HAL
open science

Etude de la chimie du soufre dans les régions de formation stellaire de faible masse

Valentine Wakelam

To cite this version:

Valentine Wakelam. Etude de la chimie du soufre dans les régions de formation stellaire de faible masse. Astrophysique [astro-ph]. Université Paul Sabatier - Toulouse III, 2004. Français. NNT : . tel-00007369

HAL Id: tel-00007369

https://theses.hal.science/tel-00007369v1

Submitted on 9 Nov 2004

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THÈSE

PRÉSENTÉE À

L'Université Toulouse III - Paul SABATIER

ÉCOLE DOCTORALE DES SCIENCES DE L'UNIVERS, DE L'ENVIRONNEMENT ET DE L'ESPACE

Par Valentine WAKELAM

POUR OBTENIR LE GRADE DE

DOCTEUR

SPÉCIALITÉ : ASTROPHYSIQUE

ÉTUDE DE LA CHIMIE DU SOUFRE DANS LES RÉGIONS DE FORMATION STELLAIRE DE FAIBLE MASSE

Soutenue le : 21 septembre 2004

Après avis de : David FLOWER ... Rapporteurs
Claudine KAHANE

Devant la Commission d'examen formée de :

Adam WALTERS	Professeur, CESR, Toulouse	Président
David FLOWER	Professeur, University of Durham, UK	Rapporteur
Claudine KAHANE	Professeur, LAOG, Grenoble	Rapporteur
Cecilia CECCARELLI	Docteur, LAOG, Grenoble	Directeur de thèse
Alain CASTETS	Docteur, L3AB, Bordeaux	Directeur de thèse
Emmanuel CAUX	Docteur, CESR, Toulouse	Examinateur

2004

«Puissiez-vous vivre en des temps passionnants. »
Ancien proverbe chinois

«The hardest thing in this world is to live in it. »
Buffy

Résumé

Les étoiles de type solaire naissent de l'effondrement gravitationnel d'un nuage moléculaire. Celui-ci s'accompagne de la formation d'un cœur chaud au sein d'une protoétoile, et de régions de choc provoquées par l'éjection de matière. Dans ces environnements chauds que sont le cœur et les régions choquées, le soufre, piégé à la surface des grains de poussières, s'évapore dans le gaz, sous une forme encore inconnue.
Au cours de cette thèse, j'ai étudié l'évolution chimique des différentes composantes d'une protoétoile, en m'intéressant en particulier aux molécules soufrées et à leur possible utilisation pour dater les régions chaudes. Dans un premier temps, j'ai analysé des observations millimétriques de deux régions de formation stellaire de faible masse afin de déduire et contraindre le comportement de ces molécules par rapport aux conditions physiques du gaz. A l'aide d'un modèle de transfert radiatif couplé à un modèle dynamique d'effondrement, j'ai réalisé une étude détaillée de l'émission de SO et SO_2 dans les enveloppes protostellaires dans le but d'identifier des transitions permettant de déterminer les profils d'abondance de ces deux molécules dans les protoétoiles. J'ai également développé un modèle chimique qui m'a permis d'étudier en détail l'évolution des composés soufrés et ainsi de déterminer les possibilités et les limites de l'utilisation du soufre comme horloge chimique. J'ai démontré que les rapports d'abondance des molécules soufrées dépendaient plus des conditions physiques du gaz et de la forme initiale du soufre évaporé que du temps. Cependant, une étude au cas par cas sur des sources dont la structure physique est connue permettrait de contraindre à la fois l'âge des sources et la forme initiale de soufre. Des comparaisons entre observations et modèle m'ont permis d'émettre l'hypothèse que le soufre est évaporé des grains sous la forme atomique ou sous une forme rapidement détruite pour donner S.

Abstract

Solar type stars are formed by the gravitational collapse of molecular clouds. This collapse goes with the formation a hot core region, inside the protostar, and shocked regions induced by protostellar outflows. In these hot regions, hot core and shocks, the sulphur depleted on the grain mantles evaporates in the gas phase in an unknown form and participate to a rich warm gas phase chemistry. The main goal of my thesis is the study of the possibility to use sulphur bearing species as chemical clocks of star formation. I first analysed millimeter observations of two low mass protostars and their environment with the aim to understand the behavior of S-molecules with respect to the gas density and temperature. I also made a theoretical study of SO and SO_2 emission in protostellar envelopes using a radiative transfer code associated with a dynamical collasing model. I selected the best transitions of these two molecules to compute the SO and SO_2 abundance profiles through the protostar envelopes. Finally, I constructed a chemical interstellar model depending on time in order to check if S-bearing species can be used to date star forming regions. In fact, the abundance ratios of the main S-bearing species depend more on the physical conditions of the gaz and on the form of sulphur evaporated from the grain than on the time. However, the situation is not totally hopeless. A careful comparison between observations and model predictions can give some useful hints on time estimates and on the mantle composition. As a result, my work suggests that sulphur is depleted on the grain mantles in the atomic form or in form quickly converted into S once evaporated.

Remerciements

Mes premiers remerciements vont à mes deux directeurs de thèse, Cecilia et Alain, qui m'ont fait confiance en me donnant ce sujet de thèse. J'ai beaucoup apprécié leurs conseils, leur écoute et leurs qualités scientifiques qui se complètent. Ils m'ont donné tous les moyens pour mener ma thèse à bien en me laissant beaucoup de liberté tant sur le plan du travail que sur celui des déplacements. Je me souviendrai toujours de la première fois où Cecilia m'a parlé de postdoc et où je me suis effondrée dans son bureau. Elle m'a montré sa vision de la vie comme un jeu et depuis je repense à ce moment chaque fois que les choix me semblent être des montagnes trop difficiles à escalader.

Je remercie également tous les membres de mon jury, Adam, David, Claudine et Emmanuel, pour avoir lu mon manuscrit de thèse et de s'être déplacé jusqu'à Bordeaux pour ma soutenance.

J'ai une pensée particulière pour Paola Caselli, Eric Herbst, Guillaume Pineau des Forêts et toute l'équipe de Wagos avec lesquels j'ai travaillé au cours de ces trois ans, qui se sont montrés si gentils à mon égard et m'ont beaucoup soutenu.

Merci à Stéphanie pour ces bons moments passés en observations sur une montagne perdue. Que d'émotions partagées. J'espère qu'on aura encore l'occasion de se revoir.

Je tiens à remercier Thierry Jacq, le directeur du L3AB et de mon équipe, pour m'avoir toujours donné une très grande liberté de mouvement et tous les moyens nécessaires pour assister à différents colloques.

Je suis très reconnaissante aux divers laboratoires qui m'ont acceuilli lors de mes nombreux déplacements : l'observatoire d'Arcetri, de Grenoble, le centre d'astrobiologie de Madrid et l'ENS de Lyon.

Merci à tout le personnel de l'observatoire pour leur gentillesse et leur attention.

Merci à Cecile et Annick que j'ai si souvent embêté avec mes missions et à Marie-Claire et Elisabeth qui savent se montrer si humaines.

Merci à Hervé pour m'avoir tenu compagnie tous les midis en salle Galou.

Merci aux différents thésards qui se sont succédés à l'observatoire, les anciens : Johan, Olivier, Thomas, Sébastien, Nicolas, Laetitia et les autres ainsi que les actuels et les nouveaux : Eric, Nicolas, Yannick, Marc et Pascal.

Durant mes premières années de thèse, j'ai beaucoup fréquenté la bibliothèque et je me souviendrai toujours des fous rires avec Simon. Simon dont le départ pour Poitier aura tourné une page de l'histoire de l'observatoire.

Merci à Julio pour ta gentillesse et ton écoute. Je te souhaite de trouver ton chemin dans la vie.

Merci à Frabrice, mon voisin de bureau pour avoir écouté mes plaintes et m'avoir fait partagé les supers histoires de l'observatoire.

Je remercie mes parents, Elisabeth et Jean, qui m'ont toujours soutenu et accompagné dans les bons et les mauvais moments. Lorsque j'étais petite et que l'on me demandait ce que je voulais faire quand je serai plus grande, je répondais astrophysicienne alors que je ne savais même pas ce que ça voulait dire mais le mot me plaisait. Je repense souvent au livre d'astronomie que Jean m'a offert en maîtrise pour ranimer ma flamme pour l'astrophysique qui faiblissait. C'est grâce à cela que j'ai continué mes études pour finalement passer mon doctorat d'astrophysique. Merci à ma maman pour m'avoir écouté si souvent fatiguée au téléphone à 7000 km et m'avoir donné la force de toujours aller de l'avant tout en restant sensible au présent.

J'ai également une pensée tendre pour mon père et sa femme, Yannick et Henry Wakelam, qui constituent ma famille de Nouvelle-Zealand si lointaine et si proche.

Je souhaite à Virginie ma meilleure amie tout le bonheur possible. Que ta vie s'éclaire enfin après tant de galères. J'espère garder toujours ton amitié et ton sourire dans ma mémoire.

Merci à Joss Whedon pour avoir imaginé un jour une fille forte et belle pour défendre le monde des forces du mal et égayer mes soirées parfois tristes. Merci à Buffy pour sa force.

Merci à l'observatoire pour m'avoir permis de rencontrer Franck, l'homme de ma vie, mon mari, mon meilleur ami et mon plus grand soutien. Merci à toi Franck pour tout ce que tu m'as apporté et tout ce que tu m'apporteras encore. Sans toi je n'aurais jamais trouvé la force de terminer cette thèse. Tu m'as tellement aidé tant sur le plan du travail que sur le plan personnel et tu me rends heureuse tous les jours.

Table des matières

Résumé **iii**

Abstract **v**

Remerciements **vii**

Introduction **1**

1 Observations millimétriques **9**

1.1 Observations dans la région L1689N 9

1.1.1 Présentation de la région 9

1.1.2 Observations 11

1.1.3 Résultats 12

1.1.4 Calcul des densités de colonne 19

1.1.5 Discussion 25

1.2 Observations dans la région IRAS2-NGC1333 31

1.2.1 Présentation de la région 31

1.2.2 Les observations 32

1.2.3 Résultats 33

1.2.4 Calcul des densités de colonne 37

1.2.5 Modelisation chimique 44

1.2.6 Discussion 47

2 Modélisation de l'émission de SO et SO_2 **51**

2.1 Description du modèle 52

2.1.1 Structure physique de l'enveloppe 52

2.1.2 Transfert radiatif dans une enveloppe protostellaire en effondrement . . . 54

2.1.3 La structure chimique de l'enveloppe 55

2.1.4 Paramètres du modèle 56
2.1.5 Coefficients de collision de SO_2 57
2.2 Résultats du modèle 59
2.2.1 Emission des molécules SO et SO_2 59
2.2.2 Influence des paramètres du modèle sur les flux de SO et SO_2 64
2.2.3 Utilisation des flux pour déterminer les paramètres 69
2.3 Application à l'émission d'IRAS16293/L1689N 72
2.3.1 Abondance de SO 74
2.3.2 Abondances de SO_2 75
2.3.3 Vérification de l'hypothèse du saut d'abondance de SO et SO_2 dans les régions internes 76

3 Modélisation de la chimie du soufre : NAHOON 79
3.1 La cinétique chimique 79
3.1.1 Réactions en phase gazeuse 79
3.1.2 Réactions avec les grains 82
3.1.3 Interaction avec le rayonnement cosmique 85
3.2 Description du modèle 86
3.2.1 Le réseau chimique 86
3.2.2 Validation du modèle 87
3.2.3 Caractéristique du code numérique 88
3.2.4 Les paramètres 89
3.3 Réactions *clés* 90
3.4 Résultats à basse température : le nuage moléculaire 91
3.4.1 Comparaison des résultats avec et sans la déplétion 91
3.4.2 Composition pré-évaporation 95
3.5 Résultats à haute température : les cœurs chauds 102
3.5.1 Paramètres des modèles 102
3.5.2 Influence de la composition gazeuse pré-évaporation 109
3.5.3 Influence de la composition des manteaux, de la température et de la densité de H_2 113
3.5.4 Influence du taux de rayonnement cosmique 122
3.5.5 Sensibilité des rapports d'abondance aux différents paramètres 128
3.5.6 Comparaisons avec des observations 130

Conclusions et perspectives 139

A Publications **145**

B Notions de radioastronomie **177**

B.1 Les observations en radioastronomie 177

B.1.1 Température d'antenne et température de brillance du lobe principal . . . 179

B.1.2 La réduction des données 180

B.1.3 Résolution spatiale et dilution du signal 180

B.1.4 Paramètres de raie 182

B.2 Notions de transfert radiatif 183

B.2.1 Le problème du transfert radiatif 183

B.2.2 Approximation de l'équilibre thermodynamique local (ETL) 184

B.2.3 Relation entre la densité de colonne et l'intensité intégrée 185

B.2.4 Le modèle LVG 187

C Conditions d'excitation de SO et SO_2 dans les chocs d'IRAS2/NGC1333 **191**

D Flux théoriques de SO et SO_2 **199**

E Liste des espèces de NAHOON **207**

F Liste des réactions de NAHOON **209**

G Figures des réactions chimiques importantes **233**

Introduction

La formation stellaire de faible masse

Il est généralement admis que les étoiles se forment par la fragmentation d'un nuage moléculaire ($T \sim 10$ K, $n(H_2) \sim 10^4$ cm^{-3}) en différents cœurs de condensation que l'on appelle cœurs pré-stellaires ($T \leq 10$ K, $n(H_2) \geq 10^6$ cm^{-3}) puis par l'effondrement gravitationnel de ces cœurs pré-stellaires. L'étape intermédiaire de l'effondrement entre le cœur pré-stellaire et l'étoile est la protoétoile. Les plus jeunes protoétoiles sont constituées d'un épais nuage de poussières qui masque le centre de la protoétoile aux longueurs d'onde inférieures au millimètre. Lors de l'accrétion, les particules de gaz et de poussière du nuage tombent en chute libre (free-fall) sur l'objet central. Le moment angulaire de cette matière en effondrement est évacué par l'éjection de matière à très grande vitesse sous la forme de flots bipolaires. Au contact du milieu interstellaire froid et au repos, cette matière crée une onde de choc qui se propage en augmentant la température et la densité du gaz. Au fur et à mesure que la protoétoile accrète de la matière, le nuage de poussière devient de moins en moins dense, révélant un disque de poussière dit "protoplanétaire".

La figure 1 représente une classification chronologique des différents stades de formation d'une étoile de faible masse ($\leq 2\,M_\odot$) proposée par Adams et Shu (1985), et remise à jour par Andre et al. (1993). Les objets sont classés de 0 à III en fonction de leur distribution spectrale d'énergie :

- Classe 0 [0 - 10^4 ans] : Lorsque l'effondrement débute, le cœur pré-stellaire forme une protoétoile de classe 0. L'émission caractéristique de cet objet est celle d'un corps noir de poussières à une température de $T \sim 10 - 30$ K. L'accrétion est forte et les flots bipolaires, que l'on peut observer grâce à leur interaction avec le milieu ambiant et non directement sur les spectres des protoétoiles, sont très puissants et très collimatés.

- Classe I [$\sim 10^5$ ans] : A ce stade, le nuage de poussières est en partie dispersé, l'accrétion est moins importante et les flots sont beaucoup moins collimatés. Le spectre de ces objets

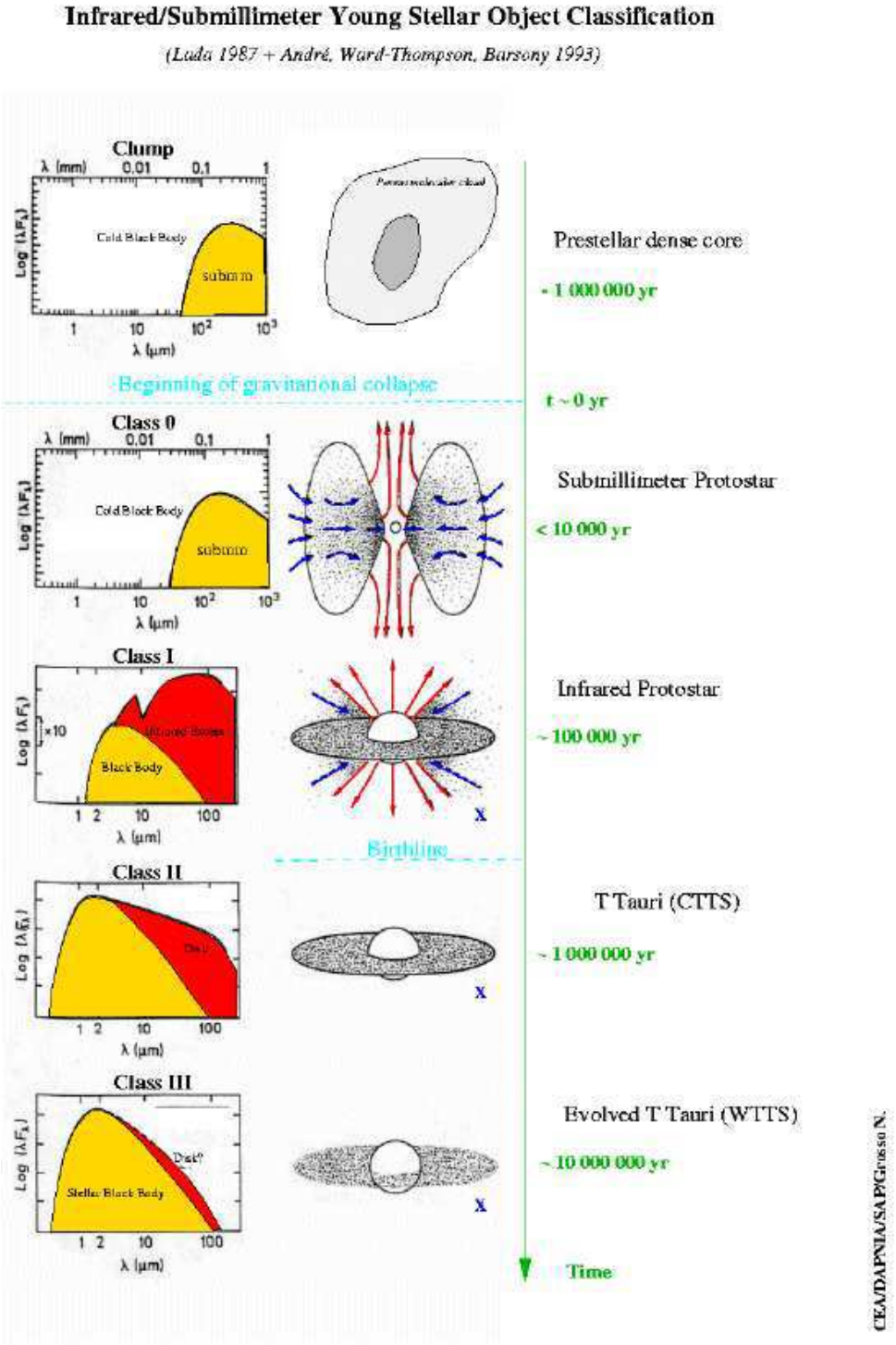

FIG. 1: *Classification des différents stades d'évolution des protoétoiles de faible masse en fonction de leur distribution spectrale d'émission. La classification comprend 5 stades du cœur préstéllaire à la classe III. L'échelle de temps caractéristique est précisée sur la droite. L'échelle des flux sur les spectres ne change pas.*

contient toujours une composante de corps noir correspondant à la protoétoile mais décalée vers les plus courtes longueur d'onde, c'est-à-dire contenant des poussières plus chaudes. A l'émission de corps noir s'ajoute un excès infrarouge dû à la présence du disque, avec la signature (en absorption) marquée des silicates à 10 μm.

- Classe II [$\sim 10^6$ ans] : Le passage de la classe I à la classe II, aussi appelée TTauri, est caractérisé par la fin de l'accrétion lorsque les réactions de fusion de l'hydrogène en hélium débutent au cœur de la nouvelle étoile. Ces objets possèdent une émission de corps noir à la température T, celle de l'étoile, avec de l'émission UV et visible. L'excès IR du disque est beaucoup moins important et surtout la signature des silicates a disparu du fait de la dispersion de l'enveloppe de poussière.

- Classe III [$\sim 10^7$ ans] : La dernière classe III, ou TTauri évoluée, voit disparaître le disque de poussière et l'excès IR associé et possède le spectre de corps noir de l'étoile centrale. C'est le dernier stade avant l'entrée de l'étoile dans la séquence principale.

Dans ce travail de thèse, je me suis uniquement intéressée aux protoétoiles de classe 0.

Contrairement au cas des étoiles de faible masse (type solaire), les étapes de formation des étoiles massives ne sont pas très bien comprises. Cependant, il est généralement admis que très rapidement après une phase de cœur pré-stellaire, les protoétoiles massives sont composées d'un cœur chaud entouré d'une région Ultra-Compacte HII où la matière est ionisée. Les cœurs chauds sont des régions de temperature élevée (T$\geq$ 100 K), denses (n$\geq 10^6$ cm^{-3}) et petites ($\leq$ 300 AU) qui possèdent une chimie particulière dominée par l'évaporation des manteaux glacés. On y trouve de fortes abondances d'eau H_2O, de formaldéhyde H_2CO, de méthanol CH_3OH et de toute une gamme de molécules plus complexes comme CH_3OCH_3, CH_3COOH et CH_3CN.

Jusqu'à récemment, on pensait que les protoétoiles de faible masse (type solaire) n'étaient pas suffisamment lumineuses, donc chaudes, pour abriter les régions de type cœur chaud. Toutefois, par une modélisation détaillée des raies de H_2O, O et H_2CO, Ceccarelli et al. (2000a,b) ont montré que l'enveloppe de la protoétoile de faible masse IRAS16293-2422 pouvait abriter une région de type "cœur chaud" de diamètre $\sim$ 300 AU. Deux ans plus tard, Schöier et al. (2002) ont confirmé cette structure en faisant toutefois la distinction entre le cœur chaud de protoétoile massive associé à une chimie complexe et la région chaude associée à la protoétoile de faible masse, pour laquelle les temps d'évolution chimique sont plus courts et donc où seules les molécules complexes de seconde génération rapidement formées pourraient être observées. Mais

une chimie complexe se déroule bel et bien dans le cœur chaud de faible masse d'IRAS16293-2422 : un "survey" spectral de cette source a en effet permis la détection de nombreuses molécules complexes (Cazaux et al., 2003). De plus, la protoétoile IRAS16293-2422 n'est pas une exception. Maret et al. (2004) ont modélisé l'enveloppe d'un échantillon de protoétoiles de même type (IRAS4A, IRAS4B, IRAS2, L1448-MN, L1448-N, L1157-MM, L1527 et VLA1623). Ces protoétoiles possèdent également un cœur chaud dont les propriétés physiques et chimiques ont été précisées par Maret et al. (2004) et Bottinelli (2004). La conséquence de cette structure est l'évaporation des manteaux glacés des grains interstellaires dans la région centrale de la protoétoile, le cœur chaud, et une forte augmentation de l'abondance des molécules qui se sont collées à la surface des grains dans les phases précédant l'effondrement. C'est dans ce contexte que s'insère mon travail.

Les poussières interstellaires

La poussière est une composante importante du milieu interstellaire. Son rôle de catalyseur est notamment central dans la chimie interstellaire. Il est maintenant admis que la plus abondante molécule de l'univers, H_2, est formée à la surface des grains à la suite de processus de chimisorption et de physisorption (e.g. Cazaux et Tielens, 2002). Les poussières influencent également la composition chimique en phase gazeuse des nuages moléculaires en piégeant des molécules à leur surface (phénomène dit de "déplétion" [1]).

Les grains sont formés dans l'environnement des étoiles évoluées, ainsi que, peut-être, dans les novae et les super-novae. Dans ce milieu à très haute température, se condensent des grains principalement constitués de silicates, de graphite et de carbone amorphe. Les étoiles évoluées produisent des grains de poussière qui sont éjectés par le vent stellaire dans le milieu diffus où ils subissent l'effet de rayonnements énergétiques (UV ou rayonnement cosmique) qui modifient probablement leur composition chimique de surface. Lorsque le milieu diffus se condense pour former des nuages moléculaires, les grains de poussière se retrouvent dans un milieu où la densité augmente (10^4 cm^{-3}) et la température est faible (10 K). Dans ces conditions, des molécules simples (*e.g.* H_2O, NH_3 et CO) se collent à leur surface et constituent un manteau glacé moléculaire. Une fois piégées, ces molécules réagissent entre elles et avec l'hydrogène du gaz pour former des molécules comme CH_4, H_2CO et CH_3OH, grâce au rôle de catalyseur joué par la surface.

1. Le mot "déplétion" a récemment été ajouté aux dictionnaires et signifie un "manque" (cf Larousse 2004). On utilise ce mot en chimie interstellaire pour exprimer un manque par rapport aux abondances cosmiques, ce manque étant lié à l'incorporation de molecules dans ou sur les grains. Ainsi, dans le contexte qui nous intéresse ici, la déplétion correspond au piégeage d'espèces chimiques à la surface des grains de poussières. En revanche, le verbe "dépléter" n'existe pas en français mais il est parfois utilisé pour traduire le verbe anglais "to deplete". Dans le reste de ce manuscrit, je ferai donc un anglicisme brutal en utilisant le verbe dépléter.

Lorsque le nuage moléculaire s'effondre en une protoétoile, les manteaux des grains s'évaporent sous l'effet de l'augmentation de la température qui en résulte, injectant dans la phase gazeuse les molécules initialement piégées. Chaque molécule possède une température d'évaporation propre qui dépend de l'énergie de liaison de la molécule au grain (voir section 3.1.2). Par exemple, la température d'évaporation de l'eau est de 100 K. Pour simplifier les traitements numériques, on suppose généralement que toutes les molécules s'évaporent à cette température car elles seraient toutes piégées dans de la glace d'eau sauf pour CO dont la température d'évaporation est autour de 20 K. Les grains, situés dans les régions extérieures au cœur chaud de la protoétoile, sont dispersés par les vents stellaires après la naissance de l'étoile. Ils se trouvent alors de nouveau exposés à un fort champ de rayonnement et les molécules présentes à leur surface vont subir des modifications qui peuvent conduire à la formation des composés organiques réfractaires qu'il est possible d'observer dans le milieu interstellaire diffus. Les caractéristiques des grains comme leur composition et leur abondance peuvent être étudiées par la structure de la courbe d'extinction ou des raies d'absorption dans l'infra-rouge des spectres obtenus en direction du centre galatique ou de certaines protoétoiles. Une explication complète de ces techniques est donnée par Draine (2003). Les grains sont de tailles et de densités qui peuvent varier suivant les régions. Il est d'usage d'utiliser les caractéristiques moyennes suivantes : un rayon de 0.1 μm, une densité de 3 g cm^{-3} et un rapport massique de la poussière sur le gaz de 10^{-2} (Hasegawa et al., 1992).

Dans le milieu interstellaire diffus, l'abondance du soufre atomique en phase gazeuse est de l'ordre de son abondance cosmique ($\sim 3.5\times10^{-5}$, Sofia et al., 1994) suggèrant que le soufre ne soit pas majoritairement déplété dans les phases réfractaires des grains de poussière. En revanche, dans les nuages moléculaires, la somme des abondances des molécules à base de soufre dans le gaz (SO + SO_2 + CS + H_2S + OCS) est à peine 0.001% de l'abondance cosmique du soufre atomique (Tieftrunk et al., 1994). Si le soufre se trouvait simplement sous la forme atomique dans le gaz froid, les modèles chimiques prédisent des abondances des molécules précédemment citées beaucoup plus grandes que celles effectivement mesurées. Par conséquent, on suppose que le soufre est stocké dans les manteaux glacés des grains, mais on ignore sous quelle forme (voir aussi Ruffle et al., 1999).

Introduction sur les horloges chimiques

Dans les régions chaudes de formation stellaire, comme les cœurs chauds et les chocs, les molécules qui étaient piégées sur les grains de poussière dans le nuage avant l'effondrement, s'évaporent en phase gazeuse sous l'effet de la température. Une fois en phase gazeuse, ces composés réagissent entre eux et leur abondance évolue au cours du temps. En comparant les

abondances de certains composés avec des modèles d'évolution chimique, il est en théorie possible de donner un âge à la région chaude observée. Cet âge correspond au temps écoulé entre l'évaporation des mateaux glacés (donc de la formation du cœur chaud ou du choc) et le moment de l'observation. L'intérêt de cette technique est de pouvoir comparer les différents stades d'évolution des objets observés et de reconstituer une échelle chronologique des modifications physiques et chimiques que subissent la protoétoile avant de former l'étoile.

La chimie du soufre[1] se prête bien à cette méthode pour différentes raisons. Premièrement, le soufre est un des éléments les plus efficacement piègés sur les grains et la formation des principales molécules soufrées fait intervenir des réactions avec barrière d'activation, donc leur abondance est très sensible aux modifications de température et de densité du milieu. De plus, la chimie du soufre évolue avec des temps caractéristiques comparables aux échelles de temps de la formation stellaire de faible masse.

L'un des principaux objectifs de ma thèse est d'étudier les composés soufrés en tant que traceurs d'évolution, c'est-à-dire :
- déterminer si la chimie du soufre peut être utilisée comme horloge chimique,
- si oui, mettre au point une procédure permettant d'utiliser des observations d'espèces soufrées pour estimer l'âge des régions chaudes.

Objectifs scientifiques de la thèse

Le but de cette thèse est d'étudier les modifications chimiques, principalement des molécules à base de soufre, associées à la formation d'une étoile de faible masse dans les trois différents

1. Le soufre est un élément important pour la vie : il constitue même une des bases du métabolisme de certaines bactéries thermophiles. Sur Terre, il est principalement associé au volcanisme où on le trouve sous forme de H_2S (dont l'odeur est assez désagréable) et de SO_2 ce qui lui vaut d'être associé à l'enfer et au diable. Dans la classification périodique des éléments, le soufre a le numéro atomique 16, appartient à la famille VI et sa période est 3 comme l'oxygène. Soufre et oxygène partagent de nombreuses similarités chimiques ayant tous deux 6 électrons de valence. Sa masse atomique est 32.06 uma et c'est le 10ème élément le plus abondant dans le système solaire, après le fer.
Dans les articles scientifiques en anglais, vous pouvez trouver deux façons d'écrire l'élément soufre : *sulphur* et *sulfur*. En latin, le soufre était considéré comme l'incarnation du feu et lié à la lumière. Le nom grec veut également dire "divinité" et fait référence à Zeus qui est parfois représenté comme tenant des éclairs. Dans la mythologie chrétienne, il est associé aux feux de l'enfer. En latin, le soufre s'écrivait *sulpurium*. La lettre "p" du latin était utilisée pour représenter une lettre grecque qui se prononçait "puff" mais qui n'était pas encore le son de la lettre "f". Plus tard, lorsque le son "f" a été utilisé, le "p" était parfois changé en "ph" pour les mots latins d'origine grec. Bien que le mot "soufre" n'ait pas de racine grecque (il dérive du mot "sulvere" en sanscrit), il a été traduit sous la forme de *sulphurium* en latin classique. L'orthographe a été altérée durant le moyen âge jusqu'à s'écrire *sulfur*, qui est l'orthographe qui apparait généralement dans les dictionnaires latins. Le mot anglais provient directement du latin classique et s'écrit traditionnellement *sulphur*. La société de chimie américaine, au moment où la simplification de l'orthographe était à la mode, a décrété que le mot soufre s'écrirait *sulfur* officiellement aux Etats-Unis. Cette forme est maintenant largement utilisée aux Etats-Unis, même si la forme *sulphur* est toujours occasionnellement vue. Dans le reste du monde, on utilise toujours *sulphur*.

types de milieux : le nuage moléculaire, les chocs et les cœurs chauds. Cette étude repose sur trois approches complémentaires: l'observation d'objets jeunes dans le domaine millimétrique, la modélisation théorique de l'émission des raies de molécules soufrées dans les enveloppes protostellaires et la modélisation de l'évolution chimique de ces objets.
Les observations sont utilisées pour déterminer les abondances des principales espèces soufrées ainsi que les conditions physiques. Pour estimer les abondances moléculaires dans les cœurs chauds, j'ai utilisé un modèle complexe de transfert radiatif couplé à un modèle dynamique d'effondrement permettant de séparer l'émission moléculaire provenant du cœur chaud de celle de l'enveloppe externe. Dans les chocs, j'ai utilisé un modèle LVG qui permet de traiter le transfert radiatif dans un milieu où règne un grand gradient de vitesse.
Les abondances déterminées dans les chocs et dans les cœurs chauds sont alors comparées aux évolutions simulées par un modèle chimique. Cette comparaison a pour but de contraindre les paramètres du modèle, essentiellement la durée d'évolution et la forme et l'abondance initiale de soufre évaporé de la surface des grains dans le gaz chaud. L'ambition finale de cette thèse est de déterminer si les espèces soufrées de seconde génération peuvent être utilisées comme horloge chimique des cœurs chauds de faible masse et de donner des contraintes sur le réservoir de soufre sur les grains.

Ma thèse comporte trois différents types de travaux qui constituent les trois chapitres de ce manuscrit. J'ai, dans un premier temps, traité et analysé des observations, faites dans le domaine millimétrique, de deux régions de formation stellaire de faible masse. Le premier chapitre présente donc les principaux résultats obtenus à partir de ces observations. Le second travail important que j'ai mené est l'étude de l'émission théorique des deux principales molécules soufrées SO et SO_2 à travers une enveloppe protostellaire en effondrement. Ceci a nécessité l'adaptation d'un modèle de transfert radiatif associé à un modèle dynamique d'effondrement au cas spécifique des molécules SO et SO_2. Ce modèle me permet de modéliser les flux émis par ces deux molécules à travers une enveloppe en effondrement. En comparant les prédictions du modèle avec des observations, le modèle permet de calculer séparément les abondances des molécules soufrées dans le cœur chaud et l'enveloppe externe des protoétoiles. A partir de cette étude, j'ai sélectionné les transitions les plus appropriées de chacune de ces deux molécules pour faire une étude systématique de SO et SO_2 dans les protoétoiles de faible masse. La présente étude se limite aux cas de SO et SO_2 qui sont les deux principales molécules soufrées de seconde génération, mais elle sera étendue à d'autres molécules soufrées comme OCS dans l'avenir. Les abondances des molécules soufrées obtenues sont comparées aux résultats du modèle chimique dans le dernier chapitre de ma thèse. Le modèle chimique que j'ai développé permet d'étudier en détail la chimie du milieu interstellaire pour des températures allant de 10 à 300 K. J'ai mené

une étude systématique de l'influence des divers paramètres du modèle comme la composition gazeuse pré-évaporation, la température, la densité, le taux d'ionisation de H_2 par le rayonnement cosmique et surtout la composition des molécules soufrées à la surface des grains. La forme sous laquelle le soufre s'évapore dans les cœurs chauds a une très grande influence sur les échelles de temps de la chimie des coeurs chauds et l'étude de l'influence de ce dernier paramètre est un apport majeur de mon travail. Je décris également dans ce chapitre une méthode originale mise au point en collaboration avec Franck Selsis pour déterminer certaines réactions clés du réseau chimique. Ce chapitre comprend enfin une comparaison avec les observations présentées dans le premier chapitre afin de contraindre la forme initiale de soufre évaporée des grains de poussière et l'âge de la source.

Chapitre 1

Observations millimétriques de molécules soufrées dans des régions de formation stellaire de faible masse

Dans ce chapitre, je décris l'analyse de l'émission millimétrique associée à des molécules soufrées (SO, SO_2 et H_2S) dans deux régions de formation stellaire de faible masse (IRAS16293-2422/L1689N et IRAS2/NGC1333). De ces données, j'estime la densité de colonne de ces molécules dans les différents types de milieux présents dans ces régions : le nuage moléculaire constitué de gaz froid au repos, la protoétoile caractérisée par le phénomène d'accrétion et la formation d'un cœur chaud et les flots bipolaires où la matière se propage à grande vitesse et choque le milieu ambiant.
Dans la première région IRAS16293-2422/L1689N, j'ai surtout comparé les densités de colonne des molécules soufrées obtenues dans les chocs avec celles d'autres molécules comme H_2CO et SiO généralement associées aux chocs. Dans IRAS2/NGC1333, j'ai étudié la variation des densités de colonne de SO et SO_2 le long du flot bipolaire provenant de la protoétoile afin d'identifier des variations chimiques dues à l'évolution temporelle du flot. Les notions de radioastronomie utilisées pour ce travail sont expliquées en annexe B.

1.1 Observations dans la région L1689N

1.1.1 Présentation de la région

Les régions de formation stellaire abritent trois différents types de milieux se distinguant par leur température, leur densité et leurs abondances chimiques (e.g. van Dishoeck et Blake,

1998, et l'introduction). Ainsi on trouve le nuage moléculaire constitué par du gaz et de la poussière froide et peu dense. A l'intérieur du nuage moléculaire se trouvent des protoétoiles qui sont des régions plus denses abritant un cœur chaud. Ces protoétoiles sont à l'origine de flots bipolaires qui créent des régions de chocs, à l'interface entre le flot et le nuage moléculaire, où le gaz est fortement compressé et chauffé. Je me suis intéressée aux variations des abondances des molécules soufrées dans ces différentes types de régions. Dans les régions chaudes comme les cœurs chauds et les chocs, les abondances des molécules H_2S, SO et SO_2 sont susceptibles d'augmenter de façon significative. C'est la raison pour laquelle elles sont souvent considérées comme de bons traceurs de chocs (Pineau Des Forêts et al., 1993; Chernin et al., 1994; Bachiller et Perez Gutierrez, 1997) et de bonnes horloges chimiques (voir l'intruction et aussi Charnley, 1997; Hatchell et al., 1998; Bachiller et al., 2001).

La région de formation stellaire dont j'ai fait l'étude est associée au nuage moléculaire L1689N. Ce nuage est situé dans le nuage de ρ Ophiuchi à 120 pc du Soleil (Knude et Hog, 1998). Grâce à des observations de l'oxygène atomique, Caux et al. (1999) ont montré que la température de ce nuage est (26 $\pm$ 0.5) K et que la densité de H_2 est supérieure à 3 $\times 10^4$ cm^{-3}. L1689N abrite deux jeunes sources protostellaires. La première est une protoétoile de classe 0 (15 $L_\odot$) toujours en phase d'accrétion que l'on appelle IRAS16293-2422 (IRAS16293 dans la suite de la thèse) (Walker et al., 1986; Zhou, 1995; Narayanan et al., 1998; Ceccarelli et al., 2000a). Comme beaucoup d'autres jeunes protoétoiles, IRAS16293 est un système binaire avec une masse totale d'environ 1.1 $M_\odot$ (Looney et al., 2000). Les deux sources de la binaire sont séparées de 5$''$, soit une distance projetée sur le plan du ciel de 600 AU. La structure de l'enveloppe entourant IRAS16293 a été reconstruite grâce à des observations multifréquence de H_2O, SiO, O et H_2CO (Ceccarelli et al., 2000a,b). Dans la région externe de cette objet (r $\geq$ 150 AU), les abondances chimiques sont similaires aux abondances typiques rencontrées dans les nuages moléculaires. Dans les régions internes (r $\leq$ 150 AU, soit environ un diamètre angulaire de 2$''$) en revanche, les abondances de H_2O, SiO et H_2CO augmentent et sont similaires aux abondances typiques des cœurs chauds autour de protoétoiles massives. Cette structure a été récemment confirmée par Schöier et al. (2002), qui a modélisé l'émission continue des poussières et des raies de plusieurs autres molécules. La deuxième protoétoile, 16293E, est une très jeune source de faible masse et de classe 0 située au Sud-Est d'IRAS16293. 16293E a été détectée pour la première fois par Mizuno et al. (1990) par une forte émission NH_3. Sa nature protostellaire est débattue dans Castets et al. (2001, CCLCL01 dans la suite de la thèse).

La région L1689N est complexe et abrite plusieurs flots (Fukui et al., 1986; Wootten et Loren, 1987; Mizuno et al., 1990; Hirano et al., 2001). Le travail récent de CCLCL01 a permit de conclure que les deux protoétoiles IRAS16293 et 16293E sont à l'origine de trois flots bipolaires.

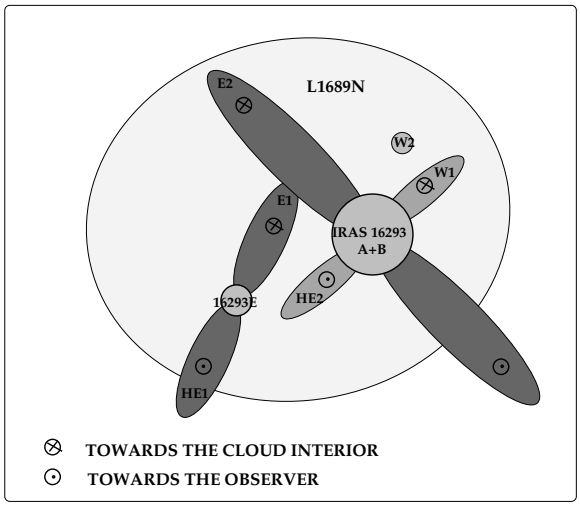

Fig. 2: *Schéma de la région L1689N. Les flots en gris foncé ont été clairement identifiés par CCLCL01, tandis que le deuxième flot bipolaire provenant de IRAS16293 et la source W2 indiqués en gris clair sont beaucoup plus incertains.*

Deux d'entre eux proviennent des deux composantes d'IRAS16293, tandis que le troisième flot proviendrait de 16293E (voir la figure 2). La nature de 16293E ainsi que la présence d'un flot provenant de cette protoétoile est toujours débattue (Lis et al., 2002). Cependant, j'ai utilisé le schéma général de CCLCL01 parce que les principales conclusions de mon travail ne sont pas affectées par le stade d'évolution actuel (pré-stellaire ou protostellaire) de 16293E. Ce qui est important pour la suite de la discussion, c'est la présence dans L1689N d'au moins une protoétoile, IRAS16293, et de six régions de chocs qui présentent une forte émission de SiO et/ou H_2CO. Ces régions de chocs sont notées : E1, E2, HE1[1], HE2, W1 et W2 (voir figure 2). La région E2, qui est la plus intense en SiO, ne montre pas d'émission de H_2CO tandis que la région du maximum de H_2CO, E1, possède également une forte émission de SiO. HE2 et HE1 forment un deuxième groupe où seule une émission de H_2CO est observée sans émission de SiO.

Le travail d'analyse que j'ai fait sur ces observations a pour but d'étudier comment l'abondance des molécules soufrées varie d'une région de choc à l'autre et par rapport aux abondances dans la protoétoile IRAS16293 et dans le nuage. Ce travail a fait l'objet d'un article publié dans Astronomy and Astrophysics (Wakelam et al., 2004b) et inclu en annexe (A).

1.1.2 Observations

De grandes cartes du nuage L1689N ont été obtenues avec les télescopes du SEST et de l'IRAM. Les molécules observées sont les suivantes : SO (les transitions $3_2 - 2_1$ et $6_5 - 5_4$), SO_2

1. Je n'ai pas fait d'étude de cette région de choc parce qu'elle présente une émission trop faible.

(la transition $5_{1,5} - 4_{0,4}$) et H_2S (les transitions $2_{2,0} - 2_{1,1}$ et $1_{1,0} - 1_{0,1}$). Nous avons également observé la raie de ^{34}SO $3_2 - 2_1$ à certaines positions du nuage dans le but d'estimer l'opacité de la raie isotopique principale. Les coordonnées de toutes les cartes $(\Delta\alpha, \Delta\delta)$ sont des offsets par rapport à la position de la composante 16293B du système binaire IRAS16293 qui a pour coordonnées $\alpha(2000.0) = 16^h32^m22^s.6$, $\delta(2000.0)$ = -$24^0 28' 33''$ (la composante 16293A est située à $4''$ sud et $2''$ Est de la composante B - Looney et al., 2000).

En juin 1997, des cartes de l'émission de SO_2 couvrant $120'' \times 100''$ ont été faites avec le télescope IRAM-30m. Le télescope SEST a été utilisé en juillet 1998 pour cartographier les raies moléculaires de SO sur une surface de $300'' \times 200''$ et la transition de H_2S $2_{2,0} - 2_{1,1}$ sur une surface de $120'' \times 100''$. En novembre 2001, mai et septembre 2002, nous avons fait des observations complémentaires à l'IRAM des espèces et transitions suivantes : SO_2 $(5_{1,5} - 4_{0,4})$), ^{34}SO $(3_2 - 2_1)$ et H_2S $1_{1,0} - 1_{0,1}$ dans certaines régions de choc (E1, E2, W1, W2 et HE2) de L1689N (voir figure 2), dans les deux protoétoiles IRAS16293 et 16293E, et dans le nuage moléculaire (à la position $\Delta\alpha = 120''$, $\Delta\delta = 0''$). Dans la suite, je ferai référence à ces huit positions en terme de positions "clés". Le tableau 1 résume les différentes transitions moléculaires observées ainsi que leur fréquence et leur énergie supérieure.

Toutes les données ont été obtenues en mode "position switch" avec une position OFF située à $\Delta\alpha$ = -$180''$, $\Delta\delta = 0''$ du centre d'IRAS16293. En utilisant le mode "frequency switch", nous avons vérifié que cette position était libre de toute émission de $C^{18}O$ et ^{13}CO. Lorsque cela était possible, j'ai dégradé la résolution spatiale des spectres à la plus grande résolution observée (voir la section B.1.3), ce qui n'a pu être fait que dans le nuage. Les paramètres d'observations pour les deux télescopes sont donnés dans le tableau 1.

1.1.3 Résultats

La figure 3 montre les cartes d'intensité intégrée sur toutes les vitesses des transitions SO $3_2 - 2_1$, SO $6_5 - 5_4$ et SO_2 $5_{1,5} - 4_{0,4}$. Les spectres (non dégradés) des six transitions du tableau 1 dans les positions clés sont reportés sur la figure 4, et les paramètres des raies sont donnés dans le tableau 2. Les observations de SiO $2 - 1$, publiées par CCLCL01, ont été reportées sur la figure 4 et dans le tableau 2 pour comparaison.

Les températures de main-beam T_{MB}, et les largeurs de raie Δv (FWHM) du tableau 2 ont été estimées par un profil gaussien de la raie entière, même dans les cas où les profils étaient en forme de double pic. En revanche, l'intensité intégrée des raies est l'aire intégrée sur l'intervalle de vitesse au niveau d'intensité 0. La vitesse v_{LSR} est la vitesse au niveau du maximum d'intensité ou la vitesse au niveau de l'absorption pour les profils en double-pic. Elle est à peu près la même pour chaque transition et chaque position observée sauf pour E2(HVC), dont l'émission

Tab. 1: *Molécules observées ainsi que les paramètres d'observations. Les densités critiques (n_{cr}) sont calculées pour des températures entre 50 et 100 K en utilisant les coefficients collisionnels cités à la section B.2.4. T_{sys} est la température système d'observation, B_{eff} est l'efficacité du lobe du télescope et $\Delta\nu$ la résolution spectrale. L'aire des régions cartographiées ($\Delta\alpha \times \Delta\delta$) pour chaque transition et la fréquence d'échantillonnage sont reportées dans les deux dernières lignes du tableau. Le symbole "-" implique que seules les observations dans les positions clés ont été obtenues.*

Transitions	SO $3_2 - 2_1$	SO $6_5 - 5_4$	^{34}SO $3_2 - 2_1$	SO_2 $5_{1,5} - 4_{0,4}$		H_2S $2_{2,0} - 2_{1,1}$		H_2S $1_{1,0} - 1_{0,1}$
ν (GHz)	99.299	219.949	97.715	135.696		216.710		168.762
E_{up}/k (K)	9	35	9	16		84		24
n_{cr} (cm^{-3})	10^5	10^6	10^5	2×10^6		10^6		2×10^6
Télescope	SEST	SEST	IRAM	IRAM	IRAM	SEST	IRAM	IRAM
T_{sys} (K)	160	250	140	400	270	220	600	700
Lobe ($''$)	51	24	26	18	18	25	11	14.5
B_{eff}	0.75	0.5	0.75	0.59	0.71	0.5	0.57	0.65
$\Delta\nu$ (kHz)	86	86	40	39	39	86	42	42
$\Delta\alpha \times \Delta\delta$ ($''\times''$)	280×190	288×216	-	120×100	-	120×100	-	-
Echantillonnage ($''$)	24	24	-	12	-	24	-	-

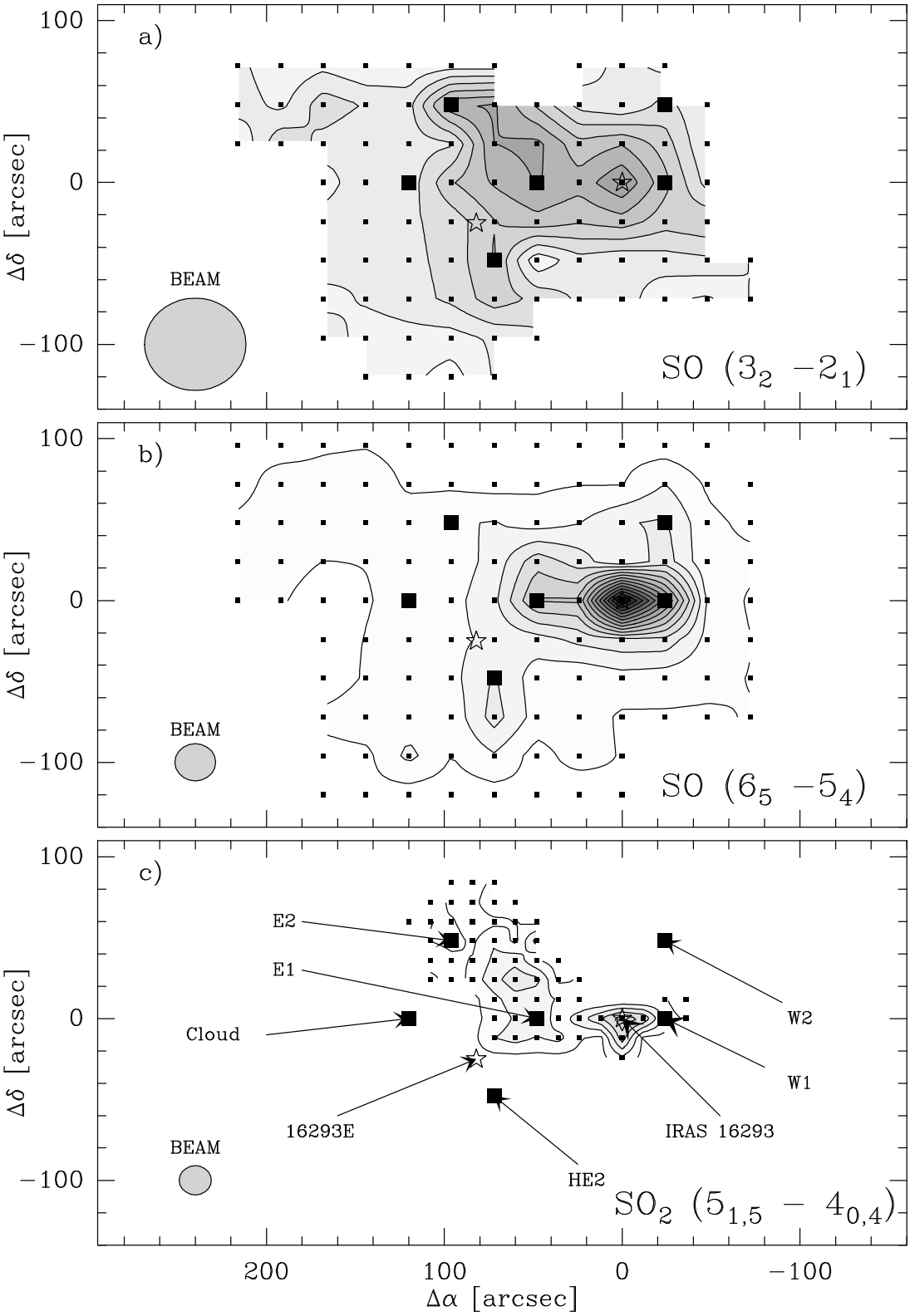

FIG. 3: *Cartes d'intensité intégrée de SO* $3_2 - 2_1$ *(a), SO* $6_5 - 5_4$ *(b) et* SO_2 $5_{1,5} - 4_{0,4}$ *(c). (a) et (b) : premier niveau à 0.5 K km* s^{-1} *avec un intervalle entre deux niveau de 1.0 K km* s^{-1}*. (c) : premier niveau à 0.3 K km* s^{-1} *avec un intervalle entre deux niveau de 1.0 K km* s^{-1}*. Sur chaque carte, les points noirs représentent les positions observées. Les deux étoiles représentent la position des deux sources protostellaires. Les flèches indiquent les huit positions clés, dont les spectres sont montrés sur la figure 4.*

est décalée vers le rouge de ~ 6 km s^{-1}.

Le premier résultat est que, contre toute attente, les régions de choc ne sont pas nécessairement associées à une forte augmentation de l'émission des raies de SO, SO_2 et H_2S. Par exemple, la région E2 qui est le maximum d'émission de SiO 2-1 (voir CCLCL01) n'est pas détectée en SO_2, et seulement marginalement détectée dans la transition de basse énergie de SO. Le second résultat est que IRAS16293 est la seule région où toutes les transitions moléculaires ont été détectées, y compris la transition de haute énergie H_2S $2_{2,0} - 2_{1,1}$. Non seulement les raies y sont plus larges que dans le nuage, mais leur largeur augmente avec le niveau d'énergie de la transition.

Emission de SO

L'émission de SO $3_2 - 2_1$ est relativement forte (~ 3 K) dans tout le nuage (figures 3 et 4). Toutes les raies sont étroites (avec des largeurs entre 1 et 2 km s^{-1}) et piquent autour de la vitesse systémique du nuage $v_{LSR} = 3.9$ km s^{-1}. La raie sur la position d'IRAS16293 présente une absorption à la vitesse systémique du nuage qui est probablement due à une absorption par la matière située au premier plan. Ce type de profil a également été remarqué sur certaines raies de H_2CO (Loinard et al., 2001). D'un autre côté, le spectre de ^{34}SO dans W1 présente la même absorption ce qui indique peut être la présence d'une forte densité de colonne de SO dans cette direction ou la présence de deux composantes ayant des vitesses différentes. Le contraste entre les intensités intégrées de SO dans les différentes régions du nuage est faible : l'émission est maximale dans IRAS16293 mais en même temps elle est étendue entre W1 et E2 (figure 3). L'émission de SO $3_2 - 2_1$ n'augmente pas de façon significative dans les régions de choc par rapport au nuage sauf dans le cas de E1 et E2. En effet, E1 et E2 ont des composantes haute vitesse visibles sur le spectre de la transition de basse énergie de SO (figure 4). Dans le suite de l'analyse, je traite séparément les composantes basse vitesse de E2 (centrée sur 3.9 km s^{-1}, par la suite E2(LVC)), et haute vitesse (à 10 km s^{-1}, par la suite E2(HVC)), car ces deux composantes peuvent être clairement séparées. En revanche, la situation est moins évidente pour E1 où la séparation n'a pas pu être faite. La composante E2(HVC) est détectée à plus de 3 RMS tout le long du flot et présente une forte émission en SiO (CCLCL01). Cette composante haute vitesse n'est pas vue en SO $6_5 - 5_4$, probablement parce que les conditions d'excitation ne sont pas suffisantes. En effet, la densité du gaz semble être plus basse dans E2(HVC) que dans le gaz ambiant (voir le tableau 3 et CCLCL01). Ceci impliquerait que E2(HVC) représente le vent protostellaire à l'origine du choc tandis que la composante de basse vitesse, E2(LVC) tracerait le nuage choqué lui même (Hollenbach, 1998). Enfin, les spectres de W1, E1 et HE2 montrent également des ébauches d'ailes bleues et rouges tandis qu'on n'observe pas d'aile dans W2.

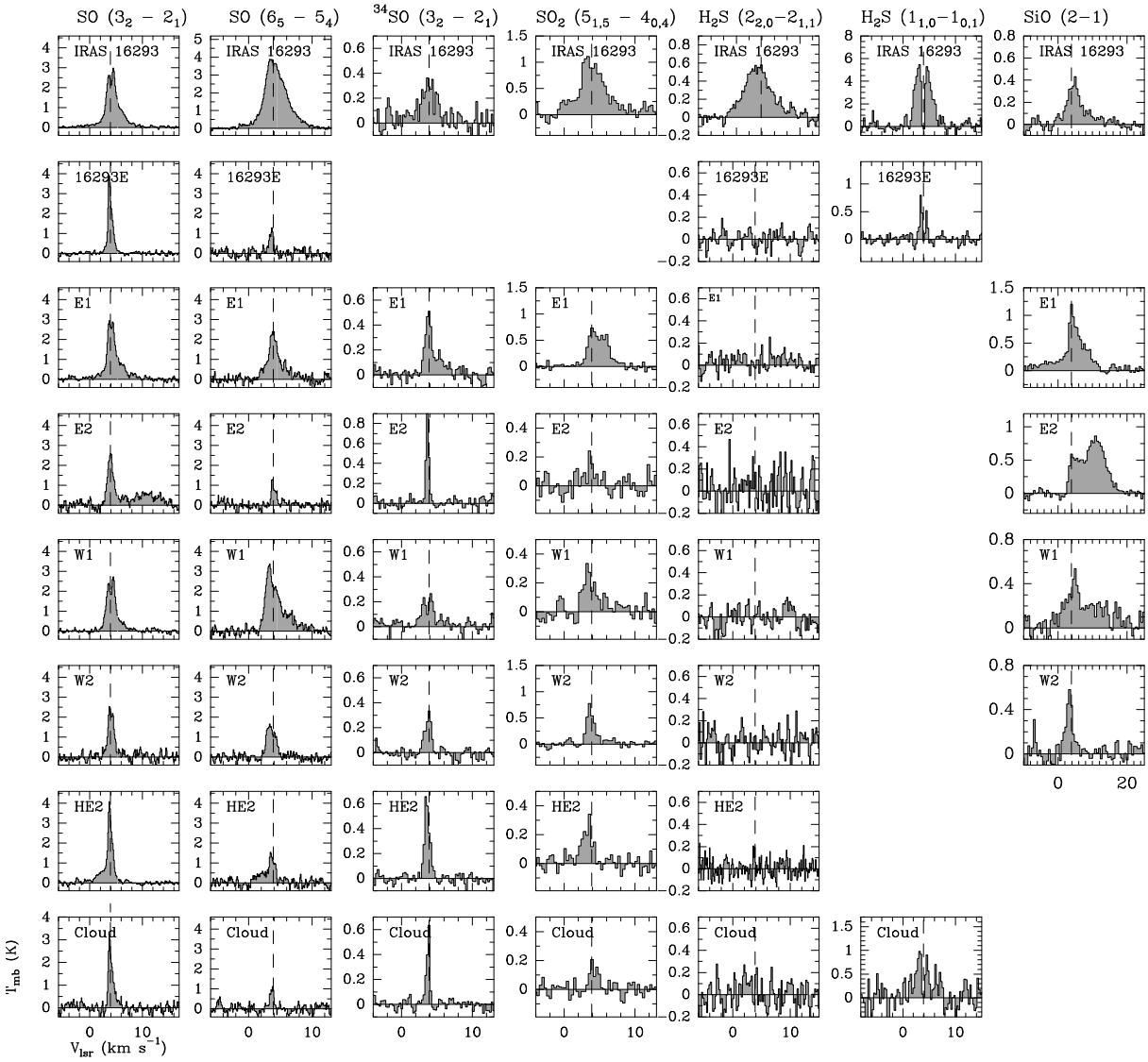

FIG. 4: *Spectres (non dégradés) de SO* $3_2 - 2_1$, *SO* $6_5 - 5_4$, ^{34}SO $3_2 - 2_1$, SO_2 $5_{1,5} - 4_{0,4}$, H_2S $2_{2,0} - 2_{1,1}$ *et* H_2S $1_{1,0} - 1_{0,1}$ *et SiO* $2 - 1$ *dans les positions clés du nuage moléculaire L1689N. La ligne verticale pointillée sur chaque spectre indique la vitesse systémique du nuage* (v_{LSR}*=3.9 km* s^{-1}*).*

La transition de plus haute énergie SO $6_5 - 5_4$ présente une émission maximum dans les régions d'IRAS16293 et de W1 et une forte émission dans E1, tandis que son intensité est faible dans le nuage. De plus, les spectres de SO $6_5 - 5_4$ dans ces régions possèdent des ailes bleues et rouges prononcées. De même, le spectre dans HE2 montre clairement une aile bleue. La région d'émission autour d'IRAS16293 possède une taille caractéristique de $\alpha \times \delta = 39'' \times 16''$, qui n'est pas résolue en δ. Enfin, les spectres de SO dans 16293E sont similaires à ceux du nuage : étroits, intenses en $3_2 - 2_1$, faibles en $6_5 - 5_4$ et dépourvus d'ailes. 16293E ne semble pas être caractérisée par une augmentation particulière de l'émission de SO par rapport au nuage.

Emission de SO_2 et H_2S

Contrairement à SO $3_2 - 2_1$, l'émission de SO_2 $5_{1,5} - 4_{0,4}$ est confinée dans quelques régions (voir les figures 3 et 4), IRAS16293, E1 et W2, probablement à cause des conditions d'excitation (la densité critique de SO_2 $5_{1,5} - 4_{0,4}$ est environ 20 fois plus grande que celle de SO $3_2 - 2_1$). Malheureusement, comme nous n'avons pas d'autres observations autour de W2, nous n'avons pas d'idée sur la taille de l'émission. Contrairement à ce que l'on attendait, il n'y a pas d'émission significative de SO_2 dans la région E2. La raie est détectée dans le nuage avec une largeur (1.4 km s^{-1}) équivalente à celle de N_2H^+ 1 - 0, observée à la même position, qui est un bon traceur du gaz froid au repos (CCLCL01).

La morphologie de l'émission des raies de SO_2 $5_{1,5} - 4_{0,4}$ et de SO $6_5 - 5_4$ sont similaires, probablement parce que les transitions ont des densités critiques proches. De plus, à part pour E1, les spectres de SO_2 $5_{1,5} - 4_{0,4}$ montrent les mêmes caractéristiques, la même vitesse par exemple, que ceux de SO $6_5 - 5_4$ dans les régions clés. Dans E1, les raies de SO présentent une forte composante ambiante avec des ailes décalées vers le bleu et le rouge plus faibles alors que la composante choquée apparaît aussi brillante que la composante ambiante dans les raies de SO_2, donc la largeur de SO_2 $5_{1,5} - 4_{0,4}$ est à peu près le double de celle de SO $6_5 - 5_4$.

IRAS16293 est la seule position où la transition H_2S $2_{2,0} - 2_{1,1}$ a été détectée. A cette position, la raie est relativement brillante et large ($\Delta v = 5.0$ km s^{-1}). Aucune émission n'a été détectée dans les régions de choc ni dans le nuage ambiant. En revanche, la transition de plus basse énergie, observée uniquement dans la position d'IRAS16293, de 16293E et du nuage, a été détectée partout avec un profil de double-pic dans les protoétoiles et peut-être même sur la position du nuage. Cette absorption est probablement due à l'épaisseur optique de la raie. En effet, Minh et al. (1991) ont ont trouvé une opacité de $\sim$10 pour des densités de colonne de H_2S similaires à la notre, en observant la même transition de H_2S dans différentes régions de formation stellaire.

TAB. 2: *Paramètres de raies (T_{MB} en K, Δv en km s^{-1}, v_{LSR} en km s^{-1} et $\int T_{MB}\delta v$ en K km s^{-1}) pour les différentes transitions observées dans les positions clés : les deux protoétoiles IRAS16293 et 16293E, les régions de choc E1, E2, W1, W2 et HE2, et la position de référence dans le nuage. Les observations de SiO ont été publiées dans CCLCL01. Lorsqu'aucun signal n'a été détecté, les T_{MB} et $\int T_{MB}\delta v$ limites sont donnés à 3 RMS. Ces paramètres sont ceux des spectres non dégradés. Le symbole "-" implique que la transition concernée n'a pas été détectée ou observée.*

		SO 3_2-2_1	SO 6_5-5_4	^{34}SO 3_2-2_1	SO_2 $5_{1,5}-4_{0,4}$	H_2S $2_{2,0}-2_{1,1}$	H_2S $1_{1,0}-1_{0,1}$	SiO $2-1$
IRAS	T_{MB}	2.9±0.1	3.7±0.1	0.3±0.1	1.1±0.1	0.5±0.04	6.2±0.6	0.35±0.05
16293-2422	Δv	2.0±0.1	3.9±0.0	2.8±0.5	4.2±0.2	5.0±0.2	3.0±0.0	5.0±0.4
	v_{LSR}	4.0	3.9	3.9	3.9	3.3	3.9	4.2
	$\int T_{MB}\delta v$	8.0±1.2	16.0±2.5	1.0±0.3	4.6±0.9	3.0±0.5	17.5± 3.2	1.9±0.1
	T_{MB}	3.4±0.1	1.2±0.2	-	-	≤ 0.2	1.1±0.1	-
16293E	Δv	1.0±0.0	0.8±0.1	-	-	-	1.2±0.1	-
	v_{LSR}	3.7	3.7	-	-	-	3.9	-
	$\int T_{MB}\delta v$	3.8±0.6	1.0±0.2	-	-	≤ 0.1	0.6± 0.1	-
	T_{MB}	2.9±0.1	2.4±0.2	0.5±0.1	0.7±0.1	≤ 0.2	-	1.1±0.1
E1	Δv	1.8±0.2	1.6±0.1	1.2±0.1	3.1±0.1	-	-	2.8±0.1
	$v_{\rm LSR}$	4.0	3.8	3.9	4.0	-	-	3.6
	$\int T_{MB}\delta v$	7.3±1.2	5.6±1.0	0.8±0.2	2.2±0.4	≤ 0.3	-	3.3±0.3
E2	T_{MB}	2.4±0.2	1.1±0.2	0.9±0.04	≤0.2	≤ 0.4	-	0.53±0.06
LVC	Δv	1.3±0.1	0.9±0.1	0.5±0.02	-	-	-	3.2±0.1
	$v_{\rm LSR}$	3.9	3.8	3.6	-	-	-	4.0
	$\int T_{MB}\delta v$	3.7±0.7	1.0±0.2	0.5±0.1	≤ 0.1	≤ 0.4	-	1.8±0.1
E2	T_{MB}	0.5±0.15	≤0.6	≤0.1	≤0.2	≤0.4	-	0.83±0.06
HVC	Δv	6.6±0.6	-	-	-	-	-	6.3±0.2
	v_{LSR}	10.4	-	-	-	-	-	11
	$\int T_{MB}\delta v$	3.6±0.7	≤ 0.5	≤ 0.2	≤ 0.3	≤ 0.8	-	5.6±0.2
	T_{MB}	2.6±0.1	3.3±0.2	0.2±0.04	0.3±0.1	≤0.2	-	0.3±0.1
W1	Δv	1.8±0.2	1.3±0.03	2.2±0.2	1.9±0.3	-	-	3.3±0.8
	v_{LSR}	4.0	3.3	3.7	3.3	-	-	4.6
	$\int T_{MB}\delta v$	5.8±1.0	9.0±1.5	0.5±0.1	0.7±0.2	≤ 0.4	-	1.1±0.2
	T_{MB}	2.4±0.2	1.6±0.2	0.30±0.04	0.7±0.1	≤0.2	-	0.5±0.1
W2	Δv	1.4±0.1	1.6±0.1	1.1±0.1	1.2±0.1	-	-	2.1±0.3
	v_{LSR}	3.8	3.3	3.9	3.7	-	-	3.5
	$\int T_{MB}\delta v$	3.8±0.7	2.7±0.5	0.3±0.1	0.9±0.2	≤ 0.3	-	1.2±0.1
	T_{MB}	3.7±0.1	1.4±0.2	0.6±0.04	0.3±0.04	≤ 0.2	-	-
HE2	Δv	0.9±0.1	0.9±0.1	0.9±0.1	1.8±0.02	-	-	-
	v_{LSR}	3.7	3.5	3.5	3.6	-	-	-
	$\int T_{MB}\delta v$	5.3±0.8	2.7±0.5	0.6±0.1	0.6±0.1	≤ 0.3	-	-
	T_{MB}	3.1±0.2	1.1±0.2	0.6±0.04	0.2±0.04	≤0.3	0.8±0.2	-
Nuage	Δv	1.0±0.04	0.7±0.1	0.5±0.1	1.4±0.2	-	1.1±0.4	-
	v_{LSR}	3.8	3.8	3.8	3.9	-	3.4	-
	$\int T_{MB}\delta v$	3.2±0.6	0.8±0.2	0.3±0.1	0.2±0.1	≤ 0.3	1.0±0.2	-

Comparison avec SiO

Contrairement aux molécules soufrées, l'émission de SiO $2-1$ est plus forte dans les régions de choc que dans IRAS16293. Les spectres dans E1 et W1 possèdent des ailes à haute vitesse plus marquées que les raies de SO et SO_2. La composante haute vitesse de E2, vue en SO 3_2-2_1, est très forte en SiO $2-1$. La largeur de ces deux raies et leur vitesse centrale sont similaires : Δv ($\sim$ 6.5 km s^{-1}) et v_{LSR} ($\sim$ 10 km s^{-1}).

1.1.4 Calcul des densités de colonne

Dans cette partie, je décris comment les densités de colonne des différentes espèces observées SO, SO_2 et H_2S ont été calculées dans les régions clé s. Les densités de colonne de SiO et H_2CO ont également été dérivées à partir des données publiées dans CCLCL01. Pour calculer la température et la densité du gaz ainsi que les densités de colonne, j'ai utilisé le modèle LVG décrit à la section B.2.4. Dans les trois sections qui suivent, j'explique les calculs pour chaque type de région : le nuage, les régions de choc et IRAS16293. Je n'ai fais aucun calcul pour 16293E parce que l'émission des molécules semble être dominée par le nuage.

Le nuage

Pour estimer la densité de H_2 et la température du gaz, ainsi que la densité de colonne de SO dans la position de référence du nuage, j'ai comparé l'épaisseur optique de la transition 3_2-2_1 ($\tau \sim 1.5$, calculée à partir des observations des isotopes ^{34}SO et ^{32}SO), et le rapport d'intensité des raies ^{32}SO 3_2-2_1 sur ^{32}SO 6_5-5_4, avec les résultats donnés par le modèle LVG. Le rapport élémentaire de ^{34}S/^{32}S utilisé est de 22.5 (Wilson et Rood, 1994; Chin et al., 1996; Lucas et Liszt, 1998). J'ai supposé que l'émission de SO remplit le lobe pour pouvoir utiliser les observations de ^{34}SO 3_2-2_1 et ^{32}SO 3_2-2_1 ensemble parce que les flux de ces deux transitions ont été mesurés avec des résolutions spatiales différentes. Cette hypothèse est réaliste dans le nuage où l'émission de SO est étendue. Les résultats de la modélisation LVG sont montrés à la figure 5. L'ensemble des observations contraint la densité de colonne de SO dans le nuage entre 3×10^{14} et 8×10^{14} cm^{-2}. En utilisant la température du gaz de 26 K trouvée par Caux et al. (1999), la densité de H_2 dérivée de la figure 5 est 3×10^4cm^{-3}.

Les densités de colonne des autres espèces, SO_2 et H_2S, ont été calculées en utilisant la densité et la température dérivées de l'émission de SO, c'est-à-dire 3×10^4cm^{-3} et 26 K[1]. En utilisant la densité de colonne de H_2 déterminée par Caux et al. (1999) de 5×10^{22} cm^{-2},

1. On suppose ici que les émission de SO_2 et H_2S proviennent du même gaz que SO, ce qui n'est peut être pas le cas. Cependant les densités de colonne de SO_2 et H_2S dépendent peu des valeurs de température et de densité adoptées.

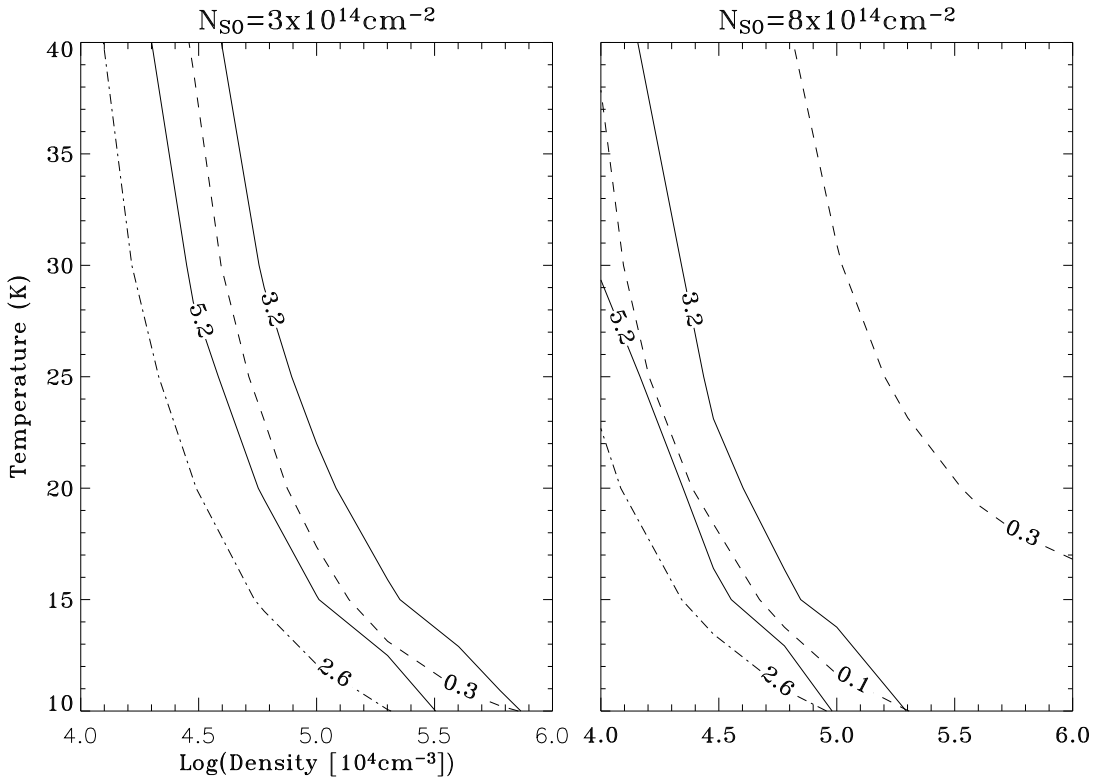

FIG. 5: *Modélisation LVG de l'émission de SO dans la position de référence du nuage. Cette figure montre les prédictions théoriques en fonction de la température du gaz et de la densité de H_2 pour les deux densités de colonne limites de SO (au delà de ces limites, les contours ne se superposent plus). Les courbes représentent trois quantités observées avec leur incertitudes. Contours pleins : rapports d'intensités intégrées de SO $3_2 - 2_1$ sur SO $6_5 - 5_4$, entre 3.2 et 5.2. Contours pointillés : probabilité d'échappement, calculée à partir du rapport des raies de ^{34}SO $3_2 - 2_1$ et ^{32}SO $3_2 - 2_1$, entre 0.1 et 0.3. Contours "trait-point" : le maximum d'intensité intégrée de la transition SO $3_2 - 2_1$, 2.6 K km s^{-1}. L'intensité décroit lorsque la température augmente, autrement dit vers le haut du diagramme. De même, la limite inférieure de la probabilité d'échappement (0.1) n'est pas visible sur la figure de gauche parce qu'elle sort du graphique.*

Tab. 3: *Température, densité du gaz (H_2) et densité de colonne de SO, SO_2, H_2S, SiO et* H_2CO *dans les six positions clés. Les densités de colonne sont en* $10^{13}cm^{-2}$ *et moyennées sur le lobe dans les régions de choc (sur 27″ pour SiO, 26″ pour H_2CO, 24″ pour SO, 18″ pour SO_2 et 25″ pour H_2S), tandis qu'elles sont corrigées de la dilution dans IRAS16293. L'erreur statistique sur les densités de colonne est estimée à 15%. Cependant, si l'on considère l'incertitude sur la température et la densité du gaz, l'erreur est d'un facteur 2 sur les densités de colonne.*

	Densité	T	Densité de colonne (10^{13} cm^{-2})				
	($10^5 cm^{-3}$)	(K)	N_{SO}	N_{SO_2}	N_{H_2S}	N_{SiO}	N_{H_2CO}
IRAS16293	250	100	13000	4100	4000	110	750
Nuage	0.3	26	30 - 80	2	1.5	0.02	2
W2	1.8	80	8.7	2.9	≤ 76	0.15	3.6
W1	2.6	150	24	2.4	≤ 72	0.15	3.4
E1	1.8	150	15	7.3	≤ 96	0.42	7.0
E2(LVC)	1.0	150	3.2	≤ 0.44	≤ 260	0.21	≤ 0.86
E2(HVC)	0.4	100	7.8	≤ 1.1	≤ 1200	1.0	≤ 1.8

l'abondance de SO_2 par rapport à H_2 trouvée est de 4×10^{-8}. Cette abondance est similaire aux abondances observées dans les autres nuages moléculaires (voir tableau 4). Dans le cas de H_2S où les coefficients de collision utilisés pour le modèle LVG sont très incertains (voir section B.2.4), la densité de colonne a également été calculée à ETL. Pour faire ce calcul, j'ai utilisé une température d'excitation de 5 K, identique à celle trouvée par Swade (1989b) et Hirahara et al. (1995) dans des nuages moléculaires similaires (L134N et TMC-1) pour plusieurs molécules dont les transitions fondamentales ont des coefficients d'Einstein (A) similaires à celui de la transition H_2S $1_{1,0} - 1_{0,1}$. Cette température est justifiée par le fait que la densité critique de H_2S à 20 K est supérieure à 10^8 cm^{-3}, bien au dessus de la densité estimée pour le nuage moléculaire. Cette température d'excitation a également été utilisée par Minh et al. (1989) pour calculer la densité de colonne de H_2S dans L134N et TMC-1 à partir de la même transition. Le rapport ortho/para de H_2S est de 3[1]. Le calcul ETL donne un résultat similaire à celui obtenu avec le modèle LVG. En revanche, si la température d'excitation est deux fois plus grande, la densité de colonne de H_2S augmente du même facteur. Enfin, les densités de colonne de SiO et H_2CO proviennent de la modélisation de Ceccarelli et al. (2000b) et Ceccarelli et al. (2001) respectivement[1]. Les densités de colonne obtenues pour toutes les espèces sont reportées dans

1. La valeur de ce rapport est incertaine à basse température. Si ce rapport était de 1 par exemple, la densité de colonne de H_2S dérivée ici ne serait sous estimée que d'un facteur 2 (voir aussi Minh et al., 1989)

1. Même si aucune émission de SiO n'a été détectée dans le nuage, Ceccarelli et al. (2000b) ont modélisé les observations de l'émission de SiO (de $J_{up} = 1$ à 8) dans IRAS16293, en tenant compte de la structure physique de l'enveloppe, et ont trouvé une abondance de SiO (par rapport à H_2) de 4.0×10^{-12} dans l'enveloppe externe. Par analogie avec les autres molécules dont les abondances trouvées dans l'enveloppe externe sont égales à celles mesurées dans les nuages moléculaires environnants, j'ai adopté une abondance de 4.0×10^{-12} pour SiO dans L1689N. De façon similaire, même si une émission faible de formaldéhyde a été détectée dans le nuage, j'ai

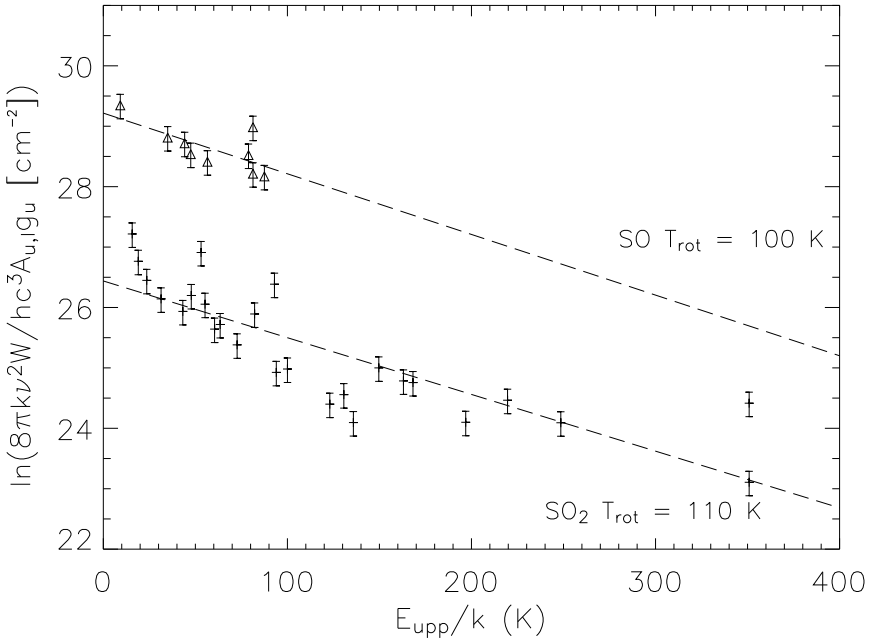

FIG. 6: *Diagrammes rotationnels de SO (triangles) et SO_2 (plus) dans IRAS16293 construits à partir des observations publiées par Blake et al. (1994). Les droites correspondent au meilleur fit linéaire. Les températures rotationnelles (T_{rot}) indiquées pour chaque molécule correspondent à l'inverse de la pente de la droite.*

le tableau 3 et les abondances par rapport à H_2 dans le tableau 4.

IRAS16293

L'enveloppe d'IRAS16293 est formée d'au moins deux composantes : un cœur associé à une forte température et une enveloppe externe dont la température est plus proche de celle du nuage (voir section 1.1.1). Le cœur chaud est une petite région ($\sim 2''$ de diamètre) dont la température est de l'ordre de 100 K et la densité de 2.5×10^7 cm^{-3} (Ceccarelli et al., 2000a; Schöier et al., 2002). A une telle température, les manteaux glacés des grains s'évaporent injectant dans la phase gazeuse leur constituants (Ceccarelli et al., 2000a,b). L'enveloppe externe est plus étendue ($\sim 20''$) et froide, avec une température de 30 K (un peu plus grande que la température de L1689N) et une densité de 2.5×10^5 cm^{-3} (Ceccarelli et al., 2000a; Schöier et al., 2002). Les abondances moléculaires dans l'enveloppe externe sont similaires à celles dans le nuage moléculaire, sauf peut-être pour les molécules deutérées. En revanche dans le cœur interne, plusieurs molécules, celles provenant de l'évaporation des manteaux des grains ou formées à

également utilisé l'abondance trouvée dans l'enveloppe externe pour le nuage.

partir des molécules évaporées, voient leur abondance augmenter. Je me suis concentrée sur les abondances des molécules soufrées dans le cœur chaud. J'ai utilisé jusqu'à présent deux transitions de SO (de faible et moyenne énergie) et une transition de faible énergie de SO_2. Or pour sonder les différentes régions de l'enveloppe protostellaire, il est nécessaire d'avoir le plus de transitions possibles couvrant un panel d'énergie le plus grand possible. Pour compléter mes observations, j'ai donc utilisé des observations multifréquence publiées par Blake et al. (1994). Plutôt que d'utiliser le modèle LVG comme pour les autres régions du nuage qui n'est pas approprié pour l'enveloppe (voir section 2.3.3), j'ai reconstruit les diagrammes rotationnels de SO et SO_2 (voir figure 6). Il est à noter que l'approche ETL décrite dans cette section pour calculer les densités de colonne de SO et SO_2 dans le cœur chaud d'IRAS16293 a été complétée par un calcul hors-ETL présenté à la section 2.3 et que les deux méthodes donnent des résultats similaires.

Les températures rotationnelles déduites de ces diagrammes sont relativement chaudes : 100 K pour SO et 110 K pour SO_2, ce qui suggère fortement que l'émission de ces deux molécules provient du cœur interne. De plus, la largeur de toutes les raies observées est supérieure à 3 km s^{-1} et augmente avec l'énergie de la transition. En prenant donc comme hypothèse de départ que les transitions observées de SO et SO_2 proviennent du cœur chaud, j'ai calculé les densités de colonne de ces deux molécules en utilisant les diagrammes rotationnels. Ces densités de colonne sont reportées dans le tableau 3 et sont corrigées du facteur de dilution dans le lobe (la taille moyenne du lobe étant de $20''$ et la taille de la source de $2''$). Pour estimer la densité de colonne de H_2S, j'ai supposé que l'émission de la transition $2_{2,0} - 2_{1,1}$ provenait entièrement du cœur chaud, comme cela est suggéré par la largeur de la raie observée et j'ai fait un calcul à l'ETL avec une température d'excitation de 100 K.

Pour calculer les abondances absolues, reportées dans le tableau 5, j'ai utilisé la densité de colonne de H_2 estimée par Ceccarelli et al. (2000a) de $7.5 \times 10^{22} cm^{-2}$. Il est important de noter que les abondances trouvées ici sont en très bon accord avec celles calculées par Schöier et al. (2002) à l'aide d'un modèle plus sophistiqué confirmant la validité de la méthode que l'on utilise. En fait, Schöier et al. ont trouvé des abondances 5 fois plus petites que les notres mais cela est dû au fait qu'ils ont utilisé une densité du gaz 5 fois plus grande que celle estimée par Ceccarelli et al. (2000a). Les deux densités estimées par Ceccarelli et al. (2000a) et Schöier et al. (2002) ne sont pas les mêmes parce que les méthodes utilisées sont différentes : Schöier et al. ont utilisé la distribution du spectre d'énergie du continuum tandis que Ceccarelli et al. se basent sur les spectres des raies de l'eau. En utilisant les raies de CO, Schöier et al. ont trouvé la même densité dans les régions internes que Ceccarelli et al. (communication privée de Schöier). J'ai donc utilisé les estimations de Ceccarelli et al. (2000a), mais il faut garder à l'esprit que les

abondances peuvent être sur-estimées d'un facteur 5. Enfin, les densités de colonne de SiO et H_2CO proviennent de la modélisation de Ceccarelli et al. (2000a,b, 2001).

Régions de choc

Pour déterminer les densités de colonne dans E1, E2(LVC), E2(HVC), W1, W2[1], j'ai utilisé la température et la densité du gaz que CCLCL01 ont calculées en comparant les raies observées de SiO (pour J de 2 à 5) avec le modèle LVG approprié. L'incertitude sur les densités et les températures ainsi déduites est de l'ordre d'un facteur 2. Je n'ai pas pu déterminer la température et la densité du gaz pour chaque molécule par manque de transitions. Ceci aurait pu être fait pour SO, mais des deux transitions de SO, celle de plus basse énergie est dominée par l'émission du nuage et ne peut pas être utilisée pour sonder le gaz choqué. Pour les autres molécules, SO_2, H_2S et H_2CO, seule une transition a été détectée ou observée. J'ai donc calculé les densités de colonne des quatre dernières molécules en supposant les mêmes températures et densités obtenues avec les observations de SiO. C'est une approximation qui ne tient pas compte de la structure possible du gaz choqué, mais les résultats de densité de colonne ne sont pas très affectés par cette hypothèse. En principe, l'émission de chaque molécule provient d'un gaz dont les conditions physiques sont différentes (comme je vais le montrer dans la section 1.2) et donc les densités de colonne peuvent être mal évaluées. Dans la pratique, l'erreur associée à cette approximation est inférieure à un facteur 2. Par exemple, Lis et al. (2002) ont trouvé des valeurs différentes pour la température (45 K) et la densité (2×10^6 cm^{-3}) dans E1 en utilisant des transitions de H_2CO. Même en prenant ces valeurs, les densités de colonne obtenues pour les quatre molécules données dans le tableau 3 ne vont pas changer de plus d'un facteur 2. Enfin, j'ai supposé que toutes les raies utilisées étaient optiquement minces (e.g. Blake et al., 1994). Les densités de colonne, moyennées dans le lobe, obtenues pour toutes les espèces dans les 4 régions de choc sont reportées dans le tableau 3.

Dans les régions de choc, à part pour E2, il est pratiquement impossible de calculer les abondances absolues des molécules observées parce qu'il est très difficile d'y estimer la densité de colonne de H_2. En effet, les densités de colonne de H_2 sont généralement calculées à partir d'observations millimétriques de CO en convertissant la densité de colonne de CO en densité de colonne de H_2 (pour cela on suppose que l'abondance varie très peu d'une région à l'autre, ce qui n'est pas toujours vrai). Cette méthode se base sur la capacité à séparer l'émission de CO provenant du nuage de celle provenant des régions de choc. Ceci peut-être fait lorsque le gaz choqué émet à relativement grande vitesse, autrement dit lorsque les deux contributions

1. Comme aucune émission de SiO n'a été détectée dans HE2, la densité et la température n'ont pas pu être contraintes dans cette région.

Tab. 4: *Abondances (par rapport à H_2) dans des nuages moléculaires. Références : a : ce travail; b : Ceccarelli et al. (2000b); c : Ceccarelli et al. (2001); d : Swade (1989b); e : Minh et al. (1989); f : Ziurys et al. (1989); g : Ohishi et al. (1992); h : Hirahara et al. (1995) et Pratap et al. (1997); i : Irvine et al. (1983); j : Ohishi et Kaifu (1998).*

Nuage	SO/H_2 (10^{-9})	SO_2/H_2 (10^{-9})	H_2S/H_2 (10^{-9})	SiO/H_2 (10^{-12})	H_2CO/H_2 (10^{-8})
L1689N	6 - 16[a]	0.4[a]	0.3[a]	4[b]	0.04[c]
L134N	0.6 - 10[d]	0.3 - 2.5[d]	3[e]	$\leq$ 3.6[f]	2[g]
TMC-1	0.3 - 4[h]	2 - 6[i]	0.7[e]	$\leq$ 2.4[f]	7[j]

sont clairement séparées au niveau des spectres (voir par exemple Bachiller et Perez Gutierrez, 1997). Dans le cas spécifique des flots dans L1689N, la vitesse projetée des chocs est trop petite et la contribution des chocs ne peut pas être distinguée de celle du nuage, sauf dans le cas de E2 où une composante haute vitesse est clairement vue. Ainsi donc, pour calculer proprement la densité de colonne de H_2 dans le gaz choqué, nous aurions besoin d'observations à haute résolution spatiale parce que l'émission de CO mesurée par les télescopes à antenne simple est complètement dominée par l'émission du nuage. Pour cette raison pratique, seuls les rapports d'abondance ont été calculés et sont résumés dans le tableau 6. Il faut faire attention que ces rapports ont été obtenus à partir des densités de colonne moyennées sur des lobes différents ($18''$ pour les observations de SO_2 et $\sim 25''$ pour les autres), donc les rapports avec SO_2 peuvent être sous-estimés ou sur-estimés d'un facteur 2 dans les régions de choc.

1.1.5 Discussion

Les rapports d'abondance entre les différentes espèces observées dans les différentes régions sont reportés dans les tableaux 4, 6 et 5 . Ces rapports varient de plus de deux ordres de grandeur les uns par rapport aux autres. Je vais maintenant analyser en détail les variations que l'on observe dans le nuage, dans les régions de choc et dans la protoétoile IRAS16293.

Le nuage

Le tableau 4 résume les abondances des différentes espèces calculées à partir des densités de colonne données dans la section précédente (tableau 3). La densité de colonne de H_2 utilisée est celle estimé par Caux et al. (1999) à partir d'observations de l'oxygène atomique de 5×10^{22} cm^{-2}. Les abondances moléculaires mesurées dans L134N et TMC-1, qui sont les deux nuages moléculaires les plus étudiés, sont également reportées dans le tableau 4 pour comparaison. Les abondances moléculaires dans L1689N sont similaires aux abondances mesurées dans les autres nuages moléculaires froids sauf peut-être pour le formaldéhyde.

IRAS16293

Les abondances absolues (par rapport à H_2) de SO, SO_2, H_2S, H_2CO et SiO dans le cœur chaud d'IRAS16293 et dans le nuage L1689N sont reportées dans le tableau 5. Les abondances des molécules soufrées augmentent énormément dans le cœur chaud par rapport au nuage moléculaire : d'un facteur 200 pour SO, d'un facteur 1300 pour SO_2 et d'un facteur 1700 pour H_2S (voir aussi Schöier et al., 2002).

Une comparaison directe entre les abondances mesurées dans IRAS16293 et dans les autres cœurs chauds (tableau 5) ne peut être faite que pour le cas d'Orion-KL, parce que dans les autres sources, les abondances n'ont pas été corrigées de la dilution dans le lobe (Hatchell et al., 1998; Buckle et Fuller, 2003). Par rapport à Orion-KL, le cœur chaud d'IRAS16293 est enrichi en SO, SO_2 et H_2CO, tandis qu'il a un déficit en H_2S. L'explication la plus plausible est que ces différences reflètent une différence dans la composition des glaces (d'où H_2CO et H_2S sont évaporés). Cette hypothèse a déjà été invoquée pour expliquer la différence entre les molécules deutérées dans les protoétoiles massives et de faibles masses (e.g. Ceccarelli, 2002). Cependant, la différence de température et de densité du gaz doit également jouer un rôle. Il faut également garder en tête que la région d'Orion-KL est très complexe et que ces abondances n'y ont pas été déterminées par une modélisation mais par simple diagrammes rotationnels. Ce point sera plus largement discuté dans le chapitre 3.5 lorsque les observations seont comparées avec le modèle chimique pour les cœurs chauds. Enfin, les rapports d'abondance SO_2/SO et H_2S/SO dans IRAS16293 sont différents d'un facteur 100 et 10 respectivement par rapport aux rapports mesurés dans les protoétoiles massives de Hatchell et al. (1998). Une fois de plus, ces différences peuvent être attribuées à une différence de stade d'évolution et à des différences de températures et de densités.

Supposons que le soufre gazeux est présent sous la forme de SO, SO_2 et H_2S dans le gaz chaud, comme prédit par les modèles (e.g. Pineau Des Forêts et al., 1993; Charnley, 1997), et que le silicium soit principalement sous la forme de SiO (Herbst et al., 1989). Le rapport (SO+SO_2+H_2S)/SiO reflète le rapport d'abondance du soufre élémentaire par rapport au silicium dans le gaz du cœur chaud d'IRAS16293. Ce rapport est à peu près de 300 et doit être comparé au rapport élémentaire S/Si solaire qui vaut 0.5. Il est peu probable que la quantité de soufre en phase gazeuse ait été surestimée. En revanche, il est possible que les raies des molécules soufrées soient optiquement épaisses, ce dont on n'a pas tenu compte ici, et que donc leur abondance ait été sous-estimée. Le rapport (SO+SO_2+H_2S)/SiO suggère donc un déficit important de silicium dans le cœur chaud d'IRAS16293. L'explication la plus probable est que le silicium est déplété dans le cœur réfractaire non volatil des grains, tandis que le soufre est plutot déplété dans les manteaux volatils. Cette conclusion est en accord avec l'hypothèse de

Tab. 5: *Abundances de SO, SO_2, H_2S, SiO et H_2CO par rapport à H_2 dans le cœur chaud d'IRAS16293. Les abondances de SO, SO_2 et H_2S ont été estimées à partir du travail présenté ici, en supposant une densité de colonne de H_2 de 7.5×10^{22}cm^{-2} (Ceccarelli et al., 2000a). Les abondances de SiO et H_2CO proviennent de travaux publiés par Ceccarelli et al. (2000a,b). Les références pour les autres sources sont : L1157-mm (IRAS 20386+6751) : Bachiller et Perez Gutierrez (1997); Orion-KL : SO, SO_2, SiO et H_2CO de Sutton et al. (1995), H_2S de Minh et al. (1990); G10.47, G29.96, G75.78, G9.62, G12.21, G31.41 et G34.26 : Hatchell et al. (1998); BF-Class 0 : Buckle et Fuller (2003).*

	SO/H_2	SO_2/H_2	H_2S/H_2	SiO/H_2	H_2CO/H_2
IRAS16293	1.7×10^{-6}	5.4×10^{-7}	5.3×10^{-7}	1.5×10^{-8}	1.0×10^{-7}
L1157-mm	5.0×10^{-9}	3.0×10^{-8}	1.1×10^{-8}	-	$4 - 6 \times 10^{-9}$
Orion-KL	1.5×10^{-7}	9.4×10^{-8}	5.0×10^{-6}	6.0×10^{-9}	7.0×10^{-9}
G10.47	3.0×10^{-9}	1.8×10^{-8}	$\geq 4.0 \times 10^{-9}$	-	-
G29.96	$\geq 5.0 \times 10^{-9}$	2.0×10^{-8}	$\geq 1.5 \times 10^{-8}$	-	-
G75.78	3.0×10^{-9}	$\geq 2.0 \times 10^{-9}$	$\geq 1.0 \times 10^{-9}$	-	-
G9.62	$\geq 4.0 \times 10^{-9}$	1.0×10^{-8}	$\geq 8.0 \times 10^{-9}$	-	-
G12.21	$\geq 8.0 \times 10^{-10}$	$\geq 5.0 \times 10^{-10}$	-	-	-
G31.41	4.0×10^{-9}	1.2×10^{-8}	$\geq 3.0 \times 10^{-9}$	-	-
G34.26	6.0×10^{-9}	1.5×10^{-8}	$\geq 2.0 \times 10^{-9}$	-	-
BF-Class 0	3.0×10^{-9}	4.0×10^{-10}	2.0×10^{-9}	-	-

Ruffle et al. (1999) que le soufre et le silicium sont déplétés à des moments différents lors de la formation des grains de poussière. Une autre explication possible est que le silicium soit sous une autre forme que SiO dans le gaz chaud comme par exemple Si, Si^+ ou SiO_2. Le silicium atomique est difficile à observer parce que la transition fondamentale est à 129 μm, autrement dit à une longueur d'onde complètement absorbée par l'atmosphère. L'instrument *Long Wavelength Spectrometer* à bord d'ISO n'a pas détecté de signal supérieure à 5×10^{-13} erg s^{-1} cm^{-2} dans cette région (Ceccarelli et al., 1998), ce qui correspond à une limite supérieure pour la densité de colonne de Si de 6×10^{17} cm^{-2}, et une abondance inférieure à 8×10^{-6}. Autrement dit, l'abondance maximum de Si est à peut près 500 fois plus grande que l'abondance de SiO observée dans IRAS16293 et pourrait expliquer le déficit de silicium observé. Pour Si^+, il est très peu vraisemblable que le champ de rayonnement UV soit suffisant dans les régions observées pour ioniser le silicium. L'abondance totale de SO, SO_2 et H_2S dans le cœur chaud d'IRAS16293 est de 2.8×10^{-6}, c'est-à-dire plus de dix fois inférieure à celle de l'abondance cosmique du soufre 3.4×10^{-5}. Même si l'on ajoute l'abondance de OCS qui est de l'ordre de celle de SO (Schöier et al., 2002), l'abondance totale de soufre élémentaire est toujours petite. Malheureusement, Schöier et al. (2002) n'ont pas pu estimer l'abondance de CS dans le cœur chaud, mais il est peu probable que CS soit le réservoir de soufre. Une autre possibilité est que le soufre soit sous la forme atomique (Charnley, 1997). En effet, S est très difficile à observer parce que la transition

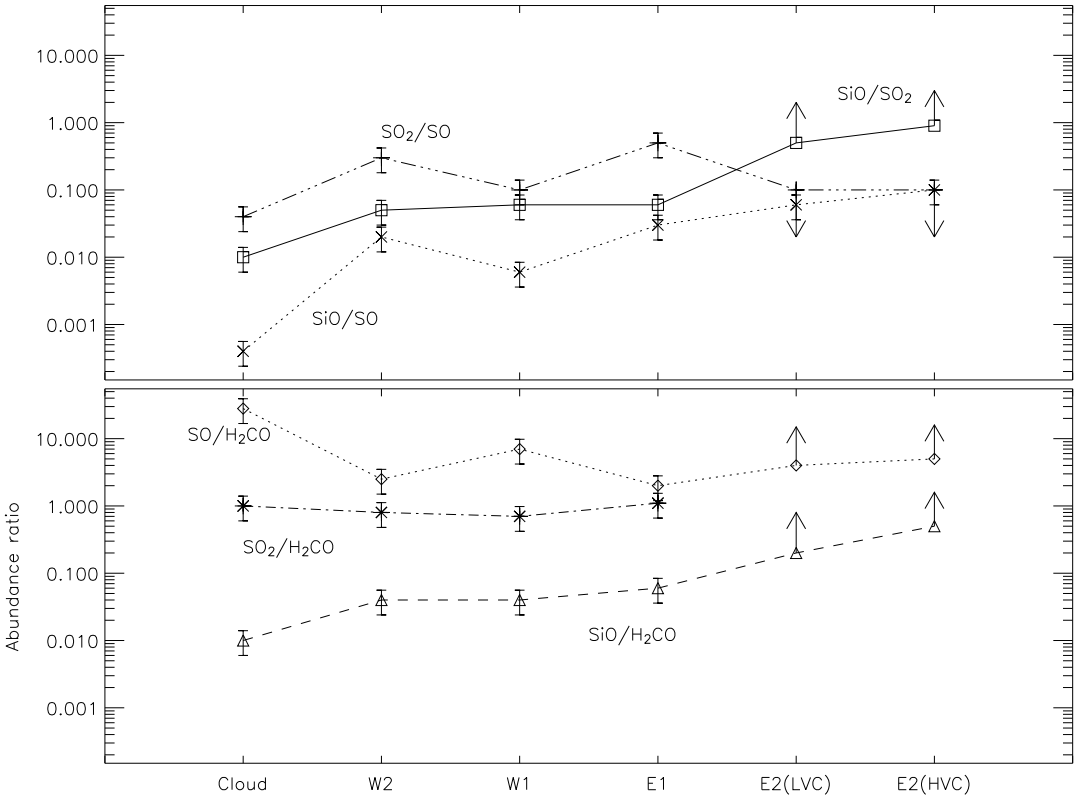

FIG. 7: *Les rapports d'abondance observés dans les différentes régions de choc et dans le nuage moléculaire présentés dans le tableau 6 : SO/H_2CO, SO_2/H_2CO et SiO/H_2CO sur le graphique du bas et SO_2/SO, SiO/SO_2 et SiO/SO sur le graphique du haut. Les flèches représentent les limites inférieures et supérieures des rapports SO_2/SO, SiO/SO_2, SO/H_2CO et SiO/H_2CO.*

fondamentale est à 25 μm, autrement dit une longueur d'onde absorbée par l'atmosphère.

Comme je l'ai déjà expliqué à plusieurs reprises, les molécules soufrées sont généralement considérées comme des outils potentiels pour dater les cœurs chauds. J'ai comparé les abondances trouvées ici avec les prédictions du modèle chimique que je décris dans le chapitre 3. Cette comparaison et les résultats sont donnés dans la section 3.5.6.

Régions de choc

La figure 7 est une représentation graphique des rapports d'abondance obtenus dans les régions de choc et dans le nuage.

Le premier résultat à noter est que tous les rapports dans les régions de chocs sont différents de plus d'un facteur deux par rapport aux rapports dans le nuage, sauf pour le rapport SO_2/H_2CO.

Les plus grandes variations, jusqu'à un facteur 100, sont celles des rapports avec SiO, ce qui confirme que SiO est la meilleure molécule pour tracer les chocs (Caselli et al., 1997; Schilke et al., 1997; Garay et al., 2002).

Un second résultat important est que l'abondance de SO_2 augmente par rapport à celle de SO dans les chocs E1, W1 et W2 (jusqu'à un facteur 10). Cela confirme également les résultats des modèles qui prédisent que SO_2 est plus produit que SO dans le gaz choqué, par le biais de réactions endothermiques qui transforment la plupart du soufre atomique de la phase gazeuse en SO_2 en des échelles de temps relativement courtes $\sim 10^3$ ans (e.g. Pineau Des Forêts et al., 1993). De façon surprenante, SO_2/SO est petit dans la région de choc E2 qui est maximum en SiO. En comparant les observations de H_2CO et SiO avec les prédictions des modèles, CCLCL01 avait conclu que E2 était un choc ancien. Ceci pourrait également expliquer le faible rapport SO_2/SO parce que SO_2 est supposé être converti en soufre atomique à un stade plus évolué $\geq 3 \times 10^4$ ans (e.g. Hatchell et al., 1998).

Le troisième résultat est le rapport SO_2/H_2CO constant, qui varie de moins d'un facteur 2, dans les régions de choc E1, W1 et W2, et dans le nuage. Le fait que le rapport SO_2/H_2CO ait la même valeur dans toutes les régions de choc et dans le nuage semble être une remarquable coïncidence pour laquelle nous n'avons pas d'explication. En revanche, le rapport SO_2/H_2CO constant dans les régions de choc peut s'expliquer par les échelles de temps de formation et de destruction de ces deux molécules, même si les mécanismes de formation de ces deux molécules dans les régions de choc sont à priori différents. D'un côté, le formaldéhyde est supposé se former à la surface des grains, puis être relaché dans la phase gazeuse par l'érosion des manteaux des grains dans le choc, et finalement être converti en molécules plus complexes par des réactions dans la phase gazeuse en plus de $\sim 3 \times 10^4$ ans (Charnley et al., 1992). SO_2 suit une route totalement différente : il a été proposé que le soufre était relaché dans la phase gazeuse sous une forme qui est transformée en SO puis SO_2 via des réactions neutre-neutre en $\sim 10^3$ ans (cf Charnley, 1997; Wakelam et al., 2004a). Après $\sim 3 \times 10^4$ ans, on s'attend à ce que l'abondance de SO_2 dans la phase gazeuse diminue (Pineau Des Forêts et al., 1993). Ainsi le fait que l'on trouve un rapport SO_2/H_2CO identique dans E1, W1 et W2 pourrait signifier que ces régions de choc possèdent un âge similaire, autour de 10^4 ans si les modèles sont corrects. En revanche, le choc E2 serait plus ancien, $\geq 3 \times 10^4$ ans, et les deux molécules auraient disparu, transformées en soufre atomique et en molécules oxygénées complexes.

Il ressort que l'étude simultanée des variations des abondances de différentes molécules peut donner une première idée de l'âge des régions de choc. Le tableau 7 résume la situation. Le temps indiqué dans ce tableau est arbitraire et dépendant du modèle considéré. La présence simultanée de SO, SO_2, H_2S, H_2CO, et SiO indiquerait des chocs jeunes ($\leq 10^4$ ans), tandis que la présence

TAB. 6: *Rapports d'abondance dans les régions de choc et dans le nuage calculés à partir des densités de colonne du tableau 3. Les références pour les autres flots sont : L1157-B1 et L1157-B2 : Bachiller et Perez Gutierrez (1997); CB3 : Codella et Bachiller (1999); L1448, B1 et CepA : Martin-Pintado et al. (1992); NGC 2071 : Chernin et Masson (1993).*

Région	SO/H_2CO	SO_2/SO	SO_2/H_2CO	H_2S/SO	SiO/SO	SiO/SO_2	SiO/H_2CO
Cloud	28	~ 0.04	1	~ 0.03	$\sim 4 \times 10^{-4}$	0.01	0.01
W2	2.5	0.3	0.8	≤ 9	0.02	0.05	0.04
W1	7	0.1	0.7	≤ 3	6×10^{-3}	0.06	0.04
E1	2	0.5	1.1	≤ 6	0.03	0.06	0.06
E2(LVC)	≥ 4	≤ 0.1	-	≤ 80	0.06	≥ 0.5	≥ 0.2
E2(HVC)	≥ 5	≤ 0.1	-	≤ 150	0.1	≥ 0.9	≥ 0.5
L1157-B1	0.6 - 1	0.6 - 1	0.4 - 1	0.8 - 1.3	0.2 - 0.3	0.3	0.1 - 0.3
L1157-B2	1	1 - 3	1 - 3	0.7 - 2	0.1 - 0.4	0.1	0.1 - 0.4
CB3	-	~ 1	-	≤ 1	$\ll 1$	$\ll 1$	-
L1448	-	-	-	-	0.3	-	-
B1	-	-	-	-	0.1	-	-
CepA	-	-	-	-	0.08	-	-
NGC 2071	-	-	-	-	0.01 - 0.05	-	-

TAB. 7: *Schéma proposé de la formation et destruction des molécules SO, SO_2, H_2S, SiO et H_2CO en fonction du temps. Les temps sont indicatifs et représentent simplement une séquence.* [a] *Injection dans la phase gazeuse des molécules arrachées des grains.*

Temps (ans)	Formation	Destruction
0^a	H_2S, H_2CO, SiH_2, SiH_4	
10^3	SO, SO_2, H_2S, SiO	
3×10^4		SO_2, H_2CO
10^5		SiO

seule d'une émission de SiO signifierait que les chocs sont plus anciens ($\geq 3 \times 10^4$ ans).

La comparaison avec les autres flots moléculaires ne peut être que très approximative mais tout de même illustrative (tableau 6). Le seul flot moléculaire où les abondances des molécules SO, SO_2, SiO et H_2CO ont été mesurées est celui provenant de la protoétoile de faible masse L1157-mm (Bachiller et Perez Gutierrez, 1997). Les rapports avec SiO dans L1157 B1 et B2 sont similaires à ceux de E2, autrement dit ces régions sont enrichies en SiO par rapport aux autre régions de choc de L1689N et par rapport au nuage. Ceci indiquerait que E2, B1 et B2 sont des chocs relativement violents. En revanche, contrairement à ce qui se passe dans E2, H_2CO, SO et SO_2 sont détectés dans L1157 B1 et B2, ce qui voudrait dire que ces chocs sont relativement jeunes (si on se réfère au tableau 7). SO semble sous abondant par rapport à H_2CO et SiO dans B1 et B2 contrairement à ce que l'on voit dans E2, mais aussi dans E1, W1 et W2. En revanche, SO_2 est surabondant. Il est impossible de savoir si cela est dû au fait que B1 et B2 sont des

chocs plus violents qui transforment SO en SO_2 plus rapidement, ou au fait que les chocs dans L1157 ont des âges différents de E1, W1 et W2. Une étude statistique sur un plus grand nombre de flots est nécessaire pour mieux comprendre ce point.

1.2 Observations dans la région IRAS2-NGC1333

1.2.1 Présentation de la région

NGC1333 est un nuage moléculaire situé dans Perseus (d = 120 pc, Cernis, 1990) où la formation stellaire de faible masse est très active (Langer et al., 1996). IRAS2 (source IRAS 03258+3104 du IRAS Point Source Catalogue) est une protoétoile de faible masse, de classe 0, située à la périphérie de ce nuage (Langer et al., 1996). IRAS2 est en fait constitué de trois composantes observables en continuum : IRAS2A, IRAS2B et IRAS2C. Les deux composantes B et C (IRAS2B et IRAS2C) sont respectivement à 30″ au Sud-Est et 30″ au Nord-Ouest de la composante A (IRAS2A) (Looney et al., 2000; Knee et Sandell, 2000). Mais dans la pratique, IRAS2A étant la source la plus généralement étudiée on l'appelle simplement IRAS2 (Sandell et al., 1994). IRAS2 est à l'origine de deux flots bipolaires orientés Nord-Sud et Est-Ouest qui indiquent la possibilité que cette source soit en fait elle même un système binaire non résolu. Le flot orienté Nord-Sud a été identifié lors d'une cartographie à basse résolution angulaire en CO (J= 1 - 0) de cette région par Liseau et al. (1988) (voir aussi Knee et Sandell, 2000, pour une étude détaillée de ce flot). Une cartographie à plus haute résolution de Sandell et al. (1994) a révélé que ce flot était assez large et peu collimaté, ainsi que la présence d'un second flot bipolaire orienté Est-Ouest. Ce flot Est-Ouest est très puissant, hautement collimaté et également très incliné sur la ligne de visée ce qui permet de séparer spatialement les deux lobes du flot (Bachiller et al., 1998).

Le flot Est-Ouest a été étudié grâce à l'émission de plusieurs molécules : CO, SiO, CS et CH_3OH (Liseau et al., 1988; Sandell et al., 1994; Langer et al., 1996; Bachiller et al., 1998; Jørgensen et al., 2004). Grâce à des cartes de haute résolution angulaire de la molécule CH_3OH, Bachiller et al. (1998) ont montré que les deux lobes du flot étaient constitués de différentes bulles de matière ("bullets") probablement éjectées à différents moments (voir figure 8). La partie Est du flot est relativement compacte ($\sim 4''$ à partir des observations CH_3OH) et s'enfonce dans une région plus dense du nuage. La partie Ouest du flot est dirigée vers nous et inclinée sur la ligne de visée de façon à ce que l'on puisse voir la totalité du lobe qui semble se propager sans contraintes. C'est dans cette partie du flot que les "clumps" de matière se voient le mieux. En comparant la vitesse de la matière éjectée avec la distance à la source, Bachiller et al. ont estimé un temps de $\sim 2 \times 10^3$ ans entre l'éjection du premier "clump" (la partie la plus éloignée de

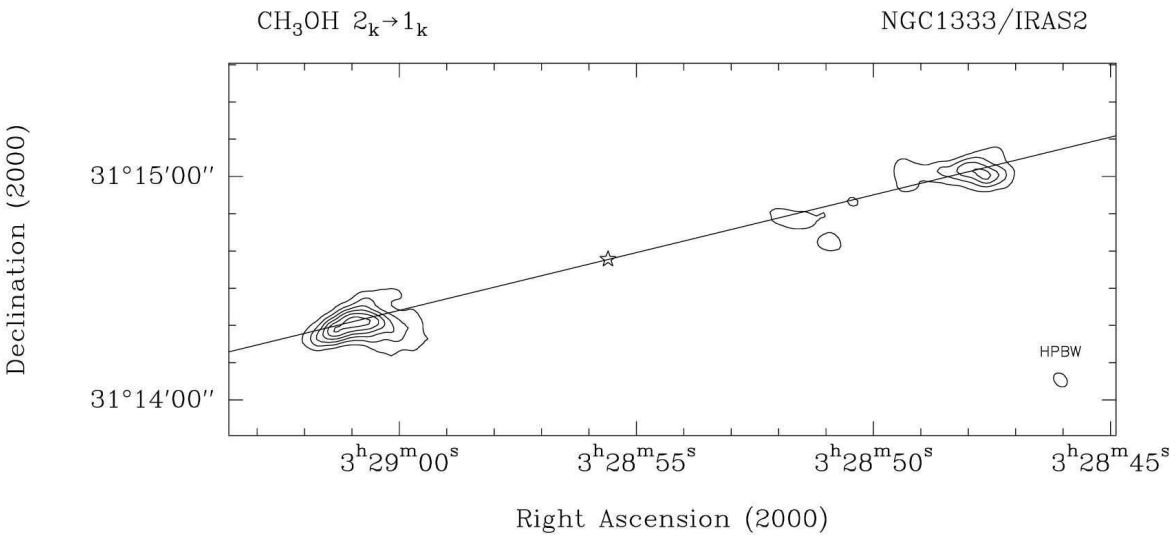

FIG. 8: *Carte de l'émission de CH_3OH $2_k - 1_k$ à haute résolution angulaire dans la region d'IRAS2 et de son flot publiée par Bachiller et al. (1998). Les contours sont entre 4 et 36 Jy km s^{-1}/lobe par pas de 6 Jy km s^{-1}/lobe (63 K km s^{-1}). L'étoile centrale représente la position d'IRAS2. Les contours au Sud-Est de la source proviennent de lémission décalée vers le rouge, alors que les contours au Nord-Ouest sont décalée vers le bleu.*

la source) et l'éjection du dernier (la partie la plus proche). L'âge global du flot est estimé à $\sim (2-5) \times 10^3$ ans avec un âge de l'ordre de 130-400 ans pour le "clump" le plus proche.

Le but de notre étude est de vérifier si une différentiation chimique pouvait être observée et utilisée pour déterminer chimiquement l'âge des différentes composantes du flot. Pour cela, le flot Est-Ouest d'IRAS2 a été cartographié en SO et SO_2 pour calculer les densités de colonne de ces deux molécules le long du flot. Des données complémentaires de CS publiées par Langer et al. (1996) ont été utilisées pour comparer les densités de colonne de CS avec celles de SO et SO_2. Les observations et densités de colonne sont reportées dans les deux sections suivantes. Puis les résultats sont présentés et discutés dans les deux parties suivantes.

1.2.2 Les observations

Les deux principales molécules soufrées SO et SO_2 ont été observées grâce au radiotélescope de 30m de l'IRAM en janvier 1998 pour SO et août 1998 et janvier 1999 pour SO_2. Les transitions observées sont : SO ($3_2 - 2_1$; $2_3 - 1_2$; $4_3 - 3_2$ et $6_5 - 5_4$) et SO_2 ($3_{1,3} - 2_{0,2}$; $10_{1,9} - 10_{0,10}$; $5_{1,5} - 4_{0,4}$ et $5_{2,4} - 4_{1,3}$). Des cartes de la source IRAS2 et de son flot ont été réalisées en utilisant un échantillonage de 12″ avec les aires suivantes : $\Delta\alpha \times \Delta\delta = 228'' \times 96''$ pour SO et $216'' \times 84''$ pour SO_2. Les cartes sont centrées sur la source IRAS2 ($\alpha(2000.0) = 3^h28^{mn}\ 55^s41$, $\delta(2000.0) = 31^0\ 14'\ 35.08''$). Le tableau 8 résume les paramètres des raies (fréquence et énergie) et les

Tab. 8: *Paramètres des transitions observées et du télescope. ν est la fréquence et E_{up}/k l'énergie supérieure de la transition en K. Lobe, B_{eff} et $\Delta\nu$ sont respectivement la taille du lobe, l'efficacité du lobe du télescope et la résolution spectrale des raies.*

Transitions	ν (GHz)	E_{up}/k (K)	Lobe $''$	B_{eff}	$\Delta\nu$ (kHz)
SO $3_2 - 2_1$	99.299	9	24	0.70	40
SO $2_3 - 1_2$	109.252	21	22	0.68	40
SO $4_3 - 3_2$	138.178	16	18	0.56	40
SO $6_5 - 5_4$	219.949	35	11	0.41	80
SO_2 $3_{1,3} - 2_{0,2}$	104.029	8	24	0.69	40
SO_2 $10_{1,9} - 10_{0,10}$	104.239	55	24	0.69	40
SO_2 $5_{1,5} - 4_{0,4}$	135.696	16	19	0.56	40
SO_2 $5_{2,4} - 4_{1,3}$	241.615	24	11	0.39	80

paramètres du télescope (le lobe, l'efficacité du lobe et la résolution spectrale) pour chaque raie. La résolution spatiale de tous les spectres a été dégradée à la plus grande résolution de 24$''$ pour pouvoir comparer les spectres entre eux (voir section B.1.3).

1.2.3 Résultats

La figure 9 montre les contours d'intensité intégrée de deux transitions des molécules suivantes SO ($3_2 - 2_1$ et $4_3 - 3_2$), SO_2 ($3_{1,3} - 2_{0,2}$ et $5_{1,5} - 4_{0,4}$) et CS (2 - 1 et 3 - 2) (voir Langer et al., 1996, pour les observations de CS). Sur ces cartes, "E" (offset 72$''$, -12$''$), "W1" (-60$''$, 12$''$) et "W2" (-96$''$, 24$''$) désignent les positions des maximums d'intensité dans les lobes Est et Ouest du flot. La figure 10 présente les spectres dégradés à la même résolution spatiale de toutes les transitions de SO et SO_2, ainsi que deux transitions de CS (2 - 1 et 3 - 2), observées sur la position de la protoétoile et sur les trois régions de choc E, W1 et W2.

Les spectres de la partie Ouest du flot (W1 et W2) sont composés de deux raies : une raie étroite à la vitesse du nuage, uniquement vue en SO et CS, dont l'amplitude décroit avec l'énergie de la transition et que nous appellerons AC pour "Ambient Component", et une composante haute vitesse que nous appellerons HVC pour "High Velocity Component". La composante HVC représente le gaz mis en mouvement et comprimé par l'onde de choc provenant de la protoétoile. La vitesse de cette composante choquée augmente lorsque l'on s'éloigne de la source. Dans la partie Est du flot, les spectres présentent une aile décalée vers le rouge qui n'est pas séparée de la composante ambiante. Les caractéristiques de ces raies sont résumées dans le tableau 9. Pour déterminer les paramètres des raies de W1 et W2, j'ai utilisé deux gaussiennes étant donné que les deux composantes ont une forme gaussienne et sont clairement séparées. Pour les spectres de E, j'ai utilisé une gaussienne de largeur 1 km s^{-1} centrée sur la vitesse du nuage pour

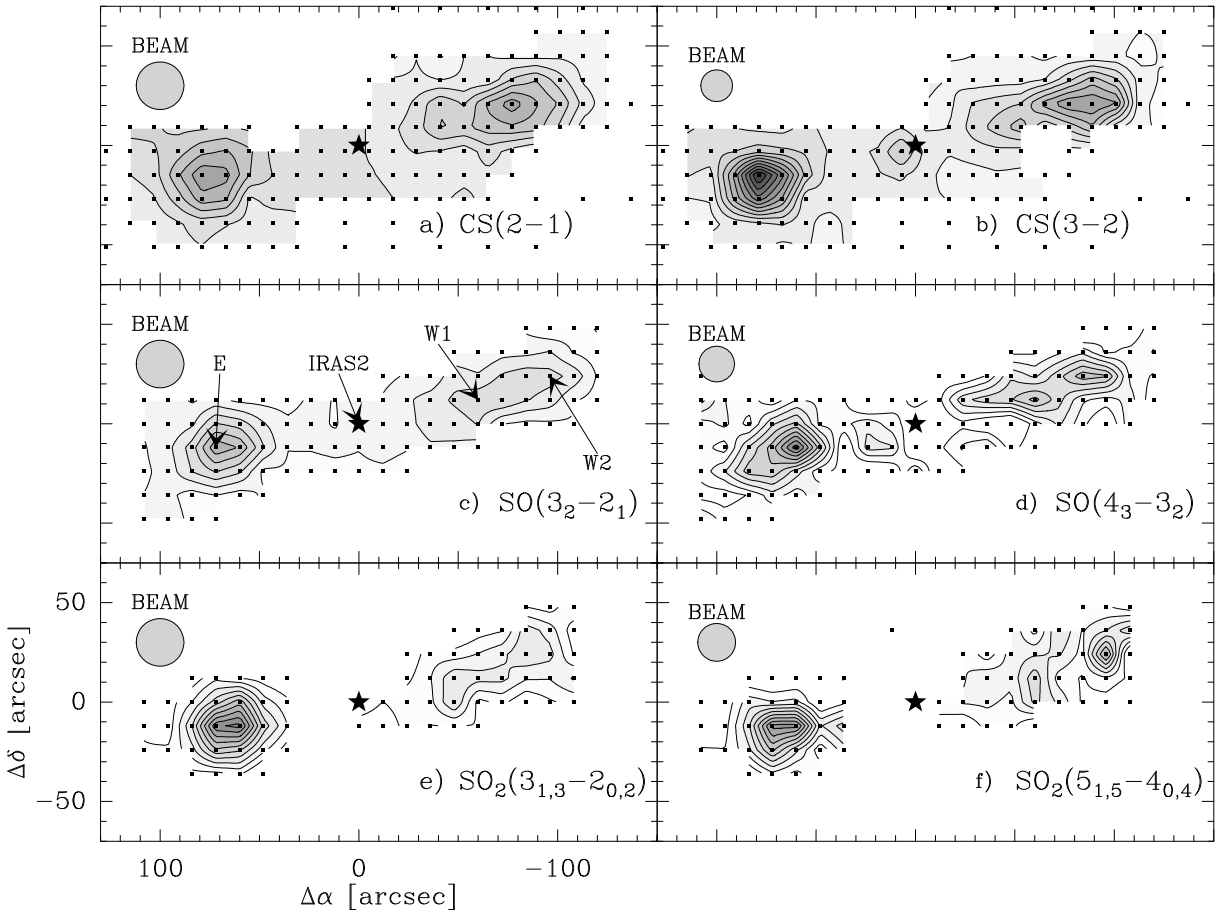

FIG. 9: *Cartes d'intensité intégrée des transitions de CS* $2-1$ *(a), CS* $3-2$ *(b), SO* 3_2-2_1 *(c), SO* 4_3-3_2 *(d),* SO_2 $3_{1,3}-2_{0,2}$ *(e) et* SO_2 $5_{1,5}-4_{0,4}$ *(f). (a), (b), (c) et (d) : le premier contour est à 0.5 K km* s^{-1} *avec un intervalle de 2.5 K km* s^{-1} *entre chaque contour. (e) et (f): le premier contour est à 0.2 K km* s^{-1} *avec un intervalle de 0.3 K km* s^{-1} *entre chaque contour. Les données de CS ont été publiées par Langer et al. (1996) et les données SO et* SO_2 *proviennent de ce travail. Sur chaque carte, les points noirs représentent la position des spectres observés. L'étoile représente la position de la source IRAS2. Les fléches indiquent les positions des spectres de la figure 10.*

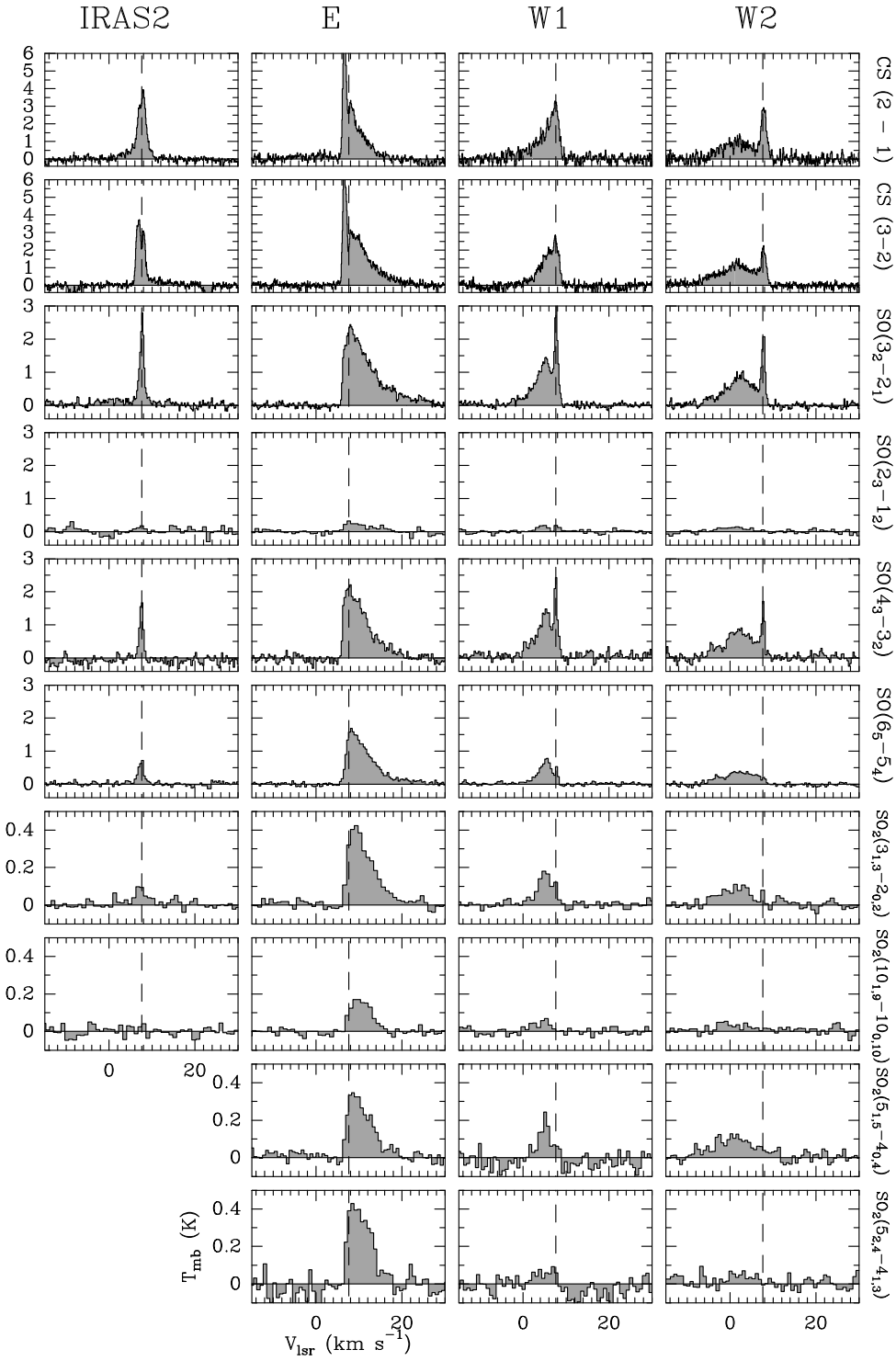

Fig. 10: *Spectres de toutes les transitions de SO et SO_2 observées sur la protoétoile IRAS2, à la position E de la partie Est du flot et aux positions W1 et W2 du lobe Ouest du flot. Les spectres des transitions 2 - 1 et 3 - 2 de CS obtenus par Langer et al. (1996) sont reportés ici pour comparaison. Tous les spectres ont été dégradés au plus grand lobe d'observation* $24''$. *Les spectres des transitions SO_2* $5_{1,5} - 4_{0,4}$ *et* $5_{2,4} - 4_{1,3}$ *dans IRAS2 ne sont pas représentés parce qu'ils n'ont pas pu être spatialement dégradés. La ligne pointillée verticale sur chaque spectre représente la vitesse systémique du nuage (v_{LSR} = 7.6 km s^{-1}).*

Tab. 9: *Résumé des caractéristiques des raies dégradées à la même résolution spatiale de 24″ dans les différentes régions sélectionnées (voir Fig. 10). T_{MB} est l'intensité de la raie en K, Δv la largeur en km s^{-1} et $\int T_{MB}\delta v$ l'intensité intégrée en K km s^{-1}. Les composantes ambiantes (AC) et haute vitesse (HVC) sont sont traitées séparément (voir section 1.2.2).*

		IRAS2	E(AC)	E(HVC)	W1 (AC)	W1 (HVC)	W1 (AC)	W2 (HVC)
	$\Delta\alpha$, $\Delta\delta$ (″)	0, 0	72, -12	72, -12	-60, 12	-60, 12	-96, 24	-96, 24
SO $3_2 - 2_1$	T_{MB}	2.4±0.09	2.39±0.07	2.02±0.07	2.7±0.08	1.4±0.08	2.0±0.08	0.9±0.08
	Δv	1.1±0.03	1.1	5.0±0.5	1.1±0.09	3.2±0.2	1.1±0.09	7.2±0.2
	$\int T_{MB}\delta v$	3.5±0.6	3.6±0.6	14.3±2.3	3.1±0.5	6.1±1.1	1.9±0.3	7.1±1.2
SO $2_3 - 1_2$	T_{MB}	≤0.3	-	0.24±0.07	0.31±0.05	0.20±0.05	≤0.15	0.15±0.05
	Δv	-	-	7.7±1.3	0.8±1.9	2.8±0.6	-	8.3±1.6
	$\int T_{MB}\delta v$	≤0.6	-	2.0±0.7	0.3±0.1	0.6±0.2	≤0.3	1.2±0.4
SO $4_3 - 3_2$	T_{MB}	1.8±0.1	2.2±0.1	1.8±0.1	2.6±0.2	1.5±0.2	1.7±0.2	0.8±0.2
	Δv	1.04±0.06	1	6.5±0.2	0.89±0.06	2.7±0.3	0.8±0.1	7.6±0.3
	$\int T_{MB}\delta v$	1.9±0.4	2.3±0.4	11.3±1.9	2.7±0.5	5.6±1.0	2.0±0.4	6.4±1.2
SO $6_5 - 5_4$	T_{MB}	0.69±0.08	1.7±0.1	1.2±0.1	0.56±0.05	0.77±0.05	0.24±0.06	0.38±0.06
	Δv	1.5±0.1	1	7.1±0.2	0.8±0.1	2.7±0.2	1	8.9±0.4
	$\int T_{MB}\delta v$	1.2±0.3	2.4±0.3	8.3±1.4	0.44±0.09	2.6±0.5	0.26±0.09	3.6±0.7
SO_2 $3_{1,3} - 2_{0,2}$	T_{MB}	0.09±0.02	-	0.44±0.02	≤0.06	0.17±0.02	≤0.06	0.09±0.02
	Δv	2.4±0.7	-	4.6±0.4	-	4.3±0.3	-	9.7±1.1
	$\int T_{MB}\delta v$	0.23±0.09	-	2.8±0.5	≤0.09	0.8±0.2	≤0.07	1.0±0.2
SO_2 $10_{1,9} - 10_{0,10}$	T_{MB}	≤0.06	-	0.18±0.2	≤0.05	0.06±0.02	≤0.6	≤0.6
	Δv	-	-	5.4±0.3	-	5.2±0.9	-	-
	$\int T_{MB}\delta v$	≤0.2	-	2.8±0.5	≤0.07	0.25±0.09	≤0.06	≤0.2
SO_2 $5_{1,5} - 4_{0,4}$	T_{MB}	-	-	0.34±0.02	≤0.1	0.23±0.04	≤0.07	0.11±0.02
	Δv	-	-	5.1±0.4	-	2.6±0.4	-	12.3±1.0
	$\int T_{MB}\delta v$	-	-	2.2±0.4	≤0.2	0.7±0.2	≤0.08	1.3±0.3
SO_2 $5_{2,4} - 4_{1,3}$	T_{MB}	-	-	0.23±0.02	≤0.09	≤0.09	≤0.07	≤0.07
	Δv	-	-	6.2±0.3	-	-	-	-
	$\int T_{MB}\delta v$	-	-	1.2±0.2	≤0.1	≤0.2	≤0.07	≤0.3

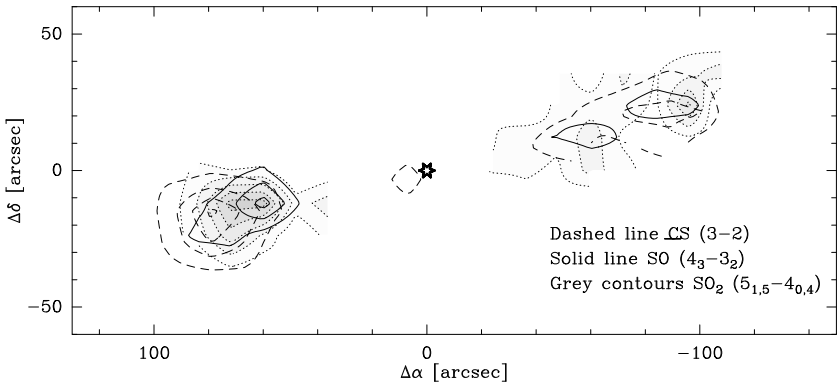

Fig. 11: *Superposition des contours d'intensité intégrée de CS* $3-2$*, SO* 4_3-3_2 *et* SO_2 $5_{1,5}-4_{0,4}$ *présentés à la figure 9. La résolution spatiale est similaire pour les trois transitions* $\sim 20''$.

obtenir l'émission du gaz ambiant. Le reste du spectre, après avoir retiré l'émission ambiante, constitue la composante choquée (voir section B.1.4 pour plus de détails sur la façon de déduire les paramètres).

Pour comparer l'émission des trois molécules soufrées (SO, SO_2 et CS), j'ai reporté les contours d'intensité intégrée d'une transition de chaque molécule sur une même carte donnée à la figure 11.

1.2.4 Calcul des densités de colonne

Pour calculer les densités de colonne de SO et SO_2 dans les différentes régions, j'ai utilisé dans un premier temps l'approximation ETL par le biais de diagrammes rotationnels. Dans une deuxième étape, j'ai fait une étude hors ETL à la fois des conditions d'excitations et des densités de colonne de SO et SO_2 en utilisant un modèle LVG. Pour CS, j'ai directement déduit les densités de colonne en utilisant le modèle LVG avec les températures et densités obtenues à partir de l'émission de SO.

Densités de colonne de SO et SO_2 : approche à l'ETL

A partir des intensités intégrées des quatre transitions observées de SO et SO_2, j'ai construit les diagrammes rotationnels de ces deux molécules dans les régions de choc E, W1 et W2 et sur la position de la source IRAS2 (voir figure 12). J'ai traité séparément les composantes AC et HVC des spectres du lobe Ouest. En revanche, pour SO_2, je n'ai pas pu faire cette étude sur la source ni dans les régions AC du flot Ouest car le nombre de raies détectées dans ces régions n'est pas suffisant (voir Table 9). Pour estimer la densité de colonne de SO_2 sur la source, j'ai utilisé la seule raie détectée (SO_2 $3_{1,3} - 2_{0,2}$) avec l'équation 44 (section B.2.3), en supposant

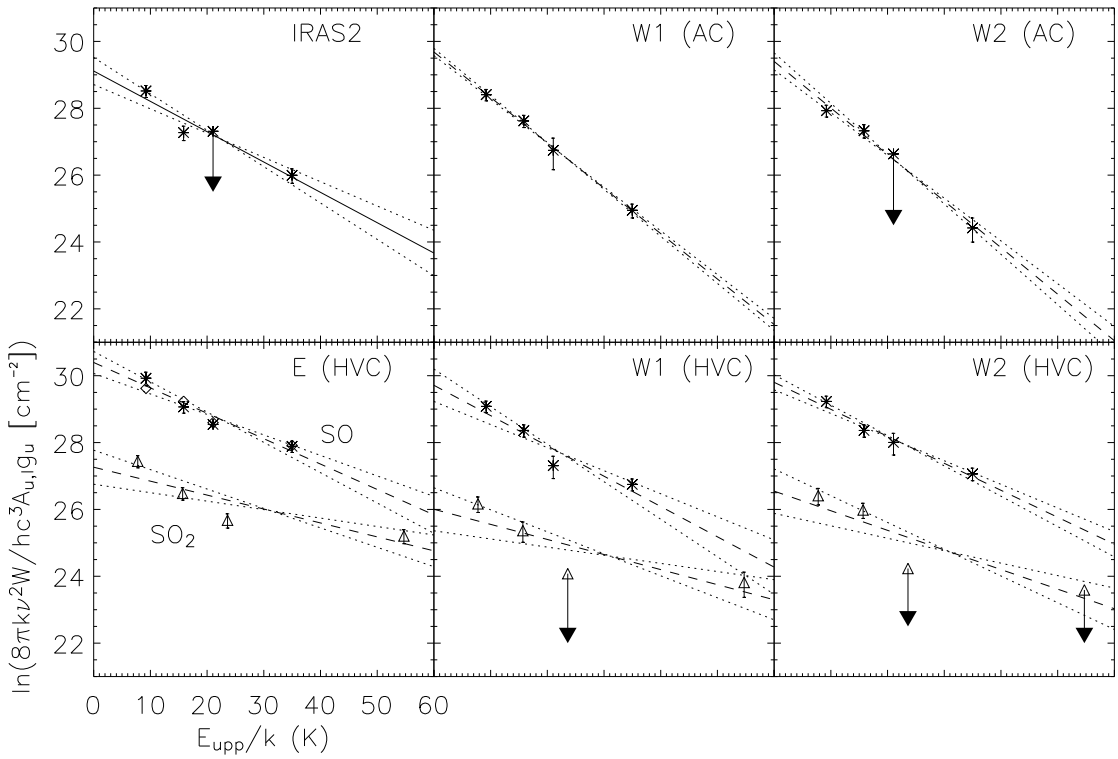

FIG. 12: *Diagrammes rotationnels des molécules SO et SO_2 dans la direction d'IRAS2 et des régions de choc E, W1 et W2. Dans W1 et W2, j'ai construit séparément les diagrammes pour les composantes AC et HVC : W1(AC), W1(HVC), W2(AC) et W2(HVC) tandis que pour E, j'ai construit uniquement la composante HVC. Les étoiles et les triangles correspondent aux données observées de SO et SO_2 respectivement.*

TAB. 10: *Températures rotationnelles et densités de colonne de SO et SO_2 calculées à partir des diagrammes rotationnels de la figure 12. La densité de colonne de SO_2 dans IRAS2 a été calculée à partir de la seule transition détectée, par la formule 44, en supposant une température d'excitation de 20 K et l'ETL.*

	SO		SO_2	
	T_{rot}(K)	$N_{SO}(10^{14}\mathrm{cm}^{-2})$	T_{rot}(K)	$N_{SO_2}(10^{13}\mathrm{cm}^{-2})$
IRAS2	11 ± 3	0.9 ± 0.01	-	1.0 ± 0.1
E (HVC)	13 ± 3	4.0 ± 0.4	28 ± 11	10 ± 1
W1(AC)	7.3 ± 0.2	0.8 ± 0.04	-	-
W1(HVC)	11.7±2.8	1.6±0.2	28.1±12.9	2.8±0.2
W2(AC)	7.2 ± 0.6	0.6 ± 0.07	-	-
W2(HVC)	12.5±1.6	2.6±0.1	19.6±7.1	3.2±0.3

une température d'excitation de 20 K et l'ETL. Les températures rotationnelles ainsi que les densités de colonne obtenues à partir de ces diagrammes sont reportées dans le Tableau 10.

Les températures rotationnelles obtenues ici sont faibles même dans la composante choquée du flot Ouest : $\leq$ 16 K pour SO et $\leq$ 41 K pour SO_2. Dans cette région, une forte émission de NH_3 (3,3) a été détectée dans les deux lobes du flot, ce qui indiquerait une température cinétique du gaz supérieure à 60 K (Bachiller et al., 1998), bien au dessus des températures rotationnnelles obtenues avec SO et SO_2. En fait, Sandell et al. (1994) et Bachiller et al. (1998) ont trouvé des températures rotationnelles similaires de l'ordre de 7 K et 13 K dans le gaz choqué en utilisant des observations de CH_3OH. Pour expliquer ce résultat, Sandell et al. (1994) ont d'abord suggéré que ce flot était le premier exemple de choc froid. Cette idée a été abandonnée et Bachiller et al. (1998) ont démontré que les conditions d'excitation de la molécule CH_3OH n'atteignaient pas l'ETL dans le flot d'IRAS2. Dans ce cas, les niveaux de haute énergie de cette molécule ne sont pas peuplés suivant la distribution de Boltzmann et la température rotationnelle est plus petite que la température cinétique du gaz. CH_3OH est une molécule possédant de nombreux niveaux d'énergie vibrationnelle et Bachiller et al. (1998) ont montré, à l'aide d'un modèle LVG, que cette explication était plausible. En revanche, SO et SO_2 sont des molécules plus simples et il est surprenant d'obtenir également des températures rotationnelles aussi basses.

En supposant que la température du gaz dans les chocs est effectivement plus grande que celles obtenues avec les diagrammes rotationnels, deux phénomènes peuvent expliquer les faibles températures rotationnelles : la sous population des niveaux d'énergie et l'épaisseur optique des raies. Pour déterminer l'explication la plus probable, j'ai modélisé l'excitation de SO et SO_2 à l'aide d'un modèle LVG sur le même principe que Bachiller et al. (1998). Cette étude démontre que la densité du gaz choqué n'était probablement pas suffisante pour permettre à ces deux molécules d'atteindre l'ETL tandis que l'explication de l'épaisseur optique est peu vraisemblable. Dans ce cas, l'erreur sur la densité de colonne calculée à l'ETL doit être de moins d'un facteur 2 pour SO et moins d'un facteur 6 pour SO_2. Si la densité du gaz est comprise entre 10^5 et 10^6 cm^{-3}, l'erreur pour SO est proche de 0 et celle de N_{SO_2} est d'un facteur 3. J'ai reporté en annexe C cette démonstration.

Densités de colonne de SO et SO_2 : approche hors ETL

Les densités de colonne de SO et SO_2 calculées à partir des diagrammes rotationnels sont relativement correctes (voir annexe C). Pour le vérifier, j'ai utilisé une autre méthode qui consiste à directement comparer les flux observés de chaque transition avec les résultats du modèle LVG en faisant varier à la fois la densité de colonne de chacune des molécules, la densité de H_2 et la

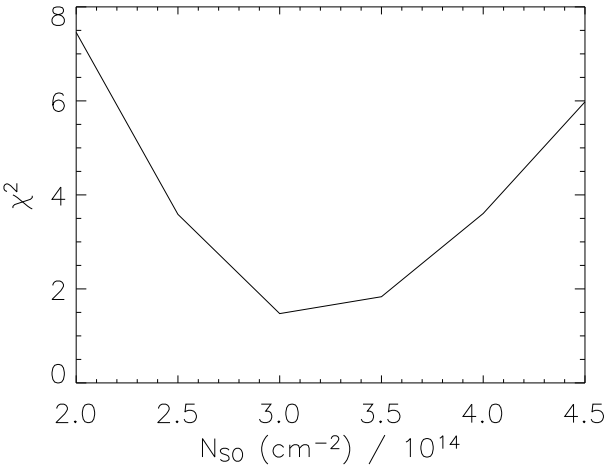

FIG. 13: *Exemple de χ^2 en fonction de la densité de colonne de SO. Le χ^2 minimum contraint la densité de colonne de SO à être 3×10^{14} dans l'exemple montré ici.*

température cinétique. La comparaison est faite en calculant le χ^2 :

$$\chi^2 = \frac{1}{N-2} \sum_{1}^{N} \frac{(F_{Observes} - F_{Modelises})^2}{\sigma^2}$$

N étant le nombre de transitions observées et σ l'erreur sur les flux observés. La densité de colonne est contrainte en minimisant la valeur de ce χ^2 pour toutes les valeurs de la température et de la densité (voir figure 13). Puis pour cette densité de colonne, le contour de χ^2 à 3σ (soit 99% de confiance) est tracé en fonction de T_k et n_{H_2}. J'ai fait varier la densité de colonne de SO et SO_2 entre 10^{13} et 10^{17} cm^{-2}, la température entre 10 et 200 K et la densité de H_2 entre 10^4 et 10^7 cm^{-3}. Cette étude a été faite dans quatre positions du lobe Est et cinq positions du lobe Ouest, qui incluent les points E, W1 et W2 discutés dans les sections précédentes. Les densités de colonne de SO et SO_2 déduites par cette méthode ainsi que les rapports SO_2/SO sont reportés dans le tableau 11. Les contours du χ^2 en fonction de T_k et n_{H_2} pour les différentes positions des lobes Est et Ouest sont montrés sur la figure 14. Les contraintes obtenues à partir des contours de χ^2 sur les conditions physiques pour chacune des molécules sont données dans le tableau 12.

Densité de colonne de CS

Pour compléter cette étude, j'ai calculé les densités de colonne de CS en utilisant les données de la transition $2-1$ publiées par Langer et al. (1996). Pour cela, j'ai utilisé le modèle LVG avec les températures et les densités reportées dans le tableau 12 et contraintes par l'émission

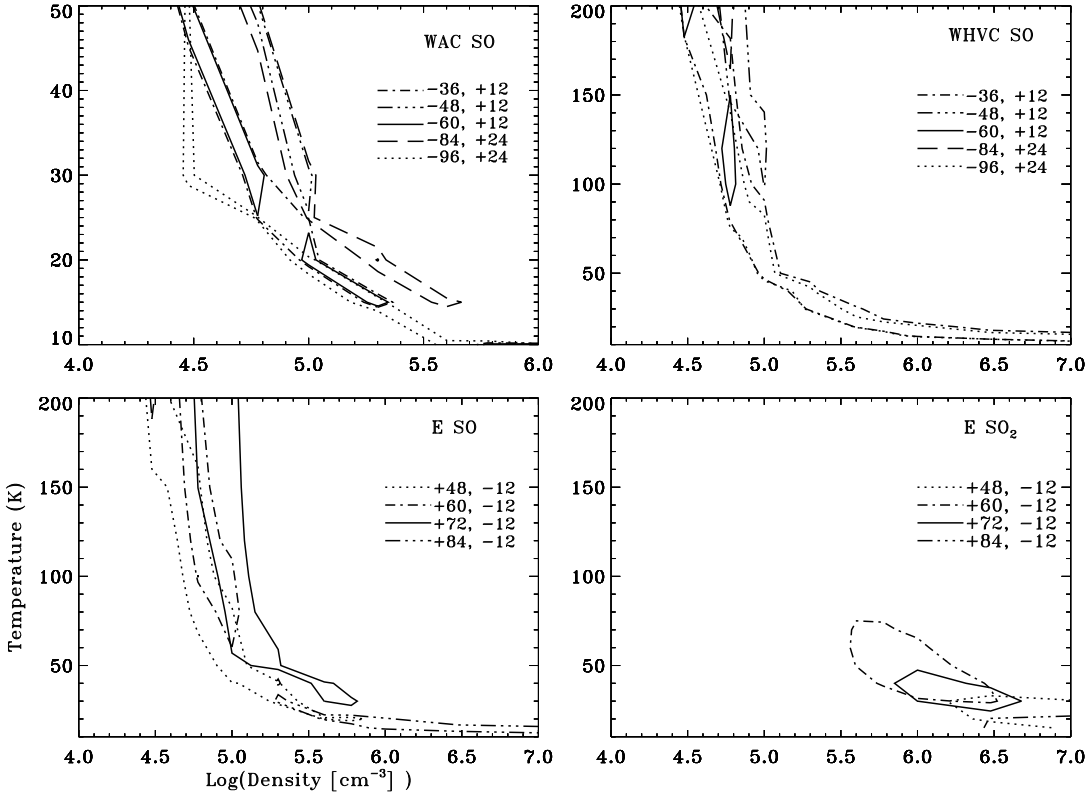

Fig. 14: *Contours du χ^2 à 3 σ en fonction de la densité et de la température du gaz. Les quatre graphiques représentent la composante AC et HVC des différents points de mesure du lobe Ouest pour la molécule SO (partie du haut) et la composante HVC du lobe Est pour SO et SO_2 (partie du bas). Chaque courbe représente le χ^2 pour une position dans le flot. L'étude de χ^2 de SO_2 n'a pas pu être faite dans le lobe Ouest ni dans la composante AC du lobe Est par manque de transitions détectées.*

TAB. 11: *Densités de colonne de SO, SO_2 et CS et rapports SO_2/SO et CS/SO dans différentes positions des lobes Est et Ouest ainsi que sur la position de la source IRAS2. Les densités de colonne de SO et SO_2 dans IRAS2 ont été estimées à l'ETL (tableau 10). Dans les flots, elles ont été calculées hors ETL en minimisant le χ^2 (section 1.2.4). Enfin, toutes les densités de colonne de CS a été déterminée à l'aide d'un modèle LVG en supposant les conditions de températures et de densités dérivées de l'émission de SO (voir tableau 12). AC et HVC font références aux composantes ambiantes et hautes vitesses. L'incertitude sur les rapports est estimée à 60% et toutes les densités de colonne sont calculées sur un lobe de $24''$.*

$\Delta\alpha$, $\Delta\delta$ (")	N_{SO} (10^{14})	N_{SO_2} (10^{13})	N_{CS} (10^{13})	SO_2/SO	CS/SO
0 0 (IRAS2)	0.8	1.0	2.6	0.1	0.3
48 -12 (HVC)	1.5	2.5	0.4	0.2	0.03
60 -12 (HVC)	3.0	7.0	1.2	0.2	0.04
72 -12 (HVC)	3.5	7.0	2.6	0.2	0.07
84 -12 (HVC)	2.0	2.0	1.8	0.1	0.09
-36 12 (AC)	0.9	≤ 0.3	4.1	≤ 0.03	0.4
-36 12 (HVC)	1.0	2.0	1.0	0.2	0.1
-48 12 (AC)	0.6	≤ 0.3	2.5	≤ 0.05	0.4
-48 12 (HVC)	1.0	2.0	2.0	0.2	0.2
-60 12 (AC)	0.9	≤ 0.4	2.4	≤ 0.04	0.3
-60 12 (HVC)	1.5	2.5	2.5	0.2	0.2
-84 24 (AC)	0.6	≤ 0.3	1.6	≤ 0.05	0.3
-84 24 (HVC)	1.5	2.5	4.3	0.2	0.3
-96 24 (AC)	0.7	≤ 0.3	1.7	≤ 0.04	0.2
-96 24 (HVC)	2.0	6.5	2.9	0.3	0.1

de SO. Les densités de colonne de CS sont similaires dans toutes les régions où le calcul a été fait ($\sim 1 \times 10^{13} - 3 \times 10^{13}$ cm $^{-2}$) sauf aux positions terminales des chocs. Dans ces régions, les densités de colonne sont multipliées par 2. Les densités de colonne de CS sont résumés dans le tableau 11.

Rapports d'abondance

Etant donné que la densité de colonne de H_2 est difficile à déterminer dans les régions de choc (voir section 1.1.5), nous ferons uniquement l'étude des rapports d'abondance SO_2/SO et CS/SO dans les différentes régions. Ces rapports d'abondance sont reportés dans le tableau 11. Ces rapports sont tracés en fonction de la distance des positions mesurées à la protoétoile sur la figure 15 (distance projetée sur le plan du ciel : $d = \sqrt{(\Delta\alpha)^2 + (\Delta\delta)^2}$). L'incertitude sur les rapports est de l'ordre de 60%.

Les rapports SO_2/SO sont similaires dans le gaz choqué des deux parties du flot et diminuent d'un ordre de grandeur dans le gaz froid. En revanche, les rapports CS/SO sont similaires dans

Tab. 12: *Températures et densités du gaz calculées à partir de l'émission de SO et SO_2 et en utilisant la méthode de χ^2 dans les différentes positions du flot et sur la source IRAS2. Dans les deux dernières colonnes sont reportées les températures et densités utilisées pour dériver les densités de colonne de CS.*

	SO		SO_2		Adoptees pour CS	
$\Delta\alpha$, $\Delta\delta$ ($''$)	T (K)	n (cm^{-3})	T (K)	n (cm^{-3})	T (K)	n (cm^{-3})
0 0 (IRAS2)	-	$\geq 2 \times 10^4$	-	-	20	10^5
48 -12	≥ 20	3×10^4 - 6×10^5	≤ 30	$\geq 2 \times 10^6$	100	6.3×10^4
60 -12	≥ 60	4.5×10^4 - 1×10^5	30-70	3.5×10^5 - 3×10^6	100	8×10^4
72 -12	≥ 30	5.5×10^4 - 6×10^5	25-50	7×10^5 - 5×10^6	100	10^5
84 -12	≤ 30	$\geq 2 \times 10^5$	≤ 20	$\geq 2.5 \times 10^6$	20	6.3×10^5
-36 12 (AC)	-	$(2.1 \pm 1.8) \times 10^5$	-	-	20	10^5
-36 12 (HVC)	-	$\geq 2.5 \times 10^4$	-	-	100	6.3×10^4
-48 12 (AC)	-	$(2.1 \pm 1.8) \times 10^5$	-	-	30	10^5
-48 12 (HVC)	≥ 100	4×10^4 - 1×10^5	-	-	100	10^5
-60 12 (AC)	-	$(2.1 \pm 1.8) \times 10^5$	-	-	20	10^5
-60 12 (HVC)	90-150	4×10^4 - 1×10^5	-	-	100	6.3×10^4
-84 24 (AC)	-	$(2.1 \pm 1.8) \times 10^5$	-	-	20	1.6×10^5
-84 24 (HVC)	≥ 160	4×10^4 - 1×10^5	-	-	170	6.3×10^4
-96 24 (AC)	-	$(2.1 \pm 1.8) \times 10^5$	-	-	20	10^5
-96 24 (HVC)	-	$\geq 2.5 \times 10^4$	-	-	100	6.3×10^4

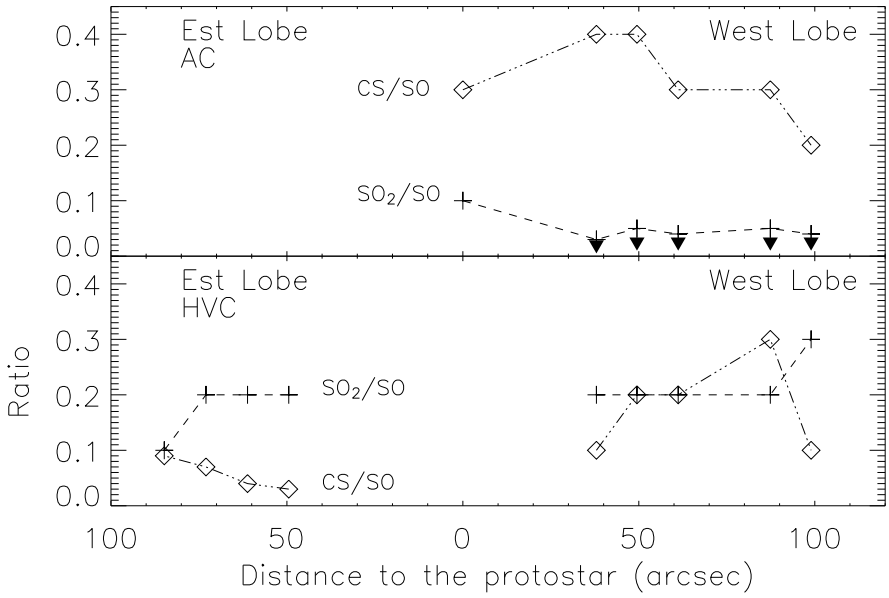

Fig. 15: *Rapports d'abondance SO_2/SO et CS/SO résumés dans le tableau 11 en fonction de la distance à la protoétoile du point observé. Le graphique du haut représente les rapports de la composante ambiante (AC) du lobe Ouest (les rapports SO_2/SO y sont des limites supérieures). Les rapports des composantes choqués (HVC) Est et Ouest sont dans le graphique du bas.*

TAB. 13: *Rapports d'abondance SO_2/SO et CS/SO calculés par NAHOON pour les températures et densités du gaz reportées dans la première ligne pour un temps d'intégration de* 10^7 *ans.*

T (K), n(H_2)	10, 10^5	10, 10^6	20, 10^5	20, 10^6
SO_2/SO	0.03	0.01	0.04	0.02
CS/SO	0.1	0.4	0.1	0.3

le gaz choqué et ambiant du lobe Ouest tandis qu'il diminue dans le gaz choqué du lobe Est.

1.2.5 Modelisation chimique

Pour comprendre les rapports SO_2/SO et CS/SO observés le long des deux parties du flot, à la fois dans le gaz froid (nuage moléculaire) et choqué, nous avons utilisé le modèle chimique NAHOON décrit au chapitre 3. Ce modèle chimique est pseudo-dépendant du temps dans la mesure où l'évolution chimique est calculée en fonction du temps mais la température et la densité du gaz sont fixes.

Gaz froid

Pour modéliser la chimie du gaz froid formant la composante ambiante des spectres, les abondances initiales (/H_2) suivantes ont été utilisées : He (0.28, Wilson et Rood, 1994), O (6.5×10^{-4}, Cardelli et al., 1996), C^+ (2.8×10^{-4}, Meyer et al., 1998) et S^+ (1.0×10^{-6}, Sofia et al., 1994). L'abondance initiale de soufre élémentaire est 30 fois plus faible que l'abondance cosmique de S afin de reproduire au mieux les abondances de molécules soufrées observées dans les nuages moléculaires (voir section 3.4.1 et Comp. A section 3.4.2). La température et la densité du gaz sont les paramètres que j'ai fait varier entre 10 et 20 K et entre 10^5 et 10^6 cm^{-3}. Les résultats de cette modélisation sont donnés dans le tableau 13 pour un temps d'intégration de 10^7 ans qui donne le meilleur accord entre les abondances observées et le modèle.

Régions de choc

Pour modéliser la chimie dans les régions de choc, les conditions initiales sont supposées être celles du nuage moléculaire précédant l'évaporation des manteaux. Nous avons utilisé la composition initiale en phase gazeuse A décrite à la section 3.4.2. L'instant initial de l'intégration ($t = 0$) correspond à l'évaporation des manteaux des grains dans le gaz. Pour les molécules autres que les molécules soufrées, les espèces évaporées, de même que leurs abondances, sont celles observées dans les glaces dans l'environnement de protoétoiles massives (voir tableau 21 de la section 3.5.1). Pour la composition des molécules soufrées contenues les manteaux des

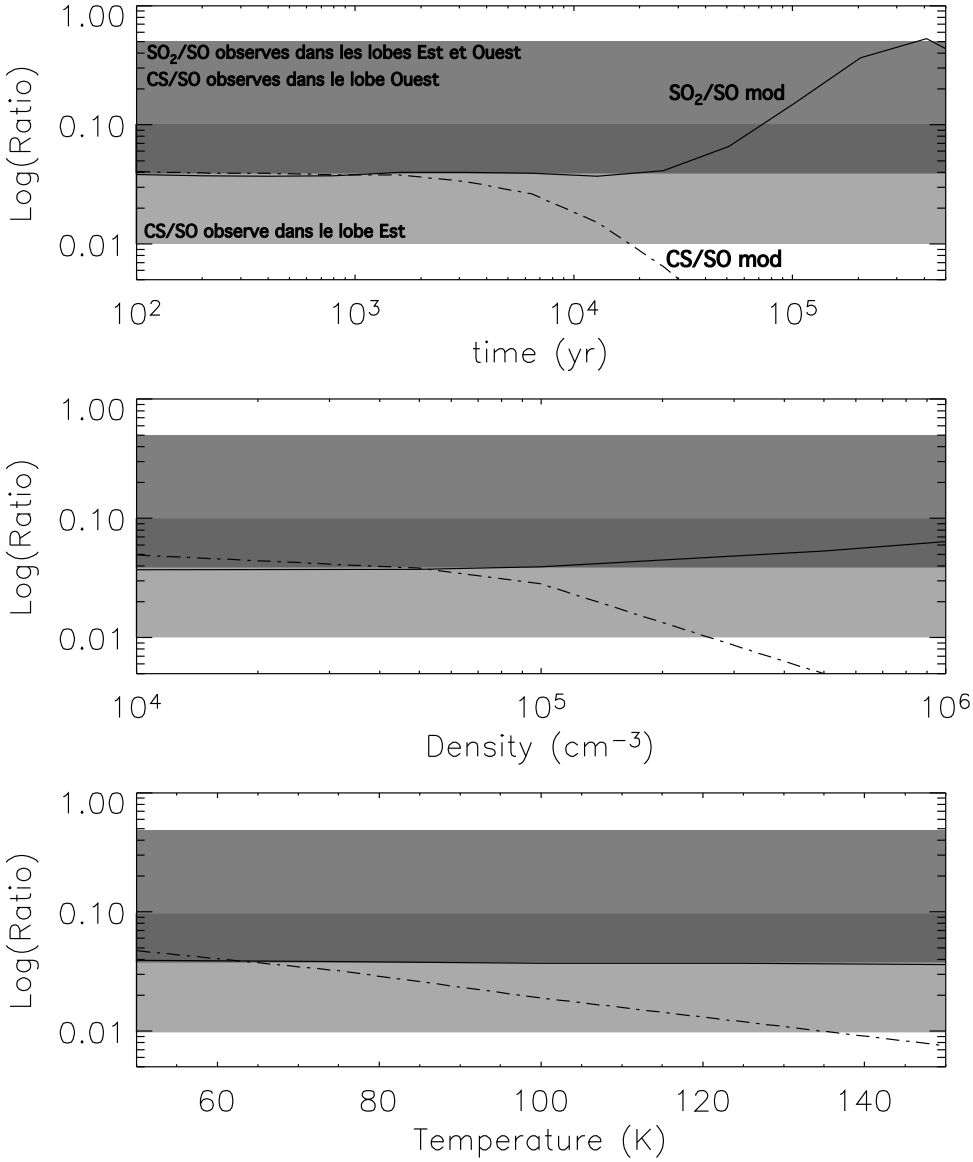

Fig. 16: *Rapports d'abondance théoriques SO_2/SO et CS/SO calculés par NAHOON (voir section 3) en fonction de trois paramètres : le temps (graphique du haut), la densité de H_2 (graphique du milieu) et la température (graphique du bas). Pour le graphique du haut, l'évolution temporelle est considérée pour une température de 70 K, une densité de 6×10^4 cm^{-3}. Au milieu, le paramètre que l'on fait varier est la densité de H_2, la température étant de 70 K et le temps d'intégration de 800 ans. Enfin dans le graphique du bas, le paramètre étudié est la température pour une densité de 6×10^4 cm^{-3} et le temps d'intégration de 800 ans. Pour tous ces graphiques, la quantité initiale de soufre évaporée est de 10^{-7}. Les deux bandes grises représentent les valeurs des rapports observés dans le gaz choqué des lobes Est et Ouest du flot d'IRAS2. La bande grise plus sombre correspond à la superposition des valeurs observées. L'intervalle des valeurs observées est estimé à partir des rapports maximum et minimum dans les différents lobes et en prenant en compte l'erreur estimée de 60%.*

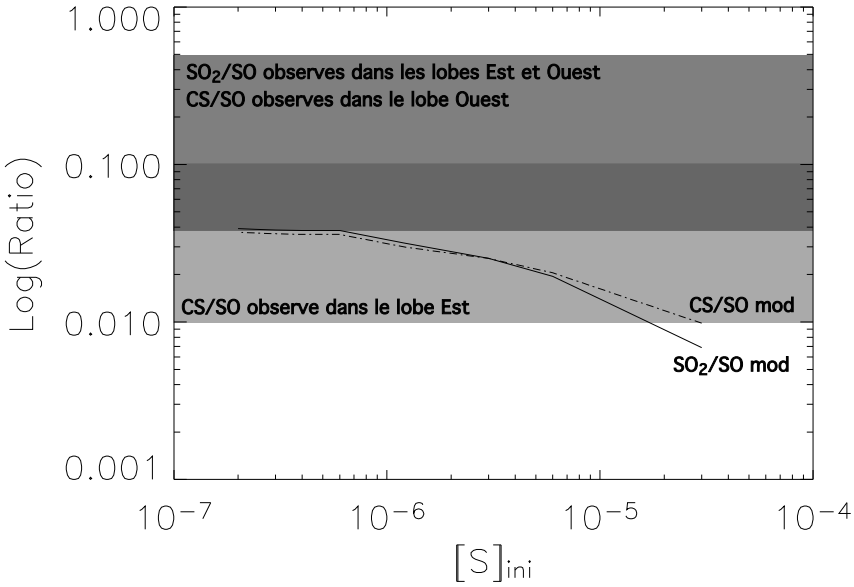

FIG. 17: *Rapports d'abondance théoriques SO_2/SO et CS/SO calculés par NAHOON (voir section 3) en fonction de la quantité de soufre atomique évaporée dans la phase gazeuse à l'instant $t = 0$. La température est de 70 K, la densité de 6×10^4 cm^{-3} et le temps d'intégration de 800 ans.*

grains, j'utilise les résultats présentés à la section 3.5.6 obtenus grâce à la comparaison entre les prédictions du modèle et les observations dans le cœur chaud d'IRAS16293. Ces observations sont en accord avec un modèle dans lequel le soufre s'évapore sous la forme de H_2S, OCS et de soufre atomique (modèle 2 du tableau 22 de la section 3.5.1). Dans les régions de choc, l'évaporation des manteaux se fait par des processus d'érosion plutôt que par effet thermique. Par conséquent, il est possible que la totalité des manteaux ne soient pas évaporés dans la phase gazeuse. Un des paramètres que j'ai étudié est la quantité de soufre atomique injecté dans le gaz (cas intermédiaires entre les modèles 1 et 2 du tableau 22 de la section 3.5.1). Les autres paramètres sont le temps d'intégration entre 0 et 10^6 ans, la température entre 50 et 100 K et la densité de H_2 entre 10^4 et 10^6 cm^{-3}.

La figure 16 montre les résultats de cette simulation. Les rapports SO_2/SO et CS/SO calculés par le modèle sont reportés dans cette figure en fonction du temps (pour une densité et une température données), de la densité (pour une température et un temp donnés) et de la température (pour une densité et un temp donnés). Pour une comparaison plus facile, j'ai reporté les rapports d'abondance observés (tableau 11) en tenant compte des incertitudes estimées. Sur la figure 17, les rapports d'abondance sont reportés en fonction de la quantité de soufre atomique évaporée dans la pahse gazeuse à l'instant $t = 0$ correspondant à l'arrivée de l'onde de choc.

1.2.6 Discussion

Morphologie des flots

Le premier résultat à noter est la très forte émission de SO et SO_2 dans les régions de choc par rapport à la source. Ceci est également visible au niveau des spectres (figure 10). Les raies observées sur la source sont très fines ($\sim 1-2$ km s^{-1}) et sont à la vitesse systémique du nuage (7.6 km s^{-1}) tandis que dans les régions de choc les spectres sont larges (entre 3 et 8 km s^{-1} pour le gaz choqué, voir tableau 9).

L'émission des trois molécules soufrées pique à peu près aux mêmes points du lobe Ouest (voir figure 11). Dans le lobe Est, l'émission de SO et SO_2 semble être plus à l'avant du choc (offsets +60″, -12″ et +72″, -12″ pour les maximums de SO et SO_2 respectivement) tandis que CS pique plus loin dans le flot à +80″, -15″. La position de CS est similaire à celle de SiO (Blake, 1996) et de CH_3OH (Bachiller et al., 1998) représentant la position terminale du choc. Cependant cette différence est inférieure à la distance d'échantillonnage des spectres et il est difficile de savoir si elle est réelle.

Conditions physiques des lobes Ouest et Est

Le premier résultat à noter à partir de l'analyse hors ETL (section 1.2.4) est que les densités de colonne obtenues avec cette méthode sont en très bon accord avec celles calculées à partir des diagrammes rotationnels (section 1.2.4). Elles s'en écartent de moins de 30% sauf pour la densité de colonne de SO_2 dans W2(HVC) qui diffère de 50%. Mais les résultats pour cette dernière région sont plus incertains parce que deux transitions de SO_2 ne sont pas détectées (voir Table 10).

Voyons maintenant les conditions physiques trouvées dans chacun des lobes.

Dans le lobe Ouest, l'émission de la composante ambiante de SO indique des conditions physiques similaires pour les cinq positions. Elle contraint relativement bien la densité de H_2 autour de 2×10^5 cm^{-3} mais pas du tout la température. Les contraintes sur le gaz choqué sont plus difficiles à interpréter. Ni la température ni la densité ne sont réellement contraintes sauf pour certaines positions comme (-60″, +12″). De façon générale, l'émission de SO semble indiquer que la température du gaz choqué augmente vers l'extérieur du flot tandis que la densité reste relativement constante. Dans les trois positions internes du flot (-48″ 12″, -60″ 12″ et -84″ 24″), la densité est inférieure à 10^5 cm^{-3}, confirmant le fait que le milieu ne soit pas à l'ETL pour SO. Cette densité serait du même ordre que celle du gaz ambiant.

Dans le lobe Est, la densité de H_2 indiquée par l'émission de SO est similaire à celle trouvée dans le lobe Ouest. La position (60″ -12″) semble être la plus chaude tandis que la position la plus

externe du flot (84″ -12″) semble être la plus froide et la plus dense. L'émission de SO_2 donne des résultats différents que celle de SO. SO_2 trace du gaz plus dense que SO mais les températures ne sont pas incompatibles. Comme pour SO, SO_2 indique que la position (60″ -12″) est la plus chaude et que la température décroît tandis que la densité augmente à partir de ce point lorsque l'on s'éloigne de la source.

Rapports d'abondance SO_2/SO et CS/SO

Les rapports SO_2/SO et CS/SO observés sont similaires dans toutes les composantes ambiantes du lobe Ouest : entre 0.2 et 0.4 pour CS/SO et inférieurs à 0.05 pour SO_2/SO (tableau 11 et la figure 15). Ces valeurs sont remarquablement bien reproduites par la modélisation chimique pour une température du gaz entre 10 et 20 K et une densité de H_2 entre 10^5 et 10^6 cm^{-3} (tableau 13).

La situation est plus compliquée dans les chocs :
Dans le gaz choqué du lobe Est, les rapports CS/SO sont de l'ordre de 0.03 à 0.07. Si l'on part du principe que l'émission haute vitesse de CS provient bien du gaz choqué (sans analyse des conditions d'excitation de la molécule nous ne pouvons que faire cette hypothèse), les rapports CS/SO observés indiquent une densité du gaz relativement similaire tout le long du flot et plutôt faible ($\leq 3 \times 10^5$ cm^{-3}), une température inférieure à 135 K et un choc relativement jeune ($\leq 2 \times 10^3$ ans). Les conditions physiques déduites ici sont en bon accord avec les résultats de l'étude hors ETL de l'émission de SO (voir section 1.2.4). L'âge déduit ici est également cohérent avec l'estimation faite par Bachiller et al. (1998) à partir de l'évolution dynamique du flot (âge global du flot estimé à $(2-5) \times 10^3$ ans) et avec le schéma proposé dans l'étude précédente sur la formation et destruction des molécules dans les chocs (voir tableau 7 de la section 1.1.5). En revanche, la précision des mesures des rapports ne permet pas de faire une distinction temporelle entre les "clumps" du flot. Le point le plus externe du lobe (84″, −12″) correspond à une valeur plus grande du rapport CS/SO probablement parce que les conditions physiques du gaz y sont plus proche de celle du nuage moléculaire (voir section 1.2.5). Les rapports SO_2/SO observés sont peu contraignants car ils ne dépendent pas de la température du gaz, de la densité ni même du temps pour une intégration entre 0 et 10^3 ans. Cependant, les prédictions de SO_2/SO par le modèle chimique avec les températures et densitées contraintes par CS/SO sont en accord avec les rapports observés même un peu faibles. Les rapports élevés SO_2/SO et CS/SO sont en faveur d'une évaporation très partielle du soufre dans la phase gazeuse : $[S]_{ini} \leq 6 \times 10^{-7}$ (voir figure 17).
Les rapports CS/SO dans le gaz choqué du lobe Ouest (entre 0.1 et 0.3) sont relativement constants et similaires à ceux de SO_2/SO dans le gaz choqué et aux rapports CS/SO dans

le gaz ambiant. Les rapports CS/SO sont plus grands dans cette partie du flot que dans le lobe Est reflétant soit une plus faible température ($\leq$ 60 K) ou par une plus faible densité ($\leq 5 \times 10^4$ cm^{-3}) que dans le lobe Est (voir figure 16). L'analyse hors ETL semble plutôt en faveur d'une diminution de la densité. Les rapports SO_2/SO en revanche sont peu sensibles à la densité et à la température du gaz (dans les intervalles considérés ici) ce qui est en accord avec le rapport constant observé.

Toute cette comparaison avec les modèles chimiques est basée sur l'hypothèse que l'émission des molécules SO, SO_2 et CS provient de la même région du choc. Or l'analyse hors ETL des conditions d'excitation de SO et SO_2 semble indiquer que les deux molécules ne sont pas formées dans le même gaz. Si SO_2 provient d'un gaz plus dense et plus froid où sa production est favorisée (voir section 3.5.3), le rapport SO_2/SO est surestimé. De même, l'origine de l'émission de CS peut être différente de celle de SO et les rapports CS/SO réels peuvent être surestimés ou sous-estimés. Ceci pourrait expliquer le fait que les rapports SO_2/SO observés sont systématiquement plus grands que ceux estimés par le modèle. Il est également possible que SO soit optiquement épais conduisant là encore à une sous-estimation de la densité de colonne de SO. Cependant, l'ètude des conditions d'excitations de SO et SO_2 présentée en annexe C semble indiquer que cette explication est peu probable.

Comparaison avec L1689N

Dans la section 1.1, j'ai présenté les résultats obtenus à partir des observations faites dans la région du nuage L1689N qui abrite au moins une protoétoile de faible masse IRAS16293 et plusieurs régions de chocs induites par des flots moléculaires. Les émissions de SO et SO_2 sont différentes dans ces deux régions. Dans L1689N, l'émission de ces molécules est maximale sur la position de la protoétoile et plus faible dans les chocs. La situation est totalement inversée dans NCG1333 où les raies de SO et SO_2 sont très faibles sur IRAS2 et intense le long du flot.

IRAS16293 et IRAS2 abritent toutes deux une région de cœur chaud (Ceccarelli et al., 2000a,b; Schöier et al., 2002; Maret et al., 2004), pourtant les raies de SO et SO_2 y sont complètement différentes. Dans la source IRAS16293, les raies de SO et SO_2 sont intenses et élargies par l'effondrement de l'enveloppe tandis que dans IRAS2 les raies sont faibles et étroites. Seules des observations complémentaires ainsi qu'une modélisation détaillée des flux permettraient de comprendre cette différence observée entre ces deux protoétoiles.

Les spectres observés dans les régions de choc d'IRAS2 possèdent une composante choquée plus prononcée que dans L1689N mais avec une composante ambiante plus faible. Le rapport SO_2/SO trouvé dans le nuage L1689N est deux fois plus petit que sur la position d'IRAS2 mais est cohérent avec ceux trouvés dans la composante ambiante du lobe Ouest. Dans le gaz

choqué, les rapports SO_2/SO d'IRAS2 sont similaires à ceux des chocs W1 et W2 de L1689N. La comparaison de ces rapports avec le schéma de formation et de destruction des molécules dans les chocs proposé dans le tableau 7 de la section 1.1.5 indique des chocs jeunes (voir également la section précédente sur les rapports d'abondance).

Chapitre 2

Modélisation de l'émission de SO et SO_2 dans des enveloppes protostellaires en effondrement

Les régions de cœur chaud de faible masse sont des régions très petites et enfouies dans des enveloppes froides, denses et étendues. Par conséquent, l'émission de ces régions est difficile à observer d'autant plus que l'angle solide occupé par un cœur chaud est très inférieur à celui du lobe des télescopes. Pour détecter ces régions, il a fallu attendre la construction d'instruments performants comme les télescopes de 30 m de l'IRAM et de 15 m du JCMT ainsi que celle du télescope spatial infrarouge ISO. Ce dernier instrument a permis d'observer les transitions de l'eau qui ne sont pas accessibles du sol, H_2O étant l'une des molécules les plus abondantes dans les cœurs chauds.

Pour déterminer les caractéristiques de ces cœurs chauds, comme la température, la densité et les abondances chimiques, l'émission moléculaire est comparée aux prédictions de modèles théoriques de transfert radiatif tenant compte de la dynamique de ces régions. Les molécules choisies pour ces observations doivent être particulièrement sensibles à l'augmentation de la température qui se produit au cours de l'évolution de la protoétoile. Ce sont, par exemple, des molécules piégées sur les manteaux glacés des grains dans le gaz froid et qui s'évaporent dans le cœur chaud, comme la molécule d'eau (H_2O), le formaldéhyde (H_2CO) et le méthanol (CH_3OH). Il peut également s'agir de molécules de seconde génération, comme SO et SO_2, produites à partir des molécules évaporées de la surface des grains. En effet, à haute température, le soufre est injecté en phase gazeuse sous une forme chimique encore inconnue qui conduit vraisemblablement à la formation rapide et majoritaire de SO et SO_2 (voir le chapitre 3). Pour être applicable au cas des cœurs chauds, le traitement du transfert radiatif doit inclure :

- un peuplement des niveaux d'énergie hors équilibre thermodynamique local,
- des raies pouvant être optiquement épaisses,
- la structure en température et en densité de l'objet. En effet, bien que les dimensions caractéristiques de l'objet soient bien inférieures au lobe du télescope, la structure doit-être prise en compte. Ainsi les transitions de haute énergie traceront préférentiellement les régions internes chaudes du cœur tandis que celles de basse énergie proviendront des couches externes froides.

Dans ce chapitre, je présente une étude théorique de l'émission des deux principales molécules soufrées SO et SO_2 à travers l'enveloppe en effondrement d'une protoétoile. Cette étude me permet de sélectionner les transitions les plus adéquates pour calculer les profils d'abondance à travers l'enveloppe et qui pourront être utilisées pour faire une étude systématique de SO et SO_2 dans les protoétoiles de faible masse. Pour faire cette étude, j'ai modifié et utilisé le modèle mis au point par Ceccarelli et al. (1996) (CHT96 dans la suite de la thèse). Le modèle CHT96 a déjà été utilisé avec succès pour reproduire des observations de H_2O, CO, O et H_2CO dans deux protoétoiles de faibles masses IRAS16293 et NGC1333-IRAS4 (Ceccarelli et al., 2000a; Maret et al., 2002), puis des observations de H_2CO dans un échantillon de protoétoiles (Maret et al., 2004). Dans les sections 2.1 et 2.2, je décris le modèle utilisé et je présente les principaux résultats de la modélisation pour SO et SO_2. Dans la dernière section, je montre une application du modèle au cas de la protoétoile IRAS16293.

2.1 Description du modèle

2.1.1 Structure physique de l'enveloppe

Le profil de densité et la dynamique des enveloppes protostellaires sont calculés à partir de la solution d'effondrement "inside-out" développée par Shu (1977) pour une sphère initiallement isotherme qui subit un effondrement. Dans les parties externes de l'enveloppe, qui ne sont pas affectées par l'effondrement, la distribution du nombre de densité de l'hydrogène moléculaire n_{H_2} en fonction du rayon r est équivalente à celle d'une sphère isotherme à l'équilibre hydrostatique :

$$n_{H_2}(r) = \frac{a^2}{2\pi\mu m_H \mathrm{G}} r^{-2} \tag{1}$$

où a est la vitesse du son, m_H la masse de l'atome d'hydrogène (1.6×10^{-24} g), μ la masse moléculaire moyenne du gaz de l'enveloppe (prenant en compte toutes les molécules) en unité de masse atomique (2.8) et G est la constante gravitationnelle (5.98×10^{-14} cm^3 s^{-2} g^{-1}).

Dans les parties internes de l'enveloppe qui subissent l'effondrement, la densité est donnée

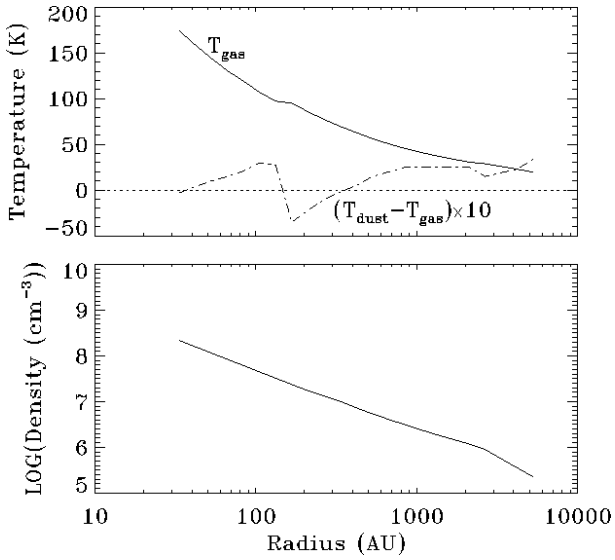

Fig. 18: *Exemple de profils de température et de densité de H_2 calculé par le modèle en fonction du rayon pour une masse centrale de 0.8 $M_\odot$ et un taux d'accrétion de masse de 3×10^{-5} $M_\odot$ an^{-1} (Ceccarelli et al., 2000a).*

par la solution dite de "free-fall" (chute libre) :

$$n_{H_2}(r) = \frac{1}{4\pi\mu m_H}\left(\frac{\dot{M}^2}{2\mathrm{G}M_*}\right)^{\frac{1}{2}} r^{-\frac{3}{2}} \tag{2}$$

où M_* est la masse centrale de l'objet et $\dot{M}$ le taux d'accrétion de masse relié à la vitesse du son par

$$\dot{M} = 0.975\frac{a^3}{\mathrm{G}} \tag{3}$$

La vitesse de free-fall de la matière est donnée par l'expression suivante :

$$v(r) = \left(\frac{2\mathrm{G}M_*}{r}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{4}$$

Le modèle suppose une symétrie sphérique durant tout l'effondrement. Ainsi il ne donne de bons résultats que pour les parties de l'enveloppe où l'approximation sphérique est valable, c'est-à-dire pour des rayons supérieurs à quelques dizaines d'unités astronomiques. A plus faible distance, la matière s'organise en disque circumstellaire, du fait de la conservation du moment angulaire des couches en effondrement.

La luminosité dégagée par l'accrétion est majoritairement absorbée par la poussière de l'enveloppe. Dans le modèle CHT96, la température des poussières est calculée de façon auto-consistante à partir des approximations analytiques trouvées par Adams et Shu (1985) qui

ont résolu le transfert radiatif pour la poussière dans les enveloppes en effondrement. Cette température est donnée par la combinaison de deux termes qui tiennent compte des parties optiquement mince et épaisse de l'enveloppe :

$$T_d(r)^4 = \left(\alpha T_a r_{15}^{-5/6}\right)^4 + \left(\beta T_b r_{15}^{-2/5}\right)^4 \tag{5}$$

où

$$T_a = 16.4 \left(\dot{M}_{-5}\right)^{1/3} \left(\frac{M_*}{M_\odot}\right)^{-1/6} \left(\frac{L_*}{L_\odot}\right)^{1/3} \tag{6}$$

$$T_b = 47.0 \left(\frac{L_*}{L_\odot}\right)^{1/5} \tag{7}$$

r_{15} et $\dot{M}_{-5}$ sont respectivement le rayon et le taux d'accrétion de masse divisés par 10^{15} cm et 10^{-5} ans. α et β sont deux coefficients calculés par Adams et Shu (1985) pour différents taux d'accrétion de masse et différentes masses centrales. La température du gaz se calcule en faisant le bilan énergétique du gaz dans l'enveloppe qui est à l'équilibre. Les processus régissant la température du gaz sont principalement le chauffage dû à la compression du gaz et aux collisions avec les grains de poussières généralement plus chauds que le gaz et le refroidissement du gaz par l'émission et l'absorption des raies moléculaires de H_2O et CO. La figure 18 montre un exemple de profil en température et en densité de H_2 de l'enveloppe de la protoétoile IRAS16293 en fonction du rayon (Ceccarelli et al., 2000a).

Les équations physiques présentées dans cette section sont basées sur l'approximation de l'équilibre stationnaire, c'est-à-dire qu'elles ne dépendent pas du temps. Pour une enveloppe protostellaire typique de une masse solaire et de 10^{-5} $M_\odot$ an^{-1} de taux d'accrétion de masse, le temps nécessaire à la totalité de l'enveloppe pour tomber sur la protoétoile (temps de chute libre) est de l'ordre de 10^5 ans. Par rapport à ce temps, les transferts de population entre les niveaux d'énergie par collision et par radiation sont instantanés (inférieurs à 1 an). D'un point de vu chimique, la formation des principaux refroidisseurs du gaz, H_2O et CO, est également très rapide puisque H_2O est formé en moins de 200 ans et que CO est déjà présent dans la phase précédant l'effondrement. L'échelle de temps de la formation des deux principales molécules soufrées est inférieure au temps de chute libre : $\sim$ 200 ans pour SO et $\leq 10^4$ ans pour SO_2. En conclusion, l'approximation de l'équilibre stationnaire qui permet de beaucoup simplifier les quations dynamiques peu être utilisée dans notre cas (voir aussi Stahler et al., 1980).

2.1.2 Transfert radiatif dans une enveloppe protostellaire en effondrement

L'équation du transfert radiatif (équation 27 dans la section B.2.1) est couplée aux équations de population (équation 28 dans la section B.2.1) de tous les niveaux de toutes les particules

présentes dans le milieu (voir aussi sections B.2.1 et B.2.4). Or ces équations forment un système complexe qui doit être résolu simultanément, et une solution exacte ne peut être obtenue que pour les systèmes les plus simples. Pour découpler les équations du transfert radiatif et de population des niveaux, l'approximation de la probabilité d'échappement est utilisée (Sobolev, 1960). Cette approximation consiste à introduire un facteur multiplicateur local qui décrit la probabilité qu'un photon a de s'échapper d'une enveloppe de gaz après avoir été généré (voir aussi section B.2.4). Ainsi l'équation 28 peut s'écrire :

$$n_u \sum_{l=1}^{N_{lev}} (A_{ul}\beta_{ul} + B_{ul}J' + C_{ul}) = \sum_{l=1}^{N_{lev}} n_l (B_{lu}J' + C_{lu}) \tag{8}$$

où J' est le champ de rayonnement à la fréquence ν_{ul} uniquement dû à l'émission de la poussière et s'écrit :

$$J' = (\beta_{ul} - \eta_{ul})B(T_{dust}) \tag{9}$$

Dans les équations 8 et 9, β_{ul} et η_{ul} sont les probabilités d'échappement d'un photon liées à l'absorption dans les raies pour β_{ul} et à l'absorption par la poussière pour η_{ul}. Ces deux probabilités d'échappement dépendent de la vitesse thermique dans le milieu et du gradient de vitesse dans l'enveloppe. $B(T_{dust})$ est la fonction de Planck pour un corps noir émettant à la température des poussières T_{dust}. Une fois que le champ de rayonnement J' est connu à chaque point du rayon de l'enveloppe, le flux d'une raie émise par l'enveloppe à une distance d peut s'écrire :

$$F_{ul} = \frac{1}{4\pi d^2} \int_{r_i}^{\infty} h\nu_{ul} A_{ul} \epsilon_{ul} n_u \left(1 - \frac{J'_{ul}}{S_{ul}}\right) 4\pi r^2 dr \tag{10}$$

2.1.3 La structure chimique de l'enveloppe

Les profils d'abondance de SO et SO_2 sont approximés par une fonction "step" qui symbolise l'augmentation de l'abondance de ces molécules dans les régions internes de l'enveloppe où les manteaux glacés des grains se sont évaporés (voir figure 19). Ainsi dans les régions externes froides de l'enveloppe, les abondances de SO [x_{cold}(SO)] et SO_2 [$x_{cold}(SO_2)$] sont relativement faibles et similaires à celles observées dans les nuages moléculaires (voir le tableau 4 du chapitre 1). Dans les régions plus internes, où la température est suffisante pour permettre l'évaporation des molécules piégées sur les grains, les abondances de SO [x_{warm}(SO)] et SO_2 [$x_{warm}(SO_2)$] augmentent de plusieurs ordres de grandeur. Cette approximation est assez forte car elle suggère que SO et SO_2 sont évaporés des grains à la même température que H_2O, c'est à dire à 100 K, ce qui n'est probablement pas le cas. Cependant, ce type d'approximation a déjà

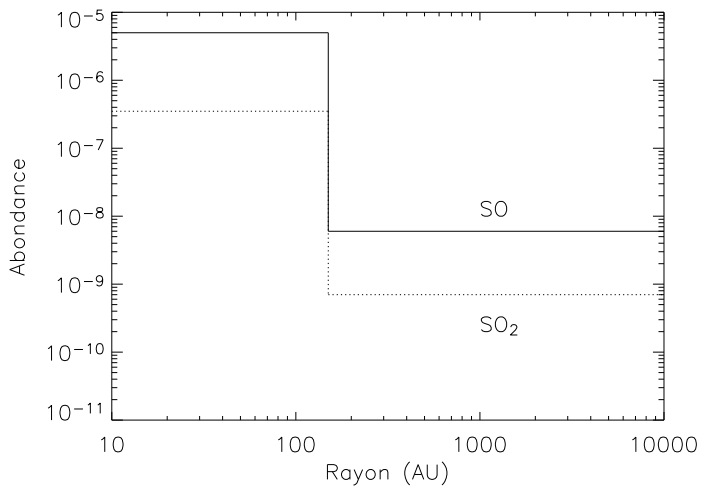

FIG. 19: *Exemple de profils d'abondance (/H_2) de SO et SO_2 approximés par une fonction "step" en fonction du rayon. A 150 AU, la température du gaz devient supérieure à 100 K (voir figure 18) permettant à la forme de soufre déplétée de s'évaporer dans la phase gazeuse et de conduire à la formation de SO et SO_2.*

été utilisé avec succès pour reproduire les spectres de ces molécules observées dans IRAS16293 par Schöier et al. (2002).

2.1.4 Paramètres du modèle

Dans le cas présenté dans cette thèse, la luminosité de la protoétoile a été fixée à 30 $L_\odot$. Tous les flux sont calculés à une distance de 160 pc du centre de la source. Le modèle calcule la population des 50 premiers niveaux pour SO et des 200 premiers niveaux pour SO_2. Toutes les données spectroscopiques proviennent du catalogue du JPL (*http://spec.jpl.nasa.gov/;Pickett et al., 1998)*. Les références utilisées pour les coefficients de collision (avec He) sont : Green (1994) pour SO et Palma (1987) pour SO_2. En fait, pour les deux molécules, seuls les coefficients de collision des 50 premiers niveaux ont été calculés. Pour SO, cela ne pose pas de problème parce que les transitions correspondantes vont jusqu'à des énergies de l'ordre de 220 cm^{-1}. Le problème se pose dans le cas de SO_2 parce que les transitions correspondant aux 50 premiers niveaux ne vont pas au delà de 80 cm^{-1}. Ce qui est beaucoup trop bas pour sonder les régions internes de l'enveloppe. En effet, comme il sera montré par la suite pour SO, des transitions d'énergie up plus grande que 150 cm^{-1} sont nécessaires pour sonder les parties chaudes de l'enveloppe. Dans la section suivante (2.1.5), j'explique comment j'ai traité ce problème.

La masse centrale de l'objet M_* et le taux d'accrétion de masse $\dot{M}$ sont les deux paramètres

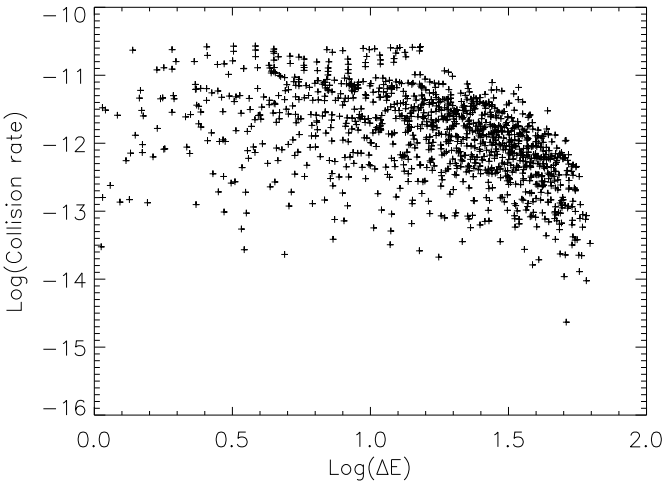

Fig. 20: *Coefficients de collision de SO_2 de Palma (1987) en fonction de l'énergie de la transition ΔE ($\Delta E = E_{up}$ - E_{low}).*

qui gouvernent directement la structure en densité et en vitesse de l'enveloppe et indirectement la structure chimique et thermique. Dans ce travail, j'ai considéré des valeurs de M_* et de $\dot{M}$ comprises dans les intervalles suivants : 0.5 - 1.5 $M_\odot$ et 0.5×10^{-5} - 5×10^{-5} $M_\odot$ an^{-1}. Dans ce modèle le taux d'accrétion de masse est supposé constant avec le temps, donc l'âge de la protoétoile est obtenu en divisant la masse centrale par le taux d'accrétion de masse.

Les deux autres paramètres du modèle sont les abondances internes et externes pour SO et pour SO_2. Pour SO, j'ai fait varier x_{cold}(SO) entre 10^{-10} et 10^{-8} tandis que x_{warm}(SO) est compris entre 3×10^{-7} et 10^{-5}. L'abondance externe de SO_2 varie entre 10^{-11} et 3×10^{-9} et $x_{warm}(SO_2)$ entre 3×10^{-9} et 10^{-6}.

2.1.5 Coefficients de collision de SO_2

Pour couvrir la totalité des conditions physiques du cœur chaud, le transfert radiatif doit être traité dans les 200 premiers niveaux de la molécule de SO_2. Or seuls les coefficients de collision des 50 premiers niveaux de la molécule sont connus (Palma, 1987). Afin d'extrapoler les coefficients des niveaux supérieurs à partir de la distribution des coefficients connus, j'ai tracé ces derniers en fonction de lénergie des transition (ΔE = E$_{up}$ - E$_{low}$) sur la figure 20. Il apparait toutefois qu'aucune relation simple ne permet de réaliser une telle extrapolation. De même, il n'existe pas de loi simple reliant les coefficients de collision de SO_2 à l'énergie du niveau supérieur (E$_{up}$) et/ou à l'énergie inférieure (E$_{low}$) des transitions. Par conséquent, j'ai décidé de faire une étude à l'équilibre thermodynamique local, c'est-à-dire que tous les niveaux sont

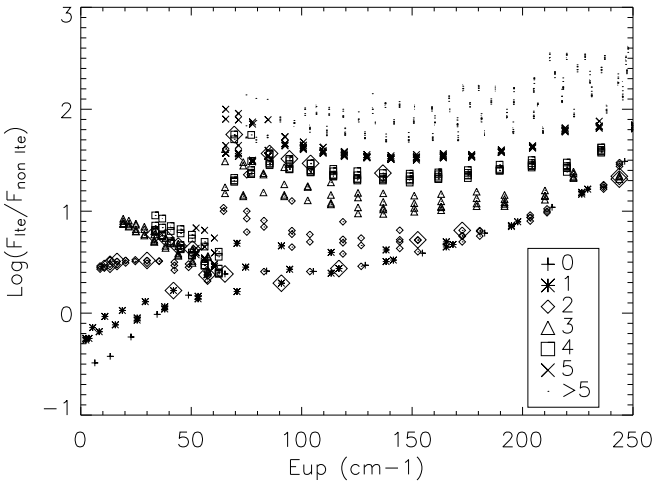

FIG. 21: *Rapport des flux de SO_2 calculés à l'ETL sur les flux calculés avec des coefficients de collision (des niveaux de 50 à 200) de 10^{-15} cm^3 s^{-1} en fonction de l'énergie up des transitions. Les différents symboles représentent des transitions avec différentes valeurs de K_- de 0 à plus de 5 (voir section 2.2.1). Les losanges de plus grange taille repésentent les transitions observées dans IRAS16293 (voir tableau 16 et section 2.3). Les paramètres du modèle sont ceux de l'exemple (tableau 14).*

peuplés suivant la loi de Boltzmann. Les resultats obtenus sont donc préliminaires mais le code est d'ores et deja prêt pour intégrer des données additionnelles. Une collaboration avec Pierre Valiron et Alexandre Faure de l'observatoire de Grenoble est en cours pour compléter les taux de collision.

Pour avoir une idée de l'influence des coefficients de collision sur les flux de SO_2, j'ai comparé les résultats obtenus avec le modèle ETL avec ceux d'un modèle où les coefficients de collisions inconnus (entre les niveaux 50 et 200) sont arbitrairement mis à 10^{-15} cm^3 s^{-1}. La figure 21 montre les rapports entre les flux calculés avec ces deux modèles. Sur cette figure, plusieurs groupes de transitions apparaissent correspondant à différentes valeurs de K_- [1] (voir section 2.2.1). Les niveaux 0 et 1 sont les plus proches de l'équilibre thermodynamique tandis que plus K_- augmente plus les flux hors ETL sont petits devant les flux à l'équilibre. Pour les transitions avec $K_- \geq 5$, la différence avec l'ETL peut être plus grande que deux ordres de grandeur.

1. Pour écrire les transitions, j'ai utilisé la nomenclature suivante : $J_K - J'_{K'}$ pour la molécule linéaire SO et $J_{K_-,K_+} - J'_{K'_-,K'_+}$ pour la molécule non-linéaire SO_2. C'est la nomenclature généralement utilisée dans la littérature mais qui diffère de celle utilisée dans la base de données spectroscopiques du JPL pour les molécules linéaires ($KJ \quad K'J'$).

Tab. 14: *Valeur des paramètres adoptés pour l'exemple.*

Paramètre	Valeur
M_*	0.8 $M_\odot$
$\dot{M}$	3×10^{-5} $M_\odot$ an^{-1}
$x_{\rm warm}$(SO)	1×10^{-6}
$x_{\rm cold}$(SO)	1×10^{-8}
$x_{\rm warm}(SO_2)$	1×10^{-7}
$x_{\rm cold}(SO_2)$	1×10^{-9}

2.2 Résultats du modèle

2.2.1 Emission des molécules SO et SO_2

L'étude de l'émission de SO et SO_2 dans une enveloppe en effondrement a été faite sur un exemple similaire au cas d'IRAS16293 qui est présenté à la section 2.3. Les paramètres utilisés pour cet exemple sont donnés dans le tableau 14. Les flux calculés pour toutes les transitions de SO et SO_2 sont répertoriés dans les tableaux 28 et 29 situés en Annexe D. Les figures 22 et 23 montrent les flux de ^{32}SO, ^{34}SO et les rapports ^{34}SO/^{32}SO en fonction de l'énergie du niveau supérieur (E_{up}) des transitions. De même, les figures 24 et figures 25 montrent les flux de $^{32}SO_2$ ainsi que les rapports $^{34}SO_2/^{32}SO_2$ en fonction de E_{up}. A partir de ces figures, il est possible d'étudier les conditions d'excitation des deux molécules à travers l'enveloppe sachant que le flux des transitions dépend de l'épaisseur optique des raies mais aussi de la température du milieu.

Résultats pour SO

Les transitions de la molécule SO forment deux groupes. Le premier groupe est caractérisé par des coefficients d'Einstein A relativement forts (représentées par des étoiles sur les figures 22 et 23) qui ont la forme suivante : $J_K - (J-1)_{(K-1)}$. Le deuxième groupe, qui comprend un plus grand nombre de transitions, est constitué des transitions du type $J_K - (J \pm 1)_K$ ou $J_K - J_{(K\pm1)}$ qui possèdent de faibles coefficients d'Einstein A (représentées par des losanges sur les figures 22 et 23). Sur la figure 22, certaines transitions de ^{32}SO forment une bosse (augmentation temporaire du flux) autour de 50 cm^{-1}. Ces transitions de basse énergie sont excitées très facilement aux températures présentes dans les régions externes de l'enveloppe et deviennent optiquement épaisses dans les régions internes. Cette bosse n'est pas visible sur le graphique du bas de la figure 22 représentant les flux de ^{34}SO parce que cette forme isotopique de SO est moins abondante.

Les niveaux dont l'énergie est plus grande que 60 cm^{-1} ne sont pas peuplées dans les régions

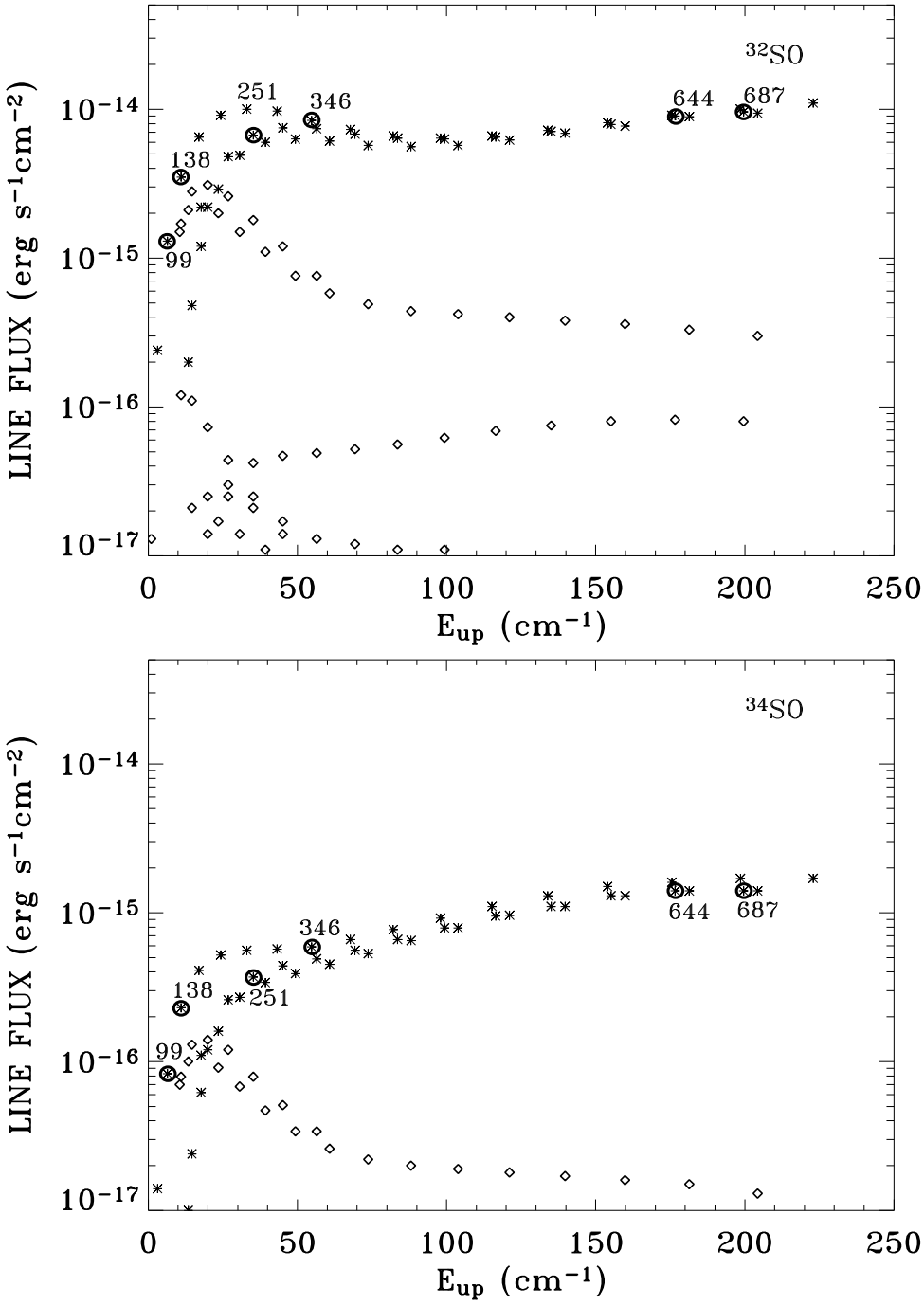

FIG. 22: *Flux émis par les différentes transitions de ^{32}SO (en haut) et ^{34}SO (en bas) en fonction de l'énergie du niveau supérieur des transitions. Les flux sont calculés pour un objet ayant les caractéristiques données dans le tableau 14. Les chiffres indiqués sur la figure sont les fréquences en GHz des transitions choisies et étudiées en détail dans la section 2.2.2. Les étoiles représentent les transitions $J_K - (J-1)_{(K-1)}$ et les losanges les transitions $J_K - (J \pm 1)_K$ ou $J_K - J_{(K\pm1)}$.*

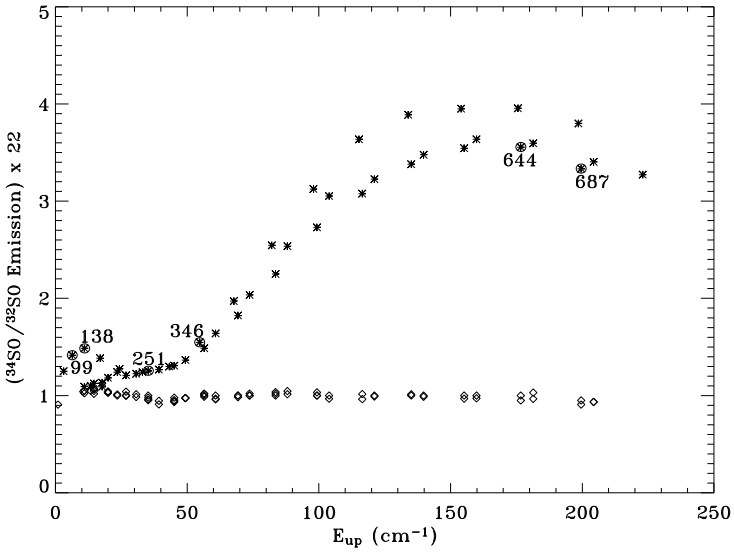

Fig. 23: *Rapport des flux de ^{32}SO sur les flux de ^{34}SO en fonction de l'énergie du niveau supérieur des transitions. Les rapports sont multipliés par 22 qui est le rapport élémentaire cosmique $^{32}S/^{34}S$ (Wilson et Rood, 1994; Chin et al., 1996; Lucas et Liszt, 1998). Les chiffres associés aux ronds indiqués sur la figure sont les fréquences en GHz des transitions choisies et étudiées en détail dans la section 2.2.2. Les étoiles représentent les transitions $J_K - (J-1)_{(K-1)}$ et les losanges les transitions $J_K - (J \pm 1)_K$ ou $J_K - J_{(K\pm1)}$.*

externes, mais sondent les parties internes chaudes et denses de l'enveloppe où SO est plus abondant. A partir de 60 cm^{-1}, l'intensité des raies de ^{32}SO augmente légèrement avec l'énergie. L'intensité des raies de ^{34}SO augmente également et plus significativement. La raison est que les transitions de ^{32}SO deviennent optiquement épaisses dans les régions internes (voir figure 23) tandis que celles de l'isotope moins abondant restent optiquement minces. Sur la figure 23, les rapports de flux ^{34}SO/^{32}SO forment un pic à 150 cm^{-1} pour diminuer à plus forte énergie car la température n'est alors plus suffisante pour peupler les niveaux de plus haute énergie.

Résultats pour SO_2

La molécule de SO_2 possède un plus grand nombre de transitions que SO car c'est une molécule non linéaire. Les transitions de SO_2 peuvent être réparties en au moins dix groupes de type $J_{K_-} - (J-n)_{(K_- - m)}$ avec $n = 1, 0$ ou -1 et $m = 1, 3$ ou 5 et le dernier groupe s'écrit $J_{K_-} - (J-1)_{(K_-+1)}$ (voir figure 24). Les familles pour lesquelles $n = 1$ et $n = 0$ sont constituées par les transitions les plus intenses avec les coefficients d'Einstein les plus grands pour une même valeur de m. Les transitions pour lesquelles $n = -1$ possèdent des intensités plus faibles correspondant à des valeurs de coefficient d'Einstein plus basses. Pour chaque valeur de n, m définit une sous-famille dont l'intensité décroît avec la valeur de $|m|$. Enfin à l'intérieur

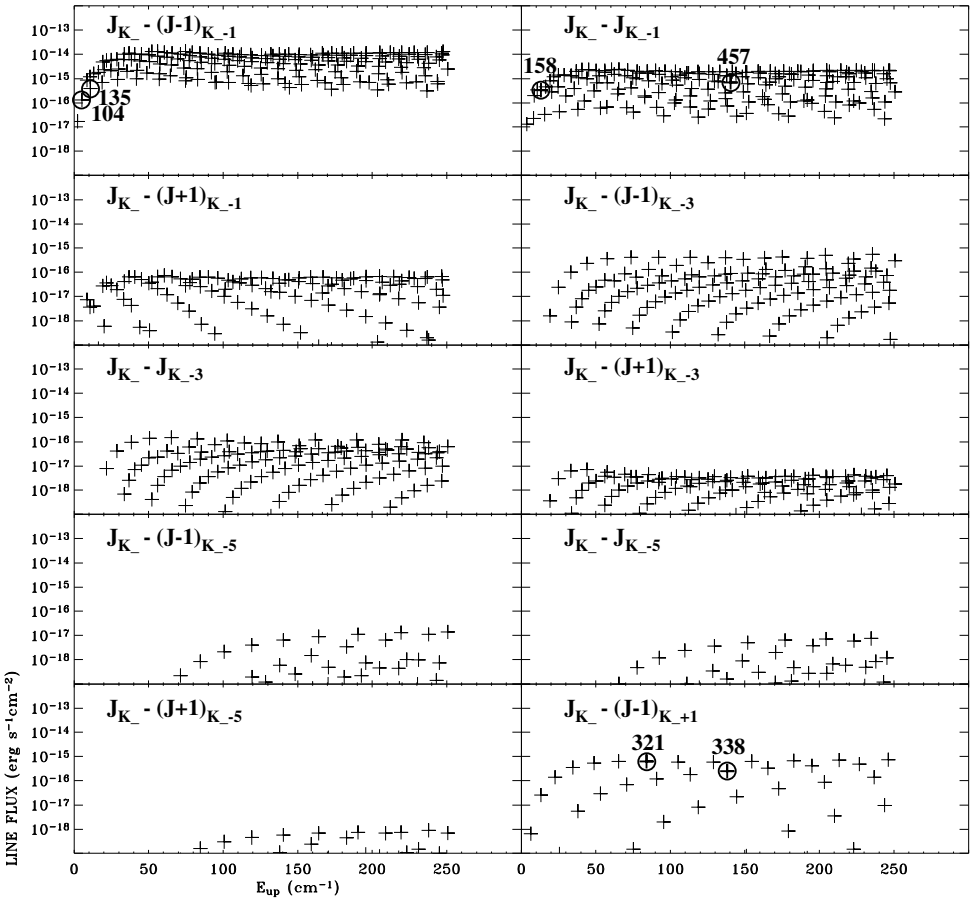

FIG. 24: *Flux émis par les différentes transitions de* $^{32}SO_2$ *en fonction de l'énergie du niveau supérieur des transitions. Les flux sont calculés pour un objet ayant les caractéristiques de l'exemple (tableau 14). Les chiffres indiqués sur la figure sont les fréquences en GHz des transitions choisies et étudiées en détail dans la section 2.2.2. Les différentes familles de transitions sont séparées sur les différents graphiques :* $J_{K_} - (J-n)_{(K_-m)}$ *avec* $n = 1, 0$ *ou* -1 *et* $m = 1, 3$ *ou* 5 *et le dernier groupe s'écrit* $J_{K_} - (J-1)_{(K_+1)}$. *Dans chacun des graphiques, une dizaine de sous-groupe apparaît correspondant à la valeur de* $K_$ *de 1 à 11.*

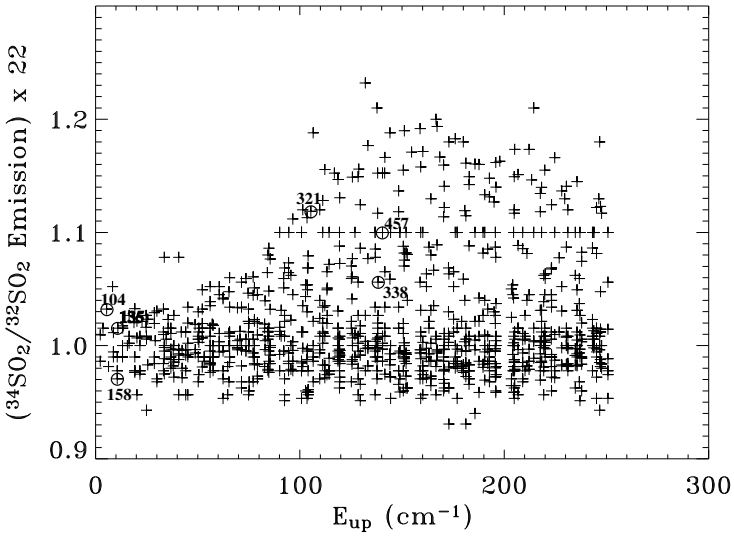

Fig. 25: *Rapport des flux de $^{32}SO_2$ sur les flux de $^{34}SO_2$ en fonction de l'énergie du niveau supérieur des transitions. Les rapports sont multipliés par 22 qui est le rapport élémentaire cosmique $^{32}S/^{34}S$ (Wilson et Rood, 1994; Chin et al., 1996; Lucas et Liszt, 1998). Les chiffres associés aux ronds indiqués sur la figure sont les fréquences en GHz des transitions choisies et étudiées en détail dans la section 2.2.2.*

de chacune de ces sous-famille, c'est-à-dire pour une valeur de n et une valeur de m, une dizaine de sous-groupes peut être identifiée correspondant à des valeurs de K_- entre 1 et 11. Comme pour SO, les flux de SO_2 forment un léger pic autour de 40 cm^{-1} et l'intensité des raies croît avec l'énergie.

Les flux de l'isotope $^{34}SO_2$ sont très similaires à ceux de $^{32}SO_2$ c'est pourquoi je n'ai pas reporté la figure ici. Les rapports des flux $^{34}SO_2/^{32}SO_2$ sont très proches de la valeur isotopique du soufre élémentaire $^{34}S/^{32}S$ qui est d'environ 22 (voir aussi la figure 25). Par conséquent, les transitions de $^{32}SO_2$ sont optiquement minces quelque soit l'énergie des transitions à cause des faibles abondances de SO_2. L'épaisseur optique augmente tout de même légèrement avec l'énergie des transitions jusqu'à 170 cm^{-1} avant de décroître comme pour SO.

Choix des transitions de SO et SO_2

Un des buts de ce travail sur les flux théoriques de SO et SO_2 est de sélectionner un certain nombre de transitions de ces deux molécules qui pourront être observées par les instruments actuels afin de contraindre efficacement les paramètres du modèle (section 2.1.4). Six transitions de chaque molécule ont été choisies parmi les plus intenses et l'influence des différents paramètres sur leur flux est décrite dans les sections 2.2.2 et 2.2.3. Ainsi, trois transitions de basse énergie pouvant être observées à l'aide du télescope de l'IRAM ont été sélectionnées pour chacune des

TAB. 15: *Transitions de SO et SO_2 sélectionnées.*

Transition	Fréquence (GHz)	E_{up} (cm^{-1})
SO $3_2 - 2_1$	99.299	6
SO $4_3 - 3_2$	138.178	11
SO $5_6 - 4_5$	251.825	35
SO $9_8 - 8_7$	346.528	55
SO $14_{15} - 13_{14}$	644.377	176
SO $15_{16} - 14_{15}$	687.456	200
SO_2 $3_{1,3} - 2_{0,2}$	104.029	5
SO_2 $5_{1,5} - 4_{0,4}$	135.696	11
SO_2 $3_{2,2} - 3_{1,3}$	158.199	11
SO_2 $18_{0,18} - 17_{1,17}$	321.330	105
SO_2 $20_{1,19} - 19_{2,18}$	338.611	138
SO_2 $17_{5,13} - 17_{4,14}$	457.466	140

molécules, plus trois transitions de haute énergie pouvant être observées au JCMT. Les douze transitions, six pour chaque molécule, sont indiquées dans le tableau 15 avec leur fréquence et leur énergie.

2.2.2 Influence des paramètres du modèle sur les flux de SO et SO_2

Masse centrale et taux d'accrétion de masse

Les figures 26 et 27 montrent l'intensité des transitions de ^{32}SO et $^{32}SO_2$ choisies (voir section 2.2.1) en fonction de la masse centrale de l'objet (M_*) et du taux d'accrétion de masse ($\dot{M}$). Pour SO, les transitions à 99 et 138 GHz dépendent moyennement de $\dot{M}$ et pratiquement pas de M_* tandis que les transitions de plus haute énergie dépendent des deux paramètres. Pour SO_2, les 6 transitions dépendent à la fois de M_* et de $\dot{M}$, mais avec une dépendance qui augmente avec l'énergie de la transition. Ceci s'explique par le fait que les transitions de basse énergie proviennent de l'enveloppe externe froide donc leur intensité va dépendre de la densité de colonne de SO et de SO_2 contenue dans la partie statique de l'enveloppe. Dans le modèle "inside-out", la région statique dépend de $\dot{M}$ (équations 1 et 3). En revanche, les transitions de haute énergie vont avoir une contribution provenant de la région chaude qui subit l'effondrement donc leur intensité va aussi dépendre de M_* qui gouverne la vitesse et la densité de l'enveloppe (voir équations 2 et 4).

Les rapports de flux $^{32}SO/^{34}SO$ en fonction de M_* et $\dot{M}$ sont reportés sur la figure 28. Les rapports de flux sont plus grands pour les transitions de plus basse énergie parce que ^{32}SO est optiquement mince dans l'enveloppe externe du fait de la faible densité de colonne de SO.

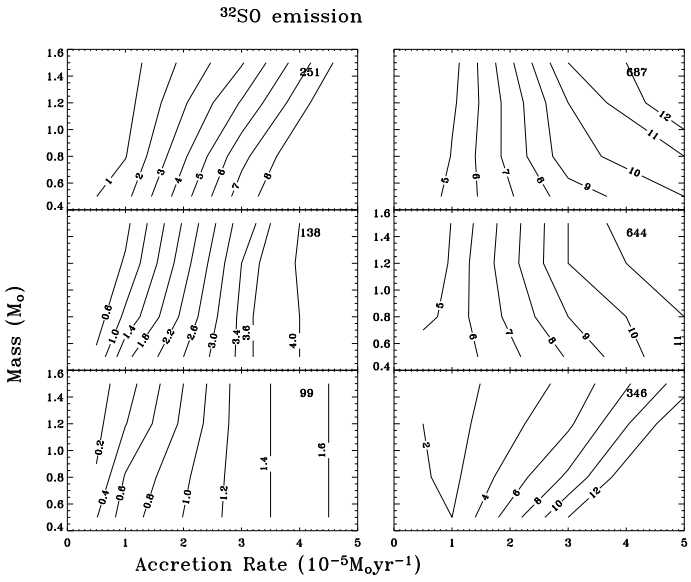

Fig. 26: *Flux des six transitions sélectionnées de* ^{32}SO *(99, 138, 251, 346, 644 et 687 GHz). Les flux sont tracés en fonction de la masse centrale et du taux d'accrétion de masse. Les abondances interne et externe de SO sont celles de l'exemple (tableau 14) :* 10^{-6} *et* 10^{-8}*. Les contours représentent les flux multipliés par* 10^{15} *erg* s^{-1} cm^{-2}*.*

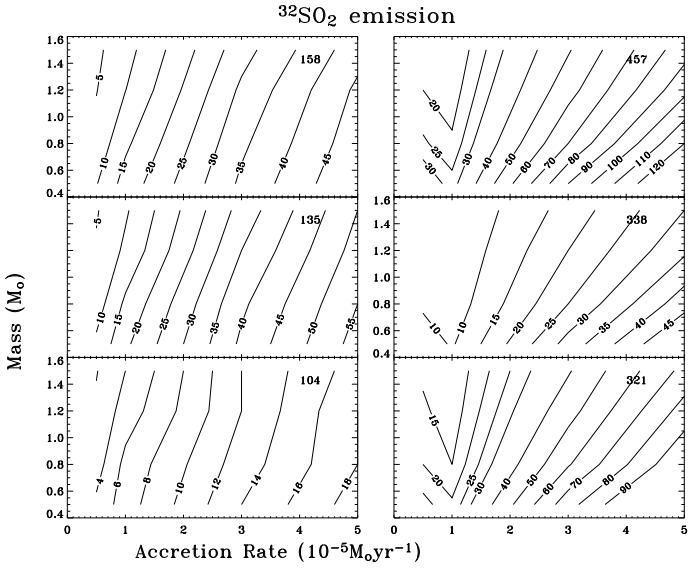

Fig. 27: *Flux des six transitions sélectionnées de* $^{32}SO_2$ *(104, 135, 158, 321, 338 et 457 GHz). Les flux sont tracés en fonction de la masse centrale et du taux d'accrétion de masse. Les abondances interne et externe de* SO_2 *sont celles de l'exemple (tableau 14) :* 10^{-7} *et* 10^{-9}*. Les contours représentent les flux multipliés par* 10^{17} *erg* s^{-1} cm^{-2}*.*

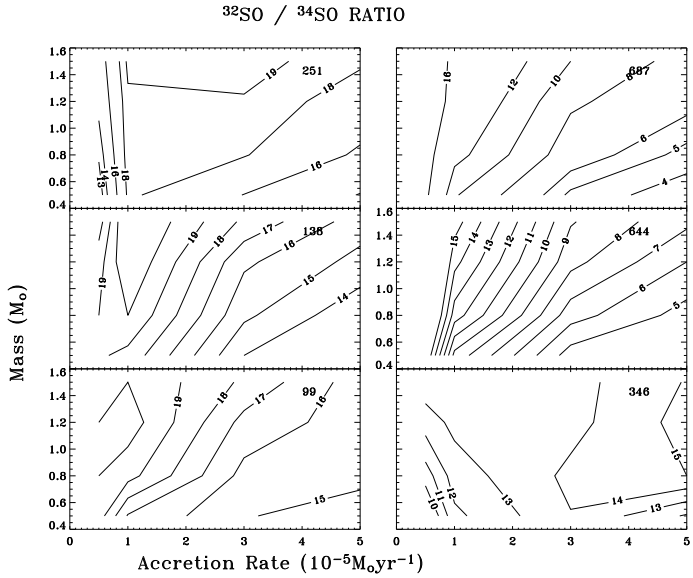

FIG. 28: *Rapport des flux $^{32}SO/^{34}SO$ des 6 transitions sélectionnées de SO (99, 138, 251, 346, 644 et 687 GHz). Les rapports de flux sont tracés en fonction de la masse centrale et du taux d'accrétion de masse. Les abondances interne et externe de SO sont celles de l'exemple (tableau 14) :* 10^{-6} *et* 10^{-8}.

En revanche, les rapports sont plus faibles pour les transitions de haute énergie et diminuent lorsque M_* et $\dot{M}$ augmentent parce que les raies sont de plus en plus optiquement épaisses. $\dot{M}$ ne peut pas être directement déduit des rapports des transitions de faible énergie qui dépendent également de la masse centrale. Vu que ces transitions sont optiquement minces, une partie de leur intensité doit provenir des régions internes de l'enveloppe donc dépendre de M_*. Je n'ai pas représenté les rapports $^{32}SO_2/^{34}SO_2$ en fonction de M_* et $\dot{M}$ parce que les six transitions sont optiquement minces aux abondances de l'exemple donc les rapports restent constants autour de 22. En conclusion, le flux des transitions de SO et SO_2 dépend à la fois de la masse centrale de l'objet et du taux d'accrétion de masse quelque soit l'énergie de la transition à cause de la faible épaisseur optique de ces deux transitions pour des abondances typiques. Il est donc très difficile de dériver M_* et $\dot{M}$ à partir d'observations de SO et SO_2.

Abondances externes et internes de SO et SO_2

Les figures 29 et 30 représentent les flux des 6 transitions de ^{32}SO et de $^{32}SO_2$ en fonction de leur abondance dans les parties internes et externes de l'enveloppe. Il apparaît clairement que les transitions de basse énergie sont dominées par l'émission provenant de l'enveloppe froide même si, comme on l'a vu précédemment, une contribution des parties internes est possible surtout pour SO_2 lorsque l'abondance externe est inférieure à 10^{-10}. En revanche, les deux transitions

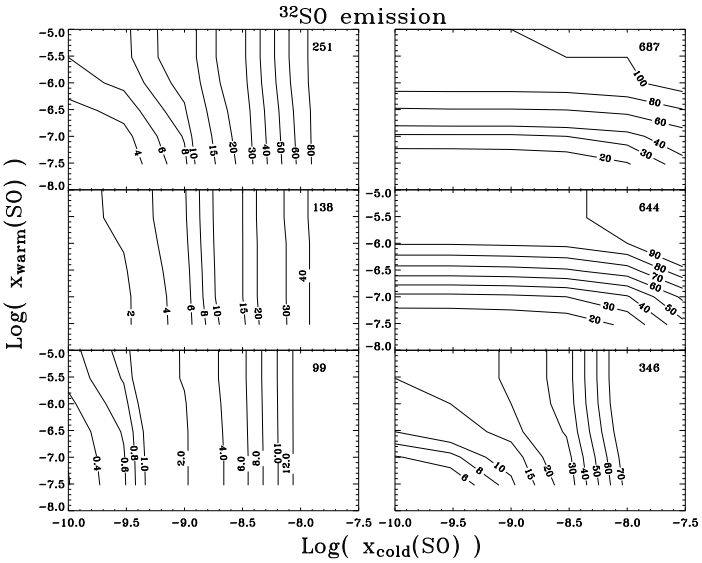

Fig. 29: *Flux des six transitions sélectionnées de* ^{32}SO *(99, 138, 251, 346, 644 et 687 GHz). Les flux sont tracés en fonction de l'abondance interne et externe de SO. La masse centrale et le taux d'accrétion de masse sont ceux de l'exemple (tableau 14) :* $0.8\,M_\odot$ *et* 3×10^{-5} $M_\odot$ an^{-1}. *Les contours représentent les flux multipliés par* 10^{16} *erg* s^{-1} cm^{-2}.

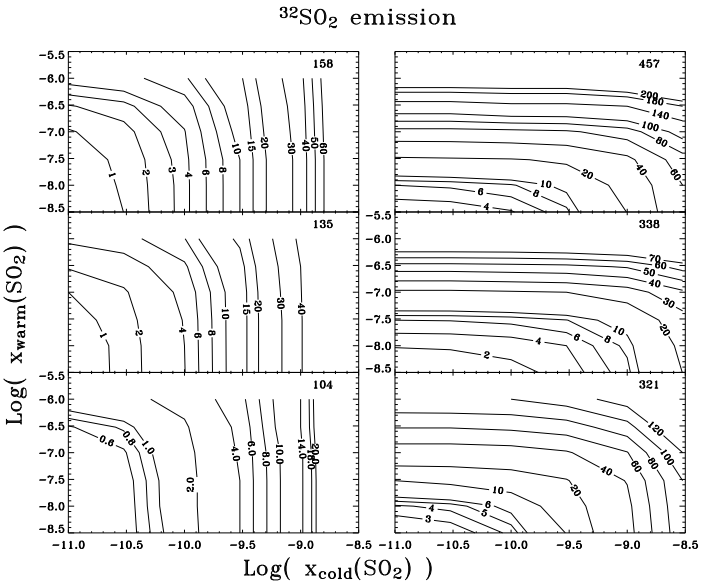

Fig. 30: *Flux des six transitions sélectionnées de* $^{32}SO_2$ *(104, 135, 158, 321, 338 et 457 GHz). Les flux sont tracés en fonction de l'abondance interne et externe de* SO_2. *La masse centrale et le taux d'accrétion de masse sont ceux de l'exemple (tableau 14) :* $0.8\,M_\odot$ *et* 3×10^{-5} $M_\odot$ an^{-1}. *Les contours représentent les flux multipliés par* 10^{17} *erg* s^{-1} cm^{-2}.

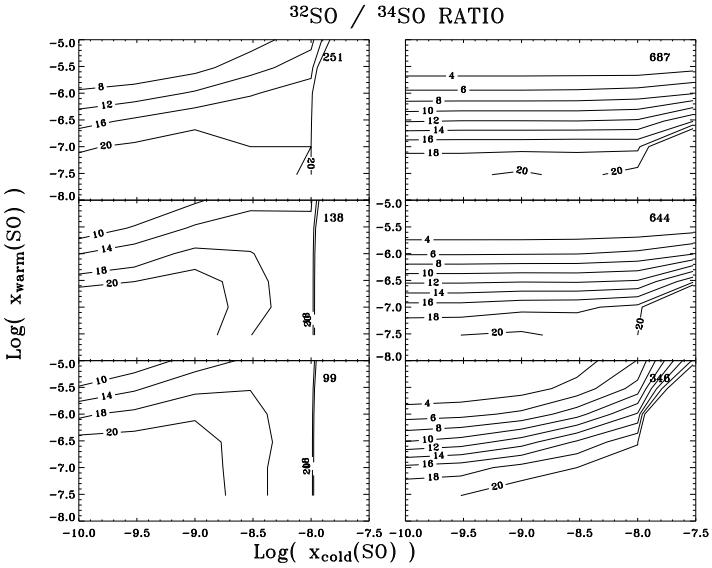

FIG. 31: *Rapport des flux $^{32}SO/^{34}SO$ des 6 transitions sélectionnées de SO (99, 138, 251, 346, 644 et 687 GHz). Les rapports de flux sont tracés en fonction de l'abondance interne et externe de SO. La masse centrale et le taux d'accrétion de masse sont ceux de l'exemple (tableau 14) : 0.8 $M_\odot$ et 3×10^{-5} $M_\odot$ an^{-1}.*

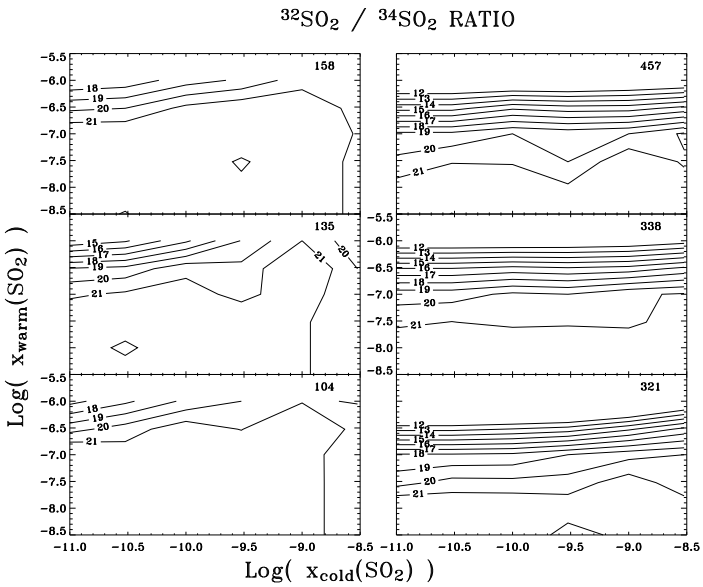

FIG. 32: *Rapport des flux $^{32}SO_2/^{34}SO_2$ des 6 transitions sélectionnées de SO_2 (104, 135, 158, 321, 338 et 457 GHz). Les rapports de flux sont tracés en fonction de l'abondance interne et externe de SO_2. La masse centrale et le taux d'accrétion de masse sont ceux de l'exemple (tableau 14) : 0.8 $M_\odot$ et 3×10^{-5} $M_\odot$ an^{-1}.*

de plus haute énergie de SO (644 GHz et 687 GHz) et SO_2 (338 et 457 GHz) ne sont sensibles qu'à x_{warm}.

Les rapports de flux $^{32}SO/^{34}SO$ et $^{32}SO_2/^{34}SO_2$ sont tracés sur les figures 31 et 32. Pour SO, les rapports des transitions de basse énergie à 99 et 138 GHz dépendent de $x_{warm}(SO)$ si l'abondance externe de SO est inférieure à 10^{-9} ou si l'abondance interne est supérieure à 10^{-6}. En fait, si l'abondance externe de SO est trop faible, les transitions de basse énergie sont optiquement minces et les rapports de flux $^{32}SO/^{34}SO$ vont sonder les régions internes de l'enveloppe. Maintenant, si l'abondance interne est grande, une partie de l'émission des transitions de basse énergie provient du cœur chaud. Dans les autres cas ($x_{cold}(SO) \geq 10^{-9}$ et $x_{warm}(SO) \leq 10^{-6}$), le rapport de flux provient de l'enveloppe froide même si les transitions sont optiquement minces. Les rapports de flux des quatre autres transitions (251, 346, 644 et 687 GHz) tracent majoritairement les régions chaudes.

Pour SO_2, les rapports des flux des trois transitions de basse énergie (104, 135 et 158 GHz) ne dépendent pas du tout de l'abondance externe et ces transitions sont optiquement minces si $x_{warm}(SO_2)$ est inférieure à 10^{-7}. Même à plus haute abondance ($x_{warm}(SO_2) \geq 10^{-7}$), ces transitions sont peu optiquement épaisses. Les rapports de flux des transitions de haute énergie de SO_2 (321, 338 et 457 GHz) ne dépendent que de $x_{warm}(SO_2)$, mais encore une fois ne présentent des variations que pour des abondances de SO_2 suffisamment grandes, supérieures à $\sim 10^{-7}$. D'un point de vue pratique, les 6 transitions de SO et de SO_2 peuvent donc contraindre les abondances de SO et de SO_2 dans l'enveloppe externe et interne à condition que la structure physique des sources soit déjà connue.

2.2.3 Utilisation des flux pour déterminer les paramètres

Il apparaît de la discussion précédente que les transitions de SO et SO_2 de haute énergie proviennnent de l'enveloppe interne chaude donc leur intensité dépendde la masse centrale de l'objet et de l'abondance interne x_{warm}. Les flux des trois transitions de haute énergie de ces deux molécules ainsi que les rapports de flux $^{32}SO/^{34}SO$ et $^{32}SO_2/^{34}SO_2$ sont donnés sur les figures 33 et 34 en fonction des deux paramètres, M_* et x_{warm}. Pour SO, le flux des transitions à 644 et 687 GHz ne dépend pas de la masse centrale et celui de la transition à 346 GHz ne dépend de la masse que pour des objets de plus de $0.8\,M_\odot$. Contrairement à ce que Ceccarelli et al. (2003) avait trouvé pour H_2CO, le flux de ^{32}SO ne contraint donc pas efficacement la masse M_*. En revanche, le flux des deux transitions de plus haute énergie de ^{32}SO et les rapports de flux $^{32}SO/^{34}SO$ des trois transitions permettent de contraindre l'abondance $x_{warm}(SO)$. Pour SO_2, le flux des trois transitions de haute énergie de même que les rapports $^{32}SO_2/^{34}SO_2$ dépendent uniquement de $x_{warm}(SO_2)$, sauf la transition à 321 GHz qui dépend de M_* si $x_{warm}(SO_2)$

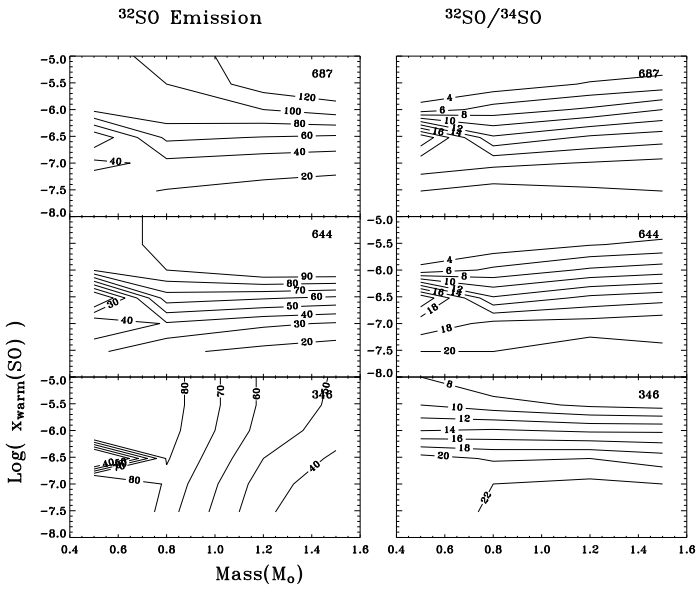

FIG. 33: *Flux des trois transitions de haute énergie de* ^{32}SO *(346, 644 et 687 GHz) ainsi que les rapports de flux* $^{32}SO/^{34}SO$ *correspondants en fonction de la masse centrale de l'objet et de l'abondance de SO dans les parties internes de l'enveloppe. Les autres paramètres sont* 3×10^{-5} $M_\odot$ *an*$^{-1}$ *pour le taux d'accrétion de masse et* 10^{-8} *pour* $x_{cold}(SO)$ *(tableau 14). Les contours représentent les flux multipliés par* 10^{16} *erg* s^{-1} cm^{-2}.

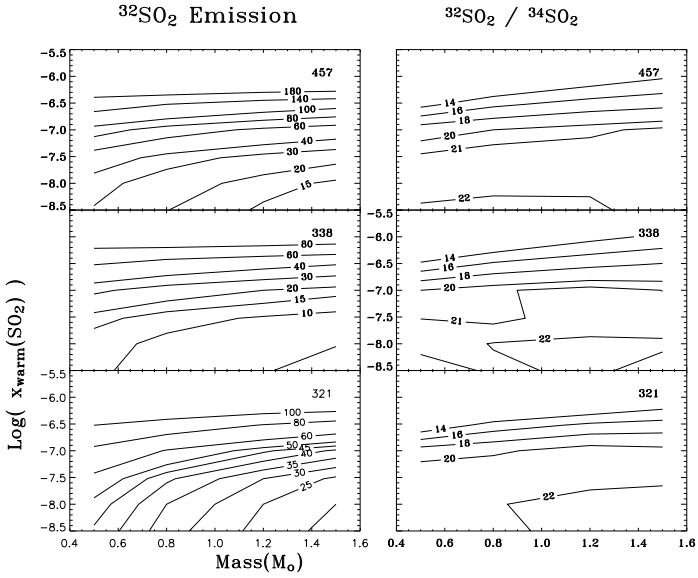

FIG. 34: *Flux des trois transitions de haute énergie de* $^{32}SO_2$ *(321, 338 et 457 GHz) ainsi que les rapports de flux* $^{32}SO_2/^{34}SO_2$ *correspondants en fonction de la masse centrale de l'objet et de l'abondance de* SO_2 *dans les parties internes de l'enveloppe. Les autres paramètres sont* 3×10^{-5} $M_\odot$ *an*$^{-1}$ *pour le taux d'accrétion de masse et* 10^{-9} *pour* $x_{cold}(SO_2)$ *(tableau 14). Les contours représentent les flux multipliés par* 10^{17} *erg* s^{-1} cm^{-2}.

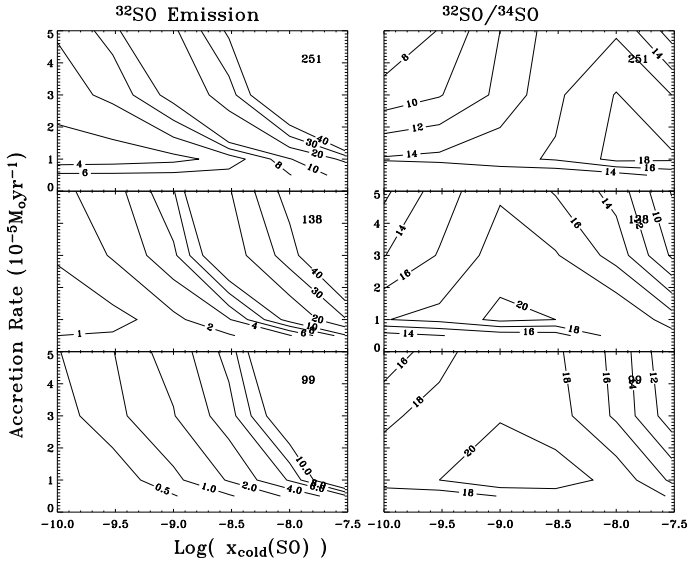

Fig. 35: *Flux des trois transitions de basse énergie de* ^{32}SO *(99, 138 et 251 GHz) ainsi que les rapports de flux* $^{32}SO/^{34}SO$ *correspondants en fonction du taux d'accrétion de masse et de l'abondance externe de SO. Les autres paramètres sont 0.8* $M_\odot$ *pour la masse centrale et* 10^{-6} *pour* $x_{warm}(SO)$ *(tableau 14). Les contours représentent les flux multipliés par* 10^{16} *erg* s^{-1} cm^{-2}.

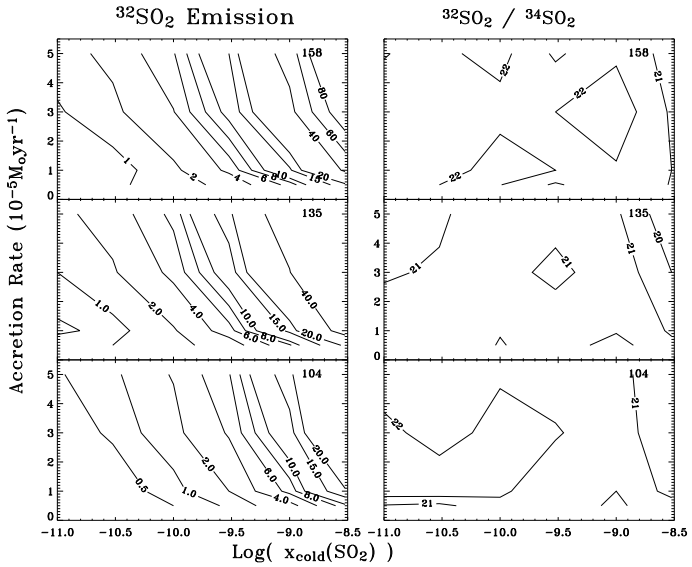

Fig. 36: *Flux des trois transitions de basse énergie de* $^{32}SO_2$ *(104, 135, 158 GHz) ainsi que les rapports de flux* $^{32}SO_2/^{34}SO_2$ *correspondants en fonction du taux d'accrétion de masse et de l'abondance externe de* SO_2*. Les autres paramètres sont 0.8* $M_\odot$ *pour la masse centrale et* 10^{-7} *pour* $x_{warm}(SO_2)$ *(tableau 14). Les contours représentent les flux multipliés par* 10^{17} *erg* s^{-1} cm^{-2}.

$\leq 3 \times 10^{-8}$. En conclusion, le flux de SO_2 ne permettent pas non plus de contraindre la masse centrale.

Inversement, les trois transitions de basse énergie de SO (99, 138 et 251 GHz) et SO_2 (104, 135 et 158 GHz) tracent l'enveloppe froide de la protoétoile et leur intensité dépend donc du taux d'accrétion de masse et de x_{cold}. Les figures 35 et 36 montrent les flux de ces trois transitions pour chacune des molécules ainsi que les rapports des flux $^{32}SO/^{34}SO$ et $^{32}SO_2/^{34}SO_2$ en fonction de $\dot{M}$ et x_{cold}. Dans le cas de SO, l'ensemble des flux et des rapports de flux permettent de contraindre ces deux paramètres. Cependant, les transitions de ^{32}SO n'étant pas suffisamment épaisses, les rapports $^{32}SO/^{34}SO$ ne présentent pas une sensibilité aux paramètres permettant de distinguer les différents cas. Dans le cas de SO_2, les flux sont sensibles aux deux paramètres tandis que les rapports de flux sont quasiment constant, reflétant le fait que ces transitions soient optiquement minces.

En conclusion, des observations des 6 transitions de chacune des molécules permettraient donc de contraindre au moins 3 des 4 paramètres : le taux d'accrétion de masse et les abondances externe et interne (de SO et de SO_2 respectivement). Cependant la détermination de $\dot{M}$ est difficile compte tenu du fait que les flux dépendent seulement marginalement de ce paramètre. L'observation des transitions isotopiques ^{34}SO n'apporterait pas vraiment d'information supplémentaire tandis que les flux de l'isotope $^{34}SO_2$ seraient inutiles car les transitions sont optiquement minces. Pour déterminer M_* et $\dot{M}$, il est donc nécessaire de faire une étude complémentaire de l'émission de H_2CO (Ceccarelli et al., 2003; Maret et al., 2004) ou de l'émission continue des poussières (e.g. Jørgensen et al., 2002). Une fois que M_* et $\dot{M}$ sont connus, le modèle peut être utilisé pour calculer les abondances externes et internes de SO et SO_2 dans une enveloppe protostellaire.

2.3 Application à l'émission d'IRAS16293/L1689N

IRAS16293 est la seule protoétoile pour laquelle des observations de SO et SO_2 ont été faites dans une gamme de longueur d'onde suffisante pour couvrir à la fois les conditions d'excitation du cœur chaud et de l'enveloppe externe. J'ai utilisé des observations de SO et SO_2 obtenues avec les télescopes du JCMT et du CSO publiées par Blake et al. (1994) ainsi qu'une observation de SO à plus basse énergie faite au SEST (voir section 1.1.2). L'ensemble des observations utilisées est résumé dans le tableau 16. Comme je l'ai expliqué précédemment, les transitions de SO et SO_2 ne permettent pas de déterminer l'ensemble des paramètres du modèle. J'ai donc utilisé la masse et le taux d'accrétion de masse calculés par Ceccarelli et al. (2000a) grâce à des observations de H_2O : 0.8 $M_\odot$ et 3×10^{-5} $M_\odot$ an^{-1}. J'ai fait varier les deux autres paramètres, l'abondance

Tab. 16: *Transitions de SO et SO_2 observées dans IRAS16293 avec les fréquences correspondantes. L'observation obtenue avec le télescope du SEST provient du travail présenté dans cette thèse au chapitre 1 et publié dans Wakelam et al. (2004b) tandis que celles obtenues avec le JCMT et le CSO ont été publiées par Blake et al. (1994). $\int T_{MB}\Delta v$ est l'intensité intégrée observée. La dernière colonne correspond au coefficient de conversion permettant de passer de l'intensité intégrée exprimée en K km s^{-1} au flux en erg s^{-1} cm^{-2}.*

Transition	Freq (GHz)	E_{up} (cm^{-1})	Télescope	$\int T_{MB}\Delta v$ (K km s^{-1})	Coefficient de conversion
SO $3_2 - 2_1$	99.3	6	SEST	8	6.2×10^{-17}
SO $7_8 - 7_7$	214.3	56	JCMT	0.76	1.3×10^{-16}
SO $5_5 - 4_4$	215.2	31	JCMT	15.1	1.3×10^{-16}
SO $6_5 - 5_4$	219.9	24	JCMT	21	1.5×10^{-16}
SO $6_6 - 5_5$	258.2	39	JCMT	16.2	1.6×10^{-16}
SO $7_6 - 6_5$	261.8	33	JCMT	22.2	1.6×10^{-16}
SO $7_8 - 6_7$	340.7	56	CSO	20.7	3.9×10^{-16}
SO $8_8 - 7_7$	344.2	61	JCMT	18.1	2.1×10^{-16}
SO $9_8 - 8_7$	346.5	55	CSO	37.2	4×10^{-16}
SO_2 $26_{3,23} - 26_{2,24}$	213.1	244	JCMT	0.75	1.3×10^{-16}
SO_2 $22_{2,20} - 22_{1,21}$	216.6	173	JCMT	1.3	1.4×10^{-16}
SO_2 $11_{1,11} - 10_{0,10}$	222.0	42	JCMT	3.8	1.4×10^{-16}
SO_2 $4_{2,2} - 3_{1,3}$	235.1	13	JCMT	2.8	1.5×10^{-16}
SO_2 $16_{1,15} - 15_{2,14}$	236.2	91	JCMT	1.1	1.5×10^{-16}
SO_2 $5_{2,4} - 4_{1,3}$	241.6	16	JCMT	2.6	1.5×10^{-16}
SO_2 $14_{0,14} - 13_{1,13}$	244.2	65	JCMT	2.8	1.5×10^{-16}
SO_2 $26_{3,23} - 25_{4,22}$	245.3	244	JCMT	0.76	1.5×10^{-16}
SO_2 $10_{3,7} - 10_{2,8}$	245.6	50	JCMT	2.3	1.5×10^{-16}
SO_2 $13_{1,13} - 12_{0,12}$	251.2	57	JCMT	6.9	1.6×10^{-16}
SO_2 $8_{3,5} - 8_{2,6}$	251.2	38	JCMT	3.5	1.6×10^{-16}
SO_2 $7_{3,5} - 7_{2,6}$	257.1	33	JCMT	3.5	1.6×10^{-16}
SO_2 $9_{3,7} - 9_{2,8}$	258.9	44	JCMT	2.9	1.6×10^{-16}
SO_2 $21_{2,20} - 21_{1,21}$	332.1	152	CSO	1.3	3.8×10^{-16}
SO_2 $8_{2,6} - 7_{1,7}$	334.7	30	CSO	1.8	3.9×10^{-16}
SO_2 $18_{4,14} - 18_{3,15}$	338.3	137	CSO	1.6	3.9×10^{-16}
SO_2 $19_{1,19} - 18_{0,18}$	346.6	117	CSO	5.0	4.0×10^{-16}
SO_2 $14_{4,10} - 14_{3,11}$	351.9	94	CSO	1.2	4.1×10^{-16}
SO_2 $13_{4,10} - 13_{3,11}$	357.1	85	CSO	1.5	4.1×10^{-16}
SO_2 $15_{4,12} - 15_{3,13}$	357.2	104	CSO	1.6	4.1×10^{-16}
SO_2 $11_{4,8} - 11_{3,9}$	357.4	69	CSO	1.7	4.1×10^{-16}

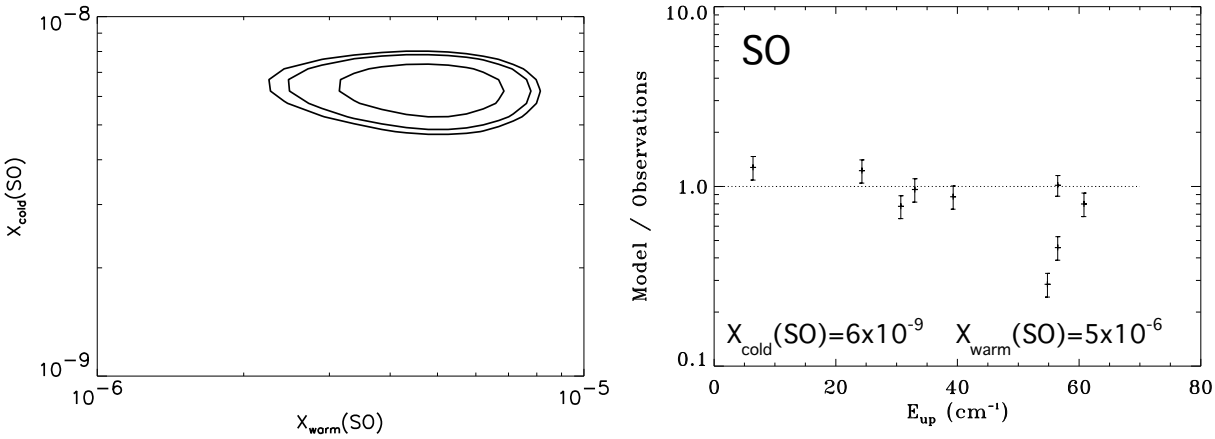

FIG. 37: *Abondances interne et externe de SO (graphique de gauche) dans IRAS16293 contraintes par la comparaison entre l'émission de SO et les prédictions du modèle pour la masse centrale et le taux d'accrétion de masse de 0.8 $M_\odot$ et 3×10^{-5} $M_\odot$ an^{-1}. Le graphique de droite représente les rapports entre les flux calculés par le modèle et les flux observés dans IRAS16293 pour la molécule de SO. Les abondances externe et interne utilisées pour ce modèle ont été déduites du graphique de gauche et sont respectivement :* 6×10^{-9} *et* 5×10^{-6}. *Les contours de* χ^2 *correspondent aux intervalles de confiance respectivement de 1 (63.3%), 2 (95.4%) et 3σ (99.7%).*

externe et interne de chacune des molécules : x_{cold}(SO) entre 10^{-10} et 10^{-8}, x_{warm}(SO) entre 3×10^{-7} et 10^{-5}, $x_{cold}(SO_2)$ entre 10^{-11} et 3×10^{-9} et $x_{warm}(SO_2)$ entre 3×10^{-9} et 10^{-6}.

Les flux observés, à l'aide d'un radiotélescope, sont généralement donnés en K km s^{-1}. Pour les convertir en erg s^{-1} cm^{-2}, il suffit de les multiplier par un facteur de conversion qui dépend des caractéristiques du télescope utilisé, de la fréquence et de la taille de la région émettrice. Le dernier paramètre peut être négligé si l'on considère que cette région est petite devant la taille du lobe. Dans le cas contraire d'une source dont la taille est plus grande ou comparable à la taille du lobe, le signal mesuré doit être convolué par une gaussienne représentant la réponse du télescope. C'est ce qui a été fait pour cette étude. L'intensité intégrée observée (en K km s^{-1}) pour chaque transition est donnée dans le tableau 16 avec les coefficients de conversions. Les flux observés ont été comparés aux résultats du modèle par la méthode statistique du χ^2.

2.3.1 Abondance de SO

La figure 37 représente les trois contours de χ^2 en fonction des abondances interne et externe de SO. Ces deux abondances sont relativement bien contraintes entre 2×10^{-6} et 9×10^{-6} pour x_{warm}(SO) et entre 4×10^{-9} et 7×10^{-9} pour x_{cold}(SO) si l'on considère le contour à 3 σ. Les abondances de SO trouvées à la fois dans le cœur chaud et l'enveloppe froide d'IRAS16293 sont en bon accord avec celles obtenues par d'autres méthodes décrites à la section 1.1.4. En effet,

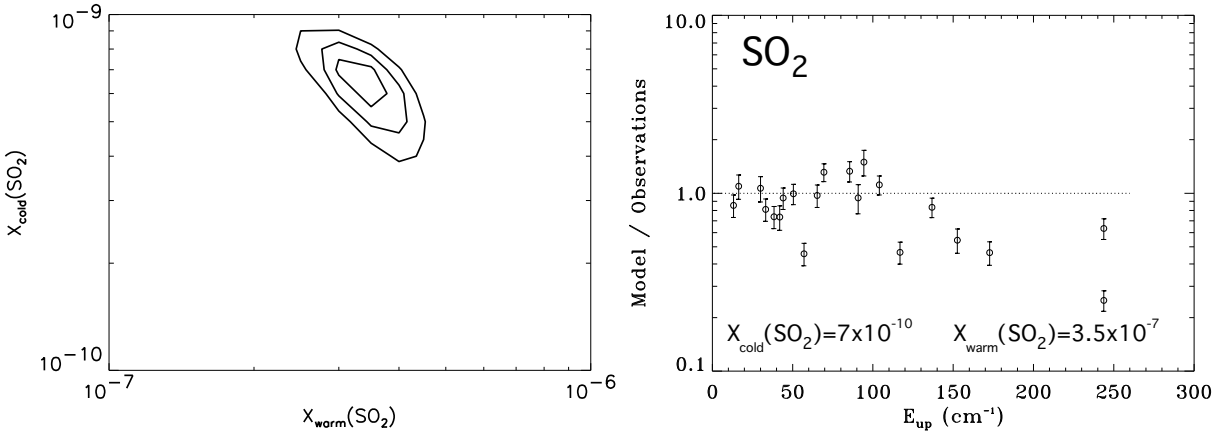

Fig. 38: *Abondances interne et externe de SO_2 (graphique de gauche) dans IRAS16293 contraintes par la comparaison entre l'émission de SO et les prédictions du modèle pour la masse centrale et le taux d'accrétion de masse de 0.8 $M_\odot$ et 3×10^{-5} $M_\odot$ an^{-1}. Le graphique de droite représente les rapports entre les flux calculés par le modèle et les flux observés dans IRAS16293 pour la molécule de SO_2. Les abondances externe et interne utilisées pour ce modèle ont été déduites du graphique de gauche et sont respectivement :* 7×10^{-9} *et* 3.5×10^{-7}. *Les contours de χ^2 correspondent aux intervalles de confiance respectivement de 1 (63.3%), 2 (95.4%) et 3σ (99.7%).*

une abondance de 1.7×10^{-6} a été calculée dans le cœur chaud avec la méthode des diagrammes rotationnels tandis que l'utilisation d'un modèle LVG a donné une abondance de $(6-16)\times10^{-9}$ pour SO dans l'enveloppe froide.

La méthode du χ^2 nous permet de trouver les paramètres qui sont en meilleur accord avec les observations. Pour vérifier la "qualité" de la modélisation, les flux théoriques obtenus pour le meilleur jeu de paramètres sont divisés par les flux observés. Ainsi, un rapport de 1 indique un très bon accord entre le modèle et les observations. Les rapports de flux Modèle/Observations pour SO sont montrés à la figure 37 pour $x_{warm}(\mathrm{SO})=5\times10^{-6}$ et $x_{cold}(\mathrm{SO})=6\times10^{-9}$. L'accord est relativement bon sauf pour les deux transitions observées au CSO : 7_8-6_7 à 340 GHz et 9_8-8_7 à 346 GHz dont les rapports sont inférieurs à 0.5. Le mauvais accord provenant de la transition à 346 GHz peut être expliqué par une importante incertitude de l'intensité intégrée de cette raie qui est mélangée à une raie de SO_2 (voir Blake et al., 1994).

2.3.2 Abondances de SO_2

Comme pour SO, les abondances de SO_2 dans les régions interne et externe de l'enveloppe sont relativement bien contraintes entre 2.5×10^{-7} et 5×10^{-7} pour $x_{warm}(SO_2)$ et entre 4×10^{-10} et 9×10^{-10} pour $x_{cold}(SO_2)$ (voir la figure 38) si l'on considère le contours à 3 σ. Encore une fois, ces abondances sont en bon accord avec celles trouvées à la section 1.1.4 par d'autres méthodes

qui sont de 5.4×10^{-7} dans le cœur chaud d'IRAS16293 et de 4×10^{-10} dans l'enveloppe froide. Ce résultat était prévisible puisque ces autres méthodes supposaient toutes deux l'ETL qui est également l'approximation utilisée dans le modèle pour SO_2 (voir section 2.1.5).

Les rapports de flux Modèle/Observations pour SO_2 sont montrés sur la figure 38. A des énergies inférieures à 100 cm^{-1}, une seule transition montre un mauvais accord avec le modèle : la transition $19_{1,19} - 18_{0,18}$ avec un rapport de 0.4. Ceci peut s'expliquer par le fait que cette raie soit confondue avec une autre raie de SO_2 (transition $9_{3,7} - 9_{2,8}$). Au delà de 100 cm^{-1}, toutes les transitions ont un rapport Modèle/Observations inférieur à 0.7. Le modèle à l'equilibre thermodynamique local prédit donc des flux qui sont inférieurs aux flux réels. Il est nécessaire de connaître les taux de collision de SO_2 pour les niveaux supérieurs de cette molécule si l'on veut correctement calculer les abondances de SO_2 dans les enveloppes protostellaires.

2.3.3 Vérification de l'hypothèse du saut d'abondance de SO et SO_2 dans les régions internes

Pour vérifier l'approximation de la fonction "step" utilisée pour modéliser le profil d'abondance dans l'enveloppe protostellaire, j'ai comparé les flux de SO et SO_2 observés dans IRAS16293 avec un modèle d'effondrement ayant un profil d'abondance des deux molécules constant à travers l'enveloppe. Dans Blake et al. (1994), les auteurs ont conclu que l'émission des molécules soufrées dans IRAS16293 provenait des régions de chocs proches du centre de la protoétoile provoquées par l'éjection de matière dans les flots qui rencontre l'enveloppe dense de la protoétoile. Pour vérifier cette hypothèse, les flux observés ont également été comparés à ceux calculés par un modèle LVG (voir section B.2.4).

Les comparaisons avec ces deux types de modèles sont montrées sur la figure 39 pour SO et sur la figure 40 pour SO_2.

SO

Pour SO, l'accord des observations avec le modèle avec un profil d'abondance de SO constant est nettement moins bon qu'avec le modèle de "jump" surtout pour les transitions dont l'énergie est supérieure à 40 cm^{-1}. Notons que l'abondance de SO utilisée dans le modèle sans "jump" change de la même façon l'intensité de toutes les transitions sans modifier l'intensité relative entre les transitions. La différence entre ces deux modèles n'est cependant pas aussi importante que pour H_2CO (Maret et al., 2004). Il est possible que dans notre cas, les transitions de SO observées ne proviennent pas de deux régions bien distinctes de l'enveloppe. En effet, l'énergie des transitions utilisées ici ne va pas au-delà de 60 cm^{-1} ce qui impliquerait que l'on ne trace pas l'émission du cœur chaud mais des régions plus externes. Des transitions à plus haute énergie

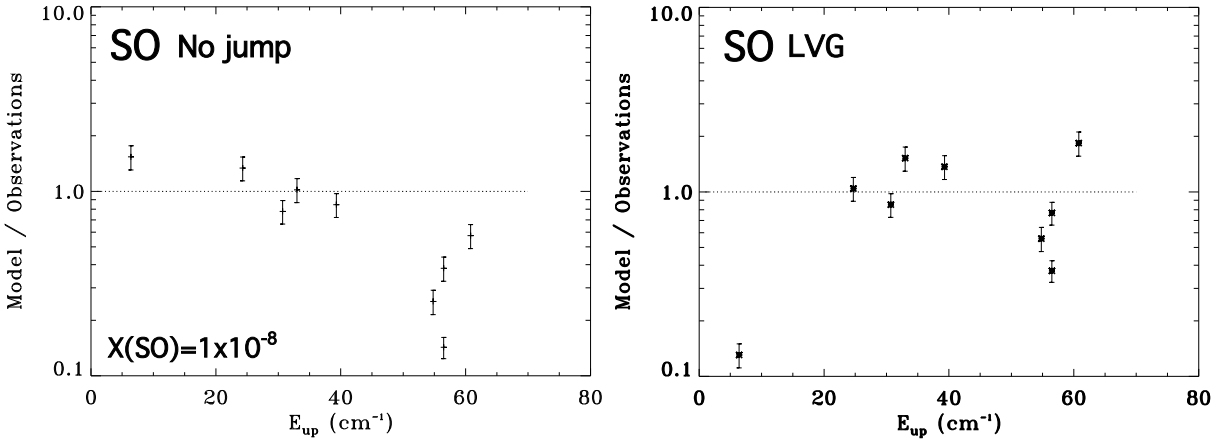

Fig. 39: *Comparaison entre les flux observés dans IRAS16293 et les flux modélisés. A gauche, les flux thóriques sont calculés par un modèle d'effondrement supposant une abondance constante de SO dans toute l'enveloppe tandis qu'à droite les flux théoriques sont calculés par un modèle LVG pour les chocs. Pour le graphique de gauche, l'abondance constante de SO est* 10^{-8}*, la masse centrale de 0.8* $M_\odot$ *et le taux d'accrétion de masse de* 3×10^{-5} $M_\odot$ an^{-1}*. Pour le modèle LVG, la densité de colonne de SO utilisée est de* 1×10^{15} cm^{-2}*, la température de 100 K et la densité de* 1×10^6 cm^{-3}*. L'émission de SO provenant d'IRAS16293 est supposée ne pas être diluée dans le lobe d'observation.*

comme les transitions à 644 et 687 GHz précédemment citées seraient nécessaires pour mieux modéliser l'abondance interne de SO.

Pour le modèle LVG, les trois paramètres du modèle (la densité de colonne de l'espèce, la température et la densité du gaz) ont été contraints par les observations par la méthode du χ^2. Les flux de SO sont supposés remplir le lobe du télescope, c'est-à-dire que que les flux modélisés sont calculés pour une taille d'émission de $20''$ et directement comparés aux flux observés sans correction de dilution. Le meilleur accord a été obtenu pour une densité de colonne de SO de 1×10^{15} cm^{-2}, une température de 100 K et une densité de H_2 de 1×10^6 cm^{-3} (voir figure 39). L'accord avec les observations est également moins bon qu'avec le modèle d'éffondrement, surtout pour la transition de plus basse et celle de plus haute énergie confirmant que l'émission de SO provient de l'enveloppe protostellaire même et non de régions de choc.

SO_2

Tout comme pour SO, la pertinence de l'hypothèse du saut d'abondance de SO_2 dans les régions internes de l'enveloppe a été testée en essayant de modéliser les observations à l'aide d'une abondance constante dans l'enveloppe. Les rapports Modèle/Observations pour des flux théoriques calculés avec une abondance constante dans l'enveloppe de 6×10^{-9} sont montrés sur la figure 40. Il apparaît clairement qu'une abondance constante de SO_2 ne peut pas rendre compte

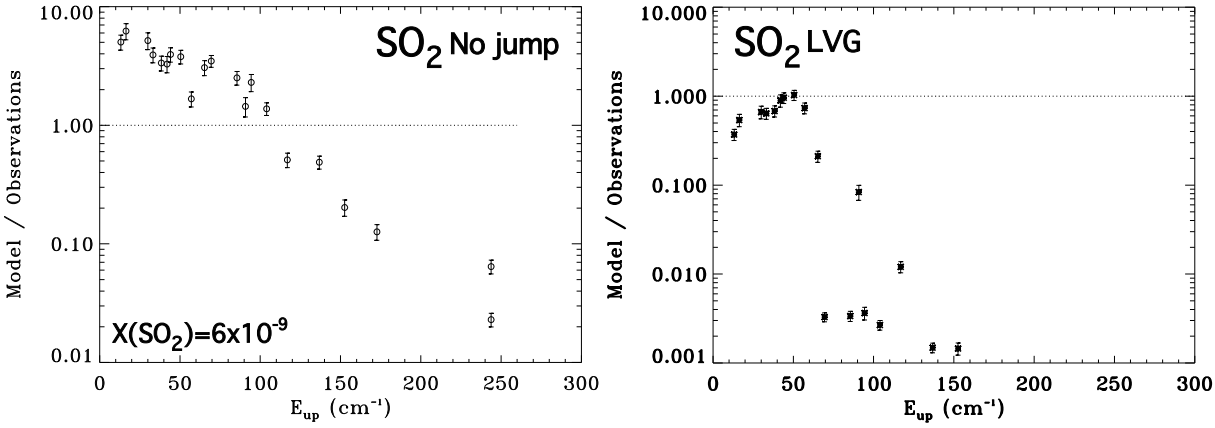

FIG. 40: *Comparaison entre les flux observés dans IRAS16293 et les flux modélisés. A gauche, les flux thóriques sont calculés par un modèle d'effondrement supposant une abondance constante de SO_2 dans toute l'enveloppe tandis qu'à droite les flux théoriques sont calculés par un modèle LVG pour les chocs. Pour le graphique de gauche, l'abondance constante de SO_2 est 6×10^{-9}, la masse centrale de 0.8 $M_\odot$ et le taux d'accrétion de masse de 3×10^{-5} $M_\odot$ an^{-1}. Pour le modèle LVG, la densité de colonne de SO utilisée est de 1×10^{14} cm^{-2}, la température de 300 K et la densité de 1×10^{7} cm^{-3}. L'émission de SO_2 provenant d'IRAS16293 est supposée ne pas être diluée dans le lobe d'observation.*

des flux de SO_2 observés dans IRAS16293 et qu'un saut de l'abondance dans les régions internes est nécessaire. De même, le modèle LVG ne reproduit pas du tout les flux SO_2 observés dans IRAS16293. Les paramètres du modèle LVG utilisés sont : $N_{SO_2} = 1 \times 10^{14}$ cm^{-2}, $T_k = 300$ K et $n(H_2) = 1 \times 10^{7}$ cm^{-3}.

En conclusion, l'émission des molécules soufrées provient bien d'un cœur chaud où l'abondance des molécules soufrées augmente significativement et ne peut être reproduite avec un profil d'abondance constant ni en invoquant la présence de chocs à proximité du centre de l'objet.

Chapitre 3

Modélisation de la chimie du soufre : NAHOON

Dans le but d'étudier en détail la chimie du soufre dans les régions de formation stellaire, j'ai développé un modèle de la chimie dans le milieu interstellaire, en collaboration avec Paola Caselli (Osservatorio di Arcetri, Italie), Eric Herbst (The Ohio State University, USA) et mes directeurs de thèse. Le modèle calcule l'évolution chimique en fonction du temps d'un système fermé caractérisé par une densité de gaz et de poussière et une température fixées. Il s'agit d'un code 0D qui ne tient pas compte des effets de structure ou de dynamique. L'évolution de l'abondance des espèces chimiques considérées, à partir de leur valeur initiale, est déterminée par une série de réactions chimiques dont la vitesse dépend des conditions physiques. Dans une première partie, je décrirai la cinétique chimique des milieux modélisés, puis je détaillerai le fonctionnement du modèle, ses paramètres et les données réactionnelles utilisées. Je présenterai ensuite les résultats du code appliqué au nuage moléculaire et aux cœurs chauds et comparerai ces simulations à des observations. J'ai baptisé ce modèle NAHOON en souvenir du bateau sur lequel je suis née.

3.1 La cinétique chimique

3.1.1 Réactions en phase gazeuse

Dans le milieu interstellaire, les réactions à trois corps (autres que les réactions faisant intervenir les grains) sont inefficaces en raison des très faibles densités en jeu (inférieures à 10^7 cm^{-3}). La chimie en phase gazeuse est donc dominée par les reactions à deux corps, dont le bilan peut s'écrire :

$$\nu_A \mathrm{A} + \nu_\mathrm{B} \mathrm{B} \rightarrow \nu_\mathrm{M} \mathrm{M} + \nu_\mathrm{N} \mathrm{N}$$

A et B étant les réactifs, M et N les produits et ν_A, ν_B, ν_M et ν_N les coefficients stoechiométriques de la réaction. Si l'on ne considère que les réactions élémentaires, ou simples, qui décrivent un seul "acte" microscopique, ces coefficients sont des nombres entiers. La vitesse de ce type de réaction (nombre de réactions par unité de temps et de volume) va alors s'écrire :

$$\mathrm{v} = -\frac{1}{\nu_\mathrm{A}}\frac{\mathrm{d[A]}}{\mathrm{dt}} = -\frac{1}{\nu_\mathrm{A}}\frac{\mathrm{d[B]}}{\mathrm{dt}} = \frac{1}{\nu_\mathrm{M}}\frac{\mathrm{d[M]}}{\mathrm{dt}} = \frac{1}{\nu_\mathrm{N}}\frac{\mathrm{d[N]}}{\mathrm{dt}}$$

où $\frac{d[X]}{dt}$ est la dérivée de la concentration du composé X par rapport au temps. Le nombre de collisions entre A et B varie comme le produit [A][B], d'où l'expresssion suivante pour la vitesse d'une réaction à deux corps élémentaires, appelée loi de Van't Hoff :

$$\mathrm{v} = k[\mathrm{A}][\mathrm{B}]$$

où k est la constante de vitesse, différente pour chaque réaction et qui dépend de la température.

La dépendance en température d'une réaction, lorsqu'elle existe, est donnée par la constante de vitesse k, aussi appelée taux de réaction. L'étude expérimentale des variations de k en fonction de T a montré que l'on obtient, pour la très grande majorité des réactions, une excellente description de cette dépendance par la relation empirique suivante

$$k = \alpha \mathrm{e}^{-E_a/\mathrm{R}T} \tag{11}$$

que l'on appelle Loi d'Arrhénius. R est la constante des gaz parfaits (8.314 J mol^{-1} K^{-1}) ; α et E_a sont deux constantes généralement déterminées de façon expérimentale mais qui ont également une signification physique. La collision de deux espèces chimiques ne donne pas toujours lieu à une réaction même si celle-ci est théoriquement possible. Il n'en résulte souvent qu'un choc élastique et il n'y a formation d'un composé nouveau que si l'orientation relative des deux réactants potentiels au moment de la collision est favorable à la réaction. Ce facteur d'orientation, lié à la nécessité d'un recouvrement particulier des orbitales électroniques, est contenu dans le terme α de la loi d'Arrhénius. $\mathrm{E_a}$ est l'énergie d'activation nécéssaire pour rendre les composés "actifs". Pour qu'une collision résulte en une réaction, il faut que les composés qui se rencontrent possèdent suffisamment d'énergie cinétique pour passer la barrière de potentiel due à leur répulsion à courte distance (voir figure 41).

Certaines réactions présentent un comportement plus complexe ; pour cette raison nous utilisons une formulation plus générale de $k(T)$:

$$k(T) = \alpha \left(\frac{T}{300}\right)^{\beta} \mathrm{e}^{-\frac{\gamma}{T}} \tag{12}$$

L'introduction d'un terme en $\left(\frac{T}{300}\right)^{\beta}$ permet de décrire l'ensemble des réactions à deux corps intervenant dans les conditions du milieu interstellaire.

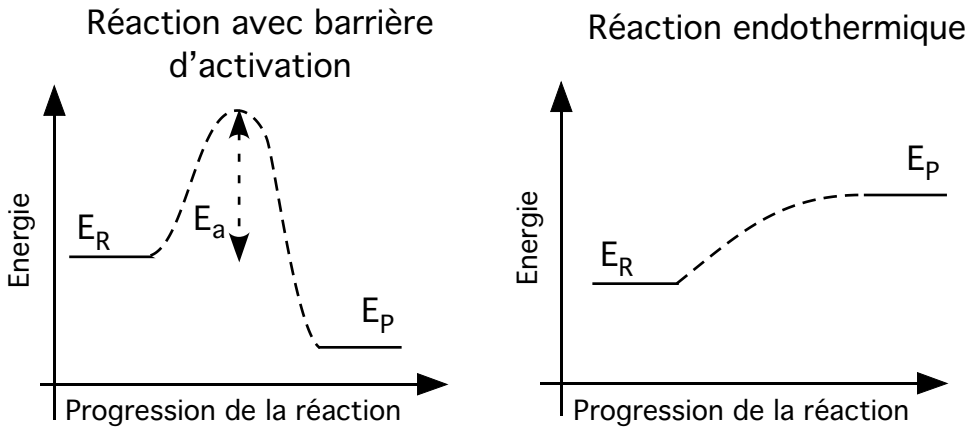

Fig. 41: *Cette figure représente un profil énergétique possible pour une réaction élémentaire. L'axe des ordonnées représente l'énergie potentielle du système (somme des diverses formes d'énergie associées à la structure moléculaire et à la nature des liaisons) et sur l'axe des abscisses est portée une variable liée à la progression de la réaction. Ce diagramme permet de comprendre la différence entre une réaction avec barrière d'activation et une réaction endothermique. L'énergie d'activation est l'énergie que le système doit fournir pour lui permettre de franchir un maximum d'énergie (barrière d'activation) pour que la réaction puisse se faire. Lorsque l'énergie des produits est plus basse que celle des réactants, la réaction libère de l'énergie au milieu extérieur et la réaction est exoénergétique. En revanche lorsque le niveau énergétique des produits est plus haut que celui des réactants, le système reçoit de l'énergie du milieu et la réaction est endoénergétique. Lorsque cette énergie est thermique on dit que la réaction est endothermique. On peut donc avoir des réactions avec barrière d'activation sans qu'elles soient endothermiques par contre une réaction endothermique possèdera toujours un terme d'énergie d'activation. Certaines réactions peuvent également être exoénergétiques mais ne pas posséder de barrière d'activation.*

3.1.2 Réactions avec les grains

Notre modèle n'inclut pas de chimie hétérogène (réactions catalysées par la poussière) à l'exception de la formation de H_2. Les grains sont uniquement traités comme un réservoir qui adsorbe des constituants de la phase gazeuse (déplétion) et en libère par évaporation. Ces échanges se font sans modifier la nature des espèces collées et évaporées.

Dans le modèle, les réactions de déplétion auront la forme suivante : A → JA. JA signifie que l'espèce A est collée sur le grain et ne doit donc plus être considérée comme présente dans le gaz. La vitesse de ces réactions est donnée par le taux de collision entre l'espèce considérée et les grains, qui dépend de la température et des sections efficaces collisionnelles, multiplié par une probabilité de collage. Cette probabilité est fixée à 1 pour les espèces neutres et à 0 pour les espèces ionisées (par example Hasegawa et al., 1992). Les réactions d'évaporation, quant à elles, sont dues à des effets thermiques (JA → A) mais aussi au rayonnement cosmique (JA + γ → A). Un autre type de réaction fait intervenir les grains : les échanges de charge entre les ions positifs et les grains chargés négativement.

Pour cette étude, les grains sont supposés avoir une taille unique (0.1 μm de rayon). Or dans la réalité, les grains interstellaires sont de différents types, carbonés ou silicatés par exemple, caractérisés par un rayon différent. Dans ce cas, la densité de grains qui est fonction de la taille des grains peut être donnée d'une loi de puissance en $r_{gr}^{-4.5}$ (Weingartner et Draine, 2001). Ce type de distribution de grains apporte une plus grande surface de grain donc favorise la déplétion des espèces gazeuses. Une des premières améliorations à apporter au modèle sera donc d'inclure une distribution de taille plutôt que d'utiliser une taille moyenne.

Formation de H_2 sur les grains

La formation de H_2 est longtemps restée un mystère, jusqu'à ce que soit mis en évidence le rôle central des grains (Gould et Salpeter, 1963). La principale voie de formation de H_2 se déroule en effet à la surface de la poussière, qui catalyse la réaction H + H → H_2, dont le taux est donné par

$$K = \alpha \times (T/300)^{\beta} \times \frac{n_H}{n_d} \tag{13}$$

où K est en cm^{3}s^{-1}, α et β sont des constantes mesurées en laboratoire, et T est la température cinétique. $\frac{n_H}{n_d}$ est le rapport de la densité de noyaux d'hydrogène ($n_H = n(H) + 2n(H_2)$) sur la densité de poussières (n_d). Ce rapport peut être exprimé en fonction des caractéristiques des grains, pour lesquelles nous avons adopté les valeurs typiques données par Hasegawa et al. (1992, voir aussi l'introduction). $\frac{n_H}{n_d}$ se calcule de la façon suivante :

$$\frac{n_H}{n_d} = \frac{\rho_g}{\rho_d} \times \frac{4\pi r_{gr}^3 \rho_{gr}}{3m_H} \tag{14}$$

avec $\rho_d = \frac{4}{3}\pi r_{gr}^3 \times \rho_{gr} \times n_d$ la densité globale de la poussière et $\rho_g = m_H \times n_H$ la densité globale du gaz. Le rapport $\frac{\rho_d}{\rho_g}$ vaut approximativement 10^{-2} et exprime la fraction en masse de poussières par rapport au gaz dans la galaxie. $\mathrm{r_{gr}}$ et ρ_{gr} sont le rayon et la densité volumique du grain que l'on prend généralement égaux à 10^{-5} cm et 3 g cm^{-3}. m_H est la masse atomique de l'hydrogène en gramme (1.66×10^{-24} g).

Recombinaison des ions sur les grains chargés négativement

Les grains neutres se chargent négativement en absorbant les électrons du milieu et les grains négatifs deviennent rapidement plus abondants que les grains neutres. La réaction de recombinaison avec les grains négatifs s'écrit : $\mathrm{A}^+ + \mathrm{grain}^- \rightarrow \mathrm{A} + \mathrm{grain}$. En se neutralisant, le réactant positif peut également donner plusieurs produits comme par exemple dans la réaction suivante : $\mathrm{SO}^+ + \mathrm{grain}^- \rightarrow \mathrm{S} + \mathrm{O} + \mathrm{grain}$.

Les processus de ces échanges de charge sont décris en détail par Weisheit et Upham (1978). Le coefficient de réaction de la neutralisation avec un grain peut s'écrire[1] :

$$K = \sigma_{gr} \langle v_0 \rangle (1 - Z_i \Omega) \tag{15}$$

où $\langle v_0 \rangle$ est la vitesse relative moyenne entre la molécule et les grains, σ_{gr} est la section de collision géométrique du grain, prise égale à πr_{gr}^2 et Z_i le nombre de charges portées par l'ion. Ω est la charge totale d'un grain dans un milieu où la température du gaz est T. Elle est donnée par :

$$\Omega = -\frac{Z_{gr}\mathrm{e}^2}{r_{gr}\mathrm{k}T} \tag{16}$$

où Z_{gr} est le nombre de charges portées par le grain, e la charge élémentaire de l'électron et k la constante de Boltzmann. La vitesse relative moyenne entre la molécule et les grains a pour expression :

$$\langle v_0 \rangle = \sqrt{\frac{8\mathrm{k}T}{\pi\mu}} \tag{17}$$

μ est la masse réduite $\mu = \frac{m_m \times m_{gr}}{m_m + m_{gr}}$ où m_m et m_{gr} sont respectivement la masse de la molécule et la masse d'un grain avec $m_{gr} = \frac{4\pi r_{gr}^3 \rho_{gr}}{3}$. Dans la pratique, la recombinaison d'un ion peut donner différents produits. Le coefficient de réaction décrit ci-dessus doit donc être multiplié par le rapport de branchement, obtenu expérimentalement, correspondant à la probabilité d'obtenir un produit donné.

1. Les taux de recombinaison utilisés ici sont une approximation du phénomène physique qui ne tient compte que de l'attraction Coulombienne des charges. Il existe également un processus d'interaction à plus courte distance dû à la polarisation des grain sous l'effet du champ de Coulomb (voir Draine et Sutin, 1987). Ce processus fera partis des améliorations à apporter au code en particulier lorsque la taille fixe des grains sera remplacée par une distribution de taille car cette interaction devient forte pour les petits grains.

Collage des molécules sur les grains

Si l'on considère que toute collision entre grains et espèces neutres resulte en l'adsorption de l'espèce neutre sur le grain (probabilité de collage = 1), le taux d'adsorption a pour expression (Hasegawa et al., 1992) :

$$K_{ads} = \sigma_{gr} \langle v_0 \rangle \tag{18}$$

Evaporation des molécules des grains

L'agitation thermique permet la désorption des composés collés et leur retour dans la phase gazeuse. Cette évaporation est controlée par la température des grains qui est globalement égale à la température du milieu mais qui peut augmenter brièvement par le chauffage impulsionnel après absorption par le grain d'une particule de rayonnement cosmique. Le taux d'évaporation thermique s'écrit :

$$K_{evap} = \mu_0 \mathrm{e}^{-\frac{E_D}{T}} \tag{19}$$

avec

$$\mu_0 = \sqrt{\frac{2 n_s E_D}{\pi^2 m_m}} \tag{20}$$

μ_0 s'appelle la fréquence vibrationnelle associée à l'adsorption de l'espèce considérée. n_s est la densité surfacique de sites pouvant accueillir des molécules, que l'on prend égale à $\sim 3\times10^{15}$ cm^{-2} pour des grains de 0.1 μm de rayon et un nombre total de sites de 10^6 par grain (Hasegawa et al., 1992). m_m est la masse de l'espèce qui s'évapore.

E_D est l'énergie d'adsorption de l'espèce sur le grain, exprimée en Kelvin, déterminée de façon expérimentale ou théorique. Les énergies associées aux espèces chimiques ainsi que les détails concernant les calculs des taux d'évaporation thermiques sont donnés par Hasegawa et Herbst (1993). Par exemple, l'énergie d'adsorption de CO et H_2O sont de 1210 et 1860 K respectivement tandis que celles des espèces soufrées S, H_2S et OCS sont 1100, 1800 et 3000 K.

Pour inclure les effets d'évaporation induits par le rayonnement cosmique, j'ai utilisé la méthode définie par Hasegawa et Herbst (1993). Le rayonnement cosmique est supposé chauffer de façon ponctuelle le grain jusqu'à une température d'environ 70 K et permettre ainsi l'évaporation des molécules. Léger et al. (1985) ont démontré que seule la composante la plus lourde du rayonnement cosmique, autrement dit les noyaux de fer, fournissait suffisamment d'énergie pour chauffer le grain jusqu'à une température permettant l'évaporation. Le taux d'évaporation s'écrit alors :

$$K_{crd} = f(70\ K) \times K_{evap}(70\ K) \tag{21}$$

$K_{evap}(70\ K)$ est le taux d'évaporation thermique calculé pour une température de 70 K. $f(70\ K)$ est la fraction du temps que le grain passe à une température voisine de 70 K. Une approximation de cette fraction est donnée par le rapport du temps caractéristique de refroidissement par la désorption des volatiles ($\sim 10^{-5}$ s^{-1}) sur la durée entre deux chauffages successifs à 70 K. Ce dernier chiffre a été estimé par Léger et al. (1985) à 3.16×10^{13} s pour les noyaux de fer du rayonnement cosmique et pour des grains de 0.1 μm de rayon, d'où f(70 K) = 3.16×10^{-19}. En fait, ce chiffre a été estimé pour un taux d'ionisation de référence dans les nuages moléculaires de $\sim 1.3 \times 10^{-17}$ s^{-1} (voir section 3.1.3) et doit varier de façon proportionnelle par rapport au taux utilisé. Ainsi si on utilise un taux d'ionisation 10 fois plus grand que le taux de référence, le temps entre deux chauffages est divisé par 10. Les taux d'évaporation K_{evap} et K_{crd} donnés ici sont exprimés en s^{-1}.

3.1.3 Interaction avec le rayonnement cosmique

Le flux de rayonnement cosmique qui baigne le milieu interstellaire est quantifié par le taux d'ionisation ζ_{H_2}, probabilité qu'une molécule de H_2 soit ionisée par seconde. La valeur de référence de ce taux d'ionisation est de 1.3×10^{-17} s^{-1} (Spitzer et Tomasko, 1968) [1]. Le taux d'ionisation des autres espèces (X), et pour chaque voie d'ionisation (i), est généralement donné sous la forme d'un facteur $\zeta_{X_i}\zeta_{H_2}$. Ce facteur est supposé constant, ce qui revient à définir une section efficace d'ionisation moyenne sur tout le spectre d'énergie du rayonnement. Cette hypothèse est raisonnable tant que l'on modélise des milieux peu denses n'affectant pas la distribution spectrale du rayonnement cosmique.

Prasad et Tarafdar (1983) ont montré que, outre l'ionisation qu'il induit directement, le rayonnement cosmique excite les états électroniques des espèces du milieu interstellaire (essentiellement H_2), produisant un champ de rayonnement UV à l'intérieur des nuages denses. L'ionisation et la photodissociation dues à ce rayonnement induit doivent être prises en compte. Les taux associés dépendent des sections efficaces de chaque espèce et pour chaque voie. Ils sont proportionnels à ζ_{H_2}, dans la mesure où la distribution spectrale des UV induits ne change pas significativement.

1. La valeur de ζ est souvent donnée sans préciser s'il s'agit de ζ_{H_2} ou ζ_H. La valeur de ζ_{H_2} est approximativement le double de ζ_H, car la probabilité d'ioniser H change très peu que l'atome fasse ou non partie d'une molécule de H_2.

3.2 Description du modèle

3.2.1 Le réseau chimique

Il existe deux grandes bases de données pour la cinétique chimique du milieu interstellaire : UMIST (Millar et al., 1991, 1997; Le Teuff et al., 2000) et NSM (New Standard Model, Lee et al., 1996). La première est la plus utilisée pour la chimie des cœurs chauds car c'est la seule qui contenait, jusqu'en 2003, les réactions dominant à la fois aux basses et hautes températures (respectivement ion-neutre et neutre-neutre). La base de données NSM, qui ne contenait que les réactions impliquées dans la chimie à basse température, a été complétée et contient désormais toutes les réactions nécessaires à la chimie des cœurs chauds.
Utiliser un modèle incluant la totalité des espèces et réactions connues s'avère bien trop lourd dans la pratique. Notre but étant de décrire la chimie du soufre, nous avons retenu de ces bases de données un réseau complet de 930 réactions impliquant 77 espèces composées des éléments H, He, C, O et S. *Complet* signifie ici que l'introduction d'autres réactions impliquant de nouvelles espèces n'a pas d'effet significatif sur les abondances des molécules soufrées ni sur celles des principales molécules oxygénées. Afin d'établir un réseau réactionnel complet déterminant les abondances des composés soufrés (SO, SO_2, CS, H_2S, OCS et H_2CS), je me suis basée sur les travaux suivants :

- Pineau Des Forêts et al. (1993) et Charnley (1997) où sont regroupées les principales réactions de la chimie du soufre dans les régions chaudes (cœurs chauds et chocs).
- Hartquist et al. (1980), où sont décrits les principaux réseaux de la chimie de l'oxygène pour la formation de O_2 et H_2O.
- Ruffle et al. (2002) pour la formation de CO. Ce composé est le plus abondant après H_2 et sa formation fait intervenir un très grand nombre de réactions que ces auteurs ont réduit à 116 en ne conservant que les réactions jouant un rôle effectif.
- Eric Herbst m'a fourni une liste de réactions ion-neutres additionnelles nécessaires à basse température (voir Lee et al., 1996, pour plus de détails).

Tous les taux, des réactions présentes dans ma base de données, disponibles dans la base de données NSM[1] ont été utilisés. Pour les autres réactions, j'ai utilisé les taux donnés dans UMIST ou dans Pineau Des Forêts et al. (1993). La liste complète des espèces et réactions du modèle, ainsi que les taux de réaction, est donnée dans les tableaux E et F situés en annexe.
Les taux des réactions de recombinaison des ions avec les grains chargés négativement ont été calculés à partir de la formule 15 en utilisant les rapports de branchement communiqués par Yuri Aikawa. Les taux d'adsorption et d'évaporation des grains ont été estimés à partir des formules

1. $http://www.physics.ohio-state.edu/\sim eric/research_files/cddata.july03$

données dans la section 3.1.2.
Certaines des réactions données par Ruffle et al. (2002), participant à la formation de CO, n'étaient répertoriées dans aucune des bases de données, je ne les ai donc pas incluse : $CH^+ + O \rightarrow CO + H^+$, $CH_3^+ + e^- \rightarrow H_2 + C + H$, $CH_5^+ + e^- \rightarrow CH + H_2 + H_2$ et $CH_5^+ + e^- \rightarrow CH_2 + H_2 + H$. Malgré cette différence, le modèle reproduit bien les abondances de CO observées et obtenues par ces auteurs.
Une des réactions contenues dans notre jeu de réactions (voir annexe) est une réaction bilan introduite par Ruffle et al. (2002). Au lieu d'utiliser la réaction $C^+ + C_2H \rightarrow C_3^+ + H$ qui produit un ion C_3^+ qui se recombine très rapidement avec un électron ($C_3^+ + e^- \rightarrow C + C_2H$), on utilise la réaction bilan $C^+ + C_2H \rightarrow e^- + C + C_2H$ avec pour taux de réaction celui de la première (plus lente que la deuxième).

3.2.2 Validation du modèle

A basse température

Les réactions chimiques incluses dans le modèle permettent des applications dans la gamme de températures 10-300 K. Afin de valider le modèle, et en particulier le choix des réactions sélectionnées pour l'etude des composés soufrés, j'ai comparé les résultats du modèle NAHOON sans la déplétion (autrement dit sans les échanges adsorption/évaporation entre les grains et la phase gazeuse) avec ceux obtenus avec le modèle complet (MC) de Lee et al. (1996) à basse température (les deux modèles NAHOON et MC étant dépendant du temps). Il s'agit d'un modèle de référence pour l'évolution chimique des nuages moléculaires à basse température.

MC suit l'évolution de 419 espèces possèdant les éléments suivant He, N, O, C, S, Si, Fe, Na, Mg, P et Cl à travers 4096 réactions. Depuis la parution des résultats de ce modèle en 1996, les taux de réaction ont été actualisés et j'ai donc utilisé les résultats les plus récents, qui m'ont été communiqué par Eric Herbst. J'ai fait tourner les deux modèles, MC et NAHOON, pour une température de 10 K, une densité de H_2 de $10^5 cm^{-3}$ et les abondances initiales par rapport à H_2 suivantes : $x(He) = 0.28$, $x(O) = 3.5 \times 10^{-4}$, $x(C^+) = 1.4 \times 10^{-4}$, $x(S^+) = 1.6 \times 10^{-7}$, $x(e^-) = 1.4016 \times 10^{-4}$ et $x(grain^0) = 2.7 \times 10^{-12}$. Les autres abondances étant mises à 0. Ces abondances élémentaires sont celles utilisées par Lee et al. (1996). L'abondance des électrons est calculée pour assurer la neutralité du gaz.

En utilisant notre liste de réactions réduite, nous sommes capables de reproduire les abondances de MC à mieux qu'un facteur 2 sauf pour les molécules C_2H_2 et $C_2H_2^+$. Ceci s'explique par le fait que deux molécules, $C_2H_4^+$ et $C_3H_3^+$, impliquées dans la production de C_2H_2 et $C_2H_2^+$

ne sont pas incluses dans notre code car elles font partie d'un grand cycle des molécules carbonées plus complexes. Etant donné qu'elles ne sont pas cruciales pour la chimie du soufre et que leur absence n'influe pas les résultats des autres molécules, nous avons décidé de ne pas les inclure. Je considére donc que les résultats donnés par NAHOON à basse température sont en accord avec ceux obtenus avec MC validant ainsi son utilisation pour simuler les abondances moléculaires des espèces à base de soufre et d'oxygène dans les nuages moléculaires froids.

A haute température

Pour valider le modèle à haute température, j'ai comparé les résultats de mon modèle avec ceux de Charnley (1997) pour les mêmes abondances initiales et les mêmes conditions de haute température et densité. Les abondances calculées par les deux modèles sont similaires à un facteur trois près sauf pour celle de la molécule CS qui est d'un ordre de grandeur inférieure dans notre modèle. Grâce à la technique expliquée dans la section 3.3, j'ai pu déterminer l'origine de cet écart: le taux de la réaction CO + $h\nu^*$ → O + C (réaction de dissociation par un photon secondaire $h\nu^*$ induit par le rayonnement cosmique), qui est 50 fois plus petit dans notre base de données que dans celle de UMIST. Le carbone atomique étant un des précurseurs de CS, moins de carbone atomique implique moins de CS. En utilisant le taux de réaction de UMIST, l'abondance de CS calculée par NAHOON est très similaire à celle calculée par Charnley.

3.2.3 Caractéristique du code numérique

Le modèle NAHOON simule l'évolution chimique d'un mélange gazeux de N espèces chimiques réagissant entre elles à travers un réseau de réactions. A partir des concentrations initiales de ces N constituants, et pour des conditions physiques fixées (température, densité), le modèle calcule les nouvelles abondances après un temps d'évolution t. Pour se faire, le code doit résoudre le système d'équations différentielles suivant :

$$\frac{dn(i)}{dt} = \sum_l \sum_j K_{lj} n(l) n(j) - n(i) \sum_j K_{ij} n(j) \tag{22}$$

$n(i)$ est la concentration de l'espèce i, ou densité (cm^{-3}). K_{lj} et K_{ij} sont les constantes de vitesse pour les réactions entre les espèces l et j et les espèces i et j. L'expression du taux de production et de destruction (respectivement premier et second terme du membre de droite) est ici réduit au cas de réactions à deux corps entre les constituants (il faudrait y ajouter des termes de photo-dissociation et -ionisation, d'évaporation et adsorption, dont la formulation, comme nous l'avons vu, diffère légèrement). A chaque pas de temps d'intégration, la conservation de la matière et de la charge est vérifiée.

Le modèle contient au final 930 réactions impliquant 77 espèces incluant les éléments H, He, C, O et S ainsi que les grains neutres, les grains chargés négativement et les électrons. La liste des espèces et des réactions est donnée en Annexe E et F. En plus des 77 espèces gazeuses (X), les 31 espèces neutres qui sont piégées sur les grains (JX) sont traitées comme des constituants à part entière. Le code traite donc au total 108 composés et résout 108 équations différentielles à chaque pas de temps.

Les équations différentielles sont résolues par la méthode de Gear qui est une méthode implicite à pas de temps variable. Cette méthode est souvent utilisée dans les modèles chimiques parce qu'elle permet de traiter des équations dont les composantes présentent des variations brutales en fonction du temps (systèmes rigides).

3.2.4 Les paramètres

Les paramètres que l'on peut faire varier sont au nombre de 5 et sont les suivants :
- *Composition initiale du gaz :* Les abondances initiales de toutes les espèces chimiques traitées doivent être fixées. Ce choix dépend bien entendu du type de milieu modélisé. Par exemple, pour calculer l'évolution chimique des espèces dans un nuage moléculaire, les éléments sont pris initialement sous la forme atomique pour O et He et sous la forme ionique pour le carbone et le soufre, comme on les observe dans les nuages diffus. Il en sera de même pour certaines régions de chocs dissociatifs. En revanche, dans les régions de chocs non dissociatifs et les cœurs chauds, il faut donner à la fois les abondances des composés en phase gazeuse et celles des composés collés sur les grains (JX). Un des buts de notre étude est d'explorer l'influence de la composition initiale en composés soufrés.
- *La température et la densité du milieu :* Deux des autres paramètres que l'on va faire varier sont la température et la densité afin de comprendre dans quelle mesure ils influencent la chimie du soufre. La chimie ne sera évidemment pas la même à basse température, où les réactions neutre-neutre avec barrière d'activation seront inefficaces, et dans les régions chaudes où les processus ioniques ne se sont plus dominants. Ces paramètres vont également déterminer l'efficacité de la déplétion des composés à la surface des grains.
- *Le taux de rayonnement cosmique :* Le flux de rayonnement cosmique qui baigne les régions que nous voulons modéliser est un des paramètres les moins contraints. Des études d'enveloppes de protoétoiles massives ont montré un taux d'ionisation par le rayonnement cosmique de $(2.6 \pm 1.8) \times 10^{-17}$ s^{-1} (van der Tak et van Dishoeck, 2000). Dans les nuages diffus en revanche, McCall et al. (2003) ont trouvé un fort taux de l'ordre de 1.2×10^{-15} s^{-1} sur la base de la grande abondance de H_3^+. Pour voir l'effet de ce paramètre, je le ferai varier entre 1.3×10^{-17} s^{-1}, qui est la valeur de référence, et 1.3×10^{-15} s^{-1}.

- *Les paramètres des grains (rayon, densité et rapport densité sur gaz) :* Là encore nous nous sommes limités à utiliser les caractéristiques classiques des grains présentées dans l'introduction : 0.1 μm pour le rayon, 3 g cm^{-3} pour la densité et 10^{-2} pour le rapport massique de la poussière sur le gaz. **Ces paramètres de grain ne seront pas modifiés dans la présente étude.**

3.3 Réactions *clés*

Pour un milieu modélisé donné, il est important d'identifier les réactions chimiques qui influencent le plus les résultats quantitatifs obtenus avec le modèle. Cela permet de déterminer les principales voies de formation ou de destruction des composés, de mettre en évidence des taux de réaction pour lesquels de meilleures estimations sont nécessaires et de comprendre l'origine des écarts obtenus par différents modèles. Connaître la sensibilité des résultats à des variations des taux de réaction permet de plus d'avoir une idée de la précision des résultats : si de faibles variations des taux de réaction, dans les limites des incertitudes affectant ces taux, modifient les résultats de façon dramatique, les comparaisons avec des observations deviennent peu significatives. Notons qu'une réaction peut être importante malgré un taux de réaction faible et inversement.
Tester la sensibilité du modèle à de faibles variations des taux de réaction est donc à la fois un outil précieux et une étape de validation importante. J'ai donc inclu dans le modèle un mode permettant d'explorer cette sensibilité. Dans un premier temps, une simulation est effectuée avec les valeurs nominales des taux des N réactions traitées par le modèle, ce qui nous donne les abondances *standards* au temps t. Le modèle est ensuite executé N fois (pour i=1 à N) en modifiant le taux k_i de la i^{eme} réaction, $k_i \rightarrow k_i \times \delta$, et en laissant les N-1 autres taux à leur valeur nominale. Les N réactions sont toutes successivement perturbées par le même coefficient δ, ce qui donne N résultats pour la composition du milieu, à comparer avec la composition de référence.

Dans mon modèle, toutes les réactions sont perturbées à l'exception de celles faisant intervenir les grains, soit 750 sur 930 réactions (voir section 3.1.2). Les variations d'abondance induites par ces perturbations sont exprimées relativement à la valeur standard de l'abondance: $\Delta X_i = \frac{|X_{ref} - X_i|}{X_{ref}}$ avec X_{ref} l'abondance de référence calculée avec le taux de réaction non modifié et X_i l'abondance calculée avec le taux k_i modifié.
Les cas présentés dans la section 3.5 ont été obtenus en perturbant les taux de réaction de 10% ($\delta = 1.1$). Dans la section 3.5.3, je discute également le cas où les taux sont multipliés par un facteur $\delta = 2$ (donc perturbés de 100%).
Pour présenter les résultats de cette méthode, j'ai choisi une représentation graphique plutôt que

de donner des tableaux de réactions (voir figures 79, 80, 81, 82, 83, 84, 85 et 86 en annexe G). Sur ces figures, sont représentées les variations ΔX_i des différentes molécules soufrées, divisées par l'amplitude de la perturbation ($\Delta R = \delta - 1 = 0.1$ dans notre cas) en fonction du numéro i de la réaction perturbée (i de 86 à 834, voir l'annexe F). Ce qui implique, pour $\Delta X/\Delta R$=1 par exemple, qu'une variation de 10% du taux de réaction modifie de 10% l'abondance de la molécule considérée. Le numéro des réactions est reporté sur les figures lorsque la variation induite est plus grande que 5% de la variation maximale obtenue pour l'espèce considérée (la réaction à l'origine de cette variation maximale étant considérée comme la réaction la plus "importante" pour la détermination de l'abondance de cette espèce).

Cette méthode a permis par exemple de souligner l'importance des réactions d'association radiative (voir tableau 24) O + SO → SO_2 + hν (756) et CO + S → OCS + hν (757) qui ont des taux de réactions faibles mais qui deviennent importantes pour la chimie du soufre dans les cœurs chauds à cause de la forte abondance des réactants.

3.4 Résultats à basse température : le nuage moléculaire

3.4.1 Comparaison des résultats avec et sans la déplétion

Pour quantifier l'influence de la déplétion sur les abondances des molécules soufrées en phase gazeuse, j'ai effectué des simulations avec et sans la déplétion pour les mêmes conditions physiques et les mêmes abondances initiales. Une température de 10 K et une densité de H_2 de 10^4 cm^{-3} sont considérées. Les abondances initiales (par rapport à H_2) utilisées sont les suivantes : He (0.28, Wilson et Rood, 1994), O (6.5×10^{-4}, Cardelli et al., 1996), C^+ (2.8×10^{-4}, Meyer et al., 1998) et S^+ (3.0×10^{-5}, Sofia et al., 1994).

La figure 42 montre l'évolution des abondances des molécules soufrées SO, SO_2, H_2S, CS et OCS au cours du temps, calculées avec et sans la déplétion. Cette figure montre que ces quatre molécules ne se comportent pas de la même façon. SO et SO_2 sont déplétés après 10^6 ans tout comme OCS. L'abondance de H_2S en revanche ne diminue pas : la déplétion des autres molécules favorise la formation de H_2S. L'augmentation de l'abondance de H_2S peut s'expliquer physiquement par l'efficacité moindre des processus d'adsorption de H_2S par rapport aux autres molécules soufrées (voir la figure 43), du fait de sa plus faible masse moléculaire. D'un point de vue chimique, la déplétion de certaines espèces neutres favorise la formation des ions H_3^+ en diminuant sa destruction par SO et SO_2. Ainsi H_3^+ réagit avec le soufre atomique pour donner HS^+ qui lui même est hydrogéné par H_2 pour former H_3S^+. Par recombinaison avec un électron, H_3S^+ formera H_2S. L'abondance de CS décroît dans les deux modèles (avec et sans la déplétion)

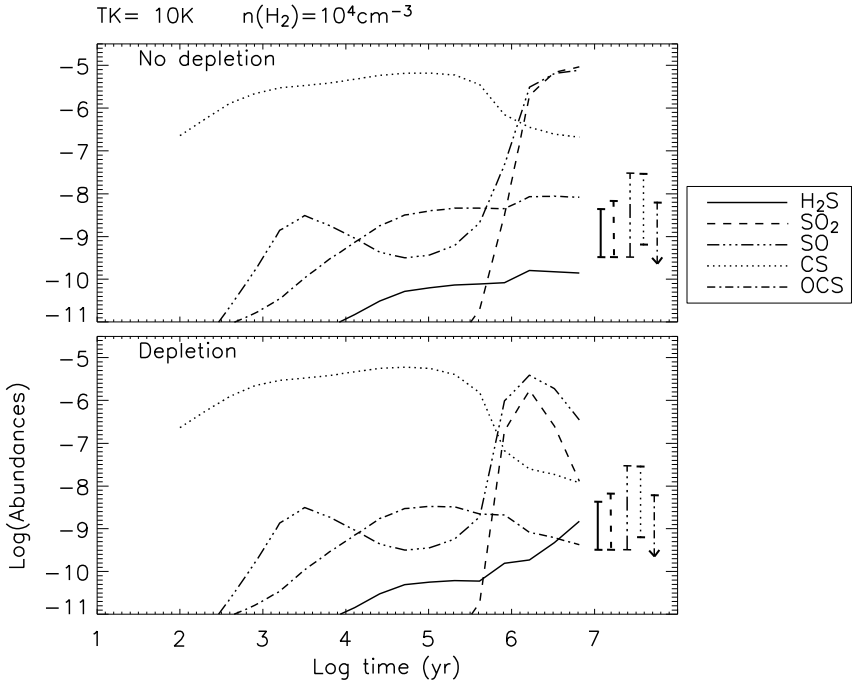

FIG. 42: *Evolution des abondances (/H_2) de H_2S, SO, SO_2, CS et OCS pour une température de 10 K et une densité de $10^4\,cm^{-3}$. Ces résultats ont été obtenus avec le modèle incluant la déplétion (graphe du bas) et le modèle sans déplétion (haut). Sur chacune des figures, les abondances de ces molécules observées dans les nuages moléculaires (voir tableau 17) sont reportées à droite sous la forme de barres. L'abondance observée de OCS est représentée par une flèche vers le bas parce que la molécule n'a pas été détectée dans L1689N.*

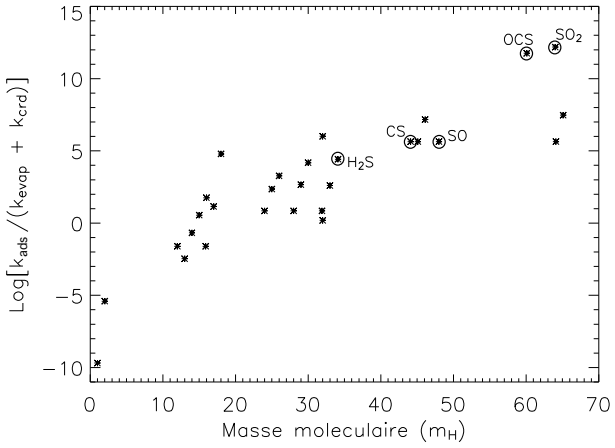

Fig. 43: *Efficacité du processus de collage des composés à la surface des grains en fonction de la masse de ces composés. L'efficacité du collage est calculée pour une température de 10 K en faisant le rapport du coefficient d'adsorption (K_{ads} voir la formule 18) sur la somme des coefficients d'évaporation thermique et d'évaporation induite par le rayonnement cosmique (K_{evap} et K_{crd} voir les formules 19 et 21). Les 31 molécules neutres du modèle sont représentées sur cette figure.*

car il est détruit pour former SO et SO_2. Cependant dans le cas du modèle avec la déplétion, l'abondance de CS devient plus faible que dans le modèle sans les processus de déplétion pour deux raisons : 1) cette molécule est détruite plus efficacement par H_3^+ plus abondant dans ce modèle et 2) une partie du CS est déplété sur les grains à partir de 10^5 ans.

La figure 44 montre l'effet de la déplétion sur l'évolution de l'abondance totale de soufre élémentaire présent dans la phase gazeuse. Avec la déplétion, on atteint un facteur 20 de déplétion au bout de 10^7 ans. Cette abondance est encore un facteur 10 voir 100 supérieure à ce qui est effectivement observé dans les nuages froids, dont les âges, estimés en comparant les abondances estimées par les modèles, sont inférieurs à 10^7 ans (Millar et Herbst, 1990; Hasegawa et al., 1992; Suzuki et al., 1992; Hasegawa et Herbst, 1993).

L'efficacité de la déplétion va dépendre de différents paramètres dont l'influence n'est pas facile à déterminer. L'efficacité du collage de H_2S, CS et SO diminue avec la température en favorisant l'évaporation thermique de ces molécules. En revanche, les molécules SO_2 et OCS, qui ont une énergie d'adsorption E_D plus grande, vont voir l'efficacité de leur déplétion augmenter avec la température pour T jusqu'à 30 K parce que celle-ci augmente le taux de collision entre grains et molécules. Au delà de 30 K, l'effet de l'évaporation l'emporte comme pour H_2S, CS et SO. Des grains de plus petit rayon sont défavorables au phénomène de collage du fait de leur section efficace collisionnelle plus faible. La masse des grains n'a aucune influence sur la déplétion puisque le seul terme où elle intervient est la masse réduite entre le grain et la molécule

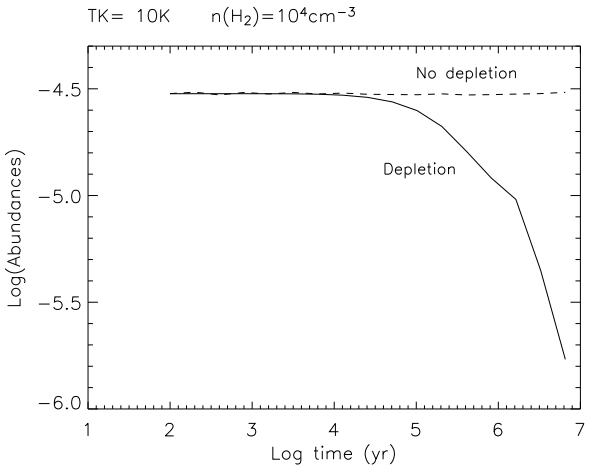

FIG. 44: *Abondance totale (/H_2) de soufre élémentaire en phase gazeuse pour une température de 10 K et une densité de $10^4 cm^{-3}$. La courbe en pointillés représente l'abondance totale calculée sans la déplétion tandis que la courbe en trait plein a été calculée avec le modèle incluant la déplétion.*

(equations 17 et 18) et que la masse du grain est beaucoup plus grande que celle de la molécule. Les énergies d'absorption des molécules E_D dépendent de la composition des grains qui n'est pas bien connue. Une sous-estimation de ces énergies d'adsorption entraîne une sous-estimation de la déplétion et inversement. La densité surfacique de sites pouvant accueillir des molécules dépend également de la nature des grains et intervient dans les expressions des taux d'évaporation (equations 19, 20 et 21). Une plus grande densité de surface de sites défavorise le collage et inversement. Le taux d'évaporation sous l'effet du rayonnement cosmique est calculé à partir du temps entre deux chauffages du grain à 70 K par les noyaux de fer contenus dans le rayonnement cosmique. Ce temps dépend du taux d'ionisation par le rayonnement cosmique choisi et de la taille des grains. Le temps entre deux chauffages successifs est sensible à ces paramètres, et sa diminution entraîne une évaporation plus efficace. Enfin, une probabilité de 1 est supposée pour le collage des espèces neutres sur les grains (voir section 3.1.2). Si cette probabilité est plus petite, les processus de collage sont moins efficaces.

Il est clair que d'autres mécanismes comme ceux liés à l'attraction de charge de S^+ par les grains chargés négativement (voir Ruffle et al., 1999) et des processus réactionnels à la surface du grain doivent entrer en jeu pour favoriser d'avantage la déplétion du soufre. C'est pour cette raison que le seul moyen de "reproduire" les abondances de molécules soufrées dans les nuages

moléculaires, en ne modifiant que les paramètres du modèles donnés en section 3.2.4, est de diminuer artificiellement l'abondance initiale de soufre.

3.4.2 Composition pré-évaporation

Tab. 17: Abondances de toutes les molécules contenues dans NAHOON calculées à différents temps d'intégration allant de 0 à 10^7 ans. Les abondances sont données sous la forme m(n) qui signifie m$\times 10^n$. La température du gaz est de 10 K et la densité de H_2 de 10^4 cm^{-3}. JX symbolise les espèces déplétées sur les grains.

Temps (ans)	0	10^2	$10^2 3$	10^4	10^5	10^6	10^7
H	0.00	2.31(-5)	6.36(-5)	8.81(-5)	1.45(-4)	1.18(-4)	1.09(-4)
H_2	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
He	2.80(-1)	2.80(-1)	2.80(-1)	2.80(-1)	2.80(-1)	2.80(-1)	2.80(-1)
C	0.00	1.41(-4)	2.65(-4)	2.56(-4)	1.75(-4)	7.40(-9)	2.51(-9)
CH	0.00	1.75(-8)	6.86(-9)	4.09(-9)	1.07(-8)	5.75(-12)	1.70(-10)
CH_2	0.00	7.09(-8)	2.54(-8)	1.51(-8)	1.12(-8)	2.90(-12)	3.36(-11)
CH_3	0.00	2.26(-10)	1.06(-10)	2.21(-11)	7.27(-11)	3.59(-13)	1.14(-10)
CH_4	0.00	5.88(-10)	2.68(-9)	2.02(-9)	2.04(-7)	6.67(-9)	8.64(-8)
C_2	0.00	3.08(-7)	6.91(-9)	1.15(-9)	2.52(-9)	9.32(-14)	2.18(-11)
C_2H	0.00	7.41(-7)	2.80(-7)	3.74(-8)	2.46(-8)	1.54(-12)	2.60(-11)
C_2H_2	0.00	2.92(-10)	6.57(-9)	8.92(-9)	1.29(-7)	5.64(-10)	1.79(-11)
O	6.40(-4)	6.39(-4)	6.32(-4)	6.15(-4)	5.33(-4)	3.12(-4)	2.09(-5)
OH	0.00	1.45(-12)	1.35(-11)	5.93(-11)	1.65(-10)	8.55(-9)	5.71(-8)
H_2O	0.00	6.43(-13)	1.15(-10)	4.18(-8)	3.42(-7)	1.17(-6)	1.33(-7)
CO	0.00	8.63(-7)	6.36(-6)	1.42(-5)	8.28(-5)	6.89(-5)	3.40(-5)
HCO	0.00	7.26(-13)	4.65(-13)	4.87(-14)	1.16(-12)	9.57(-14)	8.66(-12)
H_2CO	0.00	7.52(-12)	2.54(-11)	2.69(-11)	5.42(-10)	9.72(-12)	5.68(-10)
CH_4O	0.00	1.02(-19)	1.09(-16)	3.75(-13)	1.93(-10)	7.30(-12)	1.99(-12)
O_2	0.00	6.97(-13)	3.13(-11)	1.65(-10)	5.87(-10)	1.28(-5)	1.89(-5)
S	0.00	7.98(-7)	2.72(-6)	1.95(-5)	1.85(-5)	7.21(-6)	7.96(-7)
HS	0.00	1.56(-10)	2.26(-9)	1.18(-9)	2.67(-10)	1.21(-10)	1.66(-10)
H_2S	0.00	3.77(-13)	2.50(-12)	1.13(-11)	5.66(-11)	1.82(-10)	1.38(-9)
CS	0.00	2.33(-7)	2.53(-6)	4.39(-6)	5.66(-6)	5.20(-8)	7.27(-9)
HCS	0.00	6.62(-11)	1.09(-10)	4.76(-10)	3.91(-10)	1.69(-13)	2.88(-12)
H_2CS	0.00	7.56(-13)	8.19(-11)	1.56(-9)	7.20(-8)	1.58(-9)	3.74(-10)
SO	0.00	8.79(-13)	3.08(-10)	1.21(-9)	3.58(-10)	2.89(-6)	1.76(-7)
OCS	0.00	1.27(-12)	1.99(-11)	5.20(-10)	3.37(-9)	1.78(-9)	2.71(-10)
SO_2	0.00	2.65(-17)	1.75(-13)	3.08(-12)	1.14(-12)	1.16(-6)	5.96(-9)
S_2	0.00	1.96(-13)	8.63(-12)	3.80(-11)	1.14(-11)	8.66(-12)	1.99(-11)
HS_2	0.00	1.13(-16)	3.06(-14)	1.87(-12)	8.39(-11)	2.35(-10)	6.84(-11)
H_2S_2	0.00	1.13(-16)	3.07(-14)	1.89(-12)	8.45(-11)	2.23(-10)	5.85(-11)

$GRAIN^0$	2.70(-12)	1.79(-13)	1.32(-13)	1.21(-13)	1.22(-13)	1.25(-13)	2.14(-13)
H^+	0.00	5.71(-10)	1.22(-10)	6.74(-11)	5.17(-11)	1.16(-10)	7.40(-10)
H_2^+	0.00	5.87(-13)	5.80(-13)	5.79(-13)	5.77(-13)	5.78(-13)	5.84(-13)
H_3^+	0.00	1.99(-11)	1.01(-10)	3.46(-10)	7.43(-10)	1.93(-9)	1.14(-8)
He^+	0.00	3.08(-9)	1.13(-9)	6.89(-10)	4.06(-10)	6.01(-10)	1.81(-9)
C^+	2.80(-4)	1.35(-4)	4.46(-6)	1.39(-8)	9.91(-9)	5.30(-10)	3.07(-9)
CH^+	0.00	2.69(-11)	4.19(-13)	1.50(-13)	2.52(-13)	2.89(-17)	1.15(-16)
CH_2^+	0.00	8.08(-11)	3.20(-12)	1.56(-13)	2.65(-13)	3.94(-16)	2.39(-15)
CH_3^+	0.00	3.03(-10)	6.62(-11)	1.49(-11)	1.18(-10)	5.40(-13)	6.23(-12)
CH_4^+	0.00	1.05(-18)	5.07(-18)	5.34(-18)	5.29(-16)	3.83(-17)	3.03(-15)
CH_5^+	0.00	4.33(-12)	4.95(-12)	4.15(-12)	7.68(-11)	1.02(-12)	6.54(-11)
C_2^+	0.00	2.74(-11)	4.03(-13)	1.02(-15)	1.64(-15)	5.43(-19)	7.78(-18)
C_2H^+	0.00	3.95(-11)	6.43(-13)	5.69(-15)	2.45(-14)	9.44(-19)	9.25(-18)
$C_2H_2^+$	0.00	9.04(-11)	8.57(-12)	6.44(-13)	1.99(-11)	1.10(-14)	1.24(-12)
O^+	0.00	1.48(-15)	1.48(-15)	1.41(-15)	1.22(-15)	2.94(-14)	4.34(-14)
OH^+	0.00	9.78(-15)	4.71(-14)	1.56(-13)	2.90(-13)	4.86(-13)	2.41(-13)
H_2O^+	0.00	1.11(-14)	7.68(-14)	2.76(-13)	5.25(-13)	8.94(-13)	5.08(-13)
H_3O^+	0.00	6.19(-15)	2.24(-13)	3.99(-12)	5.38(-11)	5.78(-10)	1.20(-9)
CO^+	0.00	8.83(-15)	5.32(-15)	1.34(-16)	2.51(-16)	7.38(-15)	2.62(-14)
HCO^+	0.00	4.54(-13)	1.54(-12)	5.07(-12)	1.39(-10)	5.82(-10)	6.49(-9)
HOC^+	0.00	1.01(-13)	1.65(-13)	3.25(-13)	4.32(-12)	1.80(-12)	4.01(-12)
H_2CO^+	0.00	9.91(-15)	6.21(-15)	1.07(-16)	1.07(-14)	4.01(-16)	2.35(-13)
H_3CO^+	0.00	2.25(-17)	1.44(-16)	6.02(-16)	7.35(-14)	4.77(-15)	1.92(-12)
CH_4O^+	0.00	1.13(-22)	2.25(-20)	1.31(-18)	3.40(-15)	1.26(-16)	4.54(-16)
CH_5O^+	0.00	1.29(-21)	2.83(-19)	1.16(-16)	5.30(-14)	5.42(-15)	2.59(-14)
O_2^+	0.00	2.62(-17)	7.21(-16)	1.17(-14)	1.28(-13)	5.50(-11)	5.15(-10)
S^+	3.00(-5)	2.90(-5)	2.47(-5)	5.81(-6)	8.28(-7)	1.38(-7)	1.19(-8)
HS^+	0.00	3.02(-15)	8.82(-14)	2.85(-12)	2.81(-11)	1.06(-10)	3.57(-10)
H_2S^+	0.00	2.12(-12)	1.01(-11)	1.13(-11)	9.85(-12)	5.90(-12)	4.00(-12)
H_3S^+	0.00	9.31(-21)	1.54(-18)	2.44(-16)	1.65(-14)	3.60(-13)	6.54(-12)
CS^+	0.00	1.89(-11)	8.32(-12)	1.25(-12)	5.30(-13)	2.07(-14)	8.05(-15)
HCS^+	0.00	8.58(-11)	2.07(-10)	1.60(-10)	5.04(-10)	4.32(-11)	2.16(-10)
H_2CS^+	0.00	1.23(-16)	3.03(-16)	7.84(-16)	5.38(-14)	1.35(-14)	8.62(-14)
H_3CS^+	0.00	4.41(-15)	9.65(-14)	8.63(-14)	8.98(-12)	4.19(-13)	1.99(-12)
SO^+	0.00	1.22(-14)	5.86(-13)	1.80(-12)	1.03(-11)	7.80(-10)	8.35(-10)
HSO^+	0.00	2.56(-20)	4.77(-17)	3.39(-15)	1.88(-14)	1.80(-9)	2.50(-9)
OCS^+	0.00	1.51(-13)	2.01(-12)	7.53(-12)	1.42(-10)	4.15(-11)	4.88(-11)
$HOCS^+$	0.00	1.86(-20)	7.99(-18)	3.27(-16)	3.10(-14)	3.64(-13)	1.15(-12)
SO_2^+	0.00	4.21(-24)	3.06(-20)	5.29(-19)	1.38(-19)	2.27(-13)	4.33(-15)
HSO_2^+	0.00	2.29(-25)	1.38(-20)	2.41(-18)	1.06(-17)	1.54(-10)	1.61(-11)
S_2^+	0.00	1.23(-15)	8.33(-14)	2.40(-12)	1.53(-11)	8.23(-12)	1.69(-12)
HS_2^+	0.00	4.42(-17)	1.40(-15)	7.27(-15)	3.09(-14)	5.59(-14)	6.19(-14)
$H_2S_2^+$	0.00	6.35(-24)	3.70(-21)	2.54(-18)	1.55(-15)	7.29(-14)	4.56(-13)
$H_3S_2^+$	0.00	4.91(-20)	8.77(-18)	2.29(-16)	7.46(-15)	1.04(-13)	4.60(-13)

e^-	3.10(-4)	1.64(-4)	2.92(-5)	5.82(-6)	8.40(-7)	1.45(-7)	4.12(-8)
$GRAIN^-$	0.00	2.48(-12)	2.53(-12)	2.54(-12)	2.54(-12)	2.53(-12)	2.45(-12)
JH	0.00	4.74(-15)	1.30(-14)	1.81(-14)	2.96(-14)	2.42(-14)	2.24(-14)
JH_2	0.00	3.91(-6)	3.91(-6)	3.91(-6)	3.91(-6)	3.91(-6)	3.91(-6)
JHe	0.00	1.49(-21)	1.49(-21)	1.49(-21)	1.49(-21)	1.49(-21)	1.49(-21)
JC	0.00	2.52(-8)	7.51(-7)	4.87(-6)	4.48(-6)	1.92(-10)	6.24(-11)
JCH	0.00	5.03(-12)	2.81(-11)	1.28(-11)	3.66(-11)	1.97(-14)	5.81(-13)
JCH_2	0.00	1.95(-11)	1.58(-10)	5.68(-10)	2.12(-9)	2.92(-12)	7.07(-12)
JCH_3	0.00	5.37(-14)	6.92(-13)	1.16(-12)	1.83(-11)	6.35(-11)	3.45(-10)
JCH_4	0.00	1.01(-13)	6.19(-12)	3.77(-11)	2.97(-8)	3.12(-7)	1.18(-6)
JC_2	0.00	5.58(-11)	2.22(-10)	2.42(-10)	8.06(-10)	1.32(-9)	1.45(-10)
JC_2H	0.00	9.72(-11)	1.66(-9)	2.71(-9)	9.46(-9)	1.84(-8)	1.69(-8)
JC_2H_2	0.00	2.13(-14)	8.87(-12)	1.79(-10)	1.46(-8)	1.31(-7)	1.30(-7)
JO	0.00	1.93(-7)	1.82(-6)	1.09(-5)	1.34(-5)	7.80(-6)	5.20(-7)
JOH	0.00	2.33(-16)	2.35(-14)	1.03(-12)	3.50(-11)	8.29(-9)	5.32(-7)
JH_2O	0.00	8.71(-17)	9.68(-14)	4.41(-10)	6.48(-8)	1.58(-6)	1.16(-5)
JCO	0.00	8.04(-11)	9.18(-9)	2.25(-7)	1.06(-5)	2.07(-4)	2.41(-4)
JHCO	0.00	9.62(-17)	2.73(-15)	3.38(-15)	1.69(-13)	1.51(-12)	6.82(-11)
JH_2CO	0.00	9.38(-16)	6.08(-14)	2.90(-13)	7.76(-11)	5.82(-10)	5.73(-9)
JCH_4O	0.00	7.30(-24)	6.36(-20)	1.60(-15)	1.85(-11)	2.34(-10)	2.81(-10)
JO_2	0.00	6.42(-17)	3.14(-14)	2.05(-12)	8.13(-11)	4.63(-6)	1.33(-4)
JS	0.00	1.51(-10)	3.31(-9)	2.76(-7)	3.88(-6)	1.42(-5)	1.36(-6)
JHS	0.00	2.30(-14)	2.20(-12)	4.57(-11)	1.12(-10)	7.17(-10)	4.15(-9)
JH_2S	0.00	5.59(-17)	3.05(-15)	1.32(-13)	8.47(-12)	1.76(-10)	1.95(-8)
JCS	0.00	1.96(-11)	2.61(-9)	6.33(-8)	1.01(-6)	3.36(-6)	3.61(-6)
JHCS	0.00	6.43(-15)	1.81(-13)	5.89(-12)	7.95(-11)	2.56(-10)	2.81(-10)
JH_2CS	0.00	5.85(-17)	5.15(-14)	1.50(-11)	5.65(-9)	7.73(-8)	8.47(-8)
JSO	0.00	7.76(-17)	1.39(-13)	3.19(-11)	9.50(-11)	7.34(-7)	1.95(-5)
JOCS	0.00	8.33(-17)	1.62(-14)	3.50(-12)	3.77(-10)	3.44(-9)	1.09(-8)
JSO_2	0.00	1.54(-21)	4.92(-17)	6.57(-14)	2.18(-13)	1.93(-7)	4.36(-6)
JS_2	0.00	1.37(-17)	4.43(-15)	6.31(-13)	2.49(-12)	3.51(-11)	3.48(-10)
JHS_2	0.00	6.60(-21)	1.39(-17)	1.04(-14)	5.47(-12)	2.09(-10)	2.24(-9)
JH_2S_2	0.00	6.55(-21)	1.38(-17)	1.04(-14)	5.45(-12)	2.19(-10)	2.02(-9)

Pour modéliser la chimie dans les cœurs chauds, j'ai dans un premier temps déterminé une composition en phase gazeuse, similaire à celle des nuages moléculaires. Celle-ci servira de composition initiale au moment où les manteaux des grains s'évaporent sous l'effet de la température. Pour cela, j'ai effectué des simulations avec NAHOON, en incluant la déplétion, et avec les abondances ($/H_2$) initiales atomiques données à la section précédente, une température de 10 K et une densité de 10^4 cm^{-3}. Les abondances ainsi caculées sont données dans le tableau 17 pour différentes durées d'évolution, de 0 à 10^7 ans. Le modèle n'atteint pas une "vraie" solution stationnaire puisqu'il y a constamment un échange entre les molécules déplétées sur les grains

TAB. 18: *Abondances (/H_2) des principales molécules soufrées observées dans trois nuages moléculaires. Références: L1689N: SO, SO_2 et H_2S de Wakelam et al. (2004), CS et OCS de Schöier et al. (2002); L134N: SO, SO_2, CS et OCS de Swade (1989b), H_2S de Minh et al. (1989); TCM-1: SO et CS de Pratap et al. (1997), SO_2 de Irvine et al. (1983), H_2S de Minh et al. (1989). Pour TMC-1, la densité de colonne de H_2 est prise égale à 10^{22} cm^{-2}.*

Nuage	x(SO) (10^{-9})	x(SO_2) (10^{-9})	x(H_2S) (10^{-9})	x(CS) (10^{-9})	x(OCS) (10^{-9})
L1689N	6 - 16	0.4	0.3	3	≤ 3
L134N	0.6 - 10	0.3 - 2.5	3	0.6-3	7
TMC-1	0.3 - 8	2 - 6	0.7	3-20	-

et la phase gazeuse.

Pour comparaison, j'ai reporté dans le tableau 18 les abondances des principales molécules soufrées (SO, SO_2, CS et H_2S) mesurées dans trois nuages moléculaires L134N, TMC1 et L1689N. Ces abondances varient d'un nuage à l'autre et spatialement à l'intérieur d'un même nuage. SO et CS sont les molécules soufrées les plus abondantes dans le gaz froid des nuages moléculaires donc les plus facilement détectables. Les émissions de ces deux molécules, cartographiées dans les deux nuages moléculaires L134N (Swade, 1989a) et TMC1 (Hirahara et al., 1995), présentent des distributions différentes l'une de l'autre, qui ne sont associées à aucune autre molécule connue. Les abondances de SO et CS peuvent varier d'un ordre de grandeur au sein même du nuage et d'un nuage à l'autre (Swade, 1989b; Hirahara et al., 1995; Pratap et al., 1997; Bergin et Langer, 1997; Nilsson et al., 2000). Leur distribution est anticorrélée, ce qui résulte en des variations encore plus importantes du rapport CS/SO. Pour expliquer ce gradient du rapport d'abondance CS/SO dans les nuages, plusieurs solutions ont été proposées. L'hypothèse la plus souvent avancée est celle d'une relation entre les rapports CS/SO et C/O. Dans les régions riches en carbone, CS se formerait plus facilement tandis que dans celles riches en oxygène, ce serait SO (Swade, 1989b). Le gradient C/O serait dû à une différence de densité du gaz, l'oxygène étant plus déplété que le carbone dans les régions denses. D'autres hypothèses font intervenir une inhomogénéité des stades d'évolution dans un même nuage (Hirahara et al., 1995; Bergin et Langer, 1997).

On voit qu'une composition initiale, définie comme typique des nuages moléculaires avant effondrement, présentera forcément des différences avec certaines compositions localement observées. Cependant, nous allons montrer que ces variations de composition ont des répercussions quantitativement limitées sur les résultats.

Pour reproduire les abondances réellement observées dans les nuages moléculaires, deux problèmes

se posent. Le premier se situe au niveau de l'abondance initiale de S^+. Comme le montre la comparaison entre les tableaux 18 et 17, les abondances prédites de SO, SO_2 et CS sont de plusieurs ordres de grandeur supérieures aux abondances effectivement observées. La déplétion incluse dans le modèle n'est pas suffisante pour diminuer l'abondance de soufre dans le gaz comme expliqué à la section précédente. Il faut donc diminuer artificiellement l'abondance initiale de S^+. Le second problème est commun à tous les modèles chimiques de nuage moléculaire. Les abondances de H_2O et O_2, deux molécules cruciales pour la chimie du soufre, sont largement surestimées par les modèles chimiques par rapport aux observations (Lee et al., 1996; Millar et al., 1997). La molécule O_2 n'a jamais été détectée dans le milieu interstellaire froid. Les satellites ISO et SWAS ont permis de donner une abondance maximale de $\sim 10^{-6}$ (Goldsmith et al., 2000) tandis que les nouvelles données du satellite ODIN ont abaissé cette limite à $\sim 10^{-7}$ (Pagani et al., 2003). En revanche, O_2 a été observé dans un flot moléculaire donc à forte température avec une abondance de l'ordre de 10^{-5} (Goldsmith et al., 2002). L'eau pour sa part a une abondance de l'ordre de 6×10^{-10}-1×10^{-8} dans les nuages moléculaires (Snell et al., 2000). Ces abondances, effectivement observées ou non, sont de plusieurs ordres de grandeur inférieures aux valeurs prédites par les modèles. La raison avancée pour expliquer ces faibles abondances est généralement que ces deux molécules sont piégées à la surface des grains au fur et à mesure qu'elles sont produites dans le gaz. A l'aide d'un modèle chimique incluant à la fois la chimie en phase gazeuse et à la surface des grains, Roberts et Herbst (2002) ont pu reproduire les abondances de O_2 dans les nuages moléculaires, mais pas celle de H_2O. Une autre explication a été proposée par Spaans et van Dishoeck (2001) qui est que les photons UV puissent pénétrer suffisamment profondément dans les nuages observés pour photodissocier O_2 et H_2O.

Nous proposons ici trois méthodes empiriques qui permettent d'obtenir trois compositions pré-évaporations (A, B, C) en meilleur accord avec les observations :

Composition A : On fixe une abondance initiale de S^+ 30 fois plus faible que l'abondance cosmique du soufre. En fin de simulation, on abaisse artificiellement les abondances de O_2 et H_2O à 10^{-7} et 10^{-8} respectivement. On suppose que le reste de l'oxygène non porté par CO est sous la forme atomique ce qui porte l'abondance de O à 2.6×10^{-4}. Cette valeur est en accord avec les observations (e.g. Baluteau et al., 1997; Caux et al., 1999; Lis et al., 2001; Vastel et al., 2002). Cette diminution arbitrairement imposée est une façon d'inclure un processus non identifié limitant la formation de O_2 et de H_2O ou favorisant leur destruction.

Composition B : Dans ce cas, l'évolution est simulée en baissant artificiellement de deux ordres de grandeur le taux de recombinaison dissociative de H_3O^+ ($H_3O^+ + e^- \rightarrow O + H_2 +$

TAB. 19: *Abondances (/H_2) en phase gazeuses observées dans le nuage moléculaire L134N et adoptées pour la composition initiale en phase gazeuse C. Dans le cas où seules des limites supérieures ont été déterminées, je reporte dans la troisième colonne la valeur adoptées. L'oxygène non contenu dans les molécules répertoriées dans le tableau est supposé être sous la forme atomique. Les valeurs de SO, SO_2, H_2S et CS sont également reportées dans le taleau 20. Références : (1) Snell et al. (2000) ; (2) Ohishi et al. (1992) ; (3) Goldsmith et al. (2000) ; (4) Stark et al. (1996) ; (5) Dickens et al. (2000).*

Espèce	Abondance observée	Abondance adoptée	Ref.
H_2O	$\leq 3.0 \times 10^{-7}$	3.0×10^{-7}	(1)
OH	7.5×10^{-8}	-	(2)
O_2	$\leq 3.4 \times 10^{-6}$	10^{-7}	(3)
C^0	$\geq 1.0 \times 10^{-6}$	6.0×10^{-6}	(4)
O^0	-	4.6×10^{-4}	
H_2CO	2.0×10^{-8}	-	(2)
C_2H	4.0×10^{-9}	-	(2)
HCO^+	1.2×10^{-8}	-	(5)
CH_3OH	3.7×10^{-9}	-	(5)
CS	1.7×10^{-9}	-	(5)
HCS^+	6.0×10^{-11}	-	(2)
SO	3.1×10^{-9}	-	(5)
SO_2	$\leq 1.6 \times 10^{-9}$	1.0×10^{-9}	(5)
H_2S	8.0×10^{-10}	-	(2)
H_2CS	6.0×10^{-10}	-	(2)

H, réaction 788; $H_3O^+ + e^- \rightarrow OH + H + H$, 789; $H_3O^+ + e^- \rightarrow OH + H_2$, 790; $H_3O^+ + e^- \rightarrow H_2O + H$, 791). Ceci a pour effet de limiter les abondances de O_2 et H_2O dans la gamme des valeurs observées. Cela a également pour effet de diminuer l'efficacité de formation de molécules soufrées oxygénées et il suffit alors de diminuer l'abondance initale de S^+ d'un facteur 5 (au lieu du facteur 30 nécessaire pour obtenir la composition A). L'abondance d'oxygène atomique obtenue est alors compatible avec les observations : 5×10^{-4}.

Composition C: Pour cette composition, je ne fais pas tourner le modèle, mais j'utilise les abondances de toutes les molécules observées dans L134N qui sont résumées dans le tableau 19 (voir aussi Charnley et al., 2001). Notons que l'abondance d'oxygène atomique utilisée pour cette composition est également très élevée, de l'ordre de 4.6×10^{-4}.

Dans les cas des compositions A et B, le modèle reproduit "correctement" les abondances observées dans le gaz froid pour un temps d'intégration de 10^7 ans. Les figures 45 et 46 montrent

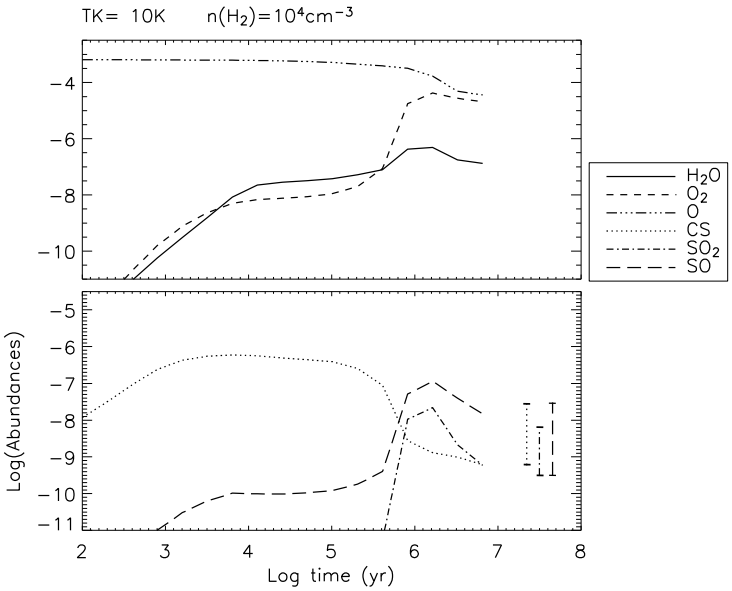

Fig. 45: *Abondances de certaines molécules en fonction du temps pour le calcul de la composition A. La température et la densité sont de 10 K et* 10^4 *cm*$^{-3}$*. Les abondances de CS, SO et* SO_2 *observées dans les nuages moléculaires (voir tableau 17) sont reportées à droite sur la figure du bas.*

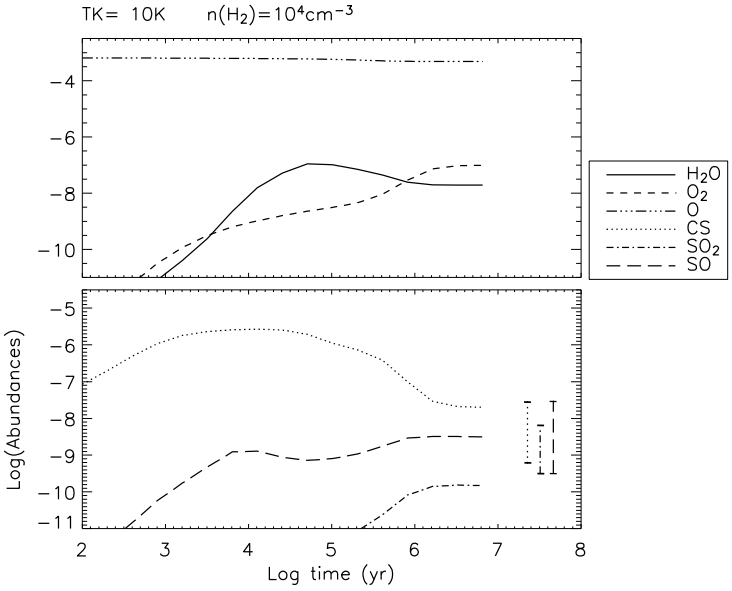

Fig. 46: *Abondances de certaines molécules en fonction du temps pour le calcul de la composition B. La température et la densité sont de 10 K et* 10^4 *cm*$^{-3}$*. Les abondances de CS, SO et* SO_2 *observées dans les nuages moléculaires (voir tableau 17) sont reportées à droite sur la figure du bas.*

TAB. 20: *Abondances en phase gazeuse des principales molécules à base de soufre, avant l'évaporation des manteaux glacés, pour les compositions A, B et C (voir tableau 19).*

Espèce	A ($\times 10^{-9}$)	B ($\times 10^{-9}$)	C ($\times 10^{-9}$)
SO	9	3	3,1
SO_2	0,4	1,5	1
H_2S	0,1	0,01	0,8
CS	0,4	20	1,7

l'évolution de l'abondance de certaines espèces soufrées et oxygénées en fonction du temps calculées à partir des trois méthodes décrites plus haut pour les compositions A et B. Les abondances finales en phase gazeuse de SO, SO_2, H_2S et CS calculées pour les compositions A et B et adoptées pour la composition C sont données dans le tableau 20.

Les procédures utilisées pour déterminer les compositions pré-évaporation A et B et la composition pré-évaporation adoptée pour le cas C ont des points faibles qu'il faut souligner. Dans la première (A), les abondances de O_2 et H_2O ne sont abaissées qu'à la fin du calcul. Donc les abondances des molécules soufrées sont calculées à partir d'abondances de O_2 et H_2O très probablement beaucoup plus grandes que celles qui existent réellement. Dans le cas B, les taux de réaction que l'on diminue artificiellement sont en fait très bien connus et ont été mesurés récemment par Jensen et al. (2000).
Le problème de la composition C est évident : seules les abondances des espèces qui peuvent être observées sont effectivement connues donc la liste est incomplète, les abondances non connues étant mises à zéro. Cependant faute d'une meilleure compréhension de la chimie des milieux froids et peu denses, la seule possibilité est d'étudier l'influence de la composition initiale en phase gazeuse pré-évaporation sur les résultats dans les cœurs chauds.

3.5 Résultats à haute température : les cœurs chauds

3.5.1 Paramètres des modèles

Afin d'étudier en détail la chimie du soufre dans les cœurs chauds, j'ai fait tourner le modèle en variant 5 paramètres au total :

- *La composition des manteaux des grains* : Les abondances des constituants, autre que les molécules soufrées, des manteaux des grains sont relativement bien connues surtout grâce aux résultats obtenus avec le satellite ISO. J'ai utilisé, **pour tous les modèles**, les abondances ($/H_2$) observées dans les glaces dans l'environnement d'étoiles massives reportées

Tab. 21: *Composition des manteaux des grains en terme de molécules non soufrées. Références : (1) Schutte et al. (1996) ; (2) Keane et al. (2001) ; (3) Chiar et al. (1996) ; (4) Boogert et al. (1998).*

Espèce	Abondance ($/H_2$)	Ref.
H_2O	10^{-4}	(1)
H_2CO	4×10^{-6}	(2)
CH_3OH	4×10^{-6}	(3)
CH_4	10^{-6}	(4)

dans le tableau 21. Les abondances sont données par rapport à H_2, c'est-à-dire qu'elle représentent les abondances équivalentes dans la phase gazeuse. Comme il l'a été mentionné dans l'introduction, on ignore sous quelle forme le soufre est déplété sur les grains. La seule molécule soufrée détectée, en phase solide à la surface des grains, est OCS. L'abondance d'OCS calculée est relativement faible, 10^{-7} (par rapport à H_2, Palumbo et al., 1997), loin de rendre compte de toute l'abondance cosmique du soufre. L'hypothèse généralement avancée est que le soufre est stocké sous la forme de H_2S pour deux raisons. Premièrement, l'hydrogénation est la principale réaction à la surface des grains. Ainsi une des molécules les plus abondantes y est H_2O. Deuxièmement, H_2S est abondant dans les régions chaudes où les manteaux glacés des grains sont évaporés, mais les modèles chimiques n'arrivent pas à expliquer sa formation en phase gazeuse. Malheureusement, les récentes observations obtenues avec l'instrument SWS (Short Wavelength Spectra) à bord du satellite ISO ne montrent pas de signature de cette molécule (Gibb et al., 2000; Boogert et al., 2000) et la valeur limite de son abondance en phase solide est de 10^{-7} par rapport à H_2 (van Dishoeck et Blake, 1998). FeS a récemment été proposé comme principal réservoir de soufre car des grains de soufre ferrique ont été observés dans des disques proto-planétaires. Ce qui est cohérent avec le fait que FeS soit un composant important des météorites. Si cette hypothèse est vraie, la déplétion du soufre dans le cœur des grains devrait s'observer en même temps que celle du fer, ce qui n'est pas le cas[1]. Très récemment, Scappini et al. (2003) ont proposé un autre réservoir : l'acide sulfurique hydraté ($H_2SO_4 \bullet H_2O$) qui en s'évaporant se tranformerait en H_2S. Scappini et al. (2003) ont comparé un spectre de laboratoire de cette molécule avec des observations SWS d'ISO dans deux jeunes objets

1. En effet, l'abondance cosmique du fer (5.6×10^{-5} par rapport à H_2, Sofia et Meyer, 2001) est un peu moins du double de celle du soufre et la fraction de l'abondance du fer contenue dans les cœurs des grains dans les milieux diffus par rapport à son abondance cosmique $\left(\frac{x(Fe)_{grain}}{x(Fe)_{cosmic}}\right)$ va de 0.9 à 1 (voir Sofia et al., 1994). Ces chiffres possèdent de grandes barres d'erreur, cependant ils suggèrent que l'abondance de fer dans la phase gazeuse des milieux diffus est au minimum d'un ordre de grandeur plus petit que celle du soufre. Par conséquent, il est peu probable que la formation de FeS dans les nuages moléculaires puisse expliquer la forte déplétion du soufre.

TAB. 22: *Abondances des molécules soufrées contenues dans les 4 manteaux des grains considérés.*

Espèces	Mod. 1	Mod. 2	Mod. 3	Mod. 4
OCS	10^{-7}	10^{-7}	10^{-7}	10^{-7}
H_2S	10^{-7}	10^{-7}	10^{-7}	10^{-8}
S	0	3×10^{-5}	0	3×10^{-5}
S_2	0	0	1.5×10^{-5}	0

stellaires (NGC7538:IRS9 et RAFGL 7009S). Ils ont conclu à la possible détection de H_2SO_4 solide mais sans quantifier son abondance. Cette détection est en fait ambiguë. Cependant, il serait intéressant de faire des recherches dans la banque de données d'ISO pour trouver d'éventuelles signatures de H_2SO_4 dans les glaces autour de protoétoiles. Pour les molécules soufrées, j'ai donc utilisé 4 compositions différentes appellées modèles 1 à 4 et reportées dans le tableau 22. D'un point de vue pratique, je suppose que le soufre peut être sous la forme de OCS, H_2S, S_2 ou S sur les grains (voir la section d'introduction). **Dans la première composition de manteaux (Modèle 1), la majorité du soufre est sous une forme réfractaire dans le cœur du grain : l'abondance totale de soufre élémentaire dans le gaz après l'évaporation des manteaux est de trois ordres de grandeur inférieure à l'abondance cosmique de S. En revanche, les trois autres (Modèles 2 à 4) possèdent de grandes abondances de soufre élémentaire (égales à l'abondance cosmique) qui sont évaporées dans la phase gazeuse directement sous forme de S ou S_2. Notons que la seule différence entre les Modèles 2 et 4 est l'abondance de H_2S qui est 10 fois plus petite dans le Modèle 4 que dans le 2.**

- *La composition en phase gazeuse pré-évaporation* : J'ai considéré les 3 compositions du gaz avant l'évaporation des molécules A, B et C (voir la section 3.4.2).
- *La température cinétique* : J'ai fait tourner NAHOON pour deux températures différentes : 100 et 300 K.
- *La densité* : Je considère trois densités de H_2 : 10^5, 10^6 et 10^7 cm^{-3}.
- *Le taux d'ionisation par le rayonnement cosmique* : Je considère trois taux différents : 1.3×10^{-17} (le taux de référence), 1.3×10^{-16} et 1.3×10^{-15} s^{-1}.

Cela me donne un total de 216 modèles. Les résultats de ces modèles sont présentés dans les sections suivantes à travers un certain nombre de figures qui sont résumées dans le tableau 23.

Tab. 23: *Résumé des figures présentant les résultats de la grille de modèles. Le tableau du haut regroupe toutes les figures représentant les abondances absolues (/H_2) de SO, SO_2, OCS, H_2S et CS (Ab.) et les rapports d'abondance SO_2/SO, SO_2/H_2S et OCS/H_2S (Rap.) en fonction du temps. Le tableau du bas liste les figures des réactions importantes (Réact. Imp. ; section 3.3) regroupées en annexe. La première colonne des deux tableaux indique le numéro de la figure. Les 5 dernières colonnes donnent les paramètres utilisés pour chaque figure : la température (Temp.), la densité de H_2 (Dens.), la composition gazeuse initiale (Comp.), la composition des molécules soufrées sur les grains (Mod.), le taux d'ionisation par le rayonnement cosmique ($\zeta 1 = 1.3 \times 10^{-17}$ s^{-1}, $\zeta 2 = 1.3 \times 10^{-16}$ s^{-1} et $\zeta 3 = 1.3 \times 10^{-15}$ s^{-1}) ou le temps d'intégration (temps). Pour les abondances et les rapports d'abondance, le temps d'intégration est entre 0 et 10^7 ans tandis que pour les réactions importantes, le taux d'ionisation est le taux de référence.*

Num	Objet	Temp. (K)	Dens. (cm^{-3})	Comp.	Mod.	ζ (s^{-1})
47	Ab.	100	10^5	A, B et C	1 à 4	ζ_1
48	Ab.	100	10^7	A, B et C	1 à 4	ζ_1
49	Ab.	300	10^7	A, B et C	1 à 4	ζ_1
50	Rap.	100	10^5	A, B et C	1 à 4	ζ_1
51	Rap.	100	10^7	A, B et C	1 à 4	ζ_1
52	Ab.	100	10^5, 10^6 et 10^7	A	1 à 4	ζ_1
53	Ab.	300	10^5, 10^6 et 10^7	A	1 à 4	ζ_1
59	Rap.	100	10^5, 10^6 et 10^7	A	1 à 4	ζ_1
60	Rap.	300	10^5, 10^6 et 10^7	A	1 à 4	ζ_1
54	Ab.	100	10^7	A	1 à 4	ζ_1, ζ_2 et ζ_3
55	Rap.	100	10^7	A	1 à 4	ζ_1, ζ_2 et ζ_3
56	Ab.	100	10^5, 10^6 et 10^7	A	2	ζ_1, ζ_2 et ζ_3
57	Rap.	100	10^5, 10^6 et 10^7	A	2	ζ_1, ζ_2 et ζ_3
58	Ab.	300	10^5 et 10^7	A	2	ζ_1, ζ_2 et ζ_3

Num	Objet	Temp. (K)	Dens. (cm^{-3})	Comp.	Mod.	temps (ans)
79	Réac. Imp.	100 K	10^7	B	1	10^3
80	Réac. Imp.	100	10^7	B	1	10^4
81	Réac. Imp.	100	10^7	A	1	10^3
82	Réac. Imp.	100	10^7	A	1	10^4
83	Réac. Imp.	100	10^7	C	3	10^2
84	Réac. Imp.	100	10^7	A	2	10^4
85	Réac. Imp.	100	10^7	A	3	10^4
86	Réac. Imp.	100	10^7	A	4	10^4
87	Réac. Imp.	200	10^7	A	2	10^4
88	Réac. Imp.	100	10^7	A	2	10^4

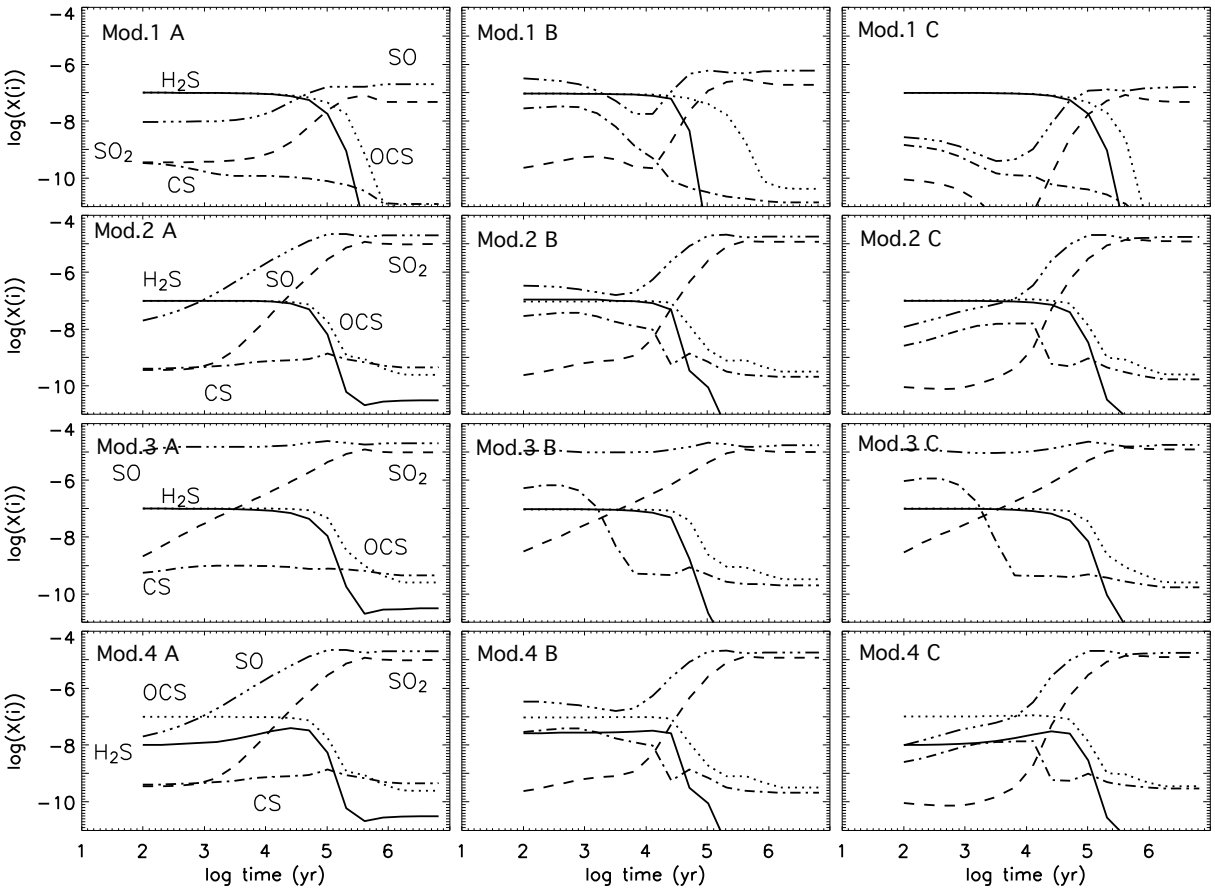

FIG. 47: *Abondances (/H_2) des molécules SO, SO_2, OCS, H_2S et CS en fonction du temps pour un gaz de température 100 K et de densité* 10^5 cm^{-3} *pour les trois compositions en phase gazeuse pré-évaporation (Comp. A : colonne de gauche, B : colonne de milieu et C : colonne de droite) et les trois compositions des manteaux des grains (Modèle 1 : première ligne en partant du haut, 2 : deuxième ligne, 3 : troisième ligne et 4 : quatrième ligne).*

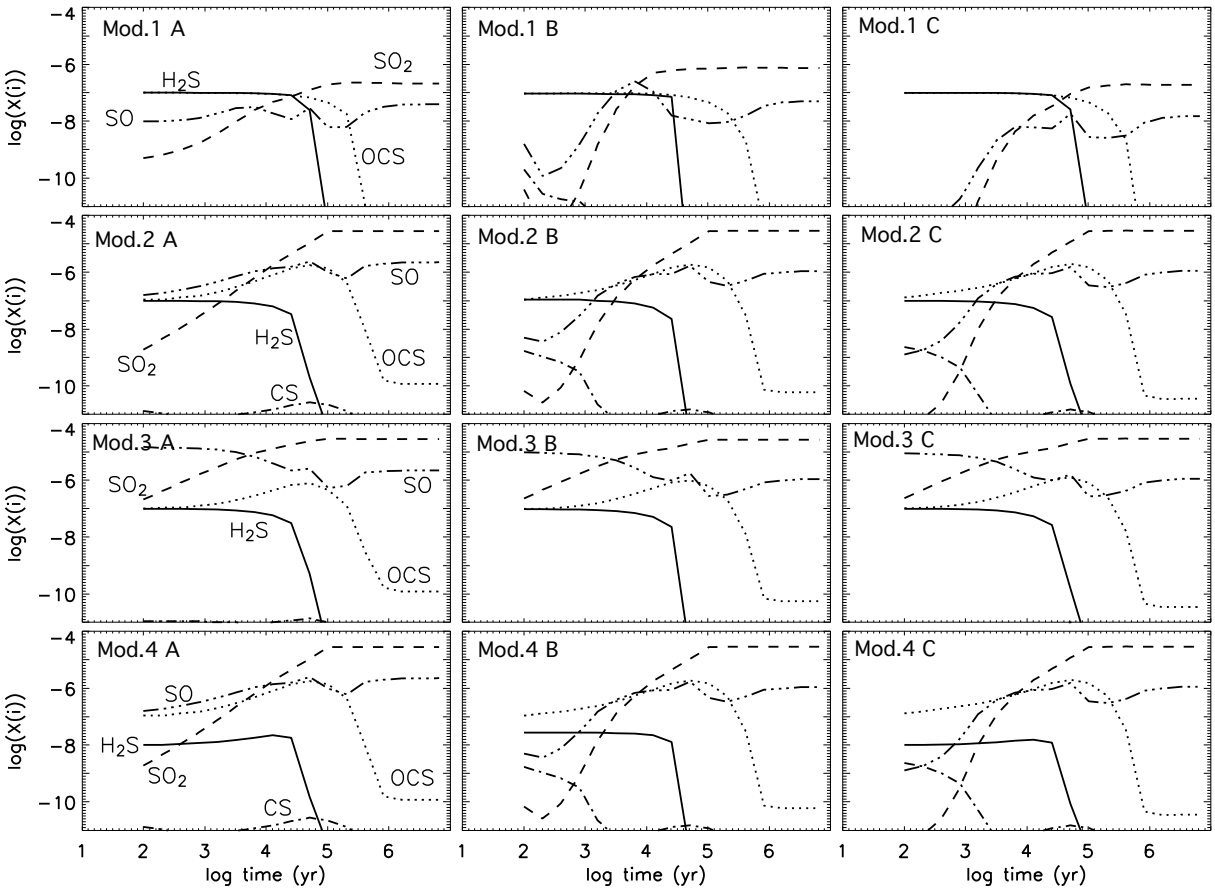

Fig. 48: *Abondances (/H_2) des molécules SO, SO_2, OCS, H_2S et CS en fonction du temps pour un gaz de température 100 K et de densité* 10^7 cm^{-3} *pour les trois compositions en phase gazeuse pré-évaporation (Comp. A : colonne de gauche, B : colonne de milieu et C : colonne de droite) et les trois compositions des manteaux des grains (Modèle 1 : première ligne en partant du haut, 2 : deuxième ligne, 3 : troisième ligne et 4 : quatrième ligne).*

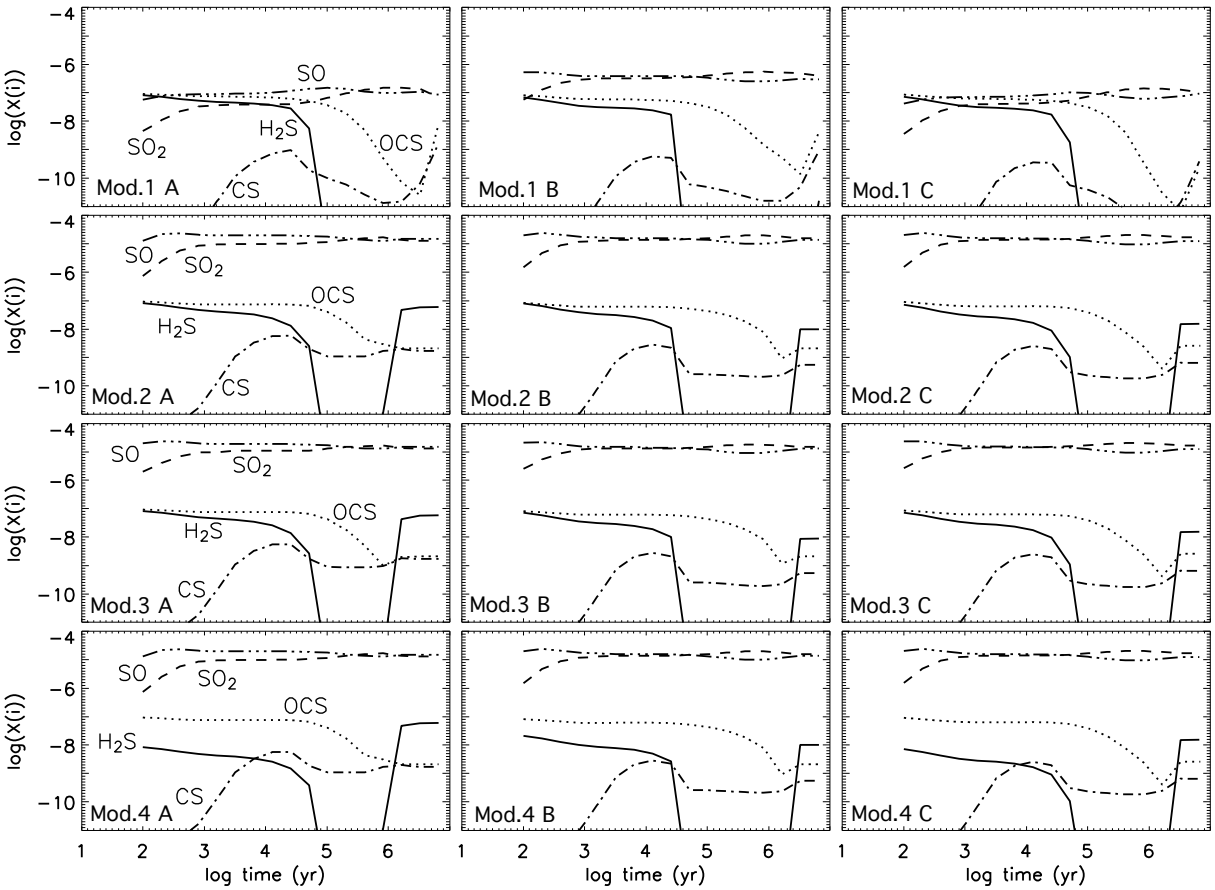

FIG. 49: *Abondances (/H_2) des molécules SO, SO_2, OCS, H_2S et CS en fonction du temps pour un gaz de température 300 K et de densité* 10^7 cm^{-3} *pour les trois compositions en phase gazeuse pré-évaporation (Comp. A : colonne de gauche, B : colonne de milieu et C : colonne de droite) et les trois compositions des manteaux des grains (Modèle 1 : première ligne en partant du haut, 2 : deuxième ligne, 3 : troisième ligne et 4 : quatrième ligne).*

3.5.2 Influence de la composition gazeuse pré-évaporation

Les figures 47, 48 et 49 donnent l'évolution au cours du temps des abondances de SO, SO_2, OCS, H_2S et CS calculées avec les trois compositions du gaz pré-évaporation (Comp. A, B et C) et pour les quatre compositions de manteau (Mod. 1 à 4). Les conditions physiques utilisées pour ces figures sont : 100 K et 10^5 cm^{-3} (figure 47), 100 K et 10^7 cm^{-3} (figure 48) et 300 K et 10^7 cm^{-3} (figure 49).

Les abondances calculées à partir des trois compositions gazeuses initiales présentent des différences importantes à 100 K, pour les fortes densités dans l'intervalle de temps $0 - 10^4$ ans et les modèles 1, 2 et 4 (figures 47 et 48). En revanche, à plus haute température et pour le modèle 3, les trois compositions donnent des résultats similaires. Le milieu met donc environ 10^4 ans pour oublier la composition initiale gazeuse. Etant donné que l'âge des protoétoiles de classe 0 est estimé à 10^3-10^4 ans (voir l'introduction et la section 3.5.6), la composition gazeuse pré-évaporation est une incertitude dont il faut tenir compte.

Dans les trois sections suivantes, j'explique les principales différences obtenues pour les molécules SO, SO_2 et CS ainsi que les similitudes entre les 3 compositions A, B et C obtenues dans certaines conditions.

Influence sur les abondances de SO et SO_2

Les molécules SO et SO_2 sont moins abondantes dans le gaz chaud à un temps donné (entre 0-10^4 ans) pour les compositions initiales B et C que pour la composition A. Ainsi à 10^3 ans, pour une température de 100 K, une densité de 10^7 cm^{-3} et le modèle 1, les abondances de SO et SO_2 sont plus petites d'un facteur 5 et 20 avec la composition B et d'un facteur 400 et 2000 avec la composition C par rapport à celles obtenues avec la composition A. Pour comprendre ces différences, j'ai utilisé la méthode décrite à la section 3.3 afin de déterminer les réactions *clés*. Pour les compositions B et C et un temps d'intégration de 10^3 ans, certaines réactions impliquant le carbone atomique sont importantes pour la formation de SO, SO_2 et CS : 164 (C + O_2 → CO + O), 166 (C + SO → S + CO) et 167 (C + SO → CS + O) (voir figure 79 en annexe).

Ces réactions deviennent négligeables à partir de 10^4 ans pour les compositions B et C tandis qu'elles le sont à tout âge pour la composition A (figure 81 en annexe). Le fait que les réactions précédemment citées soient négligeables dans le cas de la composition A s'explique par le fait que l'abondance initiale du carbone atomique est plus élevée dans les compositions B et C (3.5×10^{-6} et 5.9×10^{-6} respectivement) que dans la composition A (6.2×10^{-10}). Le fait que ces réactions perdent de l'importance après 10^4 ans pour la composition B est une des conséquences

du fait que l'abondance du carbone dans le gaz décroît et devient similaire à celle dans le modèle utilisant la composition initiale A ($\sim 10^{-11}$). De plus à 10^4 ans, une réaction importante pour la composition A (figure 82 en annexe) avec l'oxygène atomique le devient également pour les compositions B et C (figure 80 en annexe) : la réaction 756 ($O + SO \rightarrow SO_2 + h\nu$) estompant un peu plus les différences entre les résultats donnés par les différentes compositions.

Différences pour l'abondance de CS

Dans tous les modèles considérés ici, je suppose que la molécule de CS provient initialement du gaz pré-évaporation et non de l'évaporation des manteaux des grains. Ainsi donc la composition gazeuse pré-évaporation a une influence directe sur l'abondance de CS dans le gaz chaud pendant environ 10^4 ans. La composition A possède une abondance initiale de CS plus faible que les deux autres compositions, particulièrement la composition B qui a une abondance initiale de CS 50 fois plus grande que celle de la composition A. **De plus, la chimie de CS est directement liée au carbone atomique.** Aussi, la production de CS est plus efficace avec les compositions B et C qui possèdent une plus grande abondance initiale de carbone atomique que la composition A. Par exemple, pour une température de 100 K, une densité de 10^5 cm^{-3}, le modèle 3 et la composition initiale C, l'abondance de CS augmente de près de trois ordres de grandeur pendant les 100 premières années d'intégration à partir de l'abondance initiale de 10^{-9}. Dans le modèle 3, le SO très rapidement formé est également rapidement détruit par le carbone atomique (pas suffisamment toutefois pour diminuer l'abondance de SO), qui est plus abondant dans les compositions B et C, pour donner CS par la réaction $C + SO \rightarrow CS + O$ (167) (voir figure 83).

Similitudes des résultats pour les trois compositions pré-évaporation

A 100 K contrairement aux autres modèles, le modèle 3 (composition initiale du grain où le soufre est majoritairement évaporé sous la forme de S_2) donne les mêmes résultats dès 10^2 ans quelque soit la composition gazeuse initiale sauf pour la molécule de CS (voir section précédente). Cette similitude s'explique par le fait que SO est directement formé par la réaction $S_2 + O \rightarrow SO + S$ (197), atteignant son abondance d'équilibre avant 10^2 ans. A partir du moment où les trois compositions initiales possèdent une abondance d'oxygène atomique similaire elles donnent lieu à une chimie similaire pour le modèle 3.

A haute température en revanche, 300 K (voir figure 49), les résultats obtenus avec les 3 compositions initiales gazeuses sont similaires quelque soit la densité et la composition des grains. En fait, le carbone atomique initial qui fait la différence à basse température voit son abondance décroître très rapidement ($\leq 10^2$ yr) pour former du CO et n'influence donc pas

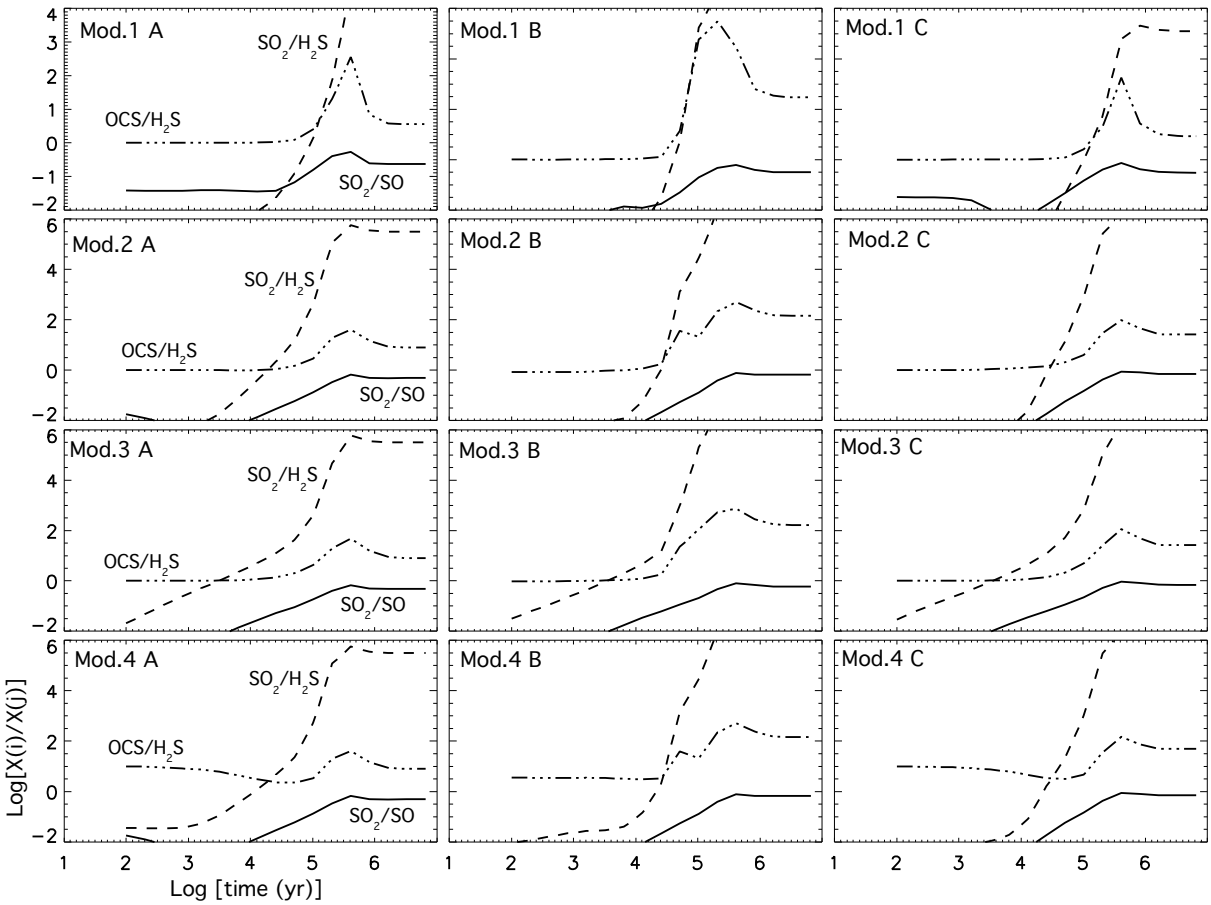

Fig. 50: *Rapports d'abondance SO_2/SO, SO_2/H_2S et OCS/H_2S en fonction du temps pour un gaz de température 100 K et de densité 10^5 cm^{-3} pour les trois compositions en phase gazeuse pré-évaporation (Comp. A : colonne de gauche, B : colonne de milieu et C : colonne de droite) et les trois compositions des manteaux des grains (Modèle 1 : première ligne en partant du haut, 2 : deuxième ligne, 3 : troisième ligne et 4 : quatrième ligne).*

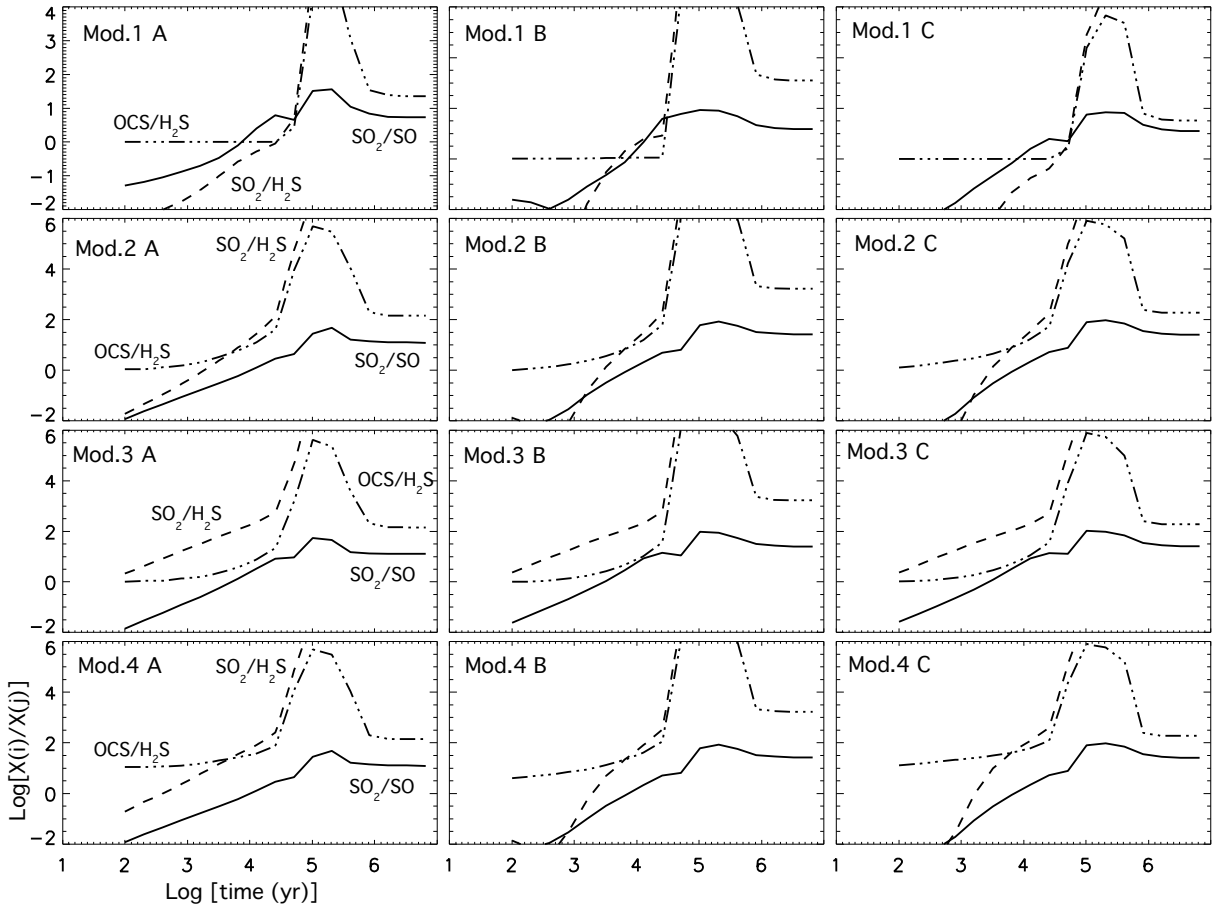

FIG. 51: *Rapports d'abondance SO_2/SO, SO_2/H_2S et OCS/H_2S en fonction du temps pour un gaz de température 100 K et de densité 10^7 cm^{-3} pour les trois compositions en phase gazeuse pré-évaporation (Comp. A : colonne de gauche, B : colonne de milieu et C : colonne de droite) et les trois compositions des manteaux des grains (Modèle 1 : première ligne en partant du haut, 2 : deuxième ligne, 3 : troisième ligne et 4 : quatrième ligne).*

la destruction de SO ni la production de CS. Les figures 50 et 51 montrent de plus que la composition initiale du gaz a moins d'influence sur les rapports d'abondance SO_2/SO, SO_2/H_2S et OCS/H_2S que sur les abondances absolues.

Les trois compositions initiales gazeuses donnent des résultats quantitatifs différents (au niveau des abondances absolues) mais qualitativement les conclusions sont les mêmes. Pour étudier l'influence des autres paramètres comme la composition des manteaux, la température et la densité, je ne considèrerai par la suite que la composition A mais les conclusions restent les mêmes pour les deux autres compositions.

3.5.3 Influence de la composition des manteaux, de la température et de la densité de H_2

Les figures 52 et 53 montrent les abondances absolues (/H_2) des principales molécules soufrées SO, SO_2, OCS, H_2S et CS en fonction du temps pour la composition gazeuse pré-évaporation A et pour les conditions physiques présentées à la section 3.5.1 (une température de 100 et 300 K et une densité de 10^5, 10^6 et 10^7 cm^{-3}). Le but de cette section est d'étudier l'influence de certains des paramètres du modèle (compositions des manteaux, de la température et de la densité) sur les abondances des molécules soufrées en phase gazeuse. Dans les quatre sections suivantes, sont commentés les résultats pour chacune des espèces soufrées. Dans la cinquième section, je décris l'influence des paramètres sur la sensibilité du modèle aux taux de réaction et sur la nature des réactions "clés", pour lesquelles une meilleure connaissance des taux est souhaitée.

Abondances de SO et SO_2

Pour tous les paramètres, SO et SO_2 sont les deux molécules soufrées qui deviennent les plus abondantes au bout d'un certain temps d'évolution ($0 - 10^6$ ans). Leurs abondances deviennent très élevées ($\sim 10^{-5}$) pour les trois derniers modèles. Je rappelle ici que la quantité totale de soufre élémentaire en phase gazeuse est de l'ordre de l'abondance cosmique de S dans les trois derniers modèles (2, 3 et 4) alors qu'elle est de deux ordres de grandeur inférieure pour le modèle 1 où la majorité du soufre est supposée être déplétée dans les cœurs réfractaires des grains. Par conséquent, le modèle 1 donnera des résultats forcément différents des trois autres modèles.
Pour une température de 100 K, une densité de 10^6-10^7 cm^{-3} et toutes les compositions des grains, SO_2 devient plus abondant que SO à partir de 10^4-10^5 ans, principalement à cause de la réaction : O + SO $\rightarrow$ SO_2 + hν (756).
A 300 K, la différence entre les abondances de SO et SO_2 devient nulle (à partir de 2×10^5 ans pour n(H_2)=10^5 cm^{-3} et à partir de 10^3 ans pour n(H_2)=10^7 cm^{-3}). Le fait que SO_2 ne soit plus sur-abondant par rapport à SO s'explique par le fait que le coefficient de la réaction O + SO $\rightarrow$

SO_2 + hν décroîsse avec la température. En fait, à cette température, SO_2 est principalement formé par la réaction OH + SO → SO_2 + H (204) dans les 100 premières années où l'abondance de SO_2 atteint sa valeur d'équilibre. Durant ce labs de temps, OH est formé très rapidement par la réaction H_2 + O → OH + H (153). Après 100 ans, la majorité du OH est transformé en eau. Le fait d'obtenir une abondance de SO_2 aussi importante que celle de SO à l'équilibre est différent des prédictions du modèle de Charnley (1997). En effet, dans le modèle de Charnley, l'abondance initiale d'oxygène atomique est nulle et donc OH est très faiblement produit. Ainsi l'abondance de SO_2 reste au moins d'un ordre de grandeur inférieure à celle de SO dans le modèle de Charnley.
Dans le modèle 3, la molécule SO devient très rapidement très abondante même à 100 K parce que le soufre moléculaire S_2 qui est initialement évaporé de la surface des grains est directement transformé en SO par la réaction S_2 + O → SO + S (197).

Les observations ont révélé une abondance d'oxygène atomique dans les nuages moléculaires (e.g. Baluteau et al., 1997; Caux et al., 1999; Lis et al., 2001; Vastel et al., 2002) globalement plus élevée que les prédictions à l'équilibre des modèles chimiques (Lee et al., 1996). La prise en compte de cette forte abondance est d'une importance capitale pour la chimie du soufre car l'évolution chimique des composés soufrés en dépend directement.

L'abondance de H_2S

Dans tous les modèles que je considére, la molécule H_2S est initialement piégée sur les grains puis évaporée dans la phase gazeuse lorsque la température augmente. Après 10^4 ans, l'abondance initiale de H_2S décroît brusquement dans tous les modèles puis croît à partir de 10^6 ans dans les modèles 2 et 4 à 300 K.

La décroissance de H_2S est due à l'attaque de cette molécule par H_3O^+ qui est plus abondant que H_3^+ dans les régions de cœur chaud où l'eau à une forte abondance. La réaction entre H_2S et H_3O^+ amène à la protonation de l'hydrogène sulphide en H_3S^+ suivie d'une recombinaison dissociative avec les électrons qui donne HS : $H_3S^+ + e^- \rightarrow$ HS + H + H (812). La molécule de HS ainsi produite est alors principalement détruite par la réaction : HS + O → SO + H (189).

A 300 K, H_2S est efficacement produit à partir de 10^5 ans par deux processus différents suivant la densité du gaz. Dans un gaz dense (10^7 cm^{-3}), H_2S est produit par une série de réactions amorcées par la destruction de SO et SO_2 par le rayonnement cosmique. Du soufre atomique est alors produit puis doublement hydrogéné pour donner du H_2S avec des étapes intermédiaires qui produisent des espèces peu communes comme HS_2^+, $H_3S_2^+$, HS_2 et $H_2S_2^+$. A 10^5 cm^{-3} en revanche, l'abondance de S^+ est plus importante ($\sim 10^{-9}$ au lieu de $10^{-12} - 10^{-11}$

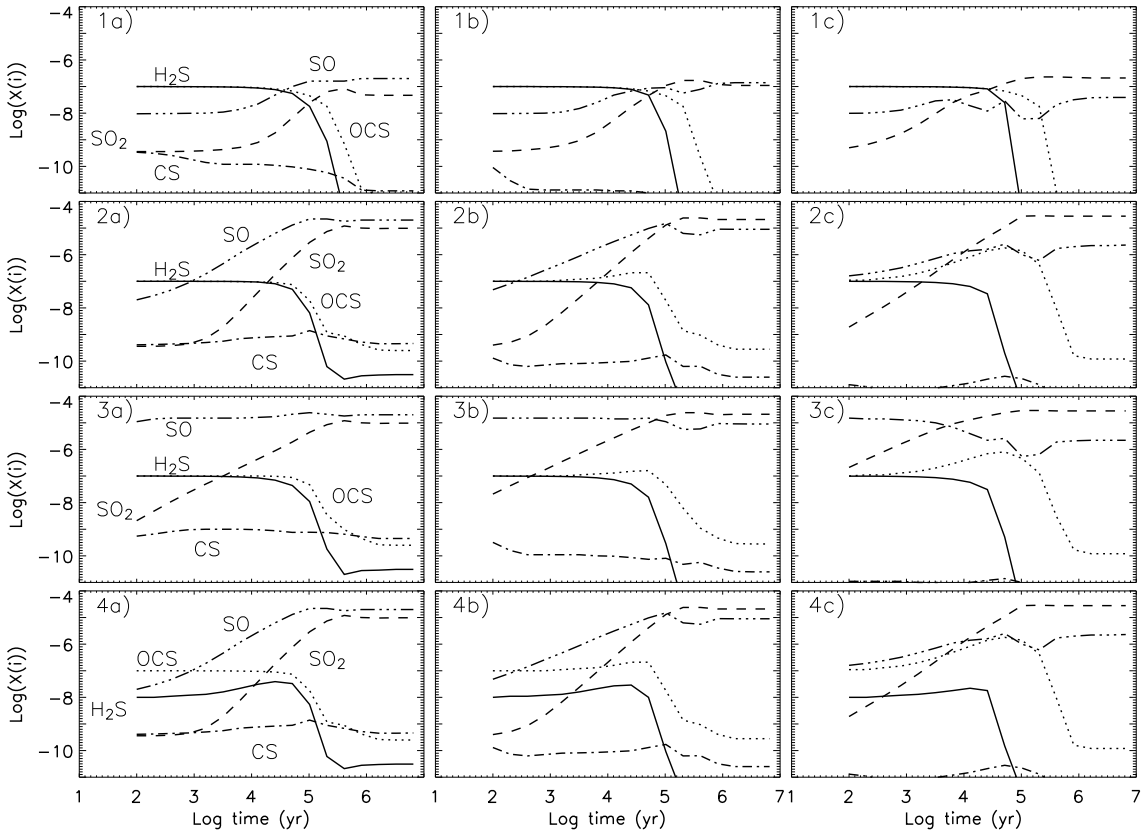

Fig. 52: *Abondances (/H_2) des molécules SO, SO_2, OCS, H_2S et CS en fonction du temps pour la composition en phase gazeuse pré-évaporation A et les quatre compositions des manteaux des grains (1 à 4 du haut vers le bas). La température est de 100 K et la densité vaut* 10^5 *(gauche),* 10^6 *(milieu) et* 10^7 cm^{-3}*(droite).*

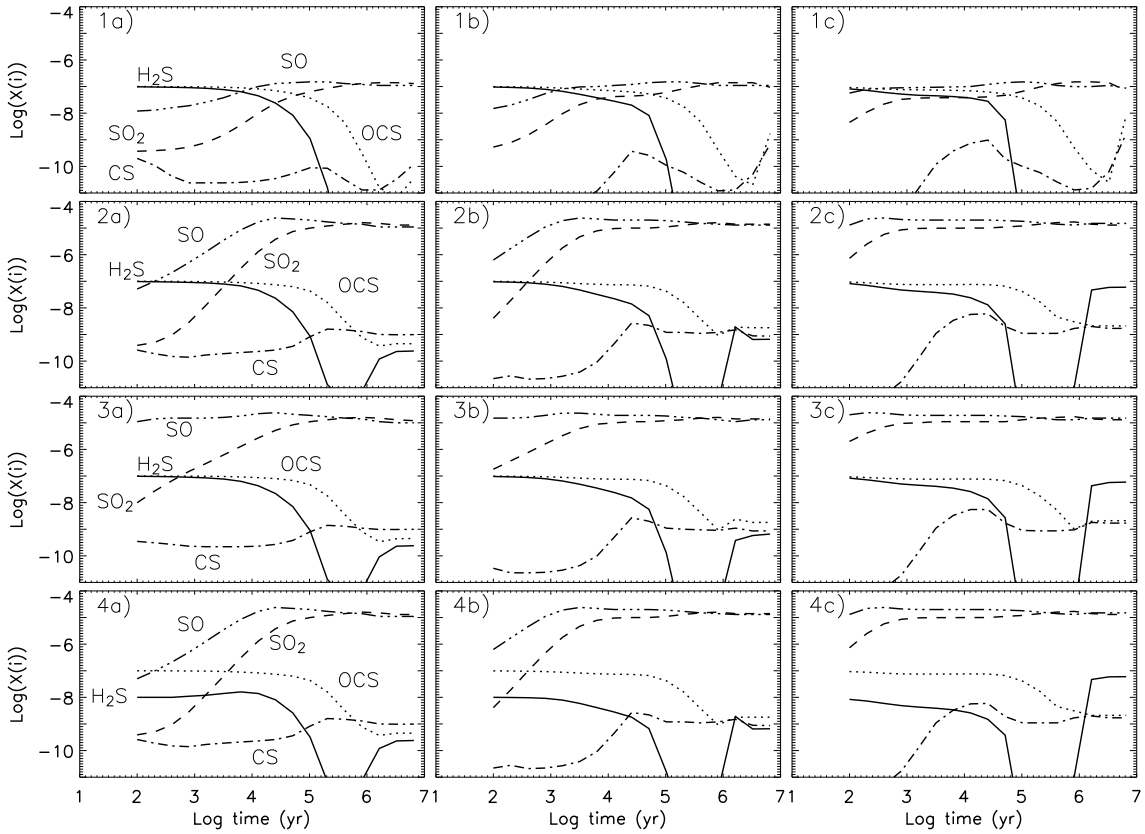

FIG. 53: *Abondances (/H_2) des molécules SO, SO_2, OCS, H_2S et CS en fonction du temps pour la composition en phase gazeuse pré-évaporation A et les quatre compositions des manteaux des grains (1 à 4 du haut vers le bas). La température est de 300 K et la densité vaut* 10^5 *(gauche),* 10^6 *(milieu) et* 10^7 cm^{-3}*(droite).*

à 10^7 cm^{-3}) et H_2S est formé par un autre procédé initié par l'ionisation de S par les photons induits par le rayonnement cosmique (117) suivie des deux réactions $H_2 + S^+ \rightarrow H_2S^+ + h\nu$ (752) et $S + H_2S^+ \rightarrow H_2S + S^+$ (740).

Notons qu'à basse température, le soufre évolue vers une forme plutôt oxygénée, tandis qu'à haute température, l'oxygène étant principalement sous forme d'eau, le soufre est plutôt hydrogéné.

L'abondance de OCS

Comme H_2S, la molécule OCS est évaporée de la surface des grains dans le gaz chaud. Une fois dans la phase gazeuse, OCS est principalement détruite par le rayonnement cosmique (127) et par S^+ (598) mais plus tardivement que H_2S. Dans certaines conditions, à 100 K et $10^6 - 10^7$ cm^{-3}, l'abondance de OCS peut être maintenue dans le gaz et peut même temporairement augmenter de 10^{-7} à 10^{-6} grâce à l'association radiative $CO + S \rightarrow OCS + h\nu$ (757). D'autre part, la destruction de OCS par S^+ est moins efficace à forte densité car l'abondance de S^+ y est plus plus faible (5×10^{-12} à 10^7 cm^{-3} contre 1×10^{-8} à 10^5 cm^{-3}).

L'abondance de CS

Contrairement aux autres espèces, CS est déjà dans le gaz au moment de l'évaporation. A 100 K, le CS initial est détruit plus efficacement lorsque la densité augmente et son abondance ne dépasse pas 10^{-9} (détruit pas l'oxygène atomique, réaction 191). A 300 K, CS est efficacement produit à haute densité et après 10^3 ans, et son abondance atteint 10^{-8}. En effet, à forte température et densité, l'oxygène atomique, principal destructeur de CS est majoritairement incorporé à H_2O à partir de 10^3 ans, tandis que CS est produit par la recombinaison de $HOCS^+$ avec un électron (réaction 824), $HOCS^+$ étant lui même formé par les réactions 286 et 447 : $H_3^+ + OCS \rightarrow HOCS^+ + H_2$ et $CH_3^+ + SO \rightarrow HOCS^+ + H_2$.

Influence des paramètres sur l'importance relative des réactions

Je vais présenter ici les résultats sous un autre angle, en étudiant l'influence des paramètres sur l'importance des différentes réactions chimiques du modèle (voir la section 3.3). Selon les paramètres physiques, en effet, la hiérarchie des voies de formation ou de destruction qui dominent le réseau réactionnel est modifiée. J'ai reporté en annexe les figures des réactions importantes (figures 82, 84, 85 et 86) impliquées dans la chimie de SO, SO_2, OCS, H_2S et CS pour les 4 compositions initiales des manteaux des grains (autres paramètres : $T_k = 100$ K, $n(H_2) = 10^7$ cm^{-3}, $t = 10^4$ ans et Comp. A).

Deux réactions sont naturellement importantes pour tous les modèles : les réactions d'ionisation par le rayonnement cosmique de H_2 et He (réactions 90 et 91) qui sont à la base de toute la chimie des ions. SO et SO_2 ont une chimie très similaire impliquant les mêmes réactions quelque soit le modèle considéré. OCS pour sa part a une chimie très simple où une seule réaction (757) semble avoir réellement de l'importance pour les modèles 2 à 4 tandis que deux réactions (127-128) sont importantes avec le modèle 1. Notez que la réaction 757 est une réaction de formation de OCS ($CO + S \rightarrow OCS + h\nu$) favorisée dans le cas des modèles 2 à 4 par l'abondance élevée de soufre élémentaire dans le gaz tandis que les réactions 127 et 128 sont des réactions de destruction de OCS par le rayonnement cosmique.

Le modèle 1 induit une chimie plus simple que les autres modèles car il est associé à un nombre restreint de réactions importantes. Certaines réactions importantes pour la formation de CS et H_2S ainsi que des réactions avec S et S^+ importantes dans les modèles 2 à 4 ne le sont plus pour le modèle 1, dû à la faible abondance de soufre élémentaire dans la phase gazeuse. Les modèles 2 et 3 ont des listes de réactions importantes relativement similaires sauf pour certaines réactions avec SO favorisées par le modèle 3 (réactions 125, 285, 447 et 624 importantes pour CS et H_2S dans le modèle 3) tandis que certaines réactions clés pour SO et SO_2 perdent de l'importance avec le modèle 3 (seules les réactions 117, 789 et 800 disparaissent totalement de la figure 85). La liste des réactions importantes est pratiquement identique pour les modèles 2 et 4. Seules quelques réactions avec H_2S et H_3S^+ (119, 587, 595 et 597) perdent de l'importance pour le modèle 4, à cause de l'abondance initiale de H_2S qui est 10 fois plus petite pour le modèle 4 que le modèle 2 tandis qu'une seule réaction (550) gagne en importance.

Etant donné que certains taux de réaction dépendent de la température, cette dernière est un paramètre qui peut faire changer l'importance des réactions. La figure 87 montre les réactions importantes à 200 K[1] pour le modèle 2 et est à comparer avec la figure 84. Certaines réactions neutre-neutre deviennent importantes tandis que d'autres deviennent négligeables (579, 789, 798, 800, 804 et 825). En revanche, je n'ai pas constaté d'influence significative de la densité de H_2. L'analyse faite jusqu'ici est basée sur une perturbation des taux de réaction de 10%. En général, étant donné que les équations ne sont pas linéaires, l'amplitude de la perturbation ne devrait pas influencer les résultats de façon linéaire. J'ai fait la même analyse que précédemment en multipliant chaque taux de réaction par 2, ce qui équivaut à une variation de 100% (voir figure 88). Dans le cas de la chimie du soufre, j'ai toujours obtenu des variations relativement linéaires : le rapport $\Delta X/\Delta R$ est peu dépendant de ΔR dans le domaine de perturbation considéré ($10\% < \Delta R < 100\%$) . La seule réelle différence est pour la molécule CS qui voit son nombre de réactions importantes augmenter si la pertubation est de 100%.

1. J'ai utilisé ici une température de 200 K car c'est celle estimée dans le cœur chaud d'Orion-KL (voir section 3.5.6).

Tab. 24: *Liste de réactions clés, auxquelles les abondances des molécules soufrées dans le gaz chaud sont le plus sensibles. La première colonne indique le numéro de la réaction (voir tableau F en annexe) tandis que la dernière colonne donne le coefficient de la réaction. γ symbolise une particule du rayonnement cosmique.*

Num.	Réaction	Coefficient $K(T)$
90	$H_2 + \gamma \rightarrow H_2^+ + e^-$	9.30×10^{-1}
153	$H_2 + O \rightarrow OH + H$	$3.44 \times 10^{-13} \left(\frac{T}{300}\right)^{2.67} e^{-\frac{3160}{T}}$
190	$O + H_2S \rightarrow HS + OH$	$9.22 \times 10^{-12} e^{-\frac{1800}{T}}$
191	$O + CS \rightarrow CO + S$	$1.94 \times 10^{-11} e^{-\frac{231}{T}}$
740	$S + H_2S^+ \rightarrow H_2S + S^+$	1.10×10^{-9}
756	$O + SO \rightarrow SO_2 + h\nu$	$3.20 \times 10^{-16} \left(\frac{T}{300}\right)^{-1.60}$
757	$CO + S \rightarrow OCS + h\nu$	$1.60 \times 10^{-17} \left(\frac{T}{300}\right)^{-1.5}$

Sélection de réactions *clés*

Nous avons identifié quelles étaient les réactions auxquelles les abondances des molécules soufrées sont les plus sensibles dans la gamme des paramètres physiques et des temps d'évolution considérés dans la présente étude. Dans la table 24, sont indiquées, parmi ces réactions dominant la chimie du soufre, celles dont il serait important de mieux contraindre le taux de réaction.
La réaction 90 est l'ionisation de H_2 par le rayonnement cosmique qui comme je l'ai déjà dit est la base de la chimie ion-molécule. Les réactions 153 et 190 sont des réactions neutre-neutre importantes seulement à haute température. Les autres réactions sont des réactions ion-molécule (740), neutre-neutre (191) et des associations radiatives (756 et 757). Sans cette analyse, l'importance de ces réactions n'aurait probablement pas été soulignée. Il sera crucial de connaître les taux de ces réactions avec plus de précision. Parmi ces réactions, seul le taux de 153 est bien déterminé expérimentalement, toutefois les mesures ont été faites à température ambiante (300 K) et donc la valeur entre 100 et 200 K est extrapolée. L'incertitude sur les énergies d'activation des réactions 190 et 191 est également grande ce qui apporte une grande incertitude sur les taux de ces réactions autour de 100 et 200 K. Il est probable que la réaction ion-molécule 740 ne soit pas exothermique (Herbst, communication personnelle) ce qui impliquerait la nécessité d'introduire une barrière d'activation et les taux des associations radiatives (756 et 757) sont au mieux connus à un facteur 10 près.

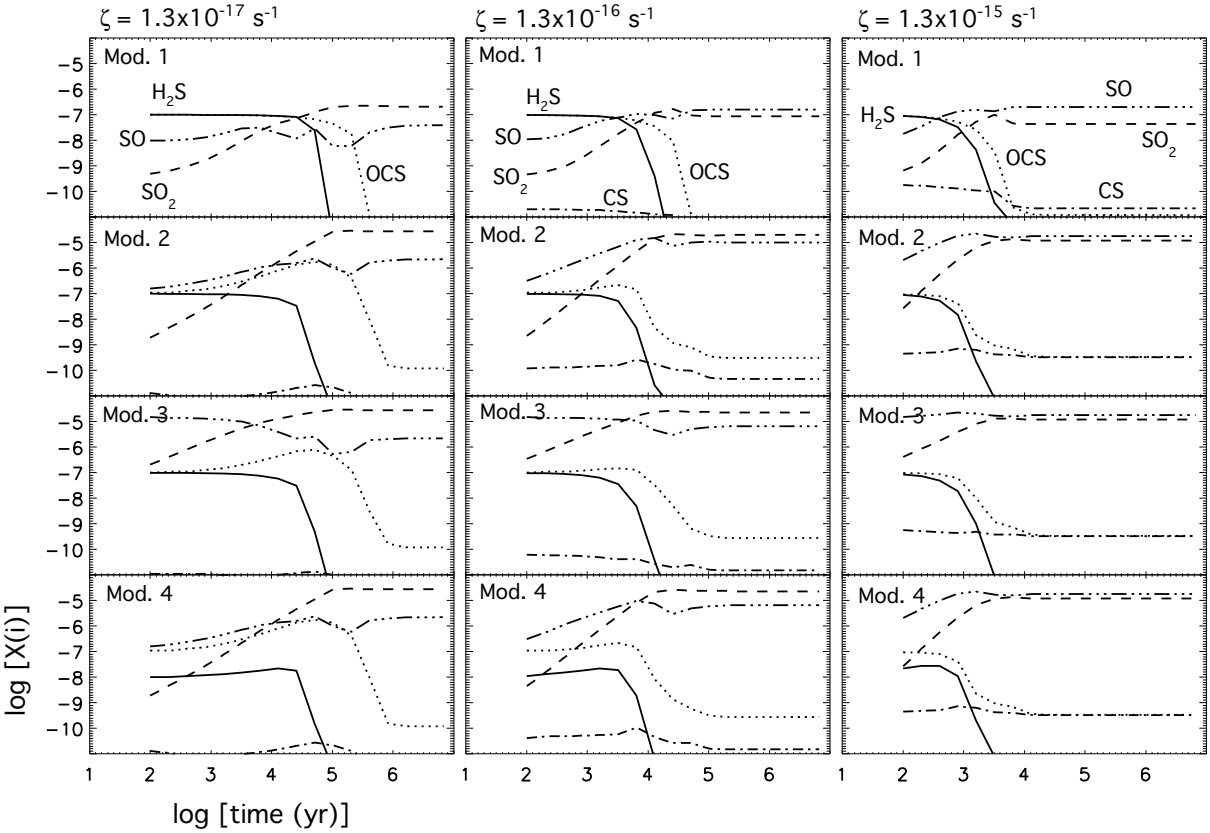

FIG. 54: *Abondances absolues (/H_2) des molécules SO, SO_2, OCS, H_2S et CS en fonction du temps pour une température de 100 K, pour une densité de* 10^7 cm^{-3} *et pour les 4 compositions de grains (ligne 1 à 4 : Modèle 1 à 4). Les trois colonnes représentent les abondances calculées avec un taux d'ionisation par le rayonnement cosmique différent. Première colonne :* 1.3×10^{-17} s^{-1} *(taux de référence), deuxième colonne :* 1.3×10^{-16} s^{-1} *et troisième colonne :* 1.3×10^{-15} s^{-1}.

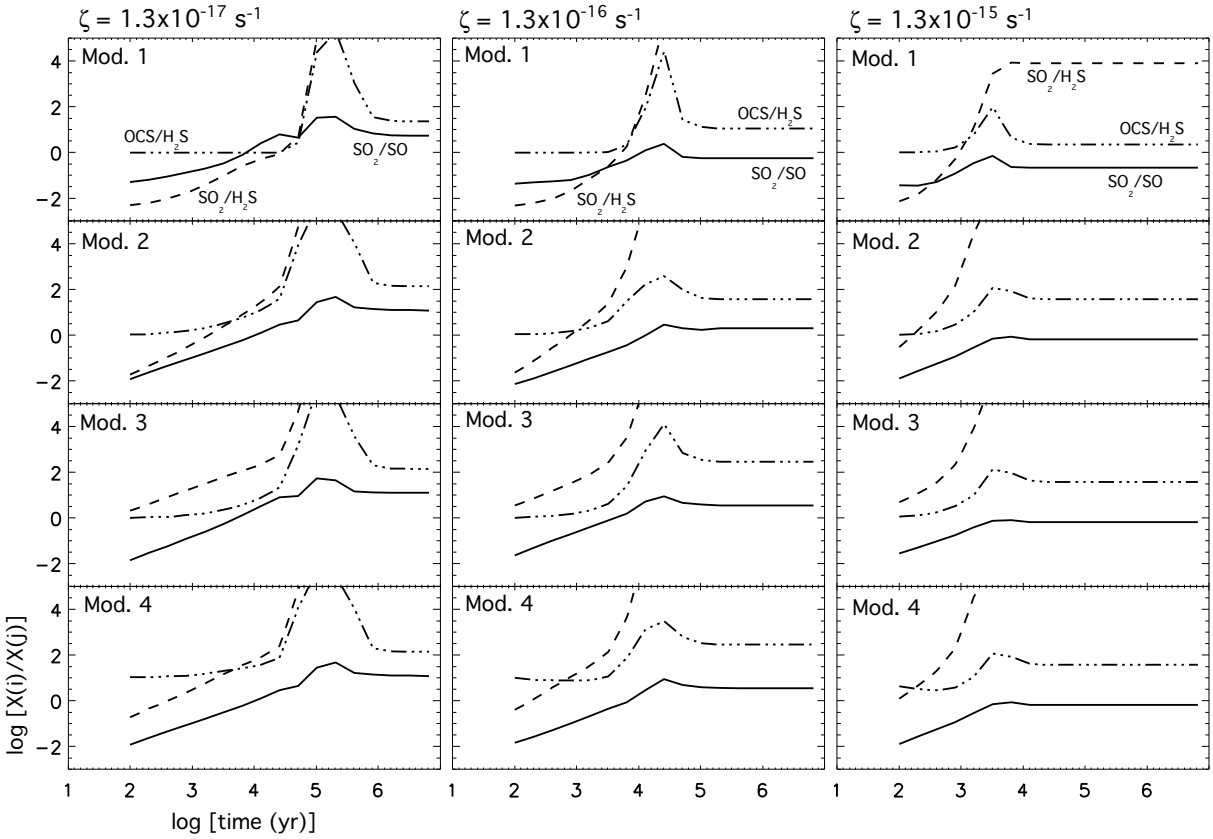

Fig. 55: *Rapports d'abondance SO_2/SO, SO_2/H_2S et OCS/H_2S en fonction du temps pour une température de 100 K, pour une densité de 10^7 cm^{-3} et pour les 4 compositions de grains (ligne 1 à 4 : Modèle 1 à 4). Les trois colonnes représentent les abondances calculées avec un taux d'ionisation par le rayonnement cosmique différent. Première colonne :* 1.3×10^{-17} s^{-1} *(taux de référence), deuxième colonne :* 1.3×10^{-16} s^{-1} *et troisième colonne :* 1.3×10^{-15} s^{-1}.

3.5.4 Influence du taux de rayonnement cosmique

Influence du taux d'ionisation sur les abondances absolues et les rapports d'abondance

Afin de tester l'influence du taux d'ionisation par le rayonnement cosmique, j'ai comparé les résultats obtenus avec NAHOON pour trois taux d'ionisation par le rayonnement cosmique différents : 1.3×10^{-17} (taux de référence), 1.3×10^{-16} et 1.3×10^{-15} s^{-1}. Les figures 54 et 55 montrent les abondances absolues et les rapports d'abondance des principales molécules soufrées en fonction du temps pour les trois taux d'ionisation et les 4 compositions de grains (Modèles 1 à 4). La température et la densité du gaz sont fixées à 100 K et 10^7 cm^{-3}.

Le taux de rayonnement cosmique a pour effet d'accélérer la destruction de H_2S et surtout de OCS en augmentant l'efficacité des réactions suivantes : OCS + hν^* → S + CO (127, hν^* étant un photon secondaire induit par le rayonnement cosmique), OCS + hν^* → OCS^+ + e^- (128), H_2S + hν^* → S + H_2 (119) et H_2S + hν^* → H_2S^+ + e^- (120). Par exemple, avec le taux d'ionisation de référence (1.3×10^{-17} s^{-1}) et le modèle 2, l'abondance de H_2S commence à décroître à partir de 2×10^4 ans et celle de OCS à partir de 2×10^5 ans. Pour un taux d'ionisation 100 fois plus grand, les abondances de H_2S et OCS commencent à diminuer autour de 300 ans. Le deuxième effet visible du rayonnement cosmique est la diminution de l'abondance de SO_2 à l'équilibre à cause de la réaction SO_2 + hν^* → SO + O (129) qui détruit SO_2 et forme du SO. Donc pour une densité de 10^7 cm^{-3} à 10^5 ans, l'abondance de SO_2 est plus grande d'environ un ordre de grandeur que celle de SO pour ζ de référence tandis que les abondances de SO et SO_2 sont les mêmes si le taux de rayonnement cosmique est 1.3×10^{-15} s^{-1}. Pour le modèle 1, l'abondance de SO_2 devient même plus petite que celle de SO à partir de 10^4 ans : x(SO)=2×10^{-7} et x(SO_2)=4×10^{-8}. Pour les modèles 2, 3 et 4, SO et SO_2 atteignent leur abondance maximale plus rapidement : autour de 10^3 ans avec $\zeta = 1.3 \times 10^{-15}$ s^{-1} au lieu de 10^5 ans pour $\zeta = 1.3 \times 10^{-17}$ s^{-1}. L'abondance de CS est plus importante lorsque le taux de rayonnement cosmique est plus grand que la valeur de référence. Dans le cas des taux d'ionisation élevés, CS est directement formé par la recombinaison de l'ion OCS^+ (formé par l'attaque de OCS par le rayonnement cosmique) avec un électron : OCS^+ + e^- → CS + O (823).

Ainsi, l'augmentation du taux d'ionisation par le rayonnement cosmique a tendance à accélérer la destruction de H_2S et OCS tout en accélérant la formation de SO et SO_2. Cela a également tendance à augmenter l'abondance finale de SO et CS et de diminuer celle de SO_2.

Le taux de rayonnement cosmique influence l'évolution des rapports d'abondance SO_2/SO, SO_2/H_2S et OCS/H_2S (voir figure 55). La dépendance du rapport SO_2/SO avec le temps devient

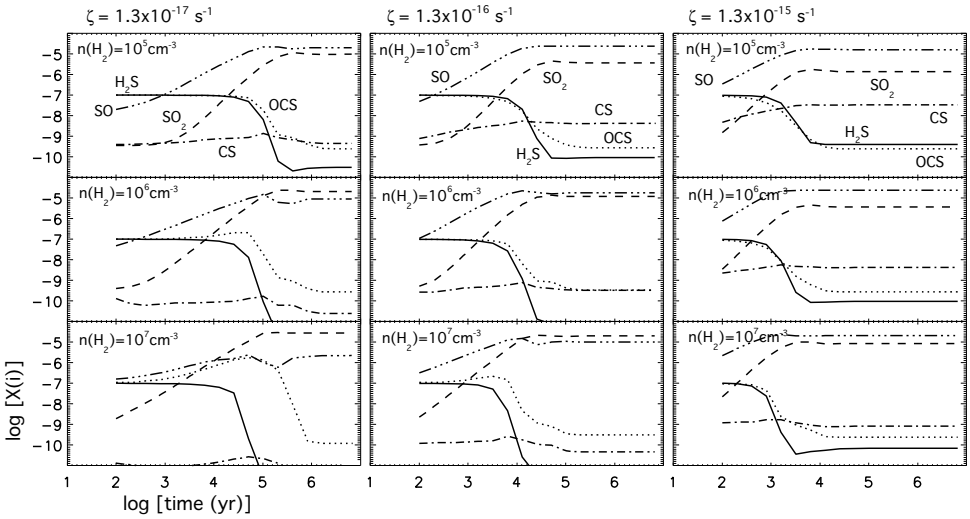

Fig. 56: *Abondances absolues (/H_2) des molécules SO, SO_2, OCS, H_2S et CS en fonction du temps pour une température de 100 K et le modèle 2. Les trois lignes représentent les abondances pour trois densités de H_2 (10^5, 10^6 et 10^7 cm^{-3}) et les trois colonnes correspondent à trois valeurs du taux d'ionisation par le rayonnement cosmique :* 1.3×10^{-17} s^{-1} *(taux de référence),* 1.3×10^{-16} s^{-1} *et* 1.3×10^{-15} s^{-1}.

encore plus faible pour des taux importants. Le rapport OCS/H_2S varie également peu avec le temps, ne subissant qu'une augmentation temporaire entre 10^3 et 10^4 ans, en passant de 0 à 100 pour $\zeta = 1.3 \times 10^{-15}$ s^{-1}. La courbe représentant le rapport SO_2/H_2S se déplace vers la gauche des graphiques, c'est-à-dire que le rapport augmente plus rapidement dû au fait que la production de SO_2 et la destruction de H_2S sont alors plus efficaces.

Le taux d'ionisation a une forte influence sur les abondances absolues des molécules soufrées de même que sur leurs rapports d'abondance.

Influence du taux d'ionisation suivant la densité de H_2

L'influence du taux d'ionisation par le rayonnement cosmique dépend de la densité. Les figures 56 et 57 montrent les abondances absolues et les rapports d'abondance des molécules soufrées en fonction du temps pour les trois taux d'ionisation (1.3×10^{-17}, 1.3×10^{-16} et 1.3×10^{-15} s^{-1}) et trois densités de H_2 (10^5, 10^6 et 10^7 cm^{-3}). Les autres paramètres sont : 100 K et modèle 2.

L'accélération de la destruction de OCS et H_2S est plus importante à forte densité. En revanche, l'abondance de SO_2 à l'équilibre est plus basse à faible densité : l'abondance de SO_2 maximale est de 10^{-5} à 10^7 cm^{-3} tandis qu'elle est de 10^{-6} à 10^5 cm^{-3} mais ceci est plus probablement un simple effet de la densité que du rayonnement cosmique proprement dit (voir

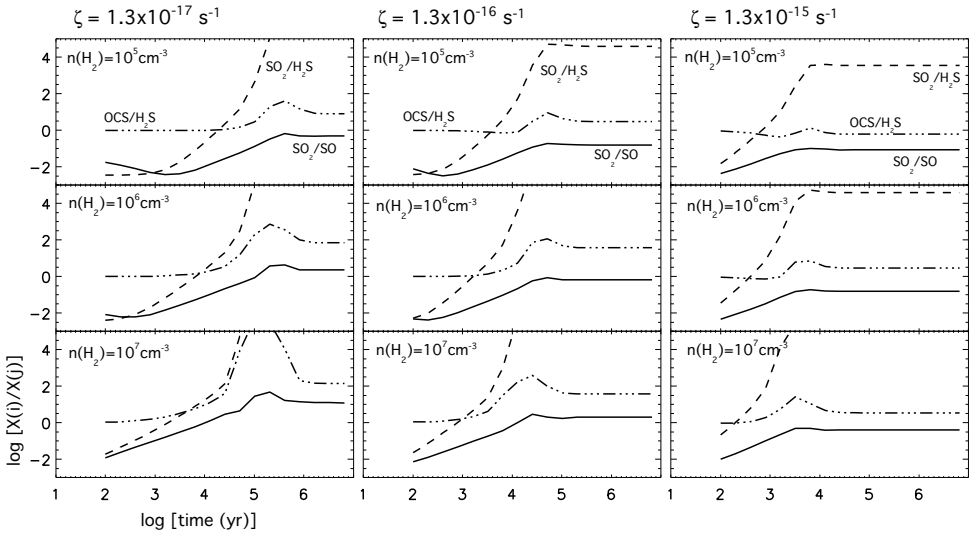

FIG. 57: *Rapports d'abondance SO_2/SO, SO_2/H_2S et OCS/H_2S en fonction du temps pour une température de 100 K et le modèle 2. Les trois lignes représentent les rapports pour trois densités de H_2 (10^5, 10^6 et 10^7 cm^{-3}) et les trois colonnes correspondent à trois valeurs du taux d'ionisation par le rayonnement cosmique :* 1.3×10^{-17} s^{-1} *(taux de référence),* 1.3×10^{-16} s^{-1} *et* 1.3×10^{-15} s^{-1}.

figure 56). CS est plus abondant à plus faible densité, mais ceci est également vrai avec le taux d'ionisation de référence. Au niveau des rapports d'abondance (figure 57), SO_2/SO et OCS/H_2S sont identiques pour toutes les densités considérées si $\zeta = 1.3 \times 10^{-15}$ s^{-1}.

Influence du taux d'ionisation suivant la température

La figure 58 montre les mêmes abondances que la figure 56 mais pour une température de 300 K. La destruction de H_2S est encore plus rapide pour 300 K à de fortes densités avec un taux d'ionisation élevé : l'abondance de H_2S a déjà diminué jusqu'à 3×10^{-8} à 300 ans et 10^7 cm^{-3} tandis qu'elle est encore de 10^{-7} avec le taux d'ionisation de référence. A faible densité en revanche, la température ne change pas l'influence du taux d'ionisation sur H_2S.

Avec un taux d'ionisation de référence, les modèles 2 à 4 et une température de 300 K, l'abondance de H_2S commence à augmenter autour de 10^6 ans (voir section 3.5.3). Ce résultat est légèrement différent avec un taux d'ionisation 100 fois plus grand. A 10^5 cm^{-3}, l'abondance de H_2S ne décroît pas en dessous de 2×10^{-10} et reste constante après 10^4 ans alors qu'avec le taux de référence, elle diminue jusqu'à 10^{-11} avant d'augmenter jusqu'à 2×10^{-10} à 10^7 ans (voir la figure 53). Par conséquent, à basse densité de H_2, un fort taux d'ionisation accélère la destruction de H_2S mais l'abondance minimale de H_2S est plus grande que celle obtenue avec un taux d'ionisation de référence. Un fort taux d'ionisation résulte en une abondance plus élevée de

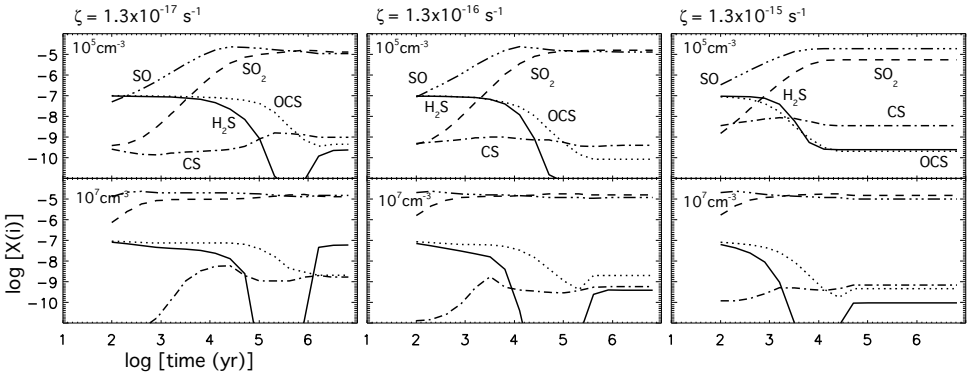

Fig. 58: *Abondances absolues (/H_2) des molécules SO, SO_2, OCS, H_2S et CS en fonction du temps pour une température de 300 K et le modèle 2. Les deux lignes représentent les abondances pour deux densités de H_2 (10^5 première ligne et 10^7 cm^{-3} deuxième ligne) et les trois colonnes correspondent à trois valeurs du taux d'ionisation par le rayonnement cosmique :* 1.3×10^{-17} s^{-1} *(taux de référence),* 1.3×10^{-16} s^{-1} *et* 1.3×10^{-15} s^{-1}.

l'abondance de S^+ ($\sim 10^{-7}$ avec $\zeta = 1.3 \times 10^{-15}$ s^{-1} au lieu de $\sim 10^{-9}$ avec $\zeta = 1.3 \times 10^{-17}$ s^{-1}) et donc en une formation de H_2S plus efficace ($H_2 + S^+ \rightarrow H_2S^+ + h\nu$, $S + H_2S^+ \rightarrow H_2S + S^+$).

A plus forte densité de H_2 et pour $\zeta = 1.3 \times 10^{-15}$ s^{-1}, l'abondance de H_2S décroît jusqu'à 5×10^{-13} à 10^4 ans pour remonter ensuite à 10^{-10} ce qui est trois ordres de grandeur inférieure à l'abondance obtenue avec ζ de référence. Dans le cas du fort taux d'ionisation, H_2S n'est plus produit par la réaction HS + HS comme avec le taux de référence mais par le même processus qu'à basse densité (voir section 3.5.3). Cependant, la raison de la plus faible abondance de H_2S pour des âges supérieurs à 10^6 ans réside dans sa destruction par l'ion H_3O^+ dont l'abondance est 10^{-8} avec $\zeta = 1.3 \times 10^{-15}$ s^{-1} au lieu de 10^{-10} avec $\zeta = 1.3 \times 10^{-17}$ s^{-1}.

La destruction de OCS n'est pas affectée par la température, donnant une abondance identique à 100 et 300 K.

A 100 K, la formation de CS était favorisée par l'augmentation du taux de rayonnement cosmique quelque soit la densité. A plus haute température, l'effet est moindre et seulement notable à basse densité (augmentation d'un facteur 20 à 10^4 ans et 300 K au lieu d'un facteur 40 à 100 K). A forte densité, l'effet est inverse et CS est détruit par l'action de l'oxygène atomique ($O + CS \rightarrow CO + S$) formé dans le gaz chaud par la dissociation de H_3O^+ puis sa recombination avec un électron (réaction 788).

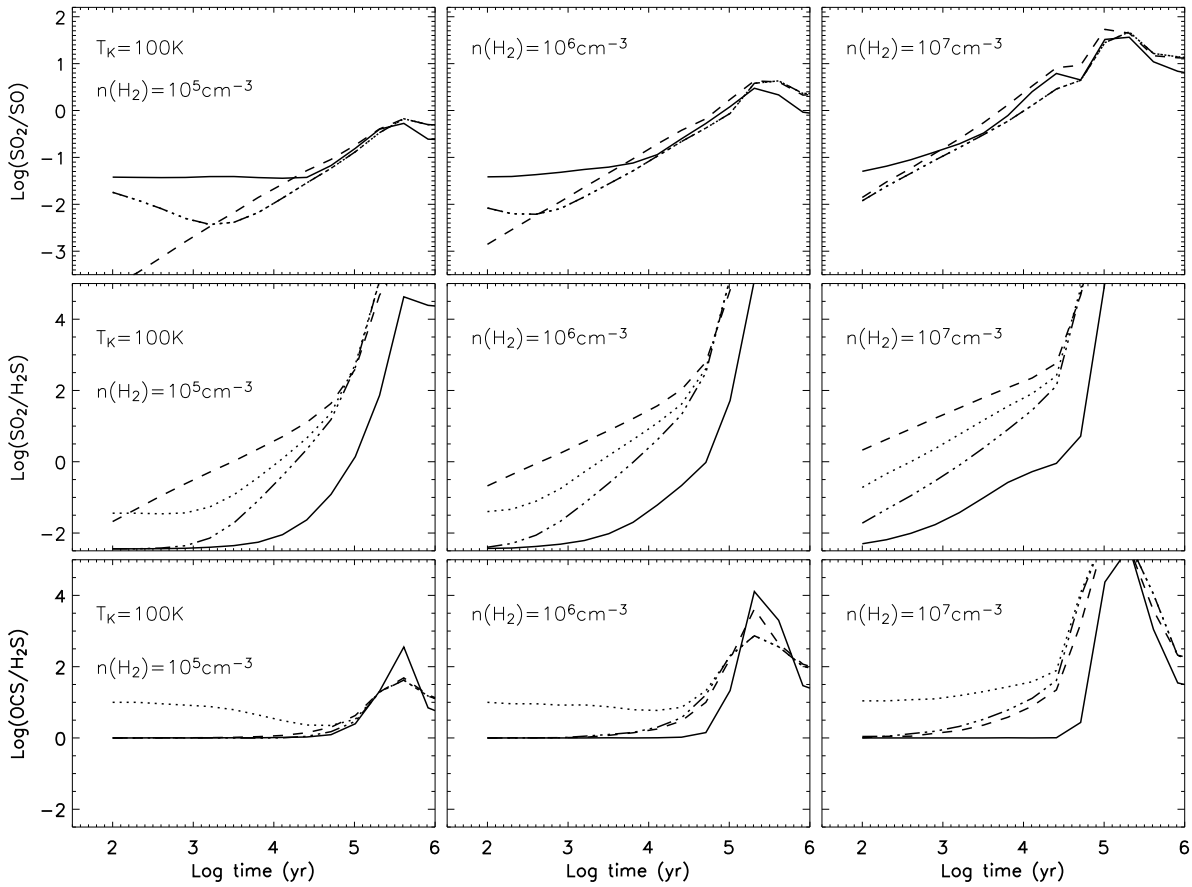

FIG. 59: *Rapports d'abondance SO_2/SO (graphique du haut), SO_2/H_2S (graphique du milieu) et OCS/H_2S (graphique du bas) en fonction du temps pour la composition en phase gazeuse pré-évaporation A et les quatre compositions des manteaux des grains (modèle 1 : ligne continue, modèle 2 : "trait-point", modèle 3 : tirets et modèle 4 : pointillés). La température est de 100 K et la densité vaut* 10^5 *(gauche),* 10^6 *(milieu) et* 10^7 cm^{-3} *(droite).*

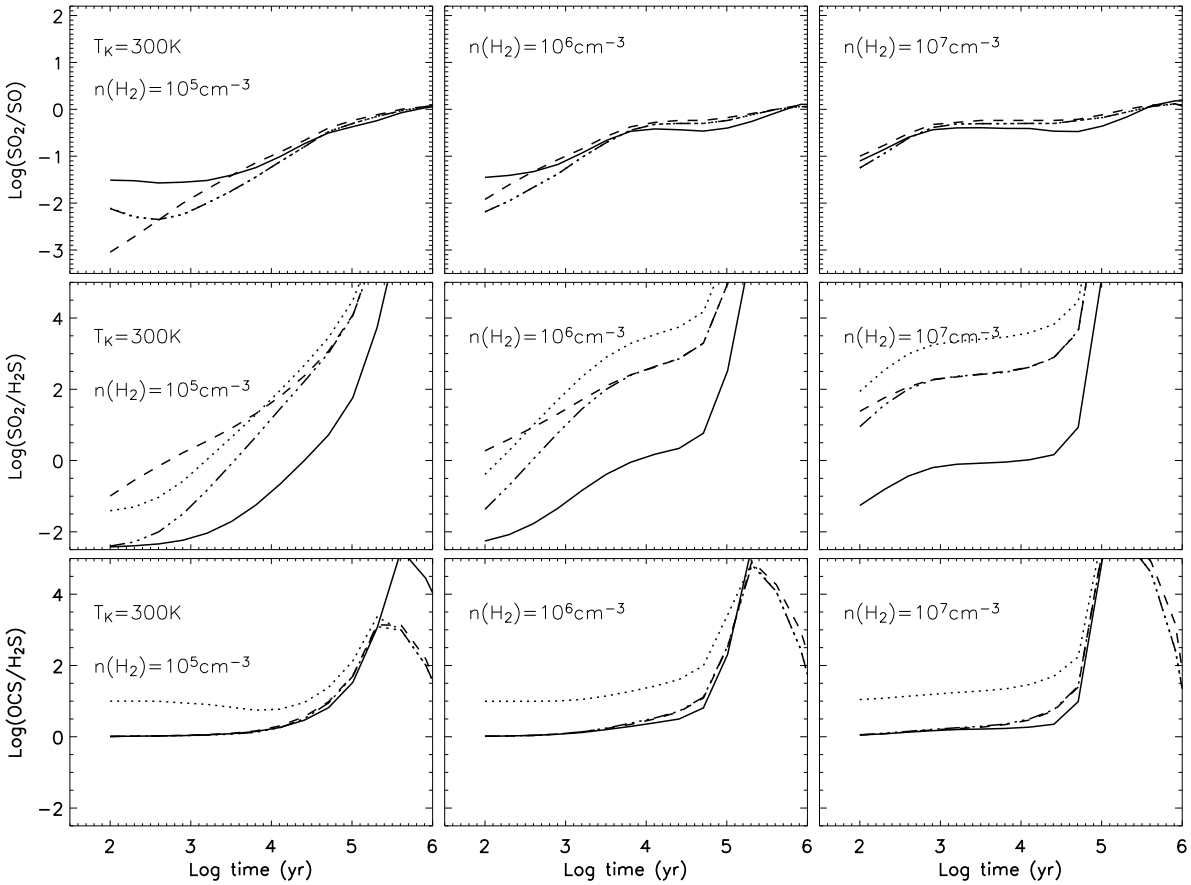

Fig. 60: *Rapports d'abondance SO_2/SO (graphique du haut), SO_2/H_2S (graphique du milieu) et OCS/H_2S (graphique du bas) en fonction du temps pour la composition en phase gazeuse pré-évaporation A et les quatre compositions des manteaux des grains (modèle 1 : ligne continue, modèle 2 : "trait-point", modèle 3 : tirets et modèle 4 : pointillés). La température est de 300 K et la densité vaut* 10^5 *(gauche),* 10^6 *(milieu) et* 10^7 cm^{-3}*(droite).*

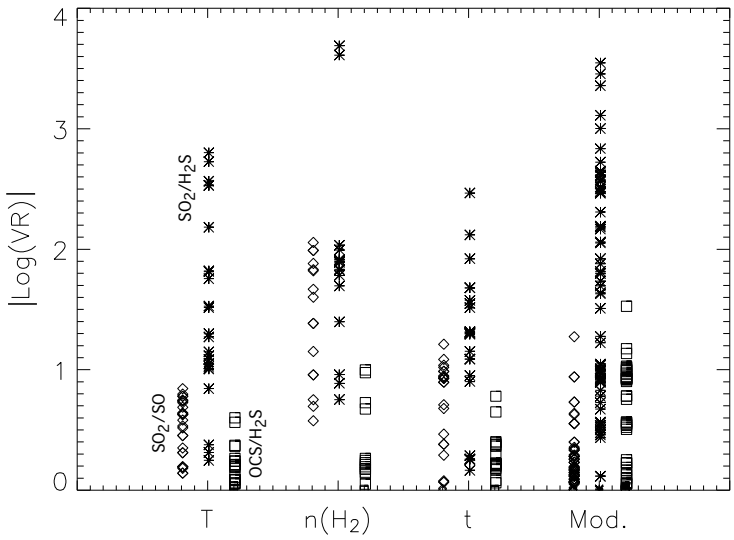

FIG. 61: *Valeur absolue du logarithme de la variation relative (VR) de chaque rapport d'abondance en fonction de chaque paramètre : la température (T), la densité ($n(H_2)$), le temps (t) et la composition du grain (Mod.) que l'on fait varier dans un intervalle donné (voir le texte). Les trois différents symboles représentent les rapports : les losanges SO_2/SO, les étoiles SO_2/H_2S et les carrés OCS/H_2S.*

3.5.5 Sensibilité des rapports d'abondance aux différents paramètres

Les figures 59 et 60 montrent l'évolution des rapports d'abondance SO_2/SO, SO_2/H_2S et OCS/H_2S en fonction du temps pour la composition initiale gazeuse A, les 4 compositions de grains (Modèles 1 à 4), deux températures (100 K et 300 K) et trois densités de H_2 (10^5, 10^6 et 10^7 cm^{-3}) différentes. Un des résultats importants de ce travail est que les rapports d'abondance des molécules soufrées dépendent plus des conditions physiques du gaz et de la composition des grains que du temps. Or de nombreux auteurs ont utilisé des données moyennes de conditions physiques ainsi qu'une composition de molécules soufrées sur les grains erronée pour dater des objets observés à partir d'abondances de molécules soufrées (Charnley, 1997; Hatchell et al., 1998; Buckle et Fuller, 2003).

Mon travail démontre que l'utilisation des molécules soufrées comme horloge chimique n'est possible qu'à condition de contraindre tous les autres paramètres (température, densité de H_2 et composition des grains). Sur la figure 61, j'ai reporté la variation relative (VR : facteur d'augmentation ou de diminution des rapports) pour les trois rapports d'abondance SO_2/SO, SO_2/H_2S et OCS/H_2S. Cette variation est obtenue en changeant un des paramètres (le temps, la température, la densité ou la composition des grains) dans l'intervalle suivant : le temps entre 10^3 et 10^4 ans, la température entre 100 et 300 K, la densité entre 10^5 et 10^7 cm^{-3} et le modèle de 1 à 4. La variation relative est déterminée pour chaque

Tab. 25: *Variation relative maximale (VRM) de chaque rapport d'abondance en fonction de chaque paramètre (le temps, la température, la densité de H_2 et la composition du grain) que l'on fait varier dans un intervalle donné (à partir de la figure61). Dans la quatrième colonne, j'ai reporté l'ensemble des autres paramètres qui permettent d'obtenir la variation maximale.*

Rapport	Paramètre variable	VRM	Ensemble de parametres
SO_2/SO	Temps	16	100 K, 10^7 cm^{-3}, Mod. 3
	Température	6	10^4 yr, 10^5 cm^{-3}, Mod. 4
	Densité	125	10^4 yr, 100 K, Mod. 3
	Modèle	20	10^3 yr, 100 K, 10^5 cm^{-3}
SO_2/H_2S	Temps	330	300 K, 10^5 cm^{-3}, Mod. 2
	Température	630	10^3 yr, 10^7 cm^{-3}, Mod. 4
	Densité	5000	10^3 yr, 300 K, Mod. 4
	Modèle	3150	10^4 yr, 300 K, 10^7 cm^{-3}
OCS/H_2S	Temps	6	100 K, 10^7 cm^{-3}, Mod. 2
	Température	3	10^4 yr, 10^7 cm^{-3}, Mod. 2
	Densité	10	10^4 yr, 100 K, Mod. 2
	Modèle	30	10^4 yr, 100 K, 10^7 cm^{-3}

paramètre en faisant varier ce paramètre dans l'intervalle considéré tout en gardant les autres paramètres fixes. Par exemple, la variation maximale du rapport SO_2/SO produite par une augmentation du temps d'intégration de 10^3 à 10^4 ans est d'un facteur 16, obtenu pour une température de 100 K, une densité de 10^7 cm^{-3} et le modèle 3.

Des figures 59, 60 et 61 et le tableau25, il apparait que le rapport SO_2/H_2S est celui qui montre les plus grandes variations avec le temps, mais malheureusement, également avec les conditions physiques et les manteaux des grains. Ce rapport est même plus sensible à ces deux derniers paramètres qu'au temps pour $t \leq 3 \times 10^4$ ans. Le rapport OCS/H_2S est moins sensible à la différence de composition des manteaux et aux conditions physiques pour $t \leq 10^5$ ans mais dans ce cas il n'est pas du tout sensible au temps, tandis que pour $t \geq 10^5$ ans, il est extrêmement sensible aux conditions physiques. Le rapport SO_2/SO varie significativement sous l'effet des compositions des manteaux, de la densité et de la température à des temps relativement courts ($\leq 10^4$ ans). Ces variations masquent complètement la dépendance en temps qui est de toute façon modérée à 100 K sauf pour les fortes densités et faible à 300 K.

En conclusions, aucun des rapports d'abondance des principales molécules soufrées ne présente une variation avec le temps à toutes les températures et densités sans être également très dépendant de ces conditions physiques ou de la composition initiale des molécules soufrées sur les grains.

3.5.6 Comparaisons avec des observations

Les papiers les plus récents sur la chimie du soufre dans les cœurs chauds sont Charnley (1997) et Hatchell et al. (1998) et sur la chimie générale des cœurs chauds sont Doty et al. (2002); Rodgers et Charnley (2003) et Nomura et Millar (2004). Pour une comparaison entre les résultats obtenus par NAHOON et ceux obtenus par ces divers auteurs, je vous renvoie à la discussion dans Wakelam et al. (2004a, voir aussi l'annexe A).

J'ai comparé les résultats de mon modèle avec les observations de molécules soufrées dans deux cœurs chauds : le cœur chaud massif d'Orion-KL et le cœur chaud de faible masse d'IRAS16293 (présenté à la section 1.1).

Comparaison avec Orion-KL

Orion-KL est une région relativement complexe où plusieurs phénomènes énergétiques sont présents. La déconvolution des profils de raies obtenues avec des télescopes à antenne simple a permis l'identification de trois composantes dans une région de seulement 20-30″ de diamètre : "the compact ridge" constitué de gaz chaud au repos, "the hot core" et "the plateau" formé par du gaz éjecté de la protoétoile à très grande vitesse (voir Genzel et Stutzki, 1989). Des observations interférométriques à haute résolution angulaire de plusieurs molécules comme OCS, SO et SO_2 ont montré que l'émission des molécules provenait de différentes régions (e.g. Wright et al., 1996). L'émission de OCS est confinée dans une région de $\sim 5''$ proche du cœur chaud tandis que celle de SO et SO_2 est plus étendue ($\sim 10''$). Plambeck et al. (1982) ont conclu que les deux molécules SO et SO_2 traçaient une région de gaz étendue en forme de tore, ce qui a été confirmé par les cartes à haute résolution angulaire de Wright et al. (1996). Il est évident que d'attribuer toute l'émission des molécules soufrées au cœur chaud est une grossière approximation. Cependant en l'absence d'une meilleure compréhension de la région, nous allons supposer que c'est le cas et comparer les abondances observées avec celles obtenues par NAHOON.

Pour limiter le nombre de paramètres, je vais utiliser les rapports d'abondance et la valeur de référence du taux d'ionisation par le rayonnement cosmique. Les densités de colonne, estimées par Schilke et al. (2001) et Sutton et al. (1995), sont de l'ordre de 2.3×10^{17}, 6×10^{16}, 1.2×10^{16} et 9×10^{15} cm^{-2} pour SO, SO_2, H_2S et OCS. Toutes ces densités de colonne sont moyennées sur un beam de $\sim 10''$. Pour simplifier, je suppose que l'émission de toutes ces molécules provient du cœur chaud dont la température serait de 200 K et la densité de H_2 de 10^7 cm^{-3} (Wright et al., 1992). J'ai simulé l'évolution chimique pour ces conditions physiques, à partir des différentes compositions de grains présentées à la section 3.5.1.

Aucun des quatres modèles du tableau 22 (voir figure 62) ne permet de reproduire les rapports d'abondance des molécules soufrées observés dans Orion-KL. **Cependant, les rapports**

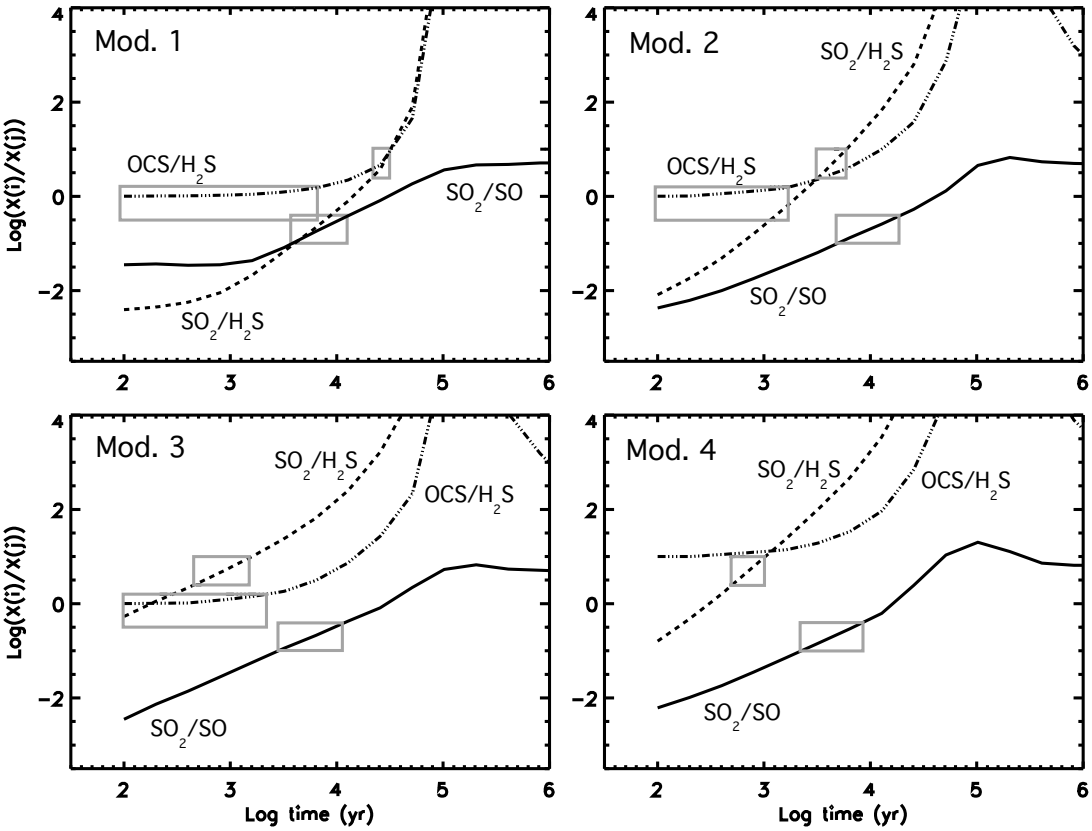

Fig. 62: *Comparaisons entre les rapports d'abondance SO_2/SO, SO_2/H_2S et OCS/H_2S observés dans Orion-KL et les prédictions théoriques des 4 modèles présentés à la section 3.5.1; calculés tous les 4 avec la composition A (voir section 3.4.2) pour une température du gaz de 200 K et une densité de H_2 de 10^7 cm^{-3}. Sur les graphiques, les rectangles gris vides représentent l'intervalle des rapports d'abondance théoriques qui sont en accord avec ceux observés pour un intervalle de temps, en prenant en compte les incertitudes sur les observations. Lorsqu'il n'y a pas de rectangle, cela signifie que les observations ne sont pas en accord avec les prédictions quelque soit le temps considéré sur le graphique.*

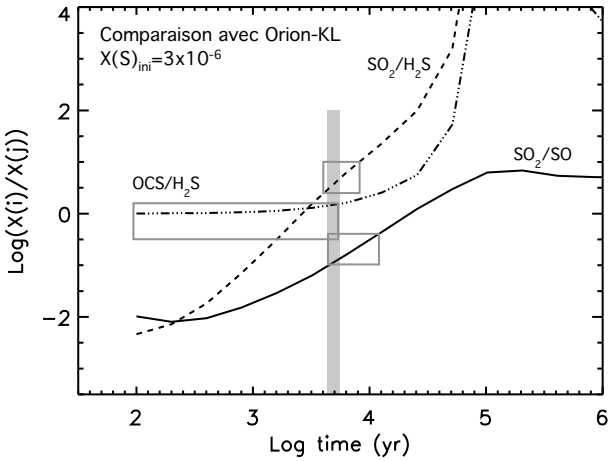

FIG. 63: *Comparaisons entre les rapports d'abondance SO_2/SO, SO_2/H_2S et OCS/H_2S observés dans Orion-KL et les prédictions théoriques obtenues avec le modèle de manteau 2 modifié (Mod. 2') pour lequel l'abondance initiale de soufre atomique est 3×10^{-6} au lieu de 3×10^{-5}. Les rectangles gris vides représentent l'intervalle des rapports d'abondance théoriques qui sont en accord avec ceux observés pour un intervalle de temps, en prenant en compte les incertitudes sur les observations. Le rectangle gris plein donne l'intervalle de temps pour lequel les trois rapports observés sont en accord avec les prédictions du modèle.*

observés peuvent être reproduits par un Modèle 2 modifié (Mod. 2', figure 63) où l'abondance initiale de soufre atomique injecté dans la phase gazeuse est diminuée d'un facteur 10 (3×10^{-6} au lieu de 3×10^{-5}), conduisant à une abondance totale de soufre intermédiaire entre le modèle 1 et les modèles 2,3 et 4. Dans ce cas, il y a un bon accord entre les observations et les prédictions théoriques pour un âge de 4×10^3 ans (voir figure 63).

L'émission de SO et SO_2 dans le cœur chaud d'Orion-KL est deux fois plus grande que celle de OCS (Wright et al., 1996). Si l'on suppose que l'émission de H_2S (molécule qui n'a pas été observée à haute résolution angulaire) provient d'une région aussi étendue que SO et SO_2, le rapport d'abondance OCS/H_2S est sous estimé d'un facteur 2. En utilisant OCS/H_2S deux fois plus grand, les trois rapports d'abondance deviennent compatibles avec le Modèle 2 pour un âge de 5×10^3 ans.

En supposant que la région de cœur chaud s'étend sur à peu près $10''$ et que la densité de colonne de H_2 est de 8×10^{23} cm^{-2} (Sutton et al., 1995), les abondances observées de SO, SO_2, H_2S et OCS sont reproduites par le modèle à un facteur 10 près que l'on prenne les Modèles 2 ou 2'. En revanche, l'abondance de CS (10^{-9}, Schilke et al., 2001) est sous-estimée de trois ordres de grandeur par le modèle, probablement parce que l'émission de CS ne provient pas du cœur chaud mais du plateau comme l'ont suggéré Schilke et al. (2001). Etant donné la complexité de

la région d'Orion-KL, il faudrait une meilleure analyse de la densité de colonne de H_2 associée aux régions dont les molécules soufrées proviennent pour faire une comparaison plus poussée des abondances.

Comparaison avec IRAS16293

Dans le cas de la protoétoile de faible masse IRAS16293, des observations multifréquence de H_2S, OCS, SO et SO_2 ont été faites et analysées à l'aide de modèles sophistiqués qui prennent en compte la structure en température et en densité de la source ainsi que le profil de l'abondance de chaque molécule (Schöier et al., 2002; Wakelam et al., 2004b, voir aussi section 1.1). Les rapports trouvés dans le cœur chaud d'IRAS16293 sont : SO_2/SO=0.3, SO_2/H_2S=1 et OCS/H_2S=1.9. La modélisation des profils de température et de densité d'IRAS16293 par Ceccarelli et al. (2000a), suggère une densité de 10^7 cm^{-3} et une température de 100 K dans la région centrale de la protoétoile.

La figure 64 montre la comparaison entre les rapports d'abondance observés et modélisés (en supposant la composition pré-évaporation A) par les 4 modèles présentés à la section 3.5.1 et la température et la densité trouvées dans IRAS16293. Seul le modèle 2 est capable de reproduire tous les rapports observés pour un même âge qui est de $\sim 2 \times 10^3$ ans. Pour vérifier la robustesse de ce résultat, j'ai également considéré des compositions de grains intermédiaires entre les modèles 2 et 3 où les proportions de soufre atomique et moléculaire sont les suivantes : (1) 1/2 et 1/2, (2) 3/4 et 1/4 et (3) 1/4 et 3/4 (voir figure 65). Dans tous ces cas intermédiaires, la forme des courbes est très similaire à celles trouvées avec le modèle 3. **Ainsi donc, la présence de soufre moléculaire détermine la forme des courbes et est incompatible avec les observations.** Si l'on fait la comparaison avec le modèle 2' utilisé pour Orion-KL, on trouve un bon accord avec les observations pour un âge autour de 4×10^3 ans, qui est très similaire à l'âge déduit du modèle 2 (voir figure 66).

Enfin, les deux modèles (2 et 2') prédisent des abondances absolues (par rapport à H_2) en accord avec les abondances observées à un facteur 5-10 près (voir tableau 26 et la figure 67). Il faut noter ici que les abondances prédites par les deux modèles sont très similaires pour des temps inférieurs à 10^4 ans. Il n'est pas possible de faire la comparaison avec l'abondance de CS parce que celle-ci n'a pas été estimée dans le cœur chaud d'IRAS16293 (Schöier et al., 2002).

Cette comparaison semble indiquer que la majorité du soufre est relachée dans la phase gazeuse sous la forme atomique ou sous une forme rapidement convertie en S (en $t \leq 10^3$ ans). Le désaccord obtenu avec le modèle 4 impose une abondance de H_2S supérieure ou égale à 10^{-7}.

L'âge qui est déduit ici du cœur chaud d'IRAS16293 est inférieur aux estimations précédentes

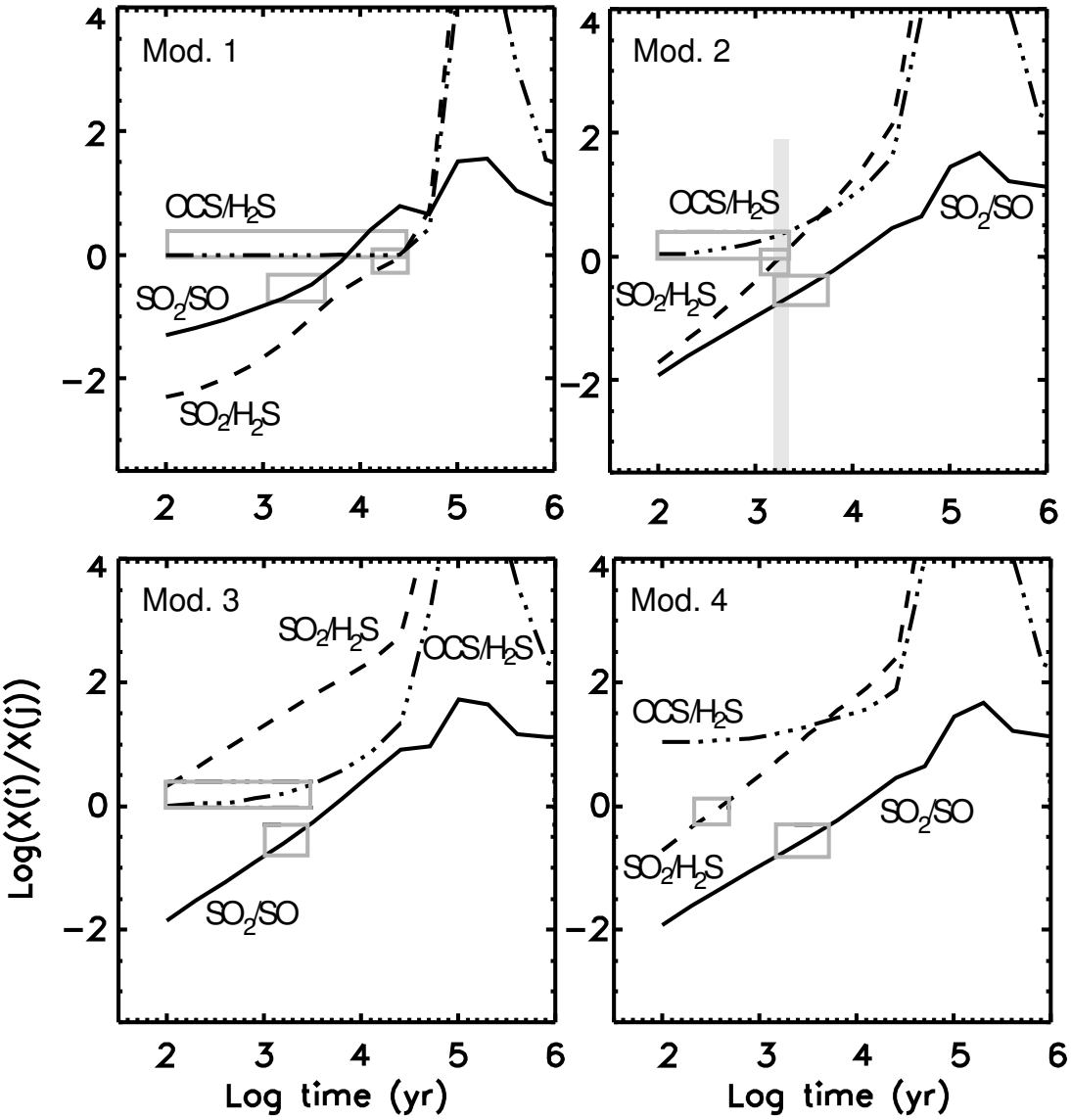

FIG. 64: *Comparaisons entre les rapports d'abondances SO_2/SO, SO_2/H_2S et OCS/H_2S observés dans IRAS16293 et les prédictions théoriques des 4 modèles présentés à la section 3.5.1; calculés tous les 4 avec la composition A (voir section 3.4.2) pour une température du gaz de 100 K et une densité de H_2 de 10^7 cm^{-3}. Sur les graphiques, les rectangles gris vides représentent l'intervalle des rapports d'abondance théoriques qui sont en accord avec ceux observés pour un intervalle de temps, en prenant en compte les incertitudes sur les observations. Lorsqu'il n'y a pas de rectangle, les observations ne sont pas en accord avec les prédictions, quelque soit le temps considéré sur le graphique. Le rectangle gris plein représente l'intervalle de temps pour lequel les trois rapports observés sont en accord avec les prédictions du modèle.*

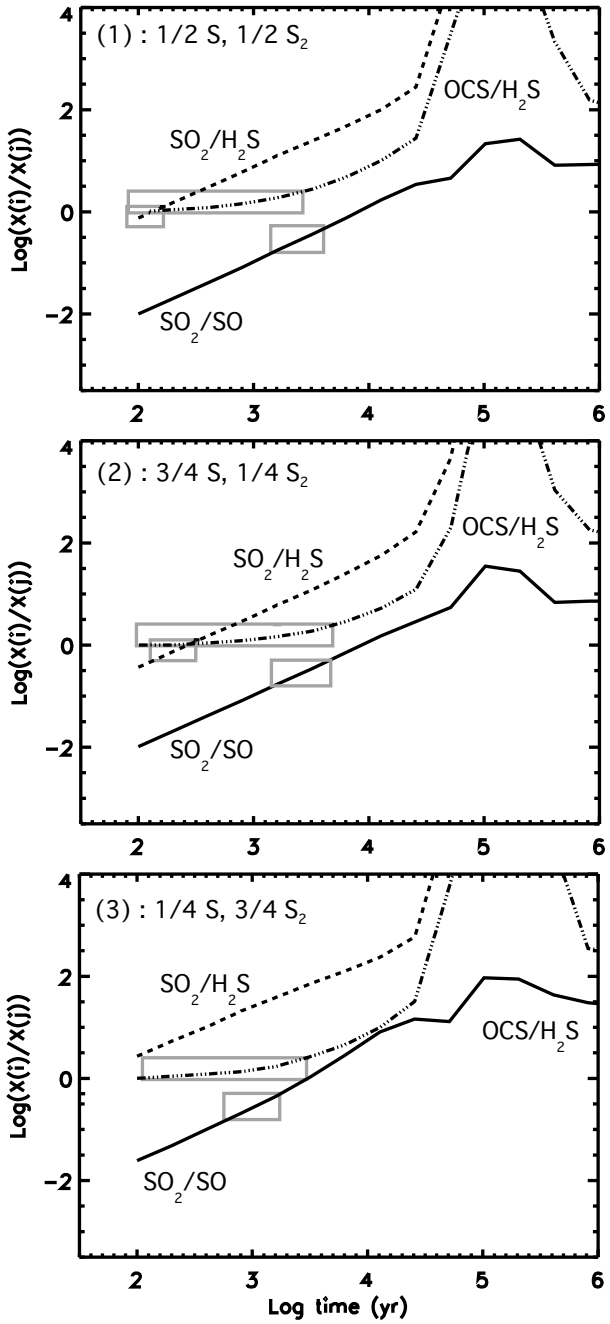

Fig. 65: *Même figure que 64 pour les 3 modèles intermédiaires entre Mod. 2 et 3 décrit à la section 3.5.6. Ces trois modèles ont des abondances initiales (par rapport à H_2) de soufre atomique et moléculaires qui sont les suivantes : (1) 1/2 (1.5×10^{-5}) et 1/2 (0.75×10^{-5}), (2) 3/4 (2.25×10^{-5}) et 1/4 0.375×10^{-5}) et (3) 1/4 (0.75×10^{-5}) et 3/4 (1.125×10^{-5}).*

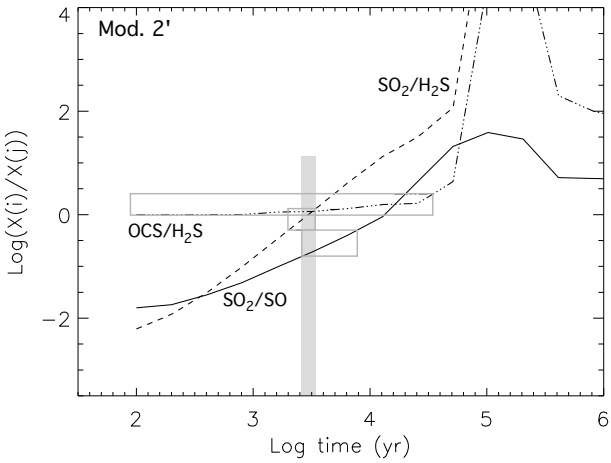

FIG. 66: *Comparaison entre les rapports d'abondances SO_2/SO, SO_2/H_2S et OCS/H_2S observés dans IRAS16293 et les prédictions théoriques du modèle 2'.*

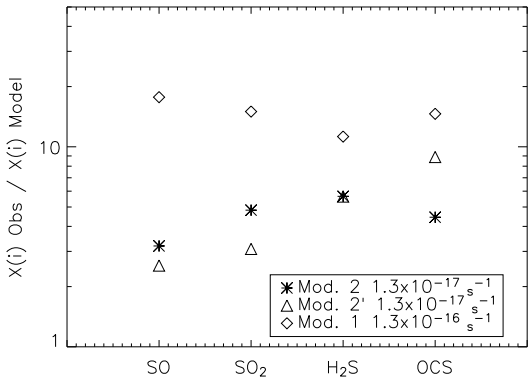

FIG. 67: *Rapports entre les abondances de SO, SO_2, H_2S et OCS observées dans le cœur chaud d'IRAS16293 et calculées par NAHOON avec les modèles 2 et 2' (taux d'ionisation de référence, voir tableau 26) et avec le modèle 1 pour lequel $\zeta = 1.3 \times 10^{-16}\ s^{-1}$.*

TAB. 26: *Abondances (/H_2) de SO, SO_2, H_2S, OCS et CS observées et modélisées dans le cœur chaud d'IRAS16293.*

Espèces	Observées	Modèle 2	Modèle 2'
SO	1.7×10^{-6}	5×10^{-7}	7×10^{-7}
SO_2	5.4×10^{-7}	10^{-7}	2×10^{-7}
H_2S	5.3×10^{-7}	10^{-7}	10^{-7}
OCS	1×10^{-6}	2×10^{-7}	10^{-7}
CS	-	1×10^{-11}	5×10^{-12}

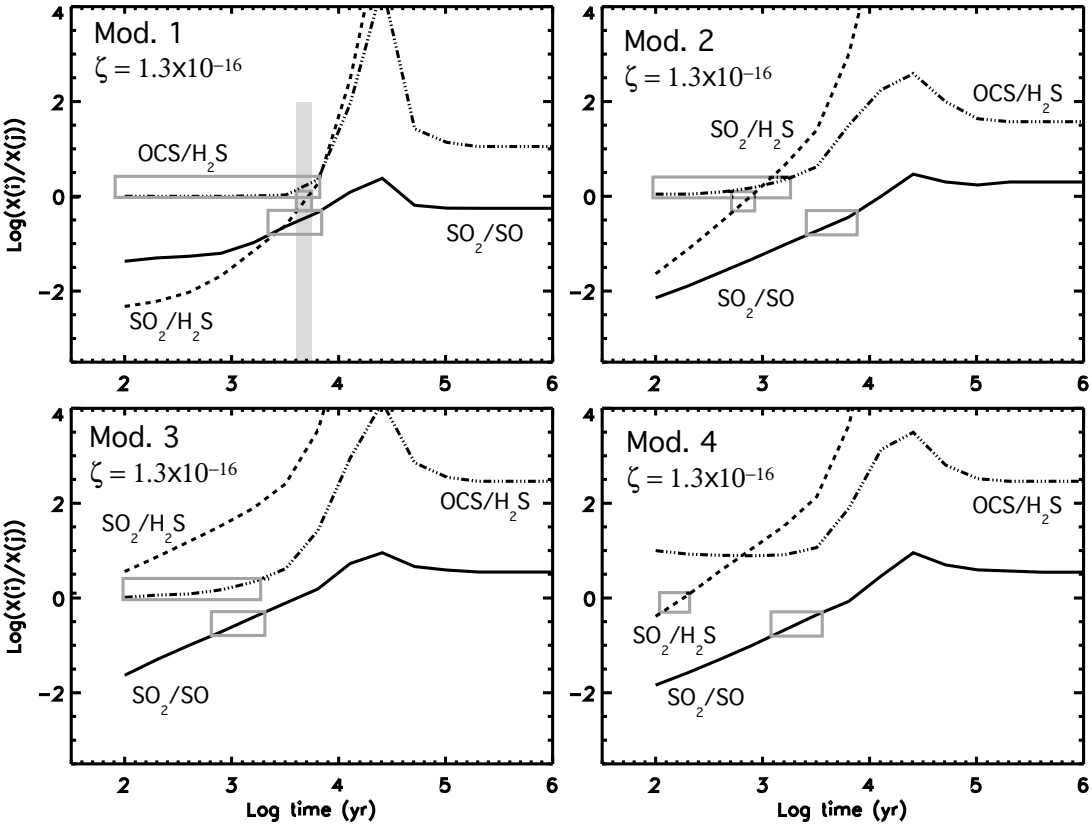

Fig. 68: *Même figure que 64 mais les rapports théoriques des 4 modèles ont été calculés avec un taux d'ionisation par rayonnement cosmique de* 1.3×10^{-16} s^{-1}.

($\sim 10^4$ ans) (Ceccarelli et al., 2000b; Maret et al., 2002; Wakelam et al., 2004b). Cependant, l'âge déduit par cette méthode représente le temps écoulé depuis l'évaporation des molécules de la surface des grains. Il faut ajouter à cet âge le temps dynamique nécessaire à la protoétoile pour atteindre la luminosité permettant de former le cœur chaud qui est observé, c'est-à-dire $\sim 3 \times 10^4$ ans sachant que le temps 0 de cette échelle dynamique est le début de l'effondrement.

La comparaison avec les observations faite jusqu'à présent est basée sur des modèles utilisant la valeur de référence du taux d'ionisation par le rayonnement cosmique (1.3×10^{-17} s^{-1}). Si j'utilise un taux d'ionisation 10 fois plus grand comme suggéré par Doty et al. (2004) pour cette région, les observations dans IRAS16293 ne sont plus en accord avec le modèle 2 mais avec le modèle 1 qui donne alors un âge très similaire (figure 68). En fait, l'augmentation du taux d'ionisation accélère la destruction de H_2S, augmentant alors le rapport SO_2/H_2S plus rapidement sans affecter significativement les autres rapports. Par conséquent, les courbes de SO_2/H_2S sur la figure 64 sont décalées vers la droite de la figure diminuant l'accord entre les observations et le modèle 2 et augmentant celui avec le modèle 1. Dans ce cas, l'âge déduit pour IRAS16293 est 5×10^3 ans et les abondances absolues prédites sont entre 15 et 20 fois inférieures à celles observées (voir figure 67). Donc un taux d'ionisation 10 fois plus grand que la valeur de référence n'est plus compatible avec l'hypothèse que le soufre est évaporé de la surface des grains sous la forme atomique. En fait, le fort taux d'ionisation proposé par Doty et al. (2004) a été déterminé de façon indirecte par une modélisation chimique de plusieurs molécules prenant en compte la structure de l'enveloppe et l'évolution temporelle. Ce modèle, très complexe, requiert de nombreux paramètres difficiles à contraindre, alors que la composition initiale de soufre sur les grains y reste "classique" (évaporation de soufre sous la forme de H_2S uniquement). J'ai pu démontrer dans ma thèse que cette composition mantellique des grains a un très grand impact sur la chimie post-évaporation et que, dans ces conditions, modifier le taux d'ionisation pour reproduire les abondances observées n'est pas justifié. De plus, les abondances obtenues avec un taux d'ionisation plus grand que la valeur de référence s'accordent moins bien avec les observations. Pour être sûr d'avoir un taux d'ionisation aussi important, il faudrait faire une mesure directe du rapport DCO^+/HCO^+ (voir par exemple Caselli et al., 1998).

Conclusions et perspectives

Au cours de ma thèse, je me suis intéressée à la chimie du soufre dans les cœurs chauds de protoétoiles de faible masse et dans les chocs produits par la matière éjectée dans les flots bipolaires. A partir d'observations radio des principales molécules soufrées dans divers régions et à l'aide d'une analyse à l'ETL dans un premier temps puis hors-ETL (modèle LVG pour les chocs et modèle de transfert radiatif couplé à un code dynamique d'effondrement pour les enveloppes protostellaires), j'ai calculé les densités de colonne des molécules dans différents types de régions : le nuage, les chocs et le cœur chaud. Dans les chocs, j'ai comparé les densités de colonne des molécules soufrées avec celles d'autres molécules généralement associées aux chocs comme SiO et H_2CO. Pour interpréter les densités de colonne observées dans les chocs et les cœurs chauds, j'ai élaboré un modèle d'évolution chimique décrit dans le troisième chapitre. Grâce à ce modèle, j'ai pu faire une étude détaillée de la chimie du soufre en fonction des conditions physiques du gaz, du taux d'ionisation par le rayonnement cosmique, du temps et de la forme et abondance de soufre évaporé des grains. Enfin pour des sources dont la température et la densité sont connues, j'ai contraint l'âge du cœur chaud et la composition des grains (en terme de molécules soufrées) en comparant les abondances observées avec celles prédites par le modèle. De plus, pour comprendre la chimie, j'ai mis au point une méthode originale permettant de déterminer les réactions clés d'un réseau chimique pour n'importe quel composé du gaz. Grâce à ces deux approches complémentaires, les observations correctement traitées et la modélisation, j'ai pu apporter un certain nombre de nouveaux éléments concernant la chimie du soufre et la physico-chimie des protoétoiles de classe 0.

Conclusions sur les chocs :

- Dans la région d'IRAS16293-2422/L1689N, SiO est la molécule qui montre les plus grandes variations en abondance dans les régions de choc contrairement aux molécules soufrées qui ne montrent que des variations modérées. Paradoxalement, la région la plus intense en SiO (E2) n'est pas détectée en SO_2, H_2S et H_2CO et seulement marginalement détectée en SO. Ceci pourrait indiquer un stade très évolué de ce choc ($\geq 3 \times 10^4$ ans). Dans les

autres régions plus faibles en SiO, SO_2 est plus produit que SO, ce qui est en accord avec les prédictions théoriques des modèles. Dans les mêmes régions, le rapport d'abondance SO_2/H_2CO est de l'ordre de l'unité. Nous avons conclu que ceci pouvait être expliqué par des chocs relativement jeunes ($\sim 10^4$ yr), où SO_2 s'est déjà formé tandis que H_2CO n'a pas encore été détruit. Ainsi en mettant ensemble les rapports d'abondance observés entre les espèces SO, SO_2, H_2CO et SiO, nous avons proposé un schéma dans lequel les différents rapports moléculaires correspondent à différents âges de choc.

- Dans la deuxième région observée IRAS2/NGC1333, l'émission de SO et SO_2 est très forte dans les chocs et faible sur la source présentant ainsi une situation opposée à celle d'IRAS16293-2422/L1689N. L'étude des conditions d'excitation de ces deux molécules et la comparaison des rapports d'abondance SO_2/SO et CS/SO avec les prédictions du modèle chimique ont permis de donner quelques contraintes sur les conditions physiques du gaz. Premièrement, SO et SO_2 ne semblent pas être associés aux même conditions d'excitation : SO_2 est émis par un gaz plus dense et/ou plus froid que SO. Les rapports d'abondance SO_2/SO sont très peu sensibles à des variations de la température et/ou de la densité du gaz tandis que CS/SO permet de contraindre les conditions physiques. Ensuite, la densité du gaz choqué est différente dans les deux parties du flot : elle est plus grande dans le lobe Est que dans le lobe Ouest tandis que la température semble similaire. Les rapports d'abondance observés impliquent que la quantité de soufre atomique évaporée des grains est inférieure à 6×10^{-7}. Enfin, l'âge chimique du flot est inférieur à 10^3 ans mais la précision des rapports ne permet pas différentier les "clumps".

Conclusions sur les cœurs chauds :

- L'abondance des molécules SO, SO_2 et H_2S augmente significativement (respectivement 200, 1300 et 1700) dans les régions internes du cœur chaud d'IRAS16293-2422. Ce cœur chaud semble être plus riche en SO, SO_2 et H_2CO que celui d'Orion-KL, probablement à cause d'une différence de composition des manteaux glacés des grains présents dans ces deux sources. En comparant l'abondance totale de molécules soufrées dans la phase gazeuse (SO+SO_2+H_2S) par rapport à celle de SiO dans le cœur chaud d'IRAS16293-2422, un déficit en silicium a été trouvé dans le gaz chaud (d'un facteur ~ 600 par rapport à l'abondance cosmique de Si), supportant l'hypothèse que le silicium est déplété dans le cœur réfractaire des grains tandis que le soufre serait déplété dans les manteaux volatils. En revanche, le soufre est lui même en déficit dans le gaz chaud d'IRAS16293-2422, par rapport à son abondance cosmique, indiquant qu'une partie du soufre réside dans la phase gazeuse sous une forme non observée ou non observable comme le soufre atomique.

- Grâce au modèle de transfert radiatif hors-ETL couplé au code dynamique d'effondrement, j'ai pu démontré qu'aux abondances typiques de SO et SO_2 dans les enveloppes protostellaires, les opacités dans les raies de SO et SO_2 sont trop faibles pour offrir une sensibilité à la structure en vitesse et en densité de l'enveloppe. Il est donc très difficile voire impossible de déterminer la masse M_* et le taux d'accrétion de masse $\dot{M}$ des objets à l'aide d'observations de l'émission de SO et SO_2. En revanche, si ces paramètres physiques sont connus par d'autres méthodes (modélisation de l'émission d'autres molécules plus adéquates ou de celle de la poussière), les flux de certaines transitions de SO et SO_2 peuvent être utilisées pour contraindre les abondances internes et externes de ces deux molécules dans les enveloppe en effondrement de protoétoiles de faible masse. J'ai sélectionné six transitions pour chacune des deux molécules qui peuvent être observées par les télescopes au sol (IRAM et JCMT) et couvrent l'ensemble des conditions physiques internes et externes des protoétoiles.
- Pour calculer l'abondance de SO_2 dans le cœur chaud d'une protoétoile en utilisant le modèle de transfert radiatif hors-ETL, un problème se pose parce que seuls les coefficients de collision (avec He) des 50 premiers niveaux de la molécule sont connus or les transitions correspondantes ne couvrent que les énergies jusqu'à 80 cm^{-1}. Le problème a été contourné en supposant le milieu à l'équilibre thermodynamique mais la comparaison avec les observations montre qu'il serait nécessaire de connaître les coefficients de collision des 200 premiers niveaux si l'on veut mieux reproduire les observations de SO_2.

Conclusions sur la chimie du soufre :

- Aucun des rapports d'abondance impliquant les quatre principales molécules soufrées (H_2S, OCS, SO et SO_2) ne peut être **facilement** utilisé pour estimer l'âge des protoétoiles. En effet, ces rapports dépendent au moins autant des conditions physiques et de la composition des manteaux des grains que du temps. De plus, l'abondance d'oxygène atomique dans le gaz, si elle n'est pas correctement prise en compte, peut sérieusement affecter la chimie. La situation n'est cependant pas sans solution. Une comparaison minutieuse entre des observations et les prédictions du modèle peut donner des indices utiles à la fois sur les échelles de temps et sur la composition des grains. Ce type d'analyse doit être fait au cas par cas parce que les conditions physiques des sources aussi bien que la composition des manteaux peuvent varier d'un objet à l'autre. Dans la pratique, les abondances moléculaires doivent être calculées de façon précise en tenant compte de la structure physique de la source. Les prédictions du modèle, auxquelles les abondances vont être comparées, doivent être faites à la bonne température et densité de la source.

- Le modèle chimique a été appliqué au cas des deux cœurs chauds les plus connus : Orion KL et IRAS16293-2422. Dans les deux cas, le meilleur accord est obtenu avec un modèle dans lequel la majorité du soufre s'évapore de la surface des grains sous la forme atomique et avec une abondance initiale de S égale à l'abondance cosmique (3×10^{-5}) et/ou 10 fois plus petite.
- La principale prédiction des modèles riches en soufre atomique est la présence de grandes abondances de SO_2, provenant du soufre atomique, à des stades plus évolués des cœurs chauds.
- L'âge du cœur chaud d'Orion-KL est alors estimé à $\sim 4 \times 10^3$ ans tandis que celui d'IRAS16293-2422 est estimé à $\sim 2 \times 10^3$ ans. Cet âge correspondant au temps entre l'évaporation des manteaux dans la phase gazeuse et la période où l'observation est faite est très petit devant l'âge dynamique de formation de la protoétoile qui est de l'ordre de 10^4 ans. Par conséquent, la chimie du soufre donne une information temporelle sur une des étapes de la formation d'une étoile de faible masse.

Perspectives

Mon travail de thèse est loin d'avoir résolu le problème du soufre dans la chimie interstellaire mais a permis de donner quelques pistes qui doivent continuer à être explorées. Un certain nombre de travaux sont déjà en route surtout sur le plan des observations.

Etude d'autres protoétoiles :

Le modèle de la chimie dans les cœurs chauds n'a pu être testé que sur une source parce qu'il n'existe pas suffisament d'observations de molécules soufrées dans les gammes de longueur d'onde adéquates sur d'autres protoétoiles. Aussi, nous avons commencé une campagne d'observations des principales molécules soufrées (SO, SO_2, H_2S, OCS et CS) dans un premier temps à l'IRAM sur une dizaine de protoétoiles dont les paramètres physiques sont connus. Nous avions obtenu une quarantaine d'heures d'observations dont la moitié a été perdue à cause du mauvais temps. Les données ne sont malheureusement pas complètes et du temps supplémentaire devra être demandé. Une demande vient également d'être soumise au JCMT pour pouvoir faire des observations à plus haute énergie. Les premiers résultats à l'IRAM sont encourageants et montrent que des différences réelles existent entre les différentes sources. L'étude qui sera faite des molécules soufrées dans ces sources permettra peut être de trouver l'origine de ces différences :

une différence d'âge, de manteaux des grains etc. Cette campagne d'observations devrait être associée à une complexification du modèle chimique consistant à le combiner au modèle de transfert radiatif et de dynamique décrit au chapitre 2. Les réactions chimiques à la surface des grains devront également être incluses dans le modèle chimique. Ce projet devrait se faire en collaboration avec Serena Viti du "University College London" selon l'orientation de mon projet post-doctoral.

Observations de nouvelles espèces soufrées :

Le travail que j'ai mené au cours de ma thèse m'a permis d'émettre une nouvelle hypothèse qui découle du travail de modélisation de la chimie dans les cœurs chauds présenté au chapitre 3 et de la comparaison avec les observations. Il est possible que le soufre s'évapore de la surface des grains sous la forme atomique ou sous une forme rapidement détruite pour former S. C'est ce scénario qui donne le meilleur accord entre les observations et le modèle. Concrètement, le soufre pourrait être sous la forme d'atomes dispersés sur le grain, piégés dans une matrice ou sous la forme d'agglomérats de soufre. Ces agglomérats peuvent être constitutés de soufre amorphe ou critallin. Le soufre cristallin peut être sous deux formes, rhombique et monoclinique, qui correspondent toutes les deux à des molécules cycliques de S_8. L'évaporation de ces aggrégats produirait un mélange de polymères de soufre allant du soufre atomique à S_8. Un travail expérimental de Meierhenrich et al. (en préparation) sur la composition des manteaux de comètes et de grains interstellaires, et plus particulièrement sur les composés produits par l'évaporation de ces manteaux, donne à mon avis des résultats intéressants dans cette perspective. Les échantillons sont préparés en formant un manteau glacé à base de H_2O, CH_3OH, NH_3, CO, CO_2 et H_2S puis ils soumettent ce manteau à un champ de rayonnement UV. L'échantillon est ensuite réchauffé et analysé. Ils ont trouvé qu'une grande partie du soufre se retrouvait sous la forme de polymères de soufre de S_6 à S_8. Ce protocole expérimental ne fait pas l'unanimité car les méthodes d'analyse de l'échantillon modifient très vraisemblablement la nature de l'échantillon. Cependant, cette expérience prouve la tendance non négligeable du soufre à se mettre sous une forme polymérisée. Pour apporter des preuves à cette hypothèse, il est possible de chercher à directement observer ce type de composé dans la phase gazeuse. Par exemple, une recherche de la signature du soufre atomique ou de son absence dans la base de données spectrales d'ISO devra être faite dans les régions de formation stellaire chaude comme les cœurs chauds massifs ou de faibles masses. Récemment, des spectres rotationnels de S_3 et S_4 ont été fait en laboratoire par McCarthy et al. (2004) ouvrant ainsi la possibilité de chercher ces espèces dans les cœurs chauds. Pour savoir s'il serait possible de les détecter dans l'environnement de protoétoiles de faible masse, j'ai inclus les polymère du soufre de S_8 à S_3 dans mon modèle chimique. En fait, leur chimie n'est pas connue. J'ai donc uniquement considéré les réactions de destruction par

l'oxygène atomique présent en grande quantité dans le gaz chaud : $S_8 + O \rightarrow S_7 + SO$, $S_7 + O \rightarrow S_6 + SO$ ... $S_3 + O \rightarrow S_2 + SO$. Pour les taux de réactions, j'ai choisi une valeur arbitraire de façon à ce que ces espèces soient détectables si l'on suppose que le réservoir du soufre est S_8. Il ne s'agit donc pas d'une réelle prédiction mais les résultats pourront être utilisés pour demander du temps d'observation sur les instruments adéquats. Enfin, une dernière piste concernant la partie réfractaire du soufre reste à être exploitée. Avec la découverte de la signature de la calcite (carbonate de calcium $CaCO_3$) dans l'environnement d'étoiles évoluées (Kemper et al., 2002) et d'une étoile en formation (Ceccarelli et al., 2002b), Franck Selsis (Centro de Astrobiologia, Madrid) et moi même avons eu l'idée de chercher des grains de sulphates dans ces régions. En effet, sur Terre, les carbonates (CO_3^{2-}) sont généralement associés aux sulfates (SO_4^{2-}). La calcite a été identifiée à partir des spectres de laboratoire dans l'infrarouge lointain car l'infrarouge proche est totalement dominé par la signature des silicates. Or il existe très peu de spectres de laboratoire dans cette gamme de longueur d'onde et aucun de sulfates. Nous avons donc entrepris, avec la collaboration de O. P. Ballesteros et M. F. Sampero du Centre d'Astrobiologie de Madrid, l'élaboration d'une base de données spectrale de minéraux dans l'infrarouge lointain. Avec cette base de données théorique, nous pourrons rechercher la signature de nouveaux composés minéraux dans les grains interstellaires. Cette base sera notamment très utile pour analyser les futures observations de l'instrument PACS (HERSCHEL).

Modélisation poussée de la chimie des chocs :

La modélisation détaillée de la chimie du soufre dans les régions de choc sera poursuivie par l'introduction d'un modèle de choc réaliste tenant compte de la physique du milieu. Nous avons en effet le projet avec Guillaume Pineau des Forêts et ses collaborateurs de refaire l'étude détaillée de la chimie du soufre dans les chocs qui avait été faite en 1993 (Pineau Des Forêts et al., 1993). En effet, depuis cette époque, le modèle physique a beaucoup évolué et les résultats sont à revoir.

Annexe A

Publications

A&A 413, 609–622 (2004)
DOI: 10.1051/0004-6361:20031572
© ESO 2003

Astronomy & Astrophysics

Sulphur-bearing species in the star forming region L1689N

V. Wakelam[1], A. Castets[1], C. Ceccarelli[1,2], B. Lefloch[2], E. Caux[3], and L. Pagani[4]

[1] Observatoire de Bordeaux, BP 89, 33270 Floirac, France
[2] Laboratoire d'Astrophysique, Observatoire de Grenoble, BP 53, 38041 Grenoble Cedex 9, France
[3] CESR CNRS-UPS, BP 4346, 31028, Toulouse Cedex 04, France
[4] LERMA & FRE 2460 du CNRS, Observatoire de Paris, 61 Av. de l'Observatoire, 75014 Paris, France

Received 10 June 2002 / Accepted 7 October 2003

Abstract. We report observations of the expected main S-bearing species (SO, SO_2 and H_2S) in the low-mass star forming region L1689N. We obtained large scale (~300″ × 200″) maps of several transitions from these molecules with the goal to study the sulphur chemistry, i.e. how the relative abundances change in the different physical conditions found in L1689N. We identified eight interesting regions, where we carried out a quantitative comparative study: the molecular cloud (as reference position), five shocked regions caused by the interaction of the molecular outflows with the cloud, and the two protostars IRAS 16293-2422 and 16293E. In the cloud we carefully computed the gas temperature and density by means of a non-LTE LVG code, while in other regions we used previous results. We hence derived the column density of SO, SO_2 and H_2S, together with SiO and H_2CO – which were observed previously – and their relevant abundance ratios. We find that SiO is the molecule that shows the largest abundance variations in the shocked regions, whereas S-bearing molecules show more moderate variations. Remarkably, the region of the brightest SiO emission in L1689N is undetected in SO_2, H_2S and H_2CO and only marginally detected in SO. In the other weaker SiO shocks, SO_2 is enhanced with respect to SO. We propose a schema in which the different molecular ratios correspond to different ages of the shocks. Finally, we find that SO, SO_2 and H_2S have significant abundance jumps in the inner hot core of IRAS 16293-2422 and discuss the implications of the measured abundances.

Key words. ISM: abundances – ISM: molecules – stars: formation – ISM: individual objects: L1689N – ISM: individual objects: IRAS 16293-2422

1. Introduction

Low mass star forming regions are composed by at least three main ingredients: the molecular cloud from which protostars are born, the protostars themselves, and the shocked regions at the interface between the cloud and the outflows emanating from the protostars. These three regions have very different physical conditions, where temperature, density and also chemical abundances greatly differ (e.g. van Dishoeck & Blake 1998). This paper focuses on the abundance changes occurring to the S-bearing molecules and the relevant sulphur chemistry. Depending on the physical condition of the gas, it is believed that different types of reactions play a role in the formation of sulphur-bearing molecules. In molecular clouds, ion-molecule reactions are the most important (Oppenheimer & Dalgarno 1974; Prasad & Huntress 1982; Millar & Herbst 1990), whereas in the warm gas of the hot cores and shocks, neutral–neutral reactions play the major role in forming sulphur species (Pineau Des Forêts et al. 1993; Charnley 1997; Hatchell et al. 1998; Keane et al. 2001). Specifically, in warm gas, the abundances of H_2S, SO and SO_2 are supposed to increase significantly. This is the reason why they are often used to trace shocks (Pineau Des Forêts et al. 1993; Chernin et al. 1994; Bachiller & Perez Gutierrez 1997). And because of the relatively fast evolution of their chemistry, on time scale of tens of thousand years, they are good candidates to be chemical clocks to study the evolution of outflows (Bachiller et al. 2001) and hot cores (Charnley 1997; Hatchell et al. 1998). Overall, it is widely accepted that in star forming regions the formation of S-bearing molecules is largely determined during the cold collapse phase, when atomic sulphur freezes out on grains and probably forms H_2S. When the protostar starts to heat its environment, H_2S evaporates and it reacts with hydrogen atoms to give sulphur atoms. S rapidly reacts with OH and O_2 to form SO, that in turn gives SO_2 by reacting with OH (e.g. Charnley 1997).

In this paper, we present large scale maps of several transitions of SO, SO_2 and H_2S in the molecular cloud L1689N, a molecular cloud located in the ρ Ophiuchi cloud complex at 120 pc from the Sun (Knude & Hog 1998). Based on atomic oxygen observations, Caux et al. (1999) found that the gas temperature in this cloud is (26 ± 0.5) K and the H_2 density

Send offprint requests to: V. Wakelam,
e-mail: wakelam@observ.u-bordeaux.fr

is larger than 3×10^4 cm^{-3}. L1689N harbors two young protostellar sources. The first one is IRAS 16293-2422 (hereinafter IRAS 16293), a Class 0 protostar (15 $L_\odot$) still in the accretion phase (Walker et al. 1986; Zhou 1995; Narayanan et al. 1998; Ceccarelli et al. 2000a). Like many other young protostars, IRAS 16293 is a binary system with a total mass around 1.1 $M_\odot$ (Looney et al. 2000), whose two sources are separated by 5″, namely a projected separation of 600 AU. The structure of the envelope surrounding IRAS 16293 has been reconstructed based on multifrequency H_2O, SiO, O and H_2CO line observations (Ceccarelli et al. 2000a,b). In the outer region ($r \geq 150$ AU), the envelope gas shows molecular abundances typical of cold molecular clouds. In the inner region ($r \leq 150$ AU, i.e. about 2″ in diameter) the abundances of H_2O, SiO and H_2CO jump to abundances typical of the hot cores around massive protostars. This structure has been recently confirmed by Schöier et al. (2002), who modeled the continuum and the line emission from several other molecules. The second protostar, 16293E, is a recently discovered low mass and very young Class 0 source situated South-East of IRAS 16293. It was detected first by Mizuno et al. (1990) as a strong NH_3 peak emission. Its protostellar nature is discussed in Castets et al. (2001, hereinafter CCLCL01).

The L1689N region is complex and has long been known to house multiple outflows (Fukui et al. 1986; Wootten & Loren 1987; Mizuno et al. 1990; Hirano et al. 2001). The recent work by CCLCL01 claims that the two protostars IRAS 16293 and 16293E drive three bipolar outflows. Two of them originate from each of the two components of IRAS 16293, while the third outflow probably emanates from 16293E (Fig. 1). In the present article we will adopt the scheme outlined in CCLCL01 (Fig. 1), but our main conclusions are substantially unaffected by the actual evolutionary stage (pre-stellar or protostellar) of 16293E, questioned in Lis et al. (2002). What is important in the following discussion is the presence in L1689N of at least one protostar, IRAS 16293, and six regions which shows an enhancement of SiO and/or H_2CO emission, and that are sites of shocked gas marked as E1, E2, HE1[1], HE2, W1 and W2 (Fig. 1). In particular, CCLCL01 found that the brightest site of SiO emission, E2, does not show up any H_2CO enhanced emission, whereas the brightest H_2CO emission site, E1, is also accompanied by strong SiO emission. HE2 and HE1 represent a third class, for only H_2CO emission is detected there and no SiO. The goal of the present work is to study how the abundances of S-bearing molecules change in all these sites, compared with the abundances in the IRAS 16293 protostar and in the cloud.

The article is organized as follows. The observations are presented in Sect. 2, the results are presented in Sect. 3, and the column density determinations are detailed in Sect. 4. In Sect. 5 we discuss the results, i.e. the observed changes of SO, SO_2 and H_2S abundances with respect to the previously measured SiO and H_2CO abundances and what this may teach us.

[1] This region is not considered farther in this work because too weak.

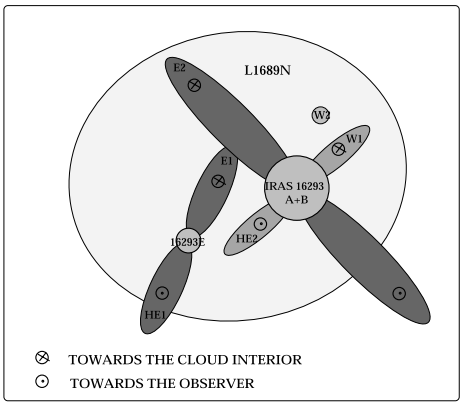

Fig. 1. Sketch of the region seen face on. The dark grey outflows have been clearly identified by CCLCL01. Light gray used for the outflow emanating from IRAS 16293 and the W2 source indicates that these are only assumptions.

2. Observations

Observations of large scale maps and specific positions inside the L1689N region were performed with the IRAM and SEST telescopes. We measured the emission of the following molecules: SO ($3_2 \rightarrow 2_1$ and $6_5 \rightarrow 5_4$ transitions), SO_2 ($5_{1,5} \rightarrow 4_{0,4}$ transition) and H_2S ($2_{2,0} \rightarrow 2_{1,1}$ and $1_{1,0} \rightarrow 1_{0,1}$ transitions). We also observed the ^{34}SO $3_2 \rightarrow 2_1$ line in a few positions in order to estimate the opacity of the main isotopic line. The coordinates ($\Delta\alpha, \Delta\delta$) of all maps shown here are offsets relative to the position of the 16293B component of the binary system IRAS 16293 at $\alpha(2000.0) = 16^h32^m22\overset{s}{.}6$, $\delta(2000.0) = -24^0 28' 33''$ (the 16293A component is located 4″ South and 2″ East from the B component – Looney et al. 2000).

In June 1997 we obtained a map covering 120″ × 100″ in the SO_2 molecular line with the IRAM-30m telescope. In November 2001, May and September 2002 we performed additional IRAM observations of the SO_2, ^{34}SO and H_2S $1_{1,0} \rightarrow 1_{0,1}$ lines at some specific positions in L1689N, namely the shocked regions E1, E2, W1, W2 and HE2 (see Fig. 1 and the Introduction), the two protostars IRAS 16293 and 16293E, and the molecular cloud (at the position $\Delta\alpha = 120''$, $\Delta\delta = 0''$). In the following we will refer to these eight positions as the "key" positions. The SEST telescope was used in July 1998 to map an area covering 300″ × 200″ in the SO molecular lines and to map a smaller area covering 120″ × 100″ in the H_2S molecular transition. Table 1 summarizes the different observed molecular transitions, together with their frequencies and upper level energies.

All data were obtained in the position switching mode with an OFF position located at $\Delta\alpha = -180''$, $\Delta\delta = 0''$ from the center of IRAS 16293. Using the frequency switching mode we checked that this position is free of any $C^{18}O$ and ^{13}CO emission. Even though our observations are not Nyquist sampled, we smoothed our data to the largest beamsize when necessary, which is accurate enough, except in the case of pathological

Table 1. Observed molecules together with the observing parameters. The critical densities (n_{cr}) are computed for temperatures between 50 and 100 K using the collisional coefficients quoted in Sect. 4. The area mapped ($\Delta\alpha \times \Delta\delta$) in each transition and the sampling of the map are reported in the last two lines. B_{eff} is the beam efficiency of the telescope. The symbol "–" implies that only observations towards the "key" positions have been obtained.

Transitions	SO $3_2 \rightarrow 2_1$	SO $6_5 \rightarrow 5_4$	^{34}SO $3_2 \rightarrow 2_1$	SO_2 $5_{1,5} \rightarrow 4_{0,4}$		H_2S $2_{2,0} \rightarrow 2_{1,1}$		H_2S $1_{1,0} \rightarrow 1_{0,1}$
ν (GHz)	99.299	219.949	97.715	135.696		216.710		168.762
E_{up}/k (K)	9	35	9	15.6		84		24
n_{cr} (cm^{-3})	10^5	10^6	10^5	2×10^6		10^6		2×10^6
Telescope	SEST	SEST	IRAM	IRAM	IRAM	SEST	IRAM	IRAM
T_{sys} (K)	160	250	140	400	270	220	600	700
Beam (″)	51	24	26	18	18	25	11	14.5
B_{eff}	0.75	0.5	0.75	0.59	0.71	0.5	0.57	0.65
$\Delta\nu$ (kHz)	86	86	40	39	39	86	42	42
$\Delta\alpha \times \Delta\delta$ (″ × ″)	280 × 190	288 × 216	–	120 × 100	–	120 × 100	–	–
sampling (″)	24	24	–	12	–	24	–	–

source morphologies. Both with the IRAM and SEST telescopes, pointing and focus was checked every 2 h, using planets, maser sources and strong extragalactic continuum sources. The pointing corrections were found to be always smaller than 3″ and 5″ with the IRAM and SEST telescopes respectively. Polynomial baselines of order 3 or less have been subtracted from the spectra. The observing parameters for both telescopes are listed in Table 1. In the following, all intensities will be given in main-beam brightness temperatures. Below we give some information which are specific to the IRAM-30m and SEST observations.

IRAM observations: the IRAM 30-m telescope is located at an altitude of 2920 m near the summit of Pico Veleta in Southern Spain. The ^{34}SO $3_2 \rightarrow 2_1$, SO_2 and H_2S molecular emissions were observed simultaneously with the 3, 2 and 1 mm SIS receivers respectively, available at the IRAM-30m. The SO_2 emission observed in June 1997 was observed simultaneously with other molecular transitions not presented here. The image sideband rejections of all receivers were always higher than 10 dB. Typical system temperatures were in the range $T_{sys} \sim 300-600$ K. The three receivers were connected to units of the autocorrelator, set to provide spectral resolutions of 40, 40, and 80 kHz at 98, 136, and 217 GHz respectively. At those frequencies, the velocity resolutions are of the order of 0.1−0.2 km s^{-1}.

SEST observations: the SEST telescope is a 15-m single dish millimeter telescope operated jointly by ESO and a consortium of Swedish institutions. It is located at an altitude of about 2450 m in La Silla (Chile). To obtain the SO and H_2S maps shown here, we used the dual 3/1.3 mm receiver. System temperatures were in the range $T_{sys} \sim 300-500$ K. This receiver was always connected to the high resolution acousto-optical spectrometer available at SEST, which provides 2048 channel of 43 kHz width giving a 86 kHz spectral resolution. At the frequencies considered here, that corresponds to a velocity resolution of 0.1−0.2 km s^{-1}, comparable to that of the IRAM data.

3. Results

Figure 2 shows the velocity-integrated intensity maps of the SO $3_2 \rightarrow 2_1$, SO $6_5 \rightarrow 5_4$ and SO_2 $5_{1,5} \rightarrow 4_{0,4}$ lines. The spectra (not smoothed) of the six transitions of Table 1 observed towards the "key" positions are displayed in Fig. 3, and the relevant line parameters are reported in Table 2. The SiO $2 \rightarrow 1$ observations, published by CCLCL01, have been added in Fig. 3 and in Table 2 for comparisons.

The main-beam brightness peak temperature T_{MB}, and the linewidth Δv (*FWHM*) of Table 2 were estimated from a Gaussian fit to the whole line profile, even in the case where profiles are double-peaked. We also estimated the width of the equivalent Gaussian with the same integrated and peak intensity as the observed line and found that the two methods differ by less than 30% with the exception of the SO $6_5 \rightarrow 5_4$ line in W1 which has an equivalent width of 2.5 km s^{-1} (versus 1.3 km s^{-1} in Table 2). On the contrary, the velocity-integrated intensity is the area integrated in the interval of velocities at the "zero-intensity" level. The velocity v_{LSR} is the velocity at the peak or at the absorption dip for double-peaked profiles. They are roughly the same for each observed transition and position, with the exception of E2(HVC), whose emission is red-shifted by ∼6 km s^{-1}.

The first remarkable result is that, against probably naive expectations, the shocked regions are not necessarily associated with evident enhancements of the emission of the observed SO, SO_2 and H_2S lines. For example, the E2 region, the brightest SiO 2−1 emission peak (see CCLCL01) is undetected in SO_2, and only marginally detected in the lowest SO transition.

The second result is that IRAS 16293 is the only site where *all* the molecular lines have been detected, including the high-energy transition H_2S $2_{2,0} \rightarrow 2_{1,1}$. Quite interestingly, we find that not only the line profiles are broader than in the cloud but their widths tend to increase with the upper energy level of the transition. We will discuss in the Sect. 5 the implication of this behavior.

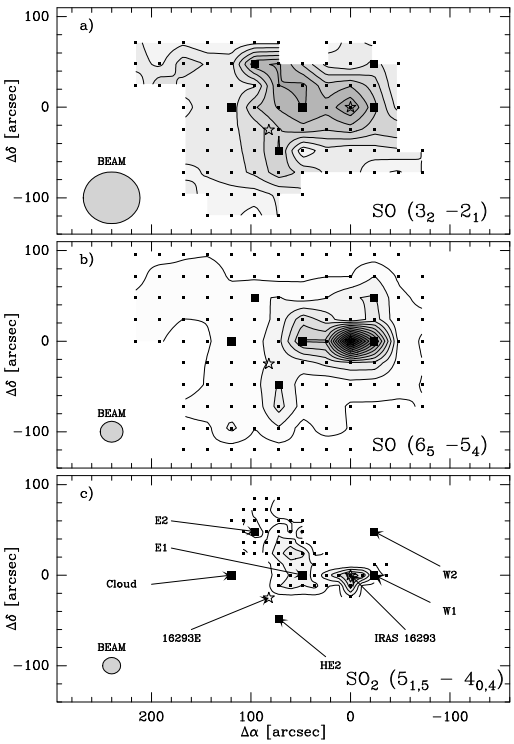

Fig. 2. Integrated intensity maps of SO $3_2 \rightarrow 2_1$ **a)**, SO $6_5 \rightarrow 5_4$ **b)** and SO_2 $5_{1,5} \rightarrow 4_{0,4}$ **c)**. **a)** and **b)**: first level is 0.5 K km s^{-1} with level step of 1.0 K km s^{-1}. **c)**: first level is 0.3 K km s^{-1} with level step of 1.0 K km s^{-1}. In each map, the black points represent the observed positions. The two stars symbols show the position of the two protostellar sources. The arrows point to the eight "key" positions, whose spectra are displayed in Fig. 3.

We now discuss in more detail the results toward the eight "key" positions.

3.1. SO emission

The SO $3_2 \rightarrow 2_1$ emission is relatively bright (~3 K) all over the cloud (Figs. 2 and 3). All the line profiles are relatively narrow (with linewidths ranging between 1 and 2 km s^{-1}) and peak around the systemic cloud velocity at $v_{\rm LSR}$ = 3.9 km s^{-1}. The absorption dip around the systemic velocity seen towards IRAS 16293 is probably due to the absorption by foreground material, as also seen in the H_2CO transitions (Loinard et al. 2001). On the other hand, the absorption dip seen in the ^{34}SO towards W1 may point to a very large SO column density in that direction or two different kinematic components. The contrast of the velocity-integrated SO molecular emission at the various positions in the cloud is relatively low: the emission peaks towards IRAS 16293 but otherwise it is widespread in the region between W1 and E2 (Fig. 2). Remarkably, there is not a much brighter SO $3_2 \rightarrow 2_1$ emission towards the shocked regions with respect to the molecular cloud. The only two clear exceptions are represented by E1 and E2, where a high velocity component appears in the low energy SO transition (Fig. 3). In the following we will analyze separately the E2 low velocity component centered at 3.9 km s^{-1} (hereinafter E2(LVC)), and the E2 high velocity component at 10 km s^{-1} (hereinafter E2(HVC)), because the two components can be clearly disentangled. On the contrary, in E1 the situation is less clear and hence we didn't pursue a separated analysis of the two components. We emphasize that the E2(HVC) component is detected at more than 3 RMS all along the red lobe of the outflow and it is also observed in the SiO transitions (CCLCL01). This high velocity component is not seen in SO $6_5 \rightarrow 5_4$ probably because of unfavorable excitation conditions. Indeed, we will show in the next section that the gas density in E2(HVC) is lower than in the ambient gas (see Table 3). This fact, already recognized by CCLCL01, leads to the supposition that the E2(HVC) may represent the wind shock, whereas the lower velocity component, E2(LVC), may trace the so called cloud shock (Hollenbach 1998). Finally, we also see hints of red and blue wings originating from the molecular outflows driven either by IRAS 16293 or 16293E in the direction of W1, E1 and HE2 whereas no wing is seen in W2.

In the higher energy line SO $6_5 \rightarrow 5_4$ the emission is peaked towards IRAS 16293 and W1 (cf. Fig. 2) while the emission from the cloud is, as expected, weak. Relatively strong emission is also detected around E1. Moreover, the SO $6_5 \rightarrow 5_4$ spectra in those positions have pronounced red and blue wings. The same happens in HE2 where the SO $6_5 \rightarrow 5_4$ spectrum shows clearly the presence of a blue wing. The emitting region around IRAS 16293 has a characteristic size of $\alpha \times \delta = 39'' \times 16''$ namely it is not resolved in δ. Finally, the observed SO spectra towards 16293E are similar to those in the cloud: narrow, intense in the SO $3_2 \rightarrow 2_1$ transition and weak in the SO $6_5 \rightarrow 5_4$ transition, and no signs of wings are evident. Overall, 16293E does not seem to have any enhanced SO emission compared with the cloud.

3.2. SO_2 and H_2S emission

Unlike the SO $3_2 \rightarrow 2_1$, the SO_2 $5_{1,5} \rightarrow 4_{0,4}$ emission is limited to a few spots (see Figs. 2 and 3), specifically toward IRAS 16293, E1 and W2, probably because of the excitation conditions (the critical density of the SO_2 $5_{1,5} \rightarrow 4_{0,4}$ transition is about 20 times the SO $3_2 \rightarrow 2_1$ critical density). Unfortunately, because of the lack of other observations around W2 we have no idea of its extent. Remarkably, no significant SO_2 emission is detected towards E2. SO_2 has also been detected at the cloud position. The linewidth (1.4 km s^{-1}) is equivalent to that of $N_2H^+1 \rightarrow 0$ – a good tracer of extended, cold and quiescent gas – observed at the same position (CCLCL01).

Probably because of similar critical densities, the SO_2 $5_{1,5} \rightarrow 4_{0,4}$ and SO $6_5 \rightarrow 5_4$ emission shows up in the same regions. In addition, with the exception of E1, the SO_2 $5_{1,5} \rightarrow 4_{0,4}$ spectra show characteristics similar to the

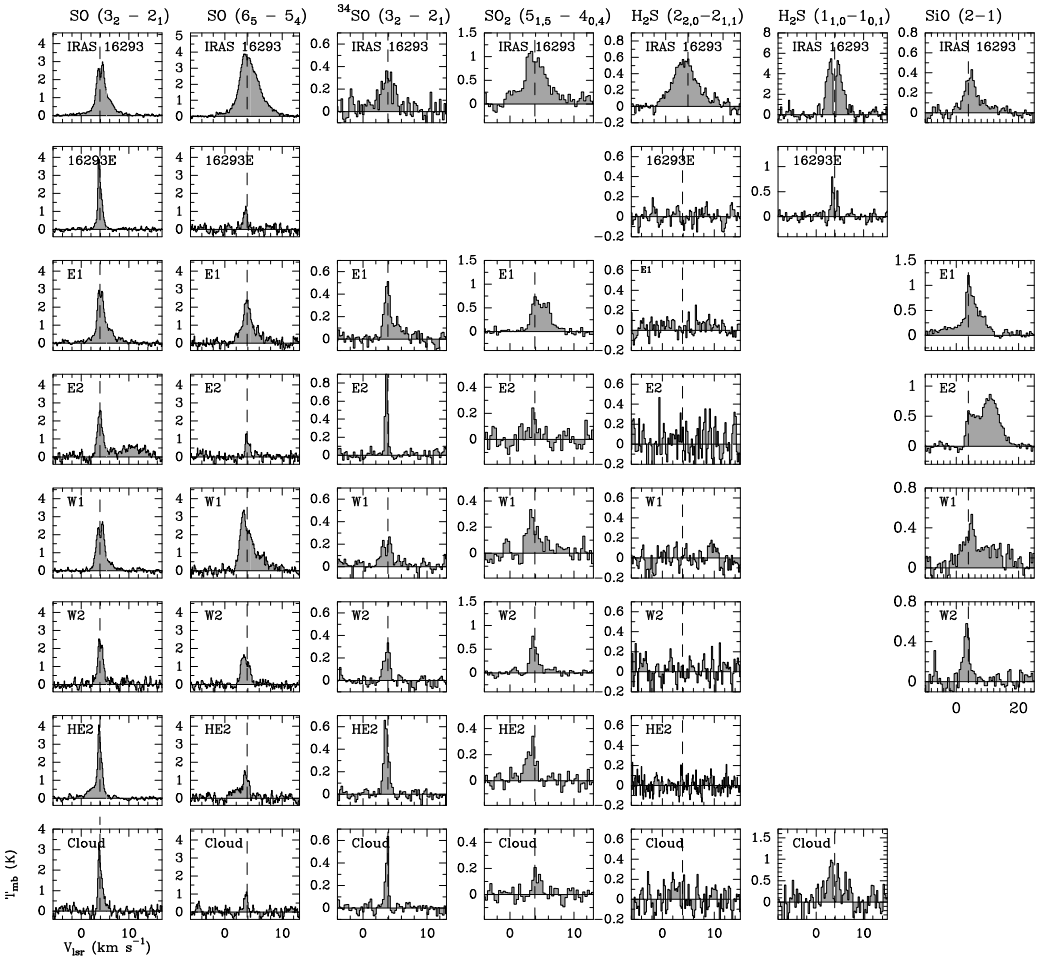

Fig. 3. Spectra (not smoothed) of SO $3_2 \rightarrow 2_1$, SO $6_5 \rightarrow 5_4$, ^{34}SO $3_2 \rightarrow 2_1$, SO_2 $5_{1,5} \rightarrow 4_{0,4}$, H_2S $2_{2,0} \rightarrow 2_{1,1}$, H_2S $1_{1,0} \rightarrow 1_{0,1}$ and SiO $2 \rightarrow 1$ at "key" points (see text) in the L1689N molecular cloud. The vertical dashed line on each spectrum shows the position of the cloud systemic velocity (v_{LSR} = 3.9 km s^{-1}).

SO $6_5 \rightarrow 5_4$ spectra, like for example the linewidth, in all "key" positions. On the contrary, in E1 the SO line profiles are characterized by a strong ambient component with blue- and redshifted wings of much lower brightness, whereas the high-velocity component appears as bright as the ambient component in the SO_2 line, so that the whole SO_2 $5_{1,5} \rightarrow 4_{0,4}$ linewidth is approximately twice that of the SO $6_5 \rightarrow 5_4$.

IRAS 16293 is the only position where H_2S $2_{2,0} \rightarrow 2_{1,1}$ has been detected. The line is relatively bright and rather broad (Δv = 5.0 km s^{-1}). There is no emission detected in shocks nor in the ambient cloud. Conversely, the lower H_2S transition, observed only toward IRAS 16293, 16293E and the cloud, has been detected in all these positions with a double-peaked profile towards the protostars and possibly the cloud position. The absorption dip is likely due to the optical depth of the line. In fact, Minh et al. (1991) have observed the same H_2S transition towards several star forming regions and found an opacity of ∼10 for similar column densities.

3.3. Comparison with SiO

Contrary to the sulphur bearing species, the emission of SiO $2 \rightarrow 1$ is stronger in the shocked regions than towards IRAS 16293. The spectra in E1 and W1 show high velocity

Table 2. Line parameters ($T_{\rm MB}$ (K), Δv (km s^{-1}), $v_{\rm LSR}$(km s^{-1}), $\int T_{\rm MB}\delta v$ (K km s^{-1})) for the various transitions observed at the "key" positions: the two protostars IRAS 16293 and 16293E, the shocked regions E1, E2, W1, W2 and HE2, and the reference position in the cloud. The SiO observations were previously published in CCLCL01. When no signal is detected, we give an upper limit for the intensity equal to 3 RMS of the relevant spectrum. The parameters are taken from the spectra not smoothed. The symbol "–" implies that the relevant transition has not been observed or detected.

		SO	SO	^{34}SO	SO_2	H_2S	H_2S	SiO
		$3_2 \rightarrow 2_1$	$6_5 \rightarrow 5_4$	$3_2 \rightarrow 2_1$	$5_{1,5} \rightarrow 4_{0,4}$	$2_{2,0} \rightarrow 2_{1,1}$	$1_{1,0} \rightarrow 1_{0,1}$	$2 \rightarrow 1$
IRAS	$T_{\rm MB}$	2.9 ± 0.1	3.7 ± 0.1	0.3 ± 0.1	1.1 ± 0.1	0.5 ± 0.04	6.2 ± 0.6	0.35 ± 0.05
16293-2422	Δv	2.0 ± 0.1	3.9 ± 0.0	2.8 ± 0.5	4.2 ± 0.2	5.0 ± 0.2	3.0 ± 0.0	5.0 ± 0.4
	$v_{\rm LSR}$	4.0	3.9	3.9	3.9	3.3	3.9	4.2
	$\int T_{\rm MB}\delta v$	8.0 ± 1.2	16.0 ± 2.5	1.0 ± 0.3	4.6 ± 0.9	3.0 ± 0.5	17.5 ± 3.2	1.9 ± 0.1
	$T_{\rm MB}$	3.4 ± 0.1	1.2 ± 0.2	–	–	≤ 0.2	1.1 ± 0.1	–
16293E	Δv	1.0 ± 0.0	0.8 ± 0.1	–	–	–	1.2 ± 0.1	–
	$v_{\rm LSR}$	3.7	3.7	–	–	–	3.9	–
	$\int T_{\rm MB}\delta v$	3.8 ± 0.6	1.0 ± 0.2	–	–	≤ 0.1	0.6 ± 0.1	–
	$T_{\rm MB}$	2.9 ± 0.1	2.4 ± 0.2	0.5 ± 0.1	0.7 ± 0.1	≤ 0.2	–	1.1 ± 0.1
E1	Δv	1.8 ± 0.2	1.6 ± 0.1	1.2 ± 0.1	3.1 ± 0.1	–	–	2.8 ± 0.1
	$v_{\rm LSR}$	4.0	3.8	3.9	4.0	–	–	3.6
	$\int T_{\rm MB}\delta v$	7.3 ± 1.2	5.6 ± 1.0	0.8 ± 0.2	2.2 ± 0.4	≤ 0.3	–	3.3 ± 0.3
E2	$T_{\rm MB}$	2.4 ± 0.2	1.1 ± 0.2	0.9 ± 0.04	≤ 0.2	≤ 0.4	–	0.53 ± 0.06
LVC	Δv	1.3 ± 0.1	0.9 ± 0.1	0.5 ± 0.02	–	–	–	3.2 ± 0.1
	$v_{\rm LSR}$	3.9	3.8	3.6	–	–	–	4.0
	$\int T_{\rm MB}\delta v$	3.7 ± 0.7	1.0 ± 0.2	0.5 ± 0.1	≤ 0.1	≤ 0.4	–	1.8 ± 0.1
E2	$T_{\rm MB}$	0.5 ± 0.15	≤ 0.6	≤ 0.1	≤ 0.2	≤ 0.4	–	0.83 ± 0.06
HVC	Δv	6.6 ± 0.6	–	–	–	–	–	6.3 ± 0.2
	$v_{\rm LSR}$	10.4	–	–	–	–	–	11
	$\int T_{\rm MB}\delta v$	3.6 ± 0.7	≤ 0.5	≤ 0.2	≤ 0.3	≤ 0.8	–	5.6 ± 0.2
	$T_{\rm MB}$	2.6 ± 0.1	3.3 ± 0.2	0.2 ± 0.04	0.3 ± 0.1	≤ 0.2	–	0.3 ± 0.1
W1	Δv	1.8 ± 0.2	1.3 ± 0.03	2.2 ± 0.2	1.9 ± 0.3	–	–	3.3 ± 0.8
	$v_{\rm LSR}$	4.0	3.3	3.7	3.3	–	–	4.6
	$\int T_{\rm MB}\delta v$	5.8 ± 1.0	9.0 ± 1.5	0.5 ± 0.1	0.7 ± 0.2	≤ 0.4	–	1.1 ± 0.2
	$T_{\rm MB}$	2.4 ± 0.2	1.6 ± 0.2	0.30 ± 0.04	0.7 ± 0.1	≤ 0.2	–	0.5 ± 0.1
W2	Δv	1.4 ± 0.1	1.6 ± 0.1	1.1 ± 0.1	1.2 ± 0.1	–	–	2.1 ± 0.3
	$v_{\rm LSR}$	3.8	3.3	3.9	3.7	–	–	3.5
	$\int T_{\rm MB}\delta v$	3.8 ± 0.7	2.7 ± 0.5	0.3 ± 0.1	0.9 ± 0.2	≤ 0.3	–	1.2 ± 0.1
	$T_{\rm MB}$	3.7 ± 0.1	1.4 ± 0.2	0.6 ± 0.04	0.3 ± 0.04	≤ 0.2	–	–
HE2	Δv	0.9 ± 0.1	0.9 ± 0.1	0.9 ± 0.1	1.8 ± 0.02	–	–	–
	$v_{\rm LSR}$	3.7	3.5	3.5	3.6	–	–	–
	$\int T_{\rm MB}\delta v$	5.3 ± 0.8	2.7 ± 0.5	0.6 ± 0.1	0.6 ± 0.1	≤ 0.3	–	–
	$T_{\rm MB}$	3.1 ± 0.2	1.1 ± 0.2	0.6 ± 0.04	0.2 ± 0.04	≤ 0.3	0.8 ± 0.2	–
Cloud	Δv	1.0 ± 0.04	0.7 ± 0.1	0.5 ± 0.1	1.4 ± 0.2	–	1.1 ± 0.4	–
	$v_{\rm LSR}$	3.8	3.8	3.8	3.9	–	3.4	–
	$\int T_{\rm MB}\delta v$	3.2 ± 0.6	0.8 ± 0.2	0.3 ± 0.1	0.2 ± 0.1	≤ 0.3	1.0 ± 0.2	–

wings much more marked than for the SO and SO_2 lines. The high velocity component of E2 seen in SO $3_2 \rightarrow 2_1$ is very strong in SiO $2 \rightarrow 1$ and have similar Δv (~ 6.5 km s^{-1}) and $v_{\rm LSR}$(~ 10 km s^{-1}) for these two transitions.

4. Column densities

In this section we estimate the column densities of the observed species, namely SO, SO_2 and H_2S, as well of the SiO and H_2CO previously observed by CCLCL01, in the "key"

positions. In order to do that, we first estimate the density and temperature of the gas in each position. To derive the gas temperature and density, as well as the column densities of the different species, we used the theoretical predictions from an LVG (Large Velocity Gradient) model described in detail in the next paragraph. The next three paragraphs describe the derivation of the gas temperature and densities as well as the column density of the observed species in the cloud, in the shocked regions, and in IRAS 16293 respectively. Note that we did not carry out the analysis on 16293E, because the observed emission in that position seems to be dominated by the cloud emission.

4.1. LVG model description

To derive the gas temperature and density, as well as the column densities, we compared the observed line intensities with the theoretical predictions from a LVG model, which self-consistently accounts for the excitation conditions (density and temperature) as well as the line opacities. For the escape probability β we used the following function of the line optical depth: $\beta = \frac{1-\exp[-3\tau]}{3\tau}$, valid in the case of a homogeneous and isothermal semi-infinite slab. More details can be found in Ceccarelli et al. (2002). Note that the dust emission is neglected in the present computations.

The spectroscopic data of SO, SO_2, H_2S, SiO and H_2CO are all taken from the JPL catalogue (`http://spec.jpl.nasa.gov/ftp/pub/catalog/catform.html`; Pickett et al. 1998). The collisional coefficients are from Green (1994) for SO, Palma (1987) for SO_2, Turner et al. (1992) for SiO, and Green (1991) for H_2CO respectively. The collisional coefficients of H_2S are not available in literature, and we estimated them from the collisional coefficients of H_2O, multiplied by a factor 5 (following the discussion in Turner 1996). This is a very rough approximation, giving rise to unfortunately very rough estimates of the H_2S column density. Furthermore, the collisional coefficients used for the other molecules are not available in the full range of temperatures probed by our observations. In particular the low temperature regime is often missing. In this case we have extrapolated the coefficients at the lowest available temperature with a $\sqrt{T_{\rm kin}}$ law. Finally, our code considers the first 50 rotational levels of each molecule, unless the relevant collisional coefficients are available for a lower number of levels.

4.2. Cloud

To estimate the gas density and temperature, and the SO column density in the cloud reference position we simultaneously best-fitted the ^{34}SO and ^{32}SO $3_2 \rightarrow 2_1$ observations (that give a line opacity for ^{32}SO $\tau \sim 1.5$), and the ^{32}SO $3_2 \rightarrow 2_1$ and $6_5 \rightarrow 5_4$ observations (whose ratio, together with the ^{32}SO $3_2 \rightarrow 2_1$ intensity, gives pairs of gas temperature and density values). Note that we used the elemental ratio ^{34}S/^{32}S = 22.5 (Wilson & Rood 1994; Chin et al. 1996; Lucas & Liszt 1998), and we assumed that the emission fills up the beam, when comparing observations obtained with different telescopes. The result of the modeling is shown in Fig. 4. We found that the ensemble of our observations constrains the SO column density in the cloud to be in the range 3 to 8×10^{14} cm^{-2}. Adopting the gas temperature of 26 K, as found by Caux et al. (1999), we derive a density of 3×10^4 cm^{-3}.

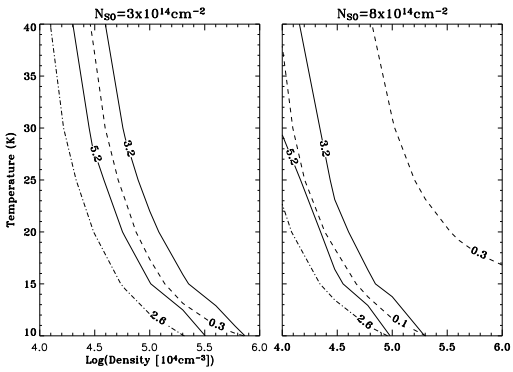

Fig. 4. Cloud reference position modeling. Theoretical predictions as function of the gas temperature and density for two different SO column densities. The curves refer the values of three observed quantities taking into account the uncertainties. Solid lines: observed integrated intensity ratio SO $3_2 \rightarrow 2_1$ over SO $6_5 \rightarrow 5_4$, between 3.2 and 5.2. Dashed lines: escape probability, derived from the ^{34}SO and ^{32}SO $3_2 \rightarrow 2_1$ line ratio, between 0.1 and 0.3. Dot-dashed line: the minimum integrated intensity of the SO $3_2 \rightarrow 2_1$ transition, 2.6 K km s^{-1}. Note that the intensity increases with increasing temperature, i.e. towards the upper part of the panel. Analogously, the lower limit of the escape probability (0.1) in the left panel is not shown because it lies outside the plot.

The column densities of the other species, namely SO_2 and H_2S, have been derived assuming the same density and temperature. The SO_2 abundance was found to be 4×10^{-8}, a value equivalent to the ones obtained in other clouds (see Table 4). In the case of H_2S we cross-checked the column density derivation with LTE computations, because of the rough approximation of the collisional coefficients. For this we assumed an excitation temperature of 5 K, as found by Swade (1989) and Hirahara et al. (1995) in similar molecular clouds (L134N and TMC-1) for several molecules whose fundamental transitions have *A*-coefficients similar to that for the H_2S $1_{1,0} \rightarrow 1_{0,1}$ transition. In fact Minh et al. (1989) used an excitation temperature of 5 K for the H_2S $1_{1,0} \rightarrow 1_{0,1}$ transition to compute the column density of H_2S in the molecular clouds L134N and TMC-1, which have temperatures and densities similar to L1689N. Note that increasing the excitation temperature by a factor two, would decrease the H_2S column density by the same amount. We assumed a H_2S ortho-to-para ratio equal to 3. Finally the SiO and H_2CO column densities are taken from the modeling by Ceccarelli et al. (2000b, 2001)

Table 3. Gas temperature and density, and column densities of SO, SO_2, H_2S, SiO and H_2CO in six "key" positions. The column densities are beam-averaged in the shocked regions (on 27″ for SiO, 26″ for H_2CO, 24″ for SO, 18″ for SO_2 and 25″ for H_2S), whereas they are corrected from the beam dilution in IRAS 16293. Errors on the estimates are around 15% if considering only the statistical uncertainties. However, a factor two of uncertainty has to be considered, when the uncertainty on the density and temperature of the emitting gas is considered.

	Density (10^5 cm^{-3})	T (K)	N_{SO} (10^{13} cm^{-2})	N_{SO_2} (10^{13} cm^{-2})	N_{H_2S} (10^{13} cm^{-2})	N_{SiO} (10^{13} cm^{-2})	N_{H_2CO} (10^{13} cm^{-2})
IRAS 16293	250	100	13 000	4100	4000	110	750
E1	1.8	150	15	7.3	≤96	0.42	7.0
E2(LVC)	1.0	150	3.2	≤0.44	≤260	0.21	≤0.86
E2(HVC)	0.4	100	7.8	≤1.1	≤1200	1.0	≤1.8
W1	2.6	150	24	2.4	≤72	0.15	3.4
W2	1.8	80	8.7	2.9	≤76	0.15	3.6
Cloud	0.3	26	30–80	2	1.5	0.02	2

Table 4. Abundances in molecular clouds. References: L1689N: SO, SO_2 and H_2S from this work, SiO from Ceccarelli et al. (2000b) and H_2CO from Ceccarelli et al. (2001); L134N: SO and SO_2 abundances from Swade (1989), H_2S from Minh et al. (1989), SiO from Ziurys et al. (1989), H_2CO from Ohishi et al. (1992); TCM-1: SO abundances from Hirahara et al. (1995) and Pratap et al. (1997), SO_2 from Irvine et al. (1983), H_2S from Minh et al. (1989), SiO from Ziurys et al. (1989), H_2CO from Ohishi & Kaifu (1998).

Cloud	x(SO) (10^{-9})	$x(SO_2)$ (10^{-9})	$x(H_2S)$ (10^{-9})	x(SiO) (10^{-12})	$x(H_2CO)$ (10^{-8})
L1689N	6–16	0.4	0.3	4	0.04
L134N	0.6–10	0.3–2.5	3	≤3.6	2
TMC-1	0.3–4	2–6	0.7	≤2.4	7

respectively[2]. The column densities derived for all species are reported in Table 3 and the abundances in Table 4.

4.3. Shocked regions

We have used the gas temperature and density derived by CCLCL01 in E1, E2(LVC), E2(HVC), W1, W2[3], i.e. in the shocked regions, by comparing the SiO observed lines (J from 2 to 5) with the relevant LVG model. The uncertainty in the derived densities and temperatures is around a factor two. We did not try to derive independently the gas temperature and density for each molecule, because of the lack of enough usable transitions. In fact, of the two SO transitions, the lowest lying transition is dominated by the cloud emission so it cannot be used to probe the shocked gas, and only one transition of SO_2, H_2S and H_2CO respectively has been detected. We therefore derived the column densities of those last four species assuming the same density and temperature derived from the SiO observations. This is an approximation that does not take into account the possible structure of the shocked gas, but the results are indeed not much affected by this assumption. In principle each molecular species may originate in slightly different physical conditions and hence the computed column density may be consequently mis-evaluated. In practice, though, the error associated with this approximation is lower than about a factor two. For example, Lis et al. (2002), using H_2CO transitions, found different values for the temperature (45 K) and density (2×10^6 cm^{-3}) in E1. Even taking those values, the derived column density of the four molecules listed in Table 3 wouldn't change by more than a factor two with respect to those quoted in the table. Finally, we also assumed that all the used lines are optically thin (e.g. Blake et al. 1994). The column densities, averaged on the relevant beam, derived for all species in each of the four shocked sites are reported in Table 3. Unfortunately, since we don't have observations of the H_2S lowest transitions in the shocks, the column density of this molecule is very poorly constrained.

4.4. IRAS 16293

As mentioned in the Introduction, the envelope of IRAS 16293 is formed by (at least) two components: an inner core characterized by a high temperature and an outer cold envelope with a temperature close to the cloud temperature. The hot core is a small region (∼2″ in diameter) whose temperature is about 100 K and the density 2.5×10^7 cm^{-3} (Ceccarelli et al. 2000a; Schöier et al. 2002). At that temperature the grain mantles evaporate injecting into the gas phase their constituents (Ceccarelli et al. 2000a,b). The outer envelope is more extended (∼20″) and colder, with a temperature of 30 K (a little larger than the L1689N temperature) and a density of 2.5×10^5 cm^{-3} (Ceccarelli et al. 2000a; Schöier et al. 2002).

[2] Although no SiO emission was detected towards the cloud position, Ceccarelli et al. (2000b) modeled the observed SiO (from J_{up} = 1 to 8) emission towards IRAS 16293, taking into account the envelope physical structure, and found that the SiO abundance is 4.0×10^{-12} in the outer envelope. In analogy with other molecules for which the abundances found in the outer envelope are equal to the (measured) abundances in the surrounding molecular clouds, we assumed 4.0×10^{-12} for the SiO abundance in L1689N. In a similar way, although weak formaldehyde emission is detected at the cloud position, we used the abundance found in the IRAS 16293 outer envelope for the cloud too.

[3] Since no SiO emission is detected in HE2, the density and temperature cannot be constrained in this position.

The molecular abundances in the outer envelope are similar to those in the molecular cloud, with the possible exception of the deuterated molecules. On the contrary, in the inner core, several molecules, those believed to be released from the grain mantles or formed from those evaporated molecules, undergo a jump in their abundances. In the following we focus on the abundance of the S-bearing molecules in the inner hot core. Blake et al. (1994), using multifrequency observations, constructed the rotational diagrams of SO and SO_2 and derived rotational temperatures relatively large (~80 K). It is therefore very likely that the bulk of the emission for both molecules originates in the inner core. Furthermore, all linewidths are larger than 3 km s^{-1} and increase with the upper level energy of the transition, once again arguing for an inner core origin. Pursuing this hypothesis we computed the column densities using these rotational diagrams, corrected for the beam dilution, reported in Table 3. In estimating the H_2S column density we assumed that the $2_{2,0} \rightarrow 2_{1,1}$ line emission originates entirely in the hot core, as it is suggested by its observed relatively large linewidth. Using then the estimates of the H_2 column density in Ceccarelli et al. (2000a) (7.5×10^{22} cm^{-2}) we derive the abundances reported in Table 5. Note that, provided that we use our volume density in the Schöier et al. (2002) model, our derived abundance compare extremely well with their abundances (which, as a result, is multiplied by a factor five), supporting the validity of our method. Actually Schöier et al. found abundances a factor 5 lower than ours, because they used a factor five larger density than us in the inner core. The two density estimates differ because of the different diagnostics used to derive them: Schöier et al. used the continuum spectral energy distribution, whereas Ceccarelli et al. used the water line spectrum. When CO lines are used instead, Schöier et al. found the same density in the inner region (Schöier private communication). We use therefore the estimate by Ceccarelli et al. (2000a), but keep in mind that we may be overestimating the abundances by a factor 5. Finally, the SiO and H_2CO column densities are taken from the Ceccarelli et al. (2000a,b, 2001) modeling.

5. Discussion

The abundance ratios between the observed species are reported in Tables 4–6. They show variations up to two orders of magnitude. In the following we analyze in detail the variations associated with the cloud, the shocked regions and the protostar IRAS 16293 respectively.

5.1. The cloud

Adopting the H_2 column density derived by Caux et al. (1999) by means of atomic oxygen observations in L1689N, 5×10^{22} cm^{-2}, and using the column densities derived in the previous section (Table 3) we obtain the abundances reported in Table 4. In the table we also report, for comparison, the abundances measured in L134N and TMC-1, two among the best studied molecular clouds. With the possible exception of formaldehyde, which seems to be underabundant, L1689N has abundances typical of other cold molecular clouds and it is therefore interesting to study how those abundances change in the region either because of the presence of shocks or the presence of a protostar (IRAS 16293).

5.2. Shocked regions

In the shocked regions, with the exception of E2, it is practically impossible to derive the absolute abundances of the observed molecules, because of the difficulty to derive reliable estimates of the H_2 column densities. In fact, usually the H_2 column densities are estimated from the CO millimeter observations converting the measured CO column densities into H_2 column densities. The method relies on the capacity to disentangle the contribution of the cloud from the shocked gas in the CO emission. However, this is feasible when the shocked gas emits at relatively large velocities, i.e. when the two contributions can be separated based on their spectral properties (see for example Bachiller & Perez Gutierrez 1997). In the specific case of the outflows in L1689N, the projected velocity of the shocks is too small and the cloud and shocked gas cannot be disentangled, except in the E2 position, where a high velocity component is present. In order therefore to estimate the H_2 column density in the shocked regions we would need high spatial resolution observations, because single dish CO measurement are totally dominated by the cloud emission. For this practical reason, we computed only abundances ratios, as summarized in Table 6. Note that the quoted ratios have been obtained dividing column densities averaged on different beam sizes (18″ for SO_2 observations and ~25″ for the others), so that the SO_2 ratios may be off by a factor two (in the shocked regions). Figure 5 shows a graphic representation of the derived abundances ratios in the shocked regions and in the cloud.

The first result to note is that, with the exception of the SO_2/H_2CO ratio, all other ratios in the shocked regions differ by more than a factor two when compared to the ratios in the cloud. In particular, the largest variations, by up a factor 100, are shown by the ratios with the SiO, confirming that SiO is the best molecule to trace shocks (Caselli et al. 1997; Schilke et al. 1997; Garay et al. 2002).

A second robust result is that SO_2 is enhanced with respect to SO in the E1, W1 and W2 shocks, when compared to the cloud (by up a factor 10). This also confirms a rather general theoretical prediction that SO_2 is overproduced with respect to SO in the shocked gas, because of endothermic reactions that lock most of the gaseous sulphur in SO_2 on timescales relatively small $\sim 10^3$ yr (e.g. Pineau Des Forêts et al. 1993). Remarkably, SO_2/SO is lowest in the strongest SiO shock of the region, E2. CCLCL01 argued that E2 is an older shock based on H_2CO and SiO observations compared with models predictions and this would agree with the low SO_2/SO ratio, as SO_2 is expected to be converted into atomic sulphur at late stages $\geq 3 \times 10^4$ yr (e.g. Hatchell et al. 1998).

The third result, is the constant SO_2/H_2CO ratio, within a factor 2, in the shocked regions E1, W1 and W2, and in the cloud. Why SO_2/H_2CO has the same value in these shocked regions and in the cloud seems a remarkable coincidence for which we do not have an explanation. On the contrary, the constant SO_2/H_2CO ratio in these shocked regions may be due

Table 5. Abundances of SO, SO_2, H_2S, SiO and H_2CO with respect to H_2 in the hot core of IRAS 16293. The abundances of SO, SO_2 and H_2S are estimated by the present work observations, assuming a H_2 column density of 7.5×10^{22} cm^{-2} (Ceccarelli et al. 2000a). The SiO and H_2CO abundances are taken from Ceccarelli et al. (2000a,b). References of the other sources: L1157-mm (IRAS 20386+6751): Bachiller & Perez Gutierrez (1997); Orion-KL: SO, SO_2, SiO and H_2CO from Sutton et al. (1995), H_2S from Minh et al. (1990); G10.47, G29.96, G75.78, G9.62, G12.21, G31.41 and G34.26: Hatchell et al. (1998); BF-Class 0: Buckle & Fuller (2003).

	SO/H_2	SO_2/H_2	H_2S/H_2	SiO/H_2	H_2CO/H_2
IRAS 16293	1.7×10^{-6}	5.4×10^{-7}	5.3×10^{-7}	1.5×10^{-8}	1.0×10^{-7}
L1157-mm	5.0×10^{-9}	3.0×10^{-8}	1.1×10^{-8}	–	$4–6 \times 10^{-9}$
Orion-KL	1.5×10^{-7}	9.4×10^{-8}	5.0×10^{-6}	6.0×10^{-9}	7.0×10^{-9}
G10.47	3.0×10^{-9}	1.8×10^{-8}	$\geq 4.0 \times 10^{-9}$	–	–
G29.96	$\geq 5.0 \times 10^{-9}$	2.0×10^{-8}	$\geq 1.5 \times 10^{-8}$	–	–
G75.78	3.0×10^{-9}	$\geq 2.0 \times 10^{-9}$	$\geq 1.0 \times 10^{-9}$	–	–
G9.62	$\geq 4.0 \times 10^{-9}$	1.0×10^{-8}	$\geq 8.0 \times 10^{-9}$	–	–
G12.21	$\geq 8.0 \times 10^{-10}$	$\geq 5.0 \times 10^{-10}$	–	–	–
G31.41	4.0×10^{-9}	1.2×10^{-8}	$\geq 3.0 \times 10^{-9}$	–	–
G34.26	6.0×10^{-9}	1.5×10^{-8}	$\geq 2.0 \times 10^{-9}$	–	–
BF-Class 0	3.0×10^{-9}	4.0×10^{-10}	2.0×10^{-9}	–	–

Table 6. Abundance ratios in the shocked regions and in the cloud, as derived from the column densities of Table 3. References for other outflows: L1157-B1 and L1157-B2: Bachiller & Perez Gutierrez (1997); CB3: Codella & Bachiller (1999); L1448, B1 and CepA: Martin-Pintado et al. (1992); NGC 2071: Chernin & Masson (1993).

Region	SO/H_2CO	SO_2/SO	SO_2/H_2CO	H_2S/SO	SiO/SO	SiO/SO_2	SiO/H_2CO
Cloud	28	~0.04	1	~0.03	$\sim 4 \times 10^{-4}$	0.01	0.01
E1	2	0.5	1.1	≤6	0.03	0.06	0.06
E2(LVC)	≥4	≤0.1	–	≤80	0.06	≥0.5	≥0.2
E2(HVC)	≥5	≤0.1	–	≤150	0.1	≥0.9	≥0.5
W1	7	0.1	0.7	≤3	6×10^{-3}	0.06	0.04
W2	2.5	0.3	0.8	≤9	0.02	0.05	0.04
L1157-B1	0.6–1	0.6–1	0.4–1	0.8–1.3	0.2–0.3	0.3	0.1–0.3
L1157-B2	1	1–3	1–3	0.7–2	0.1–0.4	0.1	0.1–0.4
CB3	–	~1	–	≤1	≪1	≪1	–
L1448	–	–	–	–	0.3	–	–
B1	–	–	–	–	0.1	–	–
CepA	–	–	–	–	0.08	–	–
NGC 2071	–	–	–	–	0.01–0.05	–	–

to the timescales involved in the formation and destruction of the two molecules, even though the mechanisms of SO_2 and H_2CO formation in shocks are expected to be different. On the one hand, formaldehyde is thought to be formed onto the grain mantles, released into the gas phase because of the mantle sputtering in the shock, and finally converted into more complex molecules by gas phase reactions on timescales larger than $\sim 3 \times 10^4$ yr (Charnley et al. 1992). SO_2 follows a totally different route: it has been proposed that sulphur is released into the gas phase mainly as H_2S, following also mantle sputtering, and then H_2S is transformed into SO and SO_2 via neutral−neutral reactions on timescales of $\sim 10^3$ yr (e.g. Charnley 1997). Later on $\sim 3 \times 10^4$ yr, gaseous sulphur is expected to be in atomic sulphur. Therefore, the constant SO_2/H_2CO ratio in E1, W1 and W2 may tell us that these three shocks have similar ages, around 10^4 yr if models are correct, whereas E2 is a much older shock, $\geq 3 \times 10^4$ yr, and SO_2 and H_2CO both disappear because transformed into S and complex O-bearing molecules respectively.

The overall emerging picture is that the combination of the variations in the abundance of different molecules can in first instance give an estimate of the age of the shock. Table 7 summarizes the situation. The times noted in the Table 7 are really modeled dependent and are meant to represent a sequence.

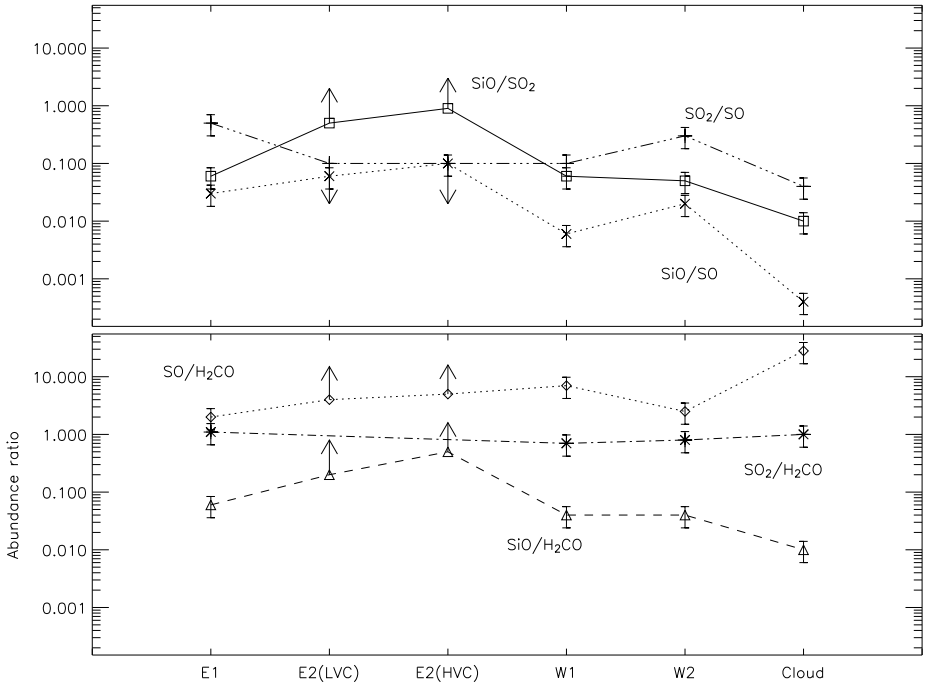

Fig. 5. The abundance ratios observed in the different shocked regions and in the molecular cloud and presented in Table 6: SO/H_2CO, SO_2/H_2CO and SiO/H_2CO on the lower panel and SO_2/SO, SiO/SO_2 and SiO/SO on the upper panel. The arrows represent upper and lower limits of the SO_2/SO, SiO/SO_2, SO/H_2CO and SiO/H_2CO ratios respectively.

Table 7. Proposed schema of the formation and destruction of SO, SO_2, H_2S, SiO and H_2CO as function of time. The times are indicative and are meant to represent a sequence.

Time (yr)	Formation	Destruction
0^a	H_2S, H_2CO, SiH_2, SiH_4	
10^3	SO, SO_2, H_2S, SiO	
3×10^4		SO_2, H_2CO
10^5		SiO

[a] Injection in the gas phase of the molecules sputtered from the grain mantles.

The simultaneous presence of SO, SO_2, H_2S, H_2CO, and SiO would mark relatively young shocks ($\leq 10^4$ yr), whereas the only presence of SiO emission would point towards relatively older shocks ($\geq 3 \times 10^4$ yr).

Finally, comparison with other molecular outflows can only be very approximate, but still somewhat illustrative (Table 6). The only molecular outflow at our knowledge in which SO, SO_2, SiO and H_2CO abundances have been measured is the L1157 outflow (Bachiller & Perez Gutierrez 1997). Looking at Table 6, L1157 B1 and B2 are rather similar to E2 with respect to the ratios involving SiO, i.e. they are relatively enriched in SiO with respect to the other shocks of L1689N and the molecular cloud. The likely interpretation is that E2, B1 and B2 are all relatively strong shocks. Yet, contrary to what happens in E2, H_2CO, SO and SO_2 are detected in L1157 B1 and B2, which would point towards relatively young shocks (Table 7). Note though that SO seems to be underabundant with respect to H_2CO and SiO in B1 and B2 when compared not only to E2, but also to E1, W1 and W2. At the same time, SO_2 is overabundant. Whether this is because of the stronger shock in B1 and B2 that converts SO into SO_2 more quickly, or because the shocks in L1157 have a different age of E1, W1 and W2, is impossible to say at this stage. A larger statistics on a larger number of outflow system is necessary to better understand this point.

5.3. IRAS 16293

Table 5 quotes the absolute abundances of SO, SO_2, H_2S, H_2CO and SiO in the hot core of IRAS 16293 and in the molecular cloud. As evident from the table, the sulphuretted molecule abundances exhibit a strong enhancement with respect to the molecular cloud abundances. The abundance of SO increases by a factor 200, SO_2 by a factor 1300 and H_2S by a factor 1700 (see also Schöier et al. 2002).

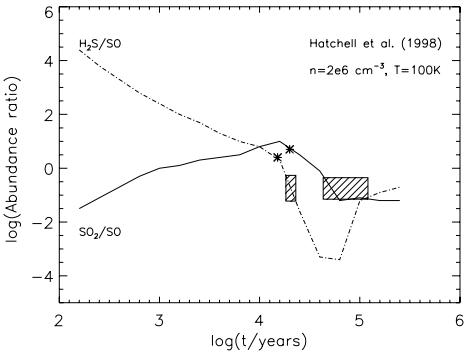

Fig. 6. Theoretical predictions of the evolution of SO_2/SO and H_2S/SO ratios as a function of time. The curves are adapted from the Hatchell et al. (1998) model, that assumes a gas temperature of 100 K and a density of 2×10^6 cm^{-3}. The grey squares represent the portion of the modelling curve in agreement with observations of the hot core of IRAS 16293 (this work). Analogously, the stars mark the predicted values of the ratios in agreement with what observed towards L1157-mm (Bachiller & Perez Gutierrez 1997).

As we mentioned in the Introduction, the sulphur species are expected to be useful to evaluate the age of hot cores. We could not resist the temptation to compare the measured abundance ratios with published theoretical predictions. In Fig. 6 we compare the H_2S/SO and SO_2/SO ratios obtained in the IRAS 16293 hot core with the theoretical values predicted by chemical models. The observed H_2S/SO and SO_2/SO ratios are consistent with the theoretical predictions by Hatchell et al. (1998), but differ substantially with those by Charnley (1997). Both models use the sulphur chemistry described in Charnley (1997) and assume that the bulk of sulphur is stored in iced H_2S onto the grain mantles. When the dust temperature exceeds 100 K, the grain mantles evaporate releasing the H_2S into the gas phase, which is slowly converted into SO and subsequently into SO_2 by neutral–neutral reactions. The only difference between the two models is that Hatchell et al. use an updated rate for the reaction of H_2S with atomic hydrogen. This difference substantially changes the evolution of the abundances of H_2S, SO and SO_2 at times larger than about 10^4 yr. Our observations support the Hatchell et al. (1998) model, as shown in Fig. 6. The agreement between observations and model predictions for an age of $\sim 3 \times 10^4$ yr is remarkable, as independent estimates of the age of IRAS 16293 converge towards the same value (Ceccarelli et al. 2000a). On the same figure we also report the values observed towards L1157-mm. Based on these observations and on the model predictions, L1157-mm has about the same age of IRAS 16293. We caution that the error bars are indeed large enough to make the agreement between observed and predicted values just a coincidence. In this sense, this result may just mean an encouragement to pursue this kind of studies on a large sample of low mass protostars, where a statistical trend could be established. We have indeed started such a study on a sample of low mass protostars, whose we have derived the physical structure (i.e. density and temperature profiles) and formaldehyde abundance profiles (Maret et al. 2002).

A direct comparison between the measured abundances in the hot cores quoted in Table 5 and that of IRAS 16293 can only be done with respect to Orion-KL, as in the other sources the abundances are not corrected for the beam dilution (Hatchell et al. 1998; Buckle & Fuller 2003). With respect to Orion-KL, the hot core of IRAS 16293 is enriched in SO, SO_2 and H_2CO, whereas it is deficient in H_2S. The most plausible explanation is that the different abundances reflect a different composition of the ices (from which H_2CO and H_2S evaporate), a fact now well documented by the study of deuterated molecules in high and low mass protostars (e.g. Ceccarelli 2002). However, the different gas temperature and density may also play a role. Finally, the SO_2/SO and H_2S/SO ratios of IRAS 16293 differ by about a factor 100 and 10 respectively with respect to the relevant ratios measured in the high mass protostars of the Hatchell et al. (1998) sample. Again, the difference may be attributed to both different evolutionary stages and different gas densities and temperatures.

Following the theoretical expectations that gaseous sulphur in the warm gas is mainly locked into SO, SO_2 and H_2S (e.g. Pineau Des Forêts et al. 1993; Charnley 1997), while silicon is mainly locked into SiO (Herbst et al. 1989), the (SO+SO_2+H_2S)/SiO ratio gives a measure of the gas phase elemental sulphur over silicon abundance ratio in the IRAS 16293 hot core. This value is about 300, to compare with the solar elemental sulphur over silicon abundance ratio of 0.5. It is unlikely that we overestimate the overall quantity of sulphur. Conversely, it could have been underestimated because of a possible optical thickness of the sulfuretted molecular lines and/or the presence of other important sulphur-bearing molecular species not considered here. Thus, the measured (SO+SO_2+H_2S)/SiO ratio suggests that there is an important deficiency of silicon in the warm gas of the IRAS 16293 hot core. The likely explanation is that silicon is mostly depleted into the non-volatile, refractory cores grains, whereas sulphur is depleted mostly onto the volatile grain mantles. This conclusion supports the thesis by Ruffle et al. (1999) that sulphur and silicon follow different routes of depletion, and specifically that sulphur is depleted at the time of mantle formation. Another possibility to explain this deficiency of silicon is that silicon is mainly in another form than SiO in the warm gas such as Si, Si^+ or SiO_2. The atomic silicon is difficult to observe, since it has its ground transition at 129 μm, i.e. a wavelength range obscured by the atmosphere. Observations obtained with the *Long Wavelength Spectrometer* on board ISO did not detect any signal larger than about 5×10^{-13} erg s^{-1} cm^{-2} (Ceccarelli et al. 1998), corresponding to an upper limit for the Si column density of 6×10^{17} cm^{-2}, and an abundance lower than 8×10^{-6}, i.e. about 500 times more than the SiO abundance found in IRAS 16293. For Si^+, it is unlikely that the UV field in the observed regions is strong enough to ionize the silicon.

Finally, the total abundance of SO, SO_2 and H_2S in the IRAS 16293 hot core is 2.8×10^{-6}, namely more than ten times lower than the corresponding solar abundance 3.4×10^{-5}. Even adding up the OCS, whose abundance is about that of SO (Schöier et al. 2002), the overall sulphur abundance is still

low. Unfortunately (Schöier et al. 2002) could not estimate the CS abundance in the hot core of IRAS 16293, but CS is unlikely to be the main reservoir of sulphur. The other possible reservoir of sulphur, the atomic sulphur (Charnley 1997), is extremely difficult to observe, because the ground state transition is at 25 μm, i.e. in a wavelength range obscured by the atmosphere.

6. Conclusion

We have presented a quantitative observational study of the most important S-bearing molecules, namely SO, SO_2 and H_2S, in the region of L1689N. We derived the column density of these molecules plus SiO and H_2CO molecules in six regions of L1689N: the cloud, the young protostar IRAS 16293, and four shocked regions.

We found that SiO is the molecule that shows the largest abundance variations in the shocked regions, whereas S-bearing molecules show more moderate variations. Remarkably, the region of the brightest SiO emission in L1689N, namely E2, is undetected in SO_2, H_2S and H_2CO and only marginally detected in SO. We argued that this is possibly due to the relatively old age ($\geq 3 \times 10^4$ yr) of this shock.

In the other weaker SiO shocks, SO_2 is enhanced with respect to SO, in agreement with theoretical expectations that predict the conversion of the gaseous sulphur mostly into SO_2 on timescales of $\sim 10^3$ yr. In the same regions, the SO_2/H_2CO ratio is of order of unity. We argued that this may point to relatively young shocks ($\sim 10^4$ yr), where SO_2 has already formed and H_2CO has not yet destroyed.

Putting together the observed combinations of the SO, SO_2, H_2CO and SiO ratios, we proposed a schema in which the different molecular ratios correspond to different ages of the shocks.

Finally, we found that SO, SO_2 and H_2S have significant abundance jumps (200, 1300 and 1700 respectively) in the inner hot core of IRAS 16293. We compared the measured abundances with theoretical models and discussed the derived protostar age. However, we cautioned that a more detailed study is necessary to draw reliable conclusions. The hot core of IRAS 16293 seems to be enriched in SO, SO_2 and H_2CO with respect to Orion-KL, probably because of a different initial composition of the ices in the two sources. Comparing the $SO+SO_2+H_2S/SiO$ ratio in the hot core of IRAS 16293, we found that silicon is largely deficient in the warm gas (by a factor ~600), supporting the thesis that silicon is depleted into the grain refractory cores whereas sulphur is depleted into the grain volatile mantles. Nonetheless, sulphur in the IRAS 16293 warm gas is also deficient.

Acknowledgements. We thank the IRAM and SEST staff in Pico Veleta and La Silla for their assistance with the observations, and the IRAM and ESO Program Committee for their award of observing time. We would like to thank G. Fuller, the referee, for useful comments.We are grateful to A.G.G.M. Tielens and M. Walmsley, for helpful discussions on sulphur and silicon chemistry. V. Wakelam wishes to thank F. Herpin for his help on data reduction.

References

Bachiller, R., Pérez Gutiérrez, M., Kumar, M. S. N., & Tafalla, M. 2001, A&A, 372, 899
Bachiller, R., & Perez Gutierrez, M. 1997, ApJ, 487, L93
Blake, G. A., van Dishoek, E. F., Jansen, D. J., Groesbeck, T. D., & Mundy, L. G. 1994, ApJ, 428, 680
Buckle, J. V., & Fuller, G. A. 2003, A&A, 399, 567
Caselli, P., Hartquist, T. W., & Havnes, O. 1997, A&A, 322, 296
Castets, A., Ceccarelli, C., Loinard, L., Caux, E., & Lefloch, B. 2001, A&A, 375, 40
Caux, E., Ceccarelli, C., Castets, A., et al. 1999, A&A, 347, L1
Ceccarelli, C. 2002, P&SS, 50, 1267
Ceccarelli, C., Caux, E., Wolfire, M., et al. 1998, A&A, 331, L17
Ceccarelli, C., Castets, A., Caux, E., et al. 2000a, A&A, 355, 1129
Ceccarelli, C., Loinard, L., Castets, A., Tielens, A. G. G. M., & Caux, E. 2000b, A&A, 357, L9
Ceccarelli, C., Loinard, L., Castets, A., et al. 2001, A&A, 372, 998
Ceccarelli, C., Baluteau, J.-P., Walmsley, M., et al. 2002, A&A, 383, 603
Charnley, S. B. 1997, ApJ, 481, 396
Charnley, S. B., Tielens, A. G. G. M., & Millar, T. J. 1992, ApJ, 399, L71
Chernin, L., & Masson, C. 1993, ApJ, 403, L21
Chernin, L. M., Masson, C. R., & Fuller, G. A. 1994, ApJ, 436, 741
Chin, Y.-N., Henkel, C., Whiteoak, J. B., Langer, N., & Churchwell, E. B. 1996, A&A, 305, 960
Codella, C., & Bachiller, R. 1999, A&A, 350, 659
Fukui, Y., Sugitani, K., Takaba, H., et al. 1986, ApJ, 311, L85
Garay, G., Mardones, D., Rodríguez, L. F., Caselli, P., & Bourke, T. L. 2002, ApJ, 567, 980
Green, S. 1991, ApJS, 76, 979
Green, S. 1994, ApJ, 434, 188
Hatchell, J., Thompson, M. A., Millar, T. J., & MacDonald, G. H. 1998, A&A, 338, 713
Herbst, E., Millar, T. J., Wlodek, S., & Bohme, D. K. 1989, A&A, 222, 205
Hirahara, Y., Masuda, A., Kawaguchi, K., et al. 1995, PASJ, 47, 845
Hirano, N., Mikami, H., Umemoto, T., Yamamoto, S., & Taniguchi, Y. 2001, ApJ, 547, 899
Hollenbach, D. J. 1998, in Herbig-Haro flows and the birth of low mass stars, ed. B. Reipurth & C. Bertout, IAU Symp., 182, 181
Irvine, W. M., Good, J. C., & Schloerb, F. P. 1983, A&A, 127, L10
Keane, J. V., Boonman, A. M. S., Tielens, A. G. G. M., & van Dishoeck, E. F. 2001, A&A, 376, L5
Knude, J., & Hog, E. 1998, A&A, 338, 897
Lis, D. C., Gerin, M., Phillips, T. G., & Motte, F. 2002, ApJ, 569, 322
Loinard, L., Castets, A., Ceccarelli, C., Caux, E., & Tielens, A. G. G. M. 2001, ApJ, 552, L163
Looney, L. W., Mundy, L. G., & Welch, W. J. 2000, ApJ, 529, 477
Lucas, R., & Liszt, H. 1998, A&A, 337, 246
Maret, S., Ceccarelli, C., Caux, E., Tielens, A. G. G. M., & Castets, A. 2002, A&A, 395, 573
Martin-Pintado, J., Bachiller, R., & Fuente, A. 1992, A&A, 254, 315
Millar, T. J., & Herbst, E. 1990, A&A, 231, 466
Minh, Y. C., Irvine, W. M., & Ziurys, L. M. 1989, ApJ, 345, L63
Minh, Y. C., Irvine, W. M., McGonagle, D., & Ziurys, L. M. 1990, ApJ, 360, 136
Minh, Y. C., Ziurys, L. M., Irvine, W. M., & McGonagle, D. 1991, ApJ, 366, 192
Mizuno, A., Fukui, Y., Iwata, T., Nozawa, S., & Takano, T. 1990, ApJ, 356, 184
Narayanan, G., Walker, C. K., & Buckley, H. D. 1998, ApJ, 496, 292

Ohishi, M., Irvine, W. M., & Kaifu, N. 1992, in Astrochemistry of Cosmic Phenomena, IAU Symp., 150, 171
Ohishi, M., & Kaifu, N. 1998, in Chemistry and Physics of Molecules and Grains in Space, Faraday Discussions, 109, 205
Oppenheimer, M., & Dalgarno, A. 1974, ApJ, 187, 231
Palma, A. 1987, ApJS, 64, 565
Pickett, H. M., Poynter, R. L., Cohen, E. A., et al. 1998, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, 60, 883
Pineau Des Forêts, G., Roueff, E., Schilke, P., & Flower, D. R. 1993, MNRAS, 262, 915
Prasad, S. S., & Huntress, W. T. 1982, ApJ 260, 590
Pratap, P., Dickens, J. E., Snell, R. L., et al. 1997, ApJ, 486, 862
Ruffle, D. P., Hartquist, T. W., Caselli, P., & Williams, D. A. 1999, MNRAS, 306, 691
Schilke, P., Walmsley, C. M., Pineau Des Forets, G., & Flower, D. R. 1997, A&A, 321, 293
Schöier, F. L., Jorgensen, J. K., van Dishoeck, E. F., & Blake, G. A. 2002, A&A, 390, 1001
Sutton, E. C., Peng, R., Danchi, W. C., et al. 1995, ApJS, 97, 455
Swade, D. A. 1989, ApJ, 345, 828
Turner, B. E. 1996, ApJ, 468, 694
Turner, B. E., Chan, K., Green, S., & Lubowich, D. A. 1992, ApJ, 399, 114
van Dishoeck, E. F., & Blake, G. A. 1998, ARA&A, 36, 317
Walker, C. K., Lada, C. J., Young, E. T., Maloney, P. R., & Wilking, B. A. 1986, ApJ, 309, L47
Wilson, T. L., & Rood, R. 1994, ARA&A, 32, 191
Wootten, A., & Loren, R. B. 1987, ApJ, 317, 220
Zhou, S. 1995, ApJ, 442, 685
Ziurys, L. M., Friberg, P., & Irvine, W. M. 1989, ApJ, 343, 201

A&A 422, 159–169 (2004)
DOI: 10.1051/0004-6361:20047186
© ESO 2004

Astronomy & Astrophysics

Resetting chemical clocks of hot cores based on S-bearing molecules*

V. Wakelam[1], P. Caselli[2], C. Ceccarelli[3], E. Herbst[4], and A. Castets[1]

[1] Observatoire de Bordeaux, BP 89, 33270 Floirac, France
[2] INAF–Osservatorio Astrofisico di Arcetri, Largo E. Fermi 5, 50125 Firenze, Italy
[3] Laboratoire d'Astrophysique, Observatoire de Grenoble, BP 53, 38041 Grenoble cedex 09, France
[4] Departments of Physics, Chemistry, and Astronomy, The Ohio State University, Columbus, OH 43210, USA

Received 2 February 2004 / Accepted 7 April 2004

Abstract. We report a theoretical study of sulphur chemistry, as applied to hot cores, where S-bearing molecular ratios have been previously proposed and used as chemical clocks. As in previous models, we follow the S-bearing molecular composition after the injection of grain mantle components into the gas phase. For this study, we developed a time-dependent chemical model with up-to-date reaction rate coefficients. We ran several cases, using different realistic chemical compositions for the grain mantles and for the gas prior to mantle evaporation. The modeling shows that S-bearing molecular ratios depend very critically on the gas temperature and density, the abundance of atomic oxygen, and, most importantly, on the form of sulphur injected in the gas phase, which is very poorly known. Consequently, ratios of S-bearing molecules cannot be easily used as chemical clocks. However, detailed observations and careful modeling of both physical and chemical structure can give hints on the source age and constrain the mantle composition (i.e. the form of sulphur in cold molecular clouds) and, thus, help to solve the mystery of the sulphur depletion. We analyse in detail the cases of Orion and IRAS 16293-2422. The comparison of the available observations with our model suggests that the majority of sulphur released from the mantles is mainly in, or soon converted into, atomic form.

Key words. ISM: abundances – ISM: molecules – stars: formation – astrochemistry

1. Introduction

It is a long-standing dream to use relative abundances of different molecules as chemical clocks to measure the ages of astronomical objects. Studies of the ages of star formation regions have recently focused on S-bearing molecules. Charnley (1997) and Hatchell et al. (1998) were the first to propose that the relative abundance ratios of SO, SO_2 and H_2S could be used to estimate the age of the hot cores of massive protostars. The underlying idea is that the main reservoir of sulphur is H_2S on grain mantles, and that when the hot core forms, the mantles evaporate, injecting the hydrogen sulphide into the gas phase. Endothermic reactions in the hot gas convert H_2S into atomic sulphur and SO from which more SO and, subsequently, SO_2 are formed, making the SO_2/SO and SO/H_2S ratios nice functions of time. These studies have triggered a variety of work, both observational and theoretical (Charnley 1997; Hatchell et al. 1998; Buckle & Fuller 2003).

This line of research, however, has been challenged by recent ISO observations, which have cast doubt on the basic assumption that sulphur is mainly trapped in grain mantles as H_2S. The lack of an appropriate feature in the ISO spectra of high (Gibb et al. 2000) and low (Boogert et al. 2000) mass protostars sets an upper limit on the mantle H_2S abundance which cannot exceed about 10^{-7} with respect to H_2 (van Dishoeck & Blake 1998). Indeed, the identity of the major reservoir of sulphur in cold molecular clouds is a long standing and unresolved problem, for the sum of the detectable S-bearing molecules is only a very small fraction of the elemental S abundance (Tieftrunk et al. 1994). Since sulphur is known not to be depleted in the diffuse medium (e.g. Sofia et al. 1994), it is usually assumed that sulphur in dense clouds is depleted onto the grain mantles rather than in refractory cores (e.g. Caselli et al. 1994), but how this happens is a mystery. In a theoretical study, Ruffle et al. (1999) proposed that in collapsing translucent clouds sulphur is efficiently adsorbed onto grain mantles. In fact, in these regions, most of the gas-phase sulphur is in the form of S^+, while grains are typically negatively charged, so that the collisional cross section for sulphur is enhanced compared with neutral species (e.g. O) and sulphur is removed from the gas phase more rapidly.

Send offprint requests to: V. Wakelam,
e-mail: wakelam@obs.u-bordeaux1.fr

* Tables 3–5 and Fig. 1 are only available in electronic form at http://www.edpsciences.org

Another mystery is the form of sulphur on dust grains. The simplest possibility is that it consists of relatively isolated atoms, as would occur in a matrix, or perhaps as isolated pairs of atoms (S_2). Another possibility is that the sulphur is amorphous (or even crystalline), having formed islands of material from the initially adsorbed atoms. Crystalline sulphur is known to come in two forms – rhombic and monoclinic – both of which consist of S_8 cyclic molecules. Vaporization leads to a complex mixture of sulfur polymers through S_8 in complexity. If sulphur is elemental and amorphous, evaporation is also likely to lead to molecules of sulphur through eight atoms in complexity. So far, the only S-bearing species firmly detected on granular surfaces is OCS, but with a relatively low fractional abundance of 10^{-7} (Palumbo et al. 1997). Recently, Keller et al. (2002) claimed the detection of iron sulphide (FeS) grains in protoplanetary disks, but there is no evidence to suggest that solid FeS is the main form of sulphur in the parent collapsing environment. Actually, if the main form of solid sulphur is FeS, S should follow Fe depletion, which is not observed (Sofia et al. 1994). Even more recently, Scappini et al. (2003) suggested that hydrated sulphuric acid ($H_2SO_4 \cdot H_2O$) is the main sulphur reservoir. In whatever form sulphur resides in the grain mantles, there is the possibility that the species, once evaporated, are very quickly destroyed to give atomic sulphur. In summary, although all the evidence is that sulphur is depleted onto grain mantles in cold clouds, its particular form is very uncertain.

Given the need for chemical clock methods, it is timely to reconsider the use of S-bearing molecules in this fashion. In this paper, we present a model with an up-to-date chemical network involving S-bearing molecules. We run several cases to cover a large, realistic parameter space for hot core sources, consistent with present observational constraints. Based on the results we obtain, we conclude that it is tricky to use abundance ratios of S-bearing molecules as chemical clocks in the absence of other constraints, for they depend more on the initial conditions, gas density, temperature, and the initial form of sulphur injected in the gas phase than on the age of the source.

The paper is organized as follows: we describe the model in Sect. 2, the model results in Sect. 3, and in Sect. 4 we discuss the practical consequences of those results and apply the model to the specific cases of Orion and IRAS 16293-2422.

2. The model

We have developed a pseudo-time dependent model for the gas phase chemistry that computes the evolution of the chemical composition of a volume of gas with a fixed density and temperature. Our goal is to follow how the S-bearing molecular abundances vary with time when the gas undergoes a sudden change in its temperature and density, and/or in its overall chemical abundance, because of the evaporation of grain mantles. In hot cores the dust temperature increases to an extent that it exceeds the mantle evaporation temperature, i.e. ~100 K, and all the components of the grain mantles are suddenly injected into the gas phase, similarly to what has been done in previous studies of hot cores (e.g. Brown et al. 1988; Charnley et al. 1992; Caselli et al. 1993; Millar et al. 1997b). In fact, it is more probable that hot cores have spatial gradients in temperature and density releasing the molecules at different times depending on their surface binding energies (see Ceccarelli et al. 1996; Viti & Williams 1999; Doty et al. 2002; Rodgers & Charnley 2003). However, the goal of this work is mainly to test the effects of the form of the main initial sulphur bearing molecules and we preferred to simplify the problem assuming that all the molecules evaporate simultaneously from the grain. More detailed models will be presented in a forthcoming paper.

In order to simulate these conditions, the gas-phase chemical composition prior to evaporation of the mantles is taken to be similar to that of dark molecular clouds. At time $t = 0$, the grain mantle components are injected into the gas phase, and the model follows the changes in the gas chemical composition with a given gas temperature and density. Throughout this paper we will use the word "evaporation" to refer to the loss of the grain mantles.

The model is a reduced chemical network, which includes 930 reactions involving 77 species containing the elements H, He, C, O and S. The standard neutral-neutral and ion-neutral reactions are considered. Most of the reaction coefficients are from the NSM ("new standard model"; `http://www.physics.ohio-state.edu/~eric/research_files/cddata.july03`) database; see also Lee et al. (1996), updated with new values or new analyses of assorted values in databases (e.g. the NIST chemical kinetics database at `http://kinetics.nist.gov/index.php`) when available. Furthermore, several high temperature (neutral-neutral) reactions have been added. To select the reduced network, we have followed Ruffle et al. (2002) for CO formation, Hollenbach & McKee (1979) and Hartquist et al. (1980) for the oxygen chemistry and Pineau Des Forêts et al. (1993) and Charnley (1997) for the sulphur chemistry.

To validate this network, we compared our results with abundances previously obtained by Lee et al. (1996) at low temperature and Charnley (1997) at higher temperatures using the same initial abundances as these authors. We found that we can reproduce molecular abundances to better than a factor of three. This is an indication that small variations in the rate coefficients between the updated NSM and UMIST databases do not strongly influence the computed abundances of sulphur bearing species. One exception is the CS molecule, which we produce at an abundance ten times less than Charnley's model, because our adopted rate coefficient for the reaction CO + CRPHOT → O + C, (where CRPHOT is a photon induced by cosmic rays) is 50 times smaller than in the UMIST database. The lowered abundance of C then translates into a lowered abundance for CS, since C is a precursor of CS.

Note that we have assumed the gas to be totally shielded from the interstellar UV field and no other UV field to be present. Thus, the model does not include any photochemistry, with the exception of cosmic ray-induced photodestruction reactions. The model takes into account a reduced gas-grain chemistry: H_2 is formed on grain surfaces and the recombination of ions with negatively charged grains occurs (see Aikawa et al. 1999, for the recombination of ions with negative grains). Moreover, neutral species can deplete onto grain mantles, and

mantle molecules can evaporate because of thermal effects and cosmic rays (Hasegawa et al. 1992; Hasegawa & Herbst 1993).

2.1. Gas-phase and mantle abundances prior to evaporation

To help determine a set of molecular abundances prior to mantle evaporation, we ran the model with a temperature equal to 10 K and a density n_{H_2} equal to 10^4 cm^{-3}, including freeze out, for 10^7 yr. At this time, species such as SO, SO_2, and CS reach abundances similar to those observed in dark clouds ($\sim 10^{-9}$, $\leq 10^{-9}$, and $\sim 10^{-9}$, respectively; Dickens et al. 2000). The adopted elemental abundances (with respect to H_2) for He, O, C^+ and S^+ are respectively: 0.28, 6.38×10^{-4} (Meyer et al. 1998), 2.8×10^{-4} (Cardelli et al. 1996) and 0.3×10^{-4}; the sulphur abundance refers to the gaseous and grain portions (see below). The late-time abundances obtained could not be reasonably used without modification for the pre-evaporated chemical composition for several reasons. First, our model, like most other gas-phase treatments (e.g. Lee et al. 1996; Millar et al. 1997a), overestimates the O_2 and H_2O abundances in cold dense clouds by orders of magnitude with respect to the ISO, SWAS and ODIN observations (e.g. Bergin et al. 2003; Pagani et al. 2003). Secondly, the elemental sulphur abundance pertaining to the gas must be lowered to avoid getting very high abundances of sulphur-bearing species. The portion of the abundance not used for the gas can be considered to reside in grain mantles until evaporation or in grain core. In order to mimic realistic conditions, we thus adopted three different compositions for the pre-evaporative gas, as follows:

Composition A: we adopted the computed late-time molecular abundances except for O_2 and H_2O, which were assumed to be 10^{-7} and 10^{-8} with respect to H_2 respectively, in agreement with observations in molecular clouds, and for atomic oxygen, O, which was assumed to carry the oxygen not locked into CO, leading to a fractional abundance of 2.6×10^{-4}, as suggested by observations (e.g. Baluteau et al. 1997; Caux et al. 1999; Vastel et al. 2002; Lis et al. 2001). In addition, the initial gas-phase sulphur abundance was taken to be a factor of 30 lower than the elemental abundance.

Composition B: we re-computed the late time abundances, lowering artificially by two orders of magnitude the rate of the dissociative recombination of H_3O^+, to decrease the computed O_2 and H_2O abundances. In this case, it was only necessary to lower the initial elemental sulphur abundance by a factor of five. The abundance of atomic oxygen in this case is 4.8×10^{-4}, consistent with observations in molecular clouds.

Composition C: the abundances were taken to equal those measured in the direction of L134N, as reported in Table 4 of Charnley et al. (2001). The oxygen not contained in the species reported in Table 4 was assumed to be in atomic form.

All three gas-phase compositions have large abundances of atomic oxygen, in agreement with observations. We assume that this large O abundance is also present at the beginning of the hot core phase, in contrast with previous studies. This implies many differences in the computed abundances, as shown in Sect. 3.1 and discussed in Sect. 4.1. Table 1 lists the abundances of the main S-bearing molecules for the three gas-phase compositions prior to mantle evaporation.

Table 1. Computed late time (A, B) and adopted (C) gas-phase abundances with respect to H_2 for the main S-bearing molecules prior to mantle evaporation.

Species	A	B	C
SO	9×10^{-9}	3×10^{-9}	3.1×10^{-9}
SO_2	4×10^{-10}	1.5×10^{-10}	1×10^{-9} [a]
H_2S	1×10^{-10}	1×10^{-11}	8×10^{-10}
CS	4×10^{-10}	2×10^{-8}	1.7×10^{-9}

[a] Here we took the value of the upper limit.

Table 2. Adopted abundances for mixtures of evaporated S-bearing molecules (with respect to H_2).

Species	Mod. 1	Mod. 2	Mod. 3	Mod. 4
OCS	10^{-7}	10^{-7}	10^{-7}	10^{-7}
H_2S	10^{-7}	10^{-7}	10^{-7}	10^{-8}
S	0	3×10^{-5}	0	3×10^{-5}
S_2	0	0	1.5×10^{-5}	0

At time $t = 0$, the grain mantle components are injected into the gas phase. The abundances of the major mantle components are relatively well constrained by the observations and we took the observed abundances (with respect to H_2) in high mass protostars: H_2O: 10^{-4} (Schutte et al. 1996), H_2CO: 4×10^{-6} (Keane et al. 2001), CH_3OH: 4×10^{-6} (Chiar et al. 1996) and CH_4: 10^{-6} (Boogert et al. 1998). Note that in order to shorten the number of treated species, we negleted the CO_2 molecule which is abundant in mantles (2×10^{-5} with respect to H_2, Gerakines et al. 1999), because it is not a crucial element of the sulphur chemistry. On the contrary, the situation is very uncertain with respect to the S-bearing mantle molecules, as discussed in the Introduction. In order to study the influence of the injected S-bearing abundances on the evolution of the chemical composition, we have run models with four types of material evaporating from mantles that differ in their major sulphur-bearing species, as reported in Table 2. In practice, sulphur on the grain mantles can be stored as OCS, H_2S, or pure sulphur in a matrix-like, amorphous, or even crystalline form. Of the four mixtures, the first one (used in model 1) has the bulk of the sulphur in the refractory core of the grain, while the other three (used in models 2–4) have large abundances of elemental sulphur leading upon evaporation directly or eventually to either S or S_2 in the gas.

2.2. "Important" reactions

As the post-evaporative gas-phase chemistry proceeds, it is important to determine the reactions that will *influence* the formation and destruction of sulphur-bearing species the most severely. We will call them "important" reactions in the following discussion. By this term, we mean quantitatively those reactions that lead to significant variations of the main S-bearing

abundances when the relevant reaction rate is changed by a small amount (specifically 10%). Although such a determination has not been featured in papers on astrochemistry, we thought it worthwhile to introduce a suitable procedure here. The aim of this study is twofold: (i) to determine a set of reactions to check carefully in laboratory experiments because the computed abundances are particularly sensitive to those reactions; and (ii) to ascertain whether different chemical networks will lead to different results, and why. To identify these reactions, we first defined a "perturbation" in the rate coefficient for each of the 750 gas-phase reactions by multiplying them by a factor of 1.1, one at a time. For each single perturbation, we then computed the abundance "variations" ΔX by comparing the computed abundances after 10^4 yr with the reference abundances calculated with the non-modified set of reaction rates, according to the expression $\Delta X = \frac{|X_{\rm ref} - X|}{X_{\rm ref}}$, where $X_{\rm ref}$ is the reference abundance and X the abundance obtained with the perturbed rate.

Figure 1 shows the variations of the abundances of the main S-bearing species H_2S, CS, and SO divided by the amplitude of the perturbation ($\Delta R = 0.1$) for a temperature of 100 K and a density of 10^7 cm^{-3}. The calculation has been performed for composition A and model 2. The abscissa consists of the numbers of reactions in our network from 86 to 834. Vertical lines are included for those reactions that produce a normalized variation larger than 1% of the largest variation, while the actual numbers of reactions with a normalized variation greater than 5% are listed. Note that for a variation (0.1) equal in size to the amplitude of the perturbation, the line extends upward to unity and that a $\Delta X/\Delta R$ of 0.5 implies that the abundance of the studied molecule change by 5% in abundance upon a 10% change in the reaction rate. The sets of numbered "important" reactions for the molecules H_2S, CS, and SO consist of 28, 24, and 17 reactions, respectively. We do not show the variations of OCS and SO_2 because the OCS abundance is only affected significantly (9%) if reaction 757 is perturbed, while SO_2 shows the same behavior as SO so the corresponding figure is the same.

In Table 3, we list the 70 most important reactions for the chemistry of H_2S, CS, SO, SO_2 and OCS for initial composition A and the four models (see previous section) at a temperature of 100 K and a density of 10^7 cm^{-3}. The first two columns give the number of the reaction and the actual reaction, while the third column gives the reaction rate coefficient k in terms of the standard parameters α (cm^3 s^{-1}), β and γ (K):

$$k = \alpha(T/300)^{\beta} \exp(-\gamma/T) \quad (1)$$

where T is the gas temperature. In this table, we report only the rate coefficients that differ by more than 10% from the UMIST ones. In the last four columns, the symbol • indicates that the reaction is important for sulphur chemistry in the model of the corresponding column. The list of reactions in Table 3 depends only weakly on the choice of initial composition mentioned in Sect. 2.1, because the three initial compositions A, B and C give sufficiently similar abundances at 10^4 yr.

Of course, for very different initial compositions, the list of important reactions could be slightly different, especially if the network is different. This is for example the case of the Charnley (1997) model, where all reactions involving atomic oxygen are not important, for no initial gaseous atomic oxygen is assumed to be present, whereas ion-molecule reactions involving molecular ions such as H_3^+, H_3O^+, and H_3CO^+, are crucial.

We found that the relative importance of the reactions in Table 3 depends more on the initial mantle composition (model 1 to 4) than on the pre-evaporation composition of the gas (A, B or C). For model 1, the chemical network is simpler (i.e. fewer important reactions) than for models 2, 3, and 4 because there is no initial S or S_2, so that many reactions forming CS as well as reactions with S and S^+ lose importance. Models 2 and 3 have a similar list of important reactions but some reactions with SO gain in importance for model 3. Models 2 and 4 are even more similar in their lists of important reactions. A few reactions with H_2S become less important for model 4 because the initial abundance of H_2S in this model is ten times less than in model 2 and only one reaction (number 550) becomes important.

The above analysis of "important" reactions refers to only one perturbation amplitude. In general, since the equations are not linear, the amplitude of the perturbation may influence the results in a non-linear way. To check for non-linearity, we also ran the case where each reaction rate is twice as large as the "standard" one (i.e. a pertubation amplitude of 1.0, which doubles the rate of reaction), and still obtained linear variations, so that normalized variations are independent of amplitude. One exception concerns CS, for which several reactions become important in the latter case. These reactions, listed in Table 4 for composition A and model 2, must be added to the ones shown in Fig. 1 for CS.

Because rate coefficients are often dependent on the temperature, a change in this parameter can affect which reactions are important. In particular, an increase of the temperature to 200 K makes some of the neutral-neutral reactions more important (Table 5) and some reactions (579, 789, 798, 800, 804 and 825) of Table 3 negligible. On the contrary, an increase of the H_2 density to 10^8 cm^{-3} does not change the results significantly.

Finally, from Tables 3 and 5 and Fig. 1, we can determine the reactions producing the largest variations for the S-bearing species under a set of relevant conditions and a reasonable time (10^4 yr) for our models: reactions 90, 153, 190, 191, 740, 756 and 757. Reaction 90 is the cosmic ray ionization rate of H_2, which is obviously important for starting the ion-molecule chemistry. Reactions 153 and 190 are neutral-neutral reactions important only at the higher temperature considered (200 K). The other reactions (cf. Table 3) are a collection of ion-molecule (740), neutral-neutral (191), and radiative association (756 and 757) processes. The importance of these reactions would probably have been overlooked had this analysis not been done. It will therefore be crucial to know the rate coefficients of the mentioned reactions with high precision. Of these reactions, only the rate coefficient for 153 is well determined in the laboratory, although the lowest measured temperature (300 K) means that the rate coefficient in the 100−200 K range involves an extrapolation. Uncertain measured activation energies for reactions 190 and 191 also lead to

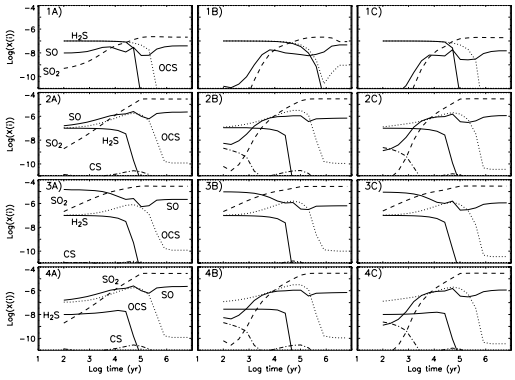

Fig. 2. Evolution of the SO_2, SO, H_2S, OCS and CS abundances with respect to H_2 as a function of time, for the three pre-evaporation gas phase compositions A (*left panels*), B (*central panels*), and C (*right panels*) and the four grain mantle compositions (1 to 4, from the top to the bottom). The gas temperature is 100 K and the H_2 density is 10^7 cm^{-3}.

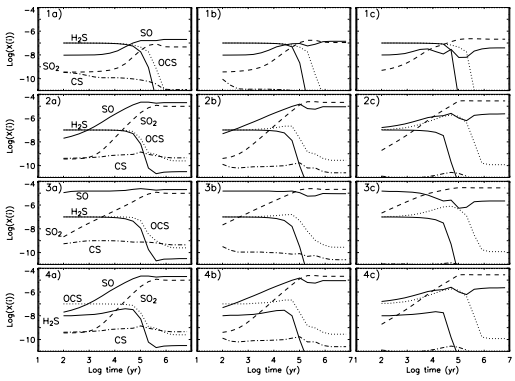

Fig. 3. Evolution of the SO_2, SO, H_2S, OCS and CS abundances with respect to H_2 as a function of time, using pre-evaporated gas phase composition A and the four grain mantle mixtures (1 to 4, from the top to the bottom). The gas temperature is 100 K and the density is 10^5 cm^{-3} (**a)** *left panels*), 10^6 cm^{-3} (**b)** *central panels*) and 10^7 cm^{-3} (**c)** *right panels*).

poorly determined rate coefficients by 100−200 K. The ion-molecule reaction (740) may not even be exothermic, while the rate coefficients for the radiative association processes are order-of-magnitude estimates at best.

3. Results

3.1. Abundances with respect to H_2

We have run the four models listed in Table 2, each with the three different gas-phase compositions (A, B, and C) prior to evaporation, for gases with temperatures of 100 K and 300 K, and densities of 10^5 cm^{-3}, 10^6 cm^{-3} and 10^7 cm^{-3}. In this

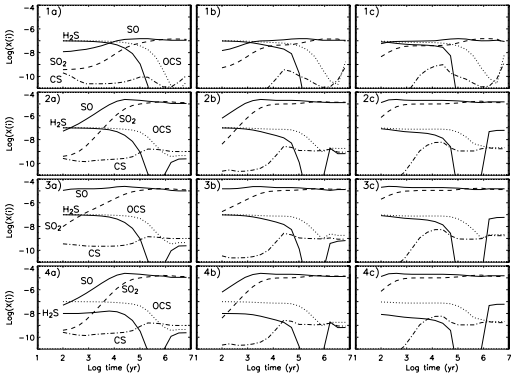

Fig. 4. Same as Fig. 3 but with a temperature of 300 K.

section, we give some sense of the major features of the chemistry of the sulphur-bearing species.

Figure 2 shows the evolution of the abundances of the SO_2, SO, H_2S, OCS and CS molecules, with respect to H_2, for the four models and three gas-phase compositions (with $T = 100$ K and $n(H_2) = 10^7$ cm^{-3}). There are clearly differences among the models, at times earlier than 10^4 yr, due to the different initial compositions whereas after 10^4 yr the three gas phase compositions give similar results. For example, for models 1, 2 and 4, the compositions B and C give lower SO and SO_2 abundances than the composition A at times earlier than 10^4 yr, whereas the three gas phase compositions give similar results for model 3. For sake of simplicity, in the following, we will discuss composition A, but the results do not change qualitatively assuming the B or C compositions.

Figures 3 and 4 show the evolution, at 100 K and 300 K respectively, of the abundances of the main S-bearing species for the four grain mantle compositions of Table 2 at the three different densities. In all the models depicted, SO and SO_2 are the most abundant species at late times. The final large amounts of SO_2 are more noticeable in models 2−4, where large amounts of gaseous sulphur are available. At a temperature of 100 K and a density between 10^6 and 10^7 cm^{-3}, the SO_2 molecule becomes more abundant than SO after 10^4−10^5 yr, mainly because of the neutral-neutral reaction O + SO → SO_2 + photon. Note that this radiative association reaction is critical because of the high abundance of atomic O in the pre-evaporative gas. At 300 K, the SO_2 molecule is formed less efficiently via this mechanism since it possesses an inverse dependence on temperature (see Table 3, reaction 756) but it is still as abundant as SO after 2×10^5 yr for a density of 10^5 cm^{-3}, and after 10^3 yr for a density of 10^7 cm^{-3} (see Fig. 4). At 300 K, OH is quickly ($\leq 10^2$ yr) formed through the reaction H_2 + O → OH + H so that SO_2 can be formed by the reaction OH + SO → SO_2 + H. Here, the presence of a large atomic oxygen abundance in the pre-evaporated gas-phase is crucial to produce the high abundance of OH at early times, contrary to what was found in previous models (e.g. Charnley 1997). In model 3, where the initial sulphur is mostly in S_2, the

SO molecule is very quickly ($\leq 10^2$ yr) formed, as S_2 directly leads to SO through the reaction $S_2 + O \rightarrow SO + S$.

Now, let us look at the chemistry of hydrogen sulphide, OCS, and CS. The initial H_2S abundance (see Table 2), dips sharply after 10^4 yr in all models but increases after 10^6 yr for models 2 to 4 at 300 K. The decrease of the H_2S abundance at 10^4 yr is produced by the attack on H_2S by H_3O^+, more abundant than H_3^+ in regions, such as hot cores, where water has a large abundance. The reaction between H_3O^+ and H_2S yields protonated hydrogen sulphide (H_3S^+), which dissociatively recombines with electrons to form HS at least part of the time: $H_3S^+ + e^- \rightarrow HS + H + H$. The HS product is itself depleted by the reaction $HS + O \rightarrow SO + H$. At 300 K, H_2S is efficiently formed at later times ($\geq 10^5$ yr) by a series of reactions that starts with the destruction by cosmic ray-induced photons of SO and SO^+ to produce atomic sulphur. Atomic sulphur is then hydrogenated into HS first, and then H_2S (with intermediate steps in which the unusual species HS_2^+, $H_3S_2^+$, HS_2 and $H_2S_2^+$ are formed). Note that at lower temperatures S is oxygenated rather than hydrogenated, whereas at 300 K atomic oxygen goes into water and, therefore, S can be hydrogenated eventually.

As in the case of H_2S, the initial (adopted) abundance of OCS is that derived from observations of this species in the solid state (see Sect. 2.1 and Table 2). Once in the gas phase, OCS is destroyed later than H_2S. Under some conditions, e.g. $T = 100$ K and $n(H_2) = 10^6$–10^7 cm^{-3}, this molecule maintains a sizable if reduced abundance. Actually, at $T = 100$ K and $n(H_2) = 10^6$–10^7 cm^{-3}, there is even a temporary increase in the OCS abundance from $\sim 10^{-7}$ to $\sim 10^{-6}$ (see Fig. 3). The OCS molecule is mostly formed by the radiative association reaction $CO + S \rightarrow OCS + PHOTON$ and this reaction is aided by the high density.

Unlike the other species, the CS molecule does not start on grain mantles in our calculations, but is part of the pre-evaporative gas. For composition A, its initial abundance is rather low. At 100 K, the initial CS is destroyed increasingly efficiently as density increases and its abundance never goes over 10^{-9}. At 300 K, CS is efficiently produced at high density after 10^3 yr and it can be as abundant as 10^{-8}. For compositions B and C, there is significantly more CS present initially, especially for composition B, which contains 50 times more CS than in composition A. The initial CS is more slowly destroyed using compositions B and C than using composition A under the conditions depicted in Fig. 2 for models 2 and 4.

3.2. Abundance ratios

Abundance ratios between sulphur-bearing species are exceedingly important because the use of fractional abundances ($X(i) = N(i)/N(H_2)$) as chemical clocks introduces an additional parameter in the analysis – the H_2 column density ($N(H_2)$) in the emitting region – which is rarely well constrained observationally. Moreover, the abundance ratios are less sensitive to the initial amount of sulphur species compared with absolute abundances. For example, an initial abundance of S or S_2 two times less than those used in model 2 or 3 does not change significantly the abundance ratios. This is why observed abundance ratios are typically used to put contraints on chemical models, when the two species trace the same region.

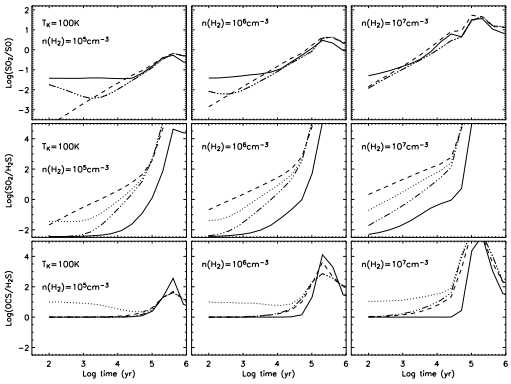

Fig. 5. Evolution of the abundance ratios SO_2/SO (*upper panels*), SO_2/H_2S (*middle panels*) and OCS/H_2S (*lower panels*) as functions of time for composition A, a gas temperature of 100 K, and densities of 10^5 cm^{-3} (*left panels*), 10^6 cm^{-3} (*central panels*) and 10^7 cm^{-3} (*right panels*). The solid, dashed-dotted, dashed, and dotted lines represent results from models 1, 2, 3, and 4, respectively. In the upper panels, the results of model 2 and 4 are the same and represented by dashed-dotted lines.

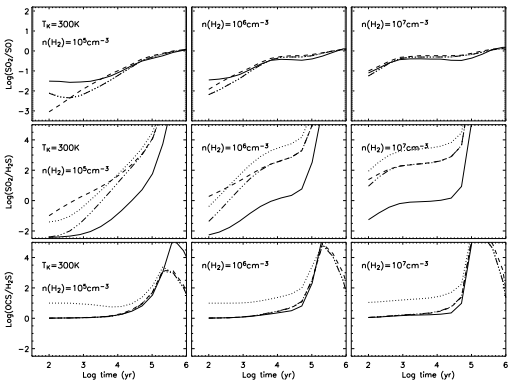

Fig. 6. Same as Fig. 5 but with a temperature of 300 K.

Figures 5 and 6 show the evolution of the abundance ratios SO_2/SO, SO_2/H_2S and OCS/H_2S, at 100 K and 300 K for three densities using composition A and all four models. The overall sense of these figures is that the computed ratios are more sensitive to the gas temperature, the density, and the (poorly known) form of sulphur in grain mantles than to the time (particularly for $t \leq 3\times10^4$ yr) or to the gas phase chemical history of the cloud. As a first step in quantifying the sensitivity of the studied abundance ratios to the different parameters, we report in Table 6 the maximum relative variation (MRV) for the three abundance ratios. These are obtained by changing the parameters time, temperature, density, model within the

Table 6. Maximum sensitivity of the abundance ratios to assorted parameters.

Ratio	Changing parameter	MRV	Set of parameter
SO_2/SO	Time	16	100 K, 10^7 cm^{-3}, Mod. 3
	Temperature	6	10^4 yr, 10^5 cm^{-3}, Mod. 4
	Density	125	10^4 yr, 100 K, Mod. 3
	Model	20	10^3 yr, 100 K, 10^5 cm^{-3}
SO_2/H_2S	Time	330	300 K, 10^5 cm^{-3}, Mod. 2
	Temperature	630	10^3 yr, 10^7 cm^{-3}, Mod. 4
	Density	5000	10^3 yr, 300 K, Mod. 4
	Model	3150	10^4 yr, 300 K, 10^7 cm^{-3}
OCS/H_2S	Time	6	100 K, 10^7 cm^{-3}, Mod. 2
	Temperature	3	10^4 yr, 10^7 cm^{-3}, Mod. 2
	Density	10	10^4 yr, 100 K, Mod. 2
	Model	30	10^4 yr, 100 K, 10^7 cm^{-3}

following considered ranges: time, 10^3–10^4 yr; temperature, 100–300 K; density, 10^5–10^7 cm^{-3}; grain mantle composition, models 1–4. The MRV is determined for each parameter by varying this parameter within the stated range while holding the others fixed at the set of values shown in Table 6. These sets lead to the strongest changes; hence the term "maximum relative variation". For example, the maximum variation of the SO_2/SO ratio produced by an increase of the time from 10^3 to 10^4 yr is 16 and it is obtained for a temperature of 100 K, a density of 10^7 cm^{-3} and model 3.

The SO_2/H_2S ratio shows the largest variations with time, but, unfortunately, also with differing physical conditions and mantle mixtures. Indeed the ratio is more sensitive to the latter parameters than to the time, for $t \leq 3\times10^4$ yr. The OCS/H_2S ratio is less sensitive to the different mantle mixtures and physical conditions, except at late times ($\geq10^5$ yr). Unfortunately, however, this ratio is not sensitive to the time at $t \leq 10^5$ yr either. The SO_2/SO ratio shows significant variations with respect to the different mantle compositions, and different densities and temperatures at relatively early times ($\leq10^4$ yr). These variations mask completely the dependence on the time, which is, anyway, moderate at 100 K with the exception of the high density case, and small at 300 K.

To gain an understanding of the sensitivities of these abundance ratios in addition to that obtained from the MRV analysis, we follow the variations of SO_2/SO, SO_2/H_2S and OCS/H_2S compared with reference ratios computed from model 2 at 10^3 yr for a temperature of 100 K and a density of 10^5 cm^{-3} (left panels of Fig. 5). The reference SO_2/SO ratio is $\sim5\times10^{-3}$ and increases by only a factor of 2 by 10^4 yr. However, a similar increase can also be due to an underestimate of the density by a factor of 10 (note that if $n_{H_2} = 10^7$ cm^{-3}, the SO_2/SO ratio increases by a factor of 20). Also, the reference SO_2/SO ratio at 10^3 yr varies by a factor of $\sim$20 depending on the adopted mantle mixture. The reference SO_2/H_2S ratio is 0.01 and increases by one order of magnitude at 10^4 yr. An increase in density (to 10^7 cm^{-3}) or in temperature (to 300 K) gives respectively a ratio of 0.3 or 0.1. The largest variation is seen if both the temperature and the density increase, so that the SO_2/H_2S ratio jumps to 160. A different mantle mixture leads to ratios between 3×10^{-3} and 0.3 (at the reference time). The reference OCS/H_2S ratio is 1 and shows little to no sensitivity to time until 10^4 yr, but also evinces little change with temperature, density and mantle composition, with the exception of model 4 which gives a ratio enhanced by a factor of $\sim$10 because the abundance of H_2S is 10 times less than in models 1, 2, and 3.

4. Discussion

4.1. Comparison with previous models

The most recent papers focussing on the detailed modelling of sulphur chemistry in hot cores are those of Charnley (1997) and Hatchell et al. (1998). The adopted chemistry is roughly the same in the two models, but they differ in the value of the activation energy barrier for the destruction of H_2S by atomic hydrogen ($H_2S + H \rightarrow HS + H_2$). In particular, Hatchell et al. used a value of 350 K while Charnley used a value of 850 K. Although there is some experimental support for a variety of choices, here we are using an energy barrier of 1350 K, based on the recent experiment by Peng et al. (1999) in the 300–600 K range. The difference in the activation energy barrier for the H_2S + H reaction causes significant variations in the models. While we obtain results similar to the Charnley model for 100 K, H_2S destruction occurs at later times in our model for $T = 300$ K. Moreover, the high value of the energy barrier has significant consequences on the SO and SO_2 abundances of our model with respect to the above two models. For example at 10^4 yr, our model predicts SO and SO_2 abundances 6 and 30 times lower than Charnley's model, using the same parameters and initial conditions. Overall, and in addition to this, our results are different from these two models primarily because we are assuming different initial gas phase and/or mantle compositions. As already noted (in Sect. 3.1), the large atomic oxygen abundance is, for example, an important difference in the pre-evaporated gas phase composition. Another difference is that both Charnley and Hatchell et al. assume that the bulk of sulphur in the ice mantle is in the H_2S form. Our model 1 adopts a similar mantle mixture, with solid-phase OCS as abundant as H_2S, whereas models 2, 3 and 4 assume that the bulk of the sulphur lies in the S or S_2 forms. These two classes of models give very different results, as widely discussed in Sect. 3.

Actually, a novelty of this work is the consideration that the sulphur can be in the atomic or molecular form when evaporated from the grain mantles. However, we should emphasize that atomic S is very quickly locked into SO and SO_2 molecules, so that we do not expect large atomic S quantities in the gas phase for a long time. For example, for a gas at 300 K and 10^7 cm^{-3}, the S abundance decreases from 3×10^{-5} to 1.5×10^{-9} in 10^3 yr by reacting with O_2 to form SO. This explains why van der Tak et al. (2003) did

not detect atomic sulphur[1] in the hot core region of the massive protostars that they studied, where the gas temperature and density are similar to those quoted above. In a slightly colder gas (~100 K), atomic S would survive longer, but it would be very difficult to detect. In fact the intensity of the SI fine structure line at 25.249 μm is 1×10^{-12} erg s^{-1} cm^{-2}, for a gas at 100 K and 10^7 cm^{-3}, a source size of 2″, an H_2 column density of 10^{23} cm^{-2}, and all the sulphur in atomic form (as our models 2 and 4 adopt). The signal would be attenuated by the foreground dust of the cold envelope, whose H_2 column density is also around 10^{23} cm^{-2}, by about a factor of ten (using the extinction curves in Draine 2003) putting the signal at the limit of the ISO-SWS detection (a typical rms is few times 10^{-13} erg s^{-1} cm^{-2}). Future investigations in the ISO database will be done in order to check the possible presence of atomique sulphur in hot cores.

Hatchell et al. (1998) found the cosmic ray rate to be an important parameter changing the timescales of the destruction of H_2S and the formation of SO and SO_2. The standard value usually assumed is 1.3×10^{-17} s^{-1} but there are some indications that it can vary depending on the region (see van der Tak & van Dishoeck 2000). To check the dependence on ionization rate whether or not it can pertain to objects as dense as hot cores, we have run the models for three different cosmic ray ionization rates: 1.3×10^{-17}, 1.3×10^{-16} and 1.3×10^{-15} s^{-1}. The results for the S-bearing abundance ratios do not strongly depend on this parameter at a density of 10^5 cm^{-3}. At higher densities, however, an increase in the cosmic ray ionization rate speeds up the photodestruction of OCS, H_2S and SO_2 via cosmic ray-induced photons. For a cosmic ray ionization rate of 1.3×10^{-15} s^{-1}, a temperature of 100 K and a density of 10^7 cm^{-3}, the abundances of H_2S and OCS start to decrease before 10^3 yr and the maximum abundance of SO_2 is 4.5×10^{-8} instead of 2×10^{-7} with model 1 and composition A. Hence, as Hatchell et al. (1998), we found that the adopted value of the cosmic ray rate may be an important parameter at high density whereas it has weak consequences on the results at lower densities.

Recently, Nomura & Millar (2004) reported a study of the chemical composition across the envelope of the massive protostar G24.3+0.15. In this study, they derived the density and temperature profile and computed the chemical composition of the gas as a function of the radius and time. Evidently, the Nomura & Millar (2004) model is more complete than ours in dealing with the physical structure of the protostar, for this is the focus of their model. On the other hand, given its complexity, the model does not explore the robustness of the achieved results as a function of the necessary assumptions of the model itself, which is, on the contrary, the focus of our study. In the same way, Doty et al. (2002) studied the chemical composition across the envelope of the massive protostar AFGL 2591. Finally, a further degree of complexity has been added to the problem by Rodgers & Charnley (2003), who considered the evolution of a protostar, including the evolution of the thermal and physical structure of the envelope plus the chemical evolution. As in the previous case, the advantage of having a better description of the protostar comes along with the disadvantage of a lack of exploration of the robustness of the results as a function of the chemical network utilized. In these three models, the authors assumed that sulphur was only evaporated from the grains mantles in the OCS and H_2S forms for Nomura & Millar (2004) and only in the H_2S form for Doty et al. (2002) and Rodgers & Charnley (2003). We have discussed above the problem with the assumption that sulphur is totally frozen onto OCS and H_2S, and showed that the resulting S-bearing abundances depend dramatically on this assumption. The conclusion is the same if considering a model where sulphur is only in H_2S (as discussed at the end of Sect. 4.2). It comes as no surprise, therefore, that our results are different from those of these more detailed approaches.

4.2. Comparison with observations

In the following, we consider the case of two well studied hot cores: the massive Orion KL and the low mass IRAS 16293-2422 hot cores. Orion KL is a complex region where several energetic phenomena are present. High resolution, interferometric observations have shown that different molecules originate in different components, especially for the OCS, SO and SO_2 molecules (e.g., Wright et al. 1996). It is evidently a very crude approximation to attribute all the S-molecule emission to the hot core, but lacking a better understanding of the region we will try to compare the observed abundances with our model predictions. First, in order to minimise the number of parameters, we will compare available observations with computed abundance ratios. The SO, SO_2, H_2S and OCS column densities have been derived by Schilke et al. (2001) and Sutton et al. (1995) to be 2.3×10^{17}, 6×10^{16}, 1.2×10^{16} cm^{-2} and 9×10^{15} cm^{-2}, respectively. All these column densities are beam-averaged, with a beam of ~10″. For simplicity, we will assume that the emission originates in the hot core region with $T = 200$ K and $n(H_2) = 10^7$ cm^{-3} (Wright et al. 1992). The comparison of the abundance ratios derived from the above column densities with our model predictions shows that none of the four models of Sect. 2.1 reproduces the observed data. However, the ratios can be reproduced by a model similar to model 2, where the initial abundance of atomic sulphur injected into the gas phase is 3×10^{-6}, i.e. ten times lower than the abundance used in model 2. We will call this model model 2′. In that case, we obtain a good agreement between the model and the observations and derive an age of 4×10^3 yr. Assuming the emission region extends about 10″ and an H_2 column density of 8×10^{23} cm^{-2} (Sutton et al. 1995), the observed abundances of SO, SO_2, H_2S and OCS are reproduced to within a factor of 10. On the contrary, the CS abundance is underestimated by three orders of magnitude by our model, probably because CS emission does not originate in the hot core. Note that, given the complexity of the region, a

[1] van der Tak et al. (2003) argued that the non detection of the 25 μm line corresponds to an upper limit to the atomic sulphur of $\leq 5 \times 10^{-8}$, computed by considering line absorption. Indeed, this is an upper limit on the S abundance in the absorbing gas, i.e. the foreground cold gas, rather than the hot gas. The upper limit on the emitting hot core gas is much higher, as explained in the text.

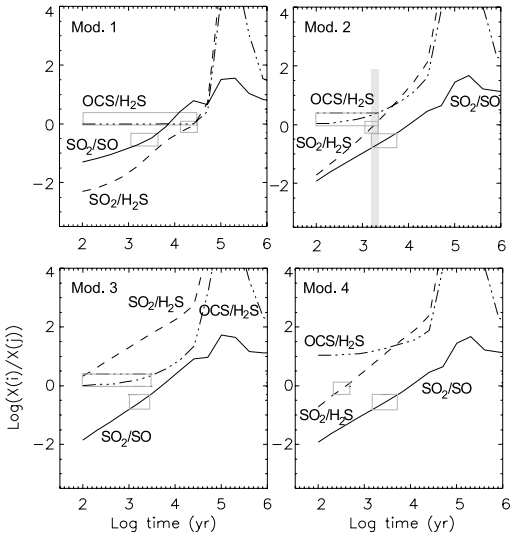

Fig. 7. Comparison between the observed ratios SO_2/SO, SO_2/H_2S and OCS/H_2S towards IRAS 16293-2422 and the theoretical predictions of four models (Mod. 1, 2, 3 and 4; all with composition A) for a gas temperature of 100 K and a density of 10^7 cm^{-3}. The grey empty boxes, if shown, represent those instances in which particular calculated ratios are in agreement for a range of times with the observed ones taking into account the uncertainties in the observations. The grey filled box for model 2 shows the time interval where all calculated ratios are in agreement with the observed ones.

better analysis would require an understanding of the H_2 column density associated with the S-bearing molecules.

In the case of the low-mass protostar IRAS 16293-2422, multifrequency observations of H_2S, OCS, SO and SO_2 have been reported and analyzed by sophisticated models, which take into account the density and temperature structure of the source, as well as the abundance profile of each studied molecule (Schöier et al. 2002; Wakelam et al. 2004). Both Schöier et al. (2002) and Wakelam et al. (2004) found the following abundance ratios in the inner warm region where the dust mantles evaporate (Ceccarelli et al. 2000a): SO_2/SO = 0.3, SO_2/H_2S = 1 and OCS/H_2S = 1.9.

The modelling of the density and temperature profiles of IRAS 16293-2422, by Ceccarelli et al. (2000a), suggests a density of 10^7 cm^{-3} and a temperature of 100 K in the hot core region. Figure 7 shows the comparison between the observed and predicted ratios (assuming composition A) for the four models: only model 2 reproduces the observations, suggesting an age of $\sim 2 \times 10^3$ yr for the protostar. To check the robustness of this result, we also tried a variety of intermediate mantle mixtures, between model 2 and model 3, with the following characteristics: (1) one-half of the initial mantle sulphur in atomic form and one-half in the form of S_2; (2) one-quarter in S and three-quarters in S_2; (3) three-quarters in S and one-quarter in S_2. In all three intermediate cases, the resulting curves are very similar to those found for model 3. The presence of molecular sulphur clearly determines the form of the curves and is inconsistent with these observations. The observed ratios are, however, well reproduced by model 2′ (used for the comparison with Orion) giving an age, $\sim 3\times10^3$ yr, very similar to the age derived by model 2. Finally, both model 2 and model 2′ predict fractional abundances at the optimum times in good agreement (within a factor of 5−10) with those observed, as reported in Table 7. Note that the CS abundance towards IRAS 16293-2422 has not been derived (Schöier et al. 2002; Wakelam et al. 2004) and that the abundances of the main S-bearing species predicted by model 2 and 2′ are very similar until 10^4 yr. This comparison suggests that the majority of the sulphur is released into the gas phase in its atomic form or quickly ($t \leq 10^3$ yr) converted to it, and that the abundance of the H_2S molecule injected in the gas phase from the grains mantles cannot be much less than 10^{-7}.

Table 7. Observed and modelled abundances of SO, SO_2, H_2S, OCS and CS towards the IRAS 16293-2422 hot core.

Species	observed	model 2	model 2′
SO	1.7×10^{-6}	5×10^{-7}	4×10^{-7}
SO_2	5.4×10^{-7}	10^{-7}	10^{-7}
H_2S	5.3×10^{-7}	10^{-7}	10^{-7}
OCS	1×10^{-6}	2×10^{-7}	10^{-7}
CS	–	1×10^{-11}	2×10^{-12}

The age determined for IRAS 16293-2422 is relatively short compared with the previous estimates ($\sim 10^4$ yr) (Ceccarelli et al. 2000b; Maret et al. 2002; Wakelam et al. 2004). However, our newly determined age represents only the time from the evaporation of the mantles; the dynamical time needed to reach the required luminosity to form the observed hot core is an additional $\sim 3 \times 10^4$ yr.

The discussion of the best chemical age for IRAS 16293-2422 is based on models with the standard value of the cosmic ray ionization rate (1.3×10^{-17} s^{-1}). If we use a rate 10 times higher as suggested by Doty et al. (2004), the observations towards IRAS 16293-2422 are no longer in agreement with model 2, but with model 1, although the derived age is very similar. Indeed, the enhanced cosmic ray ionization rate speeds up the destruction of H_2S, increasing the ratio SO_2/H_2S more rapidly without affecting significantly the other ones. Consequently, the SO_2/H_2S curves in Fig. 7 are shifted to the right of the figures, worsening the agreement with model 2 but improving it with model 1. In that case, the derived age is 5×10^3 yr and the predicted absolute abundances are between 15 and 20 less than the observed ones, however. Thus, a high cosmic ray ionization rate is no longer compatible with our hypothesis that mantle evaporation leads quickly to high gas-phase abundances of atomic sulphur. The high cosmic ray ionization rate has also a consequence on the O_2 abundance pedicted to be $\sim 10^{-6}$ at 10^3 yr with model 1 whereas it is predicted to be two orders of magnitude lower with the standard value of the cosmic ray ionization rate and model 2. However, at present one cannot choose between the

two conditions (large abundances of S in the gas phase or large cosmic-ray ionization rate). High sensitivity observations of atomic sulphur (see Sect. 4.1) are needed to put stringent constraints on chemical models.

Another way to confirm our hypothesis of a large initial abundance of atomic sulfur would be a careful study involving several other protostars at different stages of evolution. The strongest prediction of our models 2 to 4 is the large ($\gtrsim 10^{-5}$) amount of SO_2 at late times, compared with models that start with little sulphur evaporated from the grains. There is some evidence for SO_2 abundances in high-mass hot cores as large as 10^{-6} (van der Tak et al. 2003), suggesting that an initial amount of sulphur at least higher than 10^{-6} is needed. But our prediction of large SO_2 abundances in more evolved hot cores with ages larger than $\sim 10^5$ yr, does not pertain to the Orion and IRAS 16293-2422 hot cores (as found in the present work).

Quantitative comparisons with observations of other hot cores reported in the literature, such as the observations by Hatchell et al. (1998) and Buckle & Fuller (2003), are difficult to carry out since the abundances determined by these authors are averages along the line of sight and beam-averaged. Hence, their analyses do not take into account the physical structure of the source. Finally, van der Tak et al. (2003) report the study of the S-bearing molecular abundance in half a dozen massive protostars. In this case, an attempt to disentangle the outer envelope and inner core has been done, but the analysis is not accurate enough to derive abundance ratios to compare with detailed model predictions; rather, the authors just give order-of-magnitude jumps of abundance in the inner hot core regions. van der Tak et al. (2003) compared the measured abundances with the model predictions by Doty et al. (2002), and argued that OCS is the main sulphur bearing molecules on the mantles, because its predicted abundance is otherwise too low. We ran a model where sulphur is in solid OCS, to test this suggestion, and we found that it leads to results very similar to those of model 1 (where sulphur is evaporated from the grain mantles in the H_2S and OCS forms), because OCS has almost the same chemical behavior as H_2S. Although OCS is destroyed at later times, the differences in the SO and SO_2 formation are not significant and the same discussion about model 1 is valid.

5. Conclusions

We have studied in detail the influence of the mantle form of sulphur on the post-evaporative gas-phase abundances of S-bearing molecules in hot star-forming regions, with the goal of understanding whether those molecules can be used to estimate ages. We considered four different reasonable mantle mixtures, from which gas-phase H_2S, OCS, S and S_2 emerge after a process of evaporation and, for the last two species, possible rapid reaction, with different relative abundances, joining other species in the gas-phase prior to evaporation. We then followed the post-evaporative chemical evolution, with an emphasis on the abundance ratios of the main sulphur-bearing species for realistic physical conditions present in hot cores. Our results show that none of the ratios involving the four most abundant S-bearing molecules, namely H_2S, OCS, SO and SO_2, can be easily used by itself for estimating the age, because the ratios depend at least as strongly on the physical conditions and on the adopted grain mantle composition as on the time. Also, the abundance of atomic oxygen in the gas phase, if not correctly accounted for, can seriously affect the chemistry. The situation, however, is not totally hopeless, because a careful comparison between observations and model predictions can give some useful hints on time estimates, and on the mantle composition. Such a careful analysis has to be done on each single source, however, for both the physical conditions and mantle composition can vary from source to source, so that the abundance ratios are not directly comparable. In practice, a careful derivation of the molecular abundances (which takes into account the source structure) coupled with a careful modeling of the chemistry at the right gas temperature and density is necessary.

We applied our model to two well studied hot cores: Orion KL and IRAS 16293. For the S-bearing abundances towards Orion KL, we assumed that their emission arises from the hot core region (which is strongly debatable) and is not beam-diluted. We were not able to reproduce all of the observed abundances ratios with any of our models. The agreement with model 2 is satisfactory if we decrease the initial amout of atomic sulphur by a factor of 10. In that case, we derive a best age of 4×10^3 yr. However, the predicted abundance of CS is three orders of magnitude lower than the observed one. Contrary to the case of Orion KL, the sulphur-bearing abundances though the low mass hot core of IRAS 16293-2422 have been carefully determined through a sophisticated model (Schöier et al. 2002), which takes into account the density and temperature structure of the source, as well as the abundance profile of each studied molecule. Using the standard value of cosmic ray rate, we found that model 2, in which a large amount of atomic sulphur is initially present in the post-evaporative gas, best reproduces the observed abundance ratios. In that case, we derived an age of $\sim 2 \times 10^3$ yr from the evaporation era to the current stage of this particular low mass hot core. If we decrease the initial amount of atomic sulphur in model 2 as for Orion KL, the agreement is still good and gives a similar age. This analysis favors the hypothesis that sulphur is mainly evaporated from the grains in the atomic form or in a form quickly converted into it. On the contrary, if a higher rate is used as suggested by the recent modelling of Doty et al. (2004), best agreement occurs with model 1, where no atomic sulphur can be found in the grain mantle and only H_2S and OCS are initially present. The strongest prediction of our atomic sulfur-rich model is the presence of large abundances of SO_2, derived from this form of sulfur, at late stages of hot cores. A futher systematic study of S-bearing-species towards older hot cores where the physical structure is well known would provide information to test this model. Moreover, the fact that not all of the sulfur need be initially in atomic form, given the reasonable agreement obtained using model 2′, suggests that a significant portion of the granular elemental sulphur may be tied up in materials such as iron sulphide (Keller et al. 2002).

Acknowledgements. V.W. wishes to thank Franck Selsis for helpful discussions on chemical modelling and uncertainties. V.W., C.C. and A.C. acknowledge support from PCMI. P.C. acknowledges support from the MIUR grant “Dust and molecules in astrophysical environments”, and the ASI grant (contract I/R/044/02).

E.H. acknowledges the support of the National Science Foundation (US) for his research program in astrochemistry. The authors are grateful to Brunella Nisini and Malcolm Walmsley for useful discussions.

References

Aikawa, Y., Herbst, E., & Dzegilenko, F. N. 1999, ApJ, 527, 262
Baluteau, J.-P., Cox, P., Cernicharo, J., et al. 1997, A&A, 322, L33
Bergin, E. A., Kaufman, M. J., Melnick, G. J., Snell, R. L., & Howe, J. E. 2003, ApJ, 582, 830
Boogert, A. C. A., Helmich, F. P., van Dishoeck, E. F., et al. 1998, A&A, 336, 352
Boogert, A. C. A., Tielens, A. G. G. M., Ceccarelli, C., et al. 2000, A&A, 360, 683
Brown, P. D., Charnley, S. B., & Millar, T. J. 1988, MNRAS, 231, 409
Buckle, J. V., & Fuller, G. A. 2003, A&A, 399, 567
Cardelli, J. A., Meyer, D. M., Jura, M., & Savage, B. D. 1996, ApJ, 467, 334
Caselli, P., Hasegawa, T. I., & Herbst, E. 1993, ApJ, 408, 548
Caselli, P., Hasegawa, T. I., & Herbst, E. 1994, ApJ, 421, 206
Caux, E., Ceccarelli, C., Castets, A., et al. 1999, A&A, 347, L1
Ceccarelli, C., Hollenbach, D. J., & Tielens, A. G. G. M. 1996, ApJ, 471, 400
Ceccarelli, C., Castets, A., Caux, E., et al. 2000a, A&A, 355, 1129
Ceccarelli, C., Loinard, L., Castets, A., Tielens, A. G. G. M., & Caux, E. 2000b, A&A, 357, L9
Charnley, S. B. 1997, ApJ, 481, 396
Charnley, S. B., Tielens, A. G. G. M., & Millar, T. J. 1992, ApJ, 399, L71
Charnley, S. B., Rodgers, S. D., & Ehrenfreund, P. 2001, A&A, 378, 1024
Chiar, J. E., Adamson, A. J., & Whittet, D. C. B. 1996, ApJ, 472, 665
Dickens, J. E., Irvine, W. M., Snell, R. L., et al. 2000, ApJ, 542, 870
Doty, S. D., van Dishoeck, E. F., van der Tak, F. F. S., & Boonman, A. M. S. 2002, A&A, 389, 446
Doty, S. D., Schöier, F. L., & van Dishoeck, E. F. 2004, A&A, 418, 1021
Draine, B. T. 2003, ARA&A, 41, 241
Gerakines, P. A., Whittet, D. C. B., Ehrenfreund, P., et al. 1999, ApJ, 522, 357
Gibb, E. L., Whittet, D. C. B., Schutte, W. A., et al. 2000, ApJ, 536, 347
Hartquist, T. W., Dalgarno, A., & Oppenheimer, M. 1980, ApJ, 236, 182
Hasegawa, T. I., & Herbst, E. 1993, MNRAS, 261, 83
Hasegawa, T. I., Herbst, E., & Leung, C. M. 1992, ApJS, 82, 167
Hatchell, J., Thompson, M. A., Millar, T. J., & MacDonald, G. H. 1998, A&A, 338, 713
Hollenbach, D., & McKee, C. F. 1979, ApJS, 41, 555
Keane, J. V., Tielens, A. G. G. M., Boogert, A. C. A., Schutte, W. A., & Whittet, D. C. B. 2001, A&A, 376, 254
Keller, L. P., Hony, S., Bradley, J. P., et al. 2002, Nature, 417, 148
Lee, H.-H., Bettens, R. P. A., & Herbst, E. 1996, A&AS, 119, 111
Lis, D. C., Keene, J., Phillips, T. G., et al. 2001, ApJ, 561, 823
Maret, S., Ceccarelli, C., Caux, E., Tielens, A. G. G. M., & Castets, A. 2002, A&A, 395, 573
Meyer, D. M., Jura, M., & Cardelli, J. A. 1998, ApJ, 493, 222
Millar, T. J., Farquhar, P. R. A., & Willacy, K. 1997a, A&AS, 121, 139
Millar, T. J., MacDonald, G. H., & Gibb, A. G. 1997b, A&A, 325, 1163
Nomura, H., & Millar, T. J. 2004, A&A, 414, 409
Pagani, L., Olofsson, A. O. H., Bergman, P., et al. 2003, A&A, 402, L77
Palumbo, M. E., Geballe, T. R., & Tielens, A. G. G. M. 1997, ApJ, 479, 839
Peng, J., Hu, X., & Marshall, P. 1999, J. Phys. Chem., 103, 5307
Pineau Des Forêts, G., Roueff, E., Schilke, P., & Flower, D. R. 1993, MNRAS, 262, 915
Rodgers, S. D., & Charnley, S. B. 2003, ApJ, 585, 355
Ruffle, D. P., Hartquist, T. W., Caselli, P., & Williams, D. A. 1999, MNRAS, 306, 691
Ruffle, D. P., Rae, J. G. L., Pilling, M. J., Hartquist, T. W., & Herbst, E. 2002, A&A, 381, L13
Scappini, F., Cecchi-Pestellini, C., Smith, H., Klemperer, W., & Dalgarno, A. 2003, MNRAS, 341, 657
Schilke, P., Benford, D. J., Hunter, T. R., Lis, D. C., & Phillips, T. G. 2001, ApJS, 132, 281
Schöier, F. L., Jorgensen, J. K., van Dishoeck, E. F., & Blake, G. A. 2002, A&A, 390, 1001
Schutte, W. A., Tielens, A. G. G. M., Whittet, D. C. B., et al. 1996, A&A, 315, L333
Sofia, U. J., Cardelli, J. A., & Savage, B. D. 1994, ApJ, 430, 650
Sutton, E. C., Peng, R., Danchi, W. C., et al. 1995, ApJS, 97, 455
Tieftrunk, A., Pineau Des Forets, G., Schilke, P., & Walmsley, C. M. 1994, A&A, 289, 579
van der Tak, F. F. S., Boonman, A. M. S., Braakman, R., & van Dishoeck, E. F. 2003, A&A, 412, 133
van der Tak, F. F. S., & van Dishoeck, E. F. 2000, A&A, 358, L79
van Dishoeck, E. F., & Blake, G. A. 1998, ARA&A, 36, 317
Vastel, C., Polehampton, E. T., Baluteau, J.-P., et al. 2002, ApJ, 581, 315
Viti, S., & Williams, D. A. 1999, MNRAS, 305, 755
Wakelam, V., Castets, A., Ceccarelli, C., et al. 2004, A&A, 413, 609
Wright, M., Sandell, G., Wilner, D. J., & Plambeck, R. L. 1992, ApJ, 393, 225
Wright, M. C. H., Plambeck, R. L., & Wilner, D. J. 1996, ApJ, 469, 216

Online Material

Table 3. List of the reactions important for the chemistry of the SO, SO_2, OCS, H_2S and CS molecules for a temperature of 100 K and a density of 10^7 cm^{-3} with initial composition A.

Number	Reaction[1]	α	β	γ	Mod. 1	Mod. 2	Mod. 3	Mod. 4
89	$H_2 + CRP \rightarrow H^+ + H + e^-$	2.860e-19	0.00	0.00			•	
90	$H_2 + CRP \rightarrow H_2^+ + e^-$				•	•	•	•
91	$He + CRP \rightarrow He^+ + e^-$				•	•	•	•
100	$CH_4 + CRPHOT \rightarrow CH_2 + H_2$	6.08e-14	0.00	0.00		•	•	•
106	$H_2O + CRPHOT \rightarrow OH + H$	2.52e-14	0.00	0.00	•	•	•	•
117	$S + CRPHOT \rightarrow S^+ + e^-$	2.49e-14	0.00	0.00		•		•
119	$H_2S + CRPHOT \rightarrow S + H_2$	1.34e-13	0.00	0.00	•	•	•	
120	$H_2S + CRPHOT \rightarrow H_2S^+ + e^-$	4.41e-14	0.00	0.00	•		•	
125	$SO + CRPHOT \rightarrow SO^+ + e^-$	1.30e-14	0.00	0.00			•	
127	$OCS + CRPHOT \rightarrow S + CO$	1.39e-13	0.00	0.00	•			
128	$OCS + CRPHOT \rightarrow OCS^+ + e^-$	3.76e-14	0.00	0.00	•	•	•	•
167	$C + SO \rightarrow CS + O$	3.50e-11	0.00	0.00		•	•	•
168	$C + SO_2 \rightarrow CO + SO$						•	
176	$CH_2 + S \rightarrow CS + H_2$					•		•
191	$O + CS \rightarrow CO + S$	1.94e-11	0.00	231.00	•	•	•	•
207	$O_2 + S \rightarrow SO + O$	2.30e-12	0.00	0.00	•			
269	$H_3^+ + O \rightarrow OH^+ + H_2$				•	•	•	•
271	$H_3^+ + H_2O \rightarrow H_3O^+ + H_2$	4.50e-09	−0.50	0.00	•	•	•	•
276	$H_3^+ + CH_4O \rightarrow CH_3^+ + H_2O + H_2$	1.80e-09	−0.50	0.00		•	•	•
279	$H_3^+ + S \rightarrow HS^+ + H_2$					•	•	•
285	$H_3^+ + SO \rightarrow HSO^+ + H_2$	8.40e-09	−0.50	0.00			•	
286	$H_3^+ + OCS \rightarrow HOCS^+ + H_2$	3.80e-09	−0.50	0.00	•	•	•	•
308	$He^+ + H_2O \rightarrow OH + He + H^+$	1.32e-09	−0.50	0.00		•	•	•
310	$He^+ + CO \rightarrow O + C^+ + He$	5.50e-10	−0.50	0.00		•	•	•
316	$He^+ + CH_4O \rightarrow CH_3^+ + OH + He$	1.70e-09	−0.50	0.00			•	
333	$He^+ + OCS \rightarrow CS + O^+ + He$	8.40e-10	−0.50	0.00	•			
436	$CH_3^+ + O \rightarrow HCO^+ + H_2$	2.05e-10	0.00	0.00			•	
437	$CH_3^+ + O \rightarrow HOC^+ + H_2$						•	
447	$CH_3^+ + SO \rightarrow HOCS^+ + H_2$	4.20e-09	−0.50	0.00			•	
459	$CH_4 + S^+ \rightarrow H_3CS^+ + H$	1.40e-10	0.00	0.00		•	•	•
504	$O + HS^+ \rightarrow S^+ + OH$					•	•	•
505	$O + HS^+ \rightarrow SO^+ + H$					•	•	•
506	$O + H_2S^+ \rightarrow HS^+ + OH$					•	•	•
507	$O + H_2S^+ \rightarrow SO^+ + H_2$					•	•	•
537	$H_2O + HCO^+ \rightarrow CO + H_3O^+$	2.10e-09	−0.50	0.00	•	•		•
539	$H_2O + HS^+ \rightarrow S + H_3O^+$					•	•	•
540	$H_2O + H_2S^+ \rightarrow HS + H_3O^+$	7.00e-10	0.00	0.00		•	•	•
550	$H_2O^+ + H_2S \rightarrow H_3S^+ + OH$	7.00e-10	0.00	0.00				•
552	$H_3O^+ + H_2CO \rightarrow H_3CO^+ + H_2O$	2.60e-09	−0.50	0.00	•	•	•	•
553	$H_3O^+ + CH_4O \rightarrow CH_5O^+ + H_2O$				•	•	•	•
556	$H_3O^+ + H_2S \rightarrow H_3S^+ + H_2O$				•	•	•	•
579	$HCO^+ + OCS \rightarrow HOCS^+ + CO$	1.50e-09	−0.50	0.00	•	•		•
585	$H_2CO + S^+ \rightarrow H_2S^+ + CO$	1.10e-09	−0.50	0.00		•	•	•
586	$H_2CO + S^+ \rightarrow HCO^+ + HS$	1.10e-09	−0.50	0.00		•	•	•
587	$H_2CO + H_3S^+ \rightarrow H_3CO^+ + H_2S$				•	•	•	

Table 3. continued.

Number	Reaction[1]	α	β	γ	Mod. 1	Mod. 2	Mod. 3	Mod. 4
595	$S + H_3S^+ \rightarrow H_2S_2^+ + H$					•	•	
597	$S^+ + H_2S \rightarrow S_2^+ + H_2$	6.40e-10	−0.50	0.00		•	•	
603	$H_2S + SO^+ \rightarrow S_2^+ + H_2O$	1.10e-09	0.00	0.00		•	•	•
614	$H^+ + H_2O \rightarrow H_2O^+ + H$	7.30e-09	−0.50	0.00			•	
624	$H^+ + SO \rightarrow SO^+ + H$	1.40e-08	−0.50	0.00			•	
739	$S + HS^+ \rightarrow HS + S^+$					•		•
740	$S + H_2S^+ \rightarrow H_2S + S^+$					•	•	•
751	$H_2 + CH_3^+ \rightarrow CH_5^+ + PHOTON$						•	
756	$O + SO \rightarrow SO_2 + PHOTON$	3.20e-16	−1.60	0.00	•	•	•	•
757	$CO + S \rightarrow OCS + PHOTON$				•	•	•	•
789	$H_3O^+ + e^- \rightarrow OH + H + H$					•		•
798	$H_3CO^+ + e^- \rightarrow CO + H + H_2$					•	•	•
799	$H_3CO^+ + e^- \rightarrow HCO + H + H$					•	•	•
800	$H_3CO^+ + e^- \rightarrow H_2CO + H$					•		•
803	$CH_5O^+ + e^- \rightarrow CH_4O + H$					•	•	
804	$CH_5O^+ + e^- \rightarrow H_2CO + H_2 + H$					•	•	
812	$H_3S^+ + e^- \rightarrow HS + H + H$	1.00e-07	−0.50	0.00	•			
818	$H_3CS^+ + e^- \rightarrow CS + H_2 + H$					•		•
819	$H_3CS^+ + e^- \rightarrow H_2CS + H$					•		•
820	$SO^+ + e^- \rightarrow S + O$					•	•	•
821	$HSO^+ + e^- \rightarrow SO + H$						•	
822	$OCS^+ + e^- \rightarrow CO + S$	3.00e-07	0.00	0.00		•	•	•
823	$OCS^+ + e^- \rightarrow CS + O$					•	•	•
824	$HOCS^+ + e^- \rightarrow CS + OH$				•	•	•	•
825	$HOCS^+ + e^- \rightarrow OCS + H$				•	•	•	•

[1] Only rate coefficients that differ by more than 10 percent from the UMIST value are included.

Table 4. Additional important reactions for a perturbation amplitude of 1.0, for model 2 and Composition A.

Number	Reaction[a]	α	β	γ
168	$C + SO_2 \rightarrow CO + SO$			
173	$CH_2 + O \rightarrow CO + H + H$	1.20e-10	0.00	0.00
308	$He^+ + H_2O \rightarrow OH + He + H^+$	1.32e-09	−0.50	0.00
309	$He^+ + H_2O \rightarrow OH^+ + He + H$	1.32e-09	−0.50	0.00
333	$He^+ + OCS \rightarrow CS + O^+ + He$	8.40e-10	−0.50	0.00
360	$C^+ + H_2O \rightarrow HOC^+ + H$	1.80e-09	−0.50	0.00
444	$CH_3^+ + S \rightarrow HCS^+ + H_2$			
447	$CH_3^+ + SO \rightarrow HOCS^+ + H_2$	4.20e-09	−0.50	0.00
459	$CH_4 + S^+ \rightarrow H_3CS^+ + H$	1.40e-10	0.00	0.00
509	$O + HCS^+ \rightarrow S + HCO^+$	5.00e-10	0.00	0.00
510	$O + HCS^+ \rightarrow OCS^+ + H$	5.00e-10	0.00	0.00
552	$H_3O^+ + H_2CO \rightarrow H_3CO^+ + H_2O$	2.60e-09	−0.50	0.00
553	$H_3O^+ + CH_4O \rightarrow CH_5O^+ + H_2O$			
646	$He^+ + H_2O \rightarrow H_2O^+ + He$	1.32e-09	−0.50	0.00
663	$C^+ + S \rightarrow S^+ + C$			

[a] Only rate coefficients that differ by more than 10 percent from the UMIST value are included.

Table 5. Additional important reactions at 200 K, for model 2 and Composition A.

Number	Reaction[a]	α	β	γ
107	$CO + CRPHOT \rightarrow O + C$	1.30e-16	0.00	0.00
125	$SO + CRPHOT \rightarrow SO^+ + e^-$	1.30e-14	0.00	0.00
153	$H_2 + O \rightarrow OH + H$			
154	$H_2 + OH \rightarrow H_2O + H$	8.40e-13	0.00	1040
166	$C + SO \rightarrow S + CO$	3.50e-11	0.00	0
173	$CH_2 + O \rightarrow CO + H + H$	1.20e-10	0.00	0
186	$O + OH \rightarrow O_2 + H$			
190	$O + H_2S \rightarrow HS + OH$	9.22e-12	0.00	1800
204	$OH + SO \rightarrow SO_2 + H$			
309	$He^+ + H_2O \rightarrow OH^+ + He + H$	1.32e-09	−0.50	0.00
360	$C^+ + H_2O \rightarrow HOC^+ + H$	1.80e-09	−0.50	0.00
436	$CH_3^+ + O \rightarrow HCO^+ + H_2$	2.05e-10	0.00	0.00
437	$CH_3^+ + O \rightarrow HOC^+ + H_2$			
646	$He^+ + H_2O \rightarrow H_2O^+ + He$	1.32e-09	−0.50	0.00
663	$C^+ + S \rightarrow S^+ + C$			

[a] Only rate coefficients that differ by more than 10 percent from the UMIST value are included.

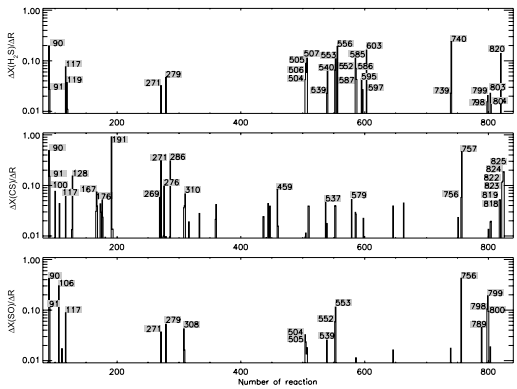

Fig. 1. The "variation" ΔX (see text) of the abundances of SO, H_2S, and CS divided by the amplitude ($\Delta R = 0.1$) of the perturbation of the rate coefficients plotted for reactions with number between 86 and 834; i.e., all the reactions in the model exept those dealing with dust grains. The numbers indicate those reactions that induce a variation of more than 5% of the highest variation for each species.

Annexe B

Notions de radioastronomie

B.1 Les observations en radioastronomie

Le premier signal radio provenant d'une source extra-terrestre a été détecté par Jansky, en 1932, qui était alors ingénieur à la Bell Telephone (USA) et qui étudiait des parasites sur les lignes téléphoniques. Il venait en fait de découvrir le rayonnement radio provenant du centre de notre galaxie. C'est durant la seconde guerre mondiale que la radioastronomie a pris son envol avec le développement des radars.
La fenêtre des ondes radio s'étend grossièrement de 15 MHz ($\lambda \sim 20$ m) à 300 GHz ($\lambda \sim 1$ mm, domaine millimétrique). Au delà de 300 GHz, on passe dans le submillimétrique et les observations deviennent plus difficiles depuis la Terre car l'eau atmosphérique absorbe le rayonnement. Seuls quelques sites géographiques privilégiés permettent d'observer au delà de 300 GHz comme les montagnes situées à Hawaï et au Chili. Les domaines millimétriques et submillimétriques permettent l'exploration de régions inaccessibles au visible et à l'UV : les régions jeunes de formation stellaire. Ces régions sont relativement froides et émettent donc

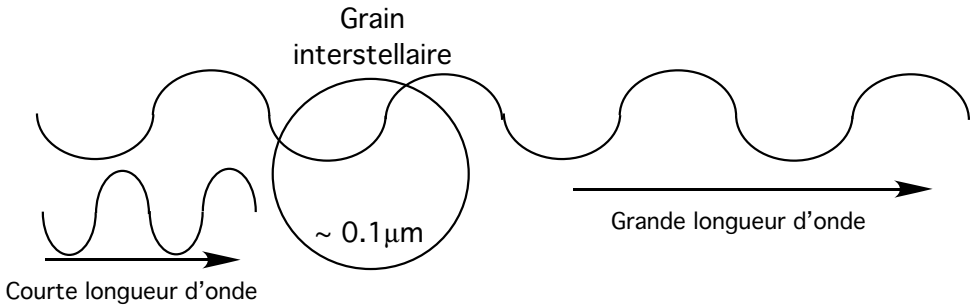

FIG. 69: *Les photons à courtes longueur d'onde sont absorbés par les grains interstellaires très denses dans les régions jeunes de formation stellaire tandis que les photons à plus grandes longueur d'onde s'échappent du nuage.*

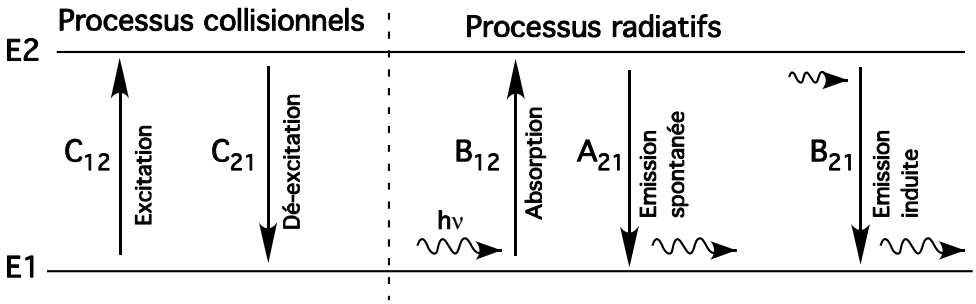

FIG. 70: *Processus collisionnels et radiatifs déterminant le peuplement des niveaux d'énergies des molécules et atomes. La figure représente un système à deux niveaux d'énergie : niveaux inférieur E1 et niveau supérieur E2.* C_{12} *et* C_{21} *sont les taux de peuplement et de dépeuplement du niveau 2 par les collisions.* B_{12} *est appellé le coefficient d'Einstein pour l'absorption radiative tandis que* A_{21} *et* B_{21} *sont les coefficient d'Einstein pour respectivement l'émission spontanée et induite.*

préférentiellement dans le domaine radio. De plus, elles sont très denses en poussières et ne laissent échapper que peu de photons. En effet, toutes les ondes émises à l'intérieur de ces régions avec une longueur d'onde inférieure ou égale au diamètre des grains de poussières seront absorbées par ces derniers (Figure 69) puis reémises à plus grande longueur d'onde. En revanche, les photons possédant une longueur d'onde plus grande vont pouvoir traverser ces régions et venir jusqu'à nous.

Quel est le mécanisme d'émission des ondes radio ? Les régions de formation stellaire se composent d'un mélange de molécules gazeuses et de poussières, avec un rapport massique (gaz/poussières) de 100 et un rapport en nombre de 10^{12}. Deux grandes familles de processus gouvernent l'excitation et la désexcitation des atomes et des molécules en phase gazeuse : les collisions et les processus radiatifs (voir la figure 70). L'agitation des particules due à la température du milieu induit des collisions permettant le transfert d'énergie d'une particule à l'autre. Cette énergie permet aux molécules d'atteindre des niveaux d'énergie vibrationnelle, rotationnelle ou hyperfin supérieurs. L'absorption d'un photon se propageant dans le milieu est le deuxième mécanisme principal d'excitation des espèces. Les collisions sont également une source importante de désexcitation, la deuxième étant radiative par l'émission d'un photon soit de façon spontanée soit sous l'effet du champ de rayonnement (émission induite). L'émission spontanée peut avoir lieu après l'excitation par absorption d'un photon aussi bien que par une collision. Les photons ainsi émis auront une fréquence qui dépend de la différence d'énergie entre les deux niveaux (niveau inférieur 1 et supérieur 2) tel que $\Delta E = E_2 - E_1 = h\nu$. L'ensemble des photons émis par une même espèce constitue un signal observable sur Terre par les radiotélescopes.

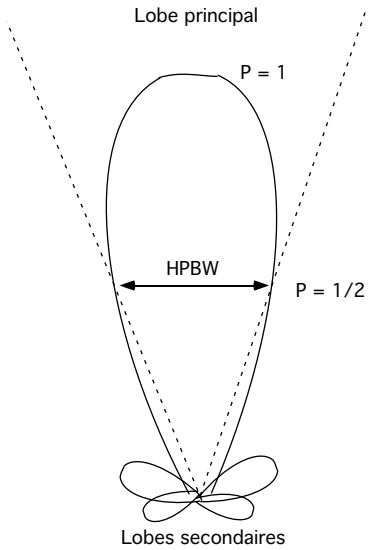

Fig. 71: *Schéma de la loi de puissance du télescope montrant le lobe principal (ou "beam") de l'antenne et les lobes secondaires. HPBW est définit comme étant le diamètre angulaire du lobe principal où la puissance est égale à la moitié de la puissance maximale.*

B.1.1 Température d'antenne et température de brillance du lobe principal

Les radiotélescopes reçoivent ces photons et les concentrent sur un détecteur par un système de réflexion. Les photons ainsi reçus sont transformés en un signal électrique de même fréquence que les photons. Ce signal passe ensuite par un calibrateur qui étalonne le signal en unité de température. Plusieurs paramètres permettent de définir la réponse d'un radiotélescope au signal qu'il reçoit afin de le calibrer. Je n'en citerai que trois : l'efficacité du lobe ou "beam efficiency" (B_{eff}), le "forward efficiency" (F_{eff}) et le lobe principal ou "beam" de l'antenne. L'efficacité du lobe correspond à la quantité du signal qui est contenu dans le lobe principal de l'antenne. Le "forward efficiency" quantifie le signal total mesuré qui provient de l'avant du télescope. Pour un "forward efficiency" de 0.9, 90% du signal mesuré provient de l'avant du télescope et 10% de l'arrière et des côtés.

Pour tenir compte de la réponse du télescope, il faut apporter une correction à la température d'antenne. La température de brillance du lobe principal ("main beam brightness temperature", T_{MB}) se calcule en multipliant la température d'antenne par le rapport "forward efficiency" sur "beam efficiency" :

$$T_{MB} = T_A \frac{F_{eff}}{B_{eff}} \tag{23}$$

Enfin le lobe du télescope ou "Half Power Beam Width" est le diamètre angulaire du lobe principal au point où la puissance de l'antenne est égale à la moitié de la puissance maximale (Fig. 71). Plus simplement, c'est la valeur de la résolution spatiale du télescope. Grossièrement

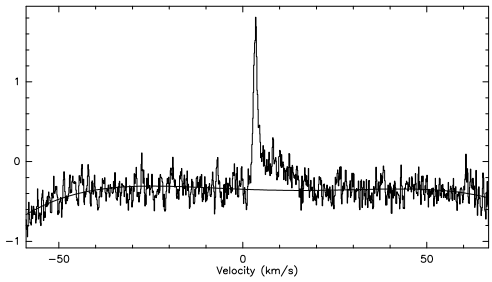

FIG. 72: *Spectre brut de SO dont la ligne de base est tracée par un polynôme de degré 4.*

et parce que les radiotélescopes travaillent en régime de diffraction limité, cette résolution peut s'écrire : $r = 1.2\lambda/D$, D étant le diamètre de l'antenne.

B.1.2 La réduction des données

La réduction des données que je présente dans ce paragraphe est valable pour des observations du radiotélescope de 30 m de l'IRAM et se fait à l'aide du logiciel CLASS. La réduction des données passe par plusieurs étapes. Premièrement, il faut modifier le paramètre de "beam efficiency" qui varie avec la fréquence. Le "forward efficiency" ne peut pas être directement modifié et doit de toutes façons être déjà réglé lors des observations. La deuxième étape se fait en retirant les lignes de base, avant ou après avoir sommé tous les spectres de la même molécule sur la même position. En effet, le niveau zéro de la température d'antenne doit être soustrait au spectre brut pour obtenir un signal d'intensité correcte (figure 72). Ce décalage peut-être constant sur la bande de fréquence observée mais peut aussi être fonction, linéaire ou non, de la fréquence. Par exemple, des réflexions dans la structure de l'antenne induisent parfois des ondes stationnaires qui se manifestent par des lignes de bases sinusoïdales. Cette étape de détermination puis soustraction de la ligne de base est simple lorsque les raies sont bien définies, mais elle peut être délicate dans le cas de raies faibles et peut alors apporter une erreur sur l'intensité de la raie.

B.1.3 Résolution spatiale et dilution du signal

Lorsque la source observée est plus petite que le lobe du télescope, la température de brillance de cette source est sous-estimée. Si l'on possède un spectre en un point unique d'observation mais que la taille de la source est connue ou peut être estimée, il est possible de faire une correction approximative de la dilution lorsque la distribution du flux de la source est gaussienne (en fonction de la fréquence) tout comme le lobe du télescope. Pour se faire, il faut multiplier le flux observé par $(\theta_{source}/\theta_{lobe})^2$, θ_{source} étant l'angle apparent de la source et θ_{lobe} le lobe du télescope.

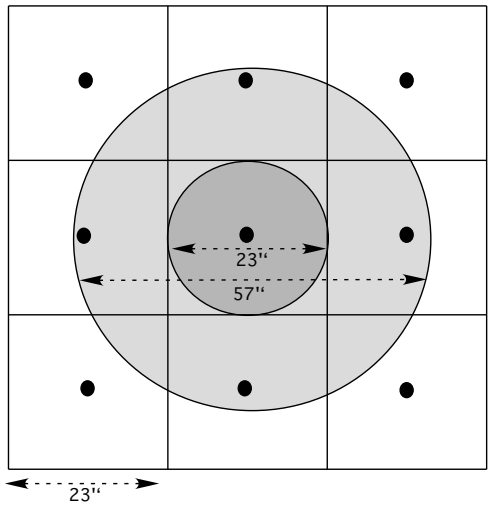

Fig. 73: *Schéma illustratif de la dégradation de la résolution spatiale. Les cercles noirs représentent les points de mesure et les deux cercles gris les deux lobes d'observation avec des résolution spatiales différentes.*

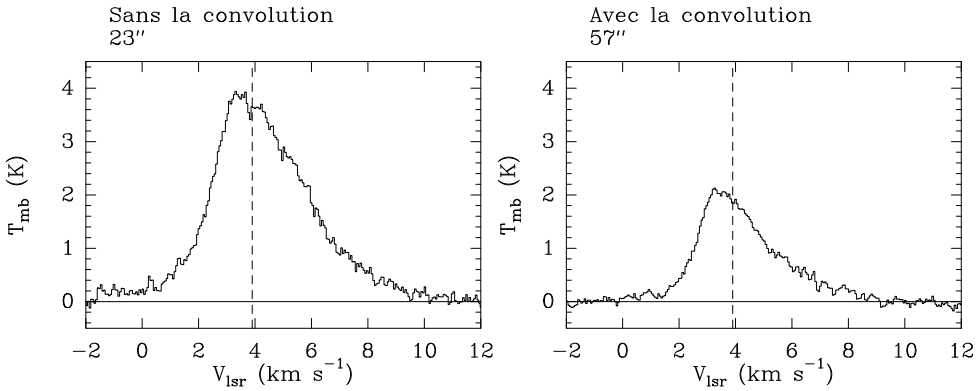

Fig. 74: *Spectres de la transition de* $6_5 - 5_4$ *de SO observé avec une résolution spatiale de 23″ (à gauche) et dégradé à une résolution de 57″ (à droite) par la méthode décrite à la section B.1.3.*

En revanche, lorsque les dimensions de la source ne sont pas connues, il n'est en théorie pas possible de comparer les T_{MB} mesurées par une antenne avec des résolutions spatiales différentes ce qui est le cas si l'on observe deux transitions de fréquences très différentes d'une même molécule. Cependant, si l'on possède suffisamment de points de mesure autour de la source observée, il est possible de dégrader la résolution spatiale de l'un des signaux (celui qui a la meilleure résolution) pour qu'il soit à la même résolution que le deuxième signal. Supposons, par exemple, que l'on ait une transition de la molécule SO observée avec un lobe de $23''$ en 9 points du ciel (disposés en carré sur le plan du ciel et avec un intervalle constant entre les points, appelé *pas* comme montré sur la figure 73). Une deuxième transition de SO a été observée sur le point central avec une résolution de $57''$. Si l'on veut faire une comparaison (ou un calcul de densité de colonne) entre les signaux de ces deux transitions au centre, il faut dégrader la résolution spatiale de la première transition pour obtenir la T_{MB} qui aurait été mesurée si on avait utilisé un lobe de $57''$. Le poids de chaque spectre observé est calculé, pour un profil gaussien, par la formule suivante :

$$poids = \exp\left(-(k^2 + l^2)F\right) \tag{24}$$

k et l étant le décalage en position du spectre considéré par rapport à la position centrale qui varient de -1 à 1 dans l'exemple présenté ici. F est un facteur qui se calcule à partir de l'intervalle angulaire entre deux points de mesure (dans notre exemple, $pas = 23''$), de la résolution angulaire de départ (ici $\theta_{dep} = 23''$) et d'arrivé (ici $\theta_{arr} = 57''$) :

$$F = \frac{pas^2}{\Omega^2} \tag{25}$$

$$\Omega^2 = \frac{\theta_{arr}^2 - \theta_{dep}^2}{4 \ln 2} \tag{26}$$

Le poids total est alors la somme de tous les poids des 9 spectres. Pour obtenir le spectre dégradé, le spectre (central) dont on veut dégrader la résolution est divisé par le poids total. La figure 74 montre un spectre brut puis dégradé à une résolution spatiale plus grande. Dans cet exemple, la source observée est ponctuelle et on peut voir que les deux spectres sont très différents. Dans le cas de sources étendues (et uniformes) par rapport à la résolution spatiale de l'instrument, l'intensité de la raie ne change pas mais le bruit statistique peut diminuer.

B.1.4 Paramètres de raie

Une fois que les spectres ont été réduits et "nettoyés", on peut déterminer les paramètres des raies. Lorsque les spectres proviennent de sources symétriques, les raies ont une forme gaussienne (en fréquence) dont on peut simplement déduire les paramètres. Dans ce cas, CLASS donne directement la largeur de la raie (largeur à mi-hauteur de la gaussienne, Δv en km s^{-1}), la

position centrale du pic (v_{LSR} en km s^{-1}), la hauteur du pic central (T_{MB} en K) et l'intensité de la raie intégrée sur toutes les vitesses ($W = \int T_{MB}\delta v$ en K km s^{-1}). Lorsque les raies proviennent d'un gaz en mouvement rapide, d'un flot bipolaire par exemple, elles n'ont pas un profil gaussien mais possèdent des ailes émises par la matière du flot se déplaçant rapidement par rapport à nous (soit dans notre direction soit en sens opposé) [1]. Deux solutions de traitement peuvent être envisagées. La première consiste à essayer de reproduire le spectre avec deux ou trois gaussiennes qui additionnées reproduisent le profil observé. La deuxième solution consiste à directement calculer la surface de la raie comprise entre deux vitesses (commande PRINT AREA V1 V2). Bien sûr cette deuxième méthode ne donne pas la largeur à mi-hauteur ni la hauteur de la raie puisque le spectre n'est pas modélisé par une gaussienne, mais en fait seule l'intensité intégrée est utilisée pour déterminer les densités de colonnes moléculaires. Dans la suite de mon travail, c'est cette méthode que j'ai utilisée sur les spectres de régions de choc.

B.2 Notions de transfert radiatif

B.2.1 Le problème du transfert radiatif

Lorsqu'un photon est émis par une molécule ou un atome du gaz, il pourra traverser le milieu et s'échapper pour nous parvenir ou pourra être absorbé par une autre espèce du gaz mettant cette espèce dans un état excité qui pour se désexciter émettra à son tour un photon etc. Le problème du transfert radiatif (qui existe également pour la poussière) provient de la dépendance non linéaire de l'émission des espèces en un point P du milieu avec toutes les autres espèces de la région. A ce problème, s'ajoute le fait que le champ de rayonnement va dépendre des niveaux d'excitation de toutes les espèces présentes dans le milieu. C'est un second problème qui est en fait couplé au problème du transfert radiatif. Dans la pratique, le problème du transfert radiatif revient à calculer comment les photons émis dans un milieu se déplacent dans ce milieu et combien d'entre eux s'en échappent pour parvenir jusqu'à nous.

Les équations de base nécessaires pour le traitement du transfert radiatif sont les suivantes :

- L'équation générale du transfert radiatif décrivant la variation de l'intensité de radiation I_ν à une fréquence ν s'écrit :

$$\frac{dI_\nu}{d\tau_\nu} = -I_\nu + S_\nu \tag{27}$$

où S_ν est la fonction source égale au rapport du coefficient d'émission ϵ_ν sur le coefficient d'absorption κ_ν et vaut $\frac{A_{ul}n_u}{B_{lu}n_l - B_{ul}n_u}$, si le champ de rayonnement des poussières est négligé.

1. Je rappelle que le passage des fréquences aux vitesses se fait par le biais de l'équation $\frac{\Delta\nu}{\nu_0} = \frac{\Delta v}{\mathrm{c}}$, ν_0 étant la fréquence centrale d'observation et c la vitesse de la lumière.

$\tau_\nu = \kappa_\nu dl$ est l'épaisseur optique le long d'un trajet dl.

- L'équation statistique local, qui exprime le fait que le nombre de transitions vers le haut par unité de temps est égal au nombre de transitions vers le bas, s'écrit :

$$n_u \sum_{l=1}^{N_{lev}} (A_{ul} + B_{ul}J + C_{ul}) = \sum_{l=1}^{N_{lev}} n_l (B_{lu}J + C_{lu}) \tag{28}$$

où B_{lu} et B_{ul} sont les coefficients d'Einstein pour l'absorption et l'émission induite, C_{ul} et C_{lu} sont des taux de collision qui caractérisent, respectivement, le transfert de population du niveau supérieur u vers le niveau inférieur l et le transfert du niveau l vers le niveau u à cause des collisions. A_{lu} est le coefficient d'Einstein pour l'émission spontanée. **J** est le champ de rayonnement interne du milieu (en l'absence d'un champ externe). n_u et n_l sont respectivement les densités de la molécule aux niveaux d'énergie u et l.

Ces équations forment un système complexe qui doit être résolu simultanément. Pour un système complexe à plusieurs niveaux d'énergie, il est nécessaire de faire une approximation permettant de simplifier les équations de population des niveaux et ainsi de découpler les deux types d'équations.

Durant ma thèse, j'ai utilisé deux grandes approximations. La première approximation, la plus simple, consiste à supposer que le milieu est à l'équilibre thermodynamique local (ETL), c'est-à-dire que la densité du gaz est suffisante pour permettre aux collisions de dominer l'excitation des espèces, et que le milieu est optiquement mince. La deuxième approximation est celle du grand gradient de vitesse (LVG) qui traite également approximativement l'absorption dans les raies, c'est-à-dire le problème du transfert radiatif.

B.2.2 Approximation de l'équilibre thermodynamique local (ETL)

Considérons un signal émis par une source à une fréquence ν, correspondant à la désexcitation d'une molécule d'un niveau supérieur u à un niveau inférieur l et se propageant dans un milieu où il n'y a aucune absorption ni émission des poussières, c'est-à-dire aucune champ de rayonnement externe. Pour une molécule à l'équilibre thermodynamique local (ETL), tous les niveaux énergétiques de la molécule sont peuplés selon la loi de distribution de Boltzmann :

$$N_u = \frac{N}{Z} g_u \mathrm{e}^{-E_u/\mathrm{k}T}. \tag{29}$$

La fonction de partition Z est la somme sur tous les niveaux possibles i de $g_i exp(-E_i/kT)$ et N est la densité de colonne totale de l'espèce en question.

Par définition, un milieu est à l'équilibre thermodynamique local lorsque la densité du gaz est suffisante pour permettre aux collisions entre espèces de peupler et dépeupler les niveaux

d'énergie moléculaires et atomiques par opposition au peuplement et dépeuplement dû à l'absorption de photons. Autrement dis, le taux de collision C_{ul} doit être supérieur au taux d'émission spontanée A_{ul}. On définit la densité critique au delà de laquelle le système est à l'équilibre par le rapport $\frac{A_{ul}}{C_{ul}}$ où C_{ul} dépendant de la température. Lorsque cette condition n'est pas vérifiée, la température utilisée dans l'expression 29 n'est plus la température cinétique du gaz, mais la température d'excitation (T_{ex}) de la transition considérée qui est alors inférieure à la première. Dans ce cas, T_{ex} caractérise le degré d'excitation de la molécule donc le degré de peuplement des niveaux d'énergie.

B.2.3 Relation entre la densité de colonne et l'intensité intégrée

Si la fonction source de l'équation de transfert radiatif 27 est constante le long de la ligne de visée, l'équation peut s'intégrer facilement pour donner :

$$I_\nu(\tau) = I_\nu(0)e^{-\tau} + S_\nu(1 - \mathrm{e}^{-\tau}) \tag{30}$$

Lorsqu'il n'y a pas de source de rayonnement $I_\nu(0)$ derrière le milieu observé et que le milieu est à l'équilibre thermodynamique local, la fonction source est égale à la fonction de Planck B_ν :

$$B_\nu(T) = \frac{2\mathrm{h}\nu^3}{c^2}\frac{1}{\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{h}\nu}{\mathrm{k}T}} - 1} \tag{31}$$

d'où l'intensité $I_\nu(\tau)$ s'écrit :

$$I_\nu(\tau) = \frac{2\mathrm{h}\nu^3}{c^2}\frac{1}{\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{h}\nu}{\mathrm{k}T}} - 1}(1 - \mathrm{e}^{-\tau}) \tag{32}$$

Aux fréquences radio, $\mathrm{h}\nu << \mathrm{k}T$ (approximation de Rayleigh-Jeans) donc la fonction de Planck s'écrit simplement :

$$B_\nu(T) \sim \frac{2\mathrm{k}T\nu^2}{c^2} \tag{33}$$

A partir de cette expression, on a l'habitude en radioastronomie d'exprimer les intensités spécifiques en terme de température de brillance T_{MB} définie par :

$$T_{MB} = \frac{c^2}{2\mathrm{k}\nu^2}I_\nu \tag{34}$$

En remplaçant I_ν par l'expressions 32 dans l'équation 34, la température de brillance peut s'écrire :

$$T_{MB} = \frac{\mathrm{h}\nu}{\mathrm{k}}\frac{1}{\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{h}\nu}{\mathrm{k}T}} - 1}(1 - \mathrm{e}^{-\tau}) \tag{35}$$

Le coefficient d'absorption à cette fréquence est donné par l'équation suivante :

$$\kappa_\nu = \frac{h\nu}{4\pi}[n_l(\nu)B_{lu} - n_u(\nu)B_{ul}] \tag{36}$$

qui peut également s'écrire :

$$\kappa_\nu = \frac{h\nu}{4\pi} n_u(\nu) \left[\frac{n_l(\nu)}{n_u(\nu)} B_{lu} - B_{ul} \right] \tag{37}$$

A l'équilibre thermodynamique local, les niveaux d'énergie sont peuplés selon la distribution de Boltzmann :

$$\frac{n_u(\nu)}{n_l(\nu)} = \frac{g_u}{g_l} \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{h}\nu}{\mathrm{k}T}} \tag{38}$$

En injectant l'équation 38 dans l'équation 37 et en remplaçant B_{lu} par $\frac{g_u}{gl} B_{ul}$, le coefficient d'absorption peut s'écrire :

$$\kappa_\nu = \frac{h\nu}{4\pi} n_u(\nu) B_{ul} [\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{h}\nu}{\mathrm{k}T}} - 1] \tag{39}$$

L'expression de κ_ν est valable pour une longueur d'onde unique. Pour connaître le coefficient d'absorption sur toute une raie, κ_ν doit être multiplié par la distribution spectrale de l'intensité de la raie à l'émission $\Phi_{ul}(\nu)$:

$$\kappa_\nu = \frac{h\nu}{4\pi} n_u(\nu) B_{ul} \left[\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{h}\nu}{\mathrm{k}T}} - 1 \right] \Phi_{ul}(\nu) \tag{40}$$

sachant que l'on a sensiblement $\Phi_{ul}(\nu_0) \sim c/(\nu_0 \Delta v)$ au centre de la raie, Δv étant la largeur à mi-hauteur de la raie exprimée en vitesse radiale et ν_0 la fréquence centrale de la raie.

L'épaisseur (ou profondeur) optique à une fréquence ν est l'intégrale de κ_ν le long d'un chemin dl : $\tau(\nu) = \int \kappa_\nu dl$ et la densité de colonne (en cm^{-2}) d'une espèce peut être définie comme l'intégrale de la densité de cette espèce sur un chemin dl : $N = \int n dl$. Par conséquent, l'épaisseur optique au centre de la raie peut s'écrire :

$$\tau(\nu) = \frac{h}{\Delta v} N_u B_{ul} (\mathrm{e}^{\mathrm{h}\nu/\mathrm{k}T} - 1) \tag{41}$$

En introduisant l'équation 41 dans l'équation 35 (avec une étape intermédiaire où l'équation 35 est multipliée puis divisée par τ) et en remplaçant B_{ul} par $A_{ul} c^3 / 8\pi h \nu^3$, la température de brillance s'écrit :

$$T_{MB} = \frac{\mathrm{hc}^3 N_u A_{ul}}{8\pi k \nu^2 \Delta v} \left(\frac{1 - \mathrm{e}^{-\tau}}{\tau} \right) \tag{42}$$

Etant donné que l'intensité d'une raie intégrée sur la vitesse vaut $W = \int T_{MB} \Delta v$, la densité de colonne N_u d'une molécule excitée à un niveau supérieur u peut s'écrire de la façon suivante :

$$N_u = \frac{8\pi \mathrm{k} \nu^2 W}{h c^3 A_{ul}} \left(\frac{\tau}{1 - \mathrm{e}^{-\tau}} \right) \tag{43}$$

Dans le cas d'un milieu uniforme, optiquement mince ($\tau/(1 - e^{-\tau}) = 1$), et à l'ETL, on a donc une relation directe entre l'intensité intégrée W que l'on mesure et la densité de colonne N_u, si l'on connait la valeur de A_{ul} pour la raie considerée.

A partir des équations 43 et 29, la densité de colonne totale d'un composé, qui peut être estimée à partir d'une seule raie observée, s'exprime :

$$N = \frac{Z}{g_u} \frac{8\pi k \nu^2 W}{hc^3 A_{ul}} \left(\frac{\tau}{1 - \mathrm{e}^{-\tau}} \right) \mathrm{e}^{E_u/\mathrm{k}T} \tag{44}$$

Lorsque la raie est optiquement mince, l'expression se simplifie car $\tau/(1-e^{-\tau})$ est alors égale à 1. Lorsque l'on possède plus d'une transition, il est possible de tracer un diagramme rotationnel qui traduit le peuplement des différents niveaux d'énergie d'une même molécule. Ainsi, N_u est calculé pour chaque transition à partir de l'équation 43 en supposant des transitions optiquement minces. $\ln(N_u/g_u)$ est tracé en fonction de l'énergie de la transition E_u/k en K. D'après l'équation 29, on doit obtenir une droite dont l'abscisse à l'origine donne $\ln(N/Z)$ et la pente donne $-(1/T_{rot})$, T_{rot} étant la température rotationnel de la molécule qui est similaire à la température d'excitation T_{ex}. Cette méthode est très pratique et a été utilisée de nombreuses fois mais elle suppose que l'on soit à l'ETL et pour un milieu optiquement mince.

B.2.4 Le modèle LVG

Principe général

Lorsque le milieu n'est pas à l'ETL, la méthode la plus populaire permettant de découpler les équations de transfert radiatif de celles des populations des niveaux est la méthode de probabilité d'échappement intoduite pour la première fois par Sobolev (1960). L'idée de base est d'introduire un facteur multiplicateur local qui décrit la probabilité qu'un photon a de s'échapper d'une enveloppe de gaz après avoir été généré.

Si la source est opaque à son propre rayonnement, le champ de rayonnement interne du milieu **J** (équation 28) est égal à la fonction source S (équation 27). Le rapport **J**/S correspond donc à la quantité de photons qui sont piégés dans le milieu et ne s'échapperont pas du nuage. Ainsi il est possible d'écrire : **J** = S(1 - β), β étant la probabilité qu'un photon a de s'échapper du milieu sans être absorbé. La clé de l'approximation de probablilité d'échappement est que β ne dépend pas du champ de rayonnement. En remplaçant **J** et S ($S_\nu = \frac{A_{ul} n_u}{B_{lu} n_l - B_{ul} n_u}$) dans l'équation 28 et en utilisant la relation $B_{ul} = A_{ul} c^3 / 8\pi h \nu^3$, l'équation de population devient :

$$n_u \sum_{l=1}^{N_{lev}} (C_{ul} - \beta A_{ul}) = \sum_{l=1}^{N_{lev}} n_l C_{lu} \tag{45}$$

Cette expression est totalement indépendante du champ de rayonnement et exprime le fait que seuls les photons qui vont s'échapper du milieu vont réellement modifier la population des niveaux puisque seul le terme de βA_{ul} intervient dans cette expression en plus des collisions.

L'expression de β peut être variable et dépend de la géométrie de la source et de l'épaisseur optique mais pas du rayonnement. Par exemple, lorsqu'un rayonnement I entre dans une couche dont la profondeur optique est τ, l'intensité qui ressort est $I\exp(-\tau)$. Donc la probabilité pour que le rayonnement s'échappe du milieu est $\exp(-\tau)$. Pour un milieu de température uniforme, la probabilité d'échappement β peut s'écrire :

$$\beta = \langle exp(-\tau) \rangle = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \exp(-\tau')d\tau' = \frac{1 - \exp(-\tau)}{\tau} \tag{46}$$

Un des modèles fréquemment appliqué utilisant la méthode de probabilité d'échappement est le modèle du grand gradient de vitesse (*Large Velocity Gradient*). Dans un milieu où règne un grand gradient de vitesse, comme une région d'éjection de matière où une enveloppe protostellaire en effondrement, la fréquence d'un photon à n'importe quelle position sera modifiée par effet Doppler à cause du gradient de vitesse pour les particules ayant le même axe de propagation et à cause de la différence de direction pour les particules se propageant sur des axes différents. Ainsi le milieu considéré est divisé en petites cellules à l'intérieur desquelles les particules interagissent entre elles et à l'extérieur desquelles les particules sont découplées. Ces cellules sont caractérisées par une longueur appelée longueur de Sobolev qui dépend du gradient de vitesse du milieu.

Le modèle utilisé

Les détails du modèle LVG que j'utilise et qui a été développé par C. Ceccarelli peuvent être trouvés dans Ceccarelli et al. (2002a). J'ai par la suite participé à l'adaptation du code pour le traitement des molécules soufrées comme décrit dans Wakelam et al. (2004b). La probabilité d'échappement de ce modèle a pour expression : $\frac{1-\exp(-3\tau)}{3\tau}$, correspondant à une sphère homogène de gaz. Les données spectroscopiques des molécules SO, SO_2, H_2S, SiO et H_2CO utilisées dans ce modèle proviennent toutes du catalogue du JPL (*http://spec.jpl.nasa.gov/;Pickett et al., 1998)*. Les références pour les coefficients de collision utilisés sont : Green (1994) pour SO, Palma (1987) pour SO_2, Turner et al. (1992) pour SiO, Green (1991) pour H_2CO et Turner et al. (1992) pour CS. Les coefficients de collision de H_2S ne sont pas disponibles dans la littérature. Nous les avons estimé en multipliant ceux de H_2O par un facteur 5 (en se basant sur la discussion de Turner, 1996). C'est une approximation très grossière qui donne une estimation très approximative des densités de colonne de H_2S. Pour les autres molécules, les coefficients de collision ne sont pas connus dans toute la gamme des températures concernées par nos observations, en particulier les basses températures. Dans ce cas, les coefficients disponibles dans la littérature sont extrapolés à plus basse température par une loi en $\sqrt{T_{kin}}$. Le code calcule les flux des transitions impliquant les 50 premiers niveaux rotationnels de chaque molécule.

Au final, le modèle calcule les flux en fonction de trois paramètres : la densité de colonne

totale, la température et la densité du gaz. Si les transitions sont optiquement minces, le rapport de deux flux observés de deux raies de la même molécule dépend uniquement de la température et de la densité et non de la densité de colonne totale. Ainsi, si au moins deux flux ont été observés pour une même molécule, il est possible de tracer le rapport de flux en fonction de la température et de la densité pour une densité de colonne donnée. Si plusieurs rapports sont connus, il est possible de contraindre les trois paramètres du modèle. S'il n'est pas possible de contraindre les conditions physiques, il faut faire une hypothèse soit sur la température soit sur la densité. Des applications de cette méthode sont décrites aux sections 1.1 et 1.2.

Annexe C

Conditions d'excitation de SO et SO_2 dans les chocs d'IRAS2/NGC1333

Cette annexe correspond à l'étude des conditions d'excitation de SO et SO_2 dans le gaz choqué du flot bipolaire induit par la protoétoile de faible masse IRAS2 dont les observations sont présentées à la section 1.2 du chapitre 1. Les températures rotationnelles calculées dans le gaz choqué du flot bipolaire d'IRAS2 sont petites ($\leq$ 16 K pour SO et $\leq$ 41 K pour SO_2) par rapport à la température cinétique estimée dans ces régions ($\geq$ 60 K). Ceci peut être un effet de la faible densité (cas hors ETL) ou de l'épaisseur optique. Pour quantifier chacun de ces effets, j'ai modélisé l'excitation des deux molécules SO et SO_2 à l'aide d'un modèle LVG puis considéré dans un premier temps un milieu hors ETL mais optiquement mince, puis un milieu à l'ETL et optiquement épais et enfin un milieu où les deux effets sont combinés. Dans un toisième paragraphe, j'ai quantifié l'erreur qui peut être induite sur les densités de colonne calculées par le biais des diagrammes rotationnels.

Effets de la faible densité (hors ETL) :

Supposons dans un premier temps que les transitions de SO et SO_2 soient **optiquement minces**. Pour cela, je fixe la densité de colonne des deux molécules avec les valeurs obtenues avec les diagrammes rotationnels dans W1(HVC) (voir tableau 10 de la section 1.2.4). Pour ces densités de colonne de SO et SO_2, j'ai calculé l'émission théorique de ces deux molécules à l'aide du modèle LVG pour des température cinétiques entre 60 et 100 K et des densités de H_2 entre 10^4 et 10^7 cm^{-3}. A partir des flux théoriques des huit transitions du tableau 8 (section 1.2.2), j'ai reconstruis des diagrammes rotationnels théoriques pour chacune des deux molécules et pour chaque couple (T_k, n_{H_2}). Puis pour chaque diagramme, j'ai calculé une température rotationnelle théorique. Les températures rotationnelles obtenues ici ne dépendent pas de la densité de colonne

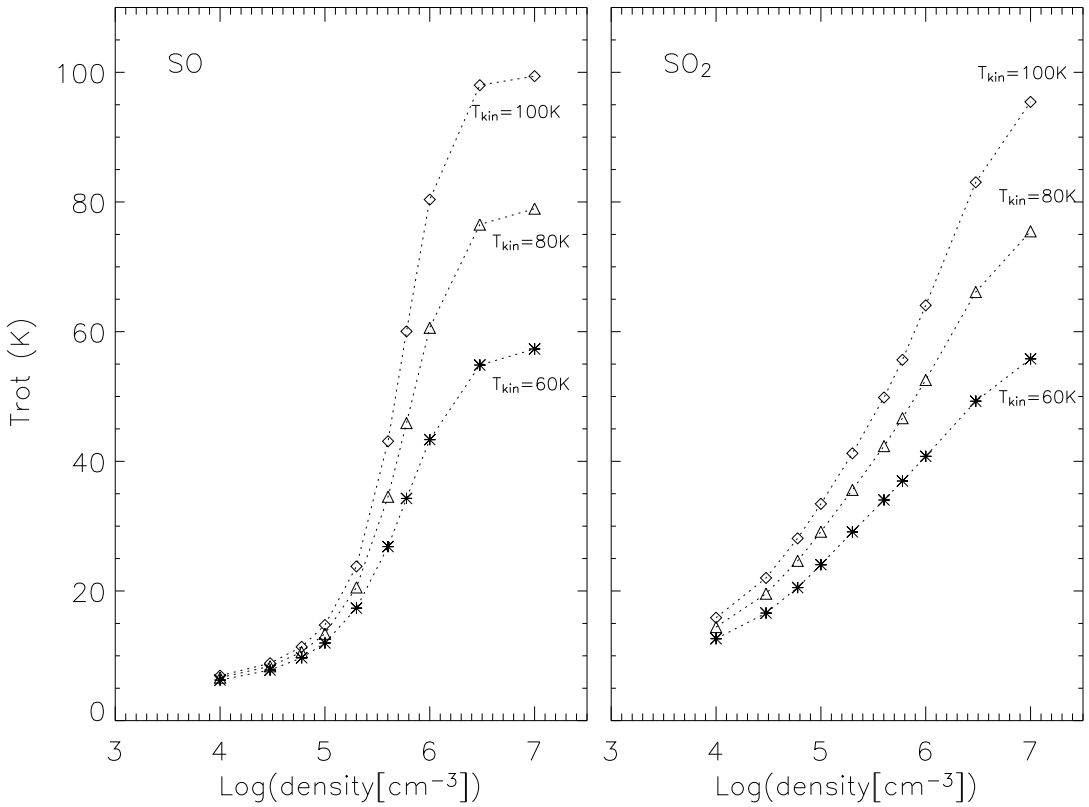

Fig. 75: *Température rotationnelle de SO (à gauche) et SO_2 (à droite) en fonction de la densité de H_2 pour plusieurs températures cinétiques du gaz entre 60 et 100 K. J'ai utilisé les densités de colonne de SO et SO_2 calculées dans W1(HVC) ($N_{\rm SO} = 1.5 \times 10^{14}$ cm^{-2} et $N_{\rm SO_2} = 3 \times 10^{13}$ cm^{-2}).*

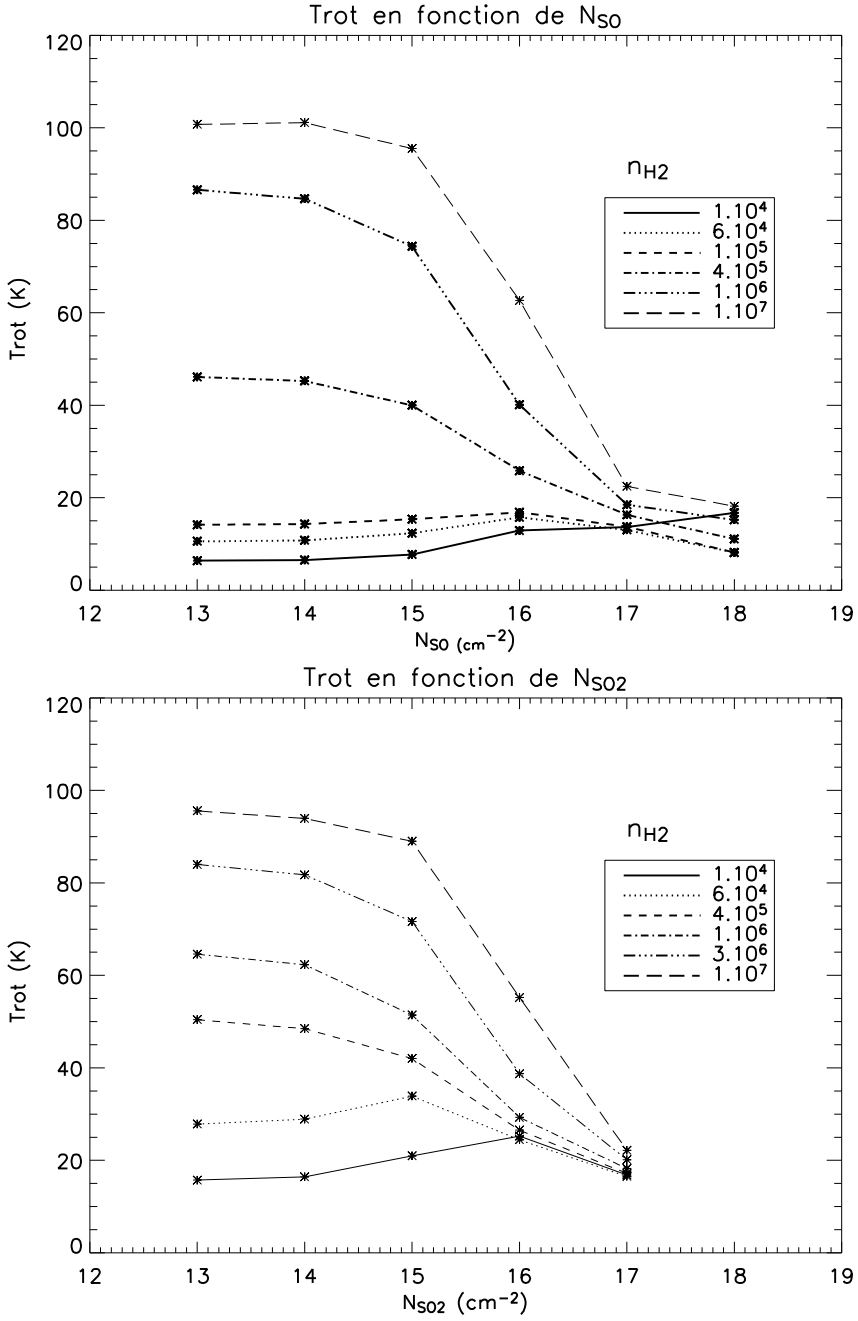

FIG. 76: *Température rotationnelle calculée à partir de l'émission de SO (graphique du haut) et de SO_2 (graphique du bas) en fonction de la densité de colonne de SO pour plusieurs densités de H_2 entre 10^4 et 10^7 cm^{-3} et pour une température cinétique de 100 K.*

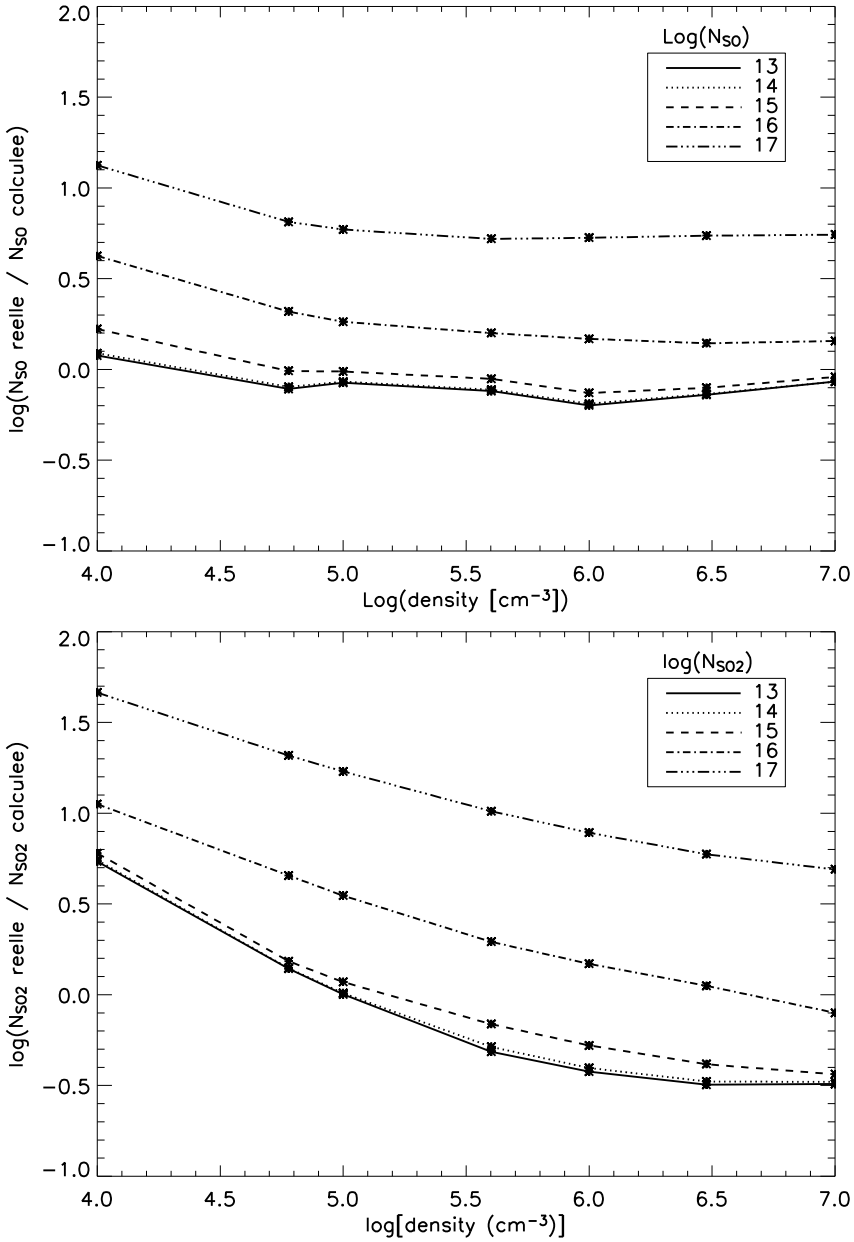

Fig. 77: *Rapports entre les densités de colonne de SO (graphique du haut) et de SO_2 (graphique du bas) réelles (LVG) et celles calculées à partir d'un diagramme rotationnel en fonction de la densité de H_2 et pour différentes densités de colonne de SO et SO_2 réelles entre 10^{13} et 10^{17} cm^{-2}.*

des composés tant que le milieu est optiquement mince. Les $T_{\rm rot}$ théoriques sont montrées sur la figure 75 en fonction de la température et de la densité du gaz.
Pour toutes T_k supérieures à 60 K, les températures rotationnelles théoriques pour SO et SO_2 peuvent être aussi basses que celles observées (7-13 K pour SO et 20-30 K pour SO_2) si la densité du gaz est inférieure à 10^6 cm^{-3}. Les transitions observées de SO et SO_2 de plus haute énergie ont des densités critiques de l'ordre de 10^6 et 10^7 cm^{-3} respectivement. Donc si la densité de H_2 est inférieure à 10^6 cm^{-3}, l'équilibre thermodynamique local n'est pas atteint et les niveaux supérieurs de ces transitions ne sont pas totalement peuplés. Dans ce cas, les températures rotationnelles calculées sont plus faibles que la température cinétique du gaz. En comparant les températures rotationnelles observées (tableau 10) avec la figure 75, il est possible de donner quelques contraintes sur la densité du gaz, en supposant dans un premier temps que les transitions soient optiquement minces. Ainsi, dans les régions de choc W1(HVC), W2(HVC) et E, l'émission de SO contraint la densité de H_2 entre 4×10^4cm^{-3} et 2×10^5cm^{-3}. A partir de l'émission de SO_2, la densité serait entre 10^4cm^{-3} et 2×10^6cm^{-3} dans W1(HVC) et E, tandis qu'elle serait entre 10^4cm^{-3} et 2.5×10^5cm^{-3} dans W2(HVC).

Effets de l'épaisseur optique :
Le second paramètre qui peut influencer les valeurs des températures rotationnelles est **l'épaisseur optique** de chaque transition. Pour influencer l'épaisseur optique, j'ai fais varier la densité de colonne de chacune des molécules entre 10^{13} et 10^{17} cm^{-2}, sachant que l'épaisseur optique des raies augmente avec la densité de colonne. La température cinétique du gaz est fixée à 100 K. La densité de H_2 pour sa part varie entre 10^4 et 10^7 cm^{-3} Les températures rotationnelles théoriques pour SO et SO_2 sont présentées sur la figure 76 en fonction de la densité de colonne de chaque molécule et de la densité de H_2. Prenons dans un premier temps le cas à l'ETL avec une densité de H_2 de 10^7 cm^{-3}, la température rotationnelle décroit très rapidement pour des densités de colonne de SO et SO_2 supérieures à 10^{15} cm^{-2}. Pour une densité de colonne de 10^{17} cm^{-2}, la température rotationnelle est de l'ordre de 20 K pour les deux molécules. Par conséquent, si l'on suppose une température cinétique du gaz supérieure à 60 K et une densité de H_2 suffisante pour permettre l'ETL, des densités de colonne de l'ordre de 10^{17} cm^{-2} sont nécessaires pour expliquer les faibles T_{rot} observées. La densité de colonne de H_2 dérivée par Bachiller et al. (1998) dans le gaz choqué est de 5.8×10^{20} cm^{-2}. En utilisant cette valeur, une densité de colonne de 10^{17} cm^{-2} donnerait une abondance de l'ordre de 10^{-4} pour SO et SO_2 par rapport à H_2, ce qui est une valeur aberrante comparée à l'abondance cosmique du soufre ($\sim 3 \times 10^{-5}$).

Effets combinés de l'épaisseur optique et de la population des niveaux :
La figure 76 permet également de voir **les effets combinés de l'épaisseur optique et de la population des niveaux**. Pour des densités de H_2 inférieures à 10^7 cm^{-3}, les températures

rotationnelles diminuent lorsque $n_{\mathrm{H_2}}$ augmente et lorsque N_{SO} et $N_{\mathrm{SO_2}}$ augmentent. Le cas extrême est atteint pour SO lorsque $n_{H_2} \leq 10^5$ cm^{-3} où la température rotationnelle reste toujours en dessous de 20 K quelque soit N_{SO}. Pour SO_2, T_{rot} est inférieur à 20 K pour $n_{H_2} \leq 10^4$ cm^{-3} quelque soit N_{SO_2}.

Effets sur les densités de colonne calculées :
Dans le cas où l'ETL n'est pas atteint et/ou les raies sont optiquement épaisses, la densité de colonne calculée à l'aide du diagramme rotationnel peut être erronée. Pour quantifier cette erreur, j'ai calculé les densités de colonne à partir des diagrammes rotationnels théoriques présentés dans le paragraphe précédent, c'est-à-dire pour des densités de colonne réelles de SO et SO_2 entre 10^{13} et 10^{17} cm^{-2}, des densités de H_2 entre 10^4 et 10^7 cm^{-3} et une température cinétique fixée à 100 K. Les rapports entre les densités de colonne réelles et celles calculées par le biais des diagrammes rotationnelles sont montrés sur la figure 77. Quelques soient les conditions physiques du gaz, la densité de colonne de SO ne peut être que sous-estimée. Pour N_{SO} réelle inférieure à 10^{15} cm^{-2}, l'erreur sur la densité de colonne calculée est d'un facteur 1.5 au maximum quelque soit n_{H_2}, c'est-à-dire que le milieu soit à l'ETL ou non. Pour une densité de colonne réelle de 10^{17} cm^{-2}, l'erreur est d'un ordre de magnitude aux faibles densités et d'un facteur 6 aux fortes densités. L'erreur sur la densité de colonne de SO_2 est beaucoup plus grande. Pour N_{SO_2} réelle $\leq 10^{15}$ cm^{-2}, N_{SO_2} calculée est sous-estimée d'un facteur 6 hors ETL et sur-estimée d'un facteur 3 à l'ETL. Si $N_{\mathrm{SO_2}}$ réelle est de l'ordre de 10^{17} cm^{-2}, la densité de colonne calculée est sous-estimée d'un facteur 50 et 5 que l'ETL soit atteint ou non.

En conclusions, il est peu probable que les transitions observées soient optiquement épaisses. En effet, même en tenant compte des erreurs liées à la méthode, N_{SO} et $N_{\mathrm{SO_2}}$ observées sont loin de la densité de colonne nécessaire pour voir les effets de l'épaisseur optique ($\sim 10^{17}$ cm^{-2}). L'explication des faibles températures rotationnelles observées la plus probable est que la densité du gaz soit trop faible pour permettre au milieu d'être à l'ETL. Les densités des colonne observées étant de l'ordre de 10^{14} cm^{-2}, on peut s'attendre à ce que ces valeurs soient relativement fiables même si l'ETL n'est pas vérifié. L'erreur sur la densité de colonne calculée à l'ETL doit être de moins d'un facteur 2 pour SO et moins d'un facteur 6 pour SO_2. Si la densité du gaz est comprise entre 10^5 et 10^6 cm^{-3}, l'erreur pour SO est proche de 0 et celle de N_{SO_2} est d'un facteur 3.

Vérification des diagrammes rotationnels :
J'ai fais un dernier test concernant les densités de colonne et les conditions d'excitation calculées. En utilisant les flux théoriques calculés, j'ai reconstruit des diagrammes rotationnels théoriques que j'ai superposé aux diagrammes observés (voir figure 78). Les diagrammes théoriques ont été obtenus pour les densités de colonne de SO et SO_2 ainsi que pour les températures et densités obtenues par la méthode de χ^2 (voir section 1.2.4). En fait, la méthode de χ^2 n'a pas permis

TAB. 27: *Températures, densités de H_2 et densités de colonne de SO et SO_2 adoptées pour vérifier la validité des diagrammes rotationnels.*

$\Delta\alpha$, $\Delta\delta$ (")	SO		SO_2		N_{SO}	N_{SO_2}
	T(K)	n(cm^{-3})	T(K)	n(cm^{-3})	(cm^{-2} 10^{14})	(cm^{-2} 10^{13})
0 0 (IRAS2)	20	4×10^5	-	-	0.8	-
72 -12 (E)	100	10^5	45	10^6	3.5	7.0
-60 12 (AC) (W1)	20	10^5	-	-	0.9	-
-60 12 (HVC) (W1)	100	6.3×10^4	-	-	1.5	-
-96 24 (AC) (W2)	20	10^5	-	-	0.7	-
-96 24 (HVC) (W2)	100	6.3×10^4	-	-	2.0	-

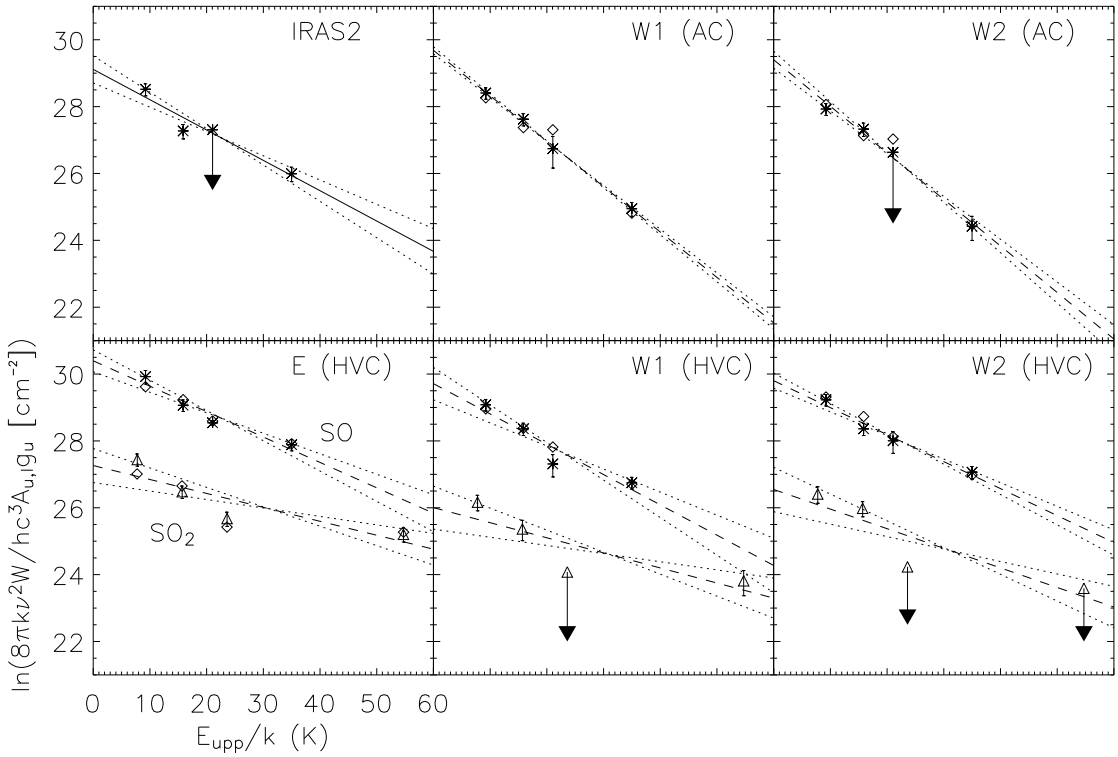

FIG. 78: *Diagrammes rotationnels des molécules SO et SO_2 dans la direction d'IRAS2 et des régions de choc E, W1 et W2 (présentés à la section 1.2.4). Dans W1 et W2 j'ai construit séparément les diagrammes pour les composantes AC et HVC: W1(AC), W1(HVC), W2(AC) et W2(HVC) tandis que pour E, j'ai construit uniquement la composante HVC. Les étoiles et les triangles correspondent aux données observées de SO et SO_2 respectivement. Les diamants représentent les valeurs calculées avec le modèle LVG en utilisant les densités de colonne, les températures et les densités déduites de la méthode de χ^2 (tableau 11).*

de contraindre totalement la température et la densité. J'ai donc dû fixer une température, en accord avec les contraintes (voir tableau 12 de la section 1.2.4), puis en déduire la densité de H_2 en utilisant les contours à 70%. Pour la composante AC des deux positions du lobe Ouest, j'ai choisi une température de 20 K en accord avec Lefloch et al. (1998). Pour les composantes choquées (lobe Est et Ouest) de SO, j'ai adopté une température de 100 K. Pour la région du lobe Est tracée par la molécule SO_2, j'ai adopté une température de 40 K suivant les contours du χ^2. Toutes ces valeurs sont reportées dans la table 27. Notez que ces conditions physiques sont en accord avec les conditions discutées dans les sections précédentes. Sur la figure 78, on peut voir que les diagrammes théoriques reproduisent très bien les diagrammes observés.

Annexe D

Flux théoriques de SO et SO_2

TAB. 28: Transitions ($J_K - J'_{K'}$), fréquences, énergies up et flux des raies de ^{32}SO pour l'exemple, i.e. $M_* = 0.8\ M_\odot$, $\dot{M} = 3 \times 10^{-5}\ M_\odot$ an^{-1}, x_{warm}(SO) $= 1 \times 10^{-6}$ et x_{cold}(SO) $= 1 \times 10^{-8}$. Les fréquences indiquées en gras dans le tableau font référence aux transitions étudiées à la section 2.2.2.

Transition	Fréquence (GHz)	Eup (cm^{-1})	Flux (erg s^{-1} cm^{-2})	Transition	Fréquence (GHz)	Eup (cm^{-1})	Flux (erg s^{-1} cm^{-2})
$1_2 - 1_1$	13.0	10	1.3e-19	$0_1 - 1_1$	178.1	88	1.4e-19
$1_0 - 0_1$	30.0	1	1.3e-17	$5_4 - 4_3$	178.6	16	6.5e-15
$2_3 - 2_2$	36.2	14	3.0e-18	$9_9 - 0_{91}$	179.6	73	1.8e-19
$2_1 - 1_0$	62.9	3	2.4e-16	$8_8 - 9_8$	181.4	60	2.5e-19
$3_4 - 3_3$	66.0	19	1.4e-17	$7_7 - 8_7$	183.6	49	3.9e-19
$2_2 - 1_1$	86.1	13	2.0e-16	$4_5 - 3_4$	206.2	26	4.8e-15
$3_2 - 2_1$	**99.3**	6	1.3e-15	$7_8 - 7_7$	214.3	56	4.9e-17
$4_5 - 4_4$	100.0	26	3.0e-17	$5_5 - 4_4$	215.2	30	4.9e-15
$2_3 - 1_2$	109.2	14	4.8e-16	$6_5 - 5_4$	219.9	24	9.1e-15
$3_3 - 2_2$	129.1	17	1.2e-15	$1_2 - 2_1$	236.4	10	1.2e-16
$5_6 - 5_5$	136.6	35	4.2e-17	$2_3 - 3_2$	246.4	14	1.1e-16
$4_3 - 3_2$	**138.2**	11	3.5e-15	$5_6 - 4_5$	**251.8**	35	6.7e-15
$3_4 - 2_3$	159.0	19	2.2e-15	$8_9 - 8_8$	254.6	69	5.2e-17
$4_4 - 3_3$	172.2	23	2.9e-15	$6_6 - 5_5$	258.2	39	6.0e-15
$6_{61} - 7_{61}$	173.2	204	4.7e-20	$7_6 - 6_5$	261.8	33	1.0e-14
$5_{51} - 6_{51}$	173.7	181	5.8e-20	$3_4 - 4_3$	267.2	19	7.3e-17
$4_{41} - 5_{41}$	174.3	159	7.0e-20	$1_1 - 1_0$	286.3	10	1.5e-15
$6_7 - 6_6$	174.9	45	4.7e-17	$4_5 - 5_4$	294.8	26	4.4e-17
$3_{31} - 4_{31}$	175.1	139	8.3e-20	$9_0 - 9_9$	295.3	83	5.6e-17
$2_{21} - 3_{21}$	175.9	121	9.9e-20	$6_7 - 5_6$	296.5	45	7.5e-15
$1_{11} - 2_{11}$	176.9	103	1.2e-19	$7_7 - 6_6$	301.3	49	6.3e-15

$8_7 - 7_6$	304.1	43	9.7e-15	$2_{31} - 1_{21}$	558.1	135	7.1e-15
$2_2 - 2_1$	309.5	13	2.1e-15	$3_{31} - 2_{21}$	559.3	139	6.9e-15
$5_6 - 6_5$	326.6	35	2.5e-17	$4_{31} - 3_{21}$	560.2	133	7.2e-15
$1_2 - 0_1$	329.4	10	1.7e-15	$9_9 - 9_8$	568.7	73	4.9e-16
$0_{11} - 0_1$	336.5	99	6.2e-17	$5_5 - 4_3$	588.5	30	1.4e-17
$3_3 - 3_2$	339.3	17	2.2e-15	$2_{31} - 3_{21}$	595.7	135	2.2e-18
$7_8 - 6_7$	340.7	56	7.4e-15	$3_{41} - 2_{31}$	601.2	155	7.9e-15
$8_8 - 7_7$	344.3	60	6.1e-15	$4_{41} - 3_{31}$	602.3	159	7.7e-15
$2_3 - 2_1$	345.7	14	2.1e-17	$5_{41} - 4_{31}$	603.0	154	8.1e-15
$9_8 - 8_7$	**346.5**	54	8.4e-15	$0_1 - 0_{91}$	609.9	88	4.4e-16
$6_7 - 7_6$	361.3	45	1.4e-17	$4_5 - 3_2$	611.5	26	2.6e-15
$4_4 - 4_3$	373.3	23	2.0e-15	$6_7 - 6_5$	623.2	45	1.7e-17
$1_{21} - 1_{11}$	378.0	116	6.9e-17	$3_{41} - 4_{31}$	636.8	155	1.9e-18
$8_9 - 7_8$	384.5	69	6.8e-15	$4_{51} - 3_{41}$	**644.4**	176	9.0e-15
$9_9 - 8_8$	387.3	73	5.7e-15	$5_{51} - 4_{41}$	645.2	181	8.9e-15
$0_{91} - 9_8$	389.1	67	7.3e-15	$6_{51} - 5_{41}$	645.8	175	9.1e-15
$7_8 - 8_7$	398.0	56	8.1e-18	$1_{11} - 1_1$	651.5	103	4.2e-16
$3_4 - 3_2$	405.4	19	2.5e-17	$6_6 - 5_4$	668.2	39	1.1e-17
$2_3 - 1_0$	408.6	14	2.8e-15	$4_{51} - 5_{41}$	678.1	176	1.6e-18
$5_5 - 5_4$	409.9	30	1.5e-15	$5_{61} - 4_{51}$	**687.4**	199	9.6e-15
$2_{31} - 2_{21}$	419.8	135	7.5e-17	$6_{61} - 5_{51}$	688.2	204	9.4e-15
$9_0 - 8_9$	428.1	83	6.4e-15	$7_{61} - 6_{51}$	688.7	198	1.0e-14
$0_1 - 9_9$	430.3	88	5.6e-15	$2_{21} - 2_{11}$	693.2	121	4.0e-16
$1_1 - 0_{91}$	431.8	82	6.6e-15	$7_8 - 7_6$	702.0	56	1.3e-17
$8_9 - 9_8$	436.0	69	5.4e-18	$5_{61} - 6_{51}$	719.7	199	1.3e-18
$6_6 - 6_5$	448.2	39	1.1e-15	$5_6 - 4_3$	725.2	35	1.8e-15
$3_{41} - 3_{31}$	461.7	155	8.0e-17	$8_{71} - 7_{61}$	731.6	222	1.1e-14
$0_{11} - 9_0$	471.5	99	6.3e-15	$3_{31} - 3_{21}$	735.2	139	3.8e-16
$1_{11} - 0_1$	473.3	103	5.7e-15	$7_7 - 6_5$	749.5	49	7.8e-18
$4_5 - 4_3$	473.4	26	2.5e-17	$4_{41} - 4_{31}$	777.3	159	3.6e-16
$2_{11} - 1_1$	474.5	97	6.4e-15	$8_9 - 8_7$	782.5	69	1.2e-17
$9_0 - 0_{91}$	475.0	83	4.0e-18	$5_{51} - 5_{41}$	819.5	181	3.3e-16
$7_7 - 7_6$	487.7	49	7.6e-16	$8_8 - 7_6$	832.0	60	6.2e-18
$4_{51} - 4_{41}$	503.8	176	8.2e-17	$6_7 - 5_4$	843.1	45	1.2e-15
$3_4 - 2_1$	504.7	19	3.1e-15	$6_{61} - 6_{51}$	861.9	204	3.0e-16
$4_4 - 3_2$	511.5	23	1.7e-17	$9_0 - 9_8$	864.1	83	1.1e-17
$0_{11} - 1_1$	514.7	99	3.2e-18	$9_9 - 8_7$	915.2	73	5.4e-18
$1_{21} - 0_{11}$	514.8	116	6.5e-15	$0_{11} - 0_{91}$	946.5	99	1.1e-17
$2_{21} - 1_{11}$	516.3	121	6.2e-15	$7_8 - 6_5$	963.9	56	7.6e-16
$3_{21} - 2_{11}$	517.3	115	6.6e-15	$0_1 - 9_8$	999.0	88	5.0e-18

TAB. 29: Transitions ($J_{K_-,K_+} - J'_{K'_-,K'_+}$), fréquences, énergies up et flux des raies de $^{32}SO_2$ pour l'exemple, i.e. $M_* = 0.8\ M_\odot$, $\dot{M} = 3 \times 10^{-5}\ M_\odot$ an^{-1}, $x_{warm}(SO_2) = 1 \times 10^{-7}$ et $x_{cold}(SO_2) = 1 \times 10^{-9}$. Les fréquences indiquées en gras dans le tableau font référence aux transitions étudiées ìla section 2.2.2.

Transition	Frequence (GHz)	Eup (cm^{-1})	Flux (erg s^{-1} cm^{-2})	Transition	Frequence (GHz)	Eup (cm^{-1})	Flux (erg s^{-1} cm^{-2})
$27_{2,26} - 26_{3,23}$	2.8	243	3.3e-26	$23_{3,21} - 22_{4,18}$	66.7	191	6.4e-20
$19_{3,17} - 18_{4,14}$	4.0	136	1.6e-24	$19_{5,15} - 20_{4,16}$	67.8	164	8.7e-20
$11_{3,9} - 12_{2,10}$	4.5	57	2.0e-23	$6_{1,5} - 6_{0,6}$	69.0	15	3.3e-17
$15_{2,14} - 14_{3,11}$	7.2	82	4.6e-23	$14_{4,10} - 15_{3,13}$	69.5	94	2.9e-19
$12_{2,10} - 13_{1,13}$	8.4	57	9.9e-23	$1_{1,1} - 0_{0,0}$	69.6	2	1.7e-17
$18_{3,15} - 17_{4,14}$	9.4	125	5.8e-23	$3_{2,2} - 4_{1,3}$	69.7	10	3.6e-18
$10_{2,8} - 11_{1,11}$	11.8	42	9.5e-22	$4_{2,2} - 5_{1,5}$	70.1	13	4.0e-18
$22_{5,17} - 23_{4,20}$	12.1	204	6.5e-23	$6_{0,6} - 5_{1,5}$	72.8	13	2.6e-17
$1_{1,1} - 2_{0,2}$	12.3	2	8.7e-21	$10_{1,9} - 9_{2,8}$	76.4	38	5.6e-18
$14_{2,12} - 15_{1,15}$	14.6	75	3.3e-22	$13_{4,10} - 14_{3,11}$	82.9	85	7.1e-19
$12_{3,9} - 13_{2,12}$	20.3	65	5.5e-21	$8_{1,7} - 8_{0,8}$	83.7	25	4.3e-17
$24_{4,20} - 23_{5,19}$	22.5	220	6.8e-22	$8_{3,5} - 9_{2,8}$	86.6	38	4.3e-18
$5_{2,4} - 6_{1,5}$	23.4	16	7.2e-20	$20_{2,18} - 21_{1,21}$	86.8	144	3.0e-20
$21_{5,17} - 22_{4,18}$	24.0	190	1.1e-21	$25_{3,23} - 24_{4,20}$	90.5	223	1.5e-19
$8_{2,6} - 9_{1,9}$	24.1	29	3.4e-20	$18_{5,13} - 19_{4,16}$	91.5	151	3.2e-19
$8_{1,7} - 7_{2,6}$	25.4	25	9.4e-20	$23_{6,18} - 24_{5,19}$	94.1	237	1.6e-19
$25_{4,22} - 24_{5,19}$	26.8	235	1.2e-21	$7_{3,5} - 8_{2,6}$	97.7	33	7.6e-18
$25_{2,24} - 24_{3,21}$	27.9	211	5.6e-22	$2_{2,0} - 3_{1,3}$	100.9	8	7.3e-18
$17_{2,16} - 16_{3,13}$	28.9	103	6.4e-21	$3_{1,3} - 2_{0,2}$	**104.0**	5	1.3e-16
$4_{0,4} - 3_{1,3}$	29.3	6	6.5e-19	$16_{2,14} - 15_{3,13}$	104.0	95	2.0e-18
$16_{2,14} - 17_{1,17}$	30.2	95	2.2e-21	$10_{1,9} - 10_{0,10}$	104.2	38	5.3e-17
$16_{4,12} - 17_{3,15}$	31.9	114	8.9e-21	$12_{4,8} - 13_{3,11}$	107.8	77	2.5e-18
$21_{3,19} - 20_{4,16}$	37.4	163	8.7e-21	$17_{5,13} - 18_{4,14}$	109.8	140	7.2e-19
$15_{4,12} - 16_{3,13}$	38.5	104	2.3e-20	$22_{6,16} - 23_{5,19}$	115.3	223	4.0e-19
$19_{2,18} - 18_{3,15}$	43.0	126	1.7e-20	$8_{0,8} - 7_{1,7}$	117.0	22	1.4e-16
$23_{2,22} - 22_{3,19}$	43.2	180	5.7e-21	$22_{3,19} - 21_{4,18}$	118.6	179	8.4e-19
$6_{2,4} - 7_{1,7}$	44.0	20	5.9e-19	$6_{3,3} - 7_{2,6}$	123.1	28	1.9e-17
$14_{2,12} - 13_{3,11}$	47.9	75	1.5e-19	$11_{4,8} - 12_{3,9}$	124.9	69	5.3e-18
$21_{2,20} - 20_{3,17}$	48.1	152	1.6e-20	$22_{2,20} - 23_{1,23}$	125.4	172	6.8e-20
$20_{5,15} - 21_{4,18}$	51.7	176	2.6e-20	$12_{2,10} - 12_{1,11}$	128.6	57	6.7e-17
$10_{3,7} - 11_{2,10}$	52.1	50	3.9e-19	$12_{1,11} - 11_{2,10}$	129.1	53	2.9e-17
$9_{3,7} - 10_{2,8}$	53.0	44	5.4e-19	$10_{2,8} - 10_{1,9}$	129.5	42	1.2e-16
$2_{1,1} - 2_{0,2}$	53.5	3	1.3e-17	$12_{1,11} - 12_{0,12}$	131.0	53	6.0e-17
$18_{2,16} - 19_{1,19}$	54.6	118	9.8e-21	$16_{5,11} - 17_{4,14}$	131.3	129	1.6e-18
$4_{1,3} - 4_{0,4}$	59.2	8	2.3e-17	$14_{2,12} - 14_{1,13}$	132.7	75	4.1e-17
$20_{3,17} - 19_{4,16}$	61.6	150	7.9e-20	$8_{2,6} - 8_{1,7}$	134.0	29	1.9e-16

$21_{6,16} - 22_{5,17}$	134.9	209	8.1e-19
$5_{1,5} - 4_{0,4}$	**135.7**	10	3.9e-16
$5_{3,3} - 6_{2,4}$	139.4	24	2.8e-17
$6_{2,4} - 6_{1,5}$	140.3	20	2.8e-16
$16_{2,14} - 16_{1,15}$	143.0	95	2.9e-17
$10_{4,6} - 11_{3,9}$	146.5	62	1.2e-17
$4_{2,2} - 4_{1,3}$	146.6	13	3.3e-16
$15_{5,11} - 16_{4,12}$	150.4	119	3.1e-18
$2_{2,0} - 2_{1,1}$	151.4	8	2.0e-16
$20_{6,14} - 21_{5,17}$	155.4	195	1.5e-18
$3_{2,2} - 3_{1,3}$	**158.2**	10	3.4e-16
$18_{2,16} - 18_{1,17}$	160.3	118	2.6e-17
$4_{3,1} - 5_{2,4}$	160.5	21	3.6e-17
$10_{0,10} - 9_{1,9}$	160.8	34	3.5e-16
$18_{2,16} - 17_{3,15}$	163.1	118	8.0e-18
$14_{1,13} - 14_{0,14}$	163.6	70	6.3e-17
$9_{4,6} - 10_{3,7}$	165.1	56	2.1e-17
$5_{2,4} - 5_{1,5}$	165.1	16	4.5e-16
$7_{1,7} - 6_{0,6}$	165.2	18	6.9e-16
$24_{2,22} - 25_{1,25}$	168.8	203	1.3e-19
$14_{5,9} - 15_{4,12}$	170.7	109	5.8e-18
$19_{6,14} - 20_{5,15}$	175.1	182	2.7e-18
$7_{2,6} - 7_{1,7}$	175.3	24	4.5e-16
$3_{3,1} - 4_{2,2}$	179.0	19	2.7e-17
$24_{3,21} - 23_{4,20}$	180.0	210	3.5e-18
$14_{1,13} - 13_{2,12}$	182.7	70	7.0e-17
$20_{2,18} - 20_{1,19}$	185.0	144	2.8e-17
$8_{4,4} - 9_{3,7}$	185.3	50	3.5e-17
$9_{2,8} - 9_{1,9}$	188.6	35	3.9e-16
$13_{5,9} - 14_{4,10}$	190.1	100	1.0e-17
$2_{2,0} - 1_{1,1}$	192.6	8	8.7e-16
$9_{1,9} - 8_{0,8}$	193.6	29	9.2e-16
$18_{6,12} - 19_{5,15}$	195.1	170	4.4e-18
$22_{3,19} - 22_{2,20}$	195.3	179	2.8e-17
$20_{3,17} - 20_{2,18}$	197.1	150	3.7e-17
$24_{3,21} - 24_{2,22}$	200.3	210	2.4e-17
$16_{1,15} - 16_{0,16}$	200.8	90	6.4e-17
$12_{0,12} - 11_{1,11}$	203.4	48	5.4e-16
$18_{3,15} - 18_{2,16}$	204.2	125	5.6e-17
$7_{4,4} - 8_{3,5}$	204.4	45	5.1e-17
$11_{2,10} - 11_{1,11}$	205.3	48	3.1e-16
$3_{2,2} - 2_{1,1}$	208.7	10	1.2e-15
$12_{5,7} - 13_{4,10}$	209.9	92	1.7e-17
$26_{3,23} - 26_{2,24}$	213.1	243	2.2e-17

$16_{3,13} - 16_{2,14}$	214.7	102	9.7e-17
$17_{6,12} - 18_{5,13}$	214.7	159	6.9e-18
$26_{2,24} - 27_{1,27}$	215.1	236	2.0e-19
$22_{2,20} - 22_{1,21}$	216.6	172	3.5e-17
$22_{7,15} - 23_{6,18}$	219.3	245	3.7e-18
$11_{1,11} - 10_{0,10}$	222.0	41	1.0e-15
$6_{4,2} - 7_{3,5}$	223.9	40	6.4e-17
$20_{2,18} - 19_{3,17}$	224.3	144	2.2e-17
$13_{2,12} - 13_{1,13}$	225.1	64	2.3e-16
$14_{3,11} - 14_{2,12}$	226.3	82	1.9e-16
$11_{5,7} - 12_{4,8}$	229.3	84	2.6e-17
$16_{6,10} - 17_{5,13}$	234.4	148	1.0e-17
$4_{2,2} - 3_{1,3}$	235.1	13	1.6e-15
$16_{1,15} - 15_{2,14}$	236.2	90	1.2e-16
$12_{3,9} - 12_{2,10}$	237.1	65	3.7e-16
$17_{3,15} - 18_{0,18}$	238.2	113	1.4e-18
$21_{7,15} - 22_{6,16}$	239.0	231	5.6e-18
$15_{3,13} - 16_{0,16}$	239.8	92	2.1e-18
$18_{1,17} - 18_{0,18}$	240.9	113	6.7e-17
$5_{2,4} - 4_{1,3}$	241.6	16	1.8e-15
$19_{3,17} - 20_{0,20}$	243.0	136	1.0e-18
$5_{4,2} - 6_{3,3}$	243.1	36	6.4e-17
$14_{0,14} - 13_{1,13}$	244.2	65	6.3e-16
$26_{3,23} - 25_{4,22}$	245.3	243	9.7e-18
$10_{3,7} - 10_{2,8}$	245.6	50	6.8e-16
$15_{2,14} - 15_{1,15}$	248.0	82	1.7e-16
$13_{3,11} - 14_{0,14}$	248.4	73	3.5e-18
$10_{5,5} - 11_{4,8}$	248.8	77	3.8e-17
$13_{1,13} - 12_{0,12}$	251.2	57	9.5e-16
$8_{3,5} - 8_{2,6}$	251.2	38	1.1e-15
$21_{3,19} - 22_{0,22}$	253.7	163	8.2e-19
$15_{6,10} - 16_{5,11}$	253.9	138	1.5e-17
$24_{2,22} - 24_{1,23}$	254.3	203	4.4e-17
$6_{3,3} - 6_{2,4}$	254.3	28	1.4e-15
$4_{3,1} - 4_{2,2}$	255.5	21	1.2e-15
$3_{3,1} - 3_{2,2}$	255.9	19	8.0e-16
$5_{3,3} - 5_{2,4}$	256.2	24	1.4e-15
$7_{3,5} - 7_{2,6}$	257.1	33	1.3e-15
$20_{7,13} - 21_{6,16}$	258.7	217	8.2e-18
$9_{3,7} - 9_{2,8}$	258.9	44	1.0e-15
$11_{3,9} - 11_{2,10}$	262.2	57	6.7e-16
$4_{4,0} - 5_{3,3}$	262.3	33	4.2e-17
$25_{4,22} - 26_{1,25}$	263.9	235	8.1e-19
$11_{3,9} - 12_{0,12}$	264.2	57	5.5e-18

$13_{3,11} - 13_{2,12}$	267.5	73	4.2e-16
$9_{5,5} - 10_{4,6}$	268.2	71	5.3e-17
$23_{3,21} - 24_{0,24}$	269.8	191	7.2e-19
$7_{2,6} - 6_{1,5}$	271.5	24	2.1e-15
$14_{6,8} - 15_{5,11}$	273.5	128	2.1e-17
$17_{2,16} - 17_{1,17}$	273.7	103	1.3e-16
$23_{4,20} - 24_{1,23}$	274.5	204	1.1e-18
$15_{3,13} - 15_{2,14}$	275.2	92	2.7e-16
$19_{7,13} - 20_{6,14}$	278.2	204	1.2e-17
$15_{1,15} - 14_{0,14}$	281.8	74	8.2e-16
$6_{2,4} - 5_{1,5}$	282.0	20	2.3e-15
$20_{1,19} - 20_{0,20}$	282.3	138	7.5e-17
$16_{0,16} - 15_{1,15}$	283.5	84	6.2e-16
$17_{3,15} - 17_{2,16}$	285.7	113	1.9e-16
$22_{2,20} - 21_{3,19}$	286.4	172	4.7e-17
$9_{3,7} - 10_{0,10}$	286.8	44	7.1e-18
$8_{5,3} - 9_{4,6}$	287.5	65	6.6e-17
$18_{1,17} - 17_{2,16}$	288.5	113	1.8e-16
$25_{3,23} - 26_{0,26}$	290.4	223	6.5e-19
$13_{6,8} - 14_{5,9}$	292.9	119	2.9e-17
$21_{4,18} - 22_{1,21}$	293.4	175	1.5e-18
$26_{2,24} - 26_{1,25}$	296.2	236	5.4e-17
$24_{4,20} - 24_{3,21}$	296.5	220	8.1e-17
$18_{7,11} - 19_{6,14}$	297.8	192	1.6e-17
$9_{2,8} - 8_{1,7}$	298.6	35	2.0e-15
$19_{3,17} - 19_{2,18}$	299.3	136	1.5e-16
$19_{2,18} - 19_{1,19}$	301.9	126	1.2e-16
$7_{5,3} - 8_{4,4}$	306.7	60	7.3e-17
$12_{6,6} - 13_{5,9}$	312.2	111	3.7e-17
$22_{4,18} - 22_{3,19}$	312.5	189	1.2e-16
$3_{3,1} - 2_{2,0}$	313.3	19	4.9e-15
$17_{1,17} - 16_{0,16}$	313.6	94	7.0e-16
$7_{3,5} - 8_{0,8}$	315.4	33	6.3e-18
$21_{3,19} - 21_{2,20}$	316.1	163	1.4e-16
$17_{7,11} - 18_{6,12}$	317.2	181	2.1e-17
$19_{4,16} - 20_{1,19}$	320.5	148	2.1e-18
$18_{0,18} - 17_{1,17}$	**321.3**	105	5.9e-16
$11_{2,10} - 10_{1,9}$	323.0	48	1.7e-15
$22_{1,21} - 22_{0,22}$	323.5	165	8.5e-17
$6_{5,1} - 7_{4,4}$	325.9	56	6.6e-17
$20_{4,16} - 20_{3,17}$	326.9	161	1.8e-16
$11_{6,6} - 12_{5,7}$	331.6	103	4.7e-17
$21_{2,20} - 21_{1,21}$	332.1	152	1.1e-16
$4_{3,1} - 3_{2,2}$	332.5	21	5.5e-15

$8_{2,6} - 7_{1,7}$	334.7	29	2.5e-15
$23_{3,21} - 23_{2,22}$	336.1	191	1.3e-16
$16_{7,9} - 17_{6,12}$	336.7	170	2.7e-17
$18_{4,14} - 18_{3,15}$	338.3	136	2.6e-16
$20_{1,19} - 19_{2,18}$	**338.6**	138	2.5e-16
$5_{5,1} - 6_{4,2}$	345.1	52	3.9e-17
$13_{2,12} - 12_{1,11}$	345.3	64	1.3e-15
$16_{4,12} - 16_{3,13}$	346.5	114	3.9e-16
$19_{1,19} - 18_{0,18}$	346.6	116	6.3e-16
$24_{2,22} - 23_{3,21}$	348.4	203	8.8e-17
$5_{3,3} - 6_{0,6}$	348.6	24	3.0e-18
$10_{6,4} - 11_{5,7}$	350.8	96	5.7e-17
$5_{3,3} - 4_{2,2}$	351.2	24	5.9e-15
$14_{4,10} - 14_{3,11}$	351.9	94	6.2e-16
$12_{4,8} - 12_{3,9}$	355.0	77	9.9e-16
$17_{4,14} - 18_{1,17}$	355.2	125	2.8e-18
$15_{7,9} - 16_{6,10}$	356.0	160	3.4e-17
$10_{4,6} - 10_{3,7}$	356.7	62	1.5e-15
$13_{4,10} - 13_{3,11}$	357.1	85	8.1e-16
$15_{4,12} - 15_{3,13}$	357.2	104	5.3e-16
$11_{4,8} - 11_{3,9}$	357.4	69	1.3e-15
$8_{4,4} - 8_{3,5}$	357.6	50	2.1e-15
$9_{4,6} - 9_{3,7}$	357.7	56	1.8e-15
$7_{4,4} - 7_{3,5}$	357.9	45	2.3e-15
$6_{4,2} - 6_{3,3}$	357.9	40	2.3e-15
$17_{4,14} - 17_{3,15}$	357.9	125	3.7e-16
$5_{4,2} - 5_{3,3}$	358.0	36	2.0e-15
$4_{4,0} - 4_{3,1}$	358.0	33	1.3e-15
$20_{0,20} - 19_{1,19}$	358.2	128	5.9e-16
$25_{3,23} - 25_{2,24}$	359.1	223	1.2e-16
$19_{4,16} - 19_{3,17}$	359.8	148	2.8e-16
$20_{8,12} - 21_{7,15}$	360.7	243	2.0e-17
$21_{4,18} - 21_{3,19}$	363.1	175	2.3e-16
$24_{1,23} - 24_{0,24}$	363.9	194	9.4e-17
$23_{2,22} - 23_{1,23}$	363.9	180	1.1e-16
$15_{2,14} - 14_{1,13}$	366.2	82	9.1e-16
$23_{4,20} - 23_{3,21}$	368.6	204	1.9e-16
$9_{6,4} - 10_{5,5}$	370.1	90	6.3e-17
$6_{3,3} - 5_{2,4}$	371.2	28	6.2e-15
$14_{7,7} - 15_{6,10}$	375.4	150	4.1e-17
$25_{4,22} - 25_{3,23}$	376.6	235	1.6e-16
$19_{8,12} - 20_{7,13}$	380.1	230	2.6e-17
$21_{1,21} - 20_{0,20}$	380.4	141	6.3e-16
$3_{3,1} - 4_{0,4}$	384.8	19	3.6e-19

$22_{1,21} - 21_{2,20}$	385.9	165	3.3e-16
$17_{2,16} - 16_{1,15}$	386.6	103	7.0e-16
$7_{3,5} - 6_{2,4}$	388.3	33	6.1e-15
$8_{6,2} - 9_{5,5}$	389.3	84	6.3e-17
$22_{0,22} - 21_{1,21}$	394.4	154	6.2e-16
$10_{2,8} - 9_{1,9}$	394.6	42	2.2e-15
$13_{7,7} - 14_{6,8}$	394.6	141	4.8e-17
$15_{4,12} - 16_{1,15}$	396.2	104	3.6e-18
$25_{2,24} - 25_{1,25}$	397.0	211	1.1e-16
$18_{8,10} - 19_{7,13}$	399.5	218	3.2e-17
$26_{1,25} - 26_{0,26}$	403.1	226	1.0e-16
$19_{2,18} - 18_{1,17}$	407.6	126	6.0e-16
$7_{6,2} - 8_{5,3}$	408.5	79	5.2e-17
$26_{2,24} - 25_{3,23}$	408.9	236	1.4e-16
$8_{3,5} - 7_{2,6}$	410.6	38	6.0e-15
$12_{7,5} - 13_{6,8}$	413.9	133	5.5e-17
$23_{1,23} - 22_{0,22}$	414.7	168	6.6e-16
$17_{8,10} - 18_{7,11}$	418.8	206	3.9e-17
$25_{5,21} - 26_{2,24}$	421.2	250	1.8e-18
$9_{3,7} - 8_{2,6}$	423.5	44	5.3e-15
$6_{6,0} - 7_{5,3}$	427.7	74	2.8e-17
$24_{1,23} - 23_{2,22}$	430.2	194	4.1e-16
$24_{0,24} - 23_{1,23}$	430.2	182	6.7e-16
$21_{2,20} - 20_{1,19}$	430.2	152	5.7e-16
$27_{2,26} - 27_{1,27}$	431.0	243	1.1e-16
$11_{7,5} - 12_{6,6}$	433.1	125	5.9e-17
$4_{4,0} - 3_{3,1}$	434.6	33	1.0e-14
$16_{8,8} - 17_{7,11}$	438.1	195	4.6e-17
$24_{5,19} - 24_{4,20}$	440.4	234	2.9e-16
$13_{4,10} - 14_{1,13}$	442.0	85	4.4e-18
$22_{5,17} - 22_{4,18}$	447.5	204	3.8e-16
$25_{1,25} - 24_{0,24}$	449.4	197	7.0e-16
$10_{3,7} - 9_{2,8}$	451.5	50	5.0e-15
$20_{5,15} - 20_{4,16}$	452.2	176	4.8e-16
$10_{7,3} - 11_{6,6}$	452.4	118	5.9e-17
$25_{5,21} - 25_{4,22}$	453.5	250	2.8e-16
$5_{4,2} - 4_{3,1}$	453.7	36	1.1e-14
$23_{5,19} - 23_{4,20}$	454.1	219	3.6e-16
$23_{2,22} - 22_{1,21}$	455.1	180	5.7e-16
$21_{5,17} - 21_{4,18}$	455.1	190	4.4e-16
$18_{5,13} - 18_{4,14}$	455.3	151	6.1e-16
$11_{3,9} - 10_{2,8}$	455.7	57	4.0e-15
$19_{5,15} - 19_{4,16}$	456.3	164	5.5e-16
$16_{5,11} - 16_{4,12}$	457.3	129	7.9e-16
$15_{8,8} - 16_{7,9}$	457.4	185	5.3e-17
$17_{5,13} - 17_{4,14}$	**457.4**	140	7.0e-16
$15_{5,11} - 15_{4,12}$	458.4	119	9.1e-16
$14_{5,9} - 14_{4,10}$	458.5	109	1.1e-15
$13_{5,9} - 13_{4,10}$	459.1	100	1.2e-15
$12_{5,7} - 12_{4,8}$	459.2	92	1.5e-15
$11_{5,7} - 11_{4,8}$	459.5	84	1.7e-15
$10_{5,5} - 10_{4,6}$	459.6	77	2.0e-15
$9_{5,5} - 9_{4,6}$	459.8	71	2.2e-15
$8_{5,3} - 8_{4,4}$	459.9	65	2.4e-15
$7_{5,3} - 7_{4,4}$	459.9	60	2.3e-15
$6_{5,1} - 6_{4,2}$	460.0	56	2.1e-15
$5_{5,1} - 5_{4,2}$	460.0	52	1.3e-15
$4_{3,1} - 4_{0,4}$	461.4	21	7.9e-18
$12_{2,10} - 11_{1,11}$	463.0	57	1.6e-15
$6_{3,3} - 6_{0,6}$	463.5	28	4.1e-17
$26_{0,26} - 25_{1,25}$	465.7	213	7.1e-16
$8_{3,5} - 8_{0,8}$	468.9	38	9.6e-17
$9_{7,3} - 10_{6,4}$	471.5	112	5.4e-17
$26_{1,25} - 25_{2,24}$	471.9	226	4.9e-16
$6_{4,2} - 5_{3,3}$	472.8	40	1.0e-14
$23_{5,19} - 24_{2,22}$	474.3	219	2.4e-18
$14_{8,6} - 15_{7,9}$	476.6	176	5.8e-17
$10_{3,7} - 10_{0,10}$	479.3	50	1.4e-16
$25_{2,24} - 24_{1,23}$	482.5	211	5.9e-16
$27_{1,27} - 26_{0,26}$	484.2	229	7.4e-16
$13_{3,11} - 12_{2,10}$	484.3	73	2.7e-15
$11_{4,8} - 12_{1,11}$	490.5	69	4.6e-18
$8_{7,1} - 9_{6,4}$	490.7	106	4.0e-17
$7_{4,4} - 6_{3,3}$	491.9	45	1.0e-14
$12_{3,9} - 11_{2,10}$	494.8	65	3.7e-15
$13_{8,6} - 14_{7,7}$	495.8	167	6.2e-17
$12_{3,9} - 12_{0,12}$	496.7	65	1.5e-16
$18_{9,9} - 19_{8,12}$	500.4	247	4.9e-17
$28_{0,28} - 27_{1,27}$	501.1	246	7.4e-16
$15_{3,13} - 14_{2,12}$	508.7	92	1.8e-15
$7_{7,1} - 8_{6,2}$	509.9	101	2.0e-17
$8_{4,4} - 7_{3,5}$	511.1	50	9.4e-15
$27_{2,26} - 26_{1,25}$	512.1	243	6.0e-16
$12_{8,4} - 13_{7,7}$	515.0	158	6.2e-17
$3_{3,1} - 2_{0,2}$	518.2	19	1.6e-18
$17_{9,9} - 18_{8,10}$	519.7	235	5.5e-17
$14_{3,11} - 14_{0,14}$	522.6	82	1.3e-16
$17_{3,15} - 16_{2,14}$	529.3	113	1.3e-15

$9_{4,6} - 8_{3,5}$	530.0	56	8.5e-15
$21_{5,17} - 22_{2,20}$	531.9	190	2.9e-18
$11_{8,4} - 12_{7,5}$	534.2	151	5.8e-17
$16_{9,7} - 17_{8,10}$	538.9	224	6.1e-17
$9_{4,6} - 10_{1,9}$	540.2	56	3.8e-18
$14_{2,12} - 13_{1,13}$	540.6	75	1.1e-15
$14_{3,11} - 13_{2,12}$	541.7	82	2.6e-15
$19_{3,17} - 18_{2,16}$	546.6	136	1.0e-15
$10_{4,6} - 9_{3,7}$	549.3	62	7.6e-15
$10_{8,2} - 11_{7,5}$	553.4	144	4.9e-17
$5_{5,1} - 4_{4,0}$	555.6	52	1.3e-14
$23_{6,18} - 23_{5,19}$	556.9	237	6.3e-16
$5_{3,3} - 4_{0,4}$	557.1	24	2.4e-17
$22_{6,16} - 22_{5,17}$	557.3	223	7.0e-16
$15_{9,7} - 16_{8,8}$	558.1	214	6.5e-17
$21_{6,16} - 21_{5,17}$	558.4	209	7.7e-16
$16_{3,13} - 16_{0,16}$	558.5	102	1.1e-16
$20_{6,14} - 20_{5,15}$	558.8	195	8.5e-16
$19_{6,14} - 19_{5,15}$	559.5	182	9.3e-16
$18_{6,12} - 18_{5,13}$	559.9	170	1.0e-15
$17_{6,12} - 17_{5,13}$	560.3	159	1.1e-15
$16_{6,10} - 16_{5,11}$	560.6	148	1.2e-15
$15_{6,10} - 15_{5,11}$	560.9	138	1.3e-15
$14_{6,8} - 14_{5,9}$	561.1	128	1.5e-15
$13_{6,8} - 13_{5,9}$	561.2	119	1.6e-15
$21_{3,19} - 20_{2,18}$	561.3	163	8.5e-16
$12_{6,6} - 12_{5,7}$	561.4	111	1.7e-15
$11_{6,6} - 11_{5,7}$	561.5	103	1.9e-15
$10_{6,4} - 10_{5,5}$	561.5	96	2.0e-15
$9_{6,4} - 9_{5,5}$	561.6	90	2.1e-15
$8_{6,2} - 8_{5,3}$	561.6	84	2.0e-15
$7_{6,2} - 7_{5,3}$	561.6	79	1.7e-15
$6_{6,0} - 6_{5,1}$	561.6	74	1.1e-15
$11_{4,8} - 10_{3,7}$	567.6	69	6.6e-15
$9_{8,2} - 10_{7,3}$	572.5	137	3.5e-17
$23_{3,21} - 22_{2,20}$	574.6	191	7.5e-16
$6_{5,1} - 5_{4,2}$	574.8	56	1.3e-14
$14_{9,5} - 15_{8,8}$	577.3	204	6.7e-17
$25_{3,23} - 24_{2,22}$	587.3	223	6.8e-16
$12_{4,8} - 11_{3,9}$	587.5	77	5.6e-15
$7_{4,4} - 8_{1,7}$	589.6	45	2.0e-18
$16_{4,12} - 17_{1,17}$	591.4	114	2.7e-18
$8_{8,0} - 9_{7,3}$	591.7	131	1.6e-17
$19_{5,15} - 20_{2,18}$	591.8	164	3.2e-18

$14_{4,10} - 15_{1,15}$	592.7	94	3.1e-18
$7_{5,3} - 6_{4,2}$	593.9	60	1.2e-14
$16_{3,13} - 15_{2,14}$	593.9	102	1.9e-15
$13_{9,5} - 14_{8,6}$	596.4	195	6.5e-17
$18_{4,14} - 19_{1,19}$	597.2	136	2.3e-18
$7_{3,5} - 6_{0,6}$	597.6	33	1.0e-16
$12_{4,8} - 13_{1,13}$	600.5	77	3.5e-18
$13_{4,10} - 12_{3,9}$	604.3	85	4.7e-15
$18_{3,15} - 18_{0,18}$	605.5	125	8.5e-17
$20_{4,16} - 21_{1,21}$	610.8	161	2.0e-18
$8_{5,3} - 7_{4,4}$	613.0	65	1.1e-14
$10_{4,6} - 11_{1,11}$	614.1	62	3.4e-18
$12_{9,3} - 13_{8,6}$	615.6	187	5.8e-17
$14_{4,10} - 13_{3,11}$	626.1	94	4.1e-15
$16_{2,14} - 15_{1,15}$	627.3	95	7.1e-16
$9_{5,5} - 8_{4,4}$	632.2	71	1.0e-14
$8_{4,4} - 9_{1,9}$	632.8	50	2.4e-18
$22_{4,18} - 23_{1,23}$	633.3	189	1.7e-18
$11_{9,3} - 12_{8,4}$	634.8	179	4.7e-17
$5_{4,2} - 6_{1,5}$	637.6	36	4.9e-19
$15_{4,12} - 14_{3,11}$	639.6	104	3.5e-15
$9_{3,7} - 8_{0,8}$	641.2	44	2.3e-16
$10_{5,5} - 9_{4,6}$	651.3	77	9.0e-15
$17_{5,13} - 18_{2,16}$	652.3	140	3.3e-18
$18_{3,15} - 17_{2,16}$	653.1	125	1.5e-15
$10_{9,1} - 11_{8,4}$	653.9	172	3.2e-17
$6_{4,2} - 7_{1,7}$	656.2	40	9.8e-19
$15_{10,6} - 16_{9,7}$	658.2	246	6.7e-17
$22_{7,15} - 22_{6,16}$	660.9	245	1.0e-15
$21_{7,15} - 21_{6,16}$	661.3	231	1.1e-15
$20_{7,13} - 20_{6,14}$	661.6	217	1.2e-15
$19_{7,13} - 19_{6,14}$	661.9	204	1.3e-15
$18_{7,11} - 18_{6,12}$	662.2	192	1.4e-15
$17_{7,11} - 17_{6,12}$	662.4	181	1.5e-15
$16_{7,9} - 16_{6,10}$	662.5	170	1.6e-15
$15_{7,9} - 15_{6,10}$	662.7	160	1.7e-15
$14_{7,7} - 14_{6,8}$	662.8	150	1.8e-15
$13_{7,7} - 13_{6,8}$	662.8	141	1.9e-15
$12_{7,5} - 12_{6,6}$	662.9	133	1.9e-15
$11_{7,5} - 11_{6,6}$	662.9	125	1.9e-15
$10_{7,3} - 10_{6,4}$	663.0	118	1.9e-15
$9_{7,3} - 9_{6,4}$	663.0	112	1.7e-15
$7_{7,1} - 7_{6,2}$	663.0	101	8.6e-16
$8_{7,1} - 8_{6,2}$	663.0	106	1.4e-15

$20_{3,17} - 20_{0,20}$	664.4	150	6.9e-17	$10_{6,4} - 9_{5,5}$	753.0	96	9.3e-15
$16_{4,12} - 15_{3,13}$	665.2	114	3.2e-15	$10_{10,0} - 11_{9,3}$	753.9	205	1.3e-17
$24_{4,20} - 25_{1,25}$	665.6	220	1.4e-18	$4_{4,0} - 4_{1,3}$	760.2	33	6.9e-19
$11_{5,7} - 10_{4,6}$	670.3	84	7.9e-15	$20_{8,12} - 20_{7,13}$	763.4	243	1.6e-15
$17_{4,14} - 16_{3,13}$	672.5	125	2.7e-15	$19_{8,12} - 19_{7,13}$	763.5	230	1.7e-15
$9_{9,1} - 10_{8,2}$	673.0	166	1.4e-17	$18_{8,10} - 18_{7,11}$	763.6	218	1.8e-15
$6_{6,0} - 5_{5,1}$	676.5	74	1.3e-14	$25_{4,22} - 24_{3,21}$	763.7	235	1.3e-15
$14_{10,4} - 15_{9,7}$	677.4	237	6.4e-17	$17_{8,10} - 17_{7,11}$	763.7	206	1.9e-15
$4_{4,0} - 5_{1,5}$	683.7	33	1.1e-19	$16_{8,8} - 16_{7,9}$	763.8	195	2.0e-15
$12_{5,7} - 11_{4,8}$	689.4	92	7.0e-15	$15_{8,8} - 15_{7,9}$	763.9	185	2.0e-15
$11_{3,9} - 10_{0,10}$	689.5	57	3.6e-16	$14_{8,6} - 14_{7,7}$	763.9	176	2.0e-15
$7_{6,2} - 6_{5,1}$	695.6	79	1.2e-14	$13_{8,6} - 13_{7,7}$	763.9	167	2.0e-15
$13_{10,4} - 14_{9,5}$	696.5	228	5.6e-17	$8_{8,0} - 8_{7,1}$	764.0	131	7.5e-16
$19_{4,16} - 18_{3,15}$	702.1	148	2.2e-15	$12_{8,4} - 12_{7,5}$	764.0	158	2.0e-15
$18_{4,14} - 18_{1,17}$	702.9	136	1.0e-16	$9_{8,2} - 9_{7,3}$	764.0	137	1.3e-15
$16_{4,12} - 16_{1,15}$	704.2	114	9.0e-17	$10_{8,2} - 10_{7,3}$	764.0	144	1.6e-15
$18_{4,14} - 17_{3,15}$	705.6	136	2.6e-15	$11_{8,4} - 11_{7,5}$	764.0	151	1.8e-15
$13_{5,9} - 12_{4,8}$	708.4	100	6.2e-15	$16_{5,11} - 15_{4,12}$	765.3	129	4.5e-15
$20_{4,16} - 20_{1,19}$	708.9	161	1.2e-16	$13_{5,9} - 14_{2,12}$	768.3	100	2.9e-18
$24_{5,19} - 25_{2,24}$	709.0	234	3.2e-18	$11_{6,6} - 10_{5,5}$	772.2	103	8.5e-15
$14_{4,10} - 14_{1,13}$	710.9	94	7.6e-17	$16_{5,11} - 17_{2,16}$	774.9	129	3.7e-18
$15_{5,11} - 16_{2,14}$	711.6	119	3.2e-18	$5_{4,2} - 5_{1,5}$	779.4	36	2.6e-18
$8_{6,2} - 7_{5,3}$	714.8	84	1.1e-14	$17_{5,13} - 16_{4,12}$	783.5	140	4.2e-15
$12_{10,2} - 13_{9,5}$	715.6	219	4.4e-17	$7_{4,4} - 7_{1,7}$	790.2	45	1.1e-17
$22_{5,17} - 23_{2,22}$	716.8	204	3.6e-18	$12_{6,6} - 11_{5,7}$	791.3	111	7.8e-15
$12_{4,8} - 12_{1,11}$	720.7	77	6.0e-17	$22_{4,18} - 21_{3,19}$	794.2	189	2.0e-15
$20_{3,17} - 19_{2,18}$	720.7	150	1.2e-15	$7_{7,1} - 6_{6,0}$	796.9	101	1.1e-14
$18_{2,16} - 17_{1,17}$	722.6	118	5.2e-16	$22_{3,19} - 21_{2,20}$	797.8	179	1.1e-15
$22_{4,18} - 22_{1,21}$	724.5	189	1.2e-16	$18_{5,13} - 17_{4,14}$	803.0	151	4.0e-15
$21_{4,18} - 20_{3,17}$	727.3	175	1.9e-15	$14_{5,9} - 15_{2,14}$	803.2	109	3.4e-18
$14_{5,9} - 13_{4,10}$	727.4	109	5.5e-15	$15_{3,13} - 14_{0,14}$	805.0	92	4.2e-16
$20_{5,15} - 21_{2,20}$	731.0	176	3.8e-18	$9_{4,6} - 9_{1,9}$	805.2	56	2.3e-17
$10_{4,6} - 10_{1,9}$	731.8	62	4.2e-17	$13_{6,8} - 12_{5,7}$	810.4	119	7.2e-15
$9_{6,4} - 8_{5,3}$	733.9	90	1.0e-14	$8_{7,1} - 7_{6,2}$	816.1	106	1.0e-14
$11_{10,2} - 12_{9,3}$	734.8	212	2.9e-17	$24_{3,21} - 24_{0,24}$	818.4	210	4.5e-17
$22_{3,19} - 22_{0,22}$	735.5	179	5.6e-17	$19_{5,15} - 18_{4,14}$	820.1	164	3.7e-15
$8_{4,4} - 8_{1,7}$	742.8	50	2.2e-17	$11_{5,7} - 12_{2,10}$	821.4	84	2.4e-18
$13_{3,11} - 12_{0,12}$	743.9	73	4.2e-16	$11_{4,8} - 11_{1,11}$	824.9	69	3.3e-17
$15_{5,11} - 14_{4,10}$	746.1	119	5.0e-15	$20_{2,18} - 19_{1,19}$	825.4	144	4.3e-16
$23_{4,20} - 22_{3,19}$	747.9	204	1.6e-15	$14_{6,8} - 13_{5,9}$	829.4	128	6.7e-15
$20_{4,16} - 19_{3,17}$	748.2	161	2.3e-15	$23_{6,18} - 24_{3,21}$	831.0	237	3.5e-18
$18_{5,13} - 19_{2,18}$	750.6	151	3.8e-18	$11_{11,1} - 12_{10,2}$	834.2	247	1.1e-17
$24_{4,20} - 24_{1,23}$	751.1	220	1.2e-16	$12_{5,7} - 13_{2,12}$	834.6	92	2.8e-18

Annexe E

Liste des espèces de NAHOON

TAB. 30: *Liste des 77 espèces chimiques incluses dans le modèle chimique dont l'abondance est calculée à chaque pas de temps.*

Num	Espèce	Num	Espèce	Num	Espèce	Num	Espèce
1	H	21	HS	41	CH_4^+	61	H_3S^+
2	H_2	22	H_2S	42	CH_5^+	62	CS^+
3	He	23	CS	43	C_2^+	63	HCS^+
4	C	24	HCS	44	C_2H^+	64	H_2CS^+
5	CH	25	H_2CS	45	$C_2H_2^+$	65	H_3CS^+
6	CH_2	26	SO	46	O^+	66	SO^+
7	CH_3	27	OCS	47	OH^+	67	HSO^+
8	CH_4	28	SO_2	48	H_2O^+	68	OCS^+
9	C_2	29	S_2	49	H_3O^+	69	$HOCS^+$
10	C_2H	30	HS_2	50	CO^+	70	SO_2^+
11	C_2H_2	31	H_2S_2	51	HCO^+	71	HSO_2^+
12	O	32	$grain^0$	52	HOC^+	72	S_2^+
13	OH	33	H^+	53	H_2CO^+	73	HS_2^+
14	H_2O	34	H_2^+	54	H_3CO^+	74	$H_2S_2^+$
15	CO	35	H_3^+	55	CH_4O^+	75	$H_3S_2^+$
16	HCO	36	He^+	56	CH_5O^+	76	e^-
17	H_2CO	37	C^+	57	O_2^+	77	$grain^-$
18	CH_4O	38	CH^+	58	S^+		
19	O_2	39	CH_2^+	59	HS^+		
20	S	40	CH_3^+	60	H_2S^+		

Annexe F

Liste des réactions de NAHOON

TAB. 31: Liste des réactions chimiques. Les troisième, quatrième et cinquième colonne (α, β et γ) donnent les trois coefficients qui permettent de calculer les taux de chaque réaction comme expliqué à la section 3.1 et rappelé ci-dessous.
La sixième colonne (I) est le type de la réaction : (0) désigne les réactions de formation de H_2 sur les grains et l'ionisation d'un grain par un électron, (1) la recombinaison dissociative des ions avec les grains chargés négativement, (2) l'intéraction des molécules avec le rayonnement cosmique, (3) l'intéraction des molécules avec les photons induits par le rayonnement cosmique, (4) les réaction neutre-neutre, (5) les réactions ion-neutre, (6) les réactions d'échange de charge, (7) les associations radiatives, (8) la recombinaison des ions avec un électron, (9) les réactions diverses, (10) la déplétion sur les grains, (11) et (12) la désorption dû à un effet thermique et au rayonnement cosmique.
Calcul des taux pour chaque type de réaction :
(0) $K = 7.568 \times 10^{11} \times \alpha \times (T/300)^{\beta}$;
(1) $K = 6.77 \times 10^{-23} \times \alpha \sqrt{\frac{(\beta/6.023\times10^{23}+1.25\times10^{-14})\times T}{\beta}} \times (1 + 167/T)$;
(2) et (3) $K = \alpha \times \zeta$;
(4) à (9) $K = \alpha(\frac{T}{300})^{\beta} e^{-\frac{\gamma}{T}}$;
(10) $K = 9 \times 10^{-35} \times \sqrt{\frac{(\alpha/6.023\times10^{23}+1.25\times10^{-14})\times T}{\alpha}} \times (n(H) + 2n(H_2))$;
(11) $K = 1.59 \times 10^{11} \times \sqrt{\gamma/\alpha} \times e^{-\alpha/T}$;
(12) $K = 5 \times 10^{-8} \times \sqrt{\gamma/\alpha} \times e^{-\alpha/70}$;
Dans ces expressions, ζ est le taux de rayonnement cosmique et n(H) et n(H_2) sont les nombres de densité de l'hygrogène atomique et moléculaire. Enfin la dernière colonne regroupe la référence du taux de réaction : *Herbst* et *UMIST* signifient que les taux proviennent des bases de données NSM et UMIST, *Aikawa* qui nous a été fournis par Aikawa, *1993Pineau* qui vient de Pineau Des Forêts et al. (1993) et *Ruffle* qu'il vient de Ruffle et al. (2002).

Num	Réaction	α	β	γ	I	Ref
1	H +H + Grain^0 → H_2 + Grain^0	4.95e-17	0.50	0.00	0	*Herbst*
2	H +H + Grain$^-$ → H_2 + Grain$^-$	4.95e-17	0.50	0.00	0	*Herbst*
3	e− + Grain^0 → Grain$^-$	6.90e-15	0.50	0.00	0	*Herbst*
4	H^+ + Grain$^-$ → H + Grain^0	1.00e+00	1.00	0.00	1	*Aikawa*
5	H_2^+ + Grain$^-$ → H + H + Grain^0	4.17e-02	2.00	0.00	1	*Aikawa*
6	H_2^+ + Grain$^-$ → H_2 + Grain^0	9.54e-01	2.00	0.00	1	*Aikawa*
7	H_3^+ + Grain$^-$ → H_2 + H + Grain^0	2.70e-01	3.00	0.00	1	*Aikawa*
8	H_3^+ + Grain$^-$ → H + H + H + Grain^0	7.30e-01	3.00	0.00	1	*Aikawa*
9	He^+ + Grain$^-$ → He + Grain^0	1.00e+00	4.00	0.00	1	*Aikawa*
10	C^+ + Grain$^-$ → C + Grain^0	1.00e+00	12.00	0.00	1	*Aikawa*
11	CH^+ + Grain$^-$ → C + H + Grain^0	1.00e+00	13.00	0.00	1	*Aikawa*
12	CH_2^+ + Grain$^-$ → C + H_2 + Grain^0	1.20e-01	14.00	0.00	1	*Aikawa*

13	$CH_2^+ + Grain^- \rightarrow CH + H + Grain^0$	2.52e-01	14.00	0.00	1	*Aikawa*
14	$CH_2^+ + Grain^- \rightarrow C + H + H + Grain^0$	6.30e-01	14.00	0.00	1	*Aikawa*
15	$CH_3^+ + Grain^- \rightarrow H_2 + C + H + Grain^0$	3.00e-01	15.00	0.00	1	*Aikawa*
16	$CH_3^+ + Grain^- \rightarrow CH_3 + Grain^0$	1.10e-04	15.00	0.00	1	*Aikawa*
17	$CH_3^+ + Grain^- \rightarrow CH + H + H + Grain^0$	1.60e-01	15.00	0.00	1	*Aikawa*
18	$CH_3^+ + Grain^- \rightarrow CH + H_2 + Grain^0$	1.40e-01	15.00	0.00	1	*Aikawa*
19	$CH_3^+ + Grain^- \rightarrow CH_2 + H + Grain^0$	4.00e-01	15.00	0.00	1	*Aikawa*
20	$CH_4^+ + Grain^- \rightarrow CH_2 + H + H + Grain^0$	5.00e-01	16.00	0.00	1	*Aikawa*
21	$CH_4^+ + Grain^- \rightarrow CH_3 + H + Grain^0$	5.00e-01	16.00	0.00	1	*Aikawa*
22	$CH_5^+ + Grain^- \rightarrow CH_3 + H_2 + Grain^0$	5.00e-01	17.00	0.00	1	*Aikawa*
23	$CH_5^+ + Grain^- \rightarrow CH_4 + H + Grain^0$	5.00e-01	17.00	0.00	1	*Aikawa*
24	$CH_5^+ + Grain^- \rightarrow CH_3 + H + H + Grain^0$	6.96e-01	17.00	0.00	1	*Aikawa*
25	$CH_5^+ + Grain^- \rightarrow CH_2 + H_2 + H + Grain^0$	1.71e-01	17.00	0.00	1	*Aikawa*
26	$CH_5^+ + Grain^- \rightarrow CH + H_2 + H_2 + Grain^0$	3.28e-02	17.00	0.00	1	*Aikawa*
27	$C_2^+ + Grain^- \rightarrow C + C + Grain^0$	1.00e+00	24.00	0.00	1	*Aikawa*
28	$C_2H^+ + Grain^- \rightarrow C_2 + H + Grain^0$	5.00e-01	25.00	0.00	1	*Aikawa*
29	$C_2H^+ + Grain^- \rightarrow CH + C + Grain^0$	5.00e-01	25.00	0.00	1	*Aikawa*
30	$C_2H_2^+ + Grain^- \rightarrow C_2 + H + H + Grain^0$	3.33e-01	26.00	0.00	1	*Aikawa*
31	$C_2H_2^+ + Grain^- \rightarrow CH + CH + Grain^0$	3.33e-01	26.00	0.00	1	*Aikawa*
32	$C_2H_2^+ + Grain^- \rightarrow C_2H + H + Grain^0$	3.33e-01	26.00	0.00	1	*Aikawa*
33	$O^+ + Grain^- \rightarrow O + Grain^0$	1.00e+00	16.00	0.00	1	*Aikawa*
34	$OH^+ + Grain^- \rightarrow O + H + Grain^0$	1.00e+00	17.00	0.00	1	*Aikawa*
35	$H_2O^+ + Grain^- \rightarrow O + H_2 + Grain^0$	1.00e-01	18.00	0.00	1	*Aikawa*
36	$H_2O^+ + Grain^- \rightarrow OH + H + Grain^0$	2.20e-01	18.00	0.00	1	*Aikawa*
37	$H_2O^+ + Grain^- \rightarrow O + H + H + Grain^0$	6.80e-01	18.00	0.00	1	*Aikawa*
38	$H_3O^+ + Grain^- \rightarrow OH + H + H + Grain^0$	4.80e-01	19.00	0.00	1	*Aikawa*
39	$H_3O^+ + Grain^- \rightarrow H_2O + H + Grain^0$	3.30e-01	19.00	0.00	1	*Aikawa*
40	$H_3O^+ + Grain^- \rightarrow OH + H_2 + Grain^0$	1.80e-01	19.00	0.00	1	*Aikawa*
41	$H_3O^+ + Grain^- \rightarrow H_2 + H + O + Grain^0$	1.00e-02	19.00	0.00	1	*Aikawa*
42	$CO^+ + Grain^- \rightarrow O + C + Grain^0$	1.00e+00	28.00	0.00	1	*Aikawa*
43	$HCO^+ + Grain^- \rightarrow H + CO + Grain^0$	1.00e+00	29.00	0.00	1	*Aikawa*
44	$HOC^+ + Grain^- \rightarrow CO + H + Grain^0$	1.00e+00	29.00	0.00	1	*Aikawa*
45	$H_2CO^+ + Grain^- \rightarrow CO + H + H + Grain^0$	8.31e-01	30.00	0.00	1	*Aikawa*
46	$H_2CO^+ + Grain^- \rightarrow H_2CO + Grain^0$	1.83e-04	30.00	0.00	1	*Aikawa*
47	$H_2CO^+ + Grain^- \rightarrow HCO + H + Grain^0$	1.67e-01	30.00	0.00	1	*Aikawa*
48	$H_3CO^+ + Grain^- \rightarrow CO + H + H_2 + Grain^0$	3.33e-01	31.00	0.00	1	*Aikawa*
49	$H_3CO^+ + Grain^- \rightarrow HCO + H + H + Grain^0$	3.33e-01	31.00	0.00	1	*Aikawa*
50	$H_3CO^+ + Grain^- \rightarrow H_2CO + H + Grain^0$	3.33e-01	31.00	0.00	1	*Aikawa*
51	$CH_4O^+ + Grain^- \rightarrow CH_3 + OH + Grain^0$	5.00e-01	32.00	0.00	1	*Aikawa*
52	$CH_4O^+ + Grain^- \rightarrow H_2CO + H_2 + Grain^0$	5.00e-01	32.00	0.00	1	*Aikawa*
53	$CH_5O^+ + Grain^- \rightarrow H_2CO + H_2 + H + Grain^0$	5.00e-01	33.00	0.00	1	*Aikawa*
54	$CH_5O^+ + Grain^- \rightarrow CH_4O + H + Grain^0$	5.00e-01	33.00	0.00	1	*Aikawa*
55	$O_2^+ + Grain^- \rightarrow O + O + Grain^0$	1.00e+00	32.00	0.00	1	*Aikawa*
56	$S^+ + Grain^- \rightarrow S + Grain^0$	1.00e+00	32.00	0.00	1	*Aikawa*

57	$HS^+ + Grain^- \rightarrow S + H + Grain^0$	1.00e+00	33.00	0.00	1	*Aikawa*
58	$H_2S^+ + Grain^- \rightarrow S + H + H + Grain^0$	5.00e-01	34.00	0.00	1	*Aikawa*
59	$H_2S^+ + Grain^- \rightarrow HS + H + Grain^0$	5.00e-01	34.00	0.00	1	*Aikawa*
60	$H_2S^+ + Grain^- \rightarrow H_2S + Grain^0$	3.67e-04	34.00	0.00	1	*Aikawa*
61	$H_3S^+ + Grain^- \rightarrow HS + H + H + Grain^0$	2.50e-01	35.00	0.00	1	*Aikawa*
62	$H_3S^+ + Grain^- \rightarrow H_2S + H + Grain^0$	7.50e-01	35.00	0.00	1	*Aikawa*
63	$CS^+ + Grain^- \rightarrow C + S + Grain^0$	1.00e+00	44.00	0.00	1	*Aikawa*
64	$HCS^+ + Grain^- \rightarrow CS + H + Grain^0$	1.00e+00	45.00	0.00	1	*Aikawa*
65	$H_2CS^+ + Grain^- \rightarrow CS + H + H + Grain^0$	5.50e-01	46.00	0.00	1	*Aikawa*
66	$H_2CS^+ + Grain^- \rightarrow HCS + H + Grain^0$	5.00e-01	46.00	0.00	1	*Aikawa*
67	$H_2CS^+ + Grain^- \rightarrow H_2CS + Grain^0$	1.83e-04	46.00	0.00	1	*Aikawa*
68	$H_3CS^+ + Grain^- \rightarrow CS + H + H_2 + Grain^0$	5.00e-01	47.00	0.00	1	*Aikawa*
69	$H_3CS^+ + Grain^- \rightarrow H_2CS + H + Grain^0$	5.00e-01	47.00	0.00	1	*Aikawa*
70	$SO^+ + Grain^- \rightarrow O + S + Grain^0$	1.00e+00	48.00	0.00	1	*Aikawa*
71	$HSO^+ + Grain^- \rightarrow SO + H + Grain^0$	1.00e+00	49.00	0.00	1	*Aikawa*
72	$OCS^+ + Grain^- \rightarrow CO + S + Grain^0$	6.67e-01	60.00	0.00	1	*Aikawa*
73	$OCS^+ + Grain^- \rightarrow CS + O + Grain^0$	3.33e-01	60.00	0.00	1	*Aikawa*
74	$HOCS^+ + Grain^- \rightarrow OH + CS + Grain^0$	5.00e-01	61.00	0.00	1	*Aikawa*
75	$HOCS^+ + Grain^- \rightarrow OCS + H + Grain^0$	5.00e-01	61.00	0.00	1	*Aikawa*
76	$SO_2^+ + Grain^- \rightarrow SO + O + Grain^0$	1.00e+00	64.00	0.00	1	*Aikawa*
77	$HSO_2^+ + Grain^- \rightarrow SO + H + O + Grain^0$	2.50e-01	65.00	0.00	1	*Aikawa*
78	$HSO_2^+ + Grain^- \rightarrow SO + OH + Grain^0$	2.50e-01	65.00	0.00	1	*Aikawa*
79	$HSO_2^+ + Grain^- \rightarrow SO_2 + H + Grain^0$	5.00e-01	65.00	0.00	1	*Aikawa*
80	$S_2+ + Grain^- \rightarrow S + S + Grain^0$	1.00e+00	64.00	0.00	1	*Aikawa*
81	$HS_2+ + Grain^- \rightarrow HS + S + Grain^0$	5.00e-01	65.00	0.00	1	*Aikawa*
82	$HS_2+ + Grain^- \rightarrow S_2 + H + Grain^0$	5.00e-01	65.00	0.00	1	*Aikawa*
83	$H_2S_2+ + Grain^- \rightarrow HS + HS + Grain^0$	5.00e-01	66.00	0.00	1	*Aikawa*
84	$H_2S_2+ + Grain^- \rightarrow HS_2 + H + Grain^0$	5.00e-01	66.00	0.00	1	*Aikawa*
85	$H_3S_2+ + Grain^- \rightarrow HS_2 + H_2 + Grain^0$	5.00e-01	67.00	0.00	1	*Aikawa*
86	$H_3S_2+ + Grain^- \rightarrow H_2S_2 + H + Grain^0$	5.00e-01	67.00	0.00	1	*Aikawa*
87	$H + \gamma \rightarrow H^+ + e^-$	4.60e-01	0.00	0.00	2	*Herbst*
88	$H_2 + \gamma \rightarrow H + H$	1.00e-01	0.00	0.00	2	*Herbst*
89	$H_2 + \gamma \rightarrow H^+ + H + e^-$	2.20e-02	0.00	0.00	2	*Herbst*
90	$H_2 + \gamma \rightarrow H_2^+ + e^-$	9.30e-01	0.00	0.00	2	*Herbst*
91	$He + \gamma \rightarrow He^+ + e^-$	5.00e-01	0.00	0.00	2	*Herbst*
92	$C + \gamma \rightarrow C^+ + e^-$	1.02e+03	0.00	0.00	2	*Herbst*
93	$O + \gamma \rightarrow O^+ + e^-$	2.80e+00	0.00	0.00	2	*Herbst*
94	$CO + \gamma \rightarrow CO^+ + e^-$	3.00e+00	0.00	0.00	2	*Herbst*
95	$CH + h\nu^* \rightarrow C + H$	1.46e+03	0.00	0.00	3	*Herbst*
96	$CH^+ + h\nu^* \rightarrow C + H^+$	3.52e+02	0.00	0.00	3	*Herbst*
97	$CH_2 + h\nu^* \rightarrow CH_2^+ + e^-$	1.00e+03	0.00	0.00	3	*Herbst*
98	$CH_3 + h\nu^* \rightarrow CH_3^+ + e^-$	1.00e+03	0.00	0.00	3	*Herbst*
99	$CH_3 + h\nu^* \rightarrow CH_2 + H$	1.00e+03	0.00	0.00	3	*Herbst*
100	$CH_4 + h\nu^* \rightarrow CH_2 + H_2$	4.68e+03	0.00	0.00	3	*Herbst*

101	$C_2 + h\nu^* \rightarrow C + C$	4.74e+02	0.00	0.00	3	*Herbst*
102	$C_2H + h\nu^* \rightarrow C_2 + H$	1.00e+04	0.00	0.00	3	*Herbst*
103	$C_2H_2 + h\nu^* \rightarrow C_2H_2^+ + e^-$	2.62e+03	0.00	0.00	3	*Herbst*
104	$C_2H_2 + h\nu^* \rightarrow C_2H + H$	1.03e+04	0.00	0.00	3	*Herbst*
105	$OH + h\nu^* \rightarrow O + H$	1.02e+03	0.00	0.00	3	*Herbst*
106	$H_2O + h\nu^* \rightarrow OH + H$	1.94e+03	0.00	0.00	3	*Herbst*
107	$CO + h\nu^* \rightarrow O + C$	1.00e+01	0.00	0.00	3	*Herbst*
108	$HCO + h\nu^* \rightarrow CO + H$	8.42e+02	0.00	0.00	3	*Herbst*
109	$HCO + h\nu^* \rightarrow HCO^+ + e^-$	2.34e+03	0.00	0.00	3	*Herbst*
110	$H_2CO + h\nu^* \rightarrow CO + H_2$	5.32e+03	0.00	0.00	3	*Herbst*
111	$CH_4O + h\nu^* \rightarrow CH_3 + OH$	3.01e+03	0.00	0.00	3	*Herbst*
112	$CH_4O + h\nu^* \rightarrow H_2CO + H_2$	6.34e+03	0.00	0.00	3	*Herbst*
113	$CH_4O + h\nu^* \rightarrow H_3CO^+ + H + e^-$	1.98e+02	0.00	0.00	3	*Herbst*
114	$CH_4O + h\nu^* \rightarrow CH_4O^+ + e^-$	2.87e+03	0.00	0.00	3	*Herbst*
115	$O_2 + h\nu^* \rightarrow O + O$	1.50e+03	0.00	0.00	3	*Herbst*
116	$O_2 + h\nu^* \rightarrow O_2^+ + e^-$	2.34e+02	0.00	0.00	3	*Herbst*
117	$S + h\nu^* \rightarrow S^+ + e^-$	1.92e+03	0.00	0.00	3	*Herbst*
118	$HS + h\nu^* \rightarrow S + H$	1.00e+03	0.00	0.00	3	*Herbst*
119	$H_2S + h\nu^* \rightarrow S + H_2$	1.03e+04	0.00	0.00	3	*Herbst*
120	$H_2S + h\nu^* \rightarrow H_2S^+ + e^-$	3.39e+03	0.00	0.00	3	*Herbst*
121	$CS + h\nu^* \rightarrow S + C$	1.00e+03	0.00	0.00	3	*Herbst*
122	$CS + h\nu^* \rightarrow CS^+ + e^-$	1.00e+03	0.00	0.00	3	*Herbst*
123	$HCS + h\nu^* \rightarrow HCS^+ + e^-$	3.00e+03	0.00	0.00	3	*Hetbst*
124	$H_2CS + h\nu^* \rightarrow H_2 + CS$	3.00e+03	0.00	0.00	3	*Herbst*
125	$SO + h\nu^* \rightarrow SO^+ + e^-$	1.00e+03	0.00	0.00	3	*Herbst*
126	$SO + h\nu^* \rightarrow S + O$	1.00e+03	0.00	0.00	3	*Herbst*
127	$OCS + h\nu^* \rightarrow S + CO$	1.07e+04	0.00	0.00	3	*Herbst*
128	$OCS + h\nu^* \rightarrow OCS^+ + e^-$	2.89e+03	0.00	0.00	3	*Herbst*
129	$SO_2 + h\nu^* \rightarrow SO + O$	3.77e+03	0.00	0.00	3	*Herbst*
130	$S_2 + h\nu^* \rightarrow S + S$	1.00e+03	0.00	0.00	3	*Herbst*
131	$HS_2 + h\nu^* \rightarrow HS + S$	3.00e+03	0.00	0.00	3	*Herbst*
132	$H_2S_2 + h\nu^* \rightarrow HS + HS$	3.00e+03	0.00	0.00	3	*Herbst*
133	$H + CH \rightarrow C + H_2$	2.70e-11	0.38	0.00	4	*Herbst*
134	$H + CH_2 \rightarrow CH + H_2$	2.70e-10	0.00	0.00	4	*Herbst*
135	$H + CH_3 \rightarrow CH_2 + H_2$	1.00e-10	0.00	7600.00	4	*Herbst*
136	$H + CH_4 \rightarrow CH_3 + H_2$	7.34e-12	0.00	4410.00	4	*Herbst*
137	$H + OH \rightarrow O + H_2$	6.99e-14	2.80	1950.00	4	*Herbst*
138	$H + H_2O \rightarrow OH + H_2$	6.82e-12	1.60	9720.00	4	*Herbst*
139	$H + HCO \rightarrow H_2 + CO$	1.50e-10	0.00	0.00	4	*Herbst*
140	$H + HCO \rightarrow O + CH_2$	6.61e-11	0.00	51600.00	4	*Herbst*
141	$H + H_2CO \rightarrow HCO + H_2$	2.14e-12	1.62	1090.00	4	*Herbst*
142	$H + O_2 \rightarrow OH + O$	2.94e-10	0.00	8380.00	4	*Herbst*
143	$H + HS \rightarrow S + H_2$	2.50e-11	0.00	0.00	4	*Herbst*
144	$H + H_2S \rightarrow HS + H_2$	6.60e-11	0.00	1350.00	4	*Herbst*

145	$H + SO \rightarrow S + OH$	5.90e-10	-0.31	11100.00	4	*38UMIST*
146	$H + OCS \rightarrow HS + CO$	1.23e-11	0.00	1949.00	4	*Herbst*
147	$H + SO_2 \rightarrow SO + OH$	9.25e-09	-0.74	14700.00	4	*1993Pineau*
148	$H + S_2 \rightarrow HS + S$	2.25e-10	0.50	8355.00	4	*41UMIST*
149	$H_2 + C \rightarrow CH + H$	6.64e-10	0.00	11700.00	4	*Herbst*
150	$H_2 + CH \rightarrow CH_2 + H$	3.75e-10	0.00	1660.00	4	*Herbst*
151	$H_2 + CH_2 \rightarrow CH_3 + H$	5.00e-11	0.00	4870.00	4	*Herbst*
152	$H_2 + CH_3 \rightarrow CH_4 + H$	2.51e-13	0.00	4210.00	4	*Herbst*
153	$H_2 + O \rightarrow OH + H$	3.44e-13	2.67	3160.00	4	*Herbst*
154	$H_2 + OH \rightarrow H_2O + H$	8.40e-13	0.00	1040.00	4	*Herbst*
155	$H_2 + S \rightarrow HS + H$	1.76e-13	2.88	6126.00	4	*54UMIST*
156	$H_2 + HS \rightarrow H_2S + H$	6.52e-12	0.09	8050.00	4	*56UMIST*
157	$C + CH \rightarrow C_2 + H$	6.59e-11	0.00	0.00	4	*Herbst*
158	$C + CH_2 \rightarrow CH + CH$	2.69e-12	0.00	23600.00	4	*Herbst*
159	$C + CH_2 \rightarrow C_2H + H$	1.00e-10	0.00	0.00	4	*Herbst*
160	$C + CH_3 \rightarrow C_2H_2 + H$	1.00e-10	0.00	0.00	4	*Herbst*
161	$C + OH \rightarrow CO + H$	1.00e-10	0.00	0.00	4	*Herbst*
162	$C + CO \rightarrow C_2 + O$	1.00e-10	0.00	52800.00	4	*Herbst*
163	$C + HCO \rightarrow CH + CO$	1.00e-10	0.00	0.00	4	*Herbst*
164	$C + O_2 \rightarrow CO + O$	4.70e-11	-0.34	0.00	4	*Herbst*
165	$C + HS \rightarrow CS + H$	1.00e-10	0.00	0.00	4	*Herbst*
166	$C + SO \rightarrow S + CO$	3.50e-11	0.00	0.00	4	*Herbst*
167	$C + SO \rightarrow CS + O$	3.50e-11	0.00	0.00	4	*Herbst*
168	$C + SO_2 \rightarrow CO + SO$	7.00e-11	0.00	0.00	4	*Herbst*
169	$C + S_2 \rightarrow CS + S$	7.00e-11	0.00	0.00	4	*Herbst*
170	$CH + O \rightarrow CO + H$	6.60e-11	0.00	0.00	4	*Herbst*
171	$CH + O_2 \rightarrow CO + OH$	3.80e-11	-0.48	0.00	4	*Herbst*
172	$CH + S \rightarrow CS + H$	5.00e-11	0.50	0.00	4	*Herbst*
173	$CH_2 + O \rightarrow CO + H + H$	1.20e-10	0.00	0.00	4	*Herbst*
174	$CH_2 + O \rightarrow CO + H_2$	8.00e-11	0.00	0.00	4	*Herbst*
175	$CH_2 + OH \rightarrow H_2CO + H$	3.00e-10	0.00	0.00	4	*Herbst*
176	$CH_2 + S \rightarrow CS + H_2$	1.00e-10	0.00	0.00	4	*Herbst*
177	$CH_2 + S \rightarrow HCS + H$	1.00e-10	0.00	0.00	4	*Herbst*
178	$CH_3 + C \rightarrow C_2H_2 + H$	1.00e-10	0.00	0.00	4	*Herbst*
179	$CH_3 + O \rightarrow H_2CO + H$	1.40e-10	0.00	0.00	4	*Herbst*
180	$CH_3 + HCO \rightarrow CH_4 + CO$	4.40e-11	0.00	0.00	4	*Herbst*
181	$CH_3 + S \rightarrow H_2CS + H$	1.40e-10	0.00	0.00	4	*Herbst*
182	$C_2 + O \rightarrow CO + C$	1.00e-10	0.00	0.00	4	*Herbst*
183	$C_2 + S \rightarrow CS + C$	1.00e-10	0.00	0.00	4	*Herbst*
184	$C_2H + O \rightarrow CO + CH$	1.70e-11	0.00	0.00	4	*Herbst*
185	$C_2H + O_2 \rightarrow HCO + CO$	4.20e-11	-0.32	0.00	4	*Herbst*
186	$O + OH \rightarrow O_2 + H$	7.50e-11	-0.25	0.00	4	*Herbst*
187	$O + HCO \rightarrow OH + CO$	5.00e-11	0.00	0.00	4	*Herbst*
188	$O + HS \rightarrow S + OH$	1.74e-11	0.67	956.00	4	*274UMIST*

189	$O + HS \rightarrow SO + H$	1.60e-10	0.00	0.00	4	*Herbst*
190	$O + H_2S \rightarrow HS + OH$	9.22e-12	0.00	1800.00	4	*Herbst*
191	$O + CS \rightarrow CO + S$	1.94e-11	0.00	231.00	4	*Herbst*
192	$O + HCS \rightarrow OH + CS$	5.00e-11	0.00	0.00	4	*Herbst*
193	$O + HCS \rightarrow OCS + H$	5.00e-11	0.00	0.00	4	*Herbst*
194	$O + SO \rightarrow S + O_2$	6.60e-13	0.00	2760.00	4	*306UMIST*
195	$O + OCS \rightarrow SO + CO$	1.60e-11	0.00	2150.00	4	*317UMIST*
196	$O + SO_2 \rightarrow SO + O_2$	9.01e-12	0.00	9837.00	4	*319UMIST*
197	$O + S_2 \rightarrow SO + S$	1.73e-11	0.00	0.00	4	*Herbst*
198	$OH + OH \rightarrow H_2O + O$	1.65e-12	1.14	50.00	4	*Herbst*
199	$OH + HCO \rightarrow H_2O + CO$	1.69e-10	0.00	0.00	4	*Herbst*
200	$OH + H_2CO \rightarrow HCO + H_2O$	1.00e-11	0.00	0.00	4	*Herbst*
201	$OH + S \rightarrow SO + H$	6.60e-11	0.00	0.00	4	*Herbst*
202	$OH + H_2S \rightarrow HS + H_2O$	6.00e-12	0.00	75.00	4	*Herbst*
203	$OH + CS \rightarrow OCS + H$	9.39e-14	1.12	800.00	4	*371UMIST*
204	$OH + SO \rightarrow SO_2 + H$	8.60e-11	0.00	0.00	4	*Herbst*
205	$CO + HS \rightarrow OCS + H$	5.95e-14	1.12	8330.00	4	*404UMIST*
206	$HCO + HCO \rightarrow H_2CO + CO$	5.00e-11	0.00	0.00	4	*Herbst*
207	$O_2 + S \rightarrow SO + O$	2.30e-12	0.00	0.00	4	*Herbst*
208	$O_2 + SO \rightarrow SO_2 + O$	1.10e-14	1.89	1538.00	4	*430UMIST*
209	$S + HS \rightarrow S_2 + H$	4.50e-11	0.00	0.00	4	*Herbst*
210	$S + SO \rightarrow S_2 + O$	1.73e-11	0.50	11500.00	4	*431UMIST*
211	$HS + HS \rightarrow H_2S + S$	3.00e-11	0.00	0.00	4	*Herbst*
212	$H + CH^+ \rightarrow C^+ + H_2$	7.50e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
213	$H + CH_4^+ \rightarrow CH_3^+ + H_2$	1.00e-11	0.00	0.00	5	*Herbst*
214	$H + CH_5^+ \rightarrow CH_4^+ + H_2$	1.50e-10	0.00	481.00	5	*Herbst*
215	$H + HS^+ \rightarrow S^+ + H_2$	1.10e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
216	$H + H_2S^+ \rightarrow HS^+ + H_2$	2.00e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
217	$H + H_3S^+ \rightarrow H_2S^+ + H_2$	6.00e-11	0.00	0.00	5	*Herbst*
218	$H + SO^+ \rightarrow S^+ + OH$	6.10e-10	0.00	11385.00	5	*1993Pineau*
219	$H^+ + CH_2 \rightarrow CH^+ + H_2$	1.14e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
220	$H^+ + CH_4 \rightarrow CH_3^+ + H_2$	2.30e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
221	$H^+ + C_2H_2 \rightarrow C_2H^+ + H_2$	2.00e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
222	$H^+ + C_2H \rightarrow C_2^+ + H_2$	3.70e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
223	$H^+ + HCO \rightarrow CO^+ + H_2$	1.30e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
224	$H^+ + HCO \rightarrow H_2^+ + CO$	1.30e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
225	$H^+ + H_2CO \rightarrow HCO^+ + H_2$	4.60e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
226	$H^+ + CH_4O \rightarrow H_3CO^+ + H_2$	3.30e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
227	$H^+ + HS \rightarrow S^+ + H_2$	3.50e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
228	$H^+ + HCS \rightarrow CS^+ + H_2$	1.85e-08	-0.50	0.00	5	*Herbst*
229	$H^+ + OCS \rightarrow HS^+ + CO$	6.50e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
230	$H^+ + SO_2 \rightarrow SO^+ + OH$	1.82e-09	0.00	0.00	5	*501UMIST*
231	$H^+ + HS_2 \rightarrow HS_2+ + H$	7.79e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
232	$H_2 + H_2^+ \rightarrow H_3^+ + H$	2.10e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*

233	$H_2 + He^+ \rightarrow He + H^+ + H$	3.30e-15	0.00	0.00	5	*Herbst*
234	$H_2 + CH^+ \rightarrow CH_2^+ + H$	1.20e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
235	$H_2 + CH_2^+ \rightarrow CH_3^+ + H$	1.20e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
236	$H_2 + CH_4^+ \rightarrow CH_5^+ + H$	3.50e-11	0.00	0.00	5	*Herbst*
237	$H_2 + C_2^+ \rightarrow C_2H^+ + H$	1.10e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
238	$H_2 + C_2H^+ \rightarrow C_2H_2^+ + H$	1.10e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
239	$H_2 + O^+ \rightarrow OH^+ + H$	1.60e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
240	$H_2 + OH^+ \rightarrow H_2O^+ + H$	1.10e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
241	$H_2 + H_2O^+ \rightarrow H_3O^+ + H$	6.10e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
242	$H_2 + CO^+ \rightarrow HCO^+ + H$	2.00e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
243	$H_2 + HOC^+ \rightarrow HCO^+ + H_2$	1.00e-11	0.00	0.00	5	*Herbst*
244	$H_2 + S^+ \rightarrow HS^+ + H$	1.10e-10	0.00	9860.00	5	*566UMIST*
245	$H_2 + HS^+ \rightarrow H_2S^+ + H$	2.00e-10	0.00	6380.00	5	*569UMIST*
246	$H_2 + H_2S^+ \rightarrow H_3S^+ + H$	6.00e-10	0.00	2900.00	5	*572UMIST*
247	$H_2 + CS^+ \rightarrow HCS^+ + H$	4.80e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
248	$H_2 + SO_2^+ \rightarrow HSO_2^+ + H$	1.70e-11	0.00	0.00	5	*Herbst*
249	$H_2^+ + C \rightarrow CH^+ + H$	2.40e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
250	$H_2^+ + CH \rightarrow CH_2^+ + H$	7.10e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
251	$H_2^+ + CH_2 \rightarrow CH_3^+ + H$	1.00e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
252	$H_2^+ + CH_4 \rightarrow CH_3^+ + H + H_2$	2.30e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
253	$H_2^+ + CH_4 \rightarrow CH_5^+ + H$	1.10e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
254	$H_2^+ + C_2 \rightarrow C_2H^+ + H$	1.10e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
255	$H_2^+ + C_2H \rightarrow C_2H_2^+ + H$	1.00e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
256	$H_2^+ + OH \rightarrow H_2O^+ + H$	7.60e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
257	$H_2^+ + H_2O \rightarrow H_3O^+ + H$	3.40e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
258	$H_2^+ + HCO \rightarrow H_3^+ + CO$	1.00e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
259	$H_2^+ + H_2CO \rightarrow HCO^+ + H + H_2$	1.40e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
260	$H_2^+ + H_2S \rightarrow HS^+ + H + H_2$	8.60e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
261	$H_2^+ + H_2S \rightarrow S^+ + H_2 + H_2$	7.70e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
262	$H_3^+ + C \rightarrow CH^+ + H_2$	2.00e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
263	$H_3^+ + CH \rightarrow CH_2^+ + H_2$	8.50e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
264	$H_3^+ + CH_2 \rightarrow CH_3^+ + H_2$	1.40e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
265	$H_3^+ + CH_3 \rightarrow CH_4^+ + H_2$	2.10e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
266	$H_3^+ + CH_4 \rightarrow CH_5^+ + H_2$	2.40e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
267	$H_3^+ + C_2 \rightarrow C_2H^+ + H_2$	1.80e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
268	$H_3^+ + C_2H \rightarrow C_2H_2^+ + H_2$	4.50e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
269	$H_3^+ + O \rightarrow OH^+ + H_2$	8.00e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
270	$H_3^+ + OH \rightarrow H_2O^+ + H_2$	9.50e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
271	$H_3^+ + H_2O \rightarrow H_3O^+ + H_2$	4.50e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
272	$H_3^+ + CO \rightarrow HCO^+ + H_2$	6.20e-10	-0.50	0.00	5	*Herbst*
273	$H_3^+ + CO \rightarrow HOC^+ + H_2$	3.60e-11	-0.50	0.00	5	*Herbst*
274	$H_3^+ + HCO \rightarrow H_2CO^+ + H_2$	2.30e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
275	$H_3^+ + H_2CO \rightarrow H_3CO^+ + H_2$	5.50e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
276	$H_3^+ + CH_4O \rightarrow CH_3^+ + H_2O + H_2$	1.80e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*

277	$H_3^+ + CH_4O \rightarrow H_3CO^+ + H_2 + H_2$	1.12e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
278	$H_3^+ + CH_4O \rightarrow CH_5O^+ + H_2$	1.04e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
279	$H_3^+ + S \rightarrow HS^+ + H_2$	2.60e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
280	$H_3^+ + HS \rightarrow H_2S^+ + H_2$	4.20e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
281	$H_3^+ + H_2S \rightarrow H_3S^+ + H_2$	2.30e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
282	$H_3^+ + CS \rightarrow HCS^+ + H_2$	1.10e-08	-0.50	0.00	5	*Herbst*
283	$H_3^+ + HCS \rightarrow H_2CS^+ + H_2$	1.09e-08	-0.50	0.00	5	*Herbst*
284	$H_3^+ + H_2CS \rightarrow H_3CS^+ + H_2$	3.80e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
285	$H_3^+ + SO \rightarrow HSO^+ + H_2$	8.40e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
286	$H_3^+ + OCS \rightarrow HOCS^+ + H_2$	3.80e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
287	$H_3^+ + SO_2 \rightarrow HSO_2^+ + H_2$	3.72e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
288	$H_3^+ + S_2 \rightarrow HS_2+ + H_2$	2.00e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
289	$H_3^+ + HS_2 \rightarrow H_2S_2+ + H_2$	4.56e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
290	$H_3^+ + H_2S_2 \rightarrow H_3S_2+ + H_2$	2.74e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
291	$He^+ + CH \rightarrow C^+ + H + He$	3.83e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
292	$He^+ + CH_2 \rightarrow C^+ + H_2 + He$	6.25e-10	-0.50	0.00	5	*Herbst*
293	$He^+ + CH_2 \rightarrow CH^+ + H + He$	6.25e-10	-0.50	0.00	5	*Herbst*
294	$He^+ + CH_3 \rightarrow CH^+ + H_2 + He$	1.00e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
295	$He^+ + CH_3 \rightarrow CH_2^+ + H + He$	1.00e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
296	$He^+ + CH_4 \rightarrow CH^+ + He + H_2 + H$	2.40e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
297	$He^+ + CH_4 \rightarrow CH_2^+ + H_2 + He$	9.50e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
298	$He^+ + CH_4 \rightarrow CH_3 + He + H^+$	4.80e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
299	$He^+ + CH_4 \rightarrow CH_3^+ + H + He$	8.50e-11	0.00	0.00	5	*Herbst*
300	$He^+ + C_2 \rightarrow C^+ + C + He$	1.60e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
301	$He^+ + C_2H \rightarrow C^+ + CH + He$	1.30e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
302	$He^+ + C_2H \rightarrow CH^+ + C + He$	1.30e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
303	$He^+ + C_2H \rightarrow C_2^+ + H + He$	1.30e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
304	$He^+ + C_2H_2 \rightarrow CH^+ + CH + He$	7.70e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
305	$He^+ + C_2H_2 \rightarrow C_2^+ + H_2 + He$	1.60e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
306	$He^+ + C_2H_2 \rightarrow C_2H^+ + H + He$	8.80e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
307	$He^+ + OH \rightarrow O^+ + He + H$	8.50e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
308	$He^+ + H_2O \rightarrow OH + He + H^+$	1.32e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
309	$He^+ + H_2O \rightarrow OH^+ + He + H$	1.32e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
310	$He^+ + CO \rightarrow O + C^+ + He$	5.50e-10	-0.50	0.00	5	*Herbst*
311	$He^+ + HCO \rightarrow CH^+ + O + He$	6.90e-10	-0.50	0.00	5	*Herbst*
312	$He^+ + HCO \rightarrow CO^+ + H + He$	6.90e-10	-0.50	0.00	5	*Herbst*
313	$He^+ + H_2CO \rightarrow CO^+ + H_2 + He$	2.40e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
314	$He^+ + H_2CO \rightarrow HCO^+ + H + He$	2.40e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
315	$He^+ + CH_4O \rightarrow OH^+ + CH_3 + He$	1.70e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
316	$He^+ + CH_4O \rightarrow CH_3^+ + OH + He$	1.70e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
317	$He^+ + O_2 \rightarrow O^+ + O + He$	1.00e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
318	$He^+ + HS \rightarrow S^+ + He + H$	3.70e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
319	$He^+ + H_2S \rightarrow S^+ + He + H_2$	1.60e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
320	$He^+ + H_2S \rightarrow HS^+ + He + H$	2.20e-10	-0.50	0.00	5	*Herbst*

321	$He^+ + CS \rightarrow S^+ + C + He$	4.70e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
322	$He^+ + CS \rightarrow S + C^+ + He$	4.70e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
323	$He^+ + HCS \rightarrow CS + He + H^+$	4.79e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
324	$He^+ + HCS \rightarrow CS^+ + He + H$	4.79e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
325	$He^+ + H_2CS \rightarrow S + CH_2^+ + He$	1.11e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
326	$He^+ + H_2CS \rightarrow S^+ + CH_2 + He$	1.11e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
327	$He^+ + H_2CS \rightarrow CS^+ + He + H_2$	1.11e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
328	$He^+ + SO \rightarrow S + O^+ + He$	3.70e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
329	$He^+ + SO \rightarrow S^+ + O + He$	3.70e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
330	$He^+ + OCS \rightarrow S^+ + CO + He$	8.40e-10	-0.50	0.00	5	*Herbst*
331	$He^+ + OCS \rightarrow S + CO^+ + He$	8.40e-10	-0.50	0.00	5	*Herbst*
332	$He^+ + OCS \rightarrow CS^+ + O + He$	8.40e-10	-0.50	0.00	5	*Herbst*
333	$He^+ + OCS \rightarrow CS + O^+ + He$	8.40e-10	-0.50	0.00	5	*Herbst*
334	$He^+ + SO_2 \rightarrow SO^+ + O + He$	8.15e-10	-0.50	0.00	5	*Herbst*
335	$He^+ + SO_2 \rightarrow S^+ + O_2 + He$	8.15e-10	-0.50	0.00	5	*Herbst*
336	$He^+ + SO_2 \rightarrow O_2^+ + S + He$	8.15e-10	-0.50	0.00	5	*Herbst*
337	$He^+ + S_2 \rightarrow S^+ + S + He$	2.00e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
338	$He^+ + HS_2 \rightarrow HS + S^+ + He$	2.00e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
339	$He^+ + HS_2 \rightarrow S_2+ + He + H$	2.00e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
340	$He^+ + H_2S_2 \rightarrow HS_2+ + He + H$	1.20e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
341	$He^+ + H_2S_2 \rightarrow HS^+ + HS + He$	1.20e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
342	$C + CH^+ \rightarrow C_2^+ + H$	1.20e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
343	$C + CH_2^+ \rightarrow C_2H^+ + H$	1.20e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
344	$C + CH_3^+ \rightarrow C_2H^+ + H_2$	1.20e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
345	$C + CH_3^+ \rightarrow C_2H_2^+ + H$	1.20e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
346	$C + CH_5^+ \rightarrow CH_4 + CH^+$	1.00e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
347	$C + C_2^+ \rightarrow C^+ + C_2$	1.10e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
348	$C + H_2O^+ \rightarrow CH^+ + OH$	1.10e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
349	$C + HCO^+ \rightarrow CO + CH^+$	1.10e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
350	$C + HS^+ \rightarrow CS^+ + H$	9.90e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
351	$C + H_2S^+ \rightarrow HCS^+ + H$	1.00e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
352	$C^+ + CH \rightarrow C_2^+ + H$	2.70e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
353	$C^+ + CH_2 \rightarrow C_2H^+ + H$	4.34e-10	-0.50	0.00	5	*Herbst*
354	$C^+ + CH_3 \rightarrow C_2H^+ + H_2$	1.00e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
355	$C^+ + CH_3 \rightarrow C_2H_2^+ + H$	1.00e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
356	$C^+ + CH_4 \rightarrow C_2H_2^+ + H_2$	5.00e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
357	$C^+ + C_2H + e^- \rightarrow C + C_2H$	2.60e-09	-0.50	0.00	5	*Ruffle*
358	$C^+ + OH \rightarrow CO^+ + H$	5.70e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
359	$C^+ + H_2O \rightarrow HCO^+ + H$	8.90e-10	-0.50	0.00	5	*Herbst*
360	$C^+ + H_2O \rightarrow HOC^+ + H$	1.80e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
361	$C^+ + HCO \rightarrow CH^+ + CO$	6.70e-10	-0.50	0.00	5	*Herbst*
362	$C^+ + H_2CO \rightarrow CH_2^+ + CO$	1.50e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
363	$C^+ + H_2CO \rightarrow HCO^+ + CH$	6.50e-10	-0.50	0.00	5	*Herbst*
364	$C^+ + CH_4O \rightarrow CH_3^+ + HCO$	6.90e-10	-0.50	0.00	5	*Herbst*

365	$C^+ + CH_4O \rightarrow H_3CO^+ + CH$	6.90e-10	-0.50	0.00	5	*Herbst*
366	$C^+ + O_2 \rightarrow CO^+ + O$	7.50e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
367	$C^+ + O_2 \rightarrow CO + O^+$	4.10e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
368	$C^+ + HS \rightarrow CS^+ + H$	2.40e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
369	$C^+ + H_2S \rightarrow HCS^+ + H$	9.50e-10	-0.50	0.00	5	*Herbst*
370	$C^+ + H_2CS \rightarrow CS + CH_2^+$	2.10e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
371	$C^+ + SO \rightarrow S^+ + CO$	1.10e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
372	$C^+ + SO \rightarrow S + CO^+$	1.10e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
373	$C^+ + SO \rightarrow CS^+ + O$	1.10e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
374	$C^+ + OCS \rightarrow CS^+ + CO$	1.60e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
375	$C^+ + SO_2 \rightarrow SO^+ + CO$	2.00e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
376	$CH + CH^+ \rightarrow C_2^+ + H_2$	7.40e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
377	$CH + CH_2^+ \rightarrow C_2H_2^+ + H$	7.20e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
378	$CH + CH_3^+ \rightarrow C_2H_2^+ + H_2$	5.10e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
379	$CH + CH_5^+ \rightarrow CH_2^+ + CH_4$	4.90e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
380	$CH + C_2H^+ \rightarrow CH_2^+ + C_2$	3.20e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
381	$CH + O^+ \rightarrow CO^+ + H$	3.50e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
382	$CH + OH^+ \rightarrow CH_2^+ + O$	3.50e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
383	$CH + H_2O^+ \rightarrow CH_2^+ + OH$	3.40e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
384	$CH + H_3O^+ \rightarrow CH_2^+ + H_2O$	4.80e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
385	$CH + CO^+ \rightarrow HCO^+ + C$	3.20e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
386	$CH + HCO^+ \rightarrow CO + CH_2^+$	4.50e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
387	$CH + H_2CO^+ \rightarrow CH_2^+ + HCO$	3.10e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
388	$CH + H_3CO^+ \rightarrow CH_2^+ + H_2CO$	4.40e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
389	$CH + O_2^+ \rightarrow HCO^+ + O$	3.10e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
390	$CH + S^+ \rightarrow CS^+ + H$	4.40e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
391	$CH + HS^+ \rightarrow CH_2^+ + S$	5.80e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
392	$CH^+ + CH_2 \rightarrow C_2H^+ + H_2$	1.00e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
393	$CH^+ + CH_4 \rightarrow C_2H_2^+ + H_2 + H$	1.40e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
394	$CH^+ + O \rightarrow CO^+ + H$	3.50e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
395	$CH^+ + OH \rightarrow CO^+ + H_2$	7.50e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
396	$CH^+ + H_2O \rightarrow H_3O^+ + C$	5.80e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
397	$CH^+ + H_2O \rightarrow HCO^+ + H_2$	2.90e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
398	$CH^+ + H_2O \rightarrow H_2CO^+ + H$	5.80e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
399	$CH^+ + HCO \rightarrow CH_2^+ + CO$	4.60e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
400	$CH^+ + H_2CO \rightarrow HCO^+ + CH_2$	9.60e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
401	$CH^+ + H_2CO \rightarrow CH_3^+ + CO$	9.60e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
402	$CH^+ + H_2CO \rightarrow H_3CO^+ + C$	9.60e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
403	$CH^+ + CH_4O \rightarrow CH_3^+ + H_2CO$	1.45e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
404	$CH^+ + CH_4O \rightarrow H_3CO^+ + CH_2$	2.90e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
405	$CH^+ + CH_4O \rightarrow CH_5O^+ + C$	1.16e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
406	$CH^+ + O_2 \rightarrow CO^+ + OH$	1.00e-11	0.00	0.00	5	*Herbst*
407	$CH^+ + O_2 \rightarrow HCO + O^+$	1.00e-11	0.00	0.00	5	*Herbst*
408	$CH^+ + O_2 \rightarrow HCO^+ + O$	9.70e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*

409	$CH^+ + S \rightarrow HS^+ + C$	4.70e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
410	$CH^+ + H_2S \rightarrow H_3S^+ + C$	6.30e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
411	$CH^+ + H_2S \rightarrow HCS^+ + H_2$	6.60e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
412	$CH^+ + OCS \rightarrow HCS^+ + CO$	1.05e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
413	$CH^+ + OCS \rightarrow HOCS^+ + C$	8.55e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
414	$CH_2 + CH_5^+ \rightarrow CH_3^+ + CH_4$	7.97e-10	-0.50	0.00	5	*Herbst*
415	$CH_2 + C_2H^+ \rightarrow CH_3^+ + C_2$	4.40e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
416	$CH_2 + OH^+ \rightarrow CH_3^+ + O$	4.80e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
417	$CH_2 + H_2O^+ \rightarrow CH_3^+ + OH$	4.70e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
418	$CH_2 + H_3O^+ \rightarrow CH_3^+ + H_2O$	7.78e-10	-0.50	0.00	5	*Herbst*
419	$CH_2 + CO^+ \rightarrow HCO^+ + CH$	4.30e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
420	$CH_2 + HCO^+ \rightarrow CH_3^+ + CO$	7.19e-10	-0.50	0.00	5	*Herbst*
421	$CH_2 + H_2CO^+ \rightarrow CH_3^+ + HCO$	4.30e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
422	$CH_2 + O_2^+ \rightarrow CH_2^+ + O_2$	4.30e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
423	$CH_2 + O_2^+ \rightarrow H_2CO^+ + O$	4.30e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
424	$CH_2^+ + O \rightarrow HCO^+ + H$	7.50e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
425	$CH_2^+ + OH \rightarrow H_2CO^+ + H$	7.40e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
426	$CH_2^+ + H_2O \rightarrow H_3CO^+ + H$	1.20e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
427	$CH_2^+ + HCO \rightarrow CH_3^+ + CO$	4.50e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
428	$CH_2^+ + H_2CO \rightarrow HCO^+ + CH_3$	2.80e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
429	$CH_2^+ + O_2 \rightarrow HCO^+ + OH$	9.10e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
430	$CH_2^+ + S \rightarrow HCS^+ + H$	1.40e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
431	$CH_2^+ + H_2S \rightarrow HCS^+ + H_2 + H$	1.10e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
432	$CH_2^+ + H_2S \rightarrow H_3CS^+ + H$	1.60e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
433	$CH_2^+ + OCS \rightarrow HCS^+ + HCO$	1.08e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
434	$CH_2^+ + OCS \rightarrow H_2CS^+ + CO$	7.20e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
435	$CH_3 + S^+ \rightarrow H_2CS^+ + H$	1.00e-11	0.00	0.00	5	*Herbst*
436	$CH_3^+ + O \rightarrow HCO^+ + H_2$	2.05e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
437	$CH_3^+ + O \rightarrow HOC^+ + H_2$	2.05e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
438	$CH_3^+ + O \rightarrow H_2CO^+ + H$	1.00e-15	0.00	0.00	5	*Herbst*
439	$CH_3^+ + OH \rightarrow H_2CO^+ + H_2$	5.40e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
440	$CH_3^+ + HCO \rightarrow CH_4^+ + CO$	6.10e-10	-0.50	0.00	5	*Herbst*
441	$CH_3^+ + H_2CO \rightarrow HCO^+ + CH_4$	2.90e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
442	$CH_3^+ + CH_4O \rightarrow H_3CO^+ + CH_4$	2.10e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
443	$CH_3^+ + O_2 \rightarrow H_3CO^+ + O$	5.00e-12	0.00	0.00	5	*Herbst*
444	$CH_3^+ + S \rightarrow HCS^+ + H_2$	1.40e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
445	$CH_3^+ + HS \rightarrow H_2CS^+ + H_2$	2.20e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
446	$CH_3^+ + H_2S \rightarrow H_3CS^+ + H_2$	1.20e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
447	$CH_3^+ + SO \rightarrow HOCS^+ + H_2$	4.20e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
448	$CH_3^+ + OCS \rightarrow H_3CS^+ + CO$	1.90e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
449	$CH_4 + CH_4^+ \rightarrow CH_5^+ + CH_3$	1.50e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
450	$CH_4 + C_2^+ \rightarrow C_2H^+ + CH_3$	2.38e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
451	$CH_4 + C_2^+ \rightarrow C_2H_2^+ + CH_2$	1.82e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
452	$CH_4 + C_2H^+ \rightarrow C_2H_2^+ + CH_3$	3.74e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*

453	$CH_4 + O^+ \rightarrow CH_3^+ + OH$	1.10e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
454	$CH_4 + OH^+ \rightarrow H_3O^+ + CH_2$	1.40e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
455	$CH_4 + OH^+ \rightarrow CH_5^+ + O$	1.95e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
456	$CH_4 + H_2O^+ \rightarrow H_3O^+ + CH_3$	1.30e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
457	$CH_4 + CO^+ \rightarrow HCO^+ + CH_3$	4.55e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
458	$CH_4 + H_2CO^+ \rightarrow H_3CO^+ + CH_3$	9.35e-11	0.00	0.00	5	*Herbst*
459	$CH_4 + S^+ \rightarrow H_3CS^+ + H$	1.40e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
460	$CH_4 + HS^+ \rightarrow H_3CS^+ + H_2$	5.40e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
461	$CH_4 + CS^+ \rightarrow HCS^+ + CH_3$	5.00e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
462	$CH_4^+ + O \rightarrow CH_3^+ + OH$	1.00e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
463	$CH_4^+ + H_2O \rightarrow H_3O^+ + CH_3$	2.50e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
464	$CH_4^+ + H_2CO \rightarrow H_3CO^+ + CH_3$	1.98e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
465	$CH_4^+ + CH_4O \rightarrow CH_5O^+ + CH_3$	1.20e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
466	$CH_4^+ + H_2S \rightarrow H_2S^+ + CH_4$	1.60e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
467	$CH_4^+ + H_2S \rightarrow H_3S^+ + CH_3$	9.50e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
468	$CH_4^+ + OCS \rightarrow HOCS^+ + CH_3$	9.80e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
469	$CH_5^+ + CH_2 \rightarrow CH_3^+ + CH_4$	7.97e-10	-0.50	0.00	5	*Herbst*
470	$CH_5^+ + C_2 \rightarrow C_2H^+ + CH_4$	9.50e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
471	$CH_5^+ + C_2H \rightarrow C_2H_2^+ + CH_4$	2.30e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
472	$CH_5^+ + O \rightarrow H_3O^+ + CH_2$	2.20e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
473	$CH_5^+ + O \rightarrow H_3CO^+ + H_2$	4.40e-12	0.00	0.00	5	*Herbst*
474	$CH_5^+ + OH \rightarrow H_2O^+ + CH_4$	5.20e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
475	$CH_5^+ + H_2O \rightarrow H_3O^+ + CH_4$	2.40e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
476	$CH_5^+ + CO \rightarrow HCO^+ + CH_4$	3.16e-10	-0.50	0.00	5	*Herbst*
477	$CH_5^+ + HCO \rightarrow H_2CO^+ + CH_4$	1.20e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
478	$CH_5^+ + H_2CO \rightarrow H_3CO^+ + CH_4$	2.70e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
479	$CH_5^+ + S \rightarrow HS^+ + CH_4$	1.30e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
480	$C_2 + O^+ \rightarrow CO^+ + C$	4.80e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
481	$C_2 + OH^+ \rightarrow C_2H^+ + O$	4.80e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
482	$C_2 + H_2O^+ \rightarrow C_2H^+ + OH$	4.70e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
483	$C_2 + HCO^+ \rightarrow C_2H^+ + CO$	8.30e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
484	$C_2 + H_2CO^+ \rightarrow C_2H^+ + HCO$	8.20e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
485	$C_2^+ + O \rightarrow CO^+ + C$	3.10e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
486	$C_2^+ + H_2O \rightarrow C_2H^+ + OH$	4.40e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
487	$C_2^+ + O_2 \rightarrow CO^+ + CO$	8.00e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
488	$C_2^+ + HCO \rightarrow C_2H^+ + CO$	3.80e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
489	$C_2^+ + S \rightarrow CS^+ + C$	5.80e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
490	$C_2H + O^+ \rightarrow CO^+ + CH$	4.60e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
491	$C_2H + OH^+ \rightarrow C_2H_2^+ + O$	4.50e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
492	$C_2H + H_2O^+ \rightarrow C_2H_2^+ + OH$	4.40e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
493	$C_2H + CO^+ \rightarrow HCO^+ + C_2$	3.90e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
494	$C_2H + HCO^+ \rightarrow C_2H_2^+ + CO$	2.00e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
495	$C_2H + H_2CO^+ \rightarrow C_2H_2^+ + HCO$	7.70e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
496	$C_2H^+ + O \rightarrow HCO^+ + C$	3.30e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*

497	$C_2H^+ + HCO \rightarrow C_2H_2^+ + CO$	7.60e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
498	$C_2H^+ + H_2CO \rightarrow H_3CO^+ + C_2$	1.10e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
499	$C_2H_2^+ + O \rightarrow HCO^+ + CH$	5.00e-11	0.00	0.00	5	*Herbst*
500	$C_2H_2^+ + O \rightarrow HOC^+ + CH$	5.00e-11	0.00	0.00	5	*Herbst*
501	$C_2H_2^+ + O_2 \rightarrow HCO^+ + HCO$	9.80e-13	0.00	0.00	5	*Herbst*
502	$O + OH^+ \rightarrow O_2^+ + H$	7.10e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
503	$O + H_2O^+ \rightarrow O_2^+ + H_2$	4.00e-11	0.00	0.00	5	*Herbst*
504	$O + HS^+ \rightarrow S^+ + OH$	2.90e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
505	$O + HS^+ \rightarrow SO^+ + H$	2.90e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
506	$O + H_2S^+ \rightarrow HS^+ + OH$	3.10e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
507	$O + H_2S^+ \rightarrow SO^+ + H_2$	3.10e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
508	$O + CS^+ \rightarrow S + CO^+$	6.00e-11	0.00	0.00	5	*Herbst*
509	$O + HCