Mexicana de Astronomia y Astrofisica Conference Series, 113–120
Western, L. R. & Watson, W. D. 1983, ApJ, 275, 195
Wiebe, D. S. & Watson, W. D. 1998, ApJ, 503, L71
Wiesemeyer, H., Hezareh, T., Kreysa, E., et al. 2014, PASP, 126, 1027
Wittkowski, M., Boboltz, D. A., Ohnaka, K., Driebe, T., & Scholz, M. 2007, A&A, 470, 191

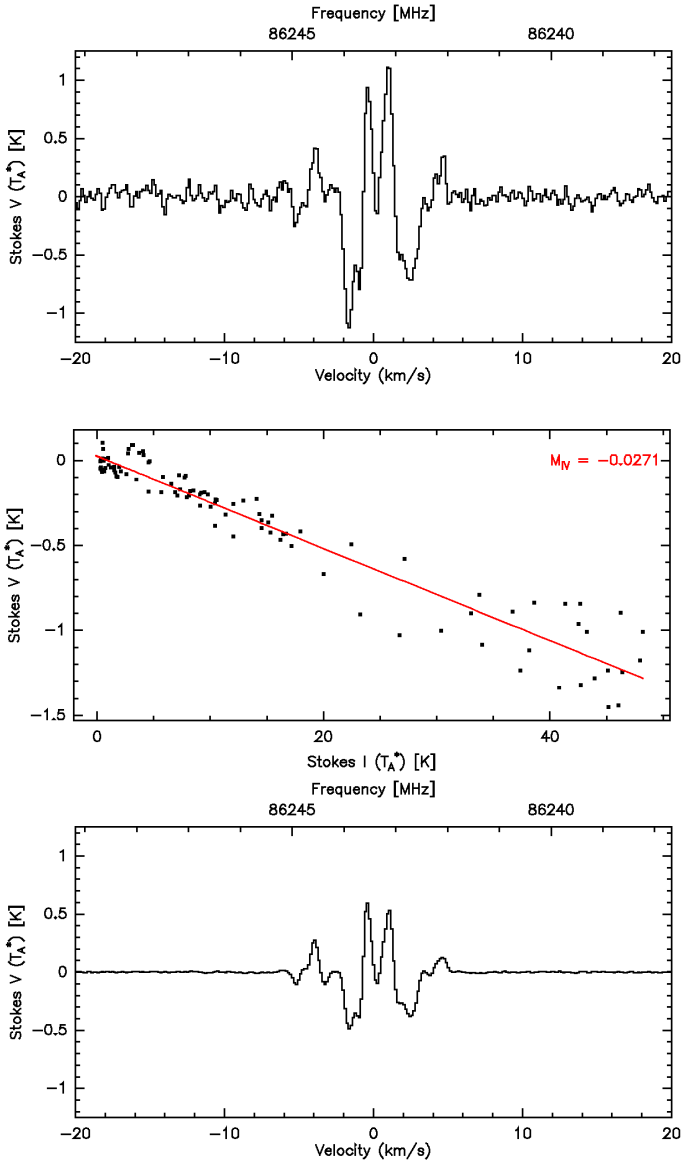


Fig. A.1. Top: Average of Stokes V spectra with low leakage ($|M_{\rm IV}| < 0.01$). **Center:** Example of the correlation between $V_{\rm instr} = M_{\rm IV} \cdot I$ and Stokes I. The regression slope is $M_{\rm IV} = -0.0271$. **Bottom:** Final cleaned and averaged Stokes V spectrum. The vertical plot scale is the same as for the spectrum shown above.

Appendix A: Removal of instrumental polarization

Removal of the instrumental leakage from Stokes I to Stokes V, as described in Sect. 3.2.1, is demonstrated for R Leo in the three panels of Fig. A.1. The final cleaned V spectrum (bottom panel) can be compared to the same V spectrum before cleaning (see Fig. 1). In Fig. A.2, we demonstrate, again for the example of R Leo, the separation of the astronomical linear polarization from instrumental contributions, by fitting sine-waves, offset by the instrumental polarizations, to the fractional Stokes parameters $Q_{\rm N}/I$ and $U_{\rm N}/I$ (as defined in the Nasmyth system, i.e., with respect to the receiver cabin, see Sect. 3.2.2), plotted against the angle χ_0.

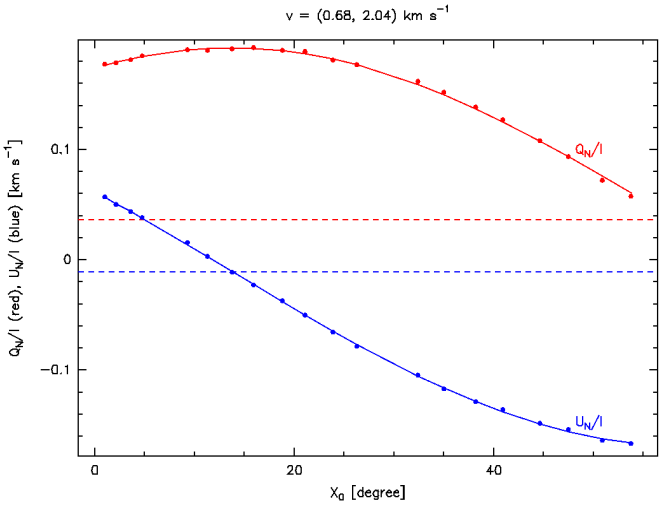


Fig. A.2. The solid red and blue lines show least-square fits to the fractional Stokes parameters $Q_{\rm N}/I$ and $U_{\rm N}/I$ (red, respectively blue, dots) of R Leo versus $\chi_0 = \varepsilon - \eta$, averaged across a velocity interval framing the Stokes I emission peak (0.68 to 2.04 km s^{-1}) and expressed in the Nasmyth reference frame. The dashed lines indicate the corresponding fractional instrumental contributions. For details, see text.

Appendix B: Stokes I spectra

Fig. B.1 presents the decomposition of Stokes I for μ Cep, o Ceti, χ Cyg, U Her (March and May 2022), and R Leo. The decomposition in R Aql is presented in Fig. 2 (left panel).

Appendix C: On the Landé factors of the SiO maser lines.

In this Appendix we recall some basic notions used to describe the Zeeman effect in molecules and define the appropriate value of the Landé factor, g, to be used in the SiO transition observed in this work.

The Larmor frequency can be used to describe the Zeeman shift of a level (in the energy domain) or a Zeeman transition (in the frequency domain) up to a gyromagnetic factor called the Landé factor. This factor is not explicitly dependent on the angular momenta that can be of two types. Those involving the electron produce an effect proportional to the Bohr magneton which, in the SI units, is given by

$$\mu_B = \frac{eh}{4\pi m_e},$$

and those involving the whole molecule for which the nuclear magneton is relevant

$$\mu_N = \frac{eh}{4\pi m_p}.$$

Both magnetons are related by the proton-to-electron mass ratio $m_p/m_e = 1836$.

The molecule under study here, SiO, is diamagnetic (its ground electronic state is $^1\Sigma^+$) and, consequently, all its electronic angular momenta are zero. It is the Larmor frequency in terms of the nuclear magneton that must be used:

$$\nu_L = \frac{\mu_N}{h} B = 762.31 \cdot B[G]$$

(for reference, we recall the common Larmor frequency in terms of the Bohr magneton $\nu_L = 1.3996 \times 10^6 \cdot B[G]$).

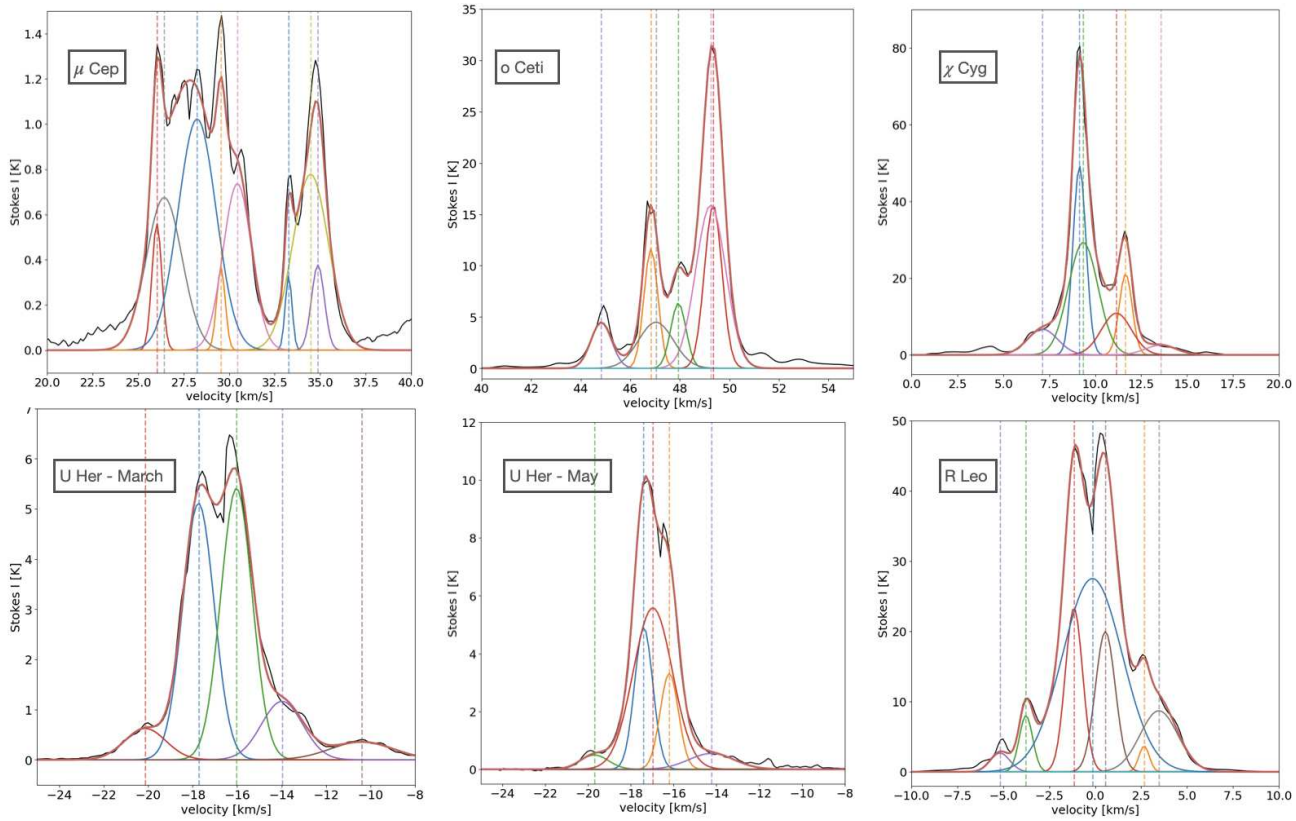


Fig. B.1. Decomposition of Stokes I for μ Cep, o Ceti, χ Cyg, U Her, and R Leo (as for R Aql, see Fig.2).

Calling Zeeman shift, the shift of an energy level with respect to its zero-field position, one defines the Zeeman splitting as the separation between two, usually symmetric, Zeeman split components using the selection rule $\Delta M_J = \pm 1$ or 0 where M_J is the projection of momentum J along the magnetic field axis (excluding 0 to 0 for $\Delta J = 0$). Laboratory measurements (Davis & Muenter 1974; Honerjäger & Tischer 1974) are coincident in assigning $g \approx 0.155$ for all J rotational transitions of SiO in the first vibrational state v=1. The Landé factor is slightly different, 0.154 in the v = 0 state (not observed here). (There is also a weak magnetic field dependent energy term due to the magnetic susceptibility anisotropy of the SiO molecule (Davis & Muenter 1974); it can be numerically ignored here.) The Zeeman shift of the v=1 SiO transitions, in terms of the nuclear magneton, is thus $g\nu_L = 118.16 \cdot B[G]$ and the Zeeman splitting is twice that value.

In the present work, we have defined an explicit Landé factor including the appropriate correction from the Bohr magneton to the nuclear magneton as

$$g_B = \frac{1}{1836} g = 8.4 \cdot 10^{-5}.$$

We note that this was also used in Elitzur (1996) (see his dimensionless equation 1.1 where, however, the Landé factor must account for the 1/1836 factor for diamagnetic molecules -Elitzur's Doppler width is also half the total Doppler line width at half intensity), and also used in Kemball & Diamond (1997); Kemball et al. (2009) or in Asensio Ramos et al. (2005).

Finally, we point out that starting from Goldreich et al. (1973), the concept of the Zeeman frequency, $g\Omega$, was introduced in many subsequent works on the magnetic field intensity where Ω is in fact the proton gyro frequency. In this work the Zeeman frequency is just the Zeeman splitting and, hence, twice the Zeeman shift

$$g\Omega = 2g\nu_L.$$

For the SiO lines of interest, using now ν_L in terms of the nuclear magneton we have in Hz

$$g\Omega = 1524.6 g B[G]$$

(and $2799165 g_B B[G]$ Hz in terms of the Bohr magneton).

Table D.1. Average circular polarization fraction $\overline{p_C}$ and average $\overline{p_L}^2/4$ for each star.

Star	$\overline{p_C}$	$\overline{p_L}^2/4$
R Aql	0.022	0.005
μ Cep	0.042	0.001
o Ceti	0.022	0.019
χ Cyg	0.013	0.028
U Her		
(March)	0.009	0.002
(May)	0.012	0.004
R Leo	0.013	0.006

Appendix D: Magnetic Field Strength

Fig. D.1 presents the magnetic field strengths of χ Cyg, using Eq. 11 for saturated masers with two solutions if the linear polarization is under 33%. Figure D.2 presents the magnetic field strengths for R Leo and o Ceti for saturated masers from Eq. 11 (left panel) and for unsaturated maser from Eq. 15 (right panel). Table D.1 shows the average circular polarization fraction $\overline{p_C}$ and average $\overline{p_L}^2/4$ for each star.

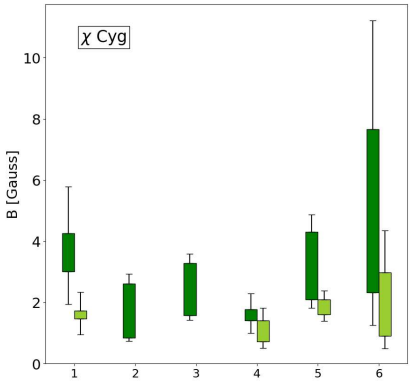


Fig. D.1. Magnetic field values for χ Cyg. Same as Fig. 6.

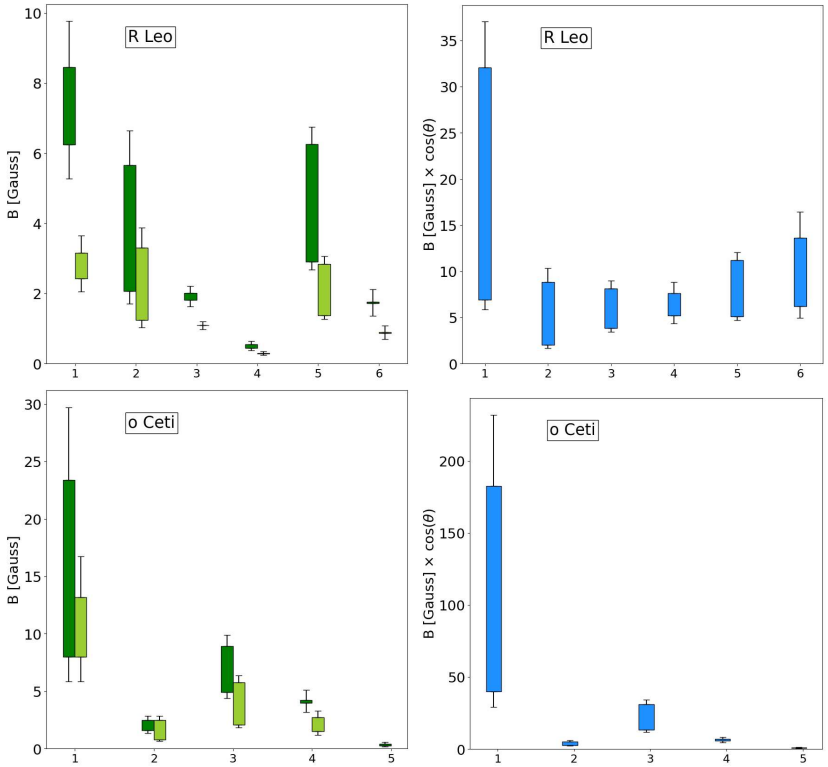


Fig. D.2. Magnetic field values for sources with uncertain saturation status. In green, the magnetic field computed with the Elitzur's formula. In blue, the magnetic field from the Zeeman weak-field theory ($B \times \cos(\theta_2)$).

E.2 Chemical tracers of a highly eccentric AGB-main-sequence star binary

nature astronomy

Article

https://doi.org/10.1038/s41550-023-02154-y

Chemical tracers of a highly eccentric AGB–main-sequence star binary

Received: 29 March 2023

Accepted: 30 October 2023

Published online: 03 January 2024

Check for updates

T. Danilovich[1,2,3] ✉, J. Malfait[1], M. Van de Sande[4], M. Montargès[5], P. Kervella[5], F. De Ceuster[1], A. Coenegrachts[1], T. J. Millar[6], A. M. S. Richards[7], L. Decin[1,8], C. A. Gottlieb[9], C. Pinte[2,10], E. De Beck[11], D. J. Price[2], K. T. Wong[12,13], J. Bolte[1,14], K. M. Menten[15], A. Baudry[16], A. de Koter[1,17], S. Etoka[7], D. Gobrecht[18], M. Gray[7,19], F. Herpin[16], M. Jeste[15], E. Lagadec[20], S. Maes[1], I. McDonald[7,21], L. Marinho[16], H. S. P. Müller[22], B. Pimpanuwat[7,19], J. M. C. Plane[8], R. Sahai[23], S. H. J. Wallström[1], J. Yates[24] & A. Zijlstra[7]

Binary interactions have been proposed to explain a variety of circumstellar structures seen around evolved stars, including asymptotic giant branch (AGB) stars and planetary nebulae. Studies resolving the circumstellar envelopes of AGB stars have revealed spirals, disks and bipolar outflows, with shaping attributed to interactions with a companion. Here we use a combined chemical and dynamical analysis to reveal a highly eccentric and long-period orbit for W Aquilae, a binary system containing an AGB star and a main-sequence companion. Our results are based on anisotropic SiN emission, the detections of irregular NS and SiC emission towards the S-type star, and density structures observed in the CO emission. These features are all interpreted as having formed during periastron interactions. Our astrochemistry-based method can yield stringent constraints on the orbital parameters of long-period binaries containing AGB stars, and will be applicable to other systems.

The asymptotic giant branch (AGB) is a late evolutionary stage of low- and intermediate-mass stars (~1 to 8 solar masses ($M_{\odot}$)). This stage is characterized by mass-losing stellar winds, rich in molecular gas and dust, which form an extended, expanding circumstellar envelope (CSE) around the star[1]. AGB stars eventually transition through the planetary nebula phase and end as white-dwarf stars, having chemically enriched their host galaxies through their mass loss[2]. Binary companions can have a substantial impact on this process, potentially affecting

[1]Institute of Astronomy, KU Leuven, Leuven, Belgium. [2]School of Physics and Astronomy, Monash University, Clayton, Victoria, Australia. [3]ARC Centre of Excellence for All Sky Astrophysics in 3 Dimensions (ASTRO 3D), Clayton, Victoria, Australia. [4]School of Physics and Astronomy, University of Leeds, Leeds, UK. [5]LESIA, Observatoire de Paris, Université PSL, CNRS, Sorbonne Université, Université Paris Cité, Meudon, France. [6]Astrophysics Research Centre, School of Mathematics and Physics, Queen's University Belfast, Belfast, UK. [7]JBCA, Department Physics and Astronomy, University of Manchester, Manchester, UK. [8]School of Chemistry, University of Leeds, Leeds, UK. [9]Harvard-Smithsonian Center for Astrophysics, Cambridge, MA, USA. [10]Université Grenoble Alpes, CNRS, IPAG, Grenoble, France. [11]Department of Space, Earth and Environment, Chalmers University of Technology, Gothenburg, Sweden. [12]Theoretical Astrophysics, Department of Physics and Astronomy, Uppsala University, Uppsala, Sweden. [13]Institut de Radioastronomie Millimétrique, Saint-Martin-d'Hères, France. [14]Department of Mathematics, Kiel University, Kiel, Germany. [15]Max-Planck-Institut für Radioastronomie, Bonn, Germany. [16]Laboratoire d'Astrophysique de Bordeaux, Université de Bordeaux, Pessac, France. [17]Anton Pannekoek Institute for Astronomy, University of Amsterdam, Amsterdam, The Netherlands. [18]Department of Chemistry and Molecular Biology, University of Gothenburg, Gothenburg, Sweden. [19]National Astronomical Research Institute of Thailand, Chiangmai, Thailand. [20]Laboratoire Lagrange, Observatoire de la Côte d'Azur, Université Côte d'Azur, Nice, France. [21]School of Physical Sciences, The Open University, Milton Keynes, UK. [22]I. Physikalisches Institut, Universität zu Köln, Cologne, Germany. [23]Jet Propulsion Laboratory, California Institute of Technology, Pasadena, CA, USA. [24]Department of Computer Science, University College London, London, UK. ✉e-mail: taissa.danilovich@monash.edu

https://doi.org/10.1038/s41550-023-02154-y

Table 1 | Molecular lines in the ground vibrational state used in our analysis

Molecule	Transition	Frequency (GHz)	Ref. for frequency	u_{cent} (km s^{-1})	Angular resolution (″)	MRS (″)	Recovered flux (%)
CO	J=2→1	230.538	100	–	0.132×0.123	5.3	–
				−23.4	0.829×0.679	8.9	33
SiN	N, J, F=6, 13/2, 13/2→5, 11/2, 11/2	262.156[a]	26	−23.7	0.222×0.198	4.7	100
SiC	$^3\Pi_2$ J=6→5	236.288	57,101	−23.8	0.199×0.184	2.6	–
NS	$^2\Pi_{1/2}$ f J, F=11/2, 13/2→9/2, 11/2	253.968[b]	64	–	0.187×0.171	2.5	–
HC_3N	J=25→24	227.419	102	−22.5	0.204×0.181	5.4	–
	J=26→25	236.513	102	−21.8	0.208×0.191	2.6	–
	J=27→26	245.606	102	−21.4	0.213×0.172	5.0	–
	J=28→27	254.700	102	−20.8	0.190×0.172	2.5	–
SiO	J=5→4	217.105	103	−22.6	0.063×0.055	5.7	85
SiS	J=12→11	217.818	104	−21.4	0.063×0.055	5.7	91
CS	J=5→4	244.936	105	−22.5	0.078×0.066	5.0	79
HCN	J=3→2	265.886	106	−23.0	0.061×0.053	2.4	72
$H^{13}CN$	J=3→2	259.012	107	−22.2	0.073×0.064	4.8	–
^{13}CN	N, F_1, F_2, F=2, 0, 2, 3, →1, 0, 1, 2	217.303[b]	108	–	0.213×0.199	5.7	44
	N, F_1, F_2, F=2, 1, 3, 4, →1, 1, 2, 3	217.467[b]	108	–	0.213×0.199	5.7	48

[a]Frequency and corresponding quantum numbers of central hyperfine component are given. [b]Frequency and corresponding quantum numbers of the brightest hyperfine component are given. All frequencies are rest frequencies and all velocities are are with respect to the local standard of rest. Column 4 lists the primary references that provide the measured frequencies and the spectroscopic designation of the transitions observed here. The Cologne Database for Molecular Spectroscopy[109,110] provides a comprehensive list of the best estimate of the transition frequencies, the excitation energies and the quantum mechanical line strengths. The quantum number F refers to the total angular momentum including nuclear spin; for ^{13}CN the quantum number F_1 refers to the coupling of the electron spin angular momentum with the nuclear spin angular momentum of ^{13}C and F_2 refers to the coupling of the rotational angular momentum (N) with F_1; for NS, the quantum number f refers to the upper Λ doubling component and is related to the parity of the level. Column 5 gives the central velocity of the line as obtained from fitting a soft parabola (see 'Data reduction' in 'ALMA results' in Methods). Column 7 gives the MRS for the ALMA observations.

mass-loss rates and chemistry[3,4], and are thought to shape both the eventual planetary nebula[5] and the CSE during the AGB phase[6]. Binary stars with an AGB component are also the progenitors of various exotic objects, including barium stars, CH stars, extrinsic S-type stars and novae[7]. Hence, understanding binary systems containing AGB stars, especially through observations, is important for understanding their overall evolutionary progress, the initial–final mass relation and the evolution of their host galaxies.

Recent observations of some AGB stars have identified the signatures of binary companions imprinted in the structure of the CSE. In only a few cases, however, is the precise nature of the companion and its effects on the CSE known, thereby limiting the study of such systems. Systems with directly detected companions include Mira, which comprises an oxygen-rich AGB star and a white dwarf, in which the companion has contributed to the shaping of the CSE structure[8,9], and L_2 Pup, an oxygen-rich AGB star surrounded by a disk with a planetary companion[10]. Bipolar structures around π^1 Gru have been attributed to a recently detected close companion[11], adding to the small number of AGB systems with directly detected companions. The spiral structures observed around the carbon stars AFGL 3068 and R Scl[12–14], and the bipolar structures around the carbon star V Hya[15], indicate the possible presence of binary companions that have not been directly detected. A more complete understanding of circumstellar structures will come from knowing both cause (for example, a stellar or planetary companion) and effect (the CSE structure) and should allow us to draw more direct links between AGB stars and planetary nebulae, which have been observed to show a multitude of complex asymmetric structures[6,16].

W Aquilae (W Aql) is a binary system at a distance of 395 pc (see 'Distance' in Methods). It contains an S-type AGB star, which has a mixed carbon–oxygen chemistry (C/O ≈ 1) and may be transitioning from being oxygen rich to carbon rich, and an F9 main-sequence star[17,18] located to the southwest of the AGB star at a projected separation of ~0.5″ (ref. 19). W Aql has been extensively studied through observations taken with a variety of telescopes[19–24]. Spatially resolved observations of the polarized dust[19] and CO (ref. 22) around the AGB star have shown a large-scale asymmetry in the direction of the F9 companion, a sign that binary interactions may be shaping the CSE. However, the asymmetry exists at larger scales than the present separation of the two stars, from ~10″ to ~100″ (refs. 19,20,22). Some indications of spiral structure in the CSE were seen in observations taken by the Atacama Large Millimeter/submillimeter Array (ALMA) at a resolution of ~0.4″ (ref. 22) but it was unclear whether these could be caused by the F9 star.

Results

We have analysed high-resolution ALMA observations of the W Aql system with spatial resolutions of ~0.024″, that is, approximately twice the K-band stellar diameter[25], and 40% larger than the millimetre stellar diameter (see 'AGB angular diameter' in Methods). We combined these with photometric observations, smoothed particle hydrodynamics (SPH) models and chemical kinetics models to put constraints on the orbit of the system. We have shown that all the observations are consistent with the hypothesis of a highly eccentric orbit, based primarily on the distributions of molecular species that formed during periastron passage and the structures seen in the CO observations, making such an interpretation highly probable.

Species formed during periastron passage

From a detailed examination of the ALMA data (see 'ALMA results' in Methods), we identified several molecules showing spatially asymmetric emission (details of molecular transitions are given in Table 1). Most notable was SiN, which has been detected towards only one other AGB CSE[26]. In Fig. 1a, we plot a zeroth-moment (integrated intensity) map of SiN, which shows emission in a roughly triangular wedge mainly to the northeast of the AGB star. To further understand the spatial origin of the emission, we constructed a position–velocity diagram (Fig. 1b), which reveals an arc of SiN emission that lies side-on (90°),

https://doi.org/10.1038/s41550-023-02154-y

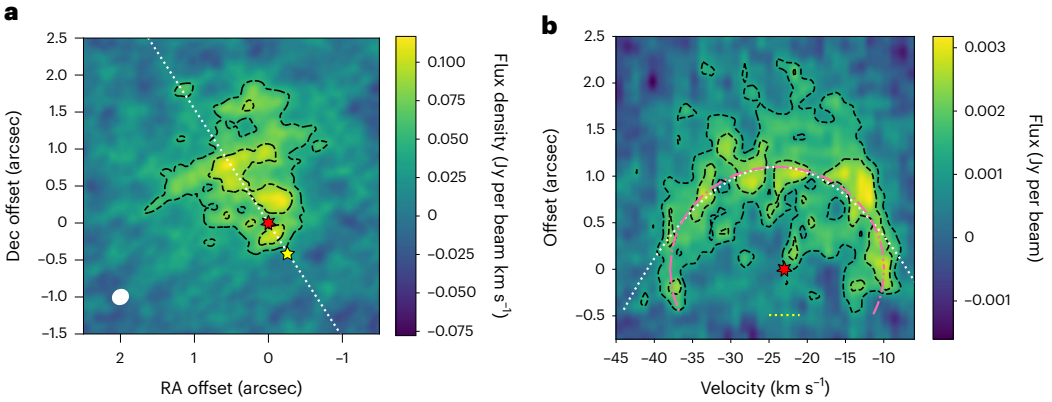


Fig. 1 | Observed SiN emission towards W Aql. a, Zeroth-moment map of SiN ($N, J = 6, 13/2 \rightarrow 5, 11/2$) towards W Aql with contours at levels of 3σ and 5σ. The position of the AGB star is indicated by the red star at (0, 0) and the current location of the F9 star is indicated by the yellow star to the southwest. North is up and east is to the left. The dotted white line indicates the axis used for the position–velocity diagram in **b** and the white ellipse in the bottom left corner indicates the size of the synthesized beam. **b**, Position–velocity diagram of SiN towards W Aql, taken at a position angle of north 33° east, as indicated by the dotted white line in **a**. Dashed black contours are at levels of 3σ and 5σ, a dotted white parabola is fit to the data (see 'SiN and SiC' in 'ALMA results' in Methods) and a dash-dotted pink ellipse is plotted to emphasize the shape of the emission in the position–velocity diagram. The position and LSR velocity ($\upsilon_{LSR} = -23$ km s^{-1}) of the AGB star is indicated by the red star and the horizontal yellow dotted line indicates the present offset of the F9 star. Dec, declination; RA, right ascension.

that is, perpendicular to the plane of the sky (see 'SiN and SiC' under 'ALMA results' in Methods).

The absence of (approximate) spherical symmetry in the emission suggests a spatial and/or temporal dependence for the formation of SiN around W Aql. Chemical kinetics models indicate that the production of SiN is higher in the presence of ultraviolet (UV) photons—such as can be provided by a main-sequence companion[4] like the F9 component of W Aql, but only in sufficiently dense regions of the CSE (see 'Chemical modelling' in Methods for further details of the chemistry initiated by the companion's UV field). We posit that: (1) the binary orbit is highly eccentric and inclined $i \approx 90°$; (2) the formation of the arc of SiN was triggered close to periastron (Fig. 2 and Extended Data Fig. 1), when the F9 star passed close to the AGB star and irradiated part of the dense inner AGB wind; and (3) this temporarily drove chemical reactions through increased (but not complete) photodissociation and photoionization, including those reactions that led to the formation of SiN (see 'SiN and SiC' under 'Chemical modelling' in Methods). We used radiative transfer modelling to estimate the abundance of SiN in the arc and found a peak abundance of 1.5×10^{-7} relative to H_2 (see 'Radiative transfer modelling' in Methods), which is in general agreement with the expectations from chemical models containing an F9-like companion. Further evidence in support of this formation mechanism is provided by the presence of SiC and NS emission towards W Aql. Their emission is also distributed asymmetrically (with a weaker signal-to-noise ratio (SNR) than SiN; see 'SiN and SiC' and 'NS' under 'ALMA results' in Methods, and Extended Data Figs. 2 and 3). The presence of SiC and NS is consistent with chemical model predictions[4] for the effect of the periastron passage of the F9 star on the chemistry of the CSE (see 'SiN and SiC' and 'NS' under 'Chemical modelling' in Methods).

Photodissociation of common species

Farther from the AGB star, such as where the F9 star is currently located, the wind is less dense (~3×10^5 cm^{-3} compared with ~10^9 cm^{-3} at 10 au from the AGB star) and the chemistry tends to be initiated by photodissociation by the interstellar radiation field. The density in this region is too low for species such as SiN to form; however, we see evidence of the F9 star driving additional photodissociation in the zeroth-moment maps of SiO, SiS, CS and HCN (Fig. 3), all of which show extended emission to the northeast and truncated emission to the southwest, in the direction of the present position of the F9 star. The central channels of SiS and CS, in particular, show significantly lower molecular emission around the F9 star (Extended Data Fig. 4). Spectra centred on the current position of the F9 star show very few detected molecular lines and the line profiles of CS, SiO and HCN show less emission around the local standard of rest (LSR) velocity compared with spectra centred on the AGB star or at the same distance from the AGB star but on the opposite side of the CSE (see 'Molecular emission around F9 star' under 'ALMA results' in Methods and Extended Data Fig. 5).

Additional evidence of the F9 star driving photodissociation is found by comparing the distribution of $H^{13}CN$ with the distribution of ^{13}CN (note, ^{12}CN was not covered by our observations), because CN is a photodissociation product of HCN[27]. As shown in Fig. 4, ^{13}CN is found to be present mainly in the region in which the $H^{13}CN$ emission is truncated. This is consistent with the F9 star driving the photodissociation of $H^{13}CN$ and hence creating ^{13}CN. We also plot the zeroth-moment map of the $J = 27–26$ transition of HCCCN (where J is the quantum number referring to the total angular momentum excluding nuclear spin and HCCCN is the next member in the cyanopolyyne family, hereafter HC_3N; Fig. 4), which shows emission on the same side of the AGB star as ^{13}CN, albeit over a much smaller region. The other observed transitions of HC_3N show a similar distribution (Extended Data Fig. 6). Because HC_3N forms from CN (see 'HCN, CN and HC_3N' under 'Chemical modelling' in Methods), its asymmetric distribution indicates an asymmetric CN distribution and hence provides further evidence of anisotropic photo-processes in the CSE.

Structures in CO emission

CO is an abundant stable molecule, commonly used as a density tracer in CSEs. We plot high-resolution (0.132″ × 0.123″) channel maps of CO emission in Extended Data Fig. 7 and first focus on the central three channels closest to the AGB stellar velocity $\upsilon_{LSR} = -23$ km s^{-1} (Fig. 5a). With the aid of angle–radius plots (Extended Data Fig. 8), we identified two key circular structures in the CO emission, with radii of 1.35″ and 10.75″, with centres offset from the present position of the AGB star by 0.1″ and 1.5″ to the north. These are shown in black and white in Fig. 5a. Other circular structures are highlighted in red and pink and, because these are offset to the southwest, we presume that they were formed through different processes to the black and white circles and focus on the latter first.

To better understand the origin of the circular structures, we performed hydrodynamic simulations for highly eccentric systems

https://doi.org/10.1038/s41550-023-02154-y

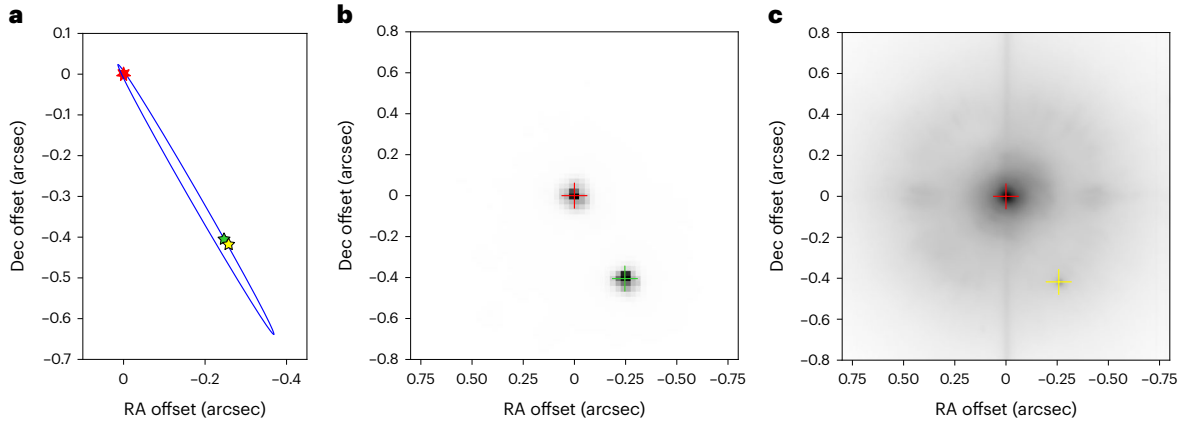


Fig. 2 | Plots of the orbit of the W Aql system as seen in the plane of the sky. In all panels, north is up and east is left. The orbital parameters shown are for eccentricity $e = 0.93$ and periastron separation $r_p = 1.5 \times 10^{14}$ cm. Although we find the inclination to be $i = 90 \pm 7°$, we plot the orbit with $i = 85°$ so that it is possible to see the ellipse. **a**, Plot of the orbit of the W Aql system in the frame of the AGB star. The location of the AGB star is shown as a red star at (0, 0), the position of the F9 star from the SPHERE observation is shown as a yellow star and from the HST observation as a green star. **b**, B-band image of W Aql observed with HST in 2004[19], plotted with a linear intensity scale. The measured centres of the AGB and F9 stars are indicated with the red and green crosses, respectively. **c**, VLT/SPHERE-ZIMPOL image of W Aql in the VBB filter, observed in 2019[48], plotted with a logarithmic intensity scale. The measured centres of the AGB and F9 stars are indicated with the red and yellow crosses, respectively.

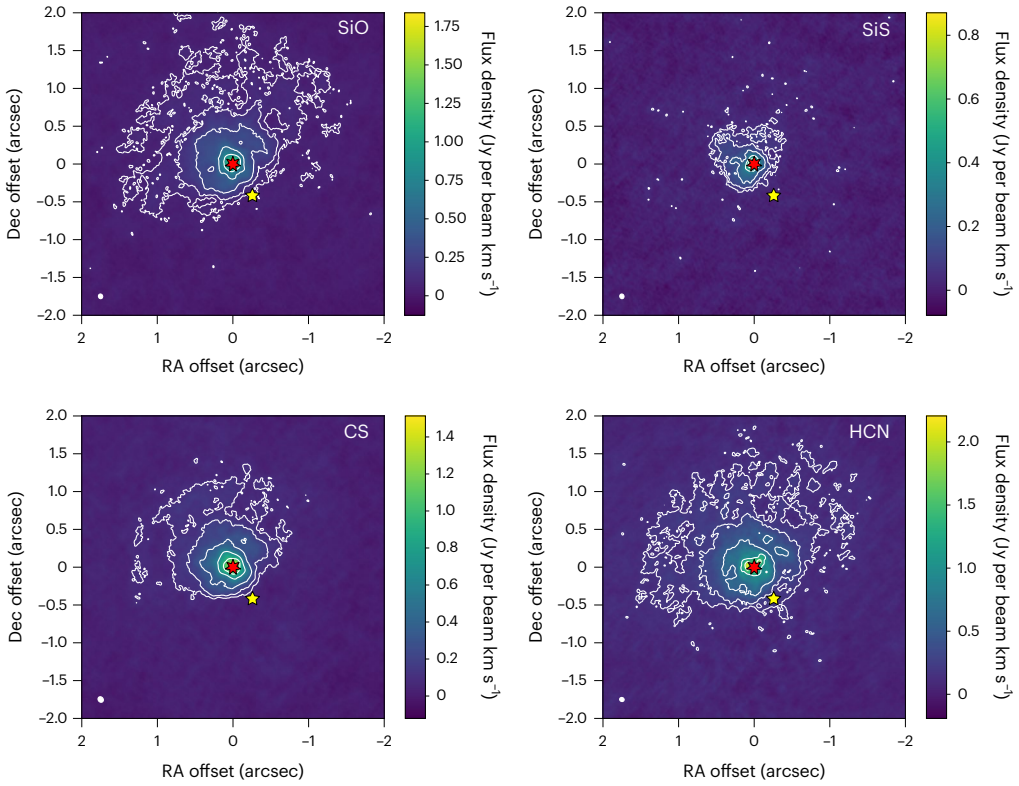


Fig. 3 | Observed SiO, SiS, CS and HCN emission towards W Aql. Zeroth-moment maps are shown for the transitions given in Table 1. White contours are at levels of 3σ, 5σ, 10σ, 20σ and 30σ. The position of the AGB star is indicated by the red star at (0, 0) and the location of the F9 companion is indicated by the yellow star to the southwest. North is up and east is left. The white ellipses in the bottom left corners indicate the sizes of the synthesized beams.

based on the W Aql system (details in 'Hydrodynamic simulations' in Methods). From these, we found that highly elliptical orbits ($e \gtrsim 0.8$) result in almost spherical structures in the wind, which appear circular and slightly offset away from the present position of the companion when viewed edge-on ($i = 90°$) relative to the plane of the orbit (Fig. 5c). These structures are generated during periastron passages and are very similar to the black and white circles seen in the ALMA CO data, even more so when the hydrodynamical model is processed with a radiative transfer code (Fig. 5d). The fact that the outer edge of the SiN emission overlaps with the inner circular structure (Fig. 5b) also suggests that they were formed contemporaneously, that is, during the most recent periastron passage. We also determined that the different emission distributions seen in the blue (elongated) and red (circular) channels of our ALMA observations are reproduced in the hydrodynamic model

https://doi.org/10.1038/s41550-023-02154-y

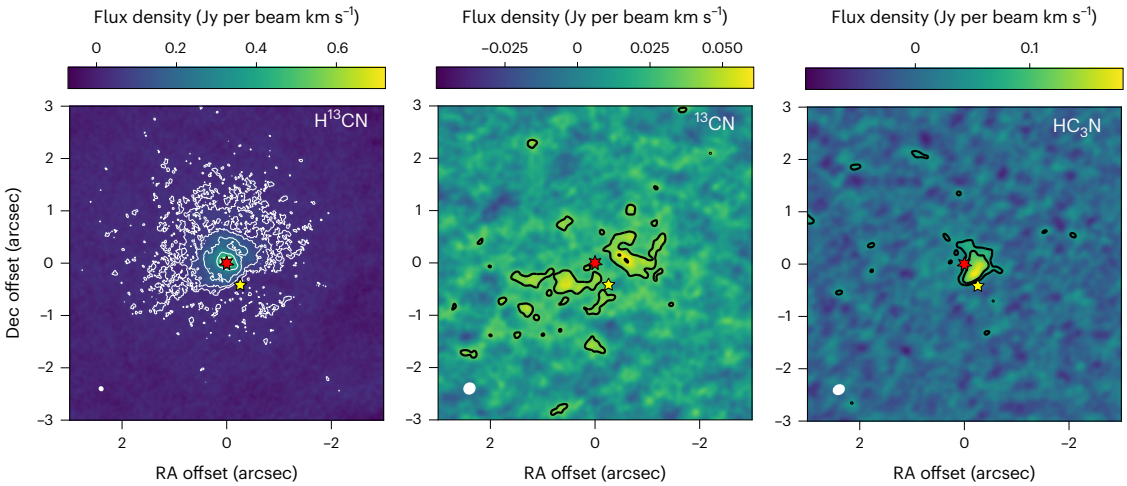


Fig. 4 | Observed emission of CN-bearing molecules towards W Aql. Zeroth-moment maps of $H^{13}CN$ (left), ^{13}CN (centre) and HC_3N ($J = 27 \rightarrow 26$, right) towards W Aql. Full transition details are given in Table 1. Contours are at levels of 3σ and 5σ, and additionally 10σ, 20σ and 30σ for $H^{13}CN$. The position of the AGB star is indicated by the red star at (0, 0) and the location of the F9 companion is indicated by the yellow star to the southwest. North is up and east is left. The white ellipses in the bottom left corners indicate the sizes of the synthesized beams.

(Extended Data Fig. 9). On the basis of all of these results, we can constrain the orbital parameters of the W Aql system.

Orbital parameters

From the circular structures seen in Fig. 5, we estimate the orbital period to be $1,082^{+89}_{-108}$ years. On the basis of the expansion time of the inner circle and the arc of SiN, we estimate the time since the most recent periastron to be 172 ± 22 years (see 'Orbital parameters from ALMA observations' in Methods). The SiN position–velocity diagram indicates an orbital inclination of $i = 90 \pm 7°$ (see 'SiN and SiC' under 'ALMA results' in Methods). Combining these results with resolved images of W Aql (see 'Spatially resolved imaging' in Methods), we found a series of numerical solutions that reproduce the observations within their uncertainties (see 'Orbital solutions' in Methods). All our solutions (Extended Data Table 1) have high eccentricities ($e > 0.9$) and small periastron distances ($r_p \leq 2 \times 10^{14}$ cm = 13 au), with long periods ~1,100 years. A solution with $e = 0.93$, $r_p = 1.5 \times 10^{14}$ cm (10 au) and period 1,051 years is plotted in Fig. 2, where it is superposed on resolved images to show the agreement with the positions of the stars.

Discussion

We have identified in observations, with the aid of astrochemistry, molecular species that formed during a periastron passage of an AGB + main-sequence (F9) binary system. Through our analysis of these species, in combination with structures in the CO and resolved images of the two stars, we were able to constrain the binary orbit to a limited number of solutions, all having high eccentricities and almost edge-on inclinations. Our analysis demonstrates a method for studying binary systems containing AGB stars by observing spatially resolved emission of key molecular species.

SiN was crucial to our analysis because it is distributed asymmetrically in the W Aql CSE—alerting us to a non-standard formation pathway—and was detected with a sufficiently high SNR to be readily analysed. The other two molecules that we identified as being created during periastron, SiC and NS, strengthened our argument but their lower SNR in the present observations would not have allowed us to draw firm conclusions in the absence of SiN. However, we note that all three molecules have the potential to serve as diagnostic tools for identifying binary interactions in other systems, especially with targeted observations at high SNR. On the basis of the predictions of chemical models that consider the presence of a Sun-like companion[4], SiN and SiC are expected to be good tracers of stellar companions to S-type and oxygen-rich AGB stars, but probably not carbon stars (unless notably asymmetric emission is detected), because carbon-rich CSEs are expected to have higher abundances of both molecules without the presence of a companion. NS is predicted to have higher abundances around carbon stars in the presence of a white-dwarf companion, but not if the companion is a main-sequence star. For S-type and oxygen-rich AGB stars, NS is expected to be a good tracer of either a white-dwarf or a Sun-like companion. While there may be other molecules that are enhanced or destroyed in the presence of a companion, a comprehensive list is difficult to compile[4]. After checking all detected molecular lines for asymmetries, we do not find any additional candidates for tracers of binary-induced chemistry towards W Aql.

The timing between our observations and the present orbital configuration of W Aql contributed to our being able to use SiN to characterize the orbit. If the W Aql system was instead observed ~200 years before the next periastron, rather than ~200 years after the most recent periastron, it is unlikely that SiN would have been detected. In that case, in the ~900 years since the previous periastron, the SiN arc would have expanded with the CSE to around 4 times farther from the AGB star than what we currently observe. At that radial distance, most of the SiN would have been destroyed through photodissociation by the interstellar radiation field[4]. This is also why we do not detect SiN that was created contemporaneously with the white circle in CO (Fig. 5a) during the second most recent periastron passage, ~1,300 years ago. That said, SiN has already persisted for ~200 years since the periastron interaction, and may continue to be detectable for another 50 to 100 years, based on the expansion velocity and excitation conditions. This means that the imprint of the periastron interaction will be potentially detectable for around a quarter of the total orbital period, a much larger portion than if we had to rely on, for example, observing changing stellar positions or radial velocities around periastron (Extended Data Table 1). The high eccentricity and small periastron separation of the system also contributed to favourable conditions for the formation of SiN around W Aql. As noted above and in 'Chemical modelling' in Methods, the companion-initiated photochemistry is most impactful in the dense inner CSE, meaning that the tracers of this photochemistry—SiN, SiC and NS—may not be formed in sufficiently high quantities to be detected for binary systems with wider orbits, where the companion passes through regions of the CSE with lower number densities. Despite these potential limitations, molecular tracers in the CSE generally

https://doi.org/10.1038/s41550-023-02154-y

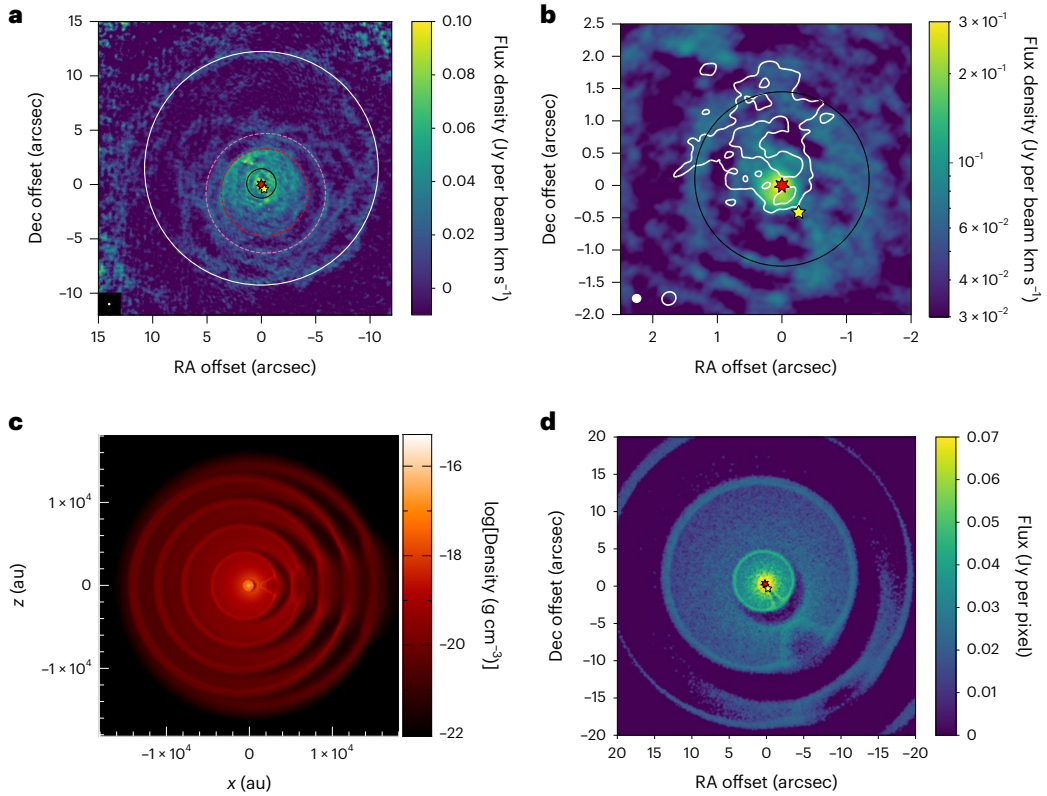


Fig. 5 | Observations and simulations of CO emission towards W Aql. a, A plot of the three central CO channels observed with ALMA summed together (see channels highlighted in Extended Data Fig. 7). We include circles (white, black, red, pink) to guide the eye to structures in the emission. The location of the AGB star is shown as a red star and the present location of the companion is shown as a yellow star. North is up and east is left. The synthetic beam size is shown as a white ellipse inside a black square in the bottom left corner. **b**, The same as the central part of **a**, including the black circle, but plotted on a logarithmic colour scale to emphasize structure. The white contours are the SiN zeroth-moment map as shown in Fig. 1a. The filled ellipse in the bottom left corner shows the synthetic beam for the CO data and the unfilled ellipse is the synthetic beam of the SiN data. **c**, Density distribution in a two-dimensional slice through a plane perpendicular to the orbital plane ($y = 0$), similar to the edge-on orientation of the W Aql system, from a three-dimensional SPH model with masses $M_{AGB} = 1.6\,M_{\odot}$ and $M_2 = 1.06\,M_{\odot}$, eccentricity $e = 0.92$, and semimajor axis $a = 125$ au. The barycentre of the system is located at 0, 0 and at the scale plotted (1×10^4 au ≈ 25″) the AGB and F9 stars cannot be distinguished. See 'Hydrodynamic simulations' in Methods for more details. **d**, The central channel of **c** after processing with a radiative transfer model to convert the model density to CO (2 → 1) intensity, taking photodissociation into account (see 'Hydrodynamic simulations' in Methods for details). Star positions are taken from the model in **c**.

persist for a relatively long time (hundreds of years, depending on the molecule) and allow us to probe the system on longer timescales than direct imaging or radial velocity measurements, which can be taken on only human timescales. Hence, molecular tracers are invaluable for constraining binary systems with long orbital periods.

The W Aql system may be unusual for having such a highly eccentric orbit, but it is not unique nor is it impossible for it to have formed with such a high eccentricity. In fact, studies of eccentricity distributions that include wider binaries find a tendency for the mean eccentricity to be higher for subsamples with larger periods[28,29]. Indeed, for long-period binaries, orbital circularization during their formation is not expected[30]. Furthermore, a large statistical analysis of binary systems found that solar-type stars in binaries are more likely to have long periods than short periods, that is, the companion frequency distribution for solar-type primaries peaked at periods of $\log[P\,(\mathrm{days})] = 5.5$ (ref. 30), very close to the period we found for W Aql ($\log[P_{\mathrm{WAql}}\,(\mathrm{days})] = 5.6$). Both the aforementioned studies focused primarily on main-sequence stars, but our result for W Aql shows that wide binaries with high eccentricities can survive to the AGB phase. Our hydrodynamic model, which takes into account the gravitational effect of the secondary star on the wind and vice versa, shows a very slightly increasing orbital period (owing to the mass lost by the AGB star) but negligible changes in eccentricity, and does not show precession over ~5,000 years. While 5,000 years may seem too short a time to make a definitive judgement, we point out that the expansion of the CSE during this time represents a larger spatial extent than the cool dust emission imaged by the Herschel Photoconductor Array Camera and Spectrometer (at 70 μm and 160 μm (ref. 20)). Despite the high eccentricity that we find for W Aql, none of our orbital solutions (Extended Data Table 1) have periastron separations smaller than the Roche limit, so no direct interaction between the two stars is expected and no evidence of such an interaction is seen in the ALMA observations. This suggests a relatively stable, if slowly evolving, system from which we could expect the eventual formation of a planetary nebula characterized by elongation to the southwest and perhaps a variety of additional arcs, analogous to what is currently seen in the AGB CSE, including at larger scales[19,20,22].

