

Modélisation des émissions maser H_2O dans l'enveloppe des étoiles évoluées

Juvinsto Carvalho

Sous la direction de Fabrice Herpin

Master 1 NPU/Agrégation

Avril 2025 – Juin 2025

Introduction Générale

Présentation du Laboratoire d'Astrophysique de Bordeaux (LAB)

- Unité Mixte de Recherche (UMR): UB & CNRS
- ¼ OASU (EPOC, INRAE, EABX, LIENSs)
- 5 équipes scientifiques et 2 d'appui technique
- Équipe FEMIS : FS et MIS
- Contribution ALMA

Description du Stage

- Contexte : Observation Raie H₂O et étoile évoluée
- Projets Waterstars : Taux collision
- Étude proposée: Transfert radiatif (MOLPOP)
- Benchmark Gray et al 2016
- Baudry et al 2023

ATOMIUM: ALMA tracing the origins of molecules forming dust in oxygen-rich M-type stars

Introduction

- Étoile évoluée riche en Oxygène
- 17 sources AGB et RSG
- Les étoiles AGB: faible masse et contribution à l'enrichissement du Milieu interstellaire
- Les RSG : forte luminosité et basse température

Table 1. Summary of some (circum)stellar parameters of the ATOMIUM sample.

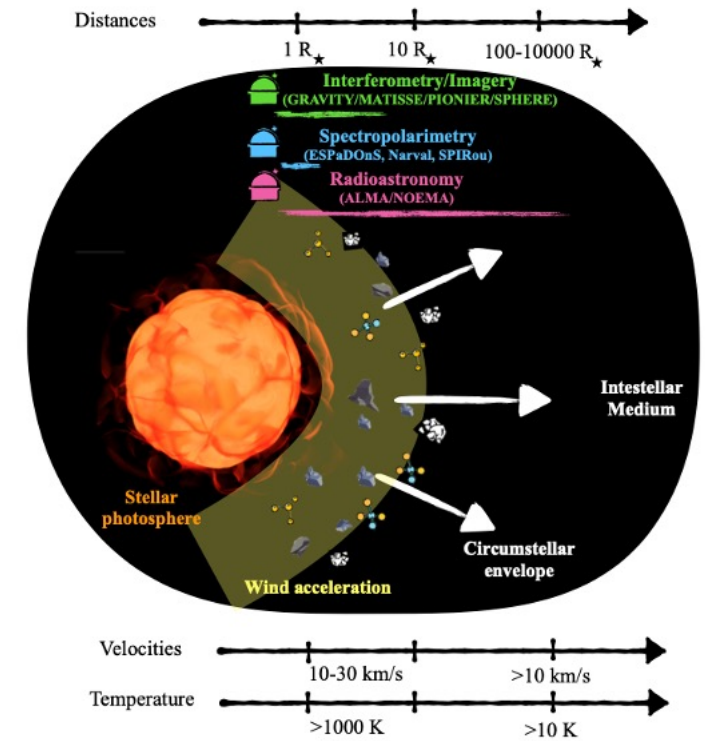
Star ^(a)	Variability type ^(e)	Mass-loss rate ($M_{\odot}/\text{yr}$)	Pulsation period P (days)	Distance D (pc)	Stellar diameter ^(b) θ_d (mas)	T_{eff} ^(b) (K)	L ^(c) ($L_{\odot}$)	$v_{\text{LSR}}^{\text{new}}$ ^(d) (km s^{-1})
S Pav	SRa	8×10^{-8} (aa)	381 (aa)	190 (jj)	12.	3100 (xx)	4900	-18.2
T Mic	SRb	8×10^{-8} (aa)	347 (aa)	210 (jj,ll)	9.3	3300 (xx)	4700	25.5
U Del	SRb	1.5×10^{-7} (aa)	119 (jj)	330 (jj,ll,yy)	7.9 (uu)	2800	4100	-6.8
RW Sco ^(f)	Mira	2.1×10^{-7} (bb)	389 (bb)	514 (jj)	4.9	3300 (xx)	7700	-69.7
V PsA	SRb	3×10^{-7} (aa)	148 (aa)	278 (jj)	13.	2400 (aa)	4100	-11.1
SV Aqr	LPV	3×10^{-7} (aa)	...	389 (jj)	4.4	3400 (xx)	4000	6.7
R Hya ^(g)	Mira	4×10^{-7} (cc)	366 (ll)	165 (pp)	23. (uu)	2100 (cc)	7400	-10.1
U Her	Mira	5.9×10^{-7} (dd)	402 (ll)	266 (qq)	11. (uu)	3100	8000	-14.9
π^1 Gru ^{(g),(h)}	SRb	7.7×10^{-7} (ee)	150 (cc)	197 (jj,ll)	21. (vv)	2300 (cc)	4700	-11.7
AH Sco	SRc	1×10^{-6} (ff)	738 (mm)	2260 (rr)	5.8 (ss)	3700	330000	-2.3
R Aql ^(f)	Mira	1.1×10^{-6} (dd)	268 (ll)	230 (jj,ll)	12. (uu)	2800 (cc)	4900	47.2
W Aql ^{(g),(h)}	Mira.	3×10^{-6} (gg)	479 (ll)	375 (jj)	11. (uu)	2800	9700	-23.0
GY Aql	Mira	4.1×10^{-6} (hh)	468 (ll)	152 (jj)	21.	3100 (xx)	9600	34.0
KW Sgr	SRc	5.6×10^{-6} (ii)	647 (nn)	2400 (ss)	3.9 (ss)	3700	175700	-4.4
IRC-10529 ^(f)	Mira	4.5×10^{-6} (cc)	680 (cc)	760 (cc)	6.5	2700 (cc)	14400	-16.3
IRC+10011 ^(f)	Mira	1.9×10^{-5} (cc)	660 (cc)	740 (cc)	6.5	2700 (cc)	13900	10.1
VX Sgr	SRc	6.1×10^{-5} (jj)	732 (oo)	1560 (tt)	8.8 (ww)	3500	102300	5.7

Gottlieb et al 2022

ATOMIUM: ALMA tracing the origins of molecules forming dust in oxygen-rich M-type stars

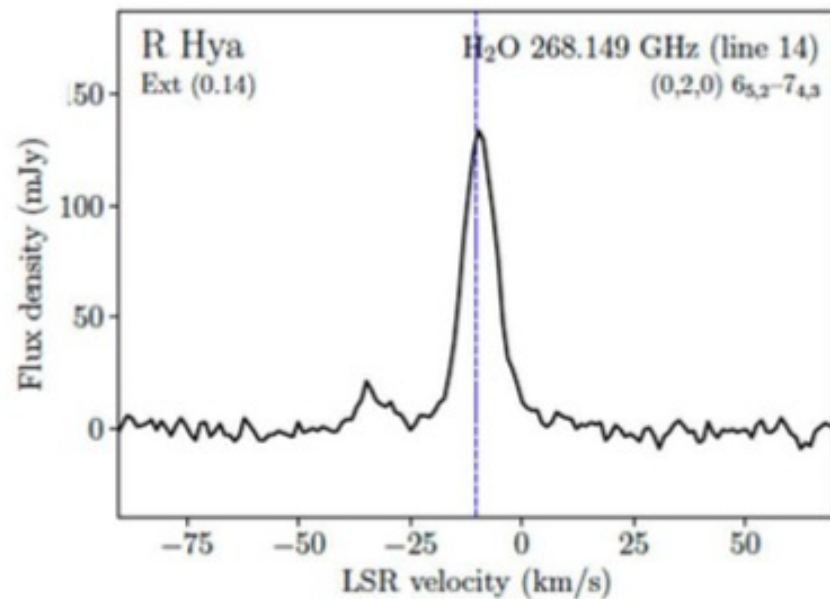
ALMA

- Domaine d'observation: 3.6 et 0.3mm
- 66 Antennes
- Interférométrie
- ALMA et ATOMIUM :
 - Résultat majeur : Binarité stellaire ou planétaire.

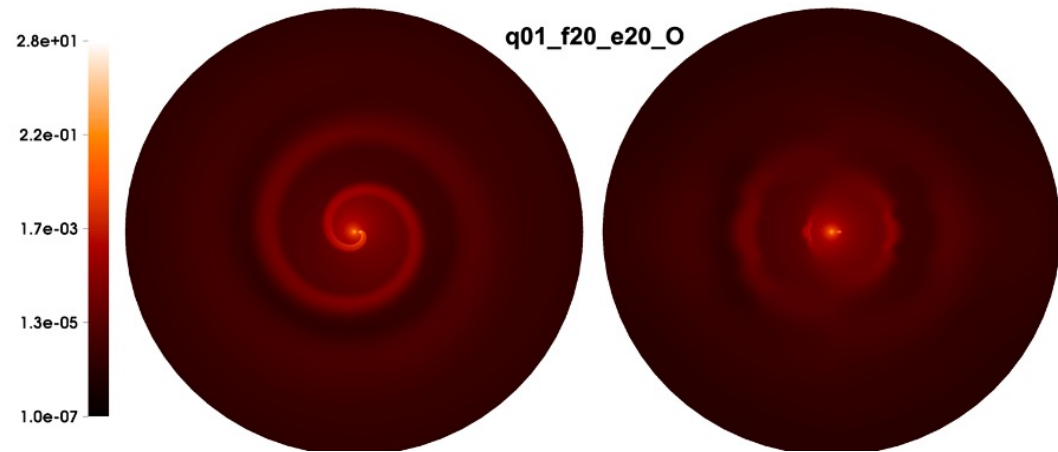


ATOMIOUM: ALMA tracing the origins of molecules forming dust in oxygen-rich M-type stars

Observations



Une raie maser de l'eau détectée dans les observations ALMA



Simulation hydrodynamique pour un système binaire contenant une AGB et un compagnon. (Gotlieb 2022)

Méthode travail

Aspect théorique : Équilibre statistique à 3 niveaux

- Atténuation onde EM dans un milieu et émission du milieu

— J_{ij} , l'intensité moyennée : pour une fréquence de transition donnée ν_{ij} ,

$$J_{ij} = \frac{1}{4\pi} \int I_{ij} d\Omega \quad (1)$$

* Avec Ω , l'angle solide

* Avec I_{ij} , l'intensité spécifique de rayonnement

Équation de transfert de rayonnement :

$$\frac{dI_\nu}{dl} = -\kappa_\nu I_\nu + \epsilon_\nu$$

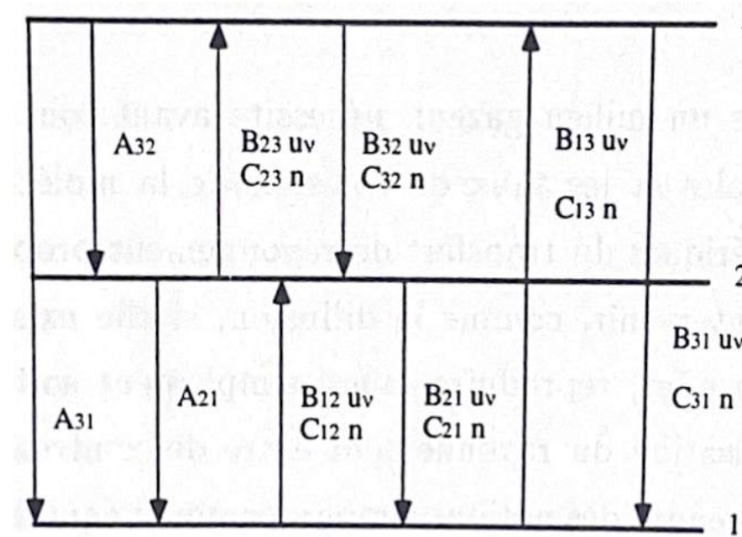


FIGURE 3 – Cas simple de 3 Niveaux rotationnels

— n , la densité de collisionneurs

— si $i > j$:

1. A_{ij} , coefficient d'émission spontanée de i vers j
2. B_{ij} , coefficient d'émission stimulée de i vers j
3. C_{ij} , coefficient d'émission par collision

— si $i < j$:

1. B_{ij} , coefficient d'absorption stimulée de i vers j
2. C_{ij} , coefficient d'absorption par collision

Afficher

MOLPOP-CEP

Approximation utilisée

- Slab : modèle tuyau

$$I_{\text{fin}} = I_{\text{init}} e^{-\tau}, \quad \text{si } I_{\text{fin}} > I_{\text{init}} \implies \text{maser, donc } \tau < 0$$

Paramètre d'entrée

- Le nombre de niveaux d'énergies
- La densité de (n_{H_2})
- Le taux d'abondance de la molécule considéré χ
- Le fichier taux de collisions
- Le fichier niveau d'énergie et les coefficients d'Einstein
- La densité moléculaire (N_{mol})
- La longueur du Slab ($L_{AGB} = 4.5 \times 10^{13} \text{ cm}$ et $L_{SG} = 2.25 \times 10^{14} \text{ cm}$, valeurs typiques tirées de **Gray2016**)
- La T_{Kin}
- La T_{dust}
- Le nombre de transition

Sortie MOLPOP

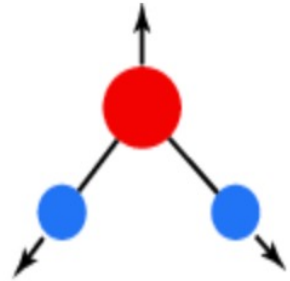
1180.22 mic (254.014 GHz) transition between levels ** and **
Upper Level: 0_2_0_14_3_12
Lower Level: 0_2_0_13_4_9

Nmol cm-2/kms	tau	Flux W/m2	int(Tb dv) K km/s	Io W/m2/Hz/st	del(Tb) K	del(TRJ) K	Tex K	Xdust
3.00E+12	4.58E-12	5.18E-25	-1.45E-10	-3.11E-27	-4.73E-01	-7.92E-11	-9.80E+00	1.00E+00
5.33E+12	8.15E-12	9.23E-25	-2.57E-10	-5.54E-27	-4.84E-01	-1.41E-10	-9.80E+00	1.00E+00
9.49E+12	1.45E-11	1.64E-24	-4.58E-10	-9.84E-27	-4.95E-01	-2.50E-10	-9.80E+00	1.00E+00
1.69E+13	2.58E-11	2.93E-24	-8.14E-10	-1.75E-26	-5.07E-01	-4.45E-10	-9.80E+00	1.00E+00
3.00E+13	4.58E-11	5.24E-24	-1.45E-09	-3.11E-26	-5.20E-01	-7.91E-10	-9.80E+00	1.00E+00
5.33E+13	8.15E-11	9.37E-24	-2.57E-09	-5.53E-26	-5.33E-01	-1.41E-09	-9.80E+00	1.00E+00
9.49E+13	1.45E-10	1.68E-23	-4.57E-09	-9.84E-26	-5.47E-01	-2.50E-09	-9.79E+00	1.00E+00
1.69E+14	2.58E-10	3.02E-23	-8.13E-09	-1.75E-25	-5.61E-01	-4.45E-09	-9.79E+00	1.00E+00
3.00E+14	4.58E-10	5.45E-23	-1.44E-08	-3.11E-25	-5.76E-01	-7.91E-09	-9.79E+00	1.00E+00
5.33E+14	8.15E-10	9.85E-23	-2.57E-08	-5.53E-25	-5.92E-01	-1.41E-08	-9.78E+00	1.00E+00
9.49E+14	1.45E-09	1.79E-22	-4.56E-08	-9.83E-25	-6.09E-01	-2.50E-08	-9.78E+00	1.00E+00
1.69E+15	2.58E-09	3.25E-22	-8.11E-08	-1.75E-24	-6.27E-01	-4.44E-08	-9.77E+00	1.00E+00
3.00E+15	4.58E-09	5.93E-22	-1.44E-07	-3.11E-24	-6.47E-01	-7.90E-08	-9.76E+00	1.00E+00
5.33E+15	8.15E-09	1.09E-21	-2.56E-07	-5.52E-24	-6.67E-01	-1.40E-07	-9.74E+00	1.00E+00
9.49E+15	1.45E-08	2.01E-21	-4.54E-07	-9.80E-24	-6.89E-01	-2.49E-07	-9.72E+00	1.00E+00
1.69E+16	2.58E-08	3.73E-21	-8.05E-07	-1.74E-23	-7.12E-01	-4.43E-07	-9.69E+00	1.00E+00

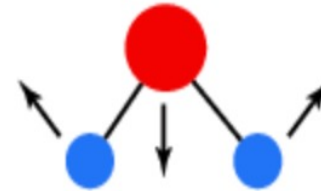
La molécule d'eau (H_2O)

Ortho- H_2O et Para- H_2O

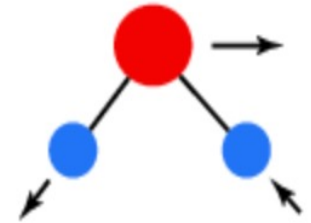
- Spin nucléaire total
- Traitement séparé
- 3 Modes de vibration
- Taux d'abondance : 1/3



symmetrical stretching



bending



asymmetrical stretching

Comparaison avec Gray et al. 2016

Gray : mmlog + Recouvrement

Table 5. The effect of changing slab thickness on maser depths achieved for selected strong maser transitions; R is the ratio of the maser depth in the thick (supergiant) model to the depth in the thin (AGB star) model.

ν (GHz)	$n_{\text{H}_2\text{O}}$ (cm^{-3})	T_K (K)	T_d (K)	τ_{SG}	τ_{AGB}	R
22	1.5(5)	814	50	15.45	2.624	5.888
321	6.0(4)	1500	50	13.35	2.676	4.989
336	3.0(5)	471	1025	12.82	1.869	6.859
380	3.0(6)	1500	50	33.85	6.424	5.269
447	6.0(3)	900	50	10.79	2.843	3.795
658	6.0(5)	1500	50	15.90	2.971	5.352
841	6.0(5)	471	1025	24.62	3.774	6.524
902	1.5(6)	1500	50	11.47	2.267	5.060
922	3.0(6)	1500	50	55.26	7.000	7.894
1296	3.0(4)	1500	50	26.59	5.785	4.596
1308	1.5(5)	471	1025	12.61	1.682	7.497
1322	1.5(4)	1500	50	35.67	8.047	4.433
1361	3.0(6)	471	1025	42.42	5.743	7.386
183	3.0(4)	1071	50	11.56	3.159	3.659
260	3.0(6)	557	1025	15.69	2.587	6.065
325	3.0(4)	1329	50	14.17	3.676	3.855
403	1.5(6)	300	1025	25.92	3.395	7.635
899	1.5(6)	1500	50	45.70	9.131	5.005
906	3.0(4)	1500	50	14.12	3.657	3.861
1441	3.0(4)	1500	50	42.61	10.06	4.236
1850	1.5(6)	1500	50	63.96	0.000	∞

Résultat avec MOLPOP

Valeurs des opacités τ calculées pour différentes transitions des o-H₂O

ν (GHz)	$n_{\text{H}_2\text{O}}$ (cm^{-3})	T (K)	T_D (K)	τ_{AGB}	τ_{SG}
22	1.5×10^5	814	50	-0.426	-0.504
321	6×10^4	1500	50	-1.88	-0.572
336	3×10^5	471	1025	0	0
380	3×10^6	1500	50	151	848
447	6×10^3	900	50	-5.01	-11.5
658	6×10^5	1500	50	0	0
841	6×10^5	471	1025	0	0
902	1.5×10^6	1500	50	0	0
922	3×10^6	1500	50	0	0
1296	3×10^4	1500	50	-2.65	11.7
1308	1.5×10^5	471	1025	5.51	29.4
1322	1.5×10^4	1500	50	-6.95	3.83
1361	3×10^6	471	1025	0	0

Valeurs des opacités τ calculées pour différentes transitions de p-H₂O

ν (GHz)	$n_{\text{H}_2\text{O}}$ (cm^{-3})	T (K)	T_D (K)	τ_{AGB}	τ_{SG}
183	3×10^4	1071	50	-0.00312	3.85
260	3×10^6	557	1025	0.885	4.92
325	3×10^4	1329	50	-0.331	2.54
403	1.5×10^6	300 (500)	1025	0.0442	0.309
899	1.5×10^6	1500	50	100	627
906	3×10^4	1500	50	-0.506	3.53
1441	3×10^4	1500	50	1.94	23.4
1850	1.5×10^6	1500	50	0.0264	0.165

Remarque : Le fichier de niveaux d'énergie utilisé est H2O_ortho_leiden.

Comparaison avec Gray et al. 2016

o-H₂O avec niveaux d'énergie max de 411, données selon Gray et al.

ν (GHz)	$n_{\text{H}_2\text{O}}$ (cm ⁻³)	T (K)	T_D (K)	τ_{AGB}	τ_{SG}
22	1.5×10^5	814	50	-0.428	0.914
321	6×10^4	1500	50	-1.29	-0.557
336	3×10^5	471	1025	0.0802	0.463
380	3×10^6	1500	50	79	432
447	6×10^3	900	50	-5.52	-11.5
658	6×10^5	1500	50	28.4	258
841	6×10^5	471	1025	3.65	19.7
902	1.5×10^6	1500	50	26.9	187
922	3×10^6	1500	50	62	379
1296	3×10^4	1500	50	-4.27	3.53
1308	1.5×10^5	471	1025	6.05	31.1
1322	1.5×10^4	1500	50	-11.5	-13.1
1361	3×10^6	471	1025	-0.196	-0.975

Remarque : Données utilisées : o-h2o-gray_H2.kij & o-h2o-gray.molecule.

p-H₂O avec niveaux d'énergie max de 413, données selon Gray et al.

ν (GHz)	$n_{\text{H}_2\text{O}}$ (cm ⁻³)	T (K)	T_D (K)	τ_{AGB}	τ_{SG}
183	3×10^4	1071	50	-0.00102	3.88
260	3×10^6	557	1025	0.909	5.04
325	3×10^4	1329	50	-0.351	2.53
403	1.5×10^6	300	1025	0.944	0.769
899	1.5×10^6	1500	50	105	648
906	3×10^4	1500	50	-0.608	3.44
1441	3×10^4	1500	50	1.92	23.5
1850	1.5×10^6	1500	50	0.029	0.169

Remarque : Données utilisées : p-h2o-gray_H2.kij & p-h2o-gray.molecule.

Application aux détections de Baudry et al. 2023

Table 2. Observable transitions of H₂¹⁶O covered by the ATOMIUM program.

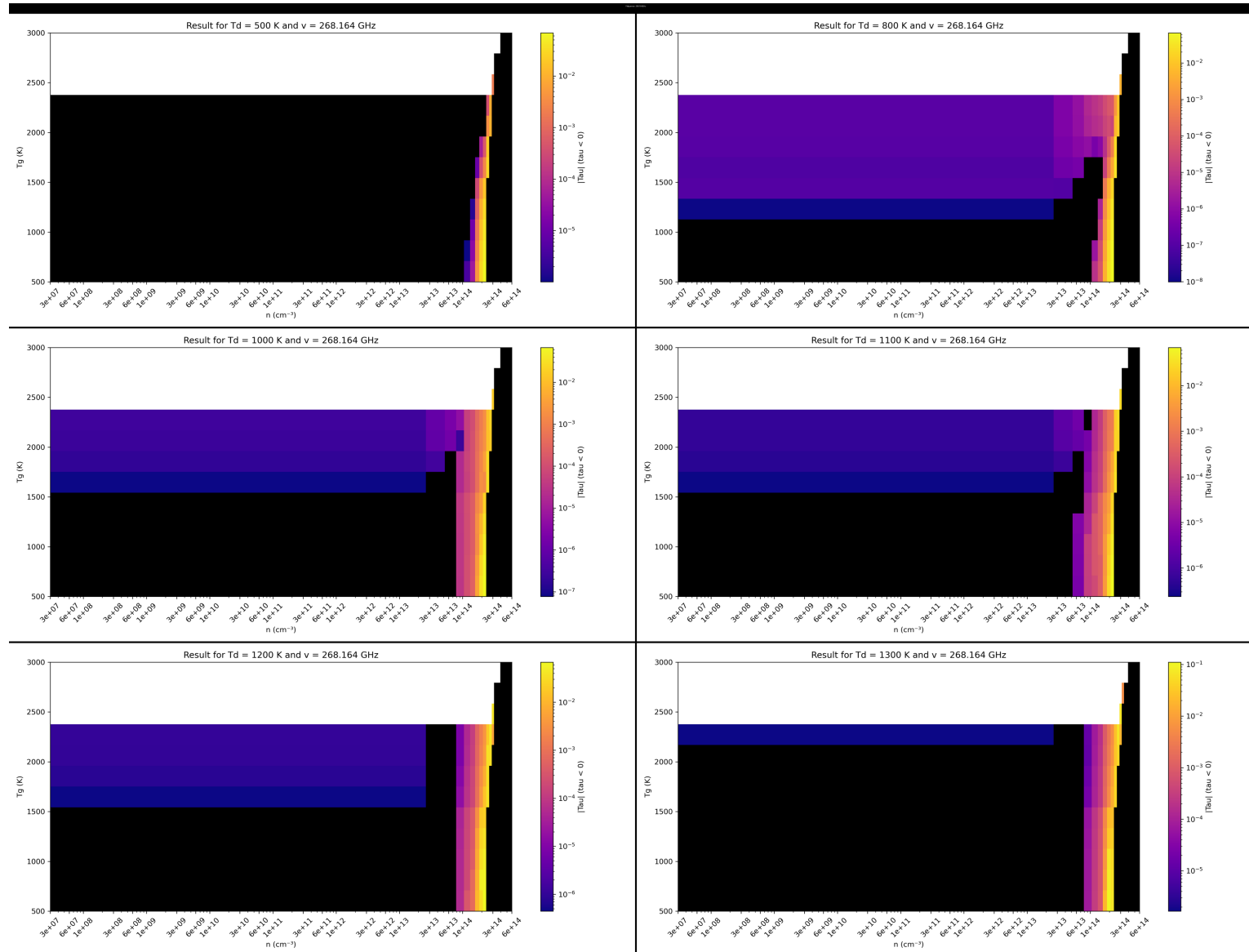
Line number	$\nu^{(a)}$ (MHz)	Unc. ^(a) (MHz)	QN _{vib} ^(b)	QN _{rot} ^(c)	S_p ^(d)	$E_{up}^{(e)}$ (cm ⁻¹) (K)	$A^{(f)}$ (×10 ⁻⁶ s ⁻¹)	$n_{det.}^{(g)}$	Reference ^(h)
1	222014.12	4.53	(0,3,0)–(0,3,0)	8 _{3,6} –7 _{4,3}	<i>o</i>	5790.1	15.6		W2020
	222017.31	1.50				8331		8	TW
2	227780.09	0.29	(1,0,0)–(0,2,0)	7 _{0,7} –8 _{3,6}	<i>o</i>	4232.2	0.003	0	JPL
						6089			
3	230191.53	0.53	(0,0,1)–(0,2,0)	8 _{3,5} –9 _{5,4}	<i>o</i>	4792.3	0.03	0	JPL
						6895			
4	236805.40	1.82	(0,0,1)–(0,0,1)	14 _{3,12} –13 _{4,9}	<i>p</i>	6263.9	2.11		JPL
	236797.0 ⁽ⁱ⁾	2.00				9012		1 ⁽ⁱ⁾	TW
5	244330.37	3.44	(1,1,0)–(0,1,1)	4 _{2,2} –3 _{2,1}	<i>p</i>	5557.9	4.84		W2020
	abso. ^(j)					7997		4 ^(j)	TW
6	252172.25	0.38	(1,0,0)–(0,2,0)	7 _{4,3} –8 _{5,4}	<i>o</i>	4572.4	0.55		JPL
	252170.56	2.00				6579		8	TW
7	254039.88	0.15	(0,0,1)–(0,0,1)	3 _{1,3} –2 _{2,0}	<i>o</i>	3895.6	9.55		JPL, P1995
	254039.75	2.00				5605		9	TW
8	254052.55	3.42	(0,2,0)–(0,2,0)	14 _{3,12} –13 _{4,9}	<i>o</i>	5790.4	6.76		JPL
	254055.18	2.00				8331		6	TW
9	254234.65	3.00	(0,1,1)–(1,1,0)	7 _{3,4} –6 _{5,1}	<i>p</i>	6179.8	2.06		W2020
						8891		2? ^(k)	
10	259952.18	0.20	(0,0,0)–(0,0,0)	13 _{6,8} –14 _{3,11}	<i>p</i>	2748.1	3.24		JPL, A1991
	259951.87	2.00				3954		10	TW
11	262555.55	1.42	(0,2,0)–(1,0,0)	10 _{7,3} –11 _{4,8}	<i>p</i>	5473.8	0.09	0	JPL
						7876			
12	262897.75	0.15	(0,1,0)–(0,1,0)	7 _{7,1} –8 _{6,2}	<i>p</i>	3109.9	3.97		JPL, P1991
	262897.87	1.50				4475		12	TW
13	266574.10	1.85	(0,0,0)–(0,0,0)	21 _{4,17} –20 _{7,14}	<i>o</i>	5748.1	4.32		JPL
	266567.52	2.00				8270		7	TW
14	268149.12	0.15	(0,2,0)–(0,2,0)	6 _{5,2} –7 _{4,3}	<i>o</i>	4197.3	15.3		JPL, P1991
	268148.51	1.50				6039		15	TW

Baudry et al. 2023

MOLPOP Energy levels and A-coefficients file			
Generated from the Leiden database file o-h2o-waterstars.dat			
Molecular species: ortho-H2O -- EMAA_DATASET_DOI: https://doi.org/10.26434/chemrxiv-2023-12345			
Molecular species			
>			
H2O_ortho			
N of levels molecular mass			
>			
1124 18.00			
N g Energy in cm ⁻¹ Level details			
>			
1	9	2.379435E+01	'0_0_0_1_0_1'
2	9	4.237174E+01	'0_0_0_1_1_0'
3	15	7.949638E+01	'0_0_0_2_1_2'
4	15	1.349016E+02	'0_0_0_2_2_1'
5	21	1.367617E+02	'0_0_0_3_0_3'
6	21	1.733658E+02	'0_0_0_3_1_2'
7	21	2.121564E+02	'0_0_0_3_2_1'
8	27	2.248384E+02	'0_0_0_4_1_4'
9	21	2.854186E+02	'0_0_0_3_3_0'
10	27	3.003623E+02	'0_0_0_4_2_3'
11	33	3.253479E+02	'0_0_0_5_0_5'
12	27	3.825169E+02	'0_0_0_4_3_2'
13	33	3.994575E+02	'0_0_0_5_1_4'
14	33	4.465107E+02	'0_0_0_5_2_3'
15	39	4.472523E+02	'0_0_0_6_1_6'
16	27	4.881077E+02	'0_0_0_4_4_1'
17	33	5.088120E+02	'0_0_0_5_3_2'
18	39	5.529114E+02	'0_0_0_6_2_5'
19	45	5.862435E+02	'0_0_0_7_0_7'
20	33	6.103411E+02	'0_0_0_5_4_1'
21	39	6.489787E+02	'0_0_0_6_3_4'
22	45	7.042140E+02	'0_0_0_7_1_6'
23	33	7.420762E+02	'0_0_0_5_5_0'
24	51	7.441627E+02	'0_0_0_8_1_8'
25	39	7.567247E+02	'0_0_0_6_4_3'
26	45	7.824098E+02	'0_0_0_7_2_5'
27	45	8.423565E+02	'0_0_0_7_3_4'
28	51	8.856001E+02	'0_0_0_8_2_7'
29	39	8.885986E+02	'0_0_0_6_5_2'
30	57	9.201680E+02	'0_0_0_9_0_9'

Fichier Projet waterstars

Application aux détections de Baudry et al. 2023



Analyse + Remarque

Conclusion et Bilan personnel du stage