Other binary systems containing AGB stars have also been found to have long periods (based mainly on spiral-like structures in CO observations) including AFGL 3068 (~800 years[13]), R Scl (445 years[14,31]) and II Lup (128 years[32]). In comparison, AGB stars that have close companions, such as π^1 Gru (current projected separation 6 au (refs. 11,33), period unknown) and V Hya (period of 8.5 years[15,34]), both of which are triple systems that also have wide companions, have less spherical and more disrupted CSEs with, for example, bipolar outflows. Unlike the former group with more spherical CSEs, these triple systems are

more likely to go on to form bipolar planetary nebulae. The very high eccentricity of W Aql precludes the presence of a stable third companion and, despite the small periastron separation, we can consider it to be a relatively undisrupted system, suggesting the eventual formation of a relatively regular planetary nebula, that is, perhaps more closely resembling the Ring Nebula than the Butterfly Nebula.

The study we have presented here adds to the small number of AGB stars with known companions and orbital parameters. While previous studies have struggled to explain the range of eccentricities observed for, for example, post-AGB stars, most of these have focused on shorter orbital periods, ranging up to 1,000 days, rather than 1,000 years, owing to observational limitations[35]. The W Aql system provides further evidence that highly eccentric systems with long orbital periods exist during the AGB phase and that such eccentricity could be inherited by binary systems in later evolutionary phases, such as post-AGB stars and barium stars[36]. The method used here—which entails the combination of chemical tracers and hydrodynamical models—can be used to detect the characteristic effects of main-sequence binary companions in other AGB CSEs. Rather than solely searching for structures in the CSE, future studies can also check for anisotropies in molecular emission and the production of particular molecular species to confirm or rule out the presence of a stellar companion.

Methods

Distance

Many of the measurements and calculations in the present work rely on the value of the distance to the W Aql system and, more specifically, to the AGB component. Previous modelling of W Aql has assumed a distance of 395 pc, calculated from a period–magnitude relation[21]. Before this, a variety of distances were assumed for W Aql, ranging from 230 pc to 680 pc (refs. 37–40). Recently, distances have been calculated based on high-precision parallax observations from the Gaia mission[41]. Values of 374 ± 22 pc (ref. 24) and 380^{+68}_{-49} pc (ref. 42) were found using different methods based on the Gaia Early Data Release 3[43]. In this work, we continue to use a distance of 395 pc because this value falls within the uncertainties of both Gaia-derived values, and because it has been previously used in many radiative transfer models for the AGB star[21–24] and various stellar and circumstellar parameters such as luminosity and mass-loss rate have been derived relative to this value (Supplementary Table 1). We note that if the true distance is not exactly the adopted one, then the derivations of various parameters would be altered in the following way: mass-loss rate and relative molecular abundances would tend to increase for a larger distance, although molecular abundances may not change significantly after the mass-loss rate was updated, owing to a degeneracy between the impact of distance and density (the latter being directly related to mass-loss rate) on the line intensity. Our derived projected separations would increase linearly with distance, which would in turn result in a larger calculated orbital period.

Stellar masses

The companion to the AGB star was identified as a main-sequence star classified as F8 to G0[18], implying that the stellar mass is in the range 1.09–1.04 $M_\odot$ (ref. 44.) For the purposes of this study, we have assumed the companion is an F9 star with a mass of 1.06 $M_\odot$.

The situation for the AGB component is more complicated. Previous studies comparing oxygen isotopic ratios with stellar evolution models have calculated an initial stellar mass for the AGB star of 1.6 ± 0.2 $M_\odot$ (refs. 45,46). Although the current mass-loss rate of the AGB star is relatively high at $\dot{M} = 3 \times 10^{-6}$ $M_\odot$ yr^{-1} (ref. 22), stellar evolution models indicate that a significant decrease in stellar mass (that is, >0.1 $M_\odot$) is not expected to occur until the final stages of the thermally pulsing AGB phase (that is, during and after the last one or two thermal pulses[47]). Ergo, we assume 1.6 $M_\odot$ for the present AGB mass and hence assume a total system mass of 2.66 $M_\odot$.

Spatially resolved imaging

W Aql was observed with the Advanced Camera for Surveys (ACS) on the Hubble Space Telescope (HST) at 400 nm on 12 October 2004 (Fig. 2b)[19]. It was observed again with the Very Large Telescope instrument Spectro-Polarimetric High-contrast Exoplanet REsearch Zurich Imaging Polarimeter (VLT/SPHERE-ZIMPOL) at 735.4 nm on 9 July 2019 (Fig. 2c)[48]. Both HST and SPHERE images were taken during a similar phase of the AGB pulsation, approximately halfway between maximum and minimum light. Another HST observation was taken with the Wide Field/Planetary Camera (WFPC) at 550 nm in 1993[20], but this was taken before the first servicing mission, and the degraded angular resolution makes it unusable for our study.

We measured the positions of the AGB and F9 stars using the Python package lmfit (https://lmfit.github.io/lmfit-py/index.html). We find the separation between the two stars is 475 ± 1.0 mas in the HST epoch, and 491 ± 1.8 mas in the SPHERE epoch. For HST, the astrometry is well characterized and the uncertainties were estimated based on the noise of the images. For SPHERE, the astrometric uncertainty includes the orientation with respect to north, the distortion, the plate-scale stability and the statistical position uncertainty[49] The change in projected distance between the two stars is then calculated to be 16 ± 0.25 ± 1.79 mas (to distinguish between the systematic and statistical uncertainties) in 14.75 years, with the projected motion of the F9 star approximately following a straight line away from the AGB star. This motion does not contradict a highly inclined, nearly edge-on orbit, with inclination, $i \approx 90°$. The 2019 SPHERE position corresponds to a projected separation of 194 au, at our adopted distance of 395 pc.

These results indicate that the orbital period must be long, particularly compared with the timescale of our observations. For example, a circular orbit with a radius of 194 au gives a period of 1,660 years for our assumed system mass of 2.66 $M_\odot$. An extremely elliptical orbit with an apastron of 194 au and a periastron of 3 au (a value chosen so that the F9 star does not pass through the AGB star, as we see no evidence of such an extreme interaction) results in a period of 600 years. Note that neither of these orbits properly consider the motion seen between the HST and SPHERE epochs and are merely illustrative. The ephemeris of such a long orbit cannot be constrained through direct photometric imaging in a reasonable timeframe, because the observations would need to be taken decades and centuries apart. Hence, we require other markers in the circumstellar environment of the AGB star to constrain the orbital parameters of the W Aql system.

ALMA results

High-spatial-resolution observations of W Aql were obtained with ALMA as part of the ATOMIUM Large Programme (ALMA Tracing the Origins of Molecules In dUst- forming oxygen-rich M-type stars; programme ID 2018.1.00659.L; principal investigator L. Decin)[50]. More than 110 molecular lines were detected towards W Aql, including CO, SiN, SiC, NS and HC_3N, which are analysed here. Previously, SiN was detected and HC_3N was tentatively detected towards W Aql with the Atacama Pathfinder EXperiment (APEX) telescope[46], which does not provide spatial information. Here we present observations of spatially resolved emission of all studied molecules. The SiN, SiC and HC_3N emission show two types of asymmetric morphology, both different to the more extensive circumstellar structures revealed by the CO observations at high spatial resolution.

Data reduction. W Aql was observed with three array configurations of ALMA. This enabled us to observe small structures at high angular resolutions (down to 0.024″ × 0.021″) while still retrieving larger structures (up to a maximum recoverable scale (MRS) of 8.9″) that would otherwise be resolved out[50]. While these are the extremes of resolution and MRS available in the ATOMIUM dataset, the precise properties of the data we analyse can be found in Table 1 for each transition.

We combined the three datasets to maximize the sensitivity of images, using the Common Astronomy Software Applications for Radio Astronomy[51]. We used the combined data to make spectral image cubes for each transition in Table 1, weighting the contributions of the baselines to optimize the resolution and surface brightness sensitivity. The velocity resolution is 1.1–1.3 km s^{-1} depending on frequency, and in some cases we averaged 2 or more channels to increase sensitivity. The typical root-mean-square (rms) noise is $\lesssim$2 mJy. All velocities are adjusted to the LSR frame. The relative astrometric accuracy of the extended configuration alone is ~0.002″ and ~0.005″ for the combined data at slightly lower resolution. The flux scale for the combined images is accurate to ~10%. The chances of interferometric noise causing artefacts $\geq 5\sigma$ in these images is negligible. The relative position accuracy of measurements is at least equal to the synthesized beam divided by the SNR[52], so for SNR = 5 this is ~40 mas for SiN, SiC, NS, HC_3N and ^{13}CN, around 25 mas for CO, and 12 mas for SiO, SiS, CS and HCN.

Moment-zero (integrated intensity) maps were made by summing all the channels with emission above ~$3\sigma_{rms}$. Position–velocity diagrams were made by selecting a tilted rectangular slice ('slit') covering the moment-zero emission (spanning a width of 3″) at the angle shown in Fig. 1 (although other angles were tested, see 'SiN and SiC' below), and measuring the flux density in this region for each channel in increments along the slice. The peak of the continuum emission was assumed to be the position of the AGB star. In the channel maps and moment-zero maps, the position of the AGB star is at (0, 0). A small secondary peak, associated with the position of the F9 star, was detected in the continuum emission and will be analysed in a future paper.

To check whether our observations suffered from resolved-out flux, we compared spectra extracted from the ALMA data with previous observations of the same lines taken with the APEX single antenna[46] as shown in Supplementary Fig. 1. For CO, we found that 66% of the flux was resolved out, whereas all the flux was recovered by ALMA for SiN. We were unable to make the same comparison for SiC, which has not been detected with APEX, or HC_3N, which was at best only tentatively detected with APEX[46]. Although only a third of the CO flux was recovered by ALMA, it is only smooth large-scale flux that is resolved out. This large-scale flux is mostly associated with smoother bulk outflows, whereas our analysis in the present work focuses on smaller structures in the wind—that is, the missing CO flux does not impede the present study.

Out of the other molecular lines discussed here and which have previously been observed, we found that about 28% of the flux in $H^{12}CN$ $J = 3 \rightarrow 2$ was resolved out (Supplementary Fig. 2). Some degree of lost flux was expected because this line was not observed with the most compact configuration of ALMA. The corresponding transition in $H^{13}CN$ was not observed with APEX[46] but as it was observed with the compact configuration of ALMA and shows more extended emission than $H^{12}CN$, we can assume very little, if any, flux was resolved out for $H^{13}CN$. For SiO, SiS and CS, most of the flux was recovered, with only about 10–20% lost, as can be seen in Supplementary Fig. 2, where we have compared the spectra of these three molecules and $H^{12}CN$ observed with APEX and ALMA.

The ^{13}CN emission in $N = 2 \rightarrow 1$ at 217 GHz (where N is the quantum number referring to the rotational angular momentum) has a low SNR. Therefore, to better determine the spatial distribution of ^{13}CN, we combined the two most intense components of the many possible fine- and hyperfine-structure transitions of the $N = 2 \rightarrow 1$ transition that span a 450 MHz wide range centred on 217.257 GHz. We extracted the channels in the calibrated visibility data in the frequency ranges corresponding to $\upsilon_{LSR} = -23 \pm 50$ km s^{-1} around each of the rest frequencies and combined the channel selections aligned in velocity. The combined dataset was assigned a fictitious rest frequency of 217.3055 GHz so that its central velocity corresponded to −23 km s^{-1}, and we then made an image cube from the stacked visibility data and analysed this following the same procedure as for the other data cubes. Finally, we checked the two multiplets of ^{13}CN listed in Table 1 individually for resolved-out flux and found that a little less than half of the flux was recovered for these lines.

For all the spectral lines studied here, except for ^{13}CN and NS, we fit soft parabola profiles[53]

$$F(\upsilon) = F_0\left(1 - \left[\frac{\upsilon - \upsilon_{cent}}{\upsilon_\infty}\right]^2\right)^{\gamma/2} \quad (1)$$

where υ_{cent} is the central velocity of the line profile and F_0 is the flux at the centre of the line. The parameters F_0, υ_{cent}, υ_∞ and γ are left as free parameters in the fit. Primarily, this is done to obtain the central line velocities, which are included in Table 1. The soft parabola profile was chosen over a Gaussian profile because the majority of the lines studied here show double-peaked emission and hence significantly deviate from Gaussian line profile shapes. ^{13}CN was excluded from this analysis because its hyperfine structure dominates its line profile, and NS was excluded because the spectrum is too noisy to obtain a reasonable fit. The central velocities of the lines were generally in agreement with the previously measured stellar LSR velocity of $\upsilon_{LSR} = -23$ km s^{-1} (refs. 21,46) and will be discussed in more detail in the following sections.

AGB angular diameter. We took the calibrated data for all ALMA configurations combined, excluding channels with line emission, and fit a uniform disk to the visibilities (as in ref. 54). This gave a diameter of 16.6 mas, containing 8.0 mJy. There was negligible ellipticity or displacement of the centroid. At millimetre wavelengths, a uniform disk is expected to be a better representation of stellar brightness distribution than a Gaussian distribution. The SNR is >100, suggesting submilliarcsecond precision, based on the nominal uncertainty of beam size divided by SNR, but taking into account possible irregularities in the stellar disk, we adopt a conservative uncertainty of 3 mas. The diameter of 16.6 ± 3mas is the size of the the surface where electron–neutral free–free emission dominates and is optically thick (at these wavelengths[55]) and corresponds to a radius of 3.3 ± 0.6 au at our adopted distance. We note that the resolution of the continuum image from the extended array is 21 × 24 mas (ref. 50), while for the combined continuum image it is 40 × 33 mas. The optical diameter is 11.6 ± 1.8 mas (ref. 25), 34% smaller than our value. A previous study[55] found that the millimetre-wave diameters of a small sample of AGB stars were 15–50% greater than the optical diameters, consistent with our finding. It has also been found that, in general, the millimetre-wave diameters of the ATOMIUM sample are 30–100% larger than the optical diameters[56].

SiN and SiC. The SiN line we observe towards W Aql ($N, J = 6, 13/2 \rightarrow 5, 11/2$) is a blend of three closely spaced hyperfine components separated by about 0.8 MHz and 0.5 MHz (Supplementary Fig. 1), and the frequency of the centroid is 262,155.78 MHz. The lower spin-rotation component ($N, J = 6, 11/2 \rightarrow 5, 9/2$) at 262.650 GHz falls just outside of the frequency range covered by our observations. The SiC line detected towards W Aql corresponds to the $J = 6 \rightarrow 5$ transition in the lowest fine-structure ladder $^3\Pi_2$ (ref. 57). The corresponding $J = 6 \rightarrow 5$ rotational transitions in the $^3\Pi_1$ and $^3\Pi_0$ upper fine-structure ladders fell between the frequency bands covered by our observations.

Neither SiN nor SiC were detected for any other stars in the ATOMIUM sample, all of which are oxygen-rich aside from one other S-type AGB star (π^1 Gru). SiC has been previously detected towards 12 carbon-rich AGB stars[58], but we found no studies of SiC in the envelope of an S-type AGB star. SiN has been previously detected towards W Aql[46] and only one other star: the nearby carbon-rich AGB star CW Leo[26], which is suspected to have a companion[59–61]. Spatially resolved submillimeter array observations towards CW Leo show the SiN mainly distributed in a shell-like pattern, with some brighter, asymmetric, emission to the southwest[62]. However, a detailed analysis of these observations has not yet been published and, consequently, we lack

detailed spatial information for SiN around other stars with which to compare our W Aql results. Spatially resolved SiC emission has also been observed towards CW Leo, for which SiC was not detected in the innermost regions of the CSE but rather in outer shells[63], possibly also showing some asymmetry to the southwest[62]. Further discussion of SiC distributions is given in 'SiN and SiC' in the 'Chemical modelling' section below).

The integrated intensity maps of SiN (Fig. 1a) and SiC (Extended Data Fig. 2a) show emission primarily north and east of the AGB star. The SiN emission has a higher SNR and is hence more readily analysed. Therefore, we have focused our analysis on SiN, but note that the SiC observations agree with the conclusions drawn from SiN.

We produced a series of position–velocity diagrams of SiN using a wide slit (total width 3″) to encompass all the emission seen in the zeroth-moment map (Fig. 1a). Using a narrower slit (such as 0.3″) resulted in a lower SNR in the position–velocity diagram, making an analysis more troublesome. We tested all possible slit angles passing through the position of the AGB star in increments of 5° and then 1° around the angles producing the most distinct position–velocity diagrams. The final slit position of 33° east of north was chosen on the basis of the clarity and intensity of the associated position–velocity diagram. Even though the slit angle was determined independently, we find that it passes through the present position of the F9 star (Fig. 1a). As shown in Fig. 1b, the position–velocity diagram of SiN shows an arc-like structure in position–velocity space, tracing a little more than half an ellipse centred on the AGB star. We fit a parabola to the points in the position–velocity diagram with intensities ≥3σ above the noise, weighted by the flux at those points. The peak of the parabola, plotted in white in Fig. 1b, is at −24.1 km s^{-1}, which is in agreement with the central velocity we find for the spectral line (Table 1). The emission distribution in the position–velocity diagram does not precisely follow the shape of the parabola, particularly at the negative offset and extreme velocity edges of the emission, so we also plot a partial ellipse based on the position of the parabola (using the centre and peak of the parabola and with the half-width along the velocity axis set to 14 km s^{-1}), which better follows the shape of the emission at the most extreme velocities. We followed a similar procedure for SiC to produce a position–velocity diagram and fit a parabola to the arc of emission (Extended Data Fig. 2b). For SiC, the peak of the parabola is at −23.5 km s^{-1}. We similarly plot a partial ellipse based on the parabola fit (velocity half-width 13 km s^{-1}), which also follows the emission at the most extreme velocities more closely.

In concert, the zeroth-moment map and the position–velocity diagram show that the SiN emission forms an arc to one side of the system, which is close to edge-on or perpendicular to the plane of the sky. We also plot the summed blue and red channels of SiN separately in Supplementary Fig. 3. Owing to the noisy edges of the contours, we could not conclusively determine whether there is an offset between them along the axis connecting the present positions of the AGB and F9 stars. Consequently, we take the orbital inclination of the system to be $i = 90 \pm 7°$, where the uncertainty is derived from the beam size. The lack of spherical symmetry in the SiN emission suggests a spatial dependence for the formation of SiN, as discussed in 'Chemical modelling' below and depicted in Extended Data Fig. 1. Despite the lower SNR of the SiC emission, the similar structure seen in the position–velocity diagram for SiC indicates a similar formation history for both SiN and SiC.

NS. Two rotational transitions of NS were covered by the ATOMIUM observations—the $J = 11/2 \rightarrow 9/2$ hyperfine split multiplets in the $^2\Pi_{1/2}$ and $^2\Pi_{3/2}$ spin–orbit fine-structure components. Neither rotational transition was detected in spectra centred on the AGB star. However guided by predictions from chemical models (see 'NS' in 'Chemical modelling' below and ref. 4), we conducted a more careful search for NS. The transition in the ground $^2\Pi_{1/2}$ component lies very close to the edge of our frequency band and is difficult to discern in the spectra, but we successfully detected it in the zeroth-moment map (Extended Data Fig. 3a). The corresponding rotational transition in the upper ($^2\Pi_{3/2}$) spin–orbit component at 255.597 GHz (ref. 64) lies about 322 K above the ground state and is estimated to be about three times less intense. We found an upper limit for the $^2\Pi_{3/2}$ component of 3σ = 0.047 Jy per beam km s^{-1} in a zeroth-moment map that covers the same velocity extent as that observed for the ground $^2\Pi_{1/2}$ component.

Before this, NS had been detected towards just one AGB star, the oxygen-rich IK Tau[65,66] (and notably has not been detected towards the nearby carbon star CW Leo). An enhanced abundance of NS is expected to be a good tracer of binarity for S-type or oxygen-rich AGB stars with main-sequence or white-dwarf companions[4]. We checked the ATOMIUM data for NS detections towards other sources. While we could rule out NS detections in several sources, for a selection of others (the AGB stars IRC+10011 and IRC−10529, and the red supergiants VX Sgr and AH Sco) we could not conclusively confirm or rule out the presence of NS for three reasons. First, the $^2\Pi_{1/2}$ component at 253.968 GHz lies close to the edge of an observed band in frequency space, meaning that the line may be partially truncated, as it is for W Aql. Second, that line lies close to the SO_2 ($J_{K_a,K_c} = 15_{6,10} \rightarrow 16_{5,11}$) line at 253.957 GHz (where the quantum number K_a refers to the projection of the total angular momentum, J, along the axis of the least moment of inertia, a, and K_c refers to the projection of J along the axis of the largest moment of inertia, c) and, for the oxygen-rich sources mentioned above, we cannot easily disentangle which emission comes from SO_2 and which might come from NS. (This is not a problem for W Aql, towards which no SO_2 lines are detected, including more intrinsically intense lines covered by our observations.) Disentangling NS and SO_2 emission is made more difficult because both lines are truncated by the edge of the observed band. Finally, we also checked for emission from the $^2\Pi_{3/2}$ component at 255.597 GHz but could not confirm the detection of this line of NS. For the AGB stars mentioned above, we did not detect emission above the noise of our observations. However, if we take the expected intensity of the $^2\Pi_{3/2}$ component to be a third that of the truncated and possibly blended line around 253.968 GHz, we determine that the expected intensity is below the noise of our observations. For the two red supergiants, the potential NS line is blended with a high-energy SO_2 line, ($J_{K_a,K_c} = 51_{7,45} \rightarrow 50_{8,42}$) at 255.595 GHz. Therefore, to determine whether NS is present in these or other ATOMIUM stars, observations of other NS transitions that do not overlap with SO_2 or other molecular lines are required.

In addition to the zeroth-moment map, we also constructed a position–velocity diagram of NS (Extended Data Fig. 3b). The only significant region of emission that is 3σ above the noise in the position–velocity diagram is located on the red side of the diagram and not notably offset from the position of the AGB star. This is close to some of the most intense regions seen in the SiN and SiC position–velocity diagrams. We note that because the NS line is on the edge of the observed band, some redder emission might not have been recovered by our observations. To emphasize that this is a true detection of NS rather than a misidentified line, we plot the spectrum of the NS line with the spectra of the SiN and SiC lines in Extended Data Fig. 3c. All lines were extracted from circular apertures with radii 0.25″, centred on the continuum peak, which was chosen to best show the NS line. All three lines have a double-peaked profile, with SiN and NS having a brighter red peak than blue peak. Although the NS spectrum is truncated at −9 km s^{-1}, it can be seen rising in a profile similar to the SiN and SiC red peaks. Deeper observations targeting NS would confirm this behaviour.

HC_3N. Four successive rotational lines of HC_3N were detected towards W Aql as part of the ATOMIUM project (Table 1). Before this, the three lowest transitions in this group were tentatively detected towards W Aql with APEX[46]. A comparison of the lines tentatively detected with APEX and our ALMA data suggests that the ALMA data do not suffer from resolved-out flux. It should also be noted that the $J = 25 \rightarrow 24$

and $J = 27 \rightarrow 26$ lines were observed with all three ALMA configurations (including the compact configuration), while the $J = 26 \rightarrow 25$ and $J = 28 \rightarrow 27$ lines were observed with only the extended and medium configurations. All four lines have similar intensities when the spectra are extracted from our combined data cubes, as expected for lines with similar energies (the lower-level energies span 131–165 K) and Einstein A coefficients. Taken together, our observations confirm that there is no flux resolved out for the observations with the medium configuration. Most of the HC_3N flux is located south and west of the present location of the AGB star (Fig. 4 and Extended Data Fig. 6), in direct contrast to the observed flux of SiN and SiC (Fig. 1 and Extended Data Fig. 2).

CO. The CO $J = 2 \rightarrow 1$ line has the most extended emission distribution of all the spectral lines observed towards W Aql as part of the ATOMIUM programme. Although only one-third of the flux was recovered by ALMA (see 'Data reduction' above), our analysis focuses on smaller structures in the wind, which are not affected by resolved-out flux.

Many complex structures are seen in the CO emission, making a definitive analysis difficult. We first examined the inner wind region, where an overdensity thought to be (part of) a spiral arm was reported[23]. In this region, we found an approximately circular structure that corresponds very well to the location of the overdensity and to the radius of the observed SiN emission. In Fig. 5b, we plot the CO emission close to the AGB star using a logarithmic colour scale and overplot the contours of SiN (as seen in Fig. 1a) and a black circle to guide the eye to the roughly circular structure. The radius of this circle is 1.35″ and its centre is 0.1″ to the north of the AGB star.

Additional circular structures in the CO emission were more difficult to concretely identify, so we plotted the radial intensity against anticlockwise angle to help find such structures (Extended Data Fig. 8). Circular structures centred on the AGB star would appear as horizontal lines in such a plot, whereas off-centre circular structures appear as sinusoids. Using the angle–radius plot, we found off-centre circles corresponding to: red, the edge of the bright central region with a radius of 4″; pink, a circular structure surrounding this region, with a radius of 5. 5″; and white, another circle with radius 10.75″ that falls close to the edge of the ALMA field of view. The white circle is offset in the same direction (north) as the black circle. Note that the sinusoid corresponding to the black circle identified above can be seen more clearly in the angle–radius plot when it is zoomed in on the structures closer to the AGB star (Extended Data Fig. 8, bottom). In Supplementary Fig. 4 we show the same angle–radius plots as in Extended Data Fig. 8, but exclude the coloured lines highlighting the aforementioned structures.

We plot all these circular structures in Fig. 5a over the averaged central three channels of the CO emission. From our analysis with the hydrodynamic model (see 'Hydrodynamic simulations') we come to the conclusion that the black and white circles were formed during the periastron passage of the two stars, in which case they are expected to be offset to the opposite side of the AGB star from the F9 star. The periastron origin of the black circle is also supported by its co-location with the SiN arc. The red and pink circles, and other irregular structures, are not directly reproduced by the hydrodynamic model, but this is probably because of limitations in the model, including missing physics around pulsations and the wind launching mechanism (see discussion in 'Hydrodynamic simulations'). Significantly, the wind is launched at 13 km s^{-1} in the hydrodynamic model, whereas previous studies assume a much lower initial velocity of 3 km s^{-1}, close to the sound speed. This discrepancy prevents a dense inner region forming in the hydrodynamic model, such as the region encircled in red in Fig. 5a. We also note that the formation timescales of the red and pink circles and other neighbouring features are $\lesssim$300 years (taking β-law wind acceleration into account) and do not match the longer timescale of the binary orbit inferred from resolved imaging (see 'Spatially resolved imaging').

When comparing these circular structures with the lower-resolution (0.47 × 0.41) ALMA observations of CO (3 → 2) around W Aql[22], in which several circular arcs were identified, we find that our red, pink and white circles correspond to the locations of those arcs. In particular, the outermost arc in the earlier data corresponds well with our white circle, and the innermost two arcs (north and southwest) match the position of our red circle. The circular region of higher flux that we have indicated in red in Fig. 5a for CO (2 → 1) also corresponds to the region of higher flux seen in CO (3 → 2). The remaining arcs identified by ref. 22 match our pink circle and a few other structures seen in our data that do not form full circles. Note that our black circle is too small to be well resolved in the earlier data.

The shell-like structures seen around W Aql have some similarity to previously reported shells around the carbon star CW Leo, which are also not perfectly centred on the AGB star[59,67,68]. Many more shells are seen for CW Leo than W Aql, probably in part because CW Leo is closer, making emission easier to detect. Studies of the CW Leo shells have concluded that they could be caused by an eccentric binary orbit seen perpendicular to the line of sight, and assumed some periods of enhanced mass loss[59,68]. Our hydrodynamic models do not assume a variable mass-loss rate (see 'Hydrodynamic simulations') but still form shell-like structures when viewed perpendicular to the orbital plane. This does not mean that the mass-loss rate of W Aql cannot be variable—indeed variable or anisotropic mass-loss might account for some of the other structures seen in the CO emission. The possible effects of variable and anisotropic mass loss are discussed in more detail in 'Anisotropic mass loss' in Supplementary Information.

We also analysed the higher- and lower-velocity channels of the W Aql CO emission, particularly in comparison with the hydrodynamic model. A long-standing unexplained phenomenon is excess emission in the blue wings of the line profiles of CO and other molecules towards W Aql[21]. In our ALMA observations of CO (Extended Data Fig. 7), it is clear that the blue- and redshifted channel maps are not symmetric around the LSR velocity. The blue channels (−37 km s^{-1} to −30 km s^{-1}) show slightly asymmetric emission, with an elongation in the southwest direction, while the red channels (−14 km s^{-1} to −8 km s^{-1}) show emission with more circular symmetry. These differences in shape account for the excess emission in the blue wing of the line profiles. We also compared these different emission distributions with the equivalent distributions produced by the hydrodynamic model after processing by the radiative transfer code MCFOST (see 'Hydrodynamic simulations'). In Extended Data Fig. 9, we plot two CO channels equidistant from the LSR velocity and the equivalent model channels. The model also shows the elongated CO emission for the blue channel and the more circular emission for the red channel, reinforcing that the asymmetry arises from the companion's interactions with the AGB wind.

Other molecular species. The species SiO, SiS, HCN and CS are commonly observed in the envelopes of many AGB stars of all chemical types[37,69–71]. All four molecules were observed previously towards W Aql at a lower spatial resolution of 0.55″ × 0.48″ (ref. 23) and were analysed using radiative transfer models under the assumption of spherical symmetry. Our observations were obtained at a much higher angular resolution and the emitting regions for all four molecules are very well resolved (Table 1 and Fig. 3). The increased angular resolution allows us to observe asymmetries in the emission. The emission from all four molecules is more extended to the northeast than to the southwest. This is a qualitatively similar anisotropy to that seen in SiN, but unlike SiN, the more common species show roughly spherically symmetric emission across a much wider fan-like region, running clockwise from east to northwest (Fig. 3). In the context of an eccentric binary companion, we interpret this not as enhanced production of SiO, SiS, HCN and CS triggered during the periastron passage (as we conclude in the cases of SiN and SiC), but as enhanced destruction through photodissociation of SiO, SiS, HCN and CS by the F9 companion, during the large portion of the orbital period it spends to the southwest of the AGB star. If this were not the case, we should see significantly less emission to the

northwest and southeast (that is, the other regions where we do not see SiN), but the contours in Fig. 3 have similar extents from the southeast to northeast to northwest. This is especially apparent in plots of the central channels of SiS and CS, shown in Extended Data Fig. 4, which show significantly reduced emission near the F9 star as opposed to on the opposite side of the AGB star. For CS, the 3σ contour centred on the AGB stars extends out to 0.33″ (~2×10^{15} cm) from the AGB star in the direction of the F9 star, compared with 0.71″ (~4×10^{15} cm) in the opposite direction. For SiS, the 3σ contour centred on the AGB star extends out to 0.09″ (~5×10^{14} cm) in the direction of the F9 star and out to 0.23″ (~1×10^{15} cm) in the opposite direction.

Furthermore, the position–velocity diagrams of CS, SiO and $H^{13}CN$, taken along the same axis as we used for SiN and plotted in Supplementary Fig. 5, show the brightest emission spatially close to the AGB star, not in an arc as for SiN or SiC. They also show that the emission is consistently less extended and less intense on the side of the AGB star where the F9 star is located. Notably, this is not the case for CO, also plotted in Supplementary Fig. 5, which does not show evidence of photodissociation by the F9 star, as expected given its stronger bond energy and self-shielding[72]. The reduced emission seen in the spectra around the F9 star (see 'Molecular emission around F9 star' below) is further evidence of most molecules being destroyed by the F9 flux.

Another molecular species that shows highly asymmetric emission around W Aql is ^{13}CN. Although the main isotopic species, ^{12}CN, was not covered in the ATOMIUM observations, it has previously been observed towards W Aql with the Institut de Radioastronomie Millimétrique (IRAM) 30 m telescope[73]. We find that, unlike the common molecular species discussed above, the ^{13}CN emission is mainly seen on the opposite side of the AGB star. As can be seen from the zeroth-moment maps of $H^{13}CN$ and ^{13}CN in Fig. 4, the ^{13}CN emission is mainly observed where the $H^{13}CN$ emission is absent, which is consistent with the generally accepted notion that CN is a photodissociation product of HCN[27]. This is discussed in more detail in 'Chemical modelling'.

Molecular emission around F9 star. We extracted spectra in circular apertures of radii 100 mas (corresponding to a projected radius of 40 au) centred on the F9 star to check for anomalous emission. Very few lines were detected above the noise in these spectra, with lines originating only from CO, SiO, CS and HCN. We compared the line profiles extracted from the region around the line-of-sight position of the F9 star with profiles of the same size aperture centred on the AGB star and plot comparisons for CS, HCN and SiO in Extended Data Fig. 5. Notably, the F9-centred line profiles show relatively more flux in the blue channels and less flux in the red channels than the corresponding AGB-centred profiles. The F9-centred profiles also tend to have relatively less emission in the channels close to the LSR velocity. From this, we can estimate that the F9 star is located, spatially, in the region that corresponds to gas with velocities close to the AGB stellar LSR velocity, that is, gas with motions approximately in the plane of the sky. This estimate is possible because, in an expanding CSE, the velocity axis has a correspondence to the line-of-sight spatial axis (see, for example, ref. 68). Although this does not say anything about the present velocity of the F9 star (it need not be moving at the same velocity as the AGB circumstellar gas that it is moving through), it is consistent with the stars being in a highly eccentric orbit, as the present relative motion of the F9 star would be predominantly in the plane of the sky rather than into or out of the plane of the sky, and would, in any case, have a low absolute total velocity of ~2 km s^{-1}.

We also checked the shape of the line profiles extracted for an equivalent 100 mas aperture on the opposite side of the AGB star from the F9 star (at the same projected separation) and found that those line profiles were more similar to the AGB-centred line profiles than those centred on the F9 star (Extended Data Fig. 5). Finally, we note that the phenomenon of the blue peaks being brighter than the red peaks for the F9-centred profiles is the opposite of what we see for the line profiles of SiN and NS (Extended Data Fig. 3c) centred on the AGB star. This is easily explained by the different formation/destruction times of the two groups of molecules: SiN and NS formed during the periastron passage, whereas CS, HCN and SiO are currently being (partly) photodissociated by the UV flux of the F9 star.

The intensity of the UV flux from the F9 star is proportional to the inverse square of the distance from the star. This means that the apparent UV flux close to the AGB star, taking the projected separation of 194 au, is 24 times less than the flux 40 au from the F9 star, and the flux on the opposite side of the AGB star (at a distance of 388 au) is 94 times weaker. At a distance of 10 au from the F9 star, close to the distance between the two stars during periastron, the UV flux would be 380 times higher than the flux on the same region at the present stellar separation. Note that these values are rough estimates and do not include, for example, UV extinction by dust, which would further reduce the UV flux for larger distances when there is more dust between the F9 star and the region of interest.

Radiative transfer modelling

Radiative transfer calculations were undertaken to approximate the abundance of SiN in the arc seen in Fig. 1. To achieve this, we extracted the SiN spectra from round apertures with radii of 0.25″, evenly spaced with centres separated by 0.3″ starting from the continuum peak and moving outwards along the north 33° east line passing through the emission. The set-up is shown in Supplementary Fig. 6a, where the regions are labelled from A to H. The aperture size was chosen to not lie outside of the detected SiN emission. Furthermore, these regions are centred along the same axis for which we found the best PV diagram (Fig. 1b and 'ALMA results'), so they are unlikely to overlap with the edges of the SiN emission. Therefore, by considering only spectra from the regions plotted in Supplementary Fig. 6c, we can use a one-dimensional (spherically symmetric) radiative transfer model to compare equivalent synthetic spectra and determine the SiN abundance distribution in the arc, which can also be approximated by a wedge of a spherical shell. Our approach is viable because the SiN emission is expected to be optically thin (and indeed we find a peak tangential optical depth of $\tau \lesssim 0.2$ in the model) and emission in other parts of the spherically symmetric model (at different velocities) is not expected to interact with emission in the regions of interest.

We used the accelerated lambda iteration method (ALI[74]), which has been previously used to determine the abundances of various other molecules in the CSE of W Aql[23,24]. We use previously determined circumstellar parameters for W Aql[21], including a radial temperature profile, the mass-loss rate of $3 \times 10^{-6}\ M_{\odot}\ yr^{-1}$ (ref. 22) and a velocity profile described by ref. 21

$$v(r) = v_0 + (v_\infty - v_0)\left(1 - \frac{R_{in}}{r}\right)^{\beta} \quad (2)$$

with $v_0 = 3$ km s^{-1} the velocity at the dust condensation radius, $R_{in} = 2 \times 10^{14}$ cm, $v_\infty = 16.5$ km s^{-1} the terminal expansion velocity and $\beta = 2$. The key stellar and circumstellar parameters are summarized in Supplementary Table 1. We also included a previously implemented overdensity[23], which was found to improve the radiative transfer model fit for ALMA observations of CS and $H^{13}CN$ at lower resolutions[23]. The overdensity relates to an increase in the H_2 number density by a factor of five between the radii of 8×10^{15} cm and 1.5×10^{16} cm (Supplementary Fig. 6), and is in good agreement with the location of a region of increased CO emission (a good tracer of density) traced by the black circle in Fig. 5b. (Previously the overdensity was thought to be part of an unresolved spiral arm[23].)

We include SiN energy levels up to $N = 20$ in the ground vibrational state and the 59 radiative transitions connecting those levels. The energy levels and Einstein A coefficients were calculated using CALPGM[75] and take fine structure into account but neglect the closely

spaced hyperfine structure, which is not resolved in our observations. There are no calculated or measured collisional (de)excitation rates for SiN, so instead we use the rates calculated for CN–He (ref. 76), scaled by 1.37 to account for the different reduced mass of the SiN–H_2 system.

On the basis that the different extraction apertures shown in Supplementary Fig. 6a probe different regions of the SiN distribution, we tried various shapes for the radial distribution of SiN abundance in an attempt to reproduce the observed distribution of SiN. These included a constant abundance, step functions of different constant SiN abundances, and Gaussian shells of various widths and positions. We also left the inner and outer radii of the SiN-emitting region as free parameters. We found that while the two apertures farthest from the continuum peak, G and H, were sensitive to the outer radius and outer abundance of the SiN distribution, as expected, the inner apertures, A to D, were also sensitive to these properties, which affected the heights of the emission peaks in their double-peaked profiles. Conversely, the choice of inner radius and the innermost abundance of SiN mainly affected the heights of the line centres for apertures A to C. These dependencies were expected given the observed wedge of SiN emission.

Our best-fitting model has a constant outer SiN abundance relative to H_2 of 1.5×10^{-7}, from 6×10^{15} cm to 2×10^{16} cm, and a power-law distribution in the inner part, starting from an inner radius of 1.5×10^{15} cm. This distribution is plotted in Supplementary Fig. 6b, where we also show the H_2 number density over the same region, including the aforementioned overdensity. As can be seen from Supplementary Fig. 6b, the extended peak of the SiN abundance spans the region of the H_2 overdensity. This further supports the idea that both phenomena have a common cause, which we postulate is the periastron passage of the AGB and F9 stars. The line profiles generated by the best-fitting models are plotted with the spectra in Supplementary Fig. 6c.

Chemical modelling

The recent results of ref. 4 focus on the effect of close companions on the circumstellar chemistry. In Supplementary Fig. 7, we reproduce their results for stars with similar wind density to W Aql (model $\dot{M}/v_\infty = 2 \times 10^{-6}\ M_\odot\ \mathrm{yr}^{-1}/(\mathrm{km\ s}^{-1})$ compared with W Aql $\dot{M}/v_\infty = 1.8 \times 10^{-6}\ M_\odot\ \mathrm{yr}^{-1}/(\mathrm{km\ s}^{-1})$), showing the predicted abundances of SiN, SiC and NS for both oxygen- and carbon-rich outflows, with and without an F9-like companion. The companion is approximated by a black body at 6,000 K and does not explicitly include chromospheric UV photons. However, observations of W Aql with the Galaxy Evolution Explorer (GALEX) in 2006 reveal a detection in the near UV (22.16 mag, 1,771–2,831 Å) but not in the far UV (>22.5 mag, 1,344–1,786 Å)[77], the latter being more important for breaking molecular bonds. If additional chromospheric UV flux is generated around periastron, as has been suggested for other types of star in close binary systems[78,79], then this would mainly serve to increase the products of UV photochemistry, such as Si^+, which are discussed below. An excessively large UV excess during periastron could possibly destroy a larger variety of molecular species than predicted, but this would occur over a relatively short timescale (Extended Data Table 1 and 'Orbital solutions') and would not preclude further chemical interactions, including many of the formation channels discussed below, once the stars moved further apart.

SiN and SiC. The chemical models[4] show that, in the absence of a companion, the SiN radical is expected to form in a shell-like distribution, with a peak abundance at a radius of around 10^{16} cm from the AGB star (Supplementary Fig. 7). The main formation pathway of SiN is via the measured reaction

$$\mathrm{NH_3 + Si^+ \rightarrow SiNH_2^+ + H} \quad (3)$$

where NH_3 is assumed to be a parent species that is formed close to the AGB star and, through observations, has been found to have a peak abundance of ~2×10^{-5} relative to H_2 (ref. 21). This is followed by dissociative recombination

$$\mathrm{SiNH_2^+ + e^- \rightarrow SiN + H_2} \quad (4)$$

The main source of Si^+ is the photodissociation of SiS, that is

$$\begin{aligned} \mathrm{SiS + h\nu} &\rightarrow \mathrm{Si + S} \\ \mathrm{Si + h\nu} &\rightarrow \mathrm{Si^+ + e^-} \end{aligned} \quad (5)$$

which occurs very readily in the presence of the F9 companion (Supplementary Fig. 8) and the UV photons it emits[4]; and is confirmed in our observations (Fig. 3 and Extended Data Fig. 4), because SiS is noticeably depleted to the southwest at the present position of the F9 star. We also note that there are minor formation pathways for SiN forming from HNSi and SiC, but both pathways also depend on NH_3 and Si^+ and hence are also affected by UV photons driving the formation of Si^+.

In the chemical models[4] (Supplementary Fig. 7), the main difference in the SiN abundance distributions between oxygen- and carbon-rich stars with the same wind density and no companion is that the peak relative abundance of SiN is predicted to be ~10^{-8} for the oxygen-rich star and ~10^{-7} for the carbon-rich star. W Aql is an S-type star whose chemistry is presumed to be intermediate between the typical carbon-rich and oxygen-rich stars[21], and that is what has been found for the abundances of HCN in S-type stars[69]. However, we find that the peak abundance of SiN in W Aql (1.5×10^{-7} relative to H_2, see 'Radiative transfer modelling' above) is in good agreement with that predicted for a carbon-rich star, although the asymmetric distribution of SiN implies that the formation process is anisotropic.

Reference [4] focused on the impact of UV photons from stellar companions on the circumstellar chemistry of AGB stars. It included a set of models with a main-sequence companion with a stellar effective temperature of 6,000 K that is comparable to the temperature of an F9 dwarf[80] (reproduced in Supplementary Fig. 7). The radial abundance profile of SiN is significantly altered by the companion—that is, the peak abundance of SiN in both the carbon- and oxygen-rich winds is higher, and the abundance of SiN in the inner part of the wind is also higher. For the oxygen-rich outflow, the inner abundance of SiN is higher at ~10^{-7}, and it remains relatively constant until it begins to decrease at around 10^{16} cm; SiN does not show a shell-like distribution, as it would in the absence of a companion, but rather a parent-like distribution with a high inner abundance followed by a Gaussian decline caused by photodissociation driven by the interstellar radiation field. For the carbon-rich outflow, a shell-like distribution is seen in the presence of the companion, but the peak abundance is higher (~10^{-6}) and the inner abundance of SiN is several orders of magnitude higher (~2×10^{-9} relative to H_2), than it would be if the companion were not present. An underlying assumption in these models is that the companion star is always close to the AGB star[4]. However, this is not the case for W Aql, as the projected distance between the F9 and AGB stars is presently 194 au or 2.9×10^{15} cm, rather than 2–5 $R_\star$ (4×10^{13}–10×10^{13} cm) as assumed in the chemical models[4]. A highly elliptical orbit, during which the F9 star passes within a few stellar radii of the AGB star, could result in the asymmetric emission by SiN that we see in Fig. 1, if the F9 star only drove the production of SiN while it was sufficiently close to the AGB star. In this instance, the temporary close proximity of the two stars is relevant, because the wind region close to the AGB star is the densest and the chemical reactions will occur more readily. For example, at 5 au from the AGB star, the H_2 number density is 3×10^9 cm^{-3}, whereas at the current projected distance of the F9 star, the number density is four orders of magnitude smaller, at 3×10^5 cm^{-3}. Because the rates of chemical reactions generally depend on (the square of the) number density, a lower number density results in a corresponding decrease in reaction rates, and hence much lower SiN production. Even very fast periastron interactions (Extended Data Table 1) are still long enough

to produce SiN, particularly as, for example, the photoionization of Si to Si^+ (equation (5)) proceeds very quickly in the presence of the companion.

Once formed, we expect SiN to persist in the expanding CSE until it is photodissociated by the interstellar radiation field, based on chemical modelling[4] and because it is not expected to participate in the formation of dust or other molecular species. In general, the photodestruction timescale of a molecule being dissociated by the interstellar radiation field depends on the photodissociation rate for that molecule and on the extinction, with higher extinctions meaning that fewer photons will penetrate to that region. This is taken into account in the chemical models and accounts for the drop off in abundance in the outer regions of the CSE (Supplementary Fig. 7), which, for SiN, agrees with the location of the drop off we found from radiative transfer modelling (see 'Radiative transfer modelling'). The additional UV photons originating from the F9 star have only a relatively local effect on the chemistry of the CSE; as discussed in 'Other molecular species' and 'Molecular emission around F9 star' in 'ALMA results' and shown in Fig. 3 and Extended Data Fig. 5, the F9 star contributes to photodissociation of molecules in its vicinity, but not on the opposite side of the CSE.

SiC behaves in a broadly similar way to SiN in the chemical models, with and without the inclusion of a main-sequence companion[4] (Supplementary Fig. 7, middle). For both carbon- and oxygen-rich CSEs without a companion, SiC is expected to be distributed in a shell around the star, albeit with a more shallow gradient on either side of the peak than for SiN. For the carbon-rich star with a density similar to W Aql, the peak abundance of SiC is located at ~10^{16} cm from the AGB star and is found to be ~10^{-6} relative to H_2, while for the oxygen-rich CSE, the peak of ~5×10^{-9} is found slightly farther from the star at ~ 3×10^{16} cm. The presence of an F9-like companion alters the SiC distribution in a similar way as for SiN, changing it from a shell-like distribution to a more centralized distribution. The abundance in the inner part of the distribution (that is, in the region from the inner edge of the model to ~10^{16} cm) increases up to ~2×10^{-5} for the carbon-rich CSE; and ~5×10^{-9} for the oxygen-rich CSE, where there is previously negligible SiC in this region without a companion (Supplementary Fig. 7).

Analogous to SiN (equations (3) and (4)), SiC mainly forms via

$$\begin{aligned} CH_3 + Si^+ &\rightarrow SiCH_2{}^+ + H \\ SiCH_2{}^+ + e^- &\rightarrow SiC + H_2 \end{aligned} \quad (6)$$

with the same source of Si^+ as explained in equation (5). CH_3 is formed either via photodissociation of CH_4 or through the successive hydrogenation of C. The former pathway is dominant for carbon-rich CSEs, while the latter is more likely in oxygen-rich CSEs. For an S-type star such as W Aql, both pathways may contribute to CH_3 formation.

The formation of both SiN and SiC is driven by Si^+, which forms through the photoionization of Si (equation (5)). In Supplementary Fig. 8, we plot the predicted abundances of Si^+ with and without the presence of the F9 companion[4]. While the abundance of Si^+ naturally rises in the outer part of the envelope (beyond ~10^{16} cm), owing to the interstellar radiation field, the inner abundance rises significantly in the presence of an F9-like companion. We note that although the abundance of Si^+ rises to 10^{-9} to 10^{-7}, for oxygen- and carbon-rich CSEs, respectively, this is still significantly less than the total abundance of Si (6.5×10^{-5} relative to H_2, assuming solar elemental abundances[81]), meaning that the photoionization process driven by the F9 star is not expected to ionize all the Si.

NS. In the absence of a companion, NS is expected to form in a shell with a peak at about 10^{16} cm (ref. 4). For a carbon-rich CSE, the addition of an F9 companion does not cause a significant difference in the NS distribution. For an oxygen-rich CSE, however, the chemical model with an F9-like companion predicts a higher abundance of NS by almost an order of magnitude and significantly changes the shape of the distribution, resulting in a high abundance of NS in the inner wind (~10^{-6}, which decreases from around 5×10^{15} cm).

NS is formed via the photodissociation of N_2 (ref. 4)

$$\begin{aligned} N_2 + h\nu &\rightarrow N + N \\ N + HS &\rightarrow NS + H \end{aligned} \quad (7)$$

Even though the rate of photodissociation of N_2 is relatively low because of the strong bond, the abundance of N_2 is thought to be high (4×10^{-5} relative to H_2 (ref. 82)). Therefore, even if only ≤1% of N_2 is destroyed, enough N is liberated to form NS[4]. The predicted abundance distribution of N, taking into account the presence of an F9-like companion, is plotted in Supplementary Fig. 8. The detection of NS is tentative (Extended Data Fig. 3), but its co-location with the brightest region of SiN (especially in the position–velocity diagram; Fig. 1b) and the predictions of chemical models that include an F9-like companion[4] (Supplementary Fig. 7), suggest that NS was probably formed during the periastron passage of the W Aql system, when the F9 star irradiated part of the inner wind.

HCN, CN and HC_3N. HCN, CN and HC_3N are closely linked species that have a wide astronomical literature in the context of the cyanopolyyne ($H-(C\equiv C)_n-C\equiv N$) family of molecules. HCN is a parent species formed close to the star[82] and CN has long been known to be a photodissociation product of HCN[27]. At low temperatures (below 800 K (ref. 83)), where HC_3N is seen towards W Aql, the main formation pathway for HC_3N is from the two parent species HCN and C_2H_2 (refs. 83,84):

$$\begin{aligned} HCN + h\nu &\rightarrow CN + H \\ CN + C_2H_2 &\rightarrow HC_3N + H \end{aligned} \quad (8)$$

For most molecular species, chemical fractionation of isotopologues is expected to be negligible around AGB stars. Hence, we can use the observations of $H^{13}CN$ and ^{13}CN to understand the formation of $H^{12}C_3N$. For the rest of this section, we omit the isotope labels. As can be seen in Fig. 4, CN is preferentially detected on the side of the CSE where the F9 star is currently located, coinciding with a region of HCN depletion. We refer to this phenomenon as depletion because it aligns well with the location of the F9 star and of CN, and because the extent of HCN to the northeast agrees well with the predicted extent of HCN in the chemical models, in the absence of a companion[4] (see also discussion in 'SiO, SiS and CS' below). Although the F9 star passes close to the AGB star during the eccentric orbit, the amount of time the stars spend close together is relatively short, ≲2% of the orbital period (Extended Data Table 1 and 'Orbital solutions'), compared with the amount of time the F9 star spends to the southwest of the AGB star, providing a relatively consistent source of UV radiation. A similar pattern of molecular depletion is seen for SiO, SiS and CS (Fig. 4) for the same reason.

HC_3N is present on the same side of the CSE as CN (Fig. 4 and Extended Data Fig. 6), from which we can infer that the presence of CN preferentially drives the formation of HC_3N to the south and west of the AGB star. Although HC_3N has long been known to be present around carbon stars, W Aql is the only S-type AGB star towards which HC_3N has been studied. Although HC_3N and other carbon-bearing molecules such as C_2H and SiC_2 seem to indicate a carbon-rich circumstellar chemistry for W Aql[46], the spectroscopic classification of W Aql marks it as an S-type star[18]. It is possible such carbon-bearing species are common around (some subset of) S-type stars more generally, but, so far, W Aql has been studied in the most detail.

HC_3N has been most widely studied around the nearby carbon star CW Leo, where it is located mainly in a spherical shell centred on the star, well resolved in ALMA observations and as predicted by chemical models[4,83], with some enhancement in the inner regions which is thought to be driven by a companion[61]. We do not see a symmetric shell-like distribution of HC_3N around W Aql (Extended Data Fig. 6);

however, we interpret the HC_3N that we observe as part of a broken shell that is formed where CN is more abundant.

Although we expect that some CN—and subsequently HC_3N—would have formed during or as a result of the periastron passage of the W Aql binary, these two molecules will have expanded with the CSE (as SiN has), to a radius that is comparable to the black circle in CO (1.35″; Fig. 5). At this distance from the AGB star, some CN might remain but is not easily detectable above the noise in our observations. Some traces of ^{13}CN are seen north of the AGB star in Fig. 4, but the SNR of the ^{13}CN observation is relatively low, partly because more than half of the flux was resolved out (Table 1). We also note that ^{12}CN, expected to be around 10 to 30 times more abundant[21], was not covered by our observations. Hence, we cannot conclusively determine how much CN is present to the northeast of the AGB star, relative to the apparently higher abundance of CN to the southwest, closer to the F9 star. More sensitive observations, ideally covering ^{12}CN and not subject to resolved out flux, would be required to fully understand the distribution of CN around W Aql. We note the CN we expect to be co-located with SiN, which should have formed during the periastron interaction, is harder to detect than SiN is, for several reasons relating to the molecular physics and energy-level distributions of the two molecules. Although SiN is also subject to hyperfine splitting, the three most intense hyperfine components are separated by only ~1.4 MHz, a tiny separation compared with the 30 km s^{-1} (22 MHz) width of the SiN line, as can be seen in Supplementary Fig. 1b. In comparison, the spectrally resolved hyperfine splitting of CN results in especially wide lines that have lower peak intensities than they would in the absence of hyperfine splitting. This makes them harder to detect above the noise. Furthermore, the dipole moment of SiN is around 1.8 times larger than for ^{13}CN (refs. 85,86), resulting in intrinsically brighter lines for SiN.

The excitation conditions of the observed lines of HC_3N are such that we do not expect to see these same lines of HC_3N lines farther out in the wind than we do in Fig. 4 (<0.5″). Therefore, if any HC_3N is present at a radius of 1.35″ from the AGB star, we would not have detected it in the present observations. We predict that HC_3N in this region could be detected in more sensitive observations covering lower-energy transition lines.

SiO, SiS and CS. The emission seen from SiO, SiS and CS (Fig. 3)—like that of HCN—indicates photodissociation driven by the F9 star during its time to the southwest of the AGB star, unlike SiN, SiC and NS whose formation is driven by the brief but intense addition of UV photons from the F9 star to the inner CSE during the periastron passage. This process works because it is the products of photodissociation and photoionization that go on to form the observed SiN, SiC and NS. However, this is not the case for SiO, SiS, CS and HCN, which are considered to be parent species in most chemical models[4,82]. Accordingly, the effect of a stellar companion is generally not to increase the abundances of these molecules in the inner CSE, but may potentially deplete them[4]. Taking the case of a main-sequence companion in the inner wind, the predictions are as follows: (1) for SiO in an oxygen-rich CSE, a minimal decrease of the inner abundance is predicted, compared with a decrease of almost an order of magnitude for the carbon-rich CSE; (2) for SiS, the models predict a significant decrease of several orders of magnitude (4–6 dex) for both chemical types; however, this dramatic change could be the result of an uncertain photodissociation rate for this molecule; (3) for CS and HCN, the change in abundance for both chemical types in the presence of a stellar companion is negligible. Hence we can conclude that the asymmetric distributions seen for SiO, SiS, CS and HCN (Fig. 3 and Extended Data Fig. 4) are caused by photodissociation from the F9 companion, rather than enhanced formation during periastron.

Hydrodynamic simulations

To better understand the structure in the CO emission, we performed high-resolution three-dimensional SPH[87,88] simulations of highly eccentric systems with parameters similar to the W Aql system. These simulations were performed with the SPH code Phantom[89–92]. The AGB star and companion are represented by gravity-only sink particles, and the wind consists of ~7×10^6 SPH gas particles that are gradually launched from boundary shells around the AGB star, with a velocity of 13 km s^{-1}, mimicking a free wind and a constant mass-loss rate[90]. Cooling within the wind is regulated by the equation of state for an ideal gas with polytropic index $\gamma = 1.2$, and the pulsations and rotation of the AGB star are not taken into account. It is important to note that these hydrodynamic simulations are necessarily simplified compared with observations, as they mainly account for the gravitational impact of the companion on the wind and the impact of the induced orbital movement of the AGB star, and neglect the impact of additional effects such as radiation, radiation pressure, pulsations, realistic cooling, and variable or anisotropic mass loss. We also note that the free-wind approach does not reproduce velocities lower than 13 km s^{-1}, even though lower velocities are expected in the inner wind region (within ~80 au of the AGB star). All of these contribute to the differences between the model and observations. Hence we aim for a qualitative understanding rather than a direct fit to the data.

We present results for a model with orbital parameters close to the W Aql system, with eccentricity $e = 0.92$ and semimajor axis $a = 125$ au, and taking the masses of the W Aql system (see 'Distance'). The Phantom model was evolved for around 5,000 years and the snapshot that we plot in various figures was selected from a time step a little earlier than this to better match the current positions of the two stars. From a detailed analysis of the Phantom model, we found that the orbital period increased slightly with time, owing to the mass being lost by the AGB star. This corresponded to a small increase in the semimajor axis but no change in the eccentricity over the time of the simulation. In Fig. 5c, we show the density distribution in a slice perpendicular to the orbital plane of this model. Plots of the same model showing the inner regions and a slice through the orbital plane are given in Supplementary Fig. 9. In general, we expect the companion to generate a spiral-like structure in the wind[91–94]. However, owing to the high eccentricity of this system, concentric near-spherical density structures are created in the wind, visible as the near-circular structures in the edge-on density distribution in Fig. 5c and Supplementary Fig. 9b. The circular structures are not quite centred on either of the central stars but rather offset to the opposite side from the F9 position at apastron, similar to the offsets we find in the ALMA CO observations. These structures are remarkably similar to the circular structures traced out by the black and white circles in Fig. 5a. The offset centres of the circles, particularly the outer circle, agree well with the observed ALMA data (white circle in Fig. 5a). Similar structures at a 90° edge-on inclination were seen for other highly eccentric SPH simulations we performed, and are also seen in previous studies with $e = 0.8$ and a primary to secondary mass ratio of $M_1/M_2 = 2.75$, compared with 1.5 for the W Aql system[95].

From a close study of our hydrodynamic simulations, we determine that the concentric circles are formed during the relatively quick periastron passage of the F9 star. During the periastron passage, the stars reach their maximal orbital velocity (~17 km s^{-1} for our chosen orbital parameters) and move hypersonically through the wind (which has a sound speed of ~3 km s^{-1} at 10 au), resulting in near-spherical shocks. The funnel-like structure (Fig. 5c) is formed through gravitational interactions between the companion and the wind. More concretely, when the companion moves towards the AGB star shortly before the periastron passage, its gravitational force results in a high-density wake behind the companion (see first and second columns in Supplementary Fig. 10). Because there is a velocity dispersion within this wake, it is delimited by a radially faster outer edge and a denser inner edge. As the companion and the AGB star pass each other quickly during periastron passage, the inner edge is shaped as a circular high-density shock, that travels radially outwards and expands as the left side ($x < 0$) of the

three-dimensional sphere-like structure. Because the wind–companion interaction around periastron passage is strong, the outer edge of the wake becomes a bow shock after periastron passage (second and third columns of Supplementary Fig. 10)[92]. The formation of the spherical high-density shock is enhanced, and is completed on the right side ($x > 0$), by the fast wobble of the AGB star. The orbital velocity of the stars reaches a maximum absolute value during this close encounter; however, the direction of the orbital velocity vectors changes by almost 180° due to the elliptical nature of the orbit. The wobble of the AGB creates a strong gradient in the radial wind velocity (mainly of the material on the $x > 0$ side of the AGB, where the wind is not disturbed by the companion shock wake). The transition from faster outflowing material to slower wind particles results in a low-density region (around $x = 40$–80 au in the right column of Supplementary Fig. 10). The edge between this low-density region and the inner denser material completes the spherical high-density shock (bottom row of Supplementary Fig. 10, showing the orbit with an inclination of 90°). The spherical structures are slightly offset because of the movement of the stars. From this, and the similar results of refs. 59,95, we can conclude that such circular structures are typical of highly elliptical systems, including when those systems are seen edge-on.

We emphasize that the circular structures are a consequence of binary interaction and do not, in our model, represent a period of enhanced mass loss. This is in contrast to the simplified model of CW Leo[59] where the increase in density was caused by an assumed increase in mass-loss rate during periastron, in addition to the wobble of the AGB star. Some discussion of the impact of anisotropic mass loss is given in 'Anisotropic mass loss' in Supplementary Information. To illustrate the effect of our constant mass-loss rate, we extracted the number density of our model along the x axis with $z = y = 0$ and compared this with the one-dimensional smooth model with an overdensity described in 'Radiative transfer modelling' and ref. 23. In Supplementary Fig. 11a, we show the number densities from the hydrodynamic model along the positive and negative x directions. Because the orbital parameters of our main hydrodynamic model do not precisely match the orbital parameters that we derive in this work, we performed an additional hydrodynamic model using the orbital solution discussed in 'Orbital solutions' ($e = 0.93$, $r_p = 10$ au). To reduce the required computational resources, we set a large accretion radius for the F9 star (1 au compared with 0.05 au in our main model), which reduces the more complex (and computationally expensive) close gravitational interactions between the companion star and the wind particles. This eliminates the funnel-like structure seen on the right of Fig. 5c but retains the sphere-like structures resulting from the motions of the two stars. For this model, the same number density plot, Supplementary Fig. 11b, reveals density peaks at radii in good agreement with the overdensity found by ref. 23. Note that, overall, the number density of the hydrodynamic models can be averaged to equal the number density of a smooth one-dimensional model (without any overdensity). However, we also note that our main model, which better allows for the close gravitational interactions between the wind and the F9 star, results in a less symmetric distribution of over- and under-dense regions (as shown for the x axis in Supplementary Fig. 11a and seen in the funnel-like structure in Fig. 5c) and contributes to the large-scale asymmetries discussed below.

On the basis of the circular structures formed during periastron, we can estimate the time of the most recent periastron from the expansion time of the black circle in Fig. 5a and the orbital period from the difference in expansion times between the black and white circles. These calculations are outlined in 'Orbital parameters from ALMA observations'. The fact that the black circle overlaps with the edge of the SiN emission (Fig. 5b) also supports our hypothesis that the SiN was created during the most recent periastron passage.

To enable a better comparison of the SPH model with the observations, we processed the Phantom model with the radiative transfer code MCFOST[96,97], using the effective stellar temperatures of both the AGB (2,300 K) and F9 (6,000 K) stars and silicate dust from ref. 98. The computation was sped up by considering only the lowest six CO levels as this was sufficient for the task at hand. MCFOST includes a routine for determining the photodissociation of CO by the interstellar UV field[99], which we used to determine the drop off in CO distribution (set to 6×10^{-4} relative to H_2 at the centre of the model), based on our three-dimensional structures. This resulted in the near-complete photodissociation of CO in the outermost density structures and left only (parts of) the innermost four circular structures visible in CO. The resultant central velocity channel is plotted in Fig. 5d, rotated to match the orientation of the W Aql system on the sky. Although the model is not a perfect reproduction of the observed CO emission (expected in light of the missing physics mentioned above), there are many qualitative similarities. We also extracted an angle–radius plot from the central channel of the MCFOST output (Supplementary Fig. 12), in which we see similar sinusoidal structures to those found in the observations (Extended Data Fig. 8 and Supplementary Fig. 4). The structures outlined by the pink and red circles identified in Fig. 5a are not apparent in the MCFOST output, although they do qualitatively resemble the structures formed at periastron. The main distinguishing feature is that the pink and red circles are offset in the opposite direction (south rather than north). If we were to ignore the offset and assume that one or both of these circles have the same origin as the black and white circles, we find that the period calculated between all the identified circles would be too short to agree with the HST and SPHERE observations of the stellar separations. Therefore, the red and pink circles cannot have formed during periastron. Noting that the Phantom model overestimates the wind velocity in the inner regions, we suggest that the difference between the observed and modelled structures partially arises from this as well as the other missing physics mentioned at the start of this section.

We also examined the channel maps generated by MCFOST at high and low velocities and compared these with equivalent channels from the ALMA observations in Extended Data Fig. 9. The observations are taken from channels ±13 km s^{-1} from the LSR velocity of $v_{LSR} = -23$ km s^{-1}. The blue channel shows CO emission elongated to the southwest, approximately along the companion axis, whereas the red channel has a more circular CO-emitting region. These differences are qualitatively reproduced in their respective MCFOST channels. This asymmetry in velocity space is also responsible for the enhanced blue emission seen in the wings of several line profiles observed towards W Aql[21]. The asymmetry arises from the orientation of the orbital plane such that the observations are reproduced if the Phantom model is orientated so that the motion of the F9 star at periastron is into the plane of the sky.

Finally, we comment on the large-scale asymmetry to the southwest, revealed by past observations, in the CO (ref. 22) and dust[19,20] emission on scales of 10″ and 60″. Although this more extended emission is in the same direction as the F9 star, the emission extent is much larger than the current or maximal separation between AGB and F9 stars (-0.5″ to 0.8″; Fig. 2). The luminosity of the F9 star is insufficient for its radiation to drive the dust outwards, as the AGB star does (see 'Radiation pressure on dust' in Supplementary Information); instead, it contributes to the large-scale shaping of the wind through its gravitational pull. We do not detect any accretion disk around the F9 star, either in the ALMA continuum or in any molecular lines, and an accretion disk is not predicted for the W Aql system by the SPH model. However, the F9 star does gravitationally attract some circumstellar material, which is then pushed outwards by the radiation pressure from the AGB star, and results in the large-scale asymmetry seen in the dust and more extended gas[19,20,22], and reproduced in our hydrodynamic model. The enhanced emission in this direction can be seen in the full extent of the central CO channel output by MCFOST (Supplementary Fig. 9c), where the CO extends out farther to the southwest.

Orbital parameters from ALMA observations

Here we constrain some orbital parameters from the ALMA observations. First we make an estimate of the period based on the round structures seen in the CO observations. As determined in 'Hydrodynamic simulations', the black and white circles shown in Fig. 5 were created during periastron interactions between the AGB and F9 stars. Assuming the velocity profile from equation (2), we find the expansion time between the two circles, and hence the orbital period, through the integral:

$$T = \int_{R_{\rm black}}^{R_{\rm white}} \frac{{\rm d}r}{v(r)} = \int_{R_{\rm black}}^{R_{\rm white}} \frac{{\rm d}r}{v_0 + (v_\infty - v_0)\left(1 - \frac{R_{\rm in}}{r}\right)^\beta} \quad (9)$$

where $R_{\rm black}$ and $R_{\rm white}$ are the radii of the black and white circles, and $R_{\rm in} = 2 \times 10^{14}$ cm is the dust condensation radius, with $v_0 = 3$ km s^{-1} the velocity for $r < R_{\rm in}$, taken to be the sound speed[21]. The period is found to be $1,082^{+89}_{-108}$ years. The uncertainty is based on the width of the circles as fit from the angle–radius plot (Extended Data Fig. 8). There we found the uncertainties in the radii of the circles to be 10.75 ± 0.75″ for the white circle and 1.35 ± 0.10″ for the black circle.

Another crucial parameter needed to constrain the orbital solution of the W Aql system is the time since periastron. As previously discussed, the most recent periastron passage generated the black circle seen in CO (Fig. 5) and the arc of SiN (Fig. 1). We can estimate the time of periastron by calculating the expansion time of these two structures. As we are now considering expansion in the inner part of the envelope, we need to also consider the velocity inside the dust condensation radius, which we assume to be close to the sound speed at $v = 3$ km s^{-1}. Equation (9) can then be rewritten:

$$\Delta t = \int_{R_{\rm in}}^{R_{\rm black}} \frac{{\rm d}r}{v_0 + (v_\infty - v_0)\left(1 - \frac{R_{\rm in}}{r}\right)^\beta} + \int_{R_{\rm form}}^{R_{\rm in}} \frac{{\rm d}r}{v_0} \quad (10)$$

where $R_{\rm black}$ is the radius of the black circle and the radial extent of the SiN arc, and $R_{\rm form}$ is the radial distance at which these two structures formed.

The value of $R_{\rm form}$ is uncertain so we take it to be the periastron distance between stars. The smallest periastron distance we obtain is ~3 au, while the largest is equal to the dust condensation radius. Using these values as a guide and assuming a constant velocity of $v_0 = 3$ km s^{-1} for $r < R_{\rm in} = 2 \times 10^{14}$ cm, we estimate the time since the most recent periastron as 172 ± 22 years ago. These derived values are listed with other orbital parameters in Supplementary Table 1.

Finally, we can determine the direction of the orbit from the position–velocity diagrams of the species formed at periastron, namely, SiN, SiC and NS. Taking into account that (1) the redder emission is brighter for all three of these molecules (and indeed only red emission is seen above the noise in the NS position–velocity diagram; Extended Data Fig. 3) and (2) the line profiles of SiN and SiC are slightly blueshifted relative to the stellar LSR velocity, suggests that these species formed first on the blue side of the envelope and then more recently on the red side. Hence, there has been slightly more time for the blue emission to expand, shifting the line profiles and position–velocity diagrams bluewards. From this, we conclude that the direction of the periastron passage was, for the F9 star, into the plane of the sky. This agrees with the evidence from the SPH model discussed above.

Orbital solutions

The orbit of the W Aql system cannot be solved analytically, so instead we solve it numerically by calculating a series of possible orbits and checking which agree with the parameters derived from observations (that is, the parameters listed in Supplementary Table 1). We adjust our basic orbital solution by leaving as free parameters the eccentricity, e, and the periastron distance, $r_{\rm p}$. All other primary orbital parameters are either input from previous results or calculated from e and $r_{\rm p}$ as follows.

The apastron, $r_{\rm a}$, is defined by

$$r_{\rm a} = r_{\rm p}\left(\frac{e+1}{1-e}\right) \quad (11)$$

and the semimajor axis, a, is then

$$a = \frac{r_{\rm p} + r_{\rm a}}{2}. \quad (12)$$

Working in the reference frame of the AGB star, we define the focus of the ellipse traced by the F9 star as the location of the AGB star, defined here as (0, 0 ,0) in our Cartesian co-ordinate scheme.

From the system mass ($M + m = 2.66\,M_\odot$) and the semimajor axis, we can then calculate the orbital period, T

$$T = 2\pi\sqrt{\left(\frac{a^3}{G(M+m)}\right)}. \quad (13)$$

where G is the gravitational constant and M and m are the masses of the AGB and F9 stars. This is enough information to plot a top-down view of the orbit, as shown in Supplementary Fig. 13. However, we know from observations that the orbit is inclined and rotated in the plane of the sky (relative to north). From the observations of SiN, we estimate the inclination angle of the orbit to be close to edge-on, $i = 90 \pm 7°$. We plot $i = 85°$ to better illustrate the orbit in the plane of the sky, but note that a completely edge-on system ($i = 90°$) satisfies the observations and does not significantly change our results. From the photometry of the two stars, we rotate the orbit in the plane of the sky by $\omega = 120°$ to fit the SPHERE observation (Fig. 2). We note that the uncertainty in ω comes mainly from the precise values of the inclination and eccentricity, but the selection of $\omega = 120°$ is a good fit given the rest of our results. The sky projection of a selected orbit and the locations of the stars are plotted in Fig. 2. We assume no rotation out of the plane of the sky along the third orthogonal axis because the relative symmetry of the SiN position–velocity diagram (Fig. 1b) suggests that this value is small (<5°).

For a possible orbital solution, we must calculate the time since periastron and the time between the SPHERE and HST observations. For this we must consider the angle θ made between the periastron, the AGB star and the F9 star, as well as the eccentric anomaly, E. Both of these angles are shown in Supplementary Fig. 13 and are mathematically related by

$$\tan\left(\frac{\theta}{2}\right) = \tan\left(\frac{E}{2}\right)\sqrt{\frac{1+e}{1-e}} \quad (14)$$

$$E = 2\tan^{-1}\left(\tan\left(\frac{\theta}{2}\right)\sqrt{\frac{1-e}{1+e}}\right). \quad (15)$$

The time since periastron, Δt, can then be calculated

$$\Delta t = \frac{T}{2\pi}\left(E - e\sin(E)\right). \quad (16)$$

We also check the possible solution against the known time between the HST and SPHERE observations by comparing $\Delta t_{\rm SPHERE} - \Delta t_{\rm HST}$ against the time difference between those observations.

To find the best solutions, we modify the input parameters ($r_{\rm p}$ and e) until we find a suitable orbit that agrees with the values we found for the period, time since periastron and time between HST and SPHERE observations. Because of the uncertainties, we find a group of compatible solutions rather than one single definition of the orbit. From a grid with steps of $\Delta e = 0.01 \in [0.70, 0.99]$ and

$\Delta r_p = 0.1 \times 10^{14}$ cm $\in [0.4 \times 10^{14}$ cm, 5×10^{14} cm], we found a set of compatible solutions, all of which are given in Extended Data Table 1. For the highest eccentricities $e > 0.95$ we additionally tested a finer grid for r_p, with $\Delta r_p = 0.5 \times 10^{13}$ cm $\in [5 \times 10^{13}$ cm, 1×10^{14} cm], because the orbital timing becomes sensitive to small variations in r_p at these high eccentricities. The compatible solutions range from the extremes of $e = 0.98$, $r_p = 4.5 \times 10^{13}$ cm to $e = 0.91$, $r_p = 2.0 \times 10^{14}$ cm. We plot one of these solutions ($e = 0.93$, $r_p = 1.5 \times 10^{14}$ cm) in Fig. 2, where we also show the orbit superposed on the HST and SPHERE photometric observations. Note that although some of our solutions have very small periastron distances, none are smaller than the Roche limit, so direct accretion of the AGB star onto the F9 star is not expected.

In Extended Data Table 1, we also include t_{close}, which we define as the time the AGB and F9 stars spend 'close' to each other. More precisely, in the AGB frame, this is the time the F9 star takes to pass through the $-90° \leq \theta \leq 90°$ region of the orbit (Supplementary Fig. 13) and can be derived from equations (15) and (16). As noted in Extended Data Table 1, t_{close} ranges from 2 years at the highest eccentricity to 18 years at $e = 0.91$. This corresponds to ~0.1% to 2% of the total orbital period.

Data availability

The observational data used here are openly available through the data archives for ALMA (https://almascience.nrao.edu/aq/), ESO for the APEX and SPHERE data (http://archive.eso.org), and HST (https://hla.stsci.edu). Custom ALMA data products that were produced for this study are available from T.D. or A.M.S.R. (a.m.s.richards@manchester.ac.uk) upon reasonable request. The Phantom input and output files from our main model can be downloaded from https://doi.org/10.26180/24240001.v1.

Code availability

Phantom is open source under the GPLv3 license and can be downloaded via https://github.com/danieljprice/phantom. MCFOST is open source under the GPLv3 license and can be downloaded via https://mcfost.readthedocs.io/en/latest/overview.html. ALI, the one-dimensional radiative transfer code, is available from the corresponding author upon reasonable request.

References

1. Höfner, S. & Olofsson, H. Mass loss of stars on the asymptotic giant branch. Mechanisms, models and measurements. *Astron. Astrophys. Rev.* **26**, 1 (2018).
2. Kobayashi, C., Karakas, A. I. & Lugaro, M. The origin of elements from carbon to uranium. *Astrophys. J.* **900**, 179 (2020).
3. Decin, L. et al. Reduction of the maximum mass-loss rate of OH/IR stars due to unnoticed binary interaction. *Nat. Astron.* **3**, 408–415 (2019).
4. Van de Sande, M. & Millar, T. J. The impact of stellar companion UV photons on the chemistry of the circumstellar environments of AGB stars. *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **510**, 1204–1222 (2022).
5. De Marco, O. et al. The messy death of a multiple star system and the resulting planetary nebula as observed by JWST. *Nat. Astron.* **6**, 1421–1432 (2022).
6. Decin, L. et al. (Sub)stellar companions shape the winds of evolved stars. *Science* **369**, 1497–1500 (2020).
7. Jorissen, A. in *Asymptotic Giant Branch Stars* (eds. H. J. Habing & H. Olofsson) 461–518 (Springer, 2004).
8. Karovska, M., Hack, W., Raymond, J. & Guinan, E. First Hubble Space Telescope observations of Mira AB wind-accreting binary systems. *Astrophys. J. Lett.* **482**, 175–178 (1997).
9. Ramstedt, S. et al. The wonderful complexity of the Mira AB system. *Astron. Astrophys.* **570**, 14 (2014).
10. Kervella, P. et al. ALMA observations of the nearby AGB star L_2 Puppis. I. Mass of the central star and detection of a candidate planet. *Astron. Astrophys.* **596**, 92 (2016).
11. Homan, W. et al. ATOMIUM: a high-resolution view on the highly asymmetric wind of the AGB star π^1Gruis. I. First detection of a new companion and its effect on the inner wind. *Astron. Astrophys.* **644**, 61 (2020).
12. Mauron, N. & Huggins, P. J. Imaging the circumstellar envelopes of AGB stars. *Astron. Astrophys.* **452**, 257–268 (2006).
13. Kim, H. et al. The large-scale nebular pattern of a superwind binary in an eccentric orbit. *Nat. Astron.* **1**, 0060 (2017).
14. Maercker, M. et al. Unexpectedly large mass loss during the thermal pulse cycle of the red giant star R Sculptoris. *Nature* **490**, 232–234 (2012).
15. Sahai, R. et al. The rapidly evolving asymptotic giant branch star, V Hya: ALMA finds a multiring circus with high-velocity outflows. *Astrophys. J.* **929**, 59 (2022).
16. Ramos-Larios, G. et al. Rings and arcs around evolved stars—I. Fingerprints of the last gasps in the formation process of planetary nebulae. *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **462**, 610–635 (2016).
17. Herbig, G. H. Physical companions to long-period variables. *Veroeffentlichungen der Remeis-Sternwarte zu Bamberg* **27**, 164 (1965).
18. Danilovich, T., Olofsson, G., Black, J. H., Justtanont, K. & Olofsson, H. Classifying the secondary component of the binary star W Aquilae. *Astron. Astrophys.* **574**, 23 (2015).
19. Ramstedt, S., Maercker, M., Olofsson, G., Olofsson, H. & Schöier, F. L. Imaging the circumstellar dust around AGB stars with PolCor. *Astron. Astrophys.* **531**, 148 (2011).
20. Mayer, A. et al. Large-scale environments of binary AGB stars probed by Herschel. I. Morphology statistics and case studies of R Aquarii and W Aquilae. *Astron. Astrophys.* **549**, 69 (2013).
21. Danilovich, T. et al. Detailed modelling of the circumstellar molecular line emission of the S-type AGB star W Aquilae. *Astron. Astrophys.* **569**, 76 (2014).
22. Ramstedt, S. et al. The circumstellar envelope around the S-type AGB star W Aql. Effects of an eccentric binary orbit. *Astron. Astrophys.* **605**, 126 (2017).
23. Brunner, M. et al. Molecular line study of the S-type AGB star W Aquilae. ALMA observations of CS, SiS, SiO and HCN. *Astron. Astrophys.* **617**, 23 (2018).
24. Danilovich, T. et al. ATOMIUM: halide molecules around the S-type AGB star W Aquilae. *Astron. Astrophys.* **655**, 80 (2021).
25. Richichi, A., Percheron, I. & Khristoforova, M. CHARM2: an updated catalog of high angular resolution measurements. *Astron. Astrophys.* **431**, 773–777 (2005).
26. Turner, B. E. Detection of SiN in IRC+10216. *Astrophys. J. Lett.* **388**, 35 (1992).
27. Huggins, P. J., Glassgold, A. E. & Morris, M. CN and C_2H in IRC+10216. *Astrophys. J.* **279**, 284–290 (1984).
28. Tokovinin, A. & Kiyaeva, O. Eccentricity distribution of wide binaries. *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **456**, 2070–2079 (2016).
29. Boffin, H. M. J., Cerf, N. & Paulus, G. Statistical analysis of a sample of spectroscopic binaries containing late-type giants. *Astron. Astrophys.* **271**, 125–138 (1993).
30. Moe, M. & Di Stefano, R. Mind your Ps and Qs: the interrelation between period (*P*) and mass-ratio (*Q*) distributions of binary stars. *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **230**, 15 (2017).
31. Maercker, M. et al. A detailed view of the gas shell around R Sculptoris with ALMA. *Astron. Astrophys.* **586**, 5 (2016).
32. Lykou, F. et al. The curious case of II Lup: a complex morphology revealed with SAM/NACO and ALMA. *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **480**, 1006–1021 (2018).
33. Doan, L. et al. The extended molecular envelope of the asymptotic giant branch star π^1 Gruis as seen by ALMA. I. Large-scale kinematic structure and CO excitation properties. *Astron. Astrophys.* **605**, 28 (2017).

34. Sahai, R., Scibelli, S. & Morris, M. R. High-speed bullet ejections during the AGB-to-planetary nebula transition: HST observations of the carbon star, V Hydrae. *Astrophys. J.* **827**, 92 (2016).
35. Oomen, G.-M. et al. Orbital properties of binary post-AGB stars. *Astron. Astrophys.* **620**, 85 (2018).
36. Jorissen, A., Van Eck, S., Mayor, M. & Udry, S. Insights into the formation of barium and Tc-poor S stars from an extended sample of orbital elements. *Astron. Astrophys.* **332**, 877–903 (1998).
37. Ramstedt, S., Schöier, F. L. & Olofsson, H. Circumstellar molecular line emission from S-type AGB stars: mass-loss rates and SiO abundances. *Astron. Astrophys.* **499**, 515–527 (2009).
38. Knapp, G. R. & Morris, M. Mass loss from evolved stars. III—Mass loss rates for fifty stars from CO $J = 1–0$ observations. *Astrophys. J.* **292**, 640–669 (1985).
39. Jura, M. Mass loss from S stars. *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **66**, 33 (1988).
40. Groenewegen, M. A. T. & De Jong, T. CO observations and mass loss of MS- and S-stars. *Astron. Astrophys.* **337**, 797–807 (1998).
41. Gaia Collaboration The Gaia mission. *Astron. Astrophys.* **595**, 1 (2016).
42. Andriantsaralaza, M., Ramstedt, S., Vlemmings, W. H. T. & De Beck, E. Distance estimates for AGB stars from parallax measurements. *Astron. Astrophys.* **667**, 74 (2022).
43. Gaia Collaboration Gaia Early Data Release 3. Summary of the contents and survey properties. *Astron. Astrophys.* **649**, 1 (2021).
44. Habets, G. M. H. J. & Heintze, J. R. W. Empirical bolometric corrections for the main-sequence. *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.* **46**, 193–237 (1981).
45. De Nutte, R. et al. Nucleosynthesis in AGB stars traced by oxygen isotopic ratios. I. Determining the stellar initial mass by means of the $^{17}O/^{18}O$ ratio. *Astron. Astrophys.* **600**, 71 (2017).
46. De Beck, E. & Olofsson, H. The surprisingly carbon-rich environment of the S-type star W Aql. *Astron. Astrophys.* **642**, 20 (2020).
47. Vassiliadis, E. & Wood, P. R. Evolution of low- and intermediate-mass stars to the end of the asymptotic giant branch with mass loss. *Astrophys. J.* **413**, 641–657 (1993).
48. Montargès, M. et al. The VLT/SPHERE view of the ATOMIUM cool evolved star sample. I. Overview: sample characterization through polarization analysis. *Astron. Astrophys.* **671**, 96 (2023).
49. Maire, A.-L. et al. High-precision astrometric studies in direct imaging with SPHERE. *The Messenger* **183**, 7–12 (2021).
50. Gottlieb, C. A. et al. ATOMIUM: ALMA tracing the origins of molecules in dust forming oxygen rich M-type stars. Motivation, sample, calibration, and initial results. *Astron. Astrophys.* **660**, 94 (2022).
51. The CASA Team et al. CASA, the Common Astronomy Software Applications for radio astronomy. *Publ. Astron. Soc. Pacific* **134**, 114501 (2022).
52. Thompson, A. R., Moran, J. M. & Swenson, G. W. Jr *Interferometry and Synthesis in Radio Astronomy* 3rd edn (Springer, 2017).
53. Olofsson, H., Eriksson, K., Gustafsson, B. & Carlstrom, U. A study of circumstellar envelopes around bright carbon stars. I—Structure, kinematics, and mass-loss rate. *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **87**, 267–304 (1993).
54. Homan, W. et al. ATOMIUM: the astounding complexity of the near circumstellar environment of the M-type AGB star R Hydrae. I. Morpho-kinematical interpretation of CO and SiO emission. *Astron. Astrophys.* **651**, 82 (2021).
55. Vlemmings, W. H. T., Khouri, T. & Olofsson, H. Resolving the extended stellar atmospheres of asymptotic giant branch stars at (sub)millimetre wavelengths. *Astron. Astrophys.* **626**, 81 (2019).
56. Baudry, A. et al. ATOMIUM: probing the inner wind of evolved O-rich stars with new, highly excited H_2O and OH lines. *Astron. Astrophys.* **674**, 125 (2023).
57. Cernicharo, J., Gottlieb, C. A., Guelin, M., Thaddeus, P. & Vrtilek, J. M. Astronomical and laboratory detection of the SiC radical. *Astrophys. J. Lett.* **341**, 25 (1989).
58. Massalkhi, S. et al. Abundance of SiC_2 in carbon star envelopes. *Astron. Astrophys.* **611**, 29 (2018).
59. Cernicharo, J., Marcelino, N., Agúndez, M. & Guélin, M. Molecular shells in IRC+10216: tracing the mass loss history. *Astron. Astrophys.* **575**, 91 (2015).
60. Decin, L. et al. ALMA data suggest the presence of spiral structure in the inner wind of CW Leonis. *Astron. Astrophys.* **574**, 5 (2015).
61. Siebert, M. A., Van de Sande, M., Millar, T. J. & Remijan, A. J. Investigating anomalous photochemistry in the inner wind of IRC+10216 through interferometric observations of HC_3N. *Astrophys. J.* **941**, 90 (2022).
62. Patel, N., Gottlieb, C. & Young, K. Probing the dust formation zone in IRC+10216 with the SMA. In *Proc. The Life Cycle of Dust in the Universe: Observations* (eds Kemper et al.) 98 (2013).
63. Velilla-Prieto, L. et al. Circumstellar chemistry of Si-C bearing molecules in the C-rich AGB star IRC+10216. *IAU Symp.* **343**, 535–537 (2019).
64. Lee, S. K., Ozeki, H. & Saito, S. Microwave spectrum of the NS radical in the $^2\Pi$ ground electronic state. *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **98**, 351 (1995).
65. Velilla Prieto, L. et al. The millimeter IRAM-30 m line survey toward IK Tauri. *Astron. Astrophys.* **597**, 25 (2017).
66. Decin, L., Richards, A. M. S., Danilovich, T., Homan, W. & Nuth, J. A. ALMA spectral line and imaging survey of a low and a high mass-loss rate AGB star between 335 and 362 GHz. *Astron. Astrophys.* **615**, 28 (2018).
67. Decin, L. et al. Discovery of multiple dust shells beyond 1 arcmin in the circumstellar envelope of IRC+10216 using Herschel/PACS. *Astron. Astrophys.* **534**, 1 (2011).
68. Guélin, M. et al. IRC +10 216 in 3D: morphology of a TP-AGB star envelope. *Astron. Astrophys.* **610**, 4 (2018).
69. Schöier, F. L. et al. The abundance of HCN in circumstellar envelopes of AGB stars of different chemical type. *Astron. Astrophys.* **550**, 78 (2013).
70. Danilovich, T. et al. Sulphur-bearing molecules in AGB stars. II. Abundances and distributions of CS and SiS. *Astron. Astrophys.* **617**, 132 (2018).
71. Massalkhi, S., Agúndez, M. & Cernicharo, J. Study of CS, SiO, and SiS abundances in carbon star envelopes: assessing their role as gas-phase precursors of dust. *Astron. Astrophys.* **628**, 62 (2019).
72. Morris, M. & Jura, M. Molecular self-shielding in the outflows from late-type stars. *Astrophys. J.* **264**, 546–553 (1983).
73. Bachiller, R. et al. A survey of CN in circumstellar envelopes. *Astron. Astrophys.* **319**, 235–243 (1997).
74. Rybicki, G. B. & Hummer, D. G. An accelerated lambda iteration method for multilevel radiative transfer. I—Non-overlapping lines with background continuum. *Astron. Astrophys.* **245**, 171–181 (1991).
75. Pickett, H. M. The fitting and prediction of vibration–rotation spectra with spin interactions. *J. Mol. Spectrosc.* **148**, 371–377 (1991).
76. Lique, F. et al. Rotational excitation of CN($X\ ^2\Sigma^+$) by He: theory and comparison with experiments. *J. Chem. Phys.* **132**, 024303 (2010).
77. Montez Jr, R., Ramstedt, S., Kastner, J. H., Vlemmings, W. & Sanchez, E. A catalog of GALEX ultraviolet emission from asymptotic giant branch stars. *Astrophys. J.* **841**, 33 (2017).
78. Schrijver, C. J. Magnetic structure in cool stars. XI. Relations between radiative fluxes mesuring stellar activity, and evidence for two components in stellar chromospheres. *Astron. Astrophys.* **172**, 111–123 (1987).

79. Gálvez, M. C. et al. Multiwavelength optical observations of chromospherically active binary systems. IV. The X-ray/EUV selected binary BK Psc (2RE J0039+103). *Astron. Astrophys.* **389**, 524–536 (2002).
80. Gray, R. O., Corbally, C. J. & Burgasser, A. J. *Stellar Spectral Classification* Princeton Series in Astrophysics (Princeton Univ. Press, 2009); http://books.google.com.au/books?id=S_Sh1i226wwC
81. Asplund, M., Amarsi, A. M. & Grevesse, N. The chemical make-up of the Sun: a 2020 vision. *Astron. Astrophys.* **653**, 141 (2021).
82. Agúndez, M., Martínez, J. I., de Andres, P. L., Cernicharo, J. & Martín-Gago, J. A. Chemical equilibrium in AGB atmospheres: successes, failures, and prospects for small molecules, clusters, and condensates. *Astron. Astrophys.* **637**, 59 (2020).
83. Agúndez, M. et al. Growth of carbon chains in IRC+10216 mapped with ALMA. *Astron. Astrophys.* **601**, 4 (2017).
84. Cordiner, M. A. & Millar, T. J. Density-enhanced gas and dust shells in a new chemical model for IRC+10216. *Astrophys. J.* **697**, 68–78 (2009).
85. Kerkines, I. S. K. & Mavridis, A. On the electron affinity of SiN and spectroscopic constants of SiN^-. *J. Chem. Phys.* **123**, 124301–124301 (2005).
86. Thomson, R. & Dalby, F. W. Experimental determination of the dipole moments of the $X(^2\Sigma^+)$ and $B(^2\Sigma^+)$ states of the CN molecule. *Can. J. Phys.* **46**, 2815 (1968).
87. Monaghan, J. J. Smoothed particle hydrodynamics. *Rep. Prog. Phys.* **68**, 1703–1759 (2005).
88. Price, D. J. Smoothed particle hydrodynamics and magnetohydrodynamics. *J. Comput. Phys.* **231**, 759–794 (2012).
89. Price, D. J. et al. Phantom: a smoothed particle hydrodynamics and magnetohydrodynamics code for astrophysics. *Publ. Astron. Soc. Aust.* **35**, 031 (2018).
90. Siess, L., Homan, W., Toupin, S. & Price, D. J. 3D simulations of AGB stellar winds. I. Steady winds and dust formation. *Astron. Astrophys.* **667**, 75 (2022).
91. Maes, S. et al. SPH modelling of companion-perturbed AGB outflows including a new morphology classification scheme. *Astron. Astrophys.* **653**, 25 (2021).
92. Malfait, J. et al. SPH modelling of wind-companion interactions in eccentric AGB binary systems. *Astron. Astrophys.* **652**, 51 (2021).
93. Mastrodemos, N. & Morris, M. Bipolar preplanetary nebulae: hydrodynamics of dusty winds in binary systems. I. Formation of accretion disks. *Astrophys. J.* **497**, 303–329 (1998).
94. Mastrodemos, N. & Morris, M. Bipolar pre-planetary nebulae: hydrodynamics of dusty winds in binary systems. II. Morphology of the circumstellar envelopes. *Astrophys. J.* **523**, 357–380 (1999).
95. Kim, H., Liu, S.-Y. & Taam, R. E. Templates of binary-induced spiral-shell patterns around mass-losing post-main-sequence stars. *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **243**, 35 (2019).
96. Pinte, C., Ménard, F., Duchêne, G. & Bastien, P. Monte Carlo radiative transfer in protoplanetary disks. *Astron. Astrophys.* **459**, 797–804 (2006).
97. Pinte, C. et al. Benchmark problems for continuum radiative transfer. High optical depths, anisotropic scattering, and polarisation. *Astron. Astrophys.* **498**, 967–980 (2009).
98. Weingartner, J. C. & Draine, B. T. Dust grain-size distributions and extinction in the Milky Way, Large Magellanic Cloud, and Small Magellanic Cloud. *Astrophys. J.* **548**, 296–309 (2001).
99. Pinte, C. et al. Direct mapping of the temperature and velocity gradients in discs. Imaging the vertical CO snow line around IM Lupi. *Astron. Astrophys.* **609**, 47 (2018).
100. Winnewisser, G., Belov, S. P., Klaus, T. & Schieder, R. Sub-Doppler measurements on the rotational transitions of carbon monoxide. *J. Mol. Spectrosc.* **184**, 468–472 (1997).
101. Bogey, M., Demuynck, C. & Destombes, J. L. Laboratory measurement of the submillimeter wave spectrum of SiC and isotopomers. *Astron. Astrophys.* **232**, 19 (1990).
102. Yamada, K. M. T., Moravec, A. & Winnewisser, G. Sub-millimeter wave spectra of cyanoacetylene and revised ground state constants. *Z. Naturforsch. A* **50**, 1179–1181 (1995).
103. Müller, H. S. P. et al. Rotational spectroscopy of isotopologues of silicon monoxide, SiO, and spectroscopic parameters from a combined fit of rotational and rovibrational data. *J. Phys. Chem. A* **117**, 13843–13854 (2013).
104. Müller, H. S. P. et al. Rotational spectroscopy of the isotopic species of silicon monosulfide, SiS. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **9**, 1579 (2007).
105. Gottlieb, C. A., Myers, P. C. & Thaddeus, P. Precise millimeter-wave laboratory frequencies for CS and $C^{34}S$. *Astrophys. J.* **588**, 655–661 (2003).
106. Ahrens, V. et al. Sub-Doppler saturation spectroscopy of HCN up to 1 THz and detection of $J = 3 \rightarrow 2$ ($4 \rightarrow 3$) emission from TMC1. *Z. Naturforsch. A* **57**, 669–681 (2002).
107. Fuchs, U. et al. High resolution spectroscopy of HCN isotopomers: $H^{13}CN$, $HC^{15}N$, and $H^{13}C^{15}N$ in the ground and first excited bending vibrational state. *Z. Naturforsch. A* **59**, 861–872 (2004).
108. Bogey, M., Demuynck, C. & Destombes, J. L. The millimetre wave spectrum of the $^{13}C^{14}N$ radical in its ground state. *Can. J. Phys.* **62**, 1248–1253 (1984).
109. Müller, H. S. P., Thorwirth, S., Roth, D. A. & Winnewisser, G. The Cologne Database for Molecular Spectroscopy, CDMS. *Astron. Astrophys.* **370**, 49–52 (2001).
110. Müller, H. S. P., Schlöder, F., Stutzki, J. & Winnewisser, G. The Cologne Database for Molecular Spectroscopy, CDMS: a useful tool for astronomers and spectroscopists. *J Mol. Struct.* **742**, 215–227 (2005).

Acknowledgements

We thank S.-H. Cho of the Korean VLBI Network for KVN observations of W Aql to confirm consistency with our ALMA results. T.D. is supported in part by the Australian Research Council through a Discovery Early Career Researcher Award (DE230100183). T.D., F.D.C. and S.H.J.W. acknowledge support from the Research Foundation Flanders (FWO) through grants 12N9920N, 1253223N and 1285221N, respectively. J.M. and S.M. acknowledge support from the Research Foundation Flanders (FWO) grant G099720N. M.V.d.S. acknowledges support from European Union's Horizon 2020 Research and Innovation programme under the Marie Skłodowska-Curie grant agreement number 882991. M.M. acknowledges funding form the Programme Paris Region fellowship supported by the Région Ile-de-France. P.K. acknowledges funding from the European Research Council (ERC) under the European Union's Horizon 2020 Research and Innovation programme (synergy grant project UniverScale, grant agreement 951549). T.J.M. is grateful to the STFC for support through grant ST/P000312/1 and thanks the Leverhulme Trust for the award of an Emeritus Fellowship. J.M.C.P. was supported by STFC grant number ST/T000287/1. L.D., J.M.C.P., S.H.J.W., S.M. and D.G. acknowledge support from ERC consolidator grant 646758 AEROSOL. E.D.B. acknowledges support from the Swedish National Space Agency. D.G. was funded by the project grant 'The Origin and Fate of Dust in Our Universe' from the Knut and Alice Wallenberg Foundation. K.T.W. acknowledges support from the European Research Council (ERC) under the European Union's Horizon 2020 Research and Innovation programme (grant agreement number 883867, project EXWINGS). F.H., A.B. and L.M. acknowledge funding from the French National Research Agency (ANR) project PEPPER (ANR-20-CE31-0002). H.S.P.M. acknowledges support by the Deutsche Forschungsgemeinschaft through the collaborative research grant SFB 956 (project ID 184018867). R.S.'s contribution to the research described here was

carried out at the Jet Propulsion Laboratory, California Institute of Technology, under a contract with NASA, and funded in part by NASA via ADAP awards, and multiple HST GO awards from the Space Telescope Science Institute. A.Z. is funded by STFC/UKRI through grant ST/T000414/1. This research was supported in part by the Australian Research Council Centre of Excellence for All Sky Astrophysics in 3 Dimensions (ASTRO 3D), through project number CE170100013. This project has received funding from the Framework Program for Research and Innovation 'Horizon 2020' under the convention Marie Skłodowska-Curie No 945298. Computational resources and services used in this work were provided by the VSC (Flemish Supercomputer Center), funded by the Research Foundation Flanders (FWO) and the Flemish Government, department EWI. This research was undertaken with the assistance of resources and services from the National Computational Infrastructure (NCI), which is supported by the Australian Government. This paper makes use of the following ALMA data: ADS/JAO.ALMA#2018.1.00659.L. ALMA is a partnership of ESO (representing its member states), NSF (USA) and NINS (Japan), together with NRC (Canada), MOST and ASIAA (Taiwan), and KASI (Republic of Korea), in cooperation with the Republic of Chile. The Joint ALMA Observatory is operated by ESO, AUI/NRAO and NAOJ. Based on observations collected at the European Organisation for Astronomical Research in the Southern Hemisphere under ESO programme 0103.D-0772(A). We acknowledge excellent support from the UK ALMA Regional Centre (UK ARC), which is hosted by the Jodrell Bank Centre for Astrophysics (JBCA) at the University of Manchester. The UK ARC Node is supported by STFC Grant ST/P000827/1.

Author contributions

T.D. conceived of and led this publication, analysed and interpreted data, performed the radiative transfer models, wrote the paper, and created most of the figures. J.M. performed and interpreted the hydrodynamics model and made Fig. 5c, and Supplementary Figs. 9a,b and 10. M.V.d.S. led the chemical interpretation and made Supplementary Figs. 7 and 8. M.M. and P.K. contributed the analysis of the resolved imaging. A.M.S.R. performed the ALMA data reduction. F.D.C. and A.C. contributed to the three-dimensional interpretation of the data. T.J.M. and J.M.C.P. contributed to the chemical interpretation. C.A.G. contributed to the line identifications and interpretation. C.P. assisted in the MCFOST modelling. D.J.P. assisted in the Phantom modelling and interpretation. E.D.B. contributed the fully reduced APEX data. The ALMA proposal was led by L.D. and C.A.G., with contributions from M.M., T.D., A.d.K., K.M.M., R.S., A.M.S.R., J.M.C.P., H.S.P.M., E.D.B., P.K., A.B., K.T.W., M.V.d.S., E.L., D.G., J.Y. and D.J.P. All authors contributed to discussions of the results, and commented on the paper and analysis.

Competing interests

The authors declare no competing interests.

Additional information

Extended data is available for this paper at https://doi.org/10.1038/s41550-023-02154-y.

Supplementary information The online version contains supplementary material available at https://doi.org/10.1038/s41550-023-02154-y.

Correspondence and requests for materials should be addressed to T. Danilovich.

Peer review information *Nature Astronomy* thanks the anonymous reviewers for their contribution to the peer review of this work.

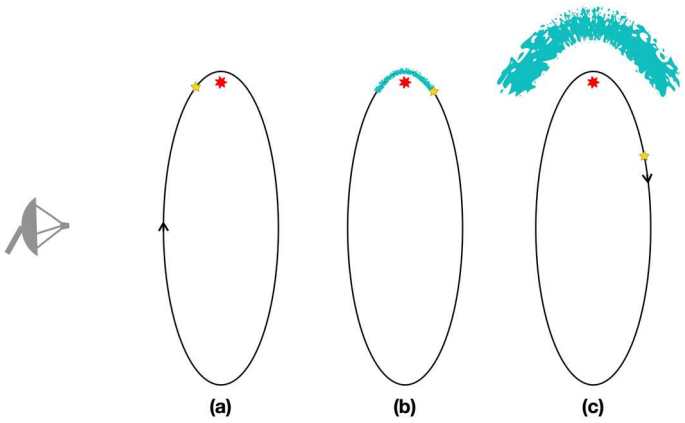
Reprints and permissions information is available at www.nature.com/reprints.

Publisher's note Springer Nature remains neutral with regard to jurisdictional claims in published maps and institutional affiliations.

Springer Nature or its licensor (e.g. a society or other partner) holds exclusive rights to this article under a publishing agreement with the author(s) or other rightsholder(s); author self-archiving of the accepted manuscript version of this article is solely governed by the terms of such publishing agreement and applicable law.

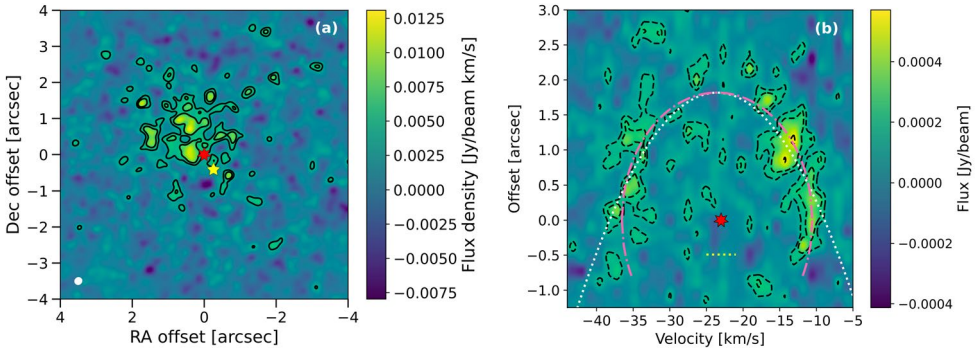
© The Author(s), under exclusive licence to Springer Nature Limited 2023

https://doi.org/10.1038/s41550-023-02154-y



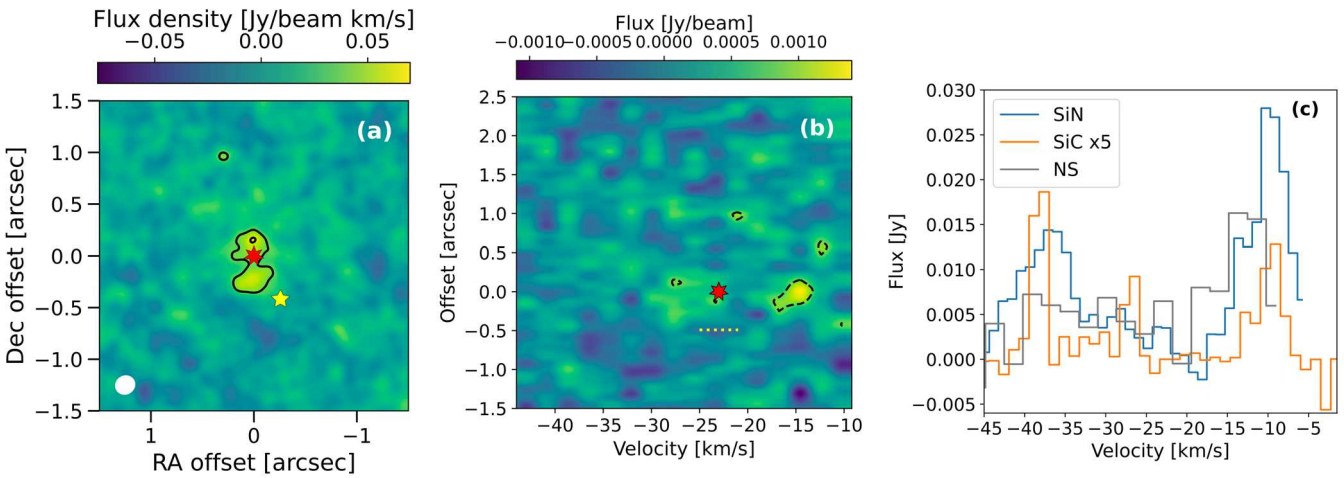
Extended Data Fig. 1 | A series of sketches illustrating the formation of SiN during the periastron passage of the W Aql system. The orbit (black line) is shown face on in the frame of the AGB star and the F9 star is assumed to be moving clockwise. Relative to our observations, the observer is located to the left, represented by the radio dish. **(a)** The F9 star (yellow) approaches the AGB star (red) and enters the dense inner wind region ($n_{H_2} \sim 10^8$ to 10^{10} cm^{-3}). **(b)** The rapid periastron passage is completed and SiN (and, similarly, SiC and NS) has formed in the wake of the F9 star (cyan region), with formation initiated by the F9 UV flux (see 'Chemical modelling' in the Methods). **(c)** As the F9 star continues on its orbit, the arc of SiN expands away from the AGB star, along with the stellar wind in which it is embedded. The present-day configuration of SiN can be seen in Fig. 1, where the PV diagram is a good approximation of the final arc shape that would be seen around the AGB star were the orbit viewed face-on.

https://doi.org/10.1038/s41550-023-02154-y



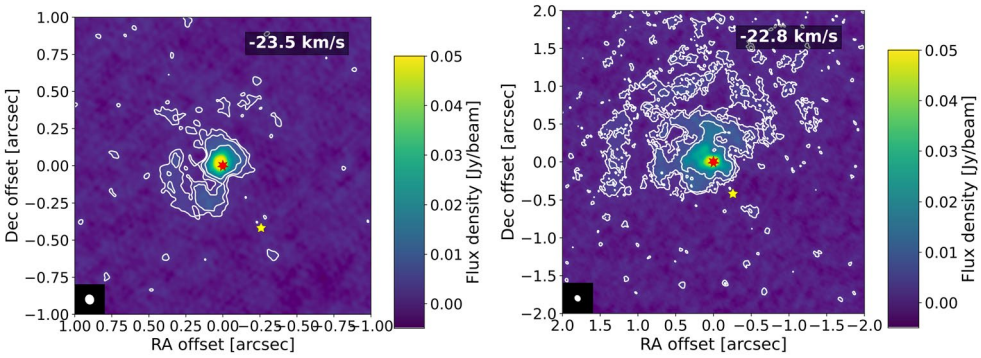
Extended Data Fig. 2 | Observed SiC emission towards W Aql. (a) Zeroth moment map of SiC towards W Aql with contours at levels of 3 and 5σ. Transition details are given in Table 1. North is up and east is to the left. The position of the AGB star is indicated by the red star at (0,0) and the location of the F9 companion is indicated by the yellow star to the south-west. North is up and east is left. The white ellipse in the bottom left corner indicates the size of the synthesized beam. **(b)** Position-velocity diagram of SiC towards W Aql, taken with the same wide slit as used for SiN (Fig. 1), with a position angle of north 33° east. Dashed black contours are at levels of 3 and 5σ, a dotted white parabola is fit to the data (see 'SiN and SiC' in the 'Data reduction' section in the Methods), and a dash-dotted pink ellipse is plotted to emphasize the shape of the emission in the PV diagram. The position and LSR velocity of the AGB star is indicated by the red star and the horizontal yellow dotted line indicates the present offset of the F9 star.

https://doi.org/10.1038/s41550-023-02154-y



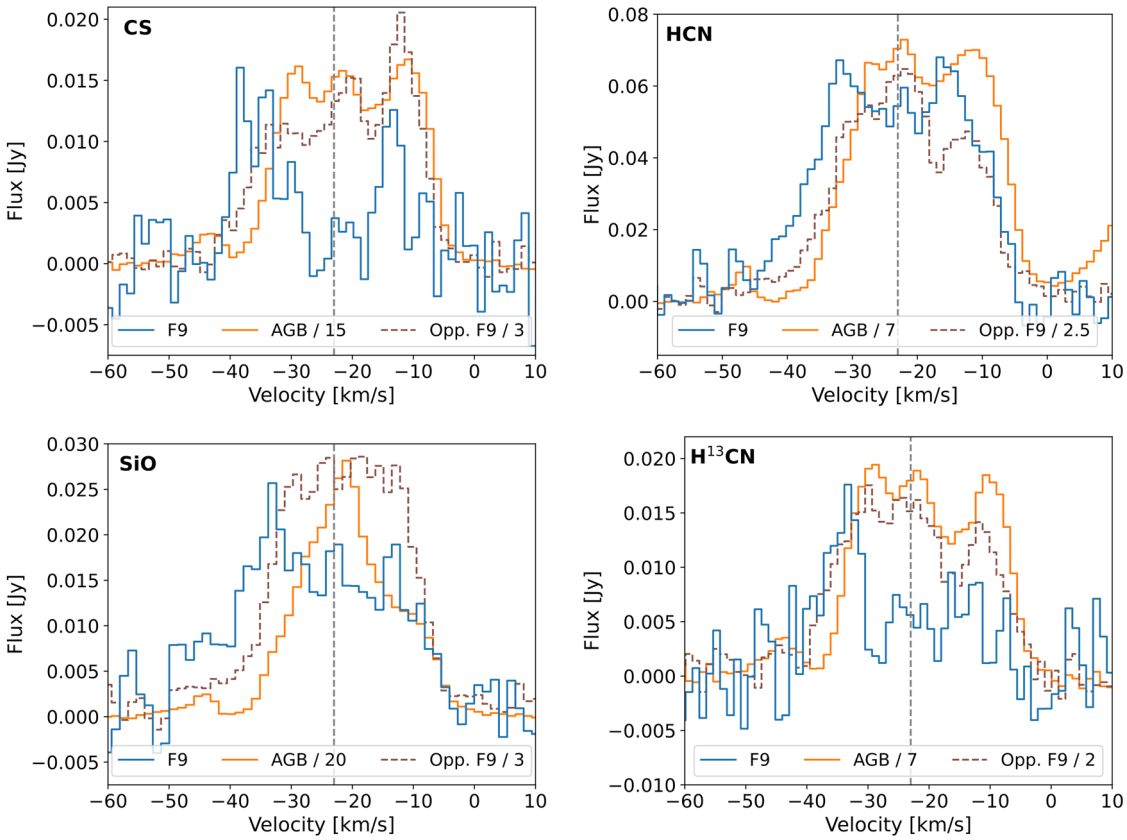
Extended Data Fig. 3 | Plots of NS towards W Aql. (a) Zeroth moment map of NS towards W Aql with contours at levels of 3 and 5σ. North is up and east is to the left. The position of the AGB star is indicated by the red star at (0,0) and the location of the F9 companion is indicated by the yellow star to the south-west. The white ellipse in the bottom left corner indicates the size of the synthesized beam. **(b)** Position-velocity diagram of NS taken with the same wide slit as used for SiN (Fig. 1). The position and LSR velocity of the AGB star is indicated by the red star and the horizontal dotted yellow line indicates the present offset of the F9 star. **(c)** Spectra of the NS, SiN and SiC lines given in Table 1. All lines were extracted for circular apertures with radii 0.25″, centred on the continuum peak. The flux of the SiC spectrum is multiplied by 5 to allow for a more direct comparison to SiN and NS.

https://doi.org/10.1038/s41550-023-02154-y



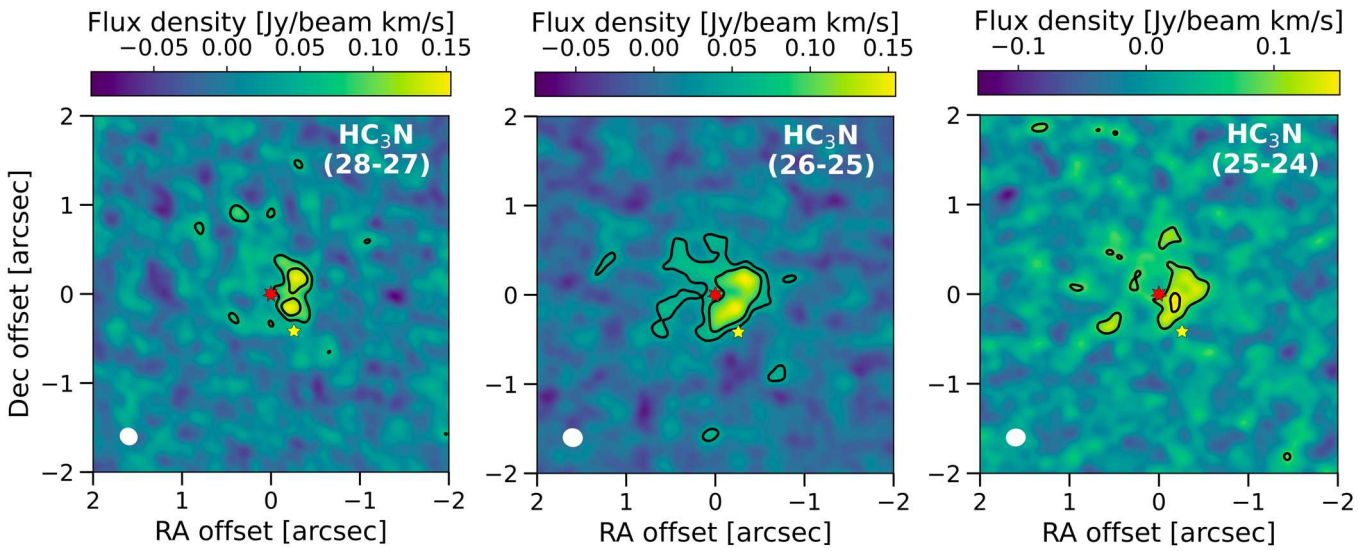
Extended Data Fig. 4 | Central channels of molecular emission towards W Aql. A channel of SiS (left) and CS (right) are plotted, showing the asymmetric distribution of these molecules caused by the flux from the F9 star. The positions of the AGB and F9 stars are indicated by the red and yellow stars, respectively. The channel velocities are given in the top right corners and the beam is shown in the bottom left corner. Contours are plotted for levels of 3, 5, and 10σ. North is up and east is left.

https://doi.org/10.1038/s41550-023-02154-y



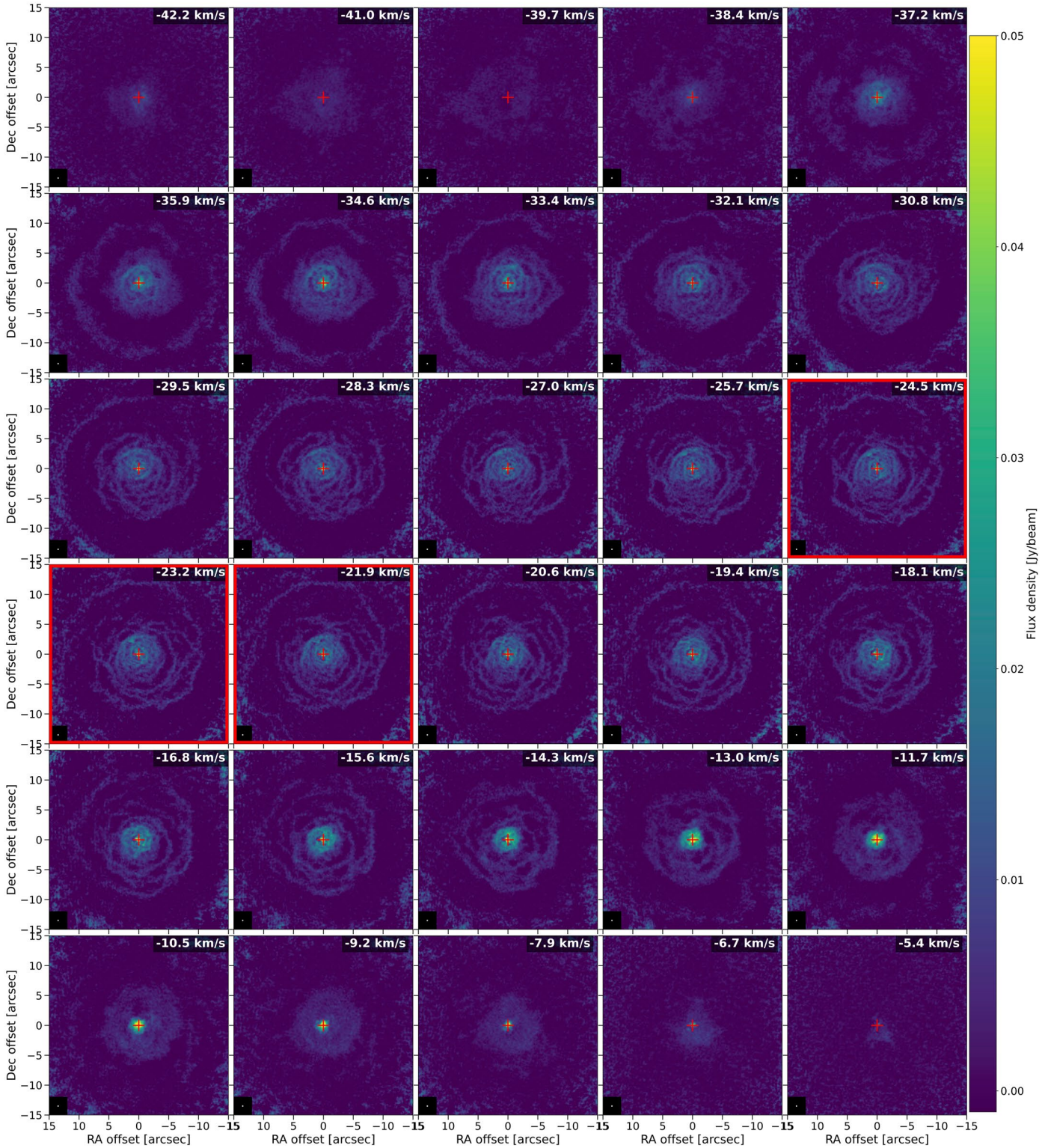
Extended Data Fig. 5 | A comparison of spectral lines at different locations in the AGB wind. Plots are shown of CS, HCN, SiO and $H^{13}CN$ emission extracted from circular apertures with 100 mas radii centred on the F9 star (blue), on the AGB star (orange) and at the same separation as the F9 star but on the opposite side of the AGB (Opp. F9, brown, dashed). (See Table 1 for line frequencies.) The AGB and Opp. F9 line profiles are scaled by the factor given in the legend to facilitate comparison with the F9 line profiles. The vertical grey line indicates $v_{LSR} = -23 km\ s^{-1}$.

https://doi.org/10.1038/s41550-023-02154-y



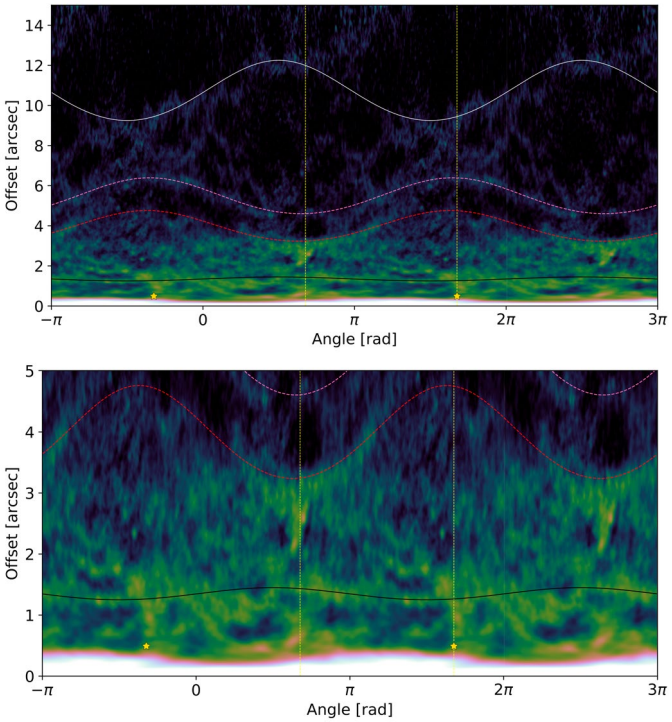
Extended Data Fig. 6 | Zeroth moment maps of HC_3N towards W Aql. The transition for each map is given in the top right, with further details given in Table 1. Contours are plotted at levels of 3 and 5σ. North is up and east is to the left. The position of the AGB star is indicated by the red star at (0,0), also corresponding to the continuum peak, and the location of the F9 companion is indicated by the yellow star to the south-west. The white ellipse in the bottom left corner indicates the size of the synthesized beam.

https://doi.org/10.1038/s41550-023-02154-y



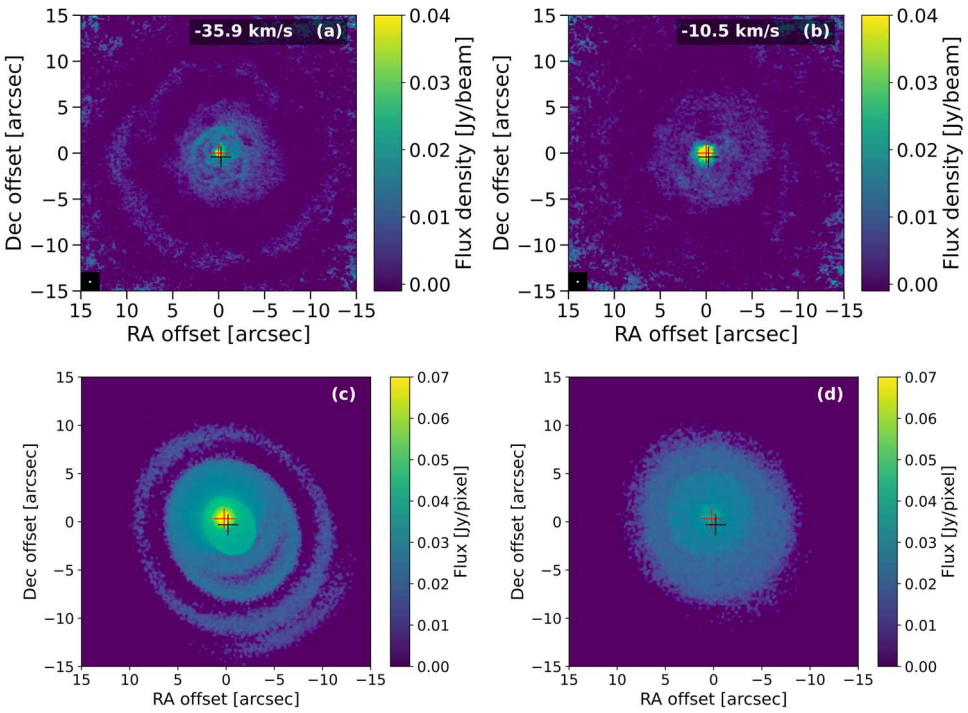
Extended Data Fig. 7 | CO emission towards W Aql. Channel maps of CO ($J = 2 \rightarrow 1$) are shown towards W Aql, obtained by combining observations from three configurations of ALMA. The AGB star is located at (0,0) and is marked by a red cross. The LSR velocity of each channel is given in the top right hand corner and the three channels closest to the W Aql $v_{LSR} = -23$km s^{-1} are highlighted with red borders and summed for Fig. 5. The synthetic beam is given by the white ellipse in the bottom left corner of each channel. North is up and east is left.

https://doi.org/10.1038/s41550-023-02154-y



Extended Data Fig. 8 | Variations in the radial emission of CO with angle. The plots show the radial emission distribution against angle for the summed central three channels of CO (Fig. 5) with a full revolution shown in the centre (0 to 2π) and half a revolution is shown on either side ($-\pi$ to 0 and 2π to 3π) to show how the structures extend onwards. The location of the F9 star is indicated by the yellow star and a yellow dotted line which passes through both stars is plotted in the central winding to guide the eye. The black, red and white curves correspond to the same features highlighted in Fig. 5. The top plot shows the full observed extent of the CO emission (out to 15″) and the bottom plot focuses on the regions out to 5″ from the AGB star. These plots are reproduced without the additional curves in Supplementary Figure 4.

https://doi.org/10.1038/s41550-023-02154-y



Extended Data Fig. 9 | Observations and models of blue and red CO emission towards W Aql. The plots show that blue (a and c) and red (b and d) channels equidistant from the stellar LSR velocity ($\upsilon_{LSR} = -23 km\ s^{-1}$) in velocity space do not exhibit identical CO emission patterns. The ALMA observations (a and b) show an elongated emission region on the blue side (a) and an approximately round emission region on the red side (b). The same pattern is mimicked in the red (c) and blue (d) channels of the hydrodynamic model processed with MCFOST. The red and black crosses correspond to the locations of the AGB and F9 stars. Note that the modelled and observed positions do not exactly correspond. Details are given in 'Hydrodynamic simulations' in the Methods.

https://doi.org/10.1038/s41550-023-02154-y

Extended Data Table 1 | Possible orbital solutions for the W Aql system

e	r_p [cm]	r_p [au]	a [au]	T [years]	Δt [years]	t_{close} [years]
0.98	4.5×10^{13}	3.0	150	1131	157	1.9
0.97	6.5×10^{13}	4.3	145	1069	163	3.3
0.96	8.5×10^{13}	5.7	142	1038	167	5.0
0.96	9.0×10^{13}	6.0	150	1131	165	5.4
0.95	1.1×10^{14}	7.4	147	1093	170	7.3
0.94	1.3×10^{14}	8.7	145	1069	174	9.3
0.93	1.5×10^{14}	10	143	1051	179	12
0.93	1.6×10^{14}	11	153	1158	177	13
0.92	1.7×10^{14}	11	142	1038	183	14
0.92	1.8×10^{14}	12	150	1131	181	15
0.91	1.9×10^{14}	13	141	1028	187	16
0.91	2.0×10^{14}	13	149	1110	186	18

Table notes: e is the eccentricity, r_p is the periastron, a is the semimajor axis, T is the orbital period, Δt is the time since the most recent periastron, and t_{close} is the amount of time the two stars spend close together (see 'Orbital solutions' in the Methods).

E.3 ATOMIUM : Molecular inventory of 17 oxygen-rich evolved stars observed with ALMA

A&A, 681, A50 (2024)
https://doi.org/10.1051/0004-6361/202347632
© The Authors 2024

Astronomy & Astrophysics

ATOMIUM: Molecular inventory of 17 oxygen-rich evolved stars observed with ALMA*

S. H. J. Wallström[1], T. Danilovich[1,2,3], H. S. P. Müller[4], C. A. Gottlieb[5], S. Maes[1], M. Van de Sande[6], L. Decin[1,7], A. M. S. Richards[8], A. Baudry[9], J. Bolte[10], T. Ceulemans[1], F. De Ceuster[1], A. de Koter[11,1], I. El Mellah[12,13], M. Esseldeurs[1], S. Etoka[8], D. Gobrecht[14], E. Gottlieb[15], M. Gray[8,16], F. Herpin[9], M. Jeste[17], D. Kee[18], P. Kervella[19], T. Khouri[20], E. Lagadec[21], J. Malfait[1], L. Marinho[9], I. McDonald[8,22], K. M. Menten[17], T. J. Millar[23], M. Montargès[19], J. A. Nuth[24], J. M. C. Plane[7], R. Sahai[25], L. B. F. M. Waters[26,27], K. T. Wong[28,29], J. Yates[30], and A. Zijlstra[8]

(Affiliations can be found after the references)

Received 2 August 2023 / Accepted 27 October 2023

ABSTRACT

Context. The dusty winds of cool evolved stars are a major contributor of the newly synthesised material enriching the Galaxy and future generations of stars. However, the details of the physics and chemistry behind dust formation and wind launching have yet to be pinpointed. Recent spatially resolved observations show the importance of gaining a more comprehensive view of the circumstellar chemistry, but a comparative study of the intricate interplay between chemistry and physics is still difficult because observational details such as frequencies and angular resolutions are rarely comparable.

Aims. Aiming to overcome these deficiencies, ATOMIUM is an ALMA Large Programme to study the physics and chemistry of the circumstellar envelopes of a diverse set of oxygen-rich evolved stars under homogeneous observing conditions at three angular resolutions between ~0.02″−1.4″. Here we summarize the molecular inventory of these sources, and the correlations between stellar parameters and molecular content.

Methods. Seventeen oxygen-rich or S-type asymptotic giant branch (AGB) and red supergiant (RSG) stars have been observed in several tunings with ALMA Band 6, targeting a range of molecules to probe the circumstellar envelope and especially the chemistry of dust formation close to the star. We systematically assigned the molecular carriers of the spectral lines and measured their spectroscopic parameters and the angular extent of the emission of each line from integrated intensity maps.

Results. Across the ATOMIUM sample, we detect 291 transitions of 24 different molecules and their isotopologues. This includes several first detections in oxygen-rich AGB/RSG stars: PO $v = 1$, SO_2 $v_1 = 1$ and $v_2 = 2$, and several high energy H_2O transitions. We also find several first detections in S-type AGB stars: vibrationally excited HCN $v_2 = 2, 3$ and SiS $v = 4, 5, 6$, as well as first detections of the molecules SiC, AlCl, and AlF in W Aql. Overall, we find strong correlations between the following molecular pairs: CS and SiS, CS and AlF, NaCl and KCl, AlO and SO, SO_2 and SO, and SO_2 and H_2O; meaning both molecules tend to have more detected emission lines in the same sources. The measured isotopic ratios of Si and S are found to be consistent with previous measurements, except for an anomalously high $^{29}Si/^{30}Si$ ratio of 4 ± 1 in the RSG VX Sgr.

Conclusions. This paper presents the overall molecular inventory and an initial analysis of the large ATOMIUM dataset, laying the groundwork for future work deriving molecular abundances and abundance profiles using radiative transfer modeling which will provide more rigorous tests for chemical models.

Key words. stars: AGB and post-AGB – supergiants – circumstellar matter – line: identification – instrumentation: interferometers – astrochemistry

1. Introduction

Cool evolved stars are a major contributor of the gas and dust returned to the interstellar medium (Tielens 2005) through their dusty winds which can reach mass-loss rates of up to 10^{-4} $M_\odot$ yr^{-1} (Höfner & Olofsson 2018). Low- and intermediate-mass (~0.8–8 $M_\odot$) asymptotic giant branch (AGB) stars are known to have dust-driven winds, while the mass-loss mechanism of the rarer, more massive red supergiant (RSG) stars remains uncertain. In both cases, however, the details of the physics and chemistry behind dust formation and wind launching have yet to be pinpointed, a vital step in understanding how newly synthesised material from AGB and RSG stars enriches the Galaxy and future generations of stars.

These AGB and RSG stars and their accompanying circumstellar envelopes (CSEs) provide useful chemical laboratories for studying dust and molecule formation due to their relatively simple overall spherical structure and their (mostly) radial velocity fields. Other chemically interesting cool environments, such as star-forming regions or (proto)planetary disks, tend to have more complex spatial and velocity structures, making it more difficult to disentangle the effects of chemistry. The overall chemical composition of an AGB CSE depends on the C/O ratio of the central star (see, for example, Habing & Olofsson 2003), as most of the less abundant element is locked up in CO. An oxygen-rich or M-type star (C/O < 1) has more free oxygen to form for example silicate dust and oxygen-bearing molecules – such as SO,

* Tables A.1–A.5 are available at the CDS via anonymous ftp to cdsarc.cds.unistra.fr (130.79.128.5) or via https://cdsarc.cds.unistra.fr/viz-bin/cat/J/A+A/681/A50

Open Access article, published by EDP Sciences, under the terms of the Creative Commons Attribution License (https://creativecommons.org/licenses/by/4.0), which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.
This article is published in open access under the Subscribe to Open model. Subscribe to A&A to support open access publication.

TiO, AlO – while a carbon-rich star (C/O > 1) has more free carbon to form for example amorphous carbon dust and molecules such as HC_3N and SiC_2. Stars with C/O ∼ 1 are called S-type stars and have a mixed chemistry. The more massive RSGs are all oxygen-rich stars, due to extra nucleosynthesis processes such as hot-bottom burning (Herwig 2005), resulting in oxygen-rich CSEs.

To date more than 100 molecules and 15 dust species have been detected around AGB and RSG stars (Decin 2021). The difficult-to-observe H_2 is by far the most abundant molecule, but it is followed in abundance by CO, whose lower energy rotational transitions are easily excited over much of the CSE and readily observable with ground-based telescopes. Observations of CO and other molecular lines provide dynamical and physical information about the CSE, and help constrain chemical models of dust and molecule formation. A very efficient means of determining the molecular contents of diverse Galactic sources are spectral line surveys, covering wide frequency bands in the millimeter and sub-millimeter domain. A range of surveys has been carried out for evolved stars with single-dish telescopes, which have discovered a wealth of new molecules. For example, Tenenbaum et al. (2010) report the first detections of PO, AlO and AlOH in space, in the RSG VY CMa, as well as the first detections of NaCl, PN, NS, and HCO^+ in an oxygen-rich source; Velilla Prieto et al. (2017) report the first detections of NO and H_2CO in an oxygen-rich source, namely IK Tau (a.k.a. NML Tau); De Beck & Olofsson (2020) report the first detections of silicon- and carbon-bearing species SiC_2, SiN, C_2H, and HC_3N towards an S-type star, W Aql; and in the extensively studied, high mass-loss rate carbon-rich star CW Leo (a.k.a. IRC+10216) refractory metal-containing species such as AlCl, AlF, MgNC, MgCN, NaCN, NaCl, and KCl are reported by Cernicharo et al. (2000), He et al. (2008), Pardo et al. (2022), alongside cyanopolyynes of the family $HC_{2n+1}N$, carbon chain radials up to C_8H, and cyclic compounds such as c-C_3H_2.

However, these single-dish observations at low angular resolution (typically 10″−40″) struggle to probe the spatial distributions of molecules in the CSE, which provide further vital constraints on chemical models. Greatly increased angular resolution is achieved with interferometry, alongside increased sensitivity allowing fainter molecular lines to be detected. This results in more accurate information on the relative excitation and formation of different species, and is especially useful for detecting rarer or short-lived species which are typically only seen close to the star – especially those suspected to play a part in dust condensation, such as AlO or carbon chains (Agúndez et al. 2020). To date, only a handful of interferometric molecular line surveys of AGB stars have been carried out due to the large observing time requirements. These include studies of some sources that also were covered by single-dish surveys: the carbon-rich CW Leo (Patel et al. 2011) and the two oxygen-rich stars R Dor and IK Tau (Decin et al. 2017, 2018). The RSG VY CMa has also been studied in this way (Kamiński et al. 2013).

Patel et al. (2011) observed the carbon-rich AGB star CW Leo with a 3″ beam using the Submillimeter Array (SMA). They detect ∼200 new lines of the molecules known from previous single-dish surveys, including narrow vibrationally excited lines (many from HCN) close to the star (see also Patel et al. 2009). They note that many of their unassigned lines are also narrow, possibly produced by vibrationally excited transitions of polyatomic molecules for which laboratory measurements of rest frequencies were not yet available. With measurements of both emission sizes and velocities for a range of lines they are also able to characterise the wind acceleration, parameterised by a beta law velocity profile (Lamers & Cassinelli 1999) with a fast acceleration ($\beta = 0.5$).

Kamiński et al. (2013) observed the very high mass-loss rate (4×10^{-4} $M_\odot\,\mathrm{yr}^{-1}$) and asymmetric RSG VY CMa with a 0.9″ beam, again using the SMA. They detect over 200 lines from 19 molecules, including AlCl, rotational emission from TiO for the first time in an oxygen-rich evolved star, and TiO_2 for the first time in space. A large number of lines of oxygen-rich molecules like SO_2 and SO are seen, as well as many lines of the relatively refractory NaCl including vibrationally excited transitions up to $v = 3$. Most of the observed lines show multiple velocity components, and the molecular emission shows similar spatial complexity.

Decin et al. (2017, 2018) observed two archetypal oxygen-rich AGB stars, the high mass-loss rate (5×10^{-6} $M_\odot\,\mathrm{yr}^{-1}$) IK Tau and the low mass-loss rate (1×10^{-7} $M_\odot\,\mathrm{yr}^{-1}$) R Dor, at ∼0.15″ angular resolution with the Atacama Large Millimeter and sub-millimeter Array (ALMA). They detect ∼200 lines from 15 different molecules, including dust precursors such as SiO, AlO, AlOH, TiO, and TiO_2. Highly vibrationally excited SiO (up to $v = 5$) is detected in both sources close to the star, and AlO is detected far beyond the dust condensation radius showing that this molecule does not become entirely locked up in dust grains. The data is also used to characterise the wind acceleration of both sources, showing much slower accelerations than for the carbon-rich CW Leo ($\beta \sim 5$–10).

These interferometric surveys demonstrate the importance of spatially resolved observations for obtaining a more comprehensive view of the circumstellar chemistry, as different molecules and transitions can show emission at different spatial scales and with different morphologies. However, it is difficult to draw more general conclusions about AGB or RSG stars from the study of single sources. Even in aggregate, various studies have different sensitivities, frequency coverage, and angular resolutions, and hence are difficult to compare. The next step to elucidate the circumstellar chemistry is to observe a sample of stars with a range of stellar parameters, with identical observing setups. By performing homogeneous high-angular-resolution observations, we can directly compare the chemical inventories of different sources, and compare them with stellar parameters.

ALMA Tracing the Origins of Molecules formIng dUst in oxygen-rich M-type stars (ATOMIUM, Program ID: 2018.1.00659.L) is an ALMA Large Programme to observe 17 oxygen-rich AGB and RSG stars at high angular resolution in a range of molecular transitions (Decin et al. 2020; Gottlieb et al. 2022). The ATOMIUM targets were chosen to represent a range of AGB mass-loss rates, chemical types (M-type and S-type stars), and pulsation behaviors (semi-regular variables (SR), long-period variables (LPV), and regular Mira variables). The sample also includes three RSG stars, and is summarised in Table 1. ATOMIUM is the first ALMA Large Programme for stellar evolution, and consists of a set of homogeneous high-resolution observations that allow unambiguous comparison of the physicochemical properties of the winds of the 17 evolved stars, expanding the sample of evolved stars studied at such high angular resolution by a factor of four. It also provides a detailed picture of the chemical and dynamical processes throughout the stellar wind, including measurements of isotopic ratios which provide an important tracer of nucleosynthesis in the core of the star. Alongside the ATOMIUM overview paper (Gottlieb et al. 2022), several in-depth studies of individual sources (Homan et al. 2020, 2021; Danilovich et al. 2023), specific molecules (Danilovich et al. 2021; Baudry et al. 2023), and comparisons

Table 1. ATOMIUM sources and their stellar parameters.

Source	Stellar type	Pulsation type	P (days)	$T_{\rm eff}$ (K)	Diameter[(1)] (mas)	$R_*^{(2)}$ (cm)	MLR[(3)] ($M_\odot$ yr^{-1})	$v_{\rm exp}$ (km s^{-1})	$D^{(4)}$ (pc)
S Pav	M-type	SRa	381 [(a)]	3100 [(b)]	12.0 [(c)]	1.7E+13	1.3E-07 [(a)]	13.0 [(c)]	190 [(d,e,f)]
RW Sco	M-type	Mira	389 [(g)]	3300 [(b)]	4.9 [(c)]	2.1E+13	1.3E-07 [(g)]	18.5 [(c)]	560 [(e)]
T Mic	M-type	SRb	347 [(a)]	3300 [(b)]	9.3 [(c)]	1.2E+13	1.4E-07 [(a)]	12.7 [(c)]	175 [(f)]
R Hya	M-type	Mira	366 [(h)]	2100 [(i)]	23.0 [(c)]	2.2E+13	1.8E-07 [(i)]	22.2 [(c)]	126 [(f)]
SV Aqr	M-type	LPV	–	3400 [(b)]	4.4 [(c)]	1.5E+13	2.7E-07 [(a)]	15.9 [(c)]	445 [(f)]
U Her	M-type	Mira	402 [(h)]	3100 [(c)]	11.0 [(c)]	2.2E+13	3.2E-07 [(j)]	19.7 [(c)]	266 [(k,f)]
U Del	M-type	SRb	119 [(d)]	2800 [(c)]	7.9 [(c)]	2.0E+13	3.7E-07 [(a)]	14.6 [(c)]	330 [(d,e,h)]
V PsA	M-type	SRb	148 [(a)]	2400 [(a)]	13.0 [(c)]	2.7E+13	4.8E-07 [(a)]	18.8 [(c)]	278 [(d,e)]
π^1 Gru	S-type	SRb	150 [(i)]	2300 [(i)]	21.0 [(c)]	2.6E+13	9.2E-07 [(l)]	64.5 [(c)]	164 [(e)]
R Aql	M-type	Mira	268 [(h)]	2800 [(i)]	12.0 [(c)]	2.1E+13	1.6E-06 [(j)]	12.8 [(c)]	230 [(d,e,h)]
GY Aql	M-type	Mira	468 [(h)]	3100 [(b)]	21.0 [(c)]	6.4E+13	2.3E-06 [(m)]	15.0 [(c)]	410 [(f)]
W Aql	S-type	Mira	479 [(h)]	2800 [(c)]	11.0 [(c)]	3.1E+13	2.7E-06 [(n)]	24.6 [(c)]	375 [(d,e,f)]
KW Sgr	RSG	SRc	647 [(o)]	3700 [(c)]	3.9 [(c)]	7.0E+13	3.6E-06 [(p)]	27.7 [(c)]	2400 [(q)]
IRC-10529	M-type	Mira	680 [(i)]	2700 [(i)]	6.5 [(c)]	4.5E+13	1.0E-05 [(i)]	21.8 [(c)]	930 [(i,f)]
AH Sco	RSG	SRc	738 [(r)]	3700 [(c)]	5.8 [(c)]	9.8E+13	1.0E-05 [(s)]	35.4 [(c)]	2260 [(t)]
IRC+10011	M-type	Mira	660 [(i)]	2700 [(i)]	6.5 [(c)]	3.6E+13	1.9E-05 [(i)]	23.1 [(c)]	740 [(f)]
VX Sgr	RSG	SRc	732 [(u)]	3500 [(c)]	8.8 [(c)]	1.0E+14	6.0E-05 [(i)]	32.9 [(c)]	1560 [(v)]

Notes. [(1)]Optical angular diameter. [(2)]Calculated from the stellar angular diameter and distance. [(3)]Scaled to the new distance estimate, see Sect. 2.3. [(4)]Several distances have been updated with respect to the values given in Gottlieb et al. (2022).

References. [(a)]Olofsson et al. (2002); [(b)]Marigo et al. (2008); [(c)]Gottlieb et al. (2022); [(d)]Gaia Collaboration (2018); [(e)]Bailer-Jones et al. (2021); [(f)]Andriantsaralaza et al. (2022); [(g)]Groenewegen et al. (1999); [(h)]Perryman et al. (1997); [(i)]De Beck et al. (2010); [(j)]Young (1995); [(k)]Vlemmings & Langevelde (2007); [(l)]Doan et al. (2017); [(m)]Loup et al. (1993); [(n)]Ramstedt et al. (2017); [(o)]Wittkowski et al. (2017); [(p)]Mauron & Josselin (2011); [(q)]Arroyo-Torres et al. (2013); [(r)]Kiss et al. (2006); [(s)]Jura & Kleinmann (1990); [(t)]Chen & Shen (2008); [(u)]Samus' et al. (2017); [(v)]Chen et al. (2007).

with optical polarized light (Montargès et al. 2023) have already resulted from this data.

This paper presents the molecular inventory of the 17 oxygen-rich AGB and RSG sources of the ATOMIUM sample. Section 2 briefly describes the observations undertaken with ALMA as part of the ATOMIUM Large Programme, and we summarize how the carriers of the spectral lines were assigned to specific molecules and how the spectroscopic parameters of the rotational lines (flux density, line width, and integrated area) were determined. In Sect. 3 we present our results, and Sect. 4 contains the conclusions. Additionally, the accompanying online tables include full lists of the molecular lines identified in the sample and in each source, including line parameters and molecular emission sizes, and all the spectra.

2. Data

2.1. ALMA observations

The ATOMIUM ALMA Large Programme covers a frequency range of ~213–270 GHz in 16 spectral tunings, with a total bandwidth of 27 GHz. Observations were carried out at three different spatial resolutions – low-resolution with beam sizes of ~0.8″–1.4″, medium-resolution with beam sizes of ~0.2″–0.5″, and high-resolution with beam sizes of ~0.02″–0.05″. The maximum scales which can be imaged (maximum recoverable scale, MRS) for each resolution are approximately 8–10″, 1.5–4″, and 0.4–0.6″, respectively (see Gottlieb et al. 2022, Table E.3). The field of view (to half maximum sensitivity) is 22″–26″, depending on frequency. Only half the tunings, covering CO and some of the other lines with the most extended emission, were observed at the lowest spatial resolution. There is, however, missing flux for at least some molecules (notably CO) in some of our sources. This can occur both for lines with angular extent larger than the field of view, and for emission which is smooth on scales larger than the MRS. For example, in R Hya about 40% of the CO flux is resolved out (Homan et al. 2021), π^1 Gru is missing ~30–70% of the CO flux (Homan et al. 2020), and W Aql is missing 66% of the CO flux (Danilovich et al. 2023). There is likely also missing flux for other molecules such as HCN and some transitions of SO_2, in at least some sources. The full extent of missing flux has not been quantified as single-dish spectra of the same frequency ranges are not available for most of our sources.

Observations took place between 2018 and 2021. All the high resolution data were taken during June–July in 2019, and hence essentially samples, for each source, only one part of the stellar phase (see Gottlieb et al. 2022, for details). Calibration and imaging were performed in CASA (McMullin et al. 2007) following standard ALMA procedures. The line-free continuum (mostly stellar emission) was identified and used for self-calibration, which was applied to all data, ensuring that the data for each star had a consistent position and flux density scale (measured in Jy beam^{-1} for the image cubes, and Jy for the extracted spectra). See Table E.2 in Gottlieb et al. (2022) for details of the continuum image properties. Image cubes were made (after continuum subtraction) for each separate spatial resolution. The channel spacing of 0.9765625 MHz gives a velocity resolution of 1.1–1.4 km s^{-1} depending on frequency. The rms noise $\sigma_{\rm rms}$ per spectral channel is ~1–5 mJy, depending on target elevation and requested noise level; the high-resolution data usually have the lowest noise and are the most sensitive to compact or clumpy emission, while the low-resolution data has the greatest surface brightness sensitivity. The observations and data reduction are

Table 2. Extract of Table A.5 which lists all measured lines in each source.

Source	Line	ν_0 (GHz)	Res.[1]	Ap.[2] ($''$)	$F_{\rm peak}$ (Jy)	I (Jy km s^{-1})	RW[3] (km s^{-1})	BW[4] (km s^{-1})	$w_{\rm vel}$ (km s^{-1})	r[5] ($''$)
AH Sco	SiO $v = 2$ $J = 5$–4	214.089	high	0.04	1.103	7.765	23.5	–21.6	45.1	0.08
AH Sco	SiO $v = 2$ $J = 5$–4	214.089	high	0.12	1.679	11.892	23.5	–18.9	42.4	0.08
AH Sco	SiO $v = 2$ $J = 5$–4	214.089	high	0.08	1.644	11.594	23.5	–18.9	42.4	0.08
AH Sco	SiO $v = 2$ $J = 5$–4	214.089	med	3.6	2.604	15.148	15.3	–14.7	30.1	0.37
AH Sco	SiO $v = 2$ $J = 5$–4	214.089	med	1.2	2.616	15.449	18.1	–14.7	32.8	0.37
AH Sco	SiO $v = 2$ $J = 5$–4	214.089	med	0.4	2.552	14.964	20.8	–20.2	41.0	0.37
					...					

Notes. [1]Spatial resolution of the data. [2]Aperture diameter used to extract the spectrum. [3]Velocity of the red line wing. [4]Velocity of the blue line wing. [5] Angular emission radius. The full version of the table (which also includes columns for uncertainties) is available at the CDS.

described fully in Gottlieb et al. (2022), and the characteristics such as the rms noise level, $\sigma_{\rm rms}$, and angular resolution of each spectral cube are given in their Table E.3. Note that in some cases (such as very bright, compact emission or weak, extended emission) the standard reduction parameters may leave low-level artefacts in the images for individual lines; papers on specific lines or targets, using optimised imaging and combination of the different spatial resolutions, may give slightly different values from those reported here (and in Gottlieb et al. 2022). To allow for this and for the propagation of errors when combining data taken at different epochs, we adopt a conservative flux scale uncertainty of 15% (although in some cases it may be much better than this).

2.2. Processing and analysis

We used spectra of each source at high, medium, and low angular resolution to identify the various molecular transitions. Spectra were extracted in circular apertures, centered on the continuum peak, with diameters of 0.04$''$, 0.08$''$, and 0.12$''$ for the high-resolution data; diameters of 0.4$''$, 1.2$''$, and 3.6$''$ for the medium-resolution data; and diameters of 1.2$''$, 3.6$''$, and 10.8$''$ for the low-resolution data. At each resolution, the smallest aperture was chosen to be the average beam size rounded up to one significant figure, for consistency.

In each spectrum the line identification was carried out in a systematic way. Starting from a list of expected lines based on the line survey of IK Tau and R Dor by Decin et al. (2018), at the position of each potential line a soft parabola function (as defined in De Beck et al. 2010) was fit with a least squares fitting algorithm. A visual inspection then ruled out spurious fits, added missing lines, and adjusted the fit of weak and blended lines. The rms (σ) was measured from the parts of the spectrum more than three times the wind expansion velocity ($v_{\rm exp}$) away from any line, and any potential lines below 2.5σ are considered non-detections. Any previously unknown lines were added to the line list, and identified if possible. Inspection of integrated intensity (moment 0) maps by eye further ensured any weak lines correspond to coherent emission across several channels rather than a noise fluctuation. We have also checked the intrinsic brightness (at 300 K) of the various transitions to ensure that the detected lines of each molecule are among the brightest lines in our frequency range. We do not exclude the possibility that further lines may be detected with a different data reduction method or by stacking data; however, we leave this to future papers.

Example medium and high angular resolution spectra of R Hya are shown in Appendix C, with molecular identifications, while Appendix A contains more detailed information about the identified lines. Additional information about the lines and molecular data can be found in Appendix A.1, Table A.1 gives a full list of identified molecules by source, Table A.2 gives the maximum radial extent of each molecule in each source, Table A.3 lists all identified molecular lines with references for the line parameters, and Table A.4 lists all the unidentified lines. Tables 2 and A.5 list all detected lines in each source, and gives measurements taken at each spatial resolution (high, medium, low) where the line was detected. Each line was measured separately in the spectra extracted with the three different apertures given above.

Line parameters were extracted from each spectrum, and for each detected line its peak flux, integrated intensity, velocity width (full width at zero power), and angular extent (from its integrated intensity map, see below) was measured. The peak flux was taken to be the flux in the brightest channel included within the line extent. The spectral extent of a line was measured between the channels where each line wing reaches 2.5σ, with a minimum width of four channels ($\approx$5 km s^{-1}), thus defining the velocity width and integrated intensity. As this was done automatically, broad weak lines may have their velocity widths and hence integrated intensities underestimated. The uncertainty on the peak flux was taken to be the rms plus the 15% absolute flux uncertainty (see Sect. 2.1), and the uncertainty on the line width was taken to be the channel width.

Potentially blended lines and lines with absorption or double-peaked profiles were checked manually to ensure that the correct line region was chosen. For lines which are blended or truncated by the edge of an observing band, only a peak flux is reported, as measured at the line center, and for lines with absorption the "peak" flux value is actually the positive or negative extremum value. Note that some lines show (partial) absorption only at certain apertures, most commonly the smaller apertures. The measured line width was used to make integrated intensity (moment 0) maps by summing the intensities of all the spectral channels covered by a line. From these maps the maximum radial extent of the emission from each line was measured, defined as the maximum radial extent of the 3σ contour enclosing the star (centered on the peak of the continuum emission). The contours were azimuthally smoothed (in bins with at least ten samples, corresponding to angular ranges of $\geq$60°) to limit deviations due to noise, following the method in Danilovich et al. (2021). Note that for transitions with clumpy emission, this method may underestimate the extent of the emission. For transitions with no measured extent from this method an upper limit is given, equal to half the major axis of the restoring beam ($b_{\rm maj}$/2). We also note

that there may be diffuse extended emission of various molecules which is not properly imaged, or which is filtered out if its size is similar to (or greater than) the maximum recoverable scale. Such emission may be brought out with different data reduction techniques or spectral averaging.

A majority of detected lines are seen in the data at multiple angular resolutions, as expected; however some transitions are only seen in the high-resolution data. We note that this data is more sensitive so faint lines are more likely to be detected. Furthermore, very compact emission (less than a few hundred milliarcsec in diameter) is best detected in the highest angular resolution data, as it may otherwise be diluted in large extraction apertures or with larger beams, or have its apparent flux reduced by imaging artefacts.

2.3. Mass-loss rate uncertainties

Mass-loss rates ($\dot{M}$) for the ATOMIUM sample were gathered from literature studies (see references in Table 1). However, these mass-loss rate determinations often assumed different distances to the stars than is used in this paper, and hence the mass-loss rate must be scaled to the new distance. This has been done using a simple formula to account for the dilution factor stemming from the distance to the star:

$$\dot{M}_{\rm new} = \dot{M}_{\rm old} \left(\frac{D_{\rm new}}{D_{\rm old}} \right)^2 . \quad (1)$$

Table 3 lists the factor by which this has changed the literature mass-loss rate, alongside more details about how the mass-loss rates were derived.

Updating the distances to these sources has changed the derived mass-loss rate by at most a factor of 2.5. However, we expect the literature mass-loss rate values to have uncertainties larger than this (though they are seldom quantified), with determinations frequently based on only one or two independent observations which makes it difficult to disentangle the degeneracies between for example the mass-loss rate, temperature profile, and the outer radius of the wind. Sources with derived mass-loss rates based on more than two independent observational data points are highlighted in green, which is the case for only five sources: IRC+10011, π^1 Gru, R Hya, VX Sgr, and W Aql. W Aql has undoubtedly the best constrained mass-loss rate as it is based on direct modeling of 21 individual CO lines, and even here the model has an estimated uncertainty of a factor ~3 (Danilovich et al. 2014; Ramstedt et al. 2017). Furthermore, many of the mass-loss rates are derived using empirical formulae, based on CO line fluxes and some stellar parameters, rather than direct radiative transfer modelling of CO observations. These formulae involve a large number of assumptions resulting in uncertainties of at least a factor ~3–5 (De Beck et al. 2010; Olofsson et al. 1993), when they are quantified at all. Two of the mass-loss rates are derived from empirical formulae using the observed 60 μm flux (labeled "a" in Table 3), which requires further assumptions about the wind velocity, dust properties, and gas-to-dust ratio.

The derived mass-loss rates also generally assume a constant and spherically symmetric mass loss, but the ATOMIUM observations have shown this is not true for any of our sources (Decin et al. 2020): they all show significant structure in their winds, and some – like π^1 Gru and R Hya – are highly asymmetric. This is interpreted as the likely presence of a companion. If the companion shapes the wind into an equatorial density enhancement, this could change the derived mass-loss rate by a factor of up to three if the system is seen face-on, and potentially much more if the system is seen edge-on (El Mellah et al. 2020). Furthermore, simply the assumption of a constant mass-loss rate has been shown to change the derived mass-loss rate by a factor of a few (Kemper et al. 2003; Decin et al. 2007).

Taken together, these factors result in typical uncertainties on the mass-loss rates of up to an order of magnitude. However, the mass-loss rate still provides a useful way to order the sources to look for general trends, and in the absence of more precise estimates we will continue to use the values in Table 1 in our analysis. Improving the mass-loss rate estimates for the ATOMIUM sources will be undertaken in a future publication, using radiative transfer modelling of homogeneous single-dish observations of at least four CO transitions per source, combined with the spatial information from the ALMA observations.

Table 3. Mass-loss rates from literature.

Source	$D_{\rm old}$	$\dot{M}^{(1)}_{\rm old}$	Deriv.$^{(2)}$	$N_{\rm obs}$	$\frac{\dot{M}_{\rm new}}{\dot{M}_{\rm old}}$
AH Sco	2000	8.0E-06	a	1	1.3
GY Aql	540	4.0E-06	b	1	0.6
IRC-10529	620	4.5E-06	c	2	2.2
IRC+10011	740	1.9E-05	c	16	1.0
KW Sgr	3000	5.6E-06	a	1	0.6
π^1 Gru	150	7.7E-07	d	4	1.2
R Aql	190	1.1E-06	e	2	1.5
R Hya	118	1.6E-07	c	7	1.1
RW Sco	700	2.1E-07	f	2	0.6
S Pav	150	8.0E-08	g	1	1.6
SV Aqr	470	3.0E-07	g	2	0.9
T Mic	130	8.0E-08	g	2	1.8
U Del	210	1.5E-07	g	2	2.5
U Her	360	5.9E-07	e	1	0.5
V PsA	220	3.0E-07	g	1	1.6
VX Sgr	1570	6.1E-05	c	3	1.0
W Aql	395	3.0E-06	g	21	0.9

Notes. $^{(1)}$ These values typically have large uncertainties of a factor ~3–10. $^{(2)}$ Description of the various mass-loss rate derivations: a: Empirical formula for 60 μm flux from Jura & Kleinmann (1990). b: Empirical formula for CO flux based on Knapp & Morris (1985), updated using Mamon et al. (1988). c: Empirical formula for CO flux derived from a grid of 1D radiative transfer models from De Beck et al. (2010). d: 3D non-LTE radiative transfer modeling using SHAPEMOL (Santander-García et al. 2015). e: 1D radiative transfer modeling, LVG model from Morris (1980). f: Empirical formula for CO flux from Olofsson et al. (1993). g: 1D non-LTE radiative transfer modeling using MCP (Schöier & Olofsson 2001).

3. Results and discussion

This section presents an overview of the molecular inventory in Sect. 3.1, molecular emission sizes in Sect. 3.2, correlations between various stellar parameters and their molecular content in Sect. 3.3, an analysis of the spatial distributions of SO and SO_2 in Sect. 3.4, isotopic ratios for a subset of the molecules in Sect. 3.5, and a discussion of the unidentified lines in Sect. 3.6

3.1. Overview of molecular inventory

Across the variety of 17 AGB and RSG sources in the ATOMIUM sample, we detect 287 molecular lines of which 29 remain

	$\dot{M}$	CO	HCN	SiS	CS	AlF	KCl	NaCl	H_2S	AlOH	AlO	SO	SO_2	H_2O	PO	TiO	OH	SiO
S Pav	1.3e-07	3	2	0	0	0	0	0	0	0	0	4	35	8	4	3	4	14
RW Sco	1.3e-07	2	2	3	1	0	0	0	0	0	0	4	18	2	2	0	0	10
T Mic	1.4e-07	2	2	0	1	0	0	0	0	0	1	7	21	6	2	0	4	11
R Hya	1.8e-07	3	6	0	1	0	0	0	0	0	1	8	36	10	4	9	4	14
SV Aqr	2.7e-07	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	3	7	1	0	0	0	6
U Her	3.2e-07	3	4	5	1	1	0	0	0	1	2	8	39	6	2	0	0	11
U Del	3.7e-07	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	6
V PsA	4.8e-07	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	2	2	2	0	0	0	11
pi1 Gru	9.2e-07	3	6	25	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	11
R Aql	1.6e-06	3	2	0	0	0	0	0	0	0	2	2	26	7	2	3	4	14
GY Aql	2.3e-06	3	2	11	2	1	0	2	1	2	2	7	16	3	2	3	0	10
W Aql	2.7e-06	4	10	45	2	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	12
KW Sgr	3.6e-06	2	2	0	0	0	0	0	0	0	0	2	0	1	0	0	0	9
AH Sco	1.0e-05	3	6	5	1	1	0	0	1	1	3	11	63	6	4	6	2	12
IRC-10529	1.0e-05	4	2	21	2	1	5	7	1	0	2	5	11	6	4	0	0	12
IRC+10011	1.9e-05	3	4	22	2	1	5	8	1	2	1	6	12	8	4	2	0	13
VX Sgr	6.0e-05	3	6	9	2	1	0	0	1	2	4	12	66	7	2	7	4	11

Fig. 1. Overview of how many lines of each molecule are detected in each source. The sources are listed in order of increasing mass-loss rate ($\dot{M}$), and molecules found in only a single source are not included.

unidentified. Emission from a total of 24 molecules has been identified, namely: AlCl, AlF, AlO, AlOH, CO, CN, CS, H_2O, H_2S, HC_3N, HCN, KCl, NaCl, OH, PO, SO, SO_2, SiC, SiC_2, SiN, SiO, SiS, TiO, and TiO_2; and 19 isotopologues thereof containing one or more of atoms of ^{13}C, ^{17}O, ^{29}Si, ^{30}Si, ^{33}S, ^{34}S, and ^{37}Cl.

This includes some first detections in oxygen-rich AGB and RSG stars:

- PO in the vibrationally excited $v = 1$ transition, detected in the RSG AH Sco and the AGB stars IRC+10011, IRC-10529, R Hya, and S Pav.
- SO_2 in the high-energy vibrationally excited $v_2 = 2$ and $v_1 = 1$ transitions, detected in the RSGs AH Sco and VX Sgr, respectively.
- Of the ten detected rotational transitions from various vibrational states of H_2O, all but one are the first identifications in space, as is one high energy transition of OH (see Baudry et al. 2023, who also detect further OH transitions by stacking data).

and first detections in S-type AGB stars:

- High vibrational level transitions of HCN $v_2 = 2, 3$ in π^1 Gru and W Aql. Vibrationally excited HCN has been studied for C-rich AGB stars by Jeste et al. (2022);
- High vibrational level transitions of SiS $v = 4, 5, 6$ in π^1 Gru and W Aql. Such high vibrational levels have previously been observed in CW Leo by Patel et al. (2011);
- Two transitions of the SiS double isotopologue ^{29}Si^{33}S in W Aql, previously observed in CW Leo by Patel et al. (2011);
- Four transitions of HC_3N in W Aql, confirming the tentative stacking detection by De Beck & Olofsson (2020);
- One transition of SiC in W Aql, to be more thoroughly discussed in Danilovich et al. (2023). SiC has previously been detected in 12 C-rich sources by Massalkhi et al. (2018);
- Several transitions of AlCl and one transition of AlF in W Aql, as discussed in Danilovich et al. (2021).

A visual overview of the molecules detected in each source can be seen in Fig. 1, where the sources are arranged in order of increasing mass-loss rate (note that molecules detected in only one source – TiO_2 in VX Sgr; and AlCl, ^{13}CN, SiN, SiC, SiC_2, and HC_3N in W Aql – are not included).

Looking at the overall molecular content, we can group together some similar sources:

- The two S-type sources, π^1 Gru and W Aql, are unsurprisingly different from the other, oxygen-rich sources. They are notably lacking in oxygen-bearing molecules, such as SO and SO_2, and show a large number of SiS lines, however W Aql is significantly more molecule-rich than π^1 Gru.
- IRC+10011 and IRC-10529 are very similar in molecular content, showing, for example, a range of Al- and Cl-bearing molecules, relatively few SO_2 lines, and a relatively large number of SiS lines. GY Aql also has a similar molecular content to IRC+10011 and IRC-10529, though it shows comparatively more SO_2 and fewer SiS lines.
- Two sources are very line-poor: U Del and the RSG KW Sgr. Beyond the molecules seen in all sources (CO, SiO, HCN) these two sources only contain a single H_2O line each and KW Sgr exhibits two SO lines. An explanation may lie in the lack of detection of high-v SiO lines (see below) in both sources, which may indicate weak shocks in the inner wind and hence post-shock temperatures too low to drive a rich chemistry and excite many of the high-v molecular lines. Furthermore, KW Sgr is a younger RSG than AH Sco or VX Sgr, with a spectral classification of M2, similar to Betelgeuse which is also known to be relatively poor in molecules (Huggins et al. 1994).

From Fig. 1 we can see that CO, HCN, and SiO are ubiquitous, as expected from previous studies, with similar numbers of lines detected in almost all sources (excepting the large number of vibrationally excited HCN lines in W Aql). All sources show vibrationally excited (up to $v = 4$) lines of SiO except the line-poor KW Sgr (up to $v = 2$) and U Del (up to $v = 1$), and also SV Aqr (up to $v = 1$). Three sources also show ^{30}SiO lines up to $v = 5$: R Aql, R Hya, and S Pav. Note that the $v = 5$ transitions of the main SiO isotopologue were not covered by our observations. Many of the SiO lines have maser components, especially the high-v lines but also some $v = 0$ lines (Pimpanuwat et al., in prep.).

SO and SO_2 are detected in a majority of sources, excepting the line-poor U Del and KW Sgr (in which SO but not SO_2 is seen), and the S-type sources π^1 Gru and W Aql. A large number of SO_2 $v = 0$ and $v_2 = 1$ lines are detected in many sources, and the two RSGs AH Sco and VX Sgr also show a few high-energy $v_1 = 1$ or $v_2 = 2$ transitions. SO_2 is one of the most widespread species in our sample, partially due to its nature as an asymmetric top which exhibits many different energy levels throughout its energy ladder, which are fairly easily populated by radiation and collisions. The other sulfur-bearing molecules – H_2S, SiS, and CS – are expected to have abundances that scale with mass-loss rate, and hence are more likely to be seen in high mass-loss-rate sources (Decin et al. 2018; Danilovich et al. 2017, 2018). Indeed, we only see H_2S in the highest mass-loss-rate sources, but for SiS and CS there is no clear trend with mass-loss rate. Danilovich et al. (2016, 2020a) also found a difference in the spatial distributions of SO and SO_2 in low- and high-mass-loss-rate sources, which is discussed further in Sect. 3.4.

SiS shows transitions from several isotopologues, and high-v lines (up to $v = 5$–6) are seen in both S-type sources, π^1 Gru and W Aql, which are expected to have higher SiS abundances (Schöier et al. 2007; Danilovich et al. 2018). All other sources only show lines of SiS up to $v = 1$, except IRC+10011 and IRC-10529 where $v = 3$ is reached.

H_2O is detected in all the sources in our sample except the two S-type stars, in several high-lying rotational transitions with lower state energy levels above ~3900 K, including high vibrational energy states. Four OH hyperfine split transitions with similar high energies ($E_{low} \gtrsim 4800$ K) are also detected. This includes many first detections of these transitions in space; they are discussed in detail in Baudry et al. (2023) and hence will not be extensively discussed here.

The halide-bearing molecules – AlF, NaCl, and KCl – are mostly found in high mass-loss-rate sources, although AlF (and AlOH) are also seen in the intermediate mass-loss-rate source U Her. Specifically the chlorine-bearing molecules KCl and NaCl are found only in IRC+10011, IRC-10529, and GY Aql. It is perhaps unexpected that the chlorides are missing in the RSGs AH Sco and VX Sgr, as NaCl is very strong in the RSG VY CMa (Tenenbaum et al. 2010; Quintana-Lacaci et al. 2023), however VY CMa is a more evolved RSG with a higher mass-loss rate than the RSGs in our sample. Furthermore, another chlorine-bearing molecule, AlCl, is only found in the S-type star W Aql, in which we do not detect NaCl or KCl, so AlCl seems to require different formation and/or excitation conditions.

W Aql is also the only source to show transitions of ^{13}CN, SiN, SiC, SiC_2, and HC_3N (note ^{12}CN was not covered by our observations). This is unsurprising as it is a bright, nearby S-type star with a fairly carbon-rich outflow (De Beck & Olofsson 2020). The other molecule only seen in a single source is TiO_2 in VX Sgr, which may be because VX Sgr is the highest-mass-loss-rate source in our sample and so its denser wind may allow less abundant molecules to be detected.

Table 4. Maximum measured radial extent of each molecule across all sources.

Mol.	Range in r_{max} ($R_\star$)	Median r_{max} ($R_\star$)	Max r_{max} ($''$)	N_{sou}
SiC	<2.1	–	0.01	1
TiO_2	14	–	0.06	1
OH	<3.0–17	6	0.20	6
AlOH	<1.3–45	4	0.20	5
AlF	<2.8–81	12	0.44	7
PO	<2.0–120	26	0.33	11
AlCl	130	–	0.69	1
AlO	<1.2–150	3	0.67	9
KCl	140–150	145	0.50	2
TiO	<1.5–160	6	0.47	7
HC_3N	210	–	1.14	1
H_2O	5.3–230	36	0.66	15
SiC_2	270	–	1.47	1
NaCl	<1.5–280	250	0.90	3
SiN	390	–	2.14	1
H_2S	7.2–490	140	1.60	5
HCN	22–590	120	1.92	17
SiS	5.5–610	210	1.97	10
CS	<13–640	150	3.51	10
SO_2	4.3–710	290	2.31	13
SO	5.1–780	340	2.53	14
SiO	140–1100	440	3.42	17
CO	29–2400 (†)	1300	7.87(†)	17

Notes. Maximum extents in CO are likely underestimated and are marked with (†). Transitions with no measurable extent are noted as upper limits equal to the radius of the beam ($b_{maj}/2$). The molecules are arranged according to the maximum measured r_{max} in $R_\star$.

3.2. Angular extents of molecules

While a full analysis of the spatial distributions of various molecules is beyond the scope of this paper, we found it useful as a first step to simply compare their observationally measured extents, as defined in Sect. 2.2. Table 4 shows the measured angular extent of each molecule across the 17 ATOMIUM sources. For each molecule, we have taken the maximum measured angular extent (r_{max}) in each source, and then give the range and median of these measurements in units of the stellar radius, $R_\star$ (see Table 1 for $R_\star$ values of each source). The maximum r_{max} for each molecule is also given in arcseconds. The maximum extents of CO are almost certainly underestimates because the emission of this molecule typically extends beyond the field of view of the observations.

Some of the smallest emission extents are found for the molecules TiO_2, OH, AlOH, and AlF. It is not surprising that these molecules are mainly seen close to the star, in the densest part of the wind, as this is predicted by chemical models (Agúndez et al. 2020; Mangan et al. 2021), especially for the Al-bearing molecules which are expected to participate in dust formation. However, OH is a special case as the observed transitions all have very high lower state energies ($E_{low} \geq 4800$ K) which will only be excited close to the star. In fact, 1.6 GHz OH maser emission has been measured up to ~100−1000 $R_\star$ in for example IRC+10011 and R Aql (Bowers et al. 1983), U Her

(Chapman et al. 1994), and the RSG VX Sgr (Szymczak & Cohen 1997).

The largest angular extents, >1.5″, are mainly found for molecules which are seen in a majority of sources: CO, SiO, SO, SO_2, CS, SiS, and HCN. However, for almost all molecules there are some sources where the maximum measured extent is very small. Which source it is varies by molecule, and its value is often an outlier among the sample. For example, in CO the smallest $r_{\rm max}$ of 29 $R_\star$ in the line-poor RSG KW Sgr is much smaller than the next smallest value of 530 $R_\star$ in AH Sco. V PsA has the smallest measured $r_{\rm max}$ in HCN, SO, and SO_2; R Hya shows the smallest extents in SiS and CS; and the smallest measured $r_{\rm max}$ in SiO is in π^1 Gru.

There are some interesting observations to be made from this summary from a chemical standpoint. First, AlO extends further out than AlOH, though this is only true for the RSGs VX Sgr and AH Sco, which have much larger AlO extents than the other sources: ≥100 $R_\star$. They also have the largest $r_{\rm max}$ in AlOH, at 45 and 8 $R_\star$, respectively – smaller than their AlO extents. This is unexpected as AlOH is formed from AlO (by reaction with H_2O and H_2), although AlOH is also easily photolysed back to AlO (Mangan et al. 2021). The other three AGB sources with detections of both AlOH and AlO show slightly larger extents in AlOH. So here we have a dichotomy between the RSG and AGB sources, where perhaps the photolysis of AlOH to AlO is more efficient in the RSGs explaining their large AlO extents.

Another surprising observation is that TiO extends further out than TiO_2 in the only star where TiO_2 is detected: the RSG VX Sgr. VX Sgr shows a maximum extent in TiO of 65 $R_\star$, larger than the 14 $R_\star$ extent in TiO_2. This might indicate that TiO_2 is depleted because it is taking part in the formation of dust particles in the inner wind.

3.3. Correlations

To get an overview of how the molecular content varies by source, we have calculated Kendall's τ_b rank correlation coefficients (Kendall 1945) for various stellar parameters and the molecular content of each source. These are shown in Fig. 2. Kendall's rank correlations are chosen as a non-parametric measure of correlation, that does not assume linear relationships between variables and is applicable to ordinal data. This allows us to use the differing number of detected lines of a given molecule as a (very rough) proxy for its relative abundance in different sources. The number of detected lines is a function of molecular parameters and excitation conditions as well as abundance, which we cannot properly take into account without radiative transfer modeling. However, by ranking the sources by the number of detected lines we can nevertheless determine which groups of molecules tend to coincide by having relatively large numbers of lines in the same sources. We also negate the need to normalize different molecules by the absolute number of potentially detectable lines in our frequency range. Many alternative techniques, such as Pearson's correlations or principal component analysis, assume linear relationships between variables and hence are less applicable to our data at this initial analysis stage.

To calculate the Kendall's τ_b correlation coefficients the sources were ranked (by measured value for stellar parameters and by number of detected lines for molecules) for each variable, and the ranks between every pair of variables were compared (adjusting for ties). This assesses how well the relationship between the two variables can be described by a monotonic function, that is, whether the first variable tends to increase as the second does and vice versa. The variables being correlated are the effective temperatures, mass-loss rates, terminal expansion velocities, and pulsation periods (as given in Table 1), and the number of lines detected for each molecule and its isotopologues. Molecules which are found in only one source (TiO_2 in VX Sgr, and AlCl, HC_3N, SiC_2, SiN, and ^{13}CN in W Aql) have not been included. Generally, we assume that a larger number of detected lines of a given molecule implies a higher molecular abundance; however there may be additional effects making the detection of, for example, highly vibrationally excited lines more likely. These will be discussed for each molecule in the following sections.

As we have more than ten sources to compare, the sampling distribution of Kendall's τ_b is approximately a normal Gaussian distribution (Kendall 1938). We therefore use p-values[1] corresponding to 1σ ($p < 0.15865$), 2σ ($p < 0.02275$), and 3σ ($p < 0.00135$) to determine which correlations are significant. We consider a correlation coefficient $\gtrsim$0.5 to be a strong correlation, which is generally only seen for correlations with at least 2σ significance. Correlations with 3σ significance have coefficients ≥0.64 and hence will be termed very strong correlations. For simplicity, we use a single term to refer to both significance and strength of correlation, as they are strongly related, and will refer to correlations with 2σ significance as strong correlations, and those with 1σ significance as weak correlations. Figure 2 is colorized by the value of the correlation coefficient, with stronger positive correlations in a darker blue. For further visual differentiation, 3σ correlation coefficients are written in boldface, 2σ in regular font, and 1σ in small italics. Correlation coefficients with p-values above 0.15865 (that is lower than 1σ significance) are not included in our analysis or in the figure.

The molecular correlations with at least a 1σ significance were then used to calculate a dendrogram (see Fig. 3) of the hierarchical relationships between the different parameters, using the farthest point (a.k.a. complete linkage) algorithm for hierarchical clustering. This dendrogram shows which parameters are most similar to each other in terms of their correlations to all the other parameters, and groups them into seven clusters shown with different colors. Note that this grouping may split up pairs of parameters that are strongly correlated with each other but have dissimilar correlations with other parameters. These clusters are reflected in Fig. 2, and the calculated correlations will now be discussed cluster by cluster for simplicity.

Cluster 1: HCN and CO is shown with green lines in Fig. 3 and discussed in Sect. 3.3.1; Cluster 2: AlF, CS, H_2S, and AlOH is shown with red lines and discussed in Sect. 3.3.2; Cluster 3: $v_{\rm exp}$ and P is shown with cyan lines and discussed in Sect 3.3.3; Cluster 4: SiS, $\dot{M}$, NaCl, and KCl is shown with purple lines discussed in Sect 3.3.4; Cluster 5: AlO and SO is shown with yellow lines and discussed in Sect. 3.3.5; Cluster 6: PO, TiO, SO_2, H_2O, OH, and SiO is shown with black lines and discussed in Sect. 3.3.6; and Cluster 7: $T_{\rm eff}$ is discussed in Sect. 3.3.7.

3.3.1. Cluster 1: HCN, CO

The first cluster contains the correlated molecules HCN and CO. For these molecules the $v = 0$ transitions of the main isotopologues are seen in all sources, so more detected lines means the detection of isotopologues (^{13}CO, C^{17}O, H^{13}CN) or vibrationally excited transitions (CO $v = 1$; HCN $v_2 = 1, 2, 3$; H^{13}CN $v_2 = 1$).

[1] A p-value measures the probability of obtaining the observed results "by chance", assuming that the null hypothesis of no correlation is true. Therefore, a smaller p-value indicates a greater statistical significance.

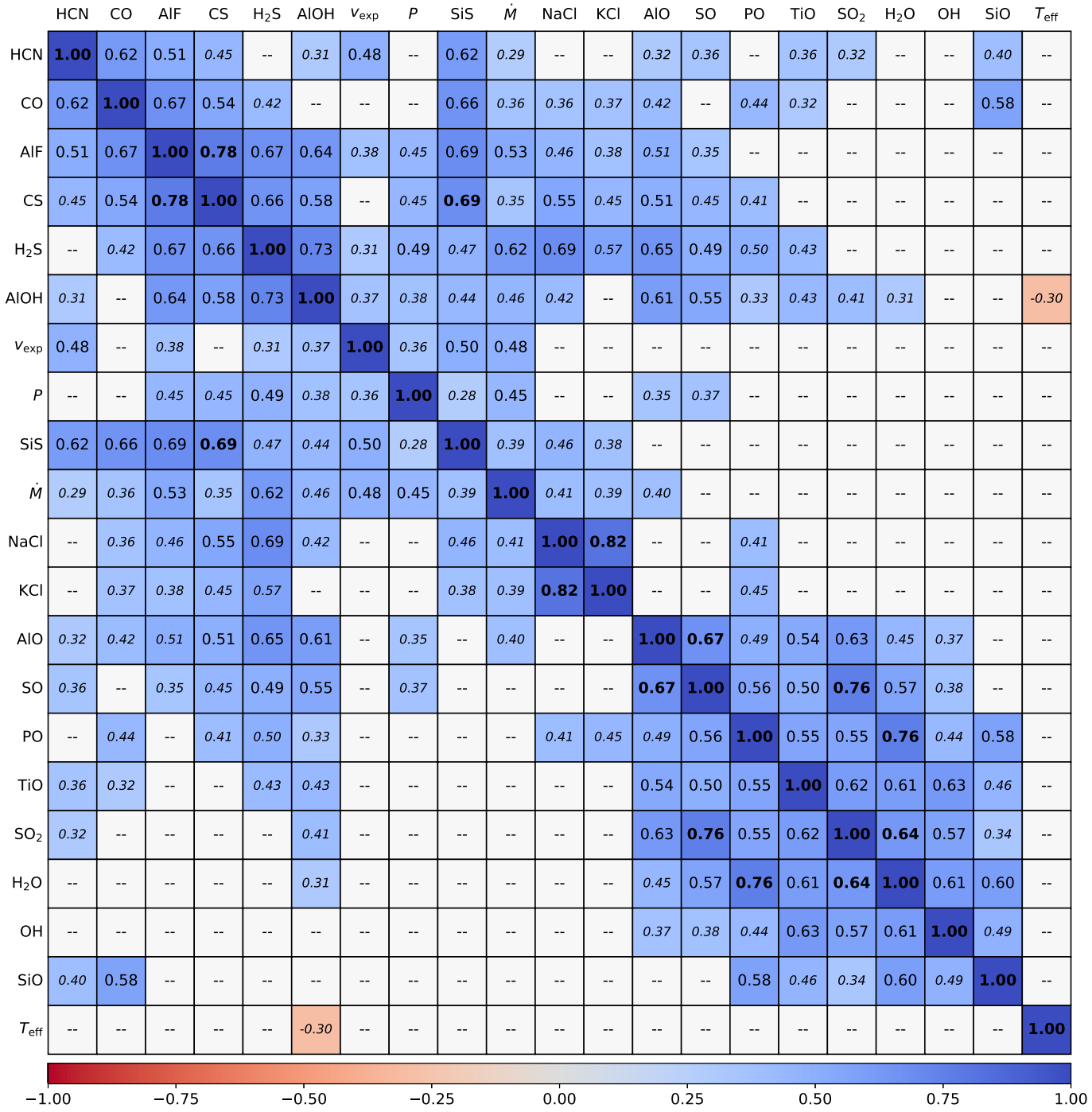


Fig. 2. Kendall's τ_b rank correlation coefficients between the expansion velocity (v_{exp}), pulsation period (P), mass-loss rate ($\dot{M}$), effective temperature (T_{eff}), and number of detected lines of various molecules in each source. Correlation coefficients with 3σ significance are in boldface, 2σ in regular font, and 1σ in small italics. Coefficients with lower than 1σ significance are not included, and instead given as - -. The cells are colorized from perfect correlation (1) in blue, to perfect anti-correlation (–1) in red.

The isotopologues of HCN and CO tend to be detected in the same sources, as one might expect for both isotopologues with ^{13}C. ^{13}CO is detected in all sources except SV Aqr, and H^{13}CN is detected in all sources except SV Aqr, U Del, and V PsA. C^{17}O is only detected in two sources: IRC-10529 and W Aql. From this we can assume that SV Aqr, U Del, and V PsA either have relatively low ^{13}C abundances or faint HCN emission, while IRC-10529 may have relatively high ^{17}O abundances and W Aql is the source with by far the brightest emission in the main CO isotopologue. Similarly, the vibrationally excited transitions in HCN and CO tend to coincide. Vibrationally excited HCN is detected in six sources: IRC+10011, π^1 Gru, R Hya, W Aql, and the RSGs AH Sco and VX Sgr, four of which also show vibrationally excited H^{13}CN. These six sources are also among the 11 which show emission in the CO $v = 1$ line.

Detecting more lines of HCN and CO is correlated with more detected lines of AlF, CS, SiS, AlO, TiO, and SiO, as well as a higher mass-loss rate ($\dot{M}$). Additionally, CO is correlated with

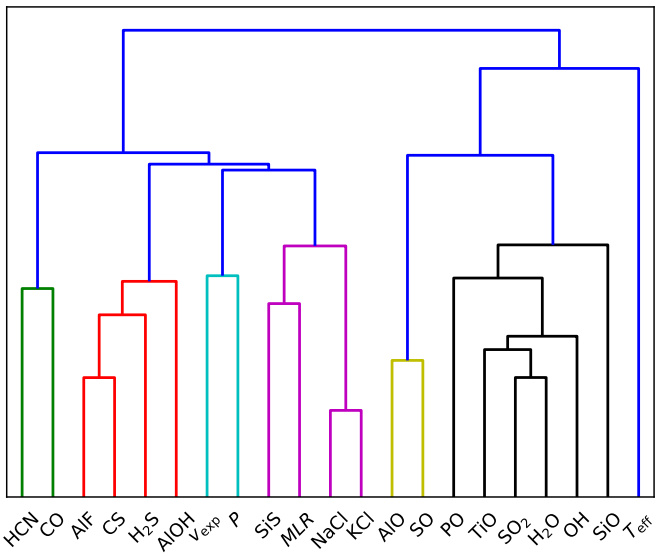


Fig. 3. Dendrogram of the correlations in Fig. 2, showing the hierarchical relationships between the different parameters. A closer connection point (lower down in the diagram) between two parameters signals a stronger relationship. The dark blue lines indicate the top-level division into seven clusters, and the other colors are simply to guide the eye in distinguishing between the different clusters.

detecting more lines of H_2S, NaCl, KCl, and PO; while HCN is correlated with detecting more lines of AlOH, SO, and SO_2, as well as a larger expansion velocity (v_{exp}). The detection of more isotopologues and vibrationally excited lines of CO and HCN at higher mass-loss rates is due to a denser wind, and most of the correlated molecules are also preferentially seen in denser winds. Some of these molecules, such as SiS and H_2S, are known tracers of higher mass-loss rate winds (Danilovich et al. 2017, 2018). Others, such as AlF, AlOH, AlO, and KCl, are expected to have fairly low abundances (Agúndez et al. 2020) and hence would only be detectable in a sufficiently dense wind. To further explain the observed correlations, a higher $\dot{M}$ is also correlated with a higher expansion velocity, and some of the molecules like SiO, PO, and SO_2 show vibrationally excited transitions in similar sources as vibrationally excited CO and HCN, which may imply these molecules are excited in similar regions of the wind.

3.3.2. Cluster 2: AlF, CS, H_2S, AlOH

The second cluster contains the molecules AlF, CS, H_2S, and AlOH. AlF is detected in 7/17 sources – GY Aql, IRC+10011, IRC-10529, U Her, W Aql, and the RSGs AH Sco and VX Sgr – of which W Aql also shows the corresponding $v = 1$ transition. CS is detected in one transition in 10/17 sources, of which five sources also show a ^{13}CS line: GY Aql, IRC+10011, IRC-10529, VX Sgr, and W Aql. H_2S has one detected transition, in 5/17 sources: AH Sco, GY Aql, IRC+10011, IRC-10529, and VX Sgr. AlOH has two $v = 0$ transitions, and is detected in 5/17 sources: AH Sco, GY Aql, IRC+10011, U Her, and VX Sgr.

AlF and CS are very strongly correlated, with all five sources showing ^{13}CS also detected in AlF. Further, all four molecules in this cluster are strongly correlated with each other and tend to be detected in the same sources. 4/5 sources showing H_2S also show AlOH, and all sources with either molecule also show AlF. All four molecules are also correlated with a longer pulsation period (P), higher mass-loss rate ($\dot{M}$), and detecting more lines of SiS, NaCl, AlO, and SO. Three-out-of-four molecules are further correlated with detecting more lines of HCN, CO, KCl, and PO, as well as a larger expansion velocity (v_{exp}).

These correlations can largely be explained by the similarities between the four sources AH Sco, GY Aql, IRC+10011, and VX Sgr. These sources have the second to eighth longest periods, and highest to seventh highest mass-loss rates. They all show a fair number of SiS lines, and include two of the three sources with detections of NaCl (see Sect. 3.3.4). The RSGs AH Sco and VX Sgr are the two sources which show the most lines of both AlO and SO (see further discussion in Sect. 3.3.5). Regarding HCN and CO: all four sources show their ^{13}C isotopologues and the CO $v = 1$ transition, three show vibrationally excited HCN and two also show vibrationally excited H^{13}CN. IRC+10011 is one of two sources showing KCl emission. All four sources are among the 11 showing PO emission, and the group contains 2/5 sources showing vibrationally excited transitions of PO. Finally, these four sources have the third to ninth largest expansion velocities.

The strong correlation between AlOH and AlO is expected due to their close chemical coupling (Mangan et al. 2021; Gobrecht et al. 2022). The strong correlation between AlOH and AlF probably comes from AlF's formation reaction AlOH + HF $\rightarrow$ AlF + H_2O; and the correlation between AlO and AlF also follows from the lesser formation reaction AlO + HF $\rightarrow$ AlF + OH (Danilovich et al. 2021).

3.3.3. Cluster 3: v_{exp}, P

The third cluster contains expansion velocity (v_{exp}) and pulsation period (P), which are weakly correlated with each other. The clustering of these parameters is not unexpected, as for AGB stars both expansion velocity and pulsation period tend to increase as they evolve (Habing & Olofsson 2003), along with the mass-loss rate. In fact, for a constant and spherical mass loss we expect a perfect correlation between v_{exp} and the mass-loss rate, so the correlation of 0.48 seen here is further evidence of wind asymmetries.

A larger expansion velocity and longer pulsation period is correlated with detecting more lines of AlF, H_2S, AlOH, and SiS, as well as a larger mass-loss rate. The expansion velocity is also correlated with detecting more lines of HCN, while the pulsation period is correlated with detecting more lines of CS, AlO, and SO. As discussed in Sect. 3.3.1, most of these molecules are preferentially detected in a dense (higher $\dot{M}$) wind.

3.3.4. Cluster 4: SiS, $\dot{M}$, NaCl, KCl

The fourth cluster contains the molecules SiS, NaCl, and KCl, along with the mass-loss rate ($\dot{M}$). NaCl is detected in three sources: GY Aql, IRC+10011, and IRC-10529, of which IRC+10011 and IRC-10529 also show vibrationally excited transitions and transitions of Na^{37}Cl. KCl is detected only in these same two sources: IRC+10011 and IRC-10529. SiS is detected in 10/17 sources, while its various isotopologues of ^{29}Si, ^{30}Si, ^{33}S, and ^{34}S are detected in between five and seven sources, including GY Aql, IRC+10011, and IRC-10529. GY Aql also shows vibrationally excited transitions of SiS up to $v = 1$, while IRC+10011 and IRC-10529 show vibrationally excited transitions up to $v = 3$. The only sources showing higher vibrationally excited transitions of SiS (up to $v = 6$) are the two S-type sources π^1 Gru and W Aql, which are expected to have higher SiS abundances (Danilovich et al. 2018), and also show transitions in all the isotopologues. Furthermore, IRC+10011, IRC-10529,

GY Aql, π^1 Gru, and W Aql have between the second and ninth highest mass-loss rates in our sample.

Detecting more lines of SiS and a higher mass-loss rate are correlated with detecting more lines of HCN, CO, AlF, CS, H_2S, AlOH, and of course NaCl and KCl, along with larger expansion velocities (v_{exp}) and longer pulsation periods (P). These correlations can largely be explained by the molecular content of GY Aql, IRC+10011, IRC-10529, π^1 Gru, and W Aql. As noted above, these sources show many lines of SiS and high mass-loss rates. Most of them are detected in vibrationally excited transitions of HCN, and IRC-10529 and W Aql are the only sources to show a transition of the ^{17}O isotopologue of CO. All but π^1 Gru show transitions of AlF and CS, and they make up 3/5 and 2/5 of the sources showing transitions of H_2S and AlOH, respectively. When it comes to expansion velocities π^1 Gru has by far the largest, and the other sources are up to the tenth largest. They also have the fourth to eighth longest periods, except π^1 Gru which instead has one of the shortest periods in our sample. Furthermore, as noted in Sect. 3.3.3, AGB stars tend to increase in mass-loss rate, expansion velocity, and pulsation period as they evolve, explaining their correlation.

Within this cluster, the chemically similar KCl and NaCl are very strongly correlated with each other. They are also correlated with detecting more lines of CO, AlF, CS, H_2S, and PO. NaCl is additionally correlated with detecting more lines of AlOH. The strong correlation between KCl and NaCl is because they are both formed from reactions of the metal atom with HCl (Plane et al. 1989; Helmer & Plane 1993). The correlation with another halogen-bearing molecule, AlF, implies that these chemically related molecules may coexist in similar environments in the stellar wind, though note that the only source where AlCl is detected, W Aql, does not show any transitions of KCl or NaCl. Through AlF the correlations with AlOH and the sulfur-bearing CS and H_2S can be explained (see Sect. 3.3.2), and the correlation with PO may be due to the main sources containing NaCl and KCl – IRC+10011 and IRC-10529 – also showing all the detected PO transitions, although they are only 2/5 sources to do so.

3.3.5. Cluster 5: AlO, SO

The fifth cluster contains the molecules AlO and SO, which are strongly correlated with each other. AlO is detected in 9/17 sources of which four also show vibrationally excited transitions: R Aql, U Her, and the RSGs AH Sco and VX Sgr. SO is detected in 14/17 sources, ten of which also show ^{34}SO. The less abundant isotopologue ^{33}SO is detected in five sources, and the single detected SO $v = 1$ transition is observed in seven sources. Of the sources showing transitions of AlO, the vast majority are detected in either both isotopologues or one isotopologue and the $v = 1$ transition of SO. Three of these sources – AH Sco, U Her, and VX Sgr – are seen in both SO isotopologues and its $v = 1$ transition.

The detection of more lines of AlO and SO is correlated with detecting more lines of HCN, AlF, CS, H_2S, AlOH, PO, TiO, SO_2, H_2O, and OH, as well as longer pulsation periods (P). Additionally, detecting more lines of AlO is correlated with detecting more lines of CO and a higher mass-loss rate ($\dot{M}$). Overall, AlO and SO are correlated with the other oxygen-bearing molecules, as expected, but also with the molecules in Cluster 1 (HCN, CO) and Cluster 2 (AlF, CS, H_2S, AlOH). As explained in Sect 3.3.2, the strong correlation between AlO and AlOH stems from their close chemical coupling, but the chemical links to SO and H_2S are less clear. One might suspect a connection through the sulfur chemistry, as both AlO and SO are also correlated with CS, but neither is correlated with SiS. However, it may be that the conditions required to populate the higher energy levels of SiS (and hence have more detected lines of SiS) differ from the conditions that excite more transitions of (vibrationally excited) AlO and (vibrationally excited and/or isotopologues of) SO. Overall, both Cluster 1 and Cluster 2 molecules tend to have many detected lines in the three sources showing the most lines of AlO and SO – AH Sco, U Her, and VX Sgr – which may explain the correlations. The grouping of the low mass-loss rate AGB star U Her with the high mass-loss rate RSGs AH Sco and VX Sgr here is unexpected, and will be explored further in a future paper.

3.3.6. Cluster 6: PO, TiO, SO_2, H_2O, OH, SiO

The sixth cluster contains the remaining oxygen-bearing molecules: PO, TiO, SO_2, H_2O, OH, and SiO. A PO doublet is detected in 11/17 sources, of which five sources – IRC+10011, IRC-10529, R Hya, S Pav, and the RSG AH Sco – also show the corresponding $v = 1$ doublet. TiO is detected in 7/17 sources, with vibrationally excited transitions detected in three sources: R Hya, and the RSGs AH Sco and VX Sgr. SO_2 is detected in 13/17 sources, with $^{34}SO_2$ in nine sources and vibrationally excited transitions detected in seven sources. Six of these sources have detections of both $^{34}SO_2$ and vibrationally excited SO_2: AH Sco, R Aql, R Hya, RW Sco, U Her, and VX Sgr. H_2O is detected in 15/17 sources, with intrinsically fainter and/or higher energy transitions in progressively fewer sources. OH is detected in 6/17 sources, of which five show both detected $v = 0$ doublets: R Aql, R Hya, S Pav, T Mic, and VX Sgr. SiO is detected in all sources: the main isotopologue in $v = 0$ and $v = 1$ and both ^{29}SiO and ^{30}SiO in a $v = 0$ transition. So more detected transitions implies the detection of more highly vibrationally excited transitions: up to $v = 4$ in the main isotopologue, which is seen in 13/17 sources; up to ^{29}SiO $v = 3$ which is seen in six sources – IRC+10011, IRC-10529, R Aql, R Hya, S Pav, and W Aql; and up to ^{30}SiO $v = 5$ which is seen in four sources – IRC+10011, R Aql, R Hya, and S Pav.

The molecules in this cluster are all correlated with each other, as expected, and most also show correlations with the other oxygen-bearing molecules. PO, TiO, and SiO are correlated with CO; PO, TiO, SO_2, and H_2O are correlated with AlOH; and all except SiO are correlated with AlO and SO.

PO is very strongly correlated with H_2O, which supports experimental findings that the reaction of excited P atoms with H_2O is a major formation route for PO (Douglas et al. 2022). The five sources with the most detected PO lines – that is the ones showing the $v = 1$ transition: AH Sco, IRC+10011, IRC-10529, R Hya, and S Pav – are also among the sources with the most detected H_2O lines, including R Hya which is the only source to show all ten H_2O transitions. Conversely, the six sources with no detected PO transitions – KW Sgr, π^1 Gru, SV Aqr, U Del, V PsA, and W Aql – also show the fewest detected H_2O lines. The two S-type sources, π^1 Gru and W Aql, show neither PO nor H_2O lines, and the others only have one to two H_2O lines and are overall quite line-poor. However, from the dendrogram in Fig. 3 we can see that PO is less closely grouped with H_2O than SO_2, TiO, and OH are. This is likely due to PO showing correlations that H_2O lacks with a range of molecules – CO, CS, H_2S, NaCl, and KCl – in addition to their shared correlations with the other oxygen-bearing molecules. This may be mostly due to IRC+10011 and IRC-10529 which are, for example, two of the three sources with detected NaCl or KCl, and two of the five

sources showing H_2S. Conversely, in R Hya and S Pav, which show the most H_2O lines, we do not detect any transitions of NaCl, KCl, or H_2S.

Detecting more lines of TiO is correlated with detecting more lines of HCN, CO, and H_2S, alongside its correlations with the other oxygen-bearing molecules. There are up to nine TiO lines, with vibrationally excited transitions in $v = 1$, with E_{low} values around 1500 K, and $v = 2$, with E_{low} values around 3000 K. Hence detecting more lines of TiO implies more vibrationally excited lines, as is also the case for HCN and CO. The three sources with the most TiO lines – AH Sco, R Hya, and VX Sgr – are also the only sources to show vibrationally excited TiO transitions. The ^{13}C isotopologues of HCN and CO are detected in all three of these sources, as are the CO $v = 1$ and HCN $v_2 = 1$ transitions. The vibrationally excited CO $v = 1$ has an E_{low} value around 3000 K, just as the $v = 2$ transitions of TiO do, and the HCN $v_2 = 1$ transitions have E_{low} values around 1000 K, roughly similar to the $v = 1$ transitions of TiO. This implies that these vibrationally excited transitions may originate in similar regions of the circumstellar envelope, potentially explaining their correlation.

SO_2 and H_2O are very strongly correlated with each other, and SO_2 is also very strongly correlated with SO. The four sources with the most transitions of SO_2 – AH Sco, R Hya, U Her, and VX Sgr – are also the four with the most SO transitions: this includes transitions of its ^{33}S and ^{34}S isotopologues, as well as the one vibrationally excited SO transition. These four sources are also in the half of the sample with the most detected H_2O transitions, as indeed are all seven of the sources with the most SO_2 transitions.

SO_2 and SO are chemically connected by the fast reaction SO + OH → SO_2 + H (DeMore et al. 1997). As SO_2 is created from SO, one would expect these molecules to be anti-correlated, but this is probably ameliorated by photolysis of SO_2 back to SO. This reaction also helps explain the strong correlation between SO_2 and OH, and its correlation with H_2O as observationally the photodissociation of H_2O into OH is linked with an abundance peak in SO (Danilovich et al. 2016). We detect up to 66 lines of SO_2 in our sources, with vibrational levels up to $v_2 = 2$. A majority (~65%) of all the detected SO_2 lines are in the $v = 0$ state, and most of the rest are in the $v_2 = 1$ state. The energy of the lower transition level (E_{low}) values are up to 2300 K, with the $v = 0$ transitions spanning the whole range, while the $v_2 = 1$ transitions have E_{low} values above 750 K, and the four $v_1 = 1$ and three $v_2 = 2$ transitions all have energies above 1500 K. The single vibrationally excited transition of SO has an E_{low} value around 1600 K. The 10 detected H_2O lines have much higher E_{low} values (≥3900 K) and many are in vibrationally excited states. There is some indication that in sources with more detected transitions of SO_2, SO, and H_2O, these transitions are probing a hotter gas as they generally have high E_{low} values. However, the H_2O transitions we can detect have much higher energies than any SO_2 or SO transitions, implying they are probing a different region of the wind, and furthermore these sources also show more transitions of ^{33}S and ^{34}S isotopologues. Therefore, the strong correlations between SO_2 and SO, and SO_2 and H_2O seem to also reflect increased abundances of all three molecules in certain sources.

OH only shows significant correlations with the other oxygen-bearing molecules: strong correlations with SO_2, H_2O, and TiO, and weak correlations with AlO, SO, PO, and SiO. The strong correlation between OH and SO_2 can be explained by the fast SO_2 formation reaction described above. OH and H_2O are expected to be chemically related, we only detect transitions at high energies – ≥3900 K for H_2O, and ≥4700 K for OH – which are likely to be excited in similar regions around the star. The strong correlation between OH and TiO is surprising from a chemical standpoint as they would be expected to be anti-correlated due to the fast reaction TiO + OH → TiO_2 + H. However, the two molecules are not necessarily co-located even if they are found in the same sources, so this reaction may not be very prominent. The detection of TiO_2 does not help resolve this issue as its transitions are inherently fairly weak, and hence not unexpectedly TiO_2 is detected in only the highest mass-loss rate source, VX Sgr.

SiO shows strong correlations with CO, H_2O, and PO; and weak correlations with larger pulsation amplitudes, and detecting more lines of HCN, SO_2, TiO, and OH. SiO is seen in every source due to its strong $v = 0$ and $v = 1$ lines, but some sources show more highly vibrationally excited transitions up to $v = 5$, and lines from the ^{29}SiO and ^{30}SiO isotopologues. The five sources with the most PO transitions – AH Sco, IRC+10011, IRC-10529, R Hya, and S Pav – are among the seven sources with the most SiO transitions. These sources also have among the most CO and H_2O transitions. Most of the SiO transitions with $v > 0$ are dominated by maser emission and weak masers are seen even in $v = 0$ for some stars (Pimpanuwat et al., in prep.). The strong correlations with CO, H_2O and PO may indicate these high-v SiO masers, with E_{low} values up to ~8600 K, form in similar regions around the star as the high-energy lines of H_2O and PO, and the $v = 1$ line of CO. Similarly, sources with more detected transitions of HCN, SO_2, TiO, and OH also tend to show vibrationally excited lines of these molecules, which may also form in similar regions.

3.3.7. Cluster 7: T_{eff}

Finally, we have a cluster containing only the effective temperature of the star, T_{eff}, which shows the only significant negative correlation: a weak negative correlation with detecting more lines of AlOH. There are two detected lines of AlOH, and both are low energy $v = 0$ transitions. Two lines of AlOH are detected in GY Aql, IRC+10011, and the RSG VX Sgr, while a single line is detected in U Her and the RSG AH Sco. GY Aql, IRC+10011, and U Her have effective temperatures at or below the median value for our sources, while the RSGs VX Sgr and AH Sco have the highest effective temperatures. So this negative correlation between effective temperature and detections of AlOH seems to mainly hold for AGB sources. The correlation might potentially be explained by a relative lack of alumina dust (and hence more free Al to form AlOH) in these sources. There is some evidence for alumina dust being the major dust component in warmer semi-regular variable AGB stars, as it can form and survive at higher temperatures than silicate dust (Gobrecht et al. 2016, and references therein), and GY Aql, IRC+10011, and U Her are all relatively cool Mira variables.

3.4. SO and SO_2 spatial distributions

While a full analysis of the spatially resolved molecular data, including a radiative transfer analysis to obtain molecular abundance distributions, is beyond the scope of this paper, we have performed an initial analysis of the spatial distributions of SO and SO_2 and how they relate to the mass-loss rate of the source. As was first put forward by Danilovich et al. (2016), there are two classes of SO distributions around AGB stars. For the lower mass-loss rate stars, the SO abundance peak is centred on the

star, whereas for the higher mass-loss rate AGB stars, the relative SO abundance has a shell-like distribution. Danilovich et al. (2016) found that the e-folding radius (the radius at which the abundance has dropped by a factor of $1/e$) of SO for the low mass-loss rate stars and the radius of the abundance peak for the higher mass-loss rate stars closely corresponded to the photodissociation radius of H_2O (that is, the radius at which the abundance of OH, the photodissociation product of H_2O, peaks – see the empirical relation from Netzer & Knapp 1987; Maercker et al. 2016). This was interpreted to be the result of different SO formation pathways with varying wind density. A similar analysis could not be performed in that work for SO_2 since there were not enough detected lines for the higher mass-loss rate stars.

Here, we carefully examine the data to ascertain whether our observations are consistent with the distributions first proposed by Danilovich et al. (2016). Hence we must define the two classes of SO and SO_2 distributions observationally. We consider a centralized SO or SO_2 distribution to be one where, for the majority of detected lines, the peak of the molecular emission in centred on the continuum peak and decreases monotonically with distance from the star. Conversely, for a shell-like distribution, the molecular emission for most lines does not decrease uniformly with angular distance from the star: the radial distribution is either flat or shows a second peak offset from the continuum peak and often associated with a (broken) ring-like structure. The shell-like distributions may be apparent in integrated intensity maps, but are generally more clearly seen in channel maps (see Appendix B). They are also more clearly detectable in lower-energy lines.

SO and SO_2 were detected for most of the stars in the ATOMIUM sample. The only stars without SO and SO_2 detections are the two S-type stars, W Aql and π^1 Gru, and the line-poor U Del. The line-poor RSG KW Sgr was detected in SO but not in SO_2. Henceforth, when referring to "all" stars in discussing SO and SO_2 detections, these sources are not included.

In Appendix B we show channel maps of the bright SO_2 $v = 0$ $J_{K_a,K_c} = 14_{0,14}-13_{1,13}$ line at 244.254 GHz in all the sources. The channel maps of R Aql, GY Aql, IRC-10529, and IRC+10011 (Figs. B.7–B.10), as well as VX Sgr (Fig. B.12), clearly show an overall shell-like structure. A similar shell-like structure is also seen for SO in these sources (shown around R Aql in the $v = 0$ $N_J = 5_5-4_4$ line at 215.221 GHz in Fig. B.13), but the SO emission is brighter closer to the continuum peak – that is, the star itself – with fainter extended structures distributed similarly to the SO_2. These minor differences suggest that SO_2 is predominantly found further from the star than SO is, which could be the result of SO_2 being a daughter species (formed from SO) for this group of stars. A similar trend is not seen for the stars with centralized SO_2 emission, where SO and SO_2 are both distributed similarly close to the continuum peaks. If anything, there is a slight tendency among the centralized SO_2 sources for the SO emission to be more extended than the SO_2 emission, but this could be a result of different abundances, some SO lines being inherently brighter than many SO_2 lines, or differing excitation conditions between the examined lines.

3.4.1. AGB stars

The two brightest SO lines covered by our frequency setup are $N_J = 5_5-4_4$ at 215.221 GHz and $N_J = 6_5-5_4$ at 251.826 GHz, the two lines with $\Delta N = \Delta J = -1$ and $v = 0$. These two lines are detected for all 14 stars with any SO detections. Overall six SO lines in the $v = 0$ vibrational ground state are detected in our sample, with $E_{low} \sim 10$–90 K. The most energetic line detected in our sample is the $N_J = 6_7-5_6$ line at 259.857 GHz ($E_{low} = 1635$ K) in the first vibrationally excited state ($v = 1$), which was detected for ten stars. The only other line in $v = 1$ that was covered by our observations has a predicted intensity (following the intensity calculations of Pickett et al. 1998, at 300 K) almost three orders of magnitude lower than the detected line, so we do not expect to detect it. With such a small number of SO lines covered over a relatively narrow range of energies, aside from the single line in $v = 1$, it is difficult to draw any firm conclusions about trends across the sample. Without a more detailed analysis involving radiative transfer modelling, which is beyond the scope of the present work, we cannot easily determine which lines were not detected for a particular source because of excitation conditions in the CSE or because of the sensitivity of our observations.

SO_2 gives us more opportunity for such an analysis since many more lines, coming from a wide range of energy levels, fall in the covered frequency range and many of these were detected by our observations. One source, V PsA shows only two detected SO_2 lines: $J_{K_a,K_c} = 14_{0,14}-13_{1,13}$ at 244.254 GHz and $J_{K_a,K_c} = 30_{4,26}-30_{3,27}$ at 259.599 GHz. These are the lines with the highest predicted intensities (at 300 K) suggesting that sensitivity is the main limitation to detecting further SO_2 lines. With so few lines, we cannot draw any further conclusions for V PsA and exclude it from further discussion of SO_2. The other ten AGB stars for which we detect SO_2 (GY Aql, IRC+10011, IRC−10529, R Aql, R Hya, RW Sco, S Pav, SV Aqr, T Mic, and U Her), all have detections of at least six lines in the ground vibrational state (with $30\ \mathrm{K} \leq E_{low} \leq 280$ K). Four stars (R Aql, R Hya, U Her and S Pav) also have detections of at least four lines in the $v_2 = 1$ vibrational state.

The observational categories defined above, with shell-like or centralized SO_2 distributions, approximately correspond to the categories put forward by Danilovich et al. (2016) for SO, and are applicable to SO_2 as the emission of these two molecules for the same star tends to be broadly similar. Ordering the sources with SO_2 detections by mass-loss rate, as in Table 5, shows a general tendency for the low mass-loss-rate sources to have centralized distributions and higher mass-loss-rate sources to have shell-like distributions. We note, however, that the mass-loss rates for many of the stars in the ATOMIUM sample are uncertain (see Sect. 2.3).

From an examination of the detected SO_2 lines for each AGB source, we also found a tendency for the sources with shell-like emission to be detected in lower-energy SO_2 lines, while the sources with centralized emission tended to be detected in more higher-energy lines (in addition to the lower-energy lines). Three out of the six stars with centralized distributions (R Hya, U Her and S Pav) also show vibrationally excited emission. In contrast, only one star with shell-like emission (R Aql) has vibrationally excited SO_2 detections. Furthermore, some of the highest energy SO_2 lines in the ground vibrational state (such as $J_{K_a,K_c} = 45_{6,40}-44_{7,37}$ at 229.750 GHz with $E_{low} = 1034$ K) are only detected in the centralized AGB sources. To quantify this trend, Table 5 includes the average of the lower energy levels of each detected line for each star. Overall, there is a trend for the sources with a shell-like distribution to have lower median E_{low} values than the sources with a centralized distribution. This trend is confounded by RW Sco and SV Aqr, two centralized sources with median E_{low} values below 100 K. However, these sources both show faint SO_2 emission, making the classification of their emission distribution more difficult. They also have the fewest SO_2 detections among the centralized sources, tending to

Table 5. SO_2 spatial distributions, radial extents, and median lower level energies in all sources.

Source	Max r R_*	Med. E_{low} (K)	N	SO_2 distribution
S Pav	144	443	35	centralized
RW Sco	451	83	17	centralized(†)
T Mic	214	119	21	centralized
R Hya	51	281	33	centralized
SV Aqr	282	61	7	centralized(†)
U Her	289	489	38	centralized
R Aql	510	138	23	shell-like
GY Aql	188	82	15	shell-like
IRC-10529	711	66	10	shell-like
IRC+10011	692	82	11	shell-like
AH Sco	342	816	55	centralized
VX Sgr	400	816	57	shell-like

Notes. Spatial distributions with uncertain classifications due to faint SO_2 emission are marked with (†). AGB stars are listed above the horizontal line and RSGs below.

show only the brightest SO_2 lines which generally have low E_{low} values.

The observed trend between SO_2 line energy and spatial distribution is not a consequence of naturally having greater spatial resolution for the nearest sources, since our two most distant sources (IRC−10529 and IRC+10011 see Table 1) have shell-like distributions of SO_2 lines, while two of the nearest sources (T Mic and R Hya) have centralized SO_2 lines. It is also not caused by lines with different energies being excited at different distances from the star, since this dichotomy holds if we use only the $J_{K_a,K_c} = 14_{0,14} - 13_{1,13}$ line at 244.254 GHz, which is one of the brightest and most frequently detected lines, to make the determination. We also note that there is a general tendency for centralized sources to have more SO_2 lines detected than the shell-like sources: the maximum radial extent of SO_2 is found to be negatively correlated ($r \sim -0.3$) with the median E_{low} values and the number of SO_2 lines detected in each source. This is most likely a consequence of the excitation conditions. The SO_2 in centralized sources is found closer to the star and hence in a warmer environment, while a significant portion of the shell-like emission originates further out in a cooler region of the wind. At higher temperatures where there are more potential SO_2 transitions to be excited, and hence unsurprising that more (and more energetic) SO_2 lines are detected.

We can also compare the measured extents of SO_2 in our AGB sources with what is expected from the chemical model of Van de Sande et al. (2018), for which calculations for each ATOMIUM source (using the stellar parameters in Table 1) is shown in Fig. 4. The sources are arranged as in Table 5, in order of increasing mass-loss rate, and for each the colored bar shows the modeled e-folding radius of the SO_2 abundance, and the black line the maximum measured 3σ extent of SO_2 lines from our observations. The chemical model assumes a power-law temperature profile with exponent ε, as implemented in Van de Sande et al. (2018) and Maes et al. (2023):

$$T = T_\star \left(\frac{r}{R_\star}\right)^{-\varepsilon}, \quad (2)$$

where $T_\star$ is the surface temperature of the AGB star and $R_\star$ the stellar radius. As the temperature profile in the outflows is generally not known, a range of models with different temperature profiles, varying ε from 0.3 to 1.0 (in steps of 0.05), were calculated. This range of models is included in Fig. 4 as an uncertainty on the model result.

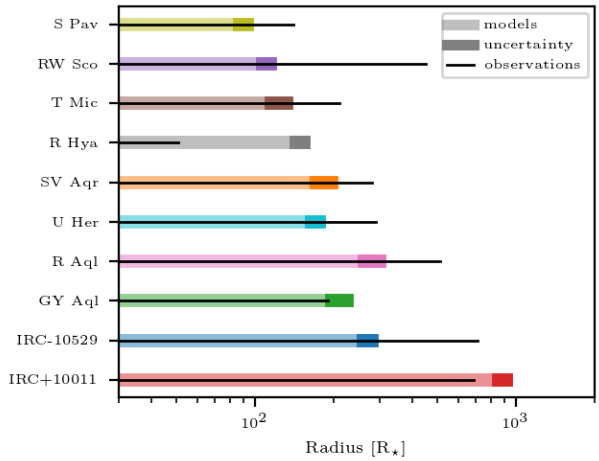


Fig. 4. Emission sizes of SO_2 as expected from chemical models, and our maximum measured line extents, for each source.

An increase in the SO_2 radius with increasing mass-loss rate is clearly seen from the model results, and the observationally measured extents broadly follow the same trend. In general, the measured SO_2 extents are larger than the modeled e-folding radii, and some discrepancy is expected when comparing modeled abundances with measured emission intensities, which does not take, for example, excitation effects into account. There are, however, two significant outliers: RW Sco which has a much larger measured SO_2 extent than expected from the models, and R Hya whose measured extent is much smaller than expected. There are several reasons to suspect the mass-loss rate we use for RW Sco is underestimated, which would explain its larger measured extent. First, its SO_2 distribution is shell-like rather than centralized, suggesting it should have a relatively high mass-loss rate to follow the SO_2 distribution trend. Second, the mass-loss rate value is taken from Groenewegen et al. (1999), who use an empirical formula from Olofsson et al. (1993) linking the integrated CO intensity with the mass-loss rate. Olofsson et al. (1993) see evidence that their formula underestimates the mass-loss rates for low mass-loss rate objects, like RW Sco. This is in addition to the inherent uncertainties in the formula, which are a factor of ∼5. The discrepancy between the measured extent of SO_2 and the prediction from the chemical model is further evidence that the mass-loss rate of RW Sco may be underestimated. As for the unexpectedly small observed extent of SO_2 in R Hya, its geometry may provide an explanation: Homan et al. (2021) find evidence for an equatorial density enhancement, and possible rotating disk, in the inner 0.4″ of the wind, which corresponds to ∼35 $R_\star$. This is similar to the maximum measured extent of SO_2 (51 $R_\star$), so it may be that SO_2 is largely confined to this disk, or not abundant enough to be detected outside it. Furthermore, the equatorial density enhancement increases the uncertainty of the calculated mass-loss rate by a factor of a few (El Mellah et al. 2020). Some discrepancy may also be caused by the limitations of the chemical model: it assumes a smooth, spherically symmetric outflow, with a constant expansion velocity and mass-loss rate. R Hya, with its equatorial density enhancement, deviates significantly from these assumptions. Additionally, most of the ATOMIUM sources show additional structure or deviations from spherical symmetry (Decin et al. 2020; Gottlieb et al. 2022) which may affect the chemistry in the wind.

3.4.2. RSG stars

The two red supergiants, VX Sgr and AH Sco, are detected in seven and six SO transitions, respectively, out of the seven total detected in ATOMIUM. They are also extensively detected in SO_2, with more than 45 lines seen for each star, and approximately a third of this count lying in the $v_2 = 1$ excited state. There are additionally three tentative detections of SO_2 towards AH Sco in the $v_2 = 2$ state and four tentative detections towards VX Sgr in the $v_1 = 1$ state. Previous studies of the more massive and highly evolved red supergiants VY CMa and NML Cyg (Adande et al. 2013; Andrews et al. 2022) report asymmetric and localised emission for both stars, including multiple components of SO and SO_2. In contrast, when considering only the lower-energy ground vibrational state SO and SO_2 emission observed by ATOMIUM, we do not see directed outflows for VX Sgr or AH Sco. Based on observations of other molecular lines, it is likely that both of these stars have complex circumstellar structures. However, when considering only the SO and SO_2 lines, we can place both RSGs into the categories we have defined here for AGB stars: VX Sgr has shell-like SO_2 and SO emission, while AH Sco has more uniform emission resembling the centralized AGB stars. Since both stars have high mass-loss rates and many high-energy SO_2 line detections, making them the two stars with the highest mean energy levels across the SO_2 lines, they do not fit the trends observed for AGB stars. In light of this and the previous studies of SO and SO_2 for RSGs, it is likely that different factors contribute to RSG SO and SO_2 distributions, possibly including different formation mechanisms, compared with the AGB stars. However, a more detailed analysis of the ATOMIUM RSGs is beyond the scope of this paper.

3.5. Isotopic ratios

In order to calculate molecular abundances from our observational data, extensive radiative transfer modeling would be required. However, with a few assumptions we can calculate isotopic ratios from observations of different isotopologues in the same transitions. These ratios provide constrains on the nucleosynthesis within AGB and RSG stars, their stellar mass and age, and the Galactic environment in which they were born. We have limited the calculation of isotopic ratios to pairs of transitions in $v = 0$ with at least one minor isotope in both molecules, to avoid the problem of potential missing flux or high optical depth in the main isotopologue lines. Hence we assume all the lines used to calculate isotopic ratios are optically thin and have no missing flux; assumptions which are supported by their narrow line shapes and limited angular extents. We have also checked that the chosen lines don't appear to be masing, as none are excessively bright or narrow. In practise, this limits us to calculations with isotopologues of SiS, as some lines of for example SiO isotopologues fall outside our observed frequency ranges.

We also need to account for the differences in line strength between different isotopologues, so to calculate the isotopic ratio between example isotopologues ${}^aX$ and ${}^bX$ we have used the following formula (Danilovich et al. 2020b):

$$\frac{{}^aX}{{}^bX} = \frac{I({}^aX)}{I({}^bX)} \left(\frac{\nu_{{}^aX}}{\nu_{{}^bX}}\right)^{-2}, \tag{3}$$

where I is the integrated intensity and ν the transition frequency for each isotopologue. For each pair of transitions we measured the integrated intensity in the spectrum where the sum of the intensities of both transitions is maximized. By taking the integrated intensities from spectra extracted at the same angular resolution and aperture size, the beam filling factors should be the same for both transitions. The calculated ratios are given in Table 6. In cases where an isotopic ratio can be calculated from multiple pairs of transitions for a single source, Table 6 contains the weighted average of these ratios.

Table 6. Isotopic ratios calculated from single and double isotopologues of SiS.

Source	Isotopologues	Ratio
GY Aql	$^{29}Si/^{30}Si$	1.3 ± 0.3
IRC+10011	$^{29}Si/^{30}Si$	1.7 ± 0.1
IRC-10529	$^{29}Si/^{30}Si$	1.2 ± 0.1
π^1 Gru	$^{29}Si/^{30}Si$	0.9 ± 0.5
VX Sgr	$^{29}Si/^{30}Si$	4 ± 1
W Aql	$^{29}Si/^{30}Si$	1.5 ± 0.5
W Aql	$^{33}S/^{34}S$	0.4 ± 0.3
IRC+10011	$^{34}S/^{32}S$	0.11 ± 0.06
IRC-10529	$^{34}S/^{32}S$	0.04 ± 0.02
W Aql	$^{34}S/^{32}S$	0.06 ± 0.02

The silicon $^{29}Si/^{30}Si$ isotopic ratios are found to be generally in the range 1–2 for our oxygen-rich and S-type AGB stars, with the RSG VX Sgr showing a larger ratio of ∼4. Previously measured values in oxygen-rich sources are also in the range 1–2: 1.7 in IK Tau (Danilovich et al. 2019); 1.58 in R Dor (De Beck & Olofsson 2018); between 0.99 and 1.35 in a sample of ten M-type AGB stars, and around 1.5 in two RSG stars (Peng et al. 2013). The solar value of 1.52 (Asplund et al. 2021) is similarly in the same range as the AGB stars.

The high $^{29}Si/^{30}Si$ ratio of 4 ± 1 measured in VX Sgr is outside the range of almost all measured Si ratios in evolved stars and in the local galaxy in general. $^{29}Si/^{30}Si$ ratios measured from presolar SiC grains are all close to the solar ratio of 1.52 (Zinner et al. 2006), as are measurements of various sources at different Galactic radii (Monson et al. 2017). The only literature ratio we were able to find that matches VX Sgr are ratios ∼1–10 from infrared observations of the red giant EU Del (Pavlenko et al. 2020). EU Del is a very low-mass and metal-poor star, located below the tip of the red giant branch (McDonald et al. 2016), so it is not similar to the high mass-loss rate RSG VX Sgr. $^{29}Si/^{30}Si$ ratios above 2 have also been measured in the AGB stars χ Cyg (2.4) and V1111 Oph (2.9) by Ukita & Kaifu (1988), as well as a measured value of 3 ± 1.5 in IK Tau by Decin et al. (2010), consistent with the value of 1.7 cited above. We note that VX Sgr has been shown to have some puzzling characteristics (Tabernero et al. 2021), so this anomalous $^{29}Si/^{30}Si$ ratio may be another signature of its odd nature.

For most oxygen-rich AGB stars we do not expect the $^{29}Si/^{30}Si$ ratio to change during the AGB phase (Zinner et al. 2006), so the measured ratios reflect those from the stars' natal clouds. The primary isotope of silicon, ^{28}Si, is an α-process element, while the two isotopes ^{29}Si and ^{30}Si form largely from ^{25}Mg and ^{26}Mg during Ne burning, which creates similar amounts of both isotopes (within a factor ∼1.5, Woosley & Weaver 1995), as well as during core-collapse Type II supernovae. According to the models of Kobayashi et al. (2011), $^{29}Si/^{30}Si$ ratios of ∼2–4 can be formed in the core-collapse supernovae of 25–30 $M_\odot$ progenitors, though the supernovae of both lower and higher mass progenitors produce much lower ratios. Some ^{29}Si and ^{30}Si also forms from ^{28}Si in the He-burning shells of AGB stars, but in small and similar amounts (Monson et al. 2017).

The sulfur $^{33}S/^{34}S$ isotopic ratio is only measured in the S-type star W Aql, where it is found to be 0.4 ± 0.3. This ratio has been measured to be 0.19 ± 0.03 in IK Tau (Danilovich et al. 2019), and 0.17 ± 0.02 in R Dor (Danilovich et al. 2020b). The solar value is 0.17 (Asplund et al. 2021), consistent with the two oxygen-rich AGB stars and also with W Aql within the uncertainties.

The sulfur $^{34}S/^{32}S$ isotopic ratio is found to be 0.06 ± 0.02 in the S-type star W Aql, and 0.04 ± 0.02 and 0.11 ± 0.06 in IRC+10011 and IRC-10529, two high mass-loss rate oxygen-rich sources. A slightly lower ratio of 0.03 is found in IK Tau (Danilovich et al. 2019), while a value of 0.04 is found in the oxygen-rich RN Cnc (Winters et al. 2022), and both R Dor and the Sun have similar values of 0.05 (Danilovich et al. 2020b; Asplund et al. 2021). Hence all our measured $^{34}S/^{32}S$ ratios are consistent with the solar value, within uncertainties.

Both the main sulfur isotope ^{32}S and the second most abundant isotope ^{34}S are primarily produced through explosive nucleosynthesis during Type II supernovae, so these values measured in AGB stars reflect the abundances in the stars' natal clouds. However, the abundance of the ^{33}S isotope may increase during the AGB phase via the slow neutron capture process (Anders & Grevesse 1989). This is consistent with its detection in the S-type star W Aql, which is more evolved than the oxygen-rich stars in our sample.

3.6. Unidentified lines

Table A.4 lists the 28 unidentified lines in the ATOMIUM sample, and in which sources they are detected. Four of these lines – U221.507, U254.791, U255.023, and U259.329 – are coincident with calculated lines of SO_2 in its v_3=1 state. The lines were observed toward stars with SO_2 lines in $v = 0$ and $v_2 = 1$ such that the assignments appear to be reasonable. On the other hand, except for S Pav, toward which two such lines were detected, only one line was detected for the other stars and none of these stars displayed emissions in $v_2 = 2$ or $v_1 = 1$. We would therefore have to invoke very selective excitations, which appears to be too speculative at present even if this cannot be ruled out entirely. Therefore, we refrain from viewing these assignments even as tentative ones.

U253.973, seen in AH Sco, IRC-10529, and VX Sgr, is possibly due to NS, a blend of its $v = 0$ $J = 11/2 - 9/2, \Omega = 1/2, F = 13/2 - 11/2^f$ transition at 253.968 GHz, and $J = 11/2 - 9/2, \Omega = 1/2, F = 11/2 - 9/2^f$ at 253.971 GHz. Facts in favor of this assignment are that these are the brightest NS lines covered by our observations, and the NS molecule has been detected in IK Tau (Velilla Prieto et al. 2017). Unfortunately, the corresponding $F = 13/2 - 11/2^e$ and $F = 11/2 - 9/2^e$ transitions around 253.570 GHz are not covered by our observations, and the U-line is blended with an SO_2 line in AH Sco and VX Sgr, making the assignment to NS very tentative.

Comparing all the U-line frequencies with the rotational lines of the following species – MgO, CaO, NaO, FeO, ZrO, MgOH, CaOH, NaOH, ZrS, MgS, and CaS – we tentatively conclude that there is no evidence for new metal oxides, hydroxides, and sulfides in the ATOMIUM survey. Furthermore, we would not expect most of these species to exist at observable levels because of the high concentrations of H and H_2 in the winds of these stars (Decin et al. 2018).

4. Conclusions

We have observed 17 oxygen-rich AGB and RSG sources at high angular resolution (0.02″–0.05″), and complementary lower resolutions (up to 1.4″), with the ALMA interferometer as part of the ATOMIUM Large Programme, detecting 291 transitions of 24 different molecules and their isotopologues.

We find a range of conclusions, both major and minor:

- We have first detections in oxygen-rich AGB and RSG stars of several vibrationally excited transitions: PO $v = 1$, SO_2 $v_1 = 1$ and $v_2 = 2$, and high energy H_2O transitions (as examined in more detail in Baudry et al. 2023).
- We also have several first detections in S-type AGB stars: vibrationally excited HCN $v_2 = 2, 3$ and SiS $v = 4, 5, 6$; as well as first detections of the molecules SiC, AlCl, and AlF in W Aql (Danilovich et al. 2021, 2023, as examined in more detail in).
- We have calculated correlations between the molecular content of different sources, finding strong correlations (with 3σ significance and correlation coefficients above 0.64) between sources with more detected lines of: CS and SiS, CS and AlF, NaCl and KCl, AlO and SO, SO_2 and SO, and SO_2 and H_2O. Some of these correlations are expected from previous results (for example, CS and SiS both trace more dense winds) or chemical reactions (for example, NaCl and KCl both form from reactions of the metal atom with HCl), while the correlations of, for example, CS and AlF, or AlO and SO, have less clear origins:
- Two of our sources are found to be extremely line-poor: the AGB star U Del and the RSG KW Sgr. We speculate this may be indicative of weak shocks in the inner wind;
- The spatial distributions of SO and SO_2 are found to be generally consistent with previous results, with a centralized distribution for low mass-loss rate sources and a shell-like distribution for high mass-loss rate sources;
- The isotopic ratios of Si and S are generally in line with previously measured ratios (including solar ratios) except for an anomalously high $^{29}Si/^{30}Si$ ratio of 4 ± 1 in the RSG VX Sgr.

This paper has presented the overall molecular inventory and an initial analysis of the large ATOMIUM dataset, laying the groundwork for future work deriving molecular abundances and abundance profiles using radiative transfer modeling which will provide more rigorous tests for chemical models.

Acknowledgements. We thank the referee for their helpful comments improving the manuscript, and Kelvin Lee for his contributions to the line identification strategy. S.H.J.W. acknowledges support from the Research Foundation Flanders (FWO) through grant 1285221N, and the ERC consolidator grant 646758 AEROSOL. T.D. acknowledges support from the Research Foundation Flanders (FWO) through grant 12N9920N, and the Australian Research Council through a Discovery Early Career Researcher Award (DE230100183). H.S.P.M. acknowledges support by the Deutsche Forschungsgemeinschaft through the collaborative research grant SFB 956 (project ID 184018867). S.M. and L.D. acknowledge support from the ERC consolidator grant 646758 AEROSOL, from the KU Leuven C1 excellence grant C16/17/007 MAESTRO, and from the FWO research grant 6099720N. M.V.d.S. acknowledges support from the European Union's Horizon 2020 research and innovation programme under the Marie Skłodowska-Curie grant agreement No 882991. A.B. and F.H. acknowledge funding from the French National Research Agency (ANR) project PEPPER (ANR-20-CE31-0002). D.G. was funded by the project grant 'The Origin and Fate of Dust in Our Universe' from the Knut and Alice Wallenberg Foundation. M.M. acknowledges funding from the Programme Paris Region fellowship supported by the Région Ile-de-France. J.M.C.P. was supported by STFC grant number ST/T000287/1. R.S.'s contribution to the research described in this publication was carried out at the Jet Propulsion Laboratory, California Institute of Technology, under a contract with NASA. K.T.W. acknowledges support from the ERC under the European Union's Horizon 2020 research and innovation programme (Grant agreement no. 883867, project EXWINGS). This paper makes use of the following ALMA data: ADS/JAO.ALMA#2018.1.00659.L. ALMA is a partnership of ESO (representing its member states), NSF (USA), and NINS (Japan), together with NRC (Canada), NSC and ASIAA (Taiwan), and KASI (Republic of Korea), in cooperation with the Republic of Chile. The Joint ALMA Observatory is operated by ESO, AUI/NRAO, and NAOJ. We

also acknowledge excellent support from the UK ALMA Regional Centre (UK ARC), which is hosted by the Jodrell Bank Centre for Astrophysics (JBCA) at the University of Manchester. The UK ARC Node is supported by STFC Grant ST/P000827/1. This project has received funding from the European Union's Horizon 2020 research and innovation program under the Marie Skłodowska-Curie Grant agreement No. 945298, and was supported in part by the Australian Research Council Centre of Excellence for All Sky Astrophysics in 3 Dimensions (ASTRO 3D) through project number CE170100013. This work has made use of Python packages Astropy (Robitaille et al. 2013; Price-Whelan et al. 2018, 2022), SciPy (Virtanen et al. 2020), pandas (McKinney 2010), NumPy (Harris et al. 2020), and Matplotlib (Hunter 2007).

References

Adande, G. R., Edwards, J. L., & Ziurys, L. M. 2013, ApJ, 778, 22
Agúndez, M., Martínez, J. I., Andres, P. L. d., Cernicharo, J., & Martín-Gago, J. A. 2020, A&A, 637, A59
Ahrens, V., Lewen, F., Takano, S., et al. 2002, Z. Naturforsch. A, 57, 669
Alekseev, E. A., Dyubko, S. F., Ilyushin, V. V., & Podnos, S. V. 1996, J. Mol. Spectr., 176, 316
Anders, E., & Grevesse, N. 1989, Geochim. Cosmochim. Acta, 53, 197
Andrews, H., De Beck, E., & Hirvonen, P. 2022, MNRAS, 510, 383
Andriantsaralaza, M., Ramstedt, S., Vlemmings, W. H. T., & De Beck, E. 2022, A&A, 667, A74
Apponi, A. J., Barclay, W. L., J., & Ziurys, L. M. 1993, ApJ, 414, L129
Arroyo-Torres, B., Wittkowski, M., Marcaide, J. M., & Hauschildt, P. H. 2013, A&A, 554, A76
Asplund, M., Amarsi, A. M., & Grevesse, N. 2021, A&A, 653, A141
Bailer-Jones, C. A. L., Rybizki, J., Fouesneau, M., Demleitner, M., & Andrae, R. 2021, AJ, 161, 147
Bailleux, S., Bogey, M., Demuynck, C., Liu, Y., & Walters, A. 2002, J. Mol. Spectr., 216, 465
Baudry, A., Wong, K. T., Etoka, S., et al. 2023, A&A, 674, A125
Belov, S. P., Tretyakov, M. Y., Kozin, I. N., et al. 1998, J. Mol. Spectr., 191, 17
Bizzocchi, L., Degli Esposti, C., & Dore, L. 2006, A&A, 455, 1161
Bogey, M., Demuynck, C., & Destombes, J. L. 1990, A&A, 232, L19
Bogey, M., Civiš, S., Delcroix, B., et al. 1997, J. Mol. Spectr., 182, 85
Bowers, P. F., Johnston, K. J., & Spencer, J. H. 1983, ApJ, 274, 733
Brünken, S., Müller, H. S. P., Menten, K. M., McCarthy, M. C., & Thaddeus, P. 2008, ApJ, 676, 1367
Campbell, J. M., Klapstein, D., Dulick, M., Bernath, P. F., & Wallace, L. 1995, ApJS, 101, 237
Caris, M., Lewen, F., & Winnewisser, G. 2002, Z. Naturforsch. A, 57, 663
Caris, M., Lewen, F., Müller, H. S. P., & Winnewisser, G. 2004, J. Mol. Struct., 695, 243
Cazzoli, G., & Puzzarini, C. 2005, J. Mol. Spectr., 233, 280
Cernicharo, J., Gottlieb, C. A., Guelin, M., Thaddeus, P., & Vrtilek, J. M. 1989, ApJ, 341, L25
Cernicharo, J., Guélin, M., & Kahane, C. 2000, A&AS, 142, 181
Chapman, J. M., Sivagnanam, P., Cohen, R. J., & Le Squeren, A. M. 1994, MNRAS, 268, 475
Chen, X., & Shen, Z. Q. 2008, IAU Symp., 252, 247
Chen, X., Shen, Z.-Q., & Xu, Y. 2007, Chinese J. Astron. Astrophys., 7, 531
Coudert, L. H., Martin-Drumel, M.-A., & Pirali, O. 2014, J. Mol. Spectr., 303, 36
Danilovich, T., Bergman, P., Justtanont, K., et al. 2014, A&A, 569, A76
Danilovich, T., De Beck, E., Black, J. H., Olofsson, H., & Justtanont, K. 2016, A&A, 588, A119
Danilovich, T., Van de Sande, M., De Beck, E., et al. 2017, A&A, 606, A124
Danilovich, T., Ramstedt, S., Gobrecht, D., et al. 2018, A&A, 617, A132
Danilovich, T., Richards, A. M. S., Karakas, A. I., et al. 2019, MNRAS, 484, 494
Danilovich, T., Gottlieb, C. A., Decin, L., et al. 2020a, ApJ, 904, 110
Danilovich, T., Richards, A. M. S., Decin, L., Van de Sande, M., & Gottlieb, C. A. 2020b, MNRAS, 494, 1323
Danilovich, T., Van de Sande, M., Plane, J. M. C., et al. 2021, A&A, 655, A80
Danilovich, T., Malfait, J., Van de Sande, M., & Montargès, M. 2023, Nat. Astron., in press
De Beck, E., & Olofsson, H. 2018, A&A, 615, A8
De Beck, E., & Olofsson, H. 2020, A&A, 642, A20
De Beck, E., Decin, L., de Koter, A., et al. 2010, A&A, 523, A18
Decin, L. 2021, ARA&A, 59, 337
Decin, L., Hony, S., de Koter, A., et al. 2007, A&A, 475, 233
Decin, L., De Beck, E., Brünken, S., et al. 2010, A&A, 516, A69
Decin, L., Richards, A. M. S., Waters, L. B. F. M., et al. 2017, A&A, 608, A55
Decin, L., Richards, A. M. S., Danilovich, T., Homan, W., & Nuth, J. A. 2018, A&A, 615, A28
Decin, L., Montargès, M., Richards, A. M. S., et al. 2020, Science, 369, 1497
DeMore, W., Sander, S., Golden, D., et al. 1997, JPL Publ., 97-4, 1
Doan, L., Ramstedt, S., Vlemmings, W. H. T., et al. 2017, A&A, 605, A28
Douglas, K. M., Gobrecht, D., & Plane, J. M. C. 2022, MNRAS, 515, 99
Drouin, B. J. 2013, J. Phys. Chem. A, 117, 10076
El Mellah, I., Bolte, J., Decin, L., Homan, W., & Keppens, R. 2020, A&A, 637, A91
Endres, C. P., Schlemmer, S., Schilke, P., Stutzki, J., & Müller, H. S. P. 2016, J. Mol. Spectr., 327, 95
Flaud, J. M., Perrin, A., Salah, L. M., Lafferty, W. J., & Guelachvili, G. 1993, J. Mol. Spectr., 160, 272
Frum, C. I., Engleman, R., J., & Bernath, P. F. 1990, J. Chem. Phys., 93, 5457
Fuchs, U., Bruenken, S., Fuchs, G. W., et al. 2004, Z. Naturforsch. A, 59, 861
Furtenbacher, T., Tóbiás, R., Tennyson, J., Polyansky, O. L., & Császár, A. G. 2020, J. Phys. Chem. Ref. Data, 49, 033101
Gaia Collaboration (Brown, A. G. A., et al.) 2018, A&A, 616, A1
Gobrecht, D., Cherchneff, I., Sarangi, A., Plane, J. M. C., & Bromley, S. T. 2016, A&A, 585, A6
Gobrecht, D., Plane, J. M. C., Bromley, S. T., et al. 2022, A&A, 658, A167
Gordon, I. E., Rothman, L. S., Hargreaves, R. J., et al. 2022, J. Quant. Spec. Radiat. Transf., 277, 107949
Goto, M., Takano, S., Yamamoto, S., Ito, H., & Saito, S. 1994, Chem. Phys. Lett., 227, 287
Gottlieb, C. A., Vrtilek, J. M., & Thaddeus, P. 1989, ApJ, 343, L29
Gottlieb, C. A., Decin, L., Richards, A. M. S., et al. 2022, A&A, 660, A94
Groenewegen, M. a. T., Baas, F., Blommaert, J. a. D. L., et al. 1999, A&AS, 140, 197
Habing, H., & Olofsson, H., eds. 2003, Asymptotic Giant Branch Stars (A&A Library (Springer))
Harris, C. R., Millman, K. J., van der Walt, S. J., et al. 2020, Nature, 585, 357
He, J. H., Kwok, S., Müller, H. S. P., et al. 2008, ApJS, 177, 275
Hedderich, H. G., & Bernath, P. F. 1992, J. Mol. Spectr., 153, 73
Hedderich, H. G., Dulick, M., & Bernath, P. F. 1993, J. Chem. Phys., 99, 8363
Helmer, M., & Plane, J. M. C. 1993, J. Chem. Phys., 99, 7696
Helminger, P. A., & De Lucia, F. C. 1985, J. Mol. Spectr., 111, 66
Hensel, K. D., Styger, C., Jäger, W., Merer, A. J., & Gerry, M. C. L. 1993, J. Chem. Phys., 99, 3320
Herwig, F. 2005, ARA&A, 43, 435
Hoeft, J., Lovas, F. J., Tiemann, E., & Törring, T. 1970, Z. Naturforsch. A, 25, 1029
Höfner, S. & Olofsson, H. 2018, A&ARv, 26, 1
Homan, W., Montargès, M., Pimpanuwat, B., et al. 2020, A&A, 644, A61
Homan, W., Pimpanuwat, B., Herpin, F., et al. 2021, A&A, 651, A82
Huggins, P. J., Bachiller, R., Cox, P., & Forveille, T. 1994, ApJ, 424, L127
Hunter, J. D. 2007, Comput. Sci. Eng., 9, 90
Jeste, M., Gong, Y., Wong, K. T., et al. 2022, A&A, 666, A69
Jura, M., & Kleinmann, S. G. 1990, ApJS, 73, 769
Kamiński, T., Gottlieb, C. A., Young, K. H., Menten, K. M., & Patel, N. A. 2013, ApJS, 209, 38
Kania, P., Giesen, T. F., Müller, H. S. P., Schlemmer, S., & Brünken, S. 2008, in 33rd International Conference on Infrared, Millimeter and Terahertz Waves, 1
Kania, P., Hermanns, M., Brünken, S., Müller, H. S. P., & Giesen, T. F. 2011, J. Mol. Spectr., 268, 173
Kawaguchi, K., Saito, S., & Hirota, E. 1983, J. Chem. Phys., 79, 629
Kemper, F., Stark, R., Justtanont, K., et al. 2003, A&A, 407, 609
Kendall, M. G. 1938, Biometrika, 30, 81
Kendall, M. G. 1945, Biometrika, 33, 239
Khouri, T., Velilla-Prieto, L., De Beck, E., et al. 2019, A&A, 623, A1
Kiss, L. L., Szabó, G. M., & Bedding, T. R. 2006, MNRAS, 372, 1721
Klaus, T., Saleck, A. H., Belov, S. P., et al. 1996, J. Mol. Spectr., 180, 197
Knapp, G. R., & Morris, M. 1985, ApJ, 292, 640
Kobayashi, C., Karakas, A. I., & Umeda, H. 2011, MNRAS, 414, 3231
Lamers, H. J. G. L. M., & Cassinelli, J. P. 1999, Introduction to stellar winds (Cambridge, UK: Cambridge University Press)
Lincowski, A. P., Halfen, D. T., & Ziurys, L. M. 2016, ApJ, 833, 9
Loup, C., Forveille, T., Omont, A., & Paul, J. F. 1993, A&AS, 99, 291
Maercker, M., Danilovich, T., Olofsson, H., et al. 2016, A&A, 591, A44
Maes, S., Van de Sande, M., Danilovich, T., De Ceuster, F., & Decin, L. 2023, MNRAS, 522, 4654
Maki, A. G., Mellau, G. C., Klee, S., Winnewisser, M., & Quapp, W. 2000, J. Mol. Spectr., 202, 67
Mamon, G. A., Glassgold, A. E., & Huggins, P. J. 1988, ApJ, 328, 797
Mangan, T. P., Douglas, K. M., Lade, R. E., et al. 2021, ACS Earth Space Chem., 5, 3385
Marigo, P., Girardi, L., Bressan, A., et al. 2008, A&A, 482, 883
Massalkhi, S., Agúndez, M., Cernicharo, J., et al. 2018, A&A, 611, A29
Mauron, N., & Josselin, E. 2011, A&A, 526, A156
McDonald, I., Zijlstra, A. A., Sloan, G. C., et al. 2016, MNRAS, 456, 4542

McKinney, W. 2010, Proceedings of the 9th Python in Science Conference, 56
McMullin, J. P., Waters, B., Schiebel, D., Young, W., & Golap, K. 2007, Astron. Soc. Pac. Conf. Ser., 376, 127
Mollaaghababa, R., Gottlieb, C. A., Vrtilek, J. M., & Thaddeus, P. 1991, ApJ, 368, L19
Monson, N. N., Morris, M. R., & Young, E. D. 2017, ApJ, 839, 123
Montargès, M., Cannon, E., Koter, A. d., et al. 2023, A&A, 671, A96
Morris, M. 1980, ApJ, 236, 823
Müller, H. S. P., & Brünken, S. 2005, J. Mol. Spectr., 232, 213
Müller, H. S. P., Thorwirth, S., Roth, D. A., & Winnewisser, G. 2001, A&A, 370, L49
Müller, H. S. P., Schlöder, F., Stutzki, J., & Winnewisser, G. 2005, J. Mol. Struct., 742, 215
Müller, H. S. P., Cernicharo, J., Agúndez, M., et al. 2012, J. Mol. Spectr., 271, 50
Müller, H. S. P., Spezzano, S., Bizzocchi, L., et al. 2013, J. Phys. Chem. A, 117, 13843
Namiki, K.-i., Saito, S., Robinson, J. S., & Steimle, T. C. 1998, J. Mol. Spectr., 191, 176
Netzer, N., & Knapp, G. R. 1987, ApJ, 323, 734
Olofsson, H., Eriksson, K., Gustafsson, B., & Carlstrom, U. 1993, ApJS, 87, 267
Olofsson, H., Delgado, D. G., Kerschbaum, F., & Schöier, F. L. 2002, A&A, 391, 1053
Pardo, J. R., Cernicharo, J., Tercero, B., et al. 2022, A&A, 658, A39
Patel, N. A., Young, K. H., Brünken, S., et al. 2009, ApJ, 692, 1205
Patel, N. A., Young, K. H., Gottlieb, C. A., et al. 2011, ApJS, 193, 17
Pavlenko, Y. V., Yurchenko, S. N., & Tennyson, J. 2020, A&A, 633, A52
Pearson, J. C., Müller, H. S. P., Pickett, H. M., Cohen, E. A., & Drouin, B. J. 2010, JQSRT, 111, 1614
Peng, T.-C., Humphreys, E. M. L., Testi, L., et al. 2013, A&A, 559, A8
Perryman, M. a. C., Lindegren, L., Kovalevsky, J., et al. 1997, A&A, 323, L49
Pickett, H. M. 1991, J. Mol. Spectr., 148, 371
Pickett, H. M., Poynter, R. L., Cohen, E. A., et al. 1998, JQSRT, 60, 883
Pine, A. S., Suenram, R. D., Brown, E. R., & McIntosh, K. A. 1996, J. Mol. Spectr., 175, 37
Plane, J. M. C., Rajasekhar, B., & Bartolotti, L. 1989, J. Chem. Phys., 91, 6177
Price-Whelan, A. M., Sipőcz, B. M., Günther, H. M., et al. 2018, AJ, 156, 123
Price-Whelan, A. M., Lim, P. L., Earl, N., et al. 2022, ApJ, 935, 167
Quintana-Lacaci, G., Velilla-Prieto, L., Agúndez, M., et al. 2023, A&A, 669, A56
Ramstedt, S., Mohamed, S., Vlemmings, W. H. T., et al. 2017, A&A, 605, A126
Robitaille, T. P., Tollerud, E. J., Greenfield, P., et al. 2013, A&A, 558, A33
Saito, S., Endo, Y., & Hirota, E. 1983, J. Chem. Phys., 78, 6447
Samus', N. N., Kazarovets, E. V., Durlevich, O. V., Kireeva, N. N., & Pastukhova, E. N. 2017, Astron. Rep., 61, 80
Santander-García, M., Bujarrabal, V., Koning, N., & Steffen, W. 2015, A&A, 573, A56
Sanz, M. E., McCarthy, M. C., & Thaddeus, P. 2003, J. Chem. Phys., 119, 11715
Sattler, J. P., Worchesky, T. L., & Lafferty, W. J. 1981, J. Mol. Spectr., 88, 364
Schöier, F. L., & Olofsson, H. 2001, A&A, 368, 969
Schöier, F. L., Bast, J., Olofsson, H., & Lindqvist, M. 2007, A&A, 473, 871
Steenbeckeliers, G. 1968, Ann. Soc. Sci. Bruxelles, Ser. III, 82, 331
Szymczak, M., & Cohen, R. J. 1997, MNRAS, 288, 945
Tabernero, H. M., Dorda, R., Negueruela, I., & Marfil, E. 2021, A&A, 646, A98
Tenenbaum, E. D., Dodd, J. L., Milam, S. N., Woolf, N. J., & Ziurys, L. M. 2010, ApJS, 190, 348
Thorwirth, S., Müller, H. S. P., & Winnewisser, G. 2000, J. Mol. Spectr., 204, 133
Thorwirth, S., Müller, H. S. P., Lewen, F., et al. 2003, ApJ, 585, L163
Tielens, A. G. G. M. 2005, The Physics and Chemistry of the Interstellar Medium (Cambridge, UK: Cambridge University Press)
Törring, T., & Herrmann, R. 1989, Mol. Phys., 68, 1379
Ukita, N., & Kaifu, N. 1988, in Atmospheric Diagnostics of Stellar Evolution: Chemical Peculiarity, Mass Loss, and Explosion, ed. K. Nomoto, Lecture Notes in Physics (Berlin, Heidelberg: Springer), 51
Van de Sande, M., Sundqvist, J. O., Millar, T. J., et al. 2018, A&A, 616, A106
Velilla Prieto, L., Sánchez Contreras, C., Cernicharo, J., et al. 2017, A&A, 597, A25
Virtanen, P., Gommers, R., Oliphant, T. E., et al. 2020, Nat. Methods, 17, 261
Vlemmings, W. H. T., & Langevelde, H. J. v. 2007, A&A, 472, 547
Winters, J. M., Hoai, D. T., Wong, K. T., et al. 2022, A&A, 658, A135
Witsch, D., Breier, A. A., Döring, E., et al. 2021, J. Mol. Spectr., 377, 111439
Wittkowski, M., Arroyo-Torres, B., Marcaide, J. M., et al. 2017, A&A, 597, A9
Woosley, S. E., & Weaver, T. A. 1995, ApJS, 101, 181
Wyse, F. C., & Gordy, W. 1972, J. Chem. Phys., 56, 2130
Wyse, F. C., Gordy, W., & Pearson, E. F. 1970, J. Chem. Phys., 52, 3887
Yamada, C., Fujitake, M., Hirota, E., & Cohen, E. A. 1990, J. Chem. Phys., 92, 2146
Yamada, K. M. T., Moravec, A., & Winnewisser, G. 1995, Z. Naturforsch. A, 50, 1179
Young, K. 1995, ApJ, 445, 872
Yu, S., Pearson, J. C., Drouin, B. J., et al. 2012, J. Mol. Spectr., 279, 16
Zelinger, Z., Amano, T., Ahrens, V., et al. 2003, J. Mol. Spectr., 220, 223
Zinner, E., Nittler, L. R., Gallino, R., et al. 2006, ApJ, 650, 350

[1] Institute of Astronomy, KU Leuven, Celestijnenlaan 200D, 3001 Leuven, Belgium
e-mail: sofia.wallstrom@kuleuven.be
[2] School of Physics & Astronomy, Monash University, Wellington Road, Clayton 3800, Victoria, Australia
[3] ARC Centre of Excellence for All Sky Astrophysics in 3 Dimensions (ASTRO 3D), Clayton 3800, Australia
[4] Universität zu Köln, I. Physikalisches Institut, 50937 Köln, Germany
[5] Harvard-Smithsonian Center for Astrophysics, 60 Garden Street, Cambridge, MA 02138, USA
[6] School of Physics and Astronomy, University of Leeds, Leeds LS2 9JT, UK
[7] School of Chemistry, University of Leeds, Leeds LS2 9JT, UK
[8] JBCA, Department Physics and Astronomy, University of Manchester, Manchester M13 9PL, UK
[9] Université de Bordeaux, Laboratoire d'Astrophysique de Bordeaux, 33615 Pessac, France
[10] Department of Mathematics, Kiel University, Heinrich-Hecht-Platz 6, 24118 Kiel, Germany
[11] Anton Pannekoek Institute for Astronomy, University of Amsterdam, Science Park 904, 1098 XH Amsterdam, The Netherlands
[12] Departamento de Física, Universidad de Santiago de Chile, Av. Victor Jara 3659, Santiago, Chile
[13] Center for Interdisciplinary Research in Astrophysics and Space Exploration (CIRAS), USACH, Chile
[14] Department of Chemistry and Molecular Biology, University of Gothenburg, Kemigården 4, 412 96 Gothenburg, Sweden
[15] School of Engineering and Applied Sciences and Department of Earth and Planetary Sciences, Harvard University, Cambridge, MA 02138, USA
[16] National Astronomical Research Institute of Thailand, Chiangmai 50180, Thailand
[17] Max-Planck-Institut für Radioastronomie, 53121 Bonn, Germany
[18] National Solar Observatory, Makawao, HI 96790, USA
[19] LESIA, Observatoire de Paris, Université PSL, CNRS, Sorbonne Université, Université Paris Cité, 5 place Jules Janssen, 92195 Meudon, France
[20] Department of Space, Earth and Environment, Chalmers University of Technology, Onsala Space Observatory, 43992 Onsala, Sweden
[21] Université Côte d'Azur, Laboratoire Lagrange, Observatoire de la Côte d'Azur, 06304 Nice Cedex 4, France
[22] School of Physical Sciences, The Open University, Walton Hall, Milton Keynes, MK7 6AA, UK
[23] Astrophysics Research Centre, School of Mathematics and Physics, Queen's University Belfast, University Road, Belfast BT7 1NN, UK
[24] NASA Goddard Space Flight Center, 8801 Greenbelt Road, Greenbelt, MD 20071, USA
[25] Jet Propulsion Laboratory, MS 183-900, California Institute of Technology, Pasadena, CA 91109, USA
[26] Department of Astrophysics/IMAPP, Radboud University, PO Box 9010, 6500 GL Nijmegen, The Netherlands
[27] SRON Netherlands Institute for Space Research Sorbonnelaan 2, 3584 CA Utrecht, The Netherlands
[28] Theoretical Astrophysics, Department of Physics and Astronomy, Uppsala University, Box 516, 751 20 Uppsala, Sweden
[29] Institut de Radioastronomie Millimétrique, 300 rue de la Piscine, 38406 Saint-Martin-d'Hères, France
[30] University College London, Department of Physics and Astronomy, London WC1E 6BT, UK

Appendix A: Molecular data, line identifications and measured parameters

Appendix A.1. Laboratory spectroscopic background on line identifications

Spectroscopic data were retrieved from the Cologne Database for Molecular Spectroscopy, CDMS,[2] (Müller et al. 2001; Müller et al. 2005; Endres et al. 2016) unless stated otherwise. Several of the accessed entries were created, updated, or extended in vibrational quanta v to support the ATOMIUM project. While all of the relevant laboratory or observational data were considered for these entries, other data are not always up-to-date. We mention only cases in which our observations may be affected. We usually list the most important references for species with more than one line in ATOMIUM, possibly supplemented by references for data that encompass the ATOMIUM frequency range or are close to it. We list in Table A.3 references of lines identified in ATOMIUM; we may refrain from listing additional background information for species with only one or two lines in ATOMIUM.

We point out that Hund's case (b) quantum numbers are given in the CDMS catalog throughout because of the `spfit` and `spcat` programs (Pickett 1991) employed for most of the CDMS entries. Hund's case (a) quantum numbers may be more appropriate for some of the radical species, and these are listed in most cases in Table A.3. The CDMS documentation file usually contains information on how to convert Hund's case (b) quantum numbers to Hund's case (a). The quantum numbers N, J, and F indicate the total rotational angular momentum, the total rotational angular momentum including the electronic spin, and the total rotational angular momentum including the electronic and nuclear spin, respectively. For non-radicals, $J = N$, and J is usually given instead of N. The quantum numbers K_a and K_c designate projection of the total rotational angular momentum onto the a- and c-axis, respectively, in the case of asymmetric top molecules such as SO_2, H_2O, TiO_2, and SiC_2. Rotational levels are usually designated as J_{K_a,K_c}. Vibrational quanta are usually designated with v; a subscript indicated the number of the vibrational mode. The triply excited bending mode of a triatomic molecule is indicated as $v_2 = 3$. Multiple excitations of triatomics, for example, $v_2 = 3$, $v_3 = 1$, are often given as triple $(v_1v_2v_3)$, where v_i indicates the excitation in the vibrational mode i; in the above case (031). The Greek letter ν is used to designate vibrational bands; ν_1 could also be witten as (100) − (000) and $\nu_1 - \nu_3$ as (100) − (001).

The references for CO, CS, H_2S, and ^{13}CN are given in Table A.3 only.

The HCN rest frequencies are from a combined fit to laboratory data for $v_2 \leq 3$, $v_3 = 1$, and $v_1 = 1$. The rotational data for $v_2 = 0$ and 1 are largely from Ahrens et al. (2002) and Thorwirth et al. (2003), respectively; data for higher excited rotational data are largely from Zelinger et al. (2003). The H^{13}CN rest frequencies are from an equvalent fit. The $v_2 = 0$ and 1 data are from Fuchs et al. (2004); additional extensive $v = 0$ data were taken from Cazzoli & Puzzarini (2005). Important for both fits were IR data from Maki et al. (2000).

The SiO rest frequencies were derived from Müller et al. (2013) who performed Fourier transform microwave (FTMW) spectroscopy on several isotopic species up to very high vibrational states along with millimeter and submillimeter measurements of several isotopic species in their ground vibrational states. Additional FTMW data of SiO, ^{29}SiO (and Si^{18}O) were taken from Sanz et al. (2003). Excited vibrational data of the main isotopologue were published by Mollaaghababa et al. (1991). Noteworthy are furthermore IR data from Campbell et al. (1995).

The current rest frequencies of SO rely mostly on Bogey et al. (1997) and Klaus et al. (1996), those of the isotopic species mostly on the latter work. Additional older data were also used at lower frequencies; some references are given in Table A.3. We point out that Hund's case (a) quantum numbers may be found in the older literature, usually designated as J_N, whereas Hund's case (b) quantum numbers are more common in the more recent literature, designated as N_J.

The SO_2 $v_2 = 0$ and 1 data were derived from Müller & Brünken (2005) with important additional rest frequencies for $v = 0$ from Belov et al. (1998) and for both vibrational states from Alekseev et al. (1996) and Helminger & De Lucia (1985). The $v_2 = 2$ and $v_1 = 1$ data are based on an unpublished fit by one of us (HSPM) and employ besides own new data published rotational transition frequencies from Steenbeckeliers (1968), unpublished data communicated by the late Walter Lafferty, presumably associated with Pine et al. (1996), and IR data from Sattler et al. (1981) and Flaud et al. (1993). The $^{34}SO_2$ $v = 0$ data are largely based on Belov et al. (1998) with important additional rest frequencies from Alekseev et al. (1996) and Helminger & De Lucia (1985).

The SiS rest frequencies were derived from Müller et al. (2013) who performed Fourier transform microwave (FTMW) spectroscopy on several isotopic species up to very high vibrational states along with millimeter and submillimeter measurements of several isotopic species mostly in their ground vibrational states. Additional FTMW data of SiS, ^{29}SiS and Si^{34}S) were taken from Sanz et al. (2003). Important were also IR data, in particular from Frum et al. (1990).

The H_2O data pertaining to the lowest five vibrational states were based on the JPL catalog (Pickett et al. 1998; Pearson et al. 2010) entry which, in turn, is based on Yu et al. (2012). Besides extensive new data, this work employs additional rotational and rovibrational data from a plethora of sources. Coudert et al. (2014) presented a similar study including the next three vibrational states, but, unfortunately, calculated transition frequencies for these start only at 300 GHz. Therefore, we inspected the HITRAN2020 (Gordon et al. 2022) and W2020 (Furtenbacher et al. 2020) compilations for highly vibrationally excited H_2O transitions. As these were deemed to be quite uncertain, we resorted to the transition frequencies determined in our study on H_2O and OH (Baudry et al. 2023).

The initial OH data were taken from the JPL catalog and bear on Drouin (2013). This analysis is based on a plethora of laboratory spectroscopic investigations. The Λ-doubling transitions with high rotational quanta, however, are rather uncertain and display systematic deviations, see for example Khouri et al. (2019) and Baudry et al. (2023). In our study on H_2O and OH (Baudry et al. 2023), we combined the data gathered in Drouin (2013) with Λ-doubling transition frequencies from our own astronomical observations and those from Khouri et al. (2019) to improve the calculations of the OH Λ-doubling transition frequencies in the upper millimeter and submillimeter regions (Baudry et al. 2023).

Calculations of the PO rest frequencies rely mainly on Bailleux et al. (2002) with additional $v = 0$ data from Kawaguchi et al. (1983).

[2] https://cdms.astro.uni-koeln.de/

The TiO rest frequencies are based on an unpublished isotopic invariant fit by one of us (HSPM). The main source of experimental data are those from the minor Ti isotopologues from Lincowski et al. (2016). Additional important data relevant for our study are the ground state rotational data of ^{46,48,50}TiO from Kania et al. (2008), those of ^{48}TiO from Namiki et al. (1998), and the extensive IR data for all Ti isotopologues from Witsch et al. (2021).

Calculations on the rotational spectrum of TiO_2 are based on Kania et al. (2011). Besides our own upper millimeter and lower submillimeter data of $^{46,48,50}TiO_2$, the analysis also employs microwave data of the same isotopologues from Brünken et al. (2008). The rotational temperatures were of order of 30 K and 3 K, respectively, which limited the quantum number range accessed. Transition frequencies involving higher rotational excitation may be quite uncertain as a consequence. The $K_a = 6-5$ Q-branch transitions with $J = 25$, 27, and 29 display larger uncertainties, such that their true transition freaquencies may differ from the calculated ones by more than 1 MHz.

The ground state rotational data of AlO were taken from Yamada et al. (1990) and from Törring & Herrmann (1989); transition frequencies of $v = 1$ and 2 were published by Goto et al. (1994).

The AlOH data were taken from the JPL catalog; they are derived from Apponi et al. (1993).

The AlF rest frequencies are mainly based on the rotational data of Wyse et al. (1970). Additional rotational data are from Hoeft et al. (1970), and rovibrational data are mainly from Hedderich & Bernath (1992).

Calculations of the rotational spectrum of AlCl and $Al^{37}Cl$ depends mainly on rotational data of Wyse & Gordy (1972). Very accurate frequencies of the $J = 1 - 0$ transitions by Hensel et al. (1993) were also employed as were rovibrational transitions taken from Hedderich et al. (1993).

The NaCl and KCl rest frequencies rely mainly on measurements by Caris et al. (2002) and Caris et al. (2004), respectively.

The SiN rest frequencies are based on Bizzocchi et al. (2006), with the important lower frequency data taken from Saito et al. (1983).

The SiC transition frequencies are based on Bogey et al. (1990) and on Cernicharo et al. (1989).

The current calculation of SiC_2 $v = 0$ transition frequencies were derived from Müller et al. (2012). Important additional data besides HIFI-Herschel data from that work come from laboratory measurements by Gottlieb et al. (1989) and from astronomical observations by Cernicharo et al. (2000).

The ground state rotational data of HC_3N depend on Thorwirth et al. (2000) with additional contributions mainly from Yamada et al. (1995).

Appendix B: SO_2 and SO channel maps

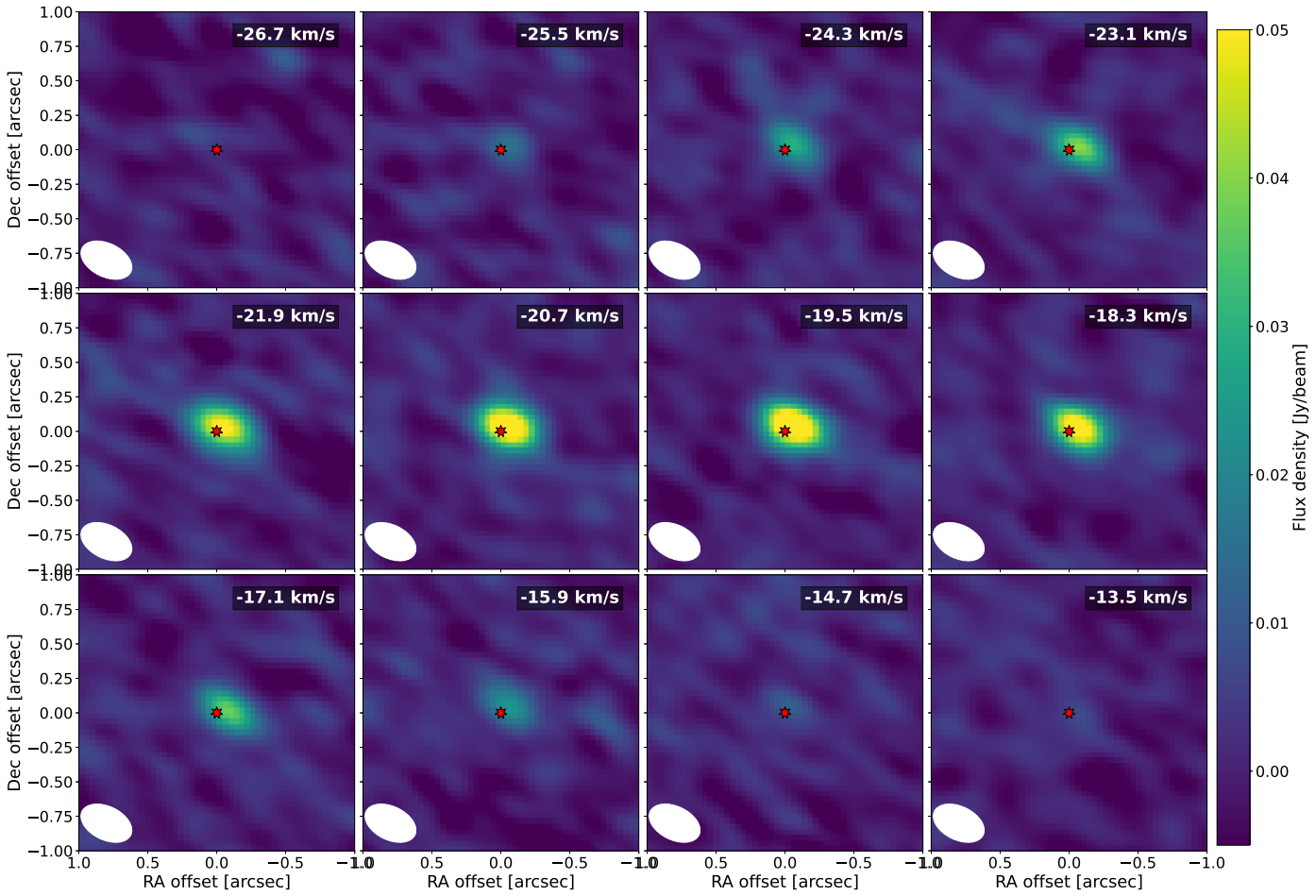


Fig. B.1: Channel map of the SO_2 $v = 0$ $J_{K_a,K_c} = 14_{0,14} - 13_{1,13}$ line at 244.254 GHz observed towards S Pav at medium angular resolution. The synthesized beam is indicated by the white ellipse in the lower left corner of each panel, the LSR velocity in km $s^{-1}$is indicated in the upper right corner, and the continuum peak is indicated by the position of the red star at (0,0).

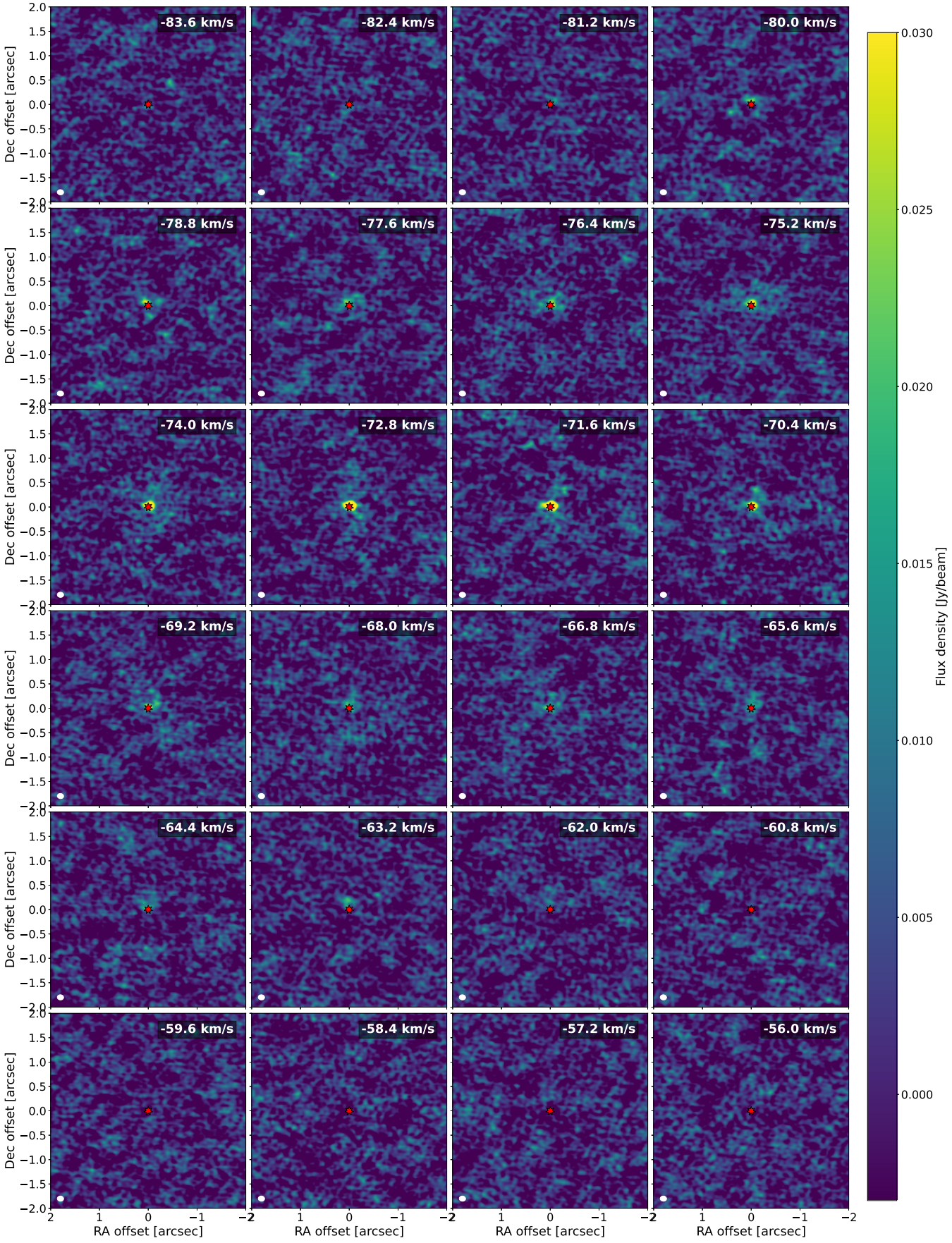


Fig. B.2: Channel map of the SO_2 $v = 0$ $J_{K_a,K_c} = 14_{0,14} - 13_{1,13}$ line at 244.254 GHz observed towards RW Sco at medium angular resolution. See caption of Figure B.1.

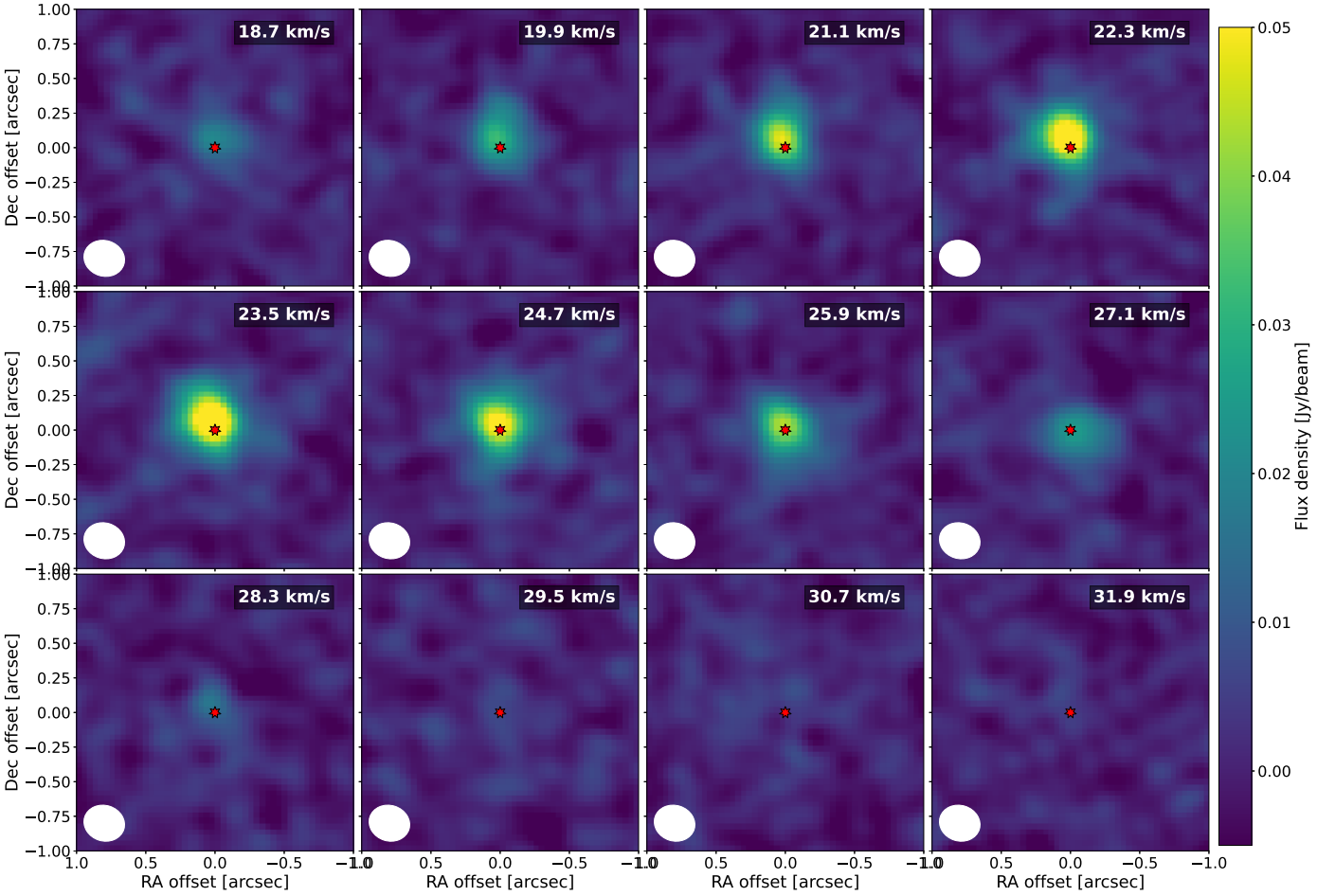


Fig. B.3: Channel map of the SO_2 $v = 0$ $J_{K_a,K_c} = 14_{0,14} - 13_{1,13}$ line at 244.254 GHz observed towards T Mic at medium angular resolution. See caption of Figure B.1.

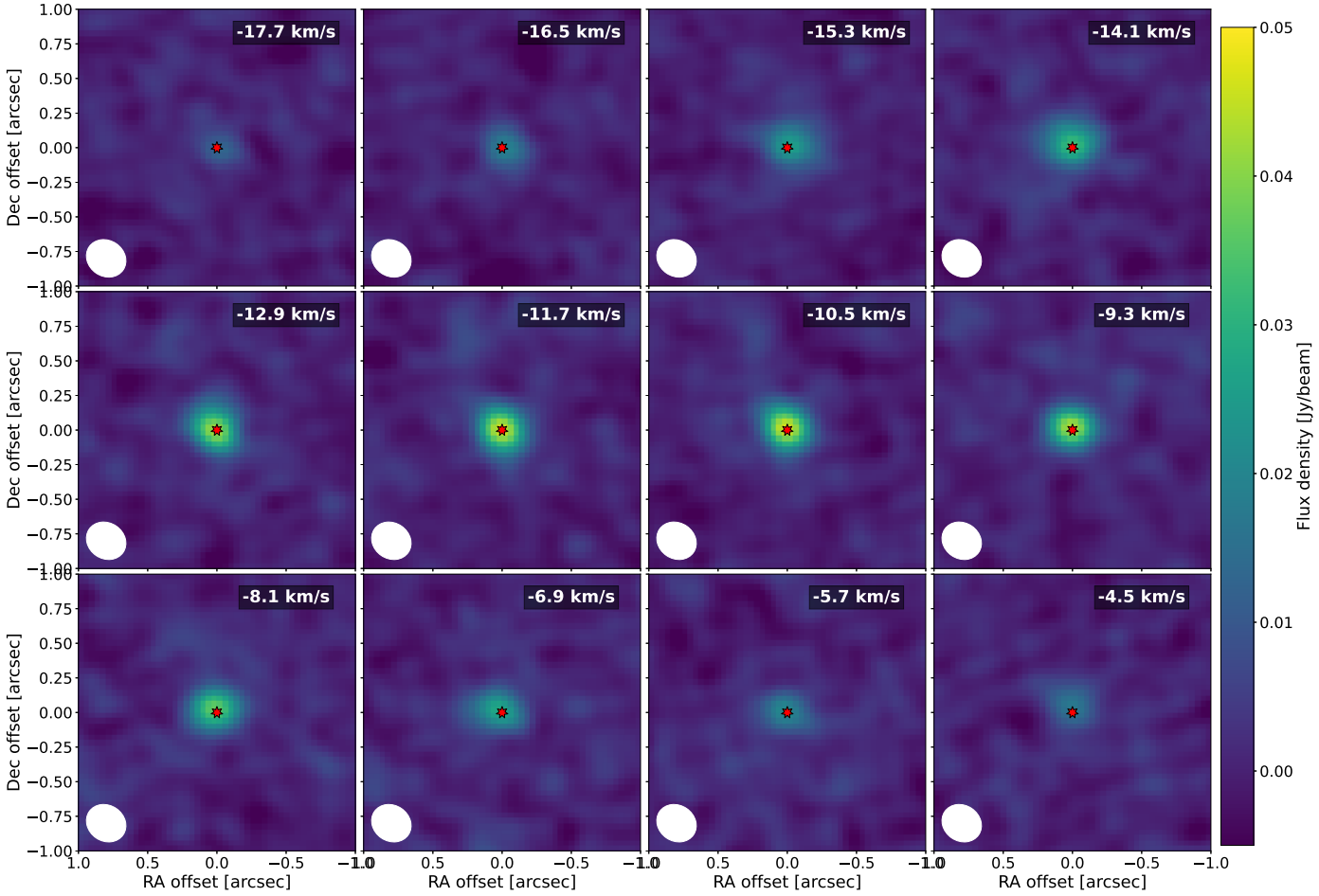


Fig. B.4: Channel map of the SO_2 $v = 0$ $J_{K_a,K_c} = 14_{0,14} - 13_{1,13}$ line at 244.254 GHz observed towards R Hya at medium angular resolution. See caption of Figure B.1.

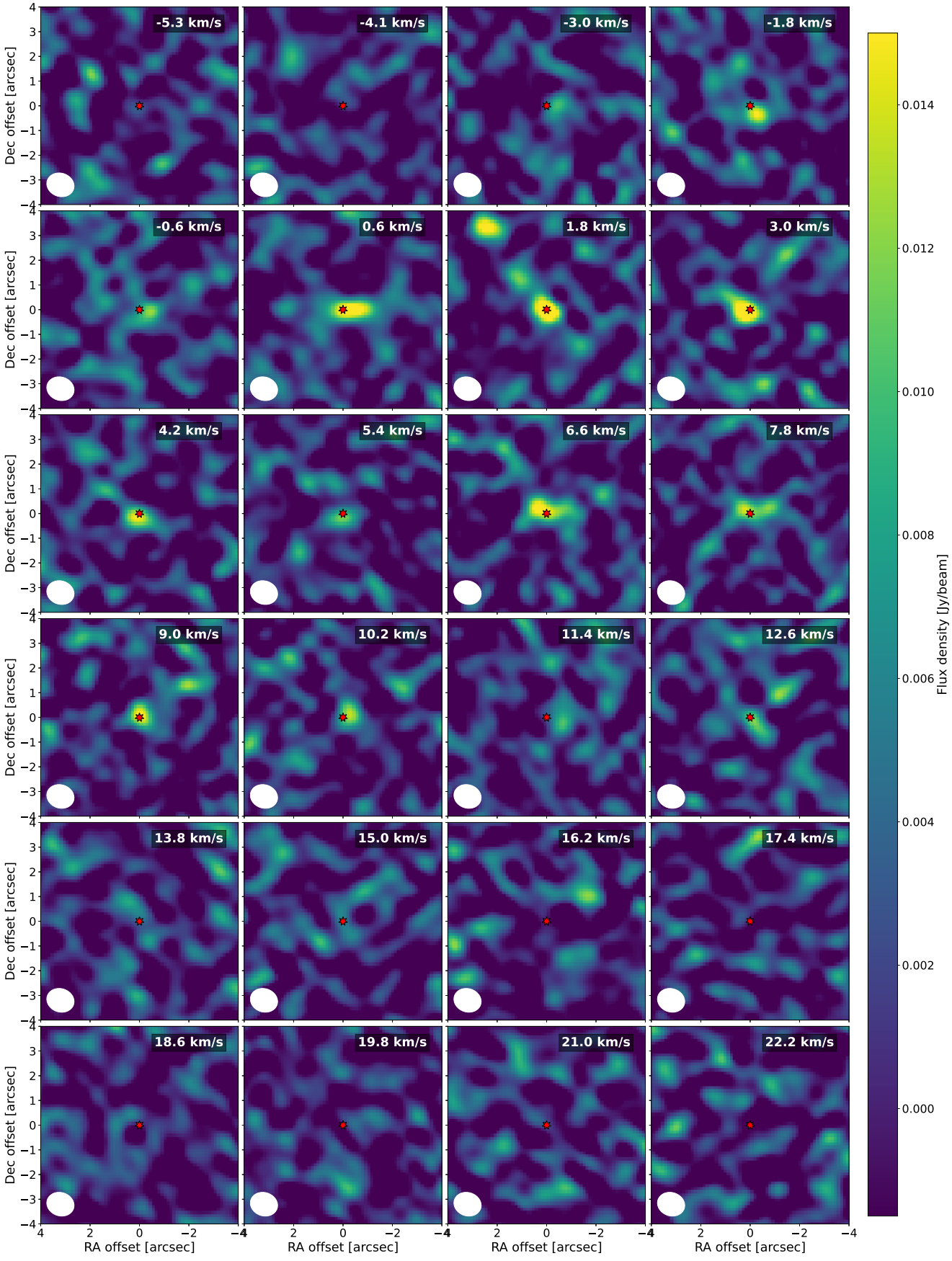


Fig. B.5: Channel map of the SO_2 $v = 0$ $J_{K_a,K_c} = 14_{0,14} - 13_{1,13}$ line at 244.254 GHz observed towards SV Aqr at low angular resolution. The medium angular resolution map is too faint to show the emission distribution. See caption of Figure B.1.

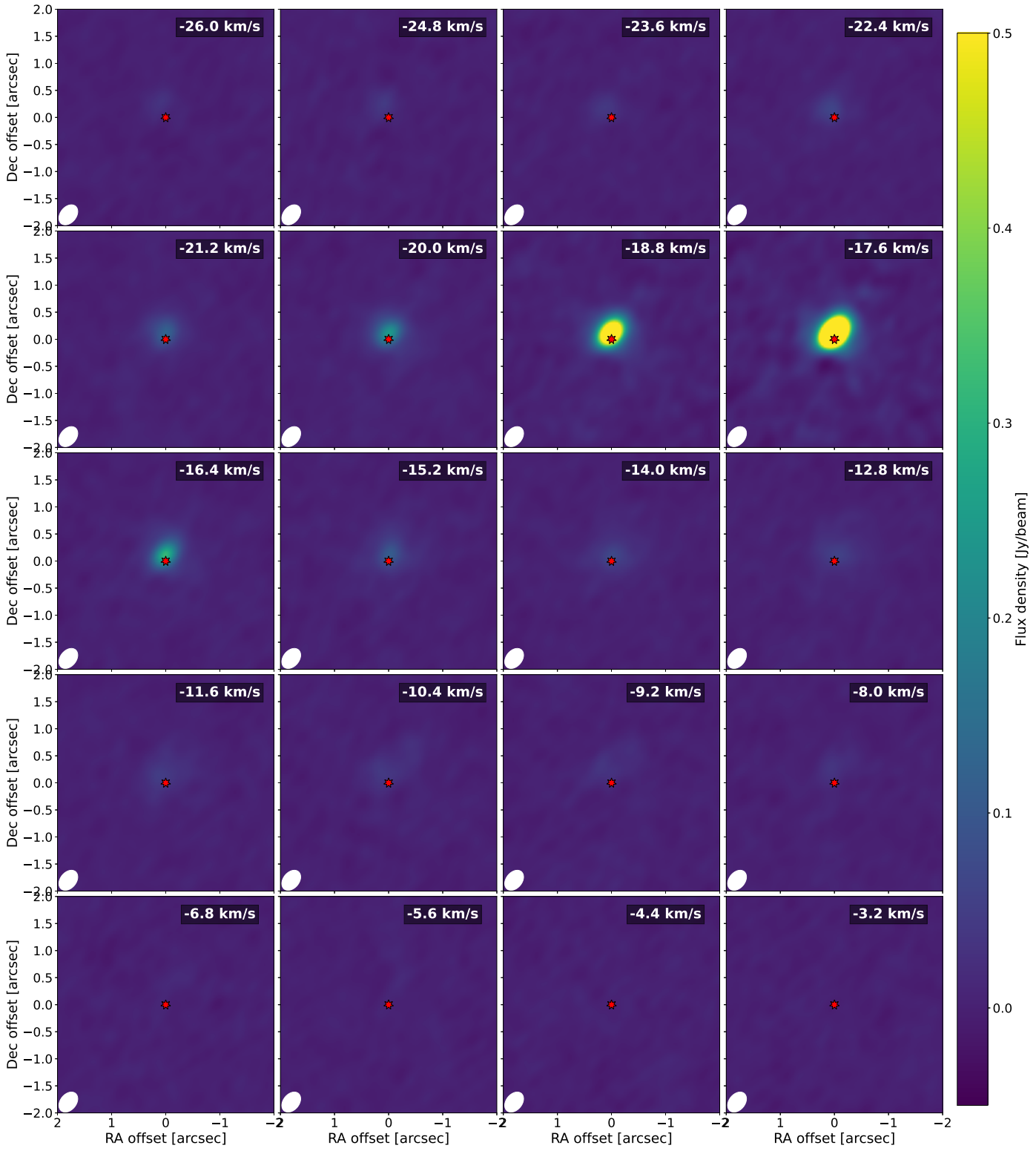


Fig. B.6: Channel map of the SO_2 $v = 0$ $J_{K_a,K_c} = 14_{0,14} - 13_{1,13}$ line at 244.254 GHz observed towards U Her at medium angular resolution. See caption of Figure B.1.

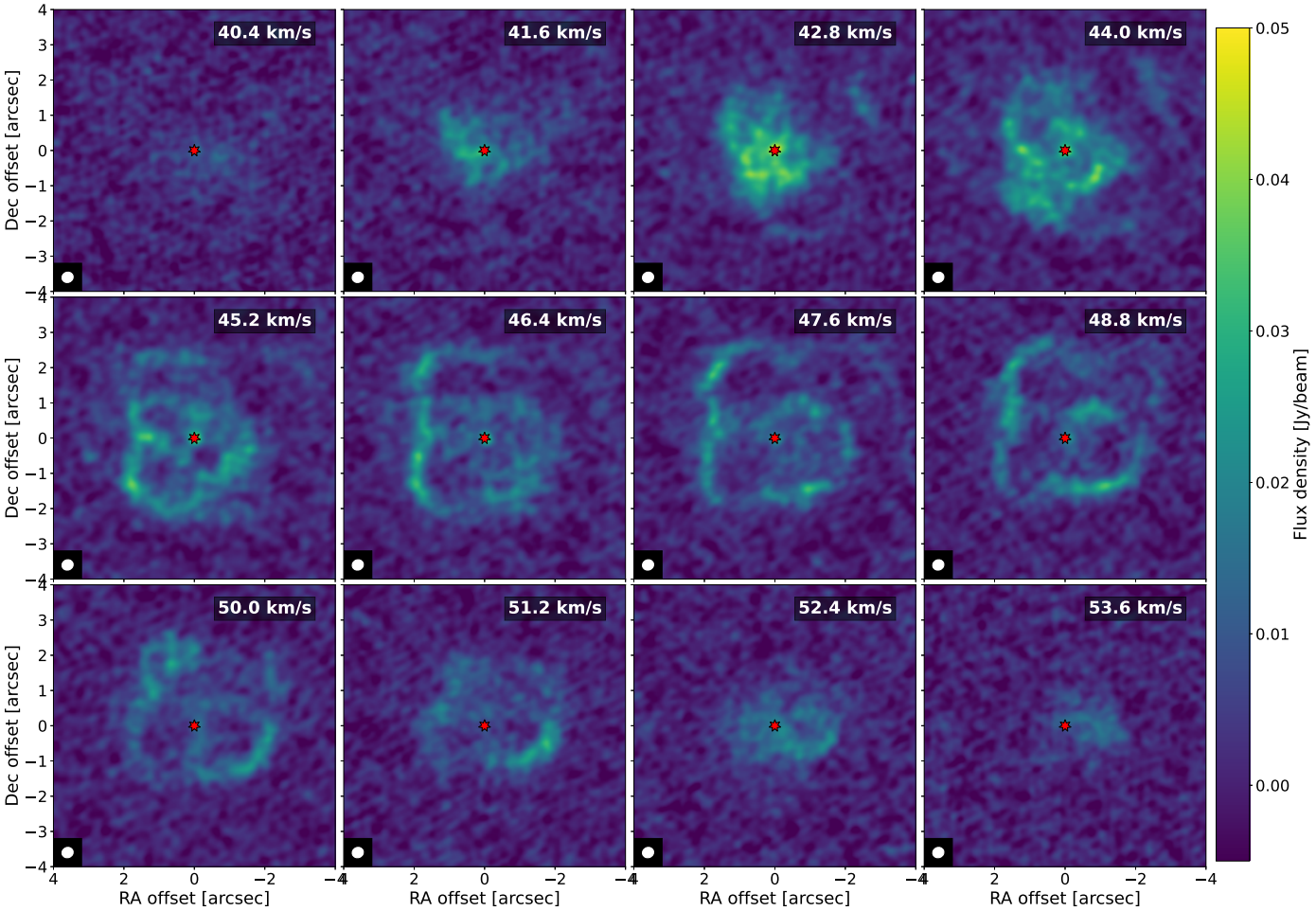


Fig. B.7: Channel map of the SO_2 $v = 0$ $J_{K_a,K_c} = 14_{0,14} - 13_{1,13}$ line at 244.254 GHz observed towards R Aql at medium angular resolution. See caption of Figure B.1.

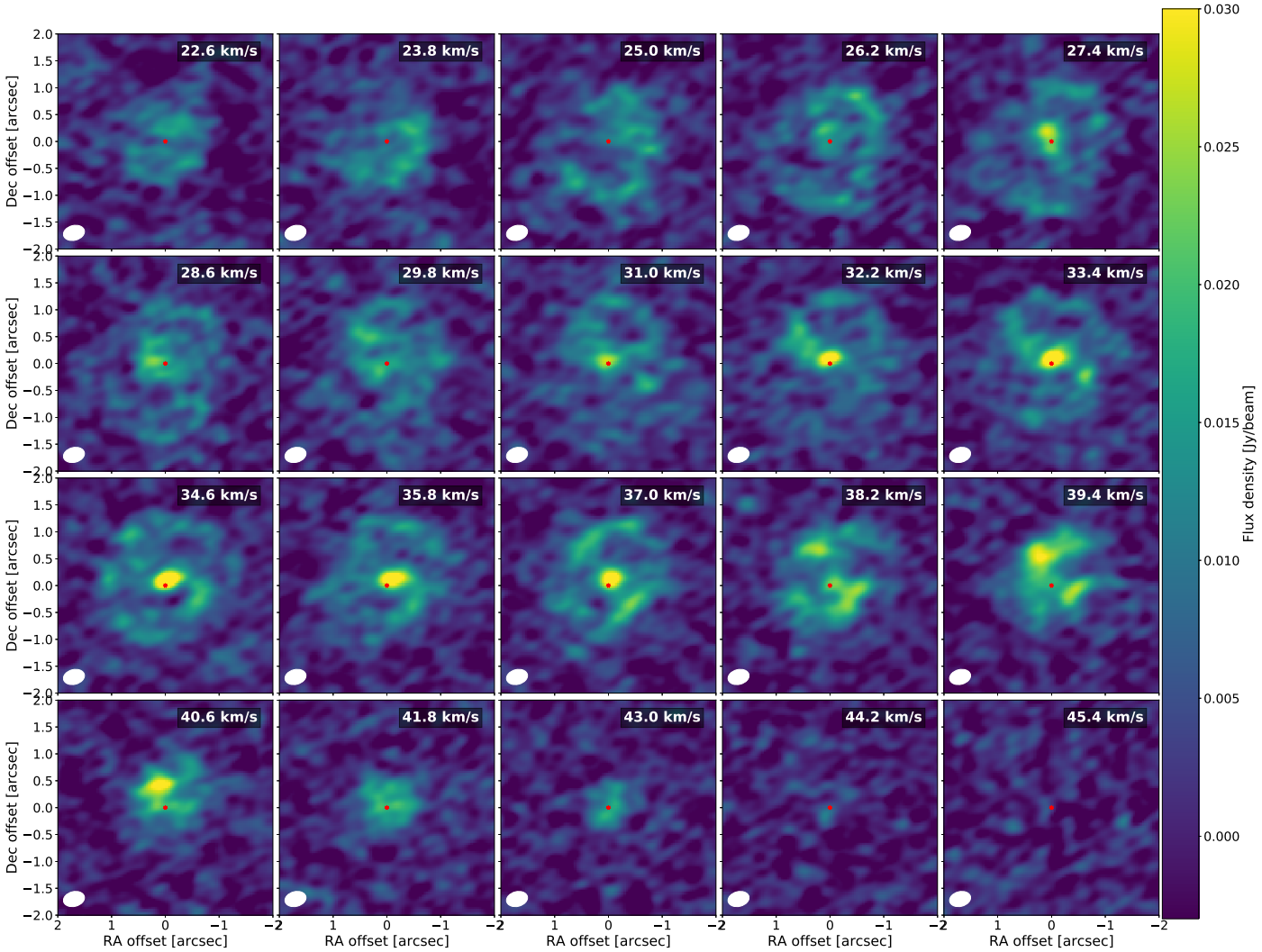


Fig. B.8: Channel map of the SO_2 $v = 0$ $J_{K_a,K_c} = 14_{0,14} - 13_{1,13}$ line at 244.254 GHz observed towards GY Aql at medium angular resolution. See caption of Figure B.1.

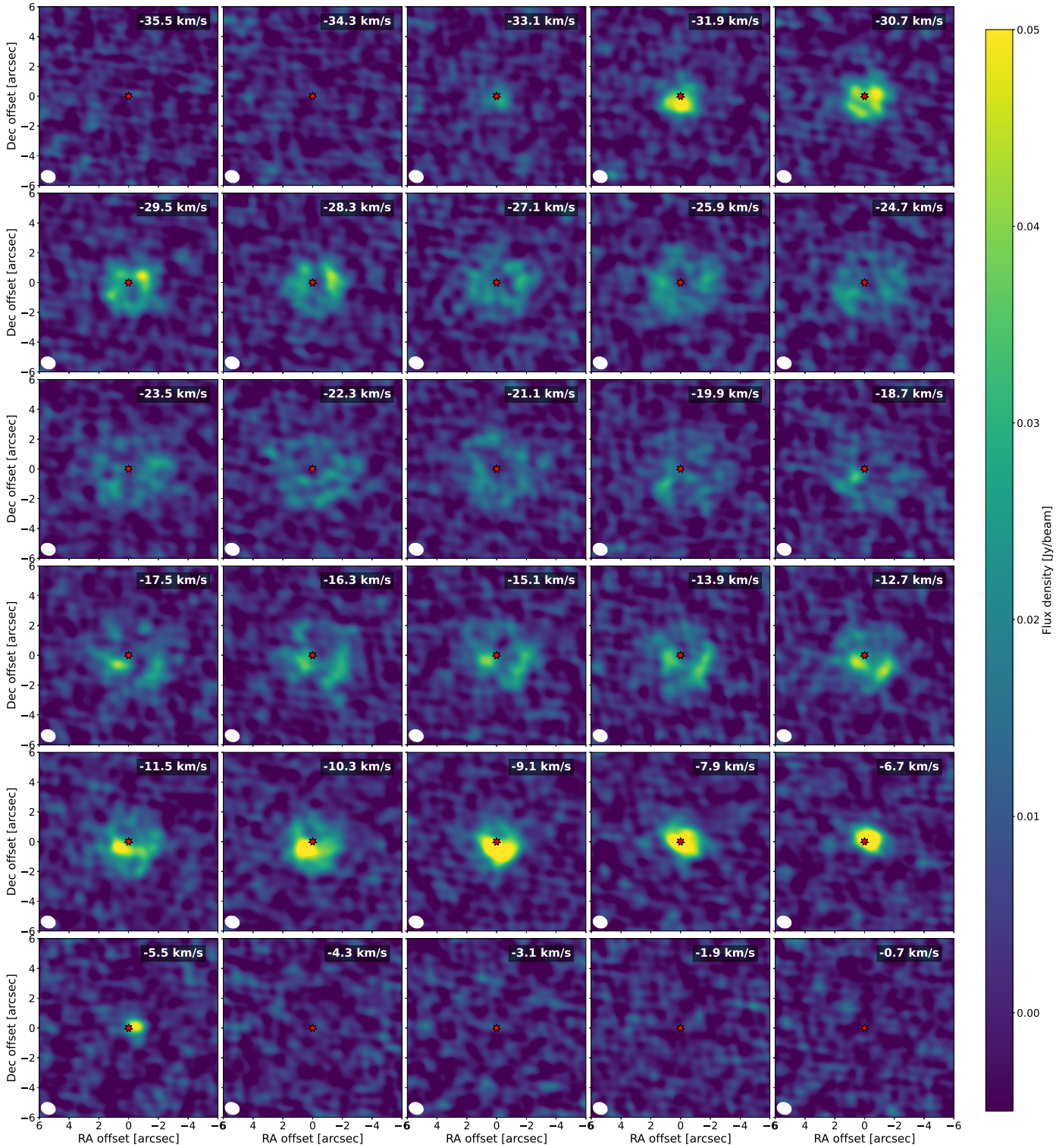


Fig. B.9: Channel map of the SO_2 $v = 0$ $J_{K_a,K_c} = 14_{0,14} - 13_{1,13}$ line at 244.254 GHz observed towards IRC-10529 at low angular resolution. The medium angular resolution map has too much resolved out flux to show the emission distribution. See caption of Figure B.1.

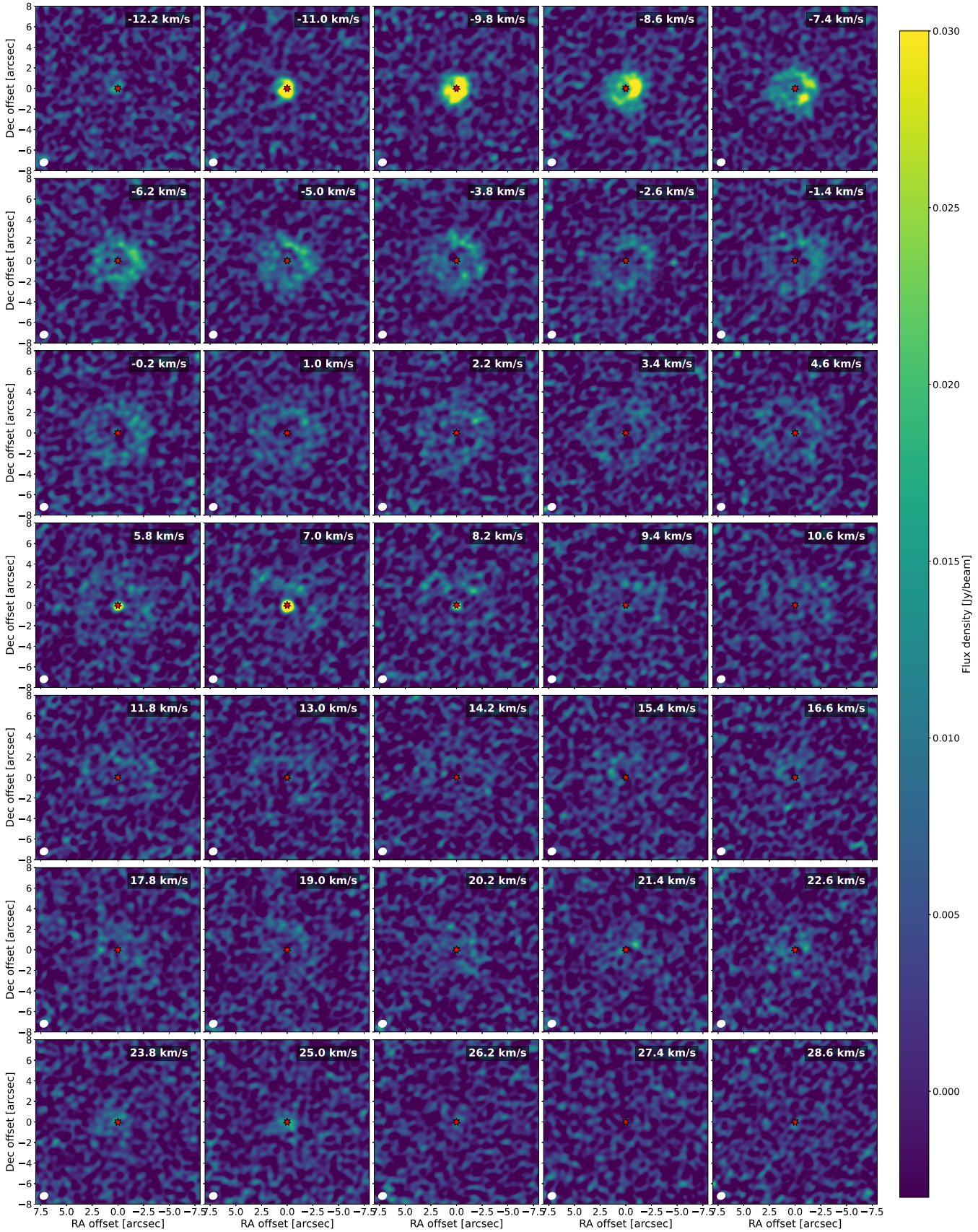


Fig. B.10: Channel map of the SO_2 $v = 0$ $J_{K_a,K_c} = 14_{0,14} - 13_{1,13}$ line at 244.254 GHz observed towards IRC+10011 at low angular resolution. The medium angular resolution map has too much resolved out flux to show the emission distribution. See caption of Figure B.1.

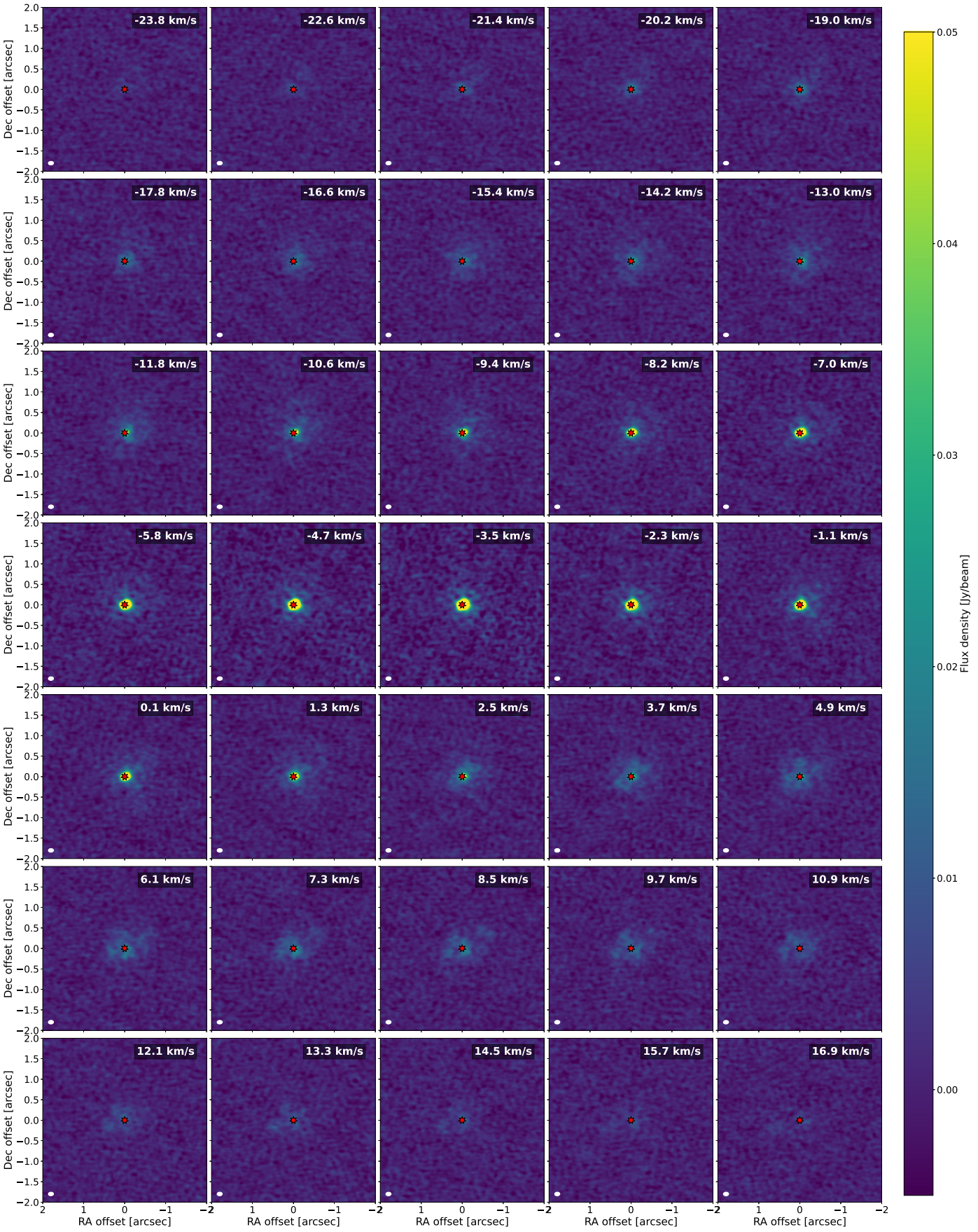


Fig. B.11: Channel map of the SO_2 $v = 0$ $J_{K_a,K_c} = 14_{0,14} - 13_{1,13}$ line at 244.254 GHz observed towards AH Sco at medium angular resolution. See caption of Figure B.1.

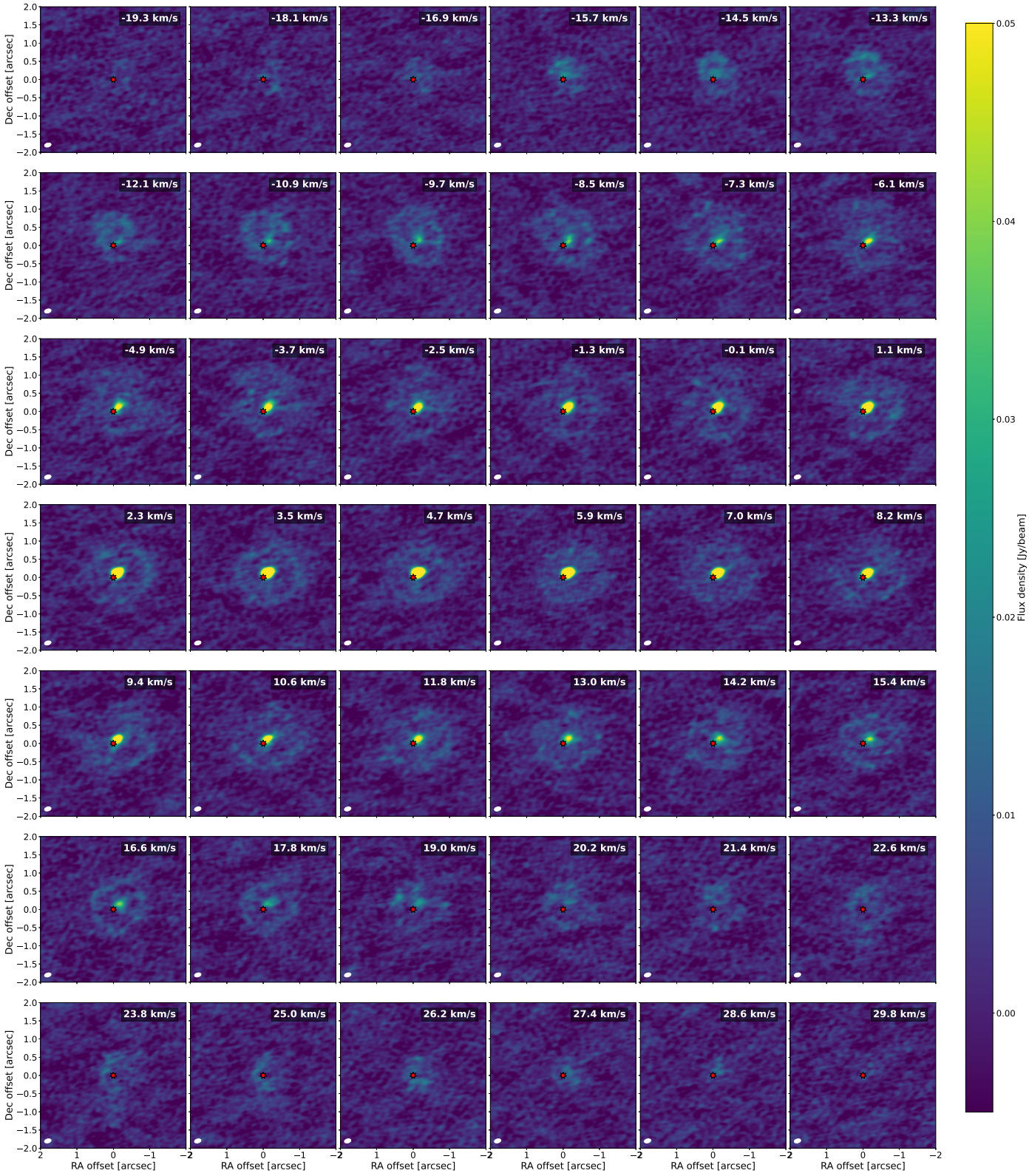


Fig. B.12: Channel map of the SO_2 $v = 0$ $J_{K_a,K_c} = 14_{0,14} - 13_{1,13}$ line at 244.254 GHz observed towards VX Sgr at medium angular resolution. See caption of Figure B.1.

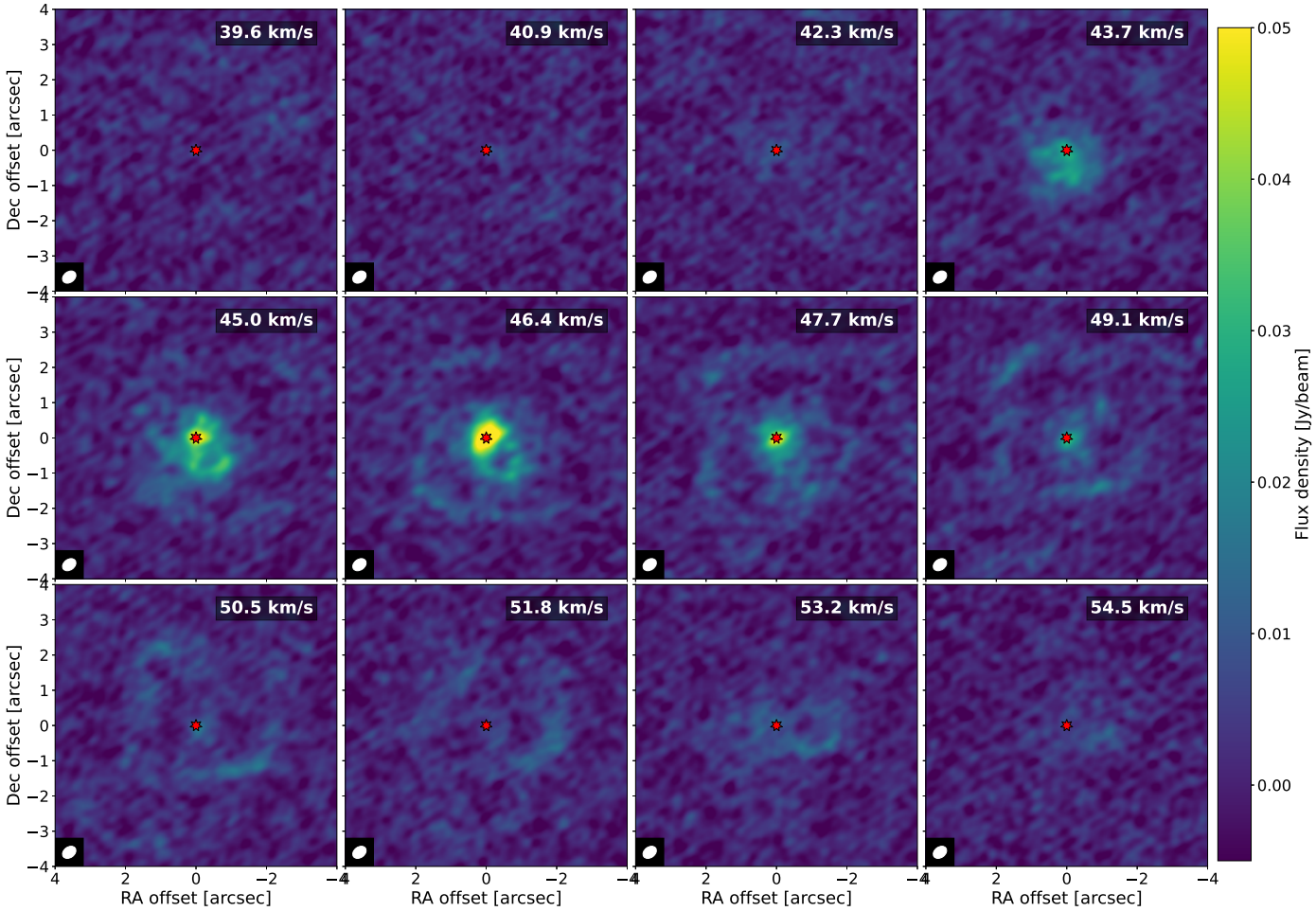


Fig. B.13: Channel map of the SO $v = 0$ $N_J = 5_5 - 4_4$ line at 215.221 GHz observed towards R Aql at medium angular resolution. See caption of Figure B.1.

Appendix C: Spectra

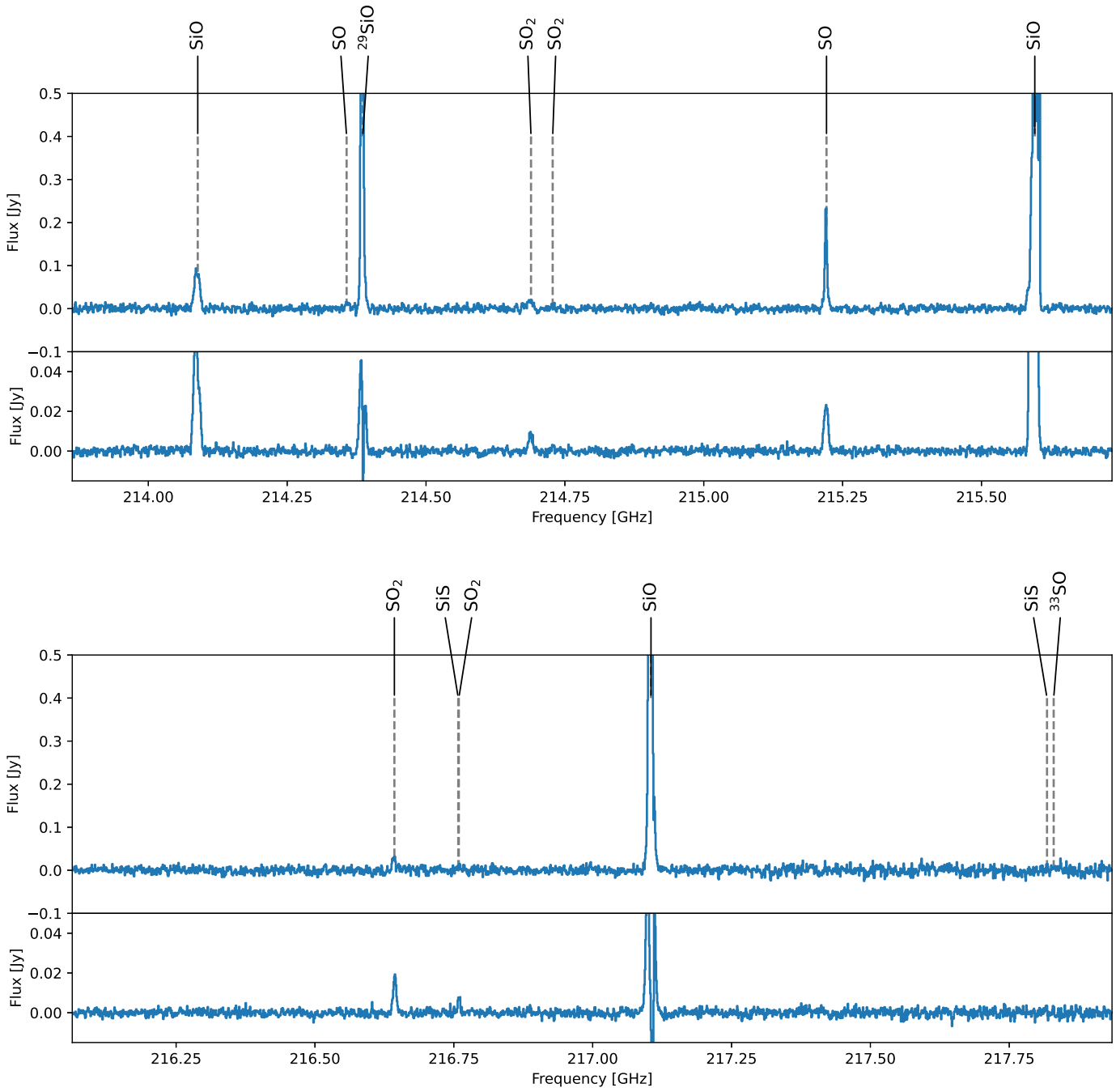


Fig. C.1: Spectrum of R Hya, in the 16 observed frequency bands. The top spectrum is extracted in a 1.2″-diameter circular aperture from the medium resolution spectrum, and the bottom shows the high resolution spectrum extracted in a 0.08″-diameter aperture. All identified lines are marked, though note that some are more easily seen at other resolutions or extraction apertures.

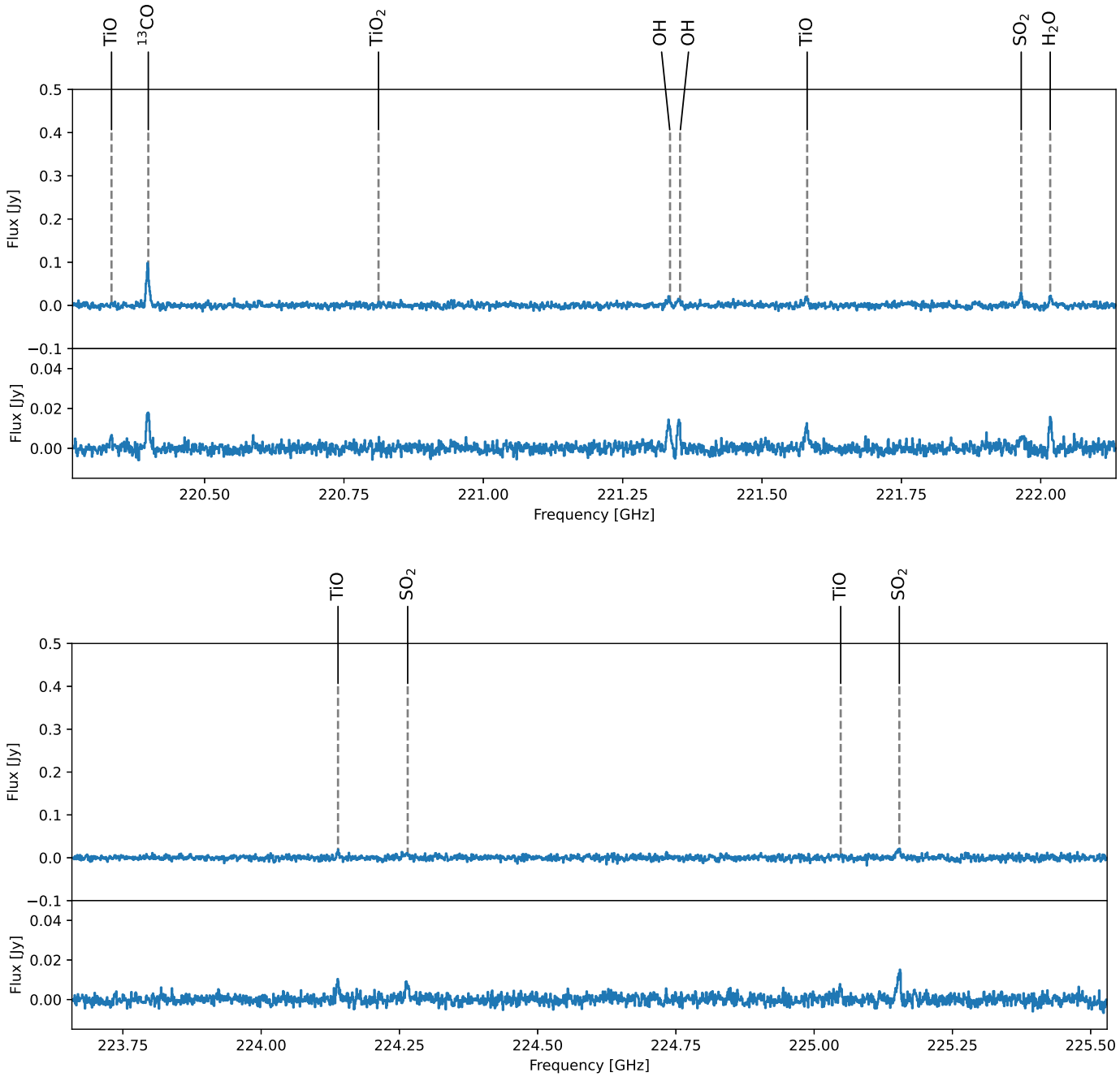


Fig. C.1: continued

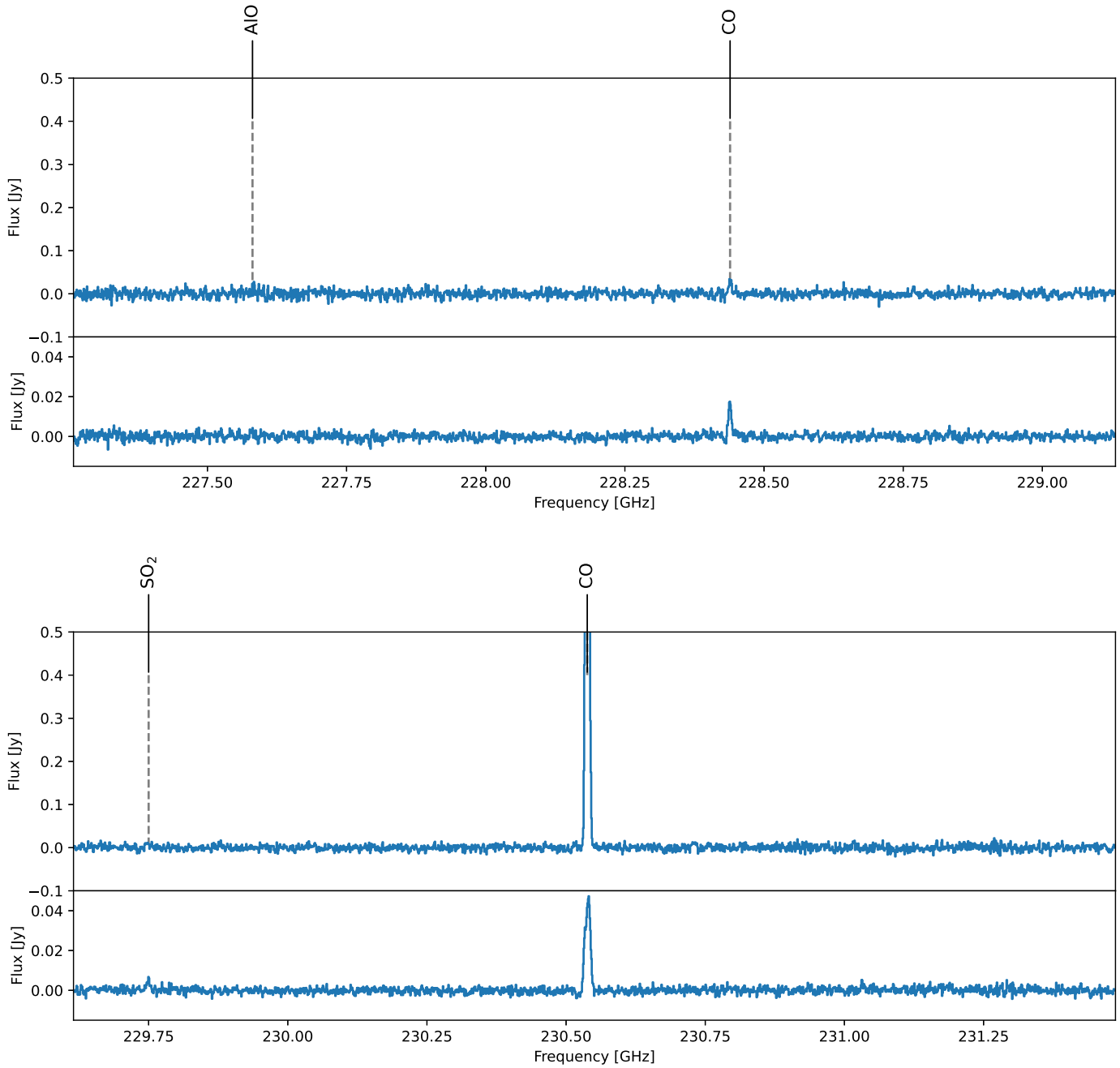
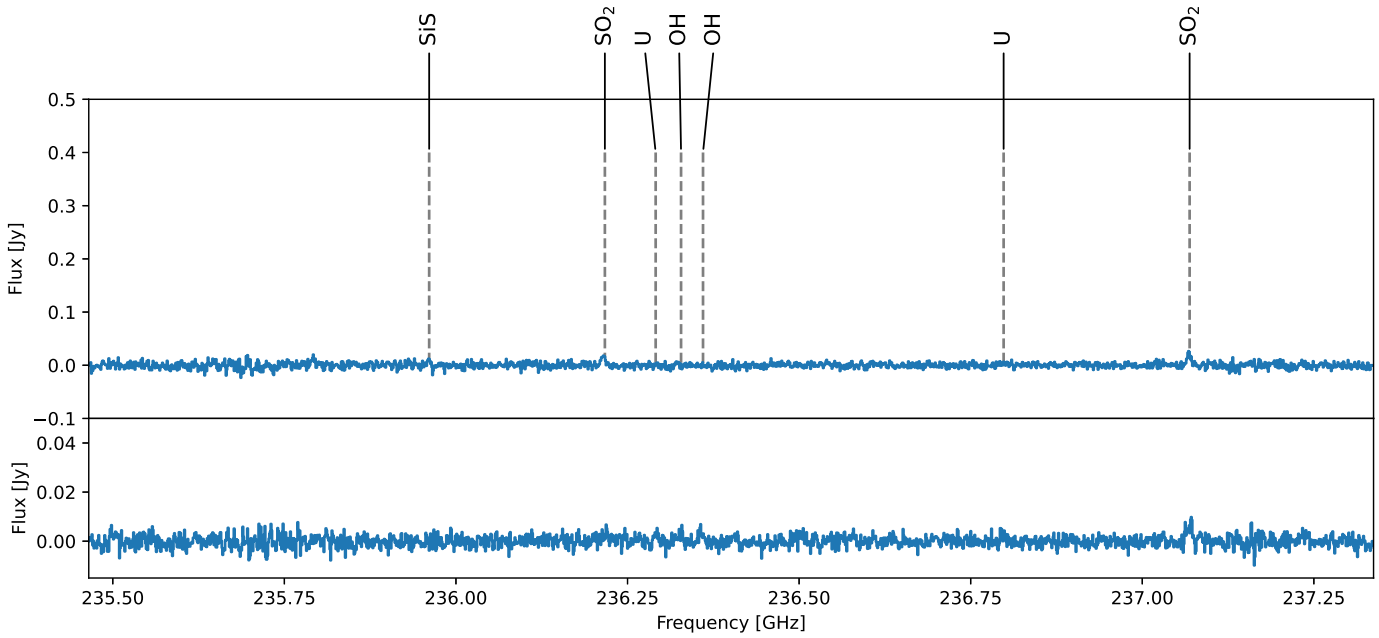


Fig. C.1: continued



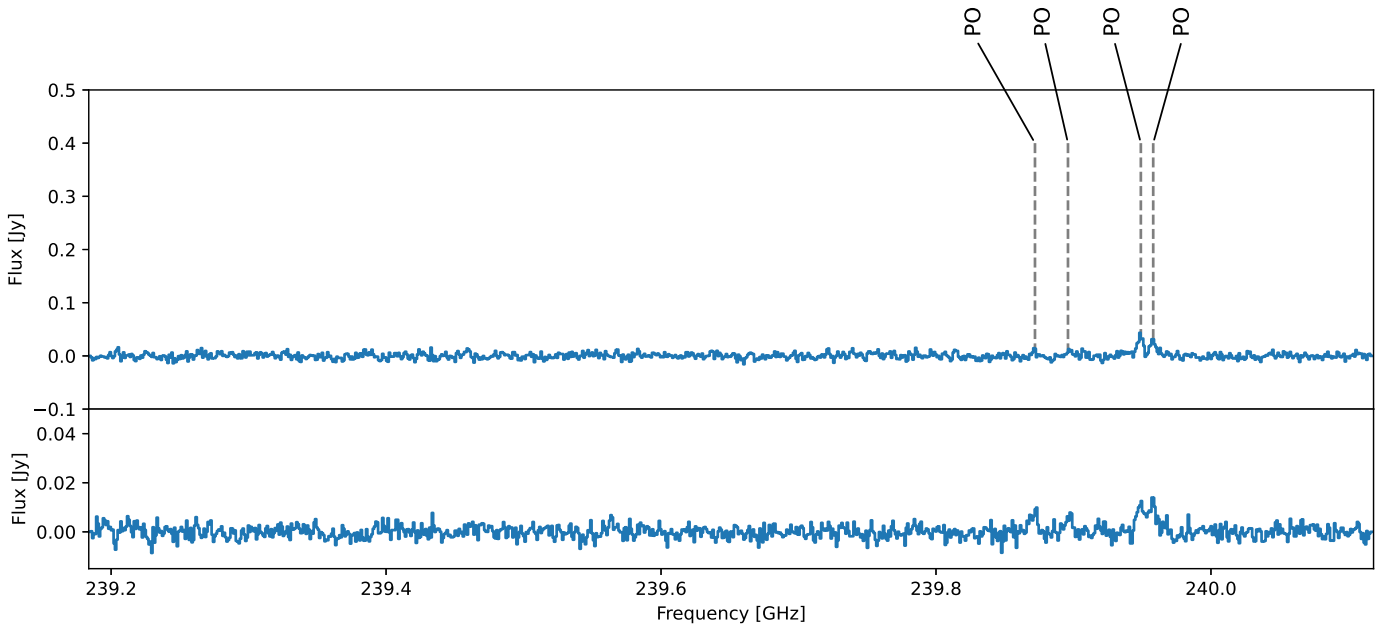


Fig. C.1: continued

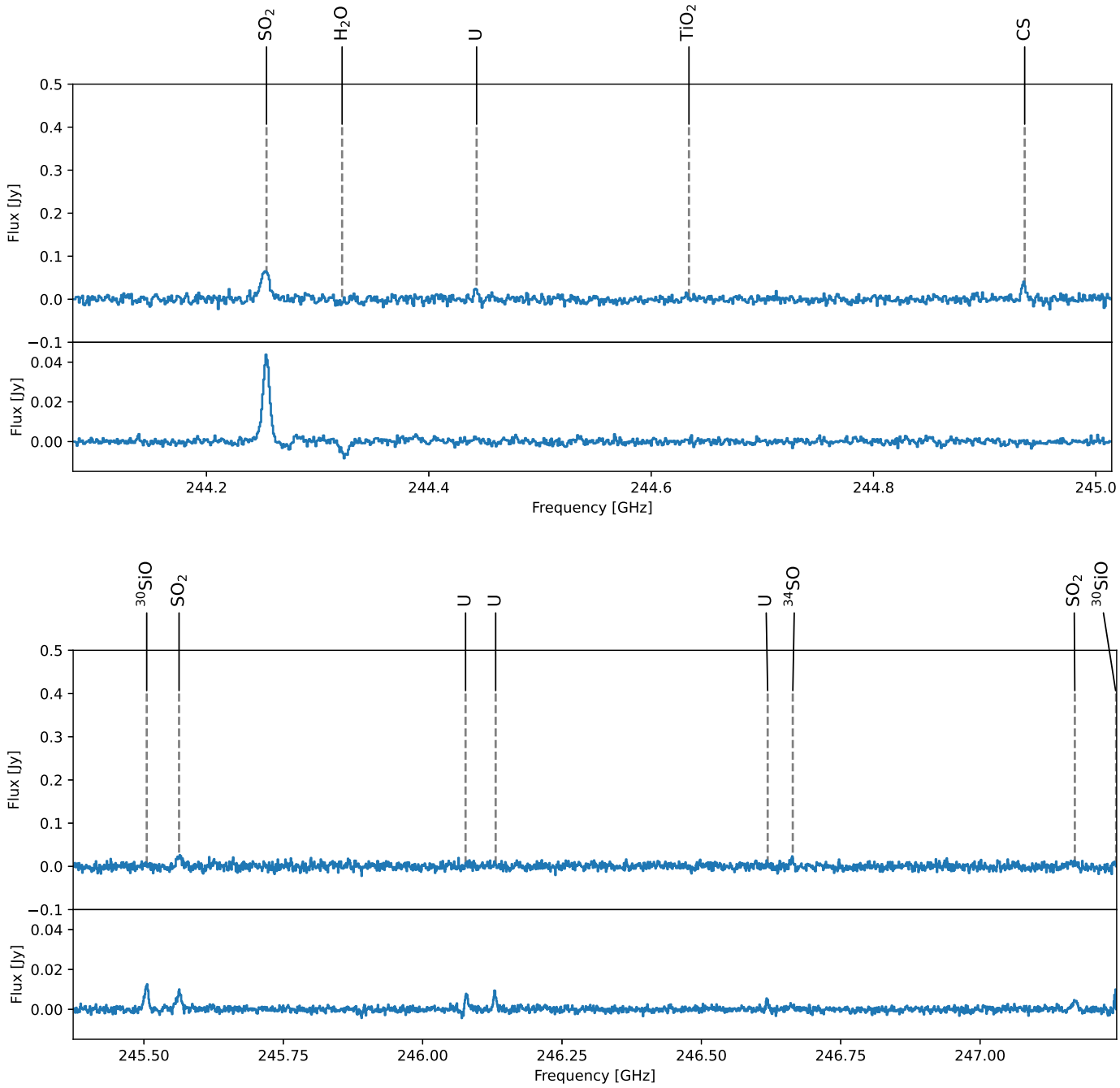


Fig. C.1: continued

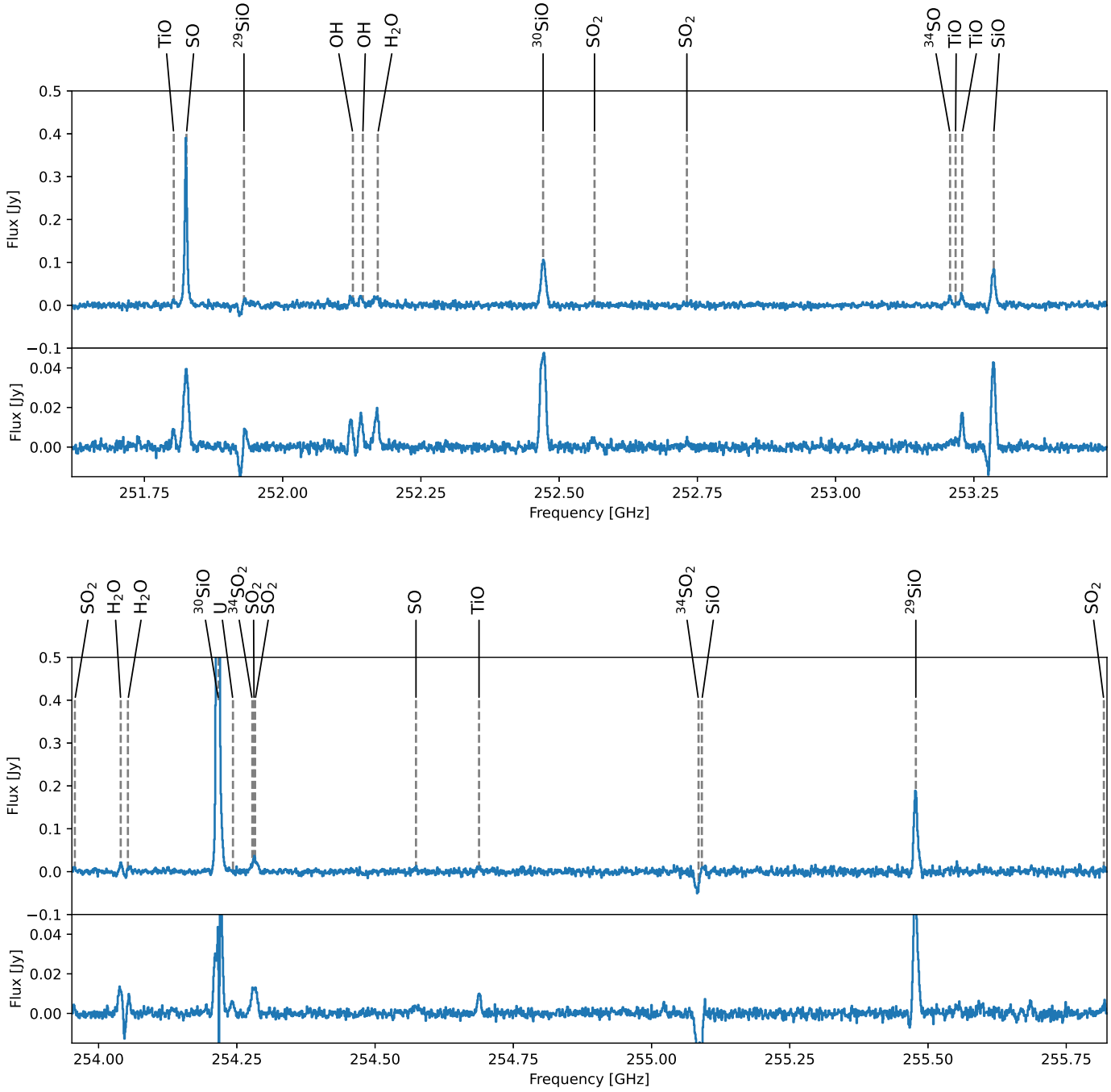


Fig. C.1: continued

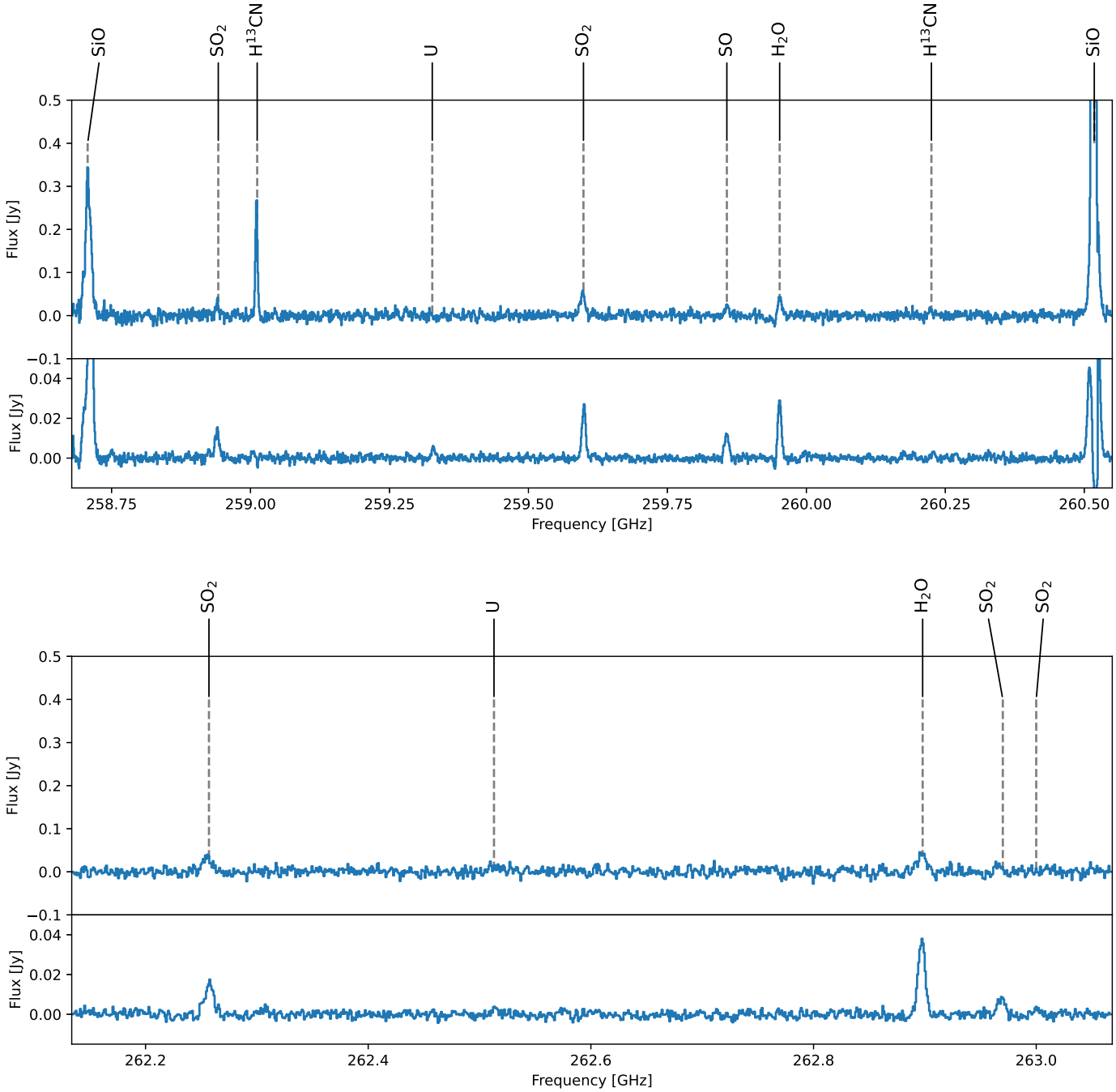


Fig. C.1: continued

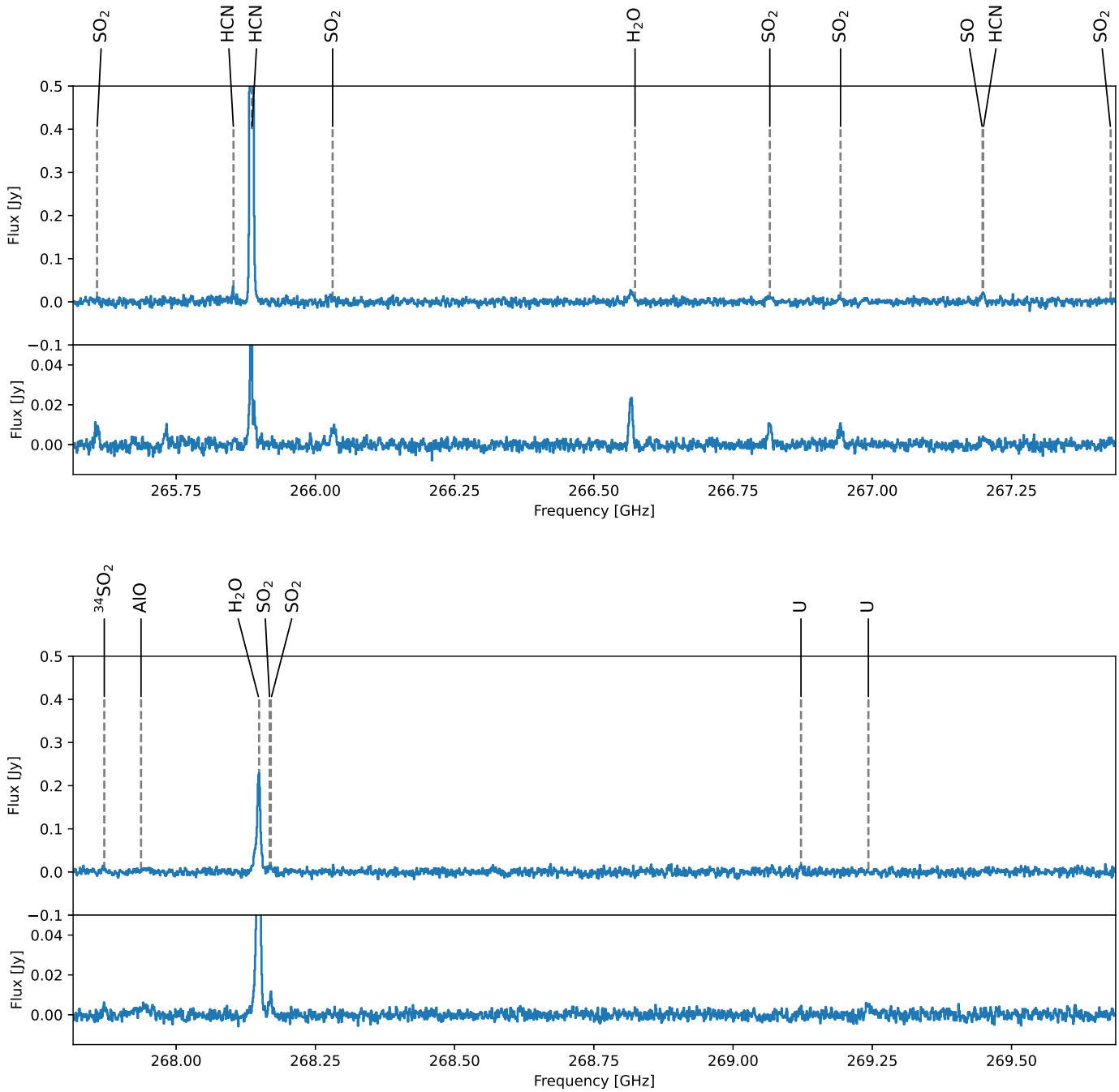


Fig. C.1: continued

E.4 ATOMIUM : ALMA Tracing the Origins of Molecules In dUst forming oxygen-rich M-type stars

DOI: 10.18727/0722-6691/5283

ATOMIUM: ALMA Tracing the Origins of Molecules In dUst forming oxygen-rich M-type stars

Leen Decin[1]
Carl Gottlieb[2]
Anita Richards[3]
Alain Baudry[4]
Taissa Danilovich[1]
Emily Cannon[1]
Thomas Ceulemans[1]
Frederik De Ceuster[1]
Alex de Koter[5]
Ileyk El Mellah[6]
Sandra Etoka[7]
Elaine Gottlieb[8]
Malcolm Gray[9]
Fabrice Herpin[4]
Ward Homan[10]
Manali Jeste[11]
Pierre Kervella[12]
Silke Maes[1]
Jolien Malfait[1]
Louise Marinho[4]
Karl Menten[11]
Tom Millar[13]
Iain McDonald[14]
Miguel Montargès[12]
Holger Müller[15]
Bannawit Pimpanuwat[7]
John Plane[16]
Ragvendra Sahai[17]
Marie Van de Sande[16]
Sofia Wallström[1]
Ka Tat Wong[18]
on behalf of the ATOMIUM Consortium[1]

[1] KU Leuven, Belgium
[2] Center for Astrophysics | Harvard & Smithsonian, Cambridge, USA
[3] Jodrell Bank Centre for Astrophysics, Manchester, UK
[4] Bordeaux University, France
[5] University of Amsterdam, the Netherlands
[6] Grenoble Alpes University, Grenoble, France
[7] University of Manchester, UK
[8] Harvard University, USA
[9] NARIT, Thailand
[10] ULB, Brussels, Belgium
[11] Max Planck Institute for Radio Astronomy, Bonn, Germany
[12] LESIA, Meudon, France
[13] Queen's University Belfast, UK
[14] Open University, UK
[15] University of Cologne, Germany
[16] University of Leeds, UK
[17] Jet Propulsion Laboratory, USA
[18] IRAM, Grenoble, France

The goals of the Atacama Large Millimeter/submillimeter Array (ALMA) Large Programme ATOMIUM are to obtain a quantitative understanding of the chemical and physical processes that govern the phase transition from small gaseous molecules to dust grains in the inner wind of oxygen-rich evolved stars; and to study the interplay between dynamical and chemical phenomena in the outflow of 17 asymptotic giant branch (AGB) and red supergiant (RSG) stars which span a range in (circum) stellar and wind properties — such as mass-loss rate, pulsation behaviour, and spatial structure of the wind-dominated ambient medium. The observations were made with three configurations of the ALMA array that encompass a range in angular resolution of approximately 0.02–1 arcseconds. They consist of 27-GHz-wide homogeneous spectral-line and continuum surveys in the 214–270 GHz range in each source in the sample, and provide an unambiguous comparison among sources. Equipped with these tools, we then show how the stellar winds of all the ATOMIUM sources exhibit distinct non-spherical geometries that can be explained by binary interaction and — depending on the parameters of the binary system — can produce a wide variety of morphologies as illustrated by the example of the AGB star π^1 Gru. In parallel with ATOMIUM, contemporaneous observations of all but three of the 17 sources were made in the visible with the SPHERE/ZIMPOL instrument at ESO's Very Large Telescope (VLT). The VLT/SPHERE observations provided direct images of the dust at a spatial resolution comparable to that obtained with ALMA. Novel hydrodynamical simulations of binary systems were done so as to further the interpretation of the near simultaneous observations of the gas and dust. We also present a brief overview of the 24 molecules that were identified in the survey, followed by a discussion of how the molecules inform us about the inner wind and the (super)giant outflow, and of some future possible observations with ALMA, ESO instruments, and the JWST.

ATOMIUM motivation and survey strategy

Scientific goals

Over 200 molecules and 15 dust species have been detected in the interstellar medium, stellar winds, exoplanets, supernovae, active galactic nuclei, etc. One of the most fundamental questions in astrophysics deals with the phase transition from simple molecules to larger gas-phase clusters and eventually dust grains. The outflows of evolved stars are the best laboratories in which to answer this pivotal question, given their rich chemistry and relatively simple dynamical structure. With the Atacama Large Millimeter/submillimeter Array (ALMA) Large Programme ALMA Tracing the Origins of Molecules In dUst forming oxygen-rich M-type stars (ATOMIUM[1]) we aim to establish the dominant physical and chemical processes in the winds of oxygen-rich evolved stars over a range of stellar masses, pulsation behaviours, mass-loss rates, and evolutionary phases. The goals are to unravel the phase transition from gas-phase to dust species, pinpoint the chemical pathways, map the morphological structure, and study the interplay between dynamical and chemical phenomena (Gottlieb et al., 2022). To achieve these goals, an ALMA Large Programme was submitted and accepted in Cycle 6 for a total observing time of 113.2 hours. This is still the only accepted Large Programme in the field of Stellar Evolution and the Sun.

ATOMIUM sample and observing strategy

The ATOMIUM sample consists of 17 oxygen-rich evolved stars, which span a range in (circum)stellar and wind properties, such as: mass-loss rate, pulsation behaviour, and asymptotic giant branch (AGB) versus red supergiant (RSG) stars. The sample consists of 14 AGB stars that are relatively close to Earth and three RSG stars. The selection criteria did not take into account prior evidence for possible binary companions.

A primary requirement for the ATOMIUM project was for homogeneous observations across the sample that

would allow unambiguous comparison among sources. The most efficient way to achieve the science goals with ALMA was to target specific spectral frequency regions in Band 6, where we know which molecules to monitor to answer the questions about the dynamical behaviour and chemical processes in the winds of evolved stars.

To spatially resolve the dust condensation region ($r \leq 10–30\ R_\star$, where $R_\star$ is the stellar radius), an angular resolution (AR) of 0.025–0.050 arcseconds is needed for our targets, which all have large optical stellar angular diameters of between 0.004 and 0.020 arcseconds. The highest spatial resolution for each target was about 0.02 arcseconds. To attain the full line strength of the molecular lines, we complemented these observations with data from a medium-resolution (AR ~ 0.20 arcseconds) configuration and a low-resolution (AR ~ 1 arcsecond) configuration. In aggregate we resolve the emission on scales from the stellar radius to thousands of stellar radii.

Figure 1. ALMA and VLT SPHERE/ZIMPOL observations towards π^1 Gru. (a) ALMA ATOMIUM CO v = 0 J = 2–1 emission map of the wind structure of π^1 Gru; angular resolution of ~ 0.3 arcseconds. (b) ALMA 1.2-mm continuum emission towards π^1 Gru at epoch July 2019; angular resolution of 0.019 arcseconds. Contours (in orange) are plotted at 3, 6, 10 and 100 times the continuum noise value. The secondary peak (white circle) south-west of the central star is likely due to a close companion. (c) SPHERE/ZIMPOL percentage polarisation at 644.9 nm towards π^1 Gru at epoch July 2019; angular resolution of 0.024 arcseconds.

ATOMIUM data reduction and data products

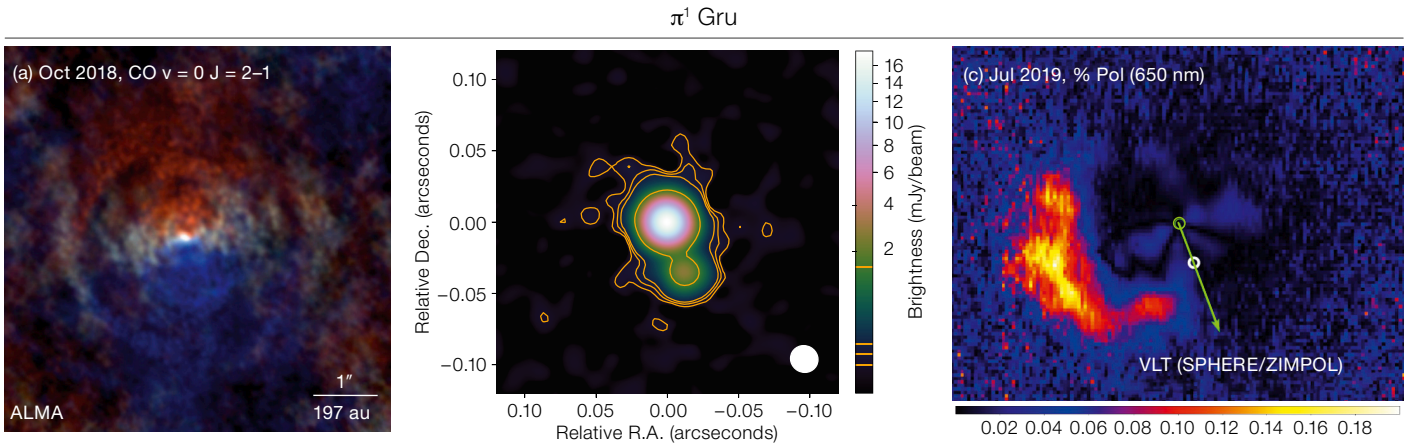
The ATOMIUM enhanced data products are being prepared for the ALMA archive. The starting point is the standard ALMA pipeline (or occasionally manual Quality Assurance 2) products. We combined the data for each star across the observed frequency range, as described by Gottlieb et al. (2022), and provide a description document and scripts for each star. These cover self-calibration (using stellar continuum), imaging and extraction of spectra. Three fully calibrated measurement sets (MS) are provided for each star, for each of the three array configurations: a continuum MS (120 channels per 1.875 GHz), a line MS (1920 channels per 1.875 GHz with about 1.2 km s^{-1} resolution) and a continuum-subtracted line MS. We also combined the data for each star for all configurations, giving one MS for the calibrated continuum visibility data (after flagging line channels) and another for the continuum-subtracted line data. The MS are a suitable starting point for re-imaging, for example to select a particular line and use different averaging or weighting to improve the sensitivity or to change the angular or spectral resolution.

Ready-made spectral cube images are available for each spectral window and array configuration (low, medium and high spatial resolution). They provide an angular resolution of approximately 0.8, 0.2 and 0.02 arcseconds, and sensitivities of a few mJy per channel. A fourth set of cubes was made from the combined data. All cubes were made using consistent parameters, but users can also take the calibrated visibility data to make images at customised resolutions to favour lines or features of interest. We made continuum-only images for each of the three configurations and the combined data, which is dominated by stellar emission (resolved at the higher resolutions) and sometimes also reveals hot dust. For the exact frequencies covered, angular resolutions, sensitivities and other details, see the appendices of Gottlieb et al. (2022). The final set of archived products are spectra extracted from each cube, for a range of extraction aperture radii (depending on configuration) from 0.02 to 5.4 arcseconds.

Hydrodynamical behaviour of stellar winds

Companions shaping the winds of AGB and RSG stars

The new revolution in observational techniques accommodates high-spatial-resolution (reconstructed) images and provides direct evidence that the circumstellar envelopes created by the stellar winds harbour small- and large-scale inhomogeneities. Flow instabilities induced by convection result in the formation of granulation cells on the surfaces of the giant stars, and of small-scale density structures in the stellar wind, with sizes of about 1–50 au. A remarkable new thesis delivered by the ALMA telescopes is that planetary or stellar companions impact the wind morphology of almost all AGB and RSG stars with a mass-loss rate



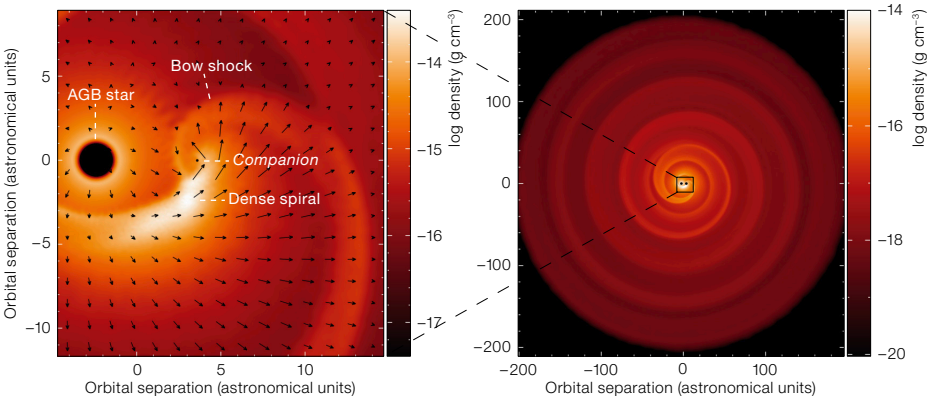


Figure 2. Density distribution in a slice through the orbital plane for the binary configuration described in the text, with the centre of mass located at the (0,0) position. The left panel shows the inner density structures formed around the primary and the companion; the right panel displays the global orbital plane morphology (Malfait et al., 2021).

$\dot{M} \geq 10^{-7}\,M_{\odot}$ yr^{-1}. In a fraction of stars, the companion induces a change in the wind's expansion velocity and mass-loss rate.

In particular, we have shown that the winds of all sources observed within the ATOMIUM programme exhibit distinct non-spherical geometries with extents greater than about 100 au, and morphologies which are similar to those of planetary nebulae (Decin et al., 2020). These morphological characteristics can be explained by binary interaction. Depending on the parameters of the binary system, a wide variety of morphologies can arise, including spiral structures, a circumbinary disc, an accretion disc around the companion, a bipolar outflow, an equatorial density enhancement. An example of such a binary-induced morphology is shown in the left panel of Figure 1, which displays the ATOMIUM CO $v = 0$ $J = 2$-1 emission map for the AGB star π^1 Gru (Decin et al., 2020). Emission that is redshifted with respect to the local standard of rest velocity is shown in red, blueshifted emission is in blue, and the gas at the rest velocity is in white. The scale bar has an angular extent of 1 arcsecond. Prior to the ATOMIUM data, it was known that π^1 Gru has a companion residing at about 440 au. However, that companion is too far away to create the structures revealed by the observations with ALMA. Remarkably, the ALMA continuum data (middle panel of Figure 1) show two maxima separated by about 6 au. An investigation of the ALMA continuum data — and the maps of the CO, SiO, and HCN emission — reveals that the second maximum could be a companion of mass $\lesssim 1.1\,M_{\odot}$ that creates an inclined, radially outflowing equatorial density enhancement and a spiral structure (Homan et al., 2020).

VLT SPHERE/ZIMPOL observations

The ALMA ATOMIUM data only provide minimal inference of the geometry of the dust distribution around the AGB stars. For that reason we have acquired contemporaneous observations of the ATOMIUM sources using the SPHERE/ZIMPOL instrument at ESO's Very Large Telescope (VLT). The ZIMPOL instrument provides polarimetric images in the visible at an angular resolution that is comparable to the highest spatial resolution in the ALMA data (right panel of Figure 1). The observed polarized light comes from the scattering by the dust grains and originates primarily from regions near the plane of the sky going through the centre of the target. Green and white circles mark the inferred locations of π^1 Gru and the close companion. The companion is not directly seen in the ZIMPOL images, but is inferred to lie at the head of the spiral structure created by the gravitational interaction between the AGB star (and its wind) and the companion (Montargès et al., 2022).

Hydrodynamical simulations

To further the interpretation of the ALMA and SPHERE observations, we have performed novel hydrodynamical simulations for binary systems in which the primary is a mass-losing AGB star (El Mellah et al., 2020; Maes et al., 2021; Malfait et al., 2021). Figure 2 shows the density distribution for a simulation in which the primary star is an AGB star of mass 1.5 $M_{\odot}$ that launches a stellar wind with initial velocity of 10 km s^{-1} and mass-loss rate of $1 \times 10^{-6}\,M_{\odot}$ yr^{-1}. A companion star of mass 1 $M_{\odot}$ orbits the AGB star in a circular orbit with orbital separation of 6 au. The wind–companion interaction creates a dense spiral flow behind the companion and a second spiral emerging from a bow shock in front of the moving companion (left panel of Figure 2). This stable bow shock shapes the global morphology into an approximate Archimedes spiral structure (right panel of Figure 2).

Chemical processes in stellar winds

Twenty-four molecules were identified in the ATOMIUM sample by means of their rotational spectra (CO, SiO, HCN, SO, SO_2, CS, SiS, H_2S, OH, H_2O, TiO, TiO_2, AlO, AlOH, PO, SiC, SiC_2, SiN, CN, HCCCN, AlCl, AlF, NaCl, KCl). The first three molecules were observed in all the stars in our sample, but some of the others were observed primarily in the denser regions of the stellar wind in only some of the stars.

Shown in Figure 3 is a small portion of the spectrum observed in the oxygen-rich Mira variable R Hya, accompanied by high-resolution maps of the integrated intensity. The spectrum contains several species believed to be precursors of the dust, including TiO in the ground and first excited vibrational level (1451 K above ground), three transitions of vibrationally excited SiO (between 1790 and 5266 K above ground), and (see Figure 4) vibrationally excited H_2O and highly excited transitions of OH (5480 K above ground). Measurements such as these provide a direct means to examine the properties of the inner wind, and serve as benchmarks for the chemical kinetic calculations.

Because our observations allow us to examine a wide variety of chemical species found throughout the stellar

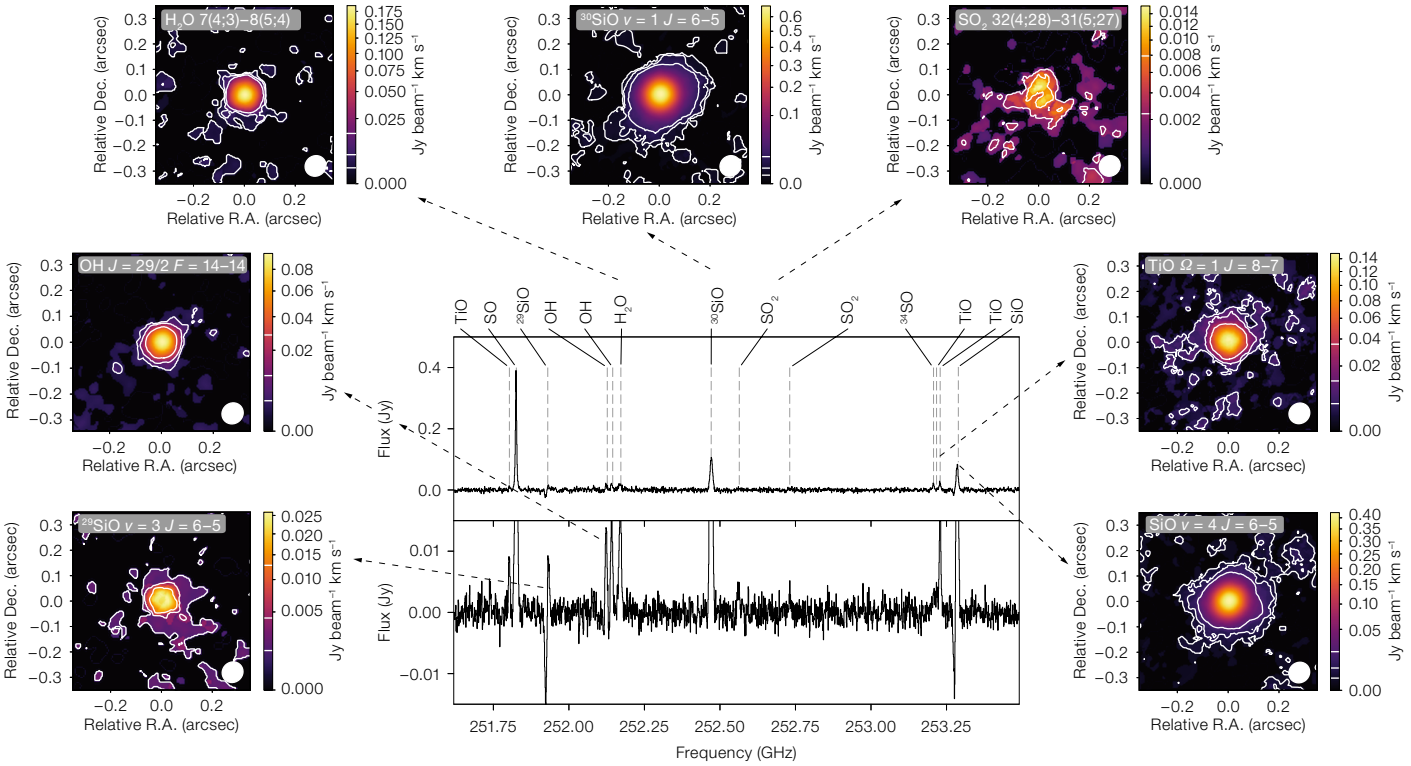


Figure 3. R Hya. Upper panel: Spectrum extracted from the medium-spatial-resolution configuration for an aperture of 0.2 arcseconds. Lower panel: Spectrum extracted from the high-spatial-resolution configuration for an aperture of 0.02 arcseconds. Images show the integrated intensity maps for some molecular lines computed from the combined dataset. White contours are at 3,10 and 30 times the noise in the integrated intensity maps. The ellipse in the bottom right corner of each image represents the beam of the combined dataset.

wind, we are able to refine the chemical kinetics codes used to predict the molecular abundances. For example, we established that the wind density plays a key role in wind chemistry, on the basis of an analysis of our recent observations of AlCl and AlF towards W Aql in close collaboration with physical chemists (Danilovich et al., 2021).

Overall, the ATOMIUM observations allow us to investigate several major astrochemical topics. These include: (i) molecules in the inner few stellar radii that are expected to be intimately involved in the formation of the initial dust grains; (ii) the interpretation of the spectra of 10 transitions in H_2O (Baudry et al., 2022, and see Figure 4) and vibrationally excited SiO which are both sensitive tracers of clumps, shocks, and complex gas motion; (iii) detailed analyses of the spectra and maps of CO and SiO (in maser and non-maser emission) that reveal the morphology and the wind dynamics in the inner wind and throughout the outflow in all the stars — supplemented with the maps and spectra of other molecules, such as HCN (Homan et al., 2020) and SO_2 (see, for example, Figure 4 of Gottlieb et al., 2022); (iv) constraining the reaction rates used in chemical kinetic codes that aim to reproduce the molecular abundances derived from the ATOMIUM observations in each stellar type, and the quantity of the dust inferred from the VLT/SPHERE-ZIMPOL observations of Montargès et al. (2022); and (v) looking for the possible influence of companions on the chemistry in the inner wind (Van de Sande & Millar, 2022).

Another important area involving the gas-dust interactions which has begun to be addressed by recent chemical kinetic codes (Van de Sande, Walsh & Danilovich, 2020), concerns the deposition of the more abundant molecules on the grains in the AGB outflows. However much remains to be done by observers, working in close collaboration with chemists. The crucial observational quantities needed are reliable estimates of the fraction by which the abundances of key molecules (for example, SiO, SiS, H_2O, HCN, CS, and SO_2) are depleted in the outflow versus the distance from the star.

Other topics addressed by ATOMIUM

Building on the core goals of the ALMA ATOMIUM Large Programme, the ATOMIUM team[2] has grown during the past few years and currently includes 48 researchers with complementary expertise. ATOMIUM team members have addressed or are currently addressing: (i) the small- and large-scale morphologies of AGB and RSG stellar winds; (ii) the cause of inhomogeneous mass-loss events in RSGs; (iii) the distribution of molecules in the winds of AGB and RSG stars; (iv) quantum-chemical calculations of the cluster geometries and reaction rates of dust-forming gaseous precursors; (v) the molecular assignment of still unidentified spectral features; (vi) maser emission, in particular SiO masers to

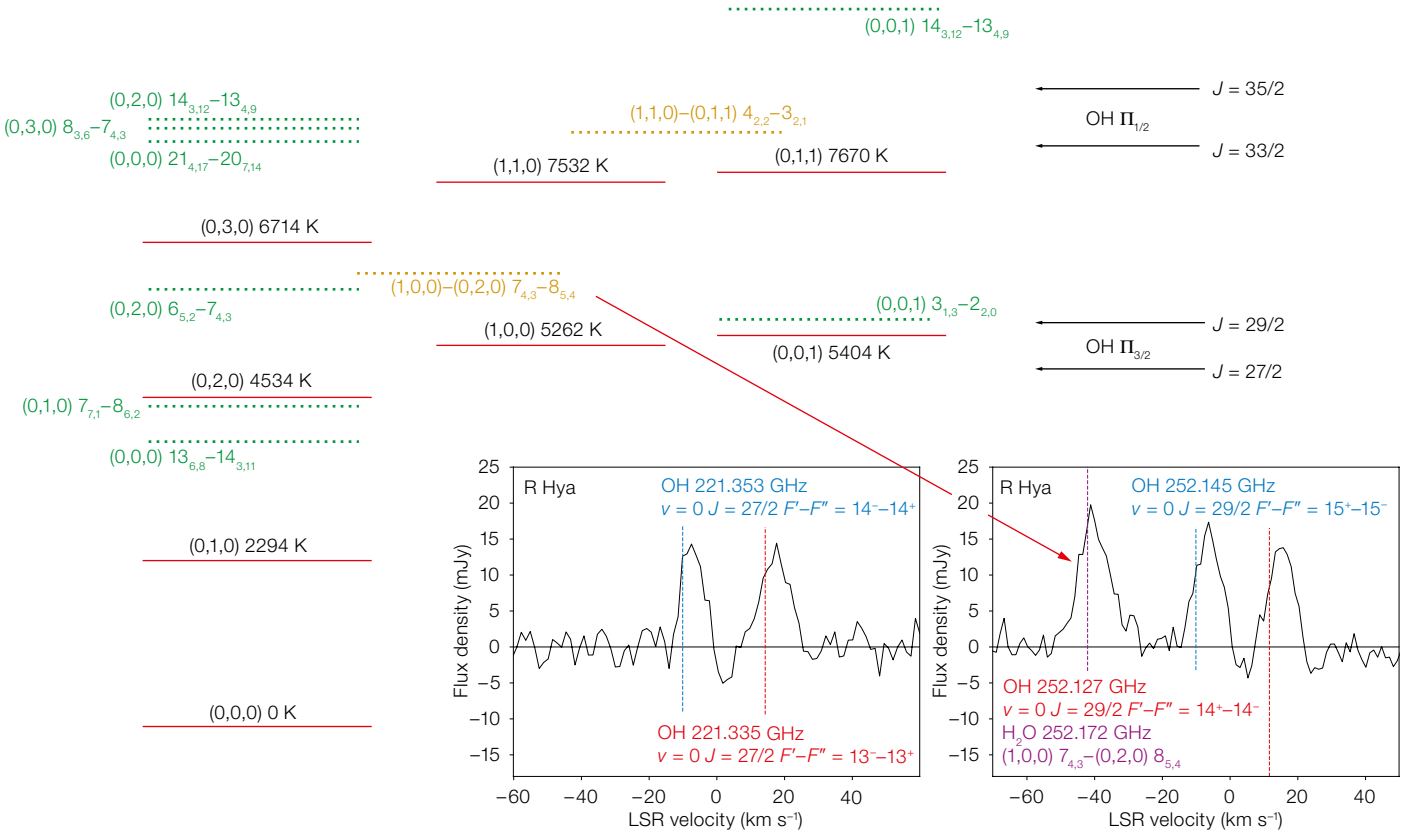


Figure 4. The lowest eight vibrational states of H_2O are displayed as horizontal red lines with their quantum numbers (v_1, v_2, v_3) and associated energy in kelvins. The horizontal dotted green and orange lines are the ten rotational transitions observed in various vibrational states of the ATOMIUM survey. The four horizontal black arrows to the right show the energy levels of the OH Λ-doublet transitions in the four rotational states observed in our survey. The two lower right panels present the J = 27/2 and 29/2 Λ-doublet spectra observed in R Hya, simultaneously with one rovibrational transition of H_2O next to the J = 29/2 OH spectrum (rightmost panel). The observed frequency is converted to velocity in the Local Standard of Rest frame by using the rest frequencies shown above and below the spectra corrected for the systemic star velocity (Baudry et al., 2022).

constrain excitation models as well as the kinematics close to the star, whilst conditions out to the wind acceleration zone are probed by water masers; (vii) the construction of chemical networks of relevance for AGB and RSG winds, and the study of their chemical predictions including that of dust nucleation; (viii) morphological studies of binary systems based on state-of-the-art hydrodynamical (HD) numerical codes; (ix) coupling of the HD codes to fast chemical network emulators and radiative transfer calculations; and (x) laboratory studies aimed at understanding dust nucleation/sublimation, and molecular collisions between water and H_2 or He, etc.

Next (observational) steps

The ATOMIUM Large Programme was designed to study oxygen-rich evolved stars via spatially resolved maps of molecular line and dust emission. From our first paper (Decin et al., 2020) it is already clear that binarity is a key parameter for understanding the chemical and morphological complexities of an evolved star's winds, although that parameter was not included in the original sample selection criteria. Aiming to understand the impact of (hidden) planetary and stellar companions, the ATOMIUM source sample should be extended to include carbon-rich evolved stars, oxygen-rich evolved stars for which we know the initial mass, and a larger variety of red supergiants. In addition, there is the need for complementary ALMA data targeted, on one hand at the same frequency bands to derive the time variability of morphological and chemical emission patterns, and on the other hand at another frequency band (i) to study the molecules via various rotational transitions spanning a range of energies, and (ii) to constrain the spectral index of the continuum in order to determine the nature of the proposed companions. On top of that, other ESO instruments such as GRAVITY and MATISSE of the Very Large Telescope Interferometer can provide crucial information about the dust location, and offer the potential for detecting the proposed companions. The ATOMIUM results will also stimulate many new radio observations of evolved stars with other interferometers or single antennas in the millimetre- and centimetre-wave domains (NOEMA, SMA, e-Merlin and large sensitive single antennas), for example to monitor masers using the Atacama Pathfinder EXperiment (APEX) (SiO) and Medicina, Pushchino and e-Merlin (22 GHz water). And although the ATOMIUM sources are bright in the infrared, the chronographic modes or off-source pointing offered by the NIRCAM and MIRI instruments on board the JWST should allow us to get high sensitivity infrared images of the stellar winds,

similar to the recent Early Release Science data of the colliding wind Wolf-Rayet binary WR140 (Lau et al., 2022).

Acknowledgements

ALMA data: ADS/JAO.ALMA#2018.1.00659.L, 'ATOMIUM: ALMA tracing the origins of molecules forming dust in oxygen-rich M-type stars'. ALMA is a partnership of ESO (representing its Member States), NSF (USA) and NINS (Japan), together with NRC (Canada) and NSC and ASIAA (Taiwan), in cooperation with the Republic of Chile. The Joint ALMA Observatory is operated by ESO, AUI/NRAO and NAOJ. SPHERE/ZIMPOL data: ESO programme 0103.D-0772(A).

References

Baudry, A. et al. 2022, submitted to A&A
Danilovich, T. et al. 2021, A&A, 655, A80
Decin, L. et al. 2020, Science, 369, 1497
El Mellah, I. 2020, A&A, 637, A91
Gottlieb, C. A. et al. 2022, A&A, 660, A94
Homan, W. et al. 2020, A&A, 644, A61
Lau, R. M. et al. 2022, Nature Astronomy, in press
Maes, S. et al. 2021, A&A, 653, A25
Malfait, J. et al. 2021, A&A, 652, A51
Montargès, M. et al. 2022, submitted to A&A
Van de Sande, M., Walsh, C. & Danilovich, T. 2020, MNRAS, 495, 1650
Van de Sande, M. & Millar, T. 2022, MNRAS, 510, 1204

Links

[1] The ATOMIUM project website: https://fys.kuleuven.be/ster/research-projects/aerosol/atomium
[2] ATOMIUM consortium members list: https://fys.kuleuven.be/ster/research-projects/aerosol/atomium/consortium-members

ALMA (ESO/NAOJ/NRAO)



A number of ALMA's 66 high-precision radio antennas can be seen in this image, connected by cleared pathways. The array spends its time observing the cool Universe and its phenomena — star formation, molecular clouds, stellar evolution, and the early Universe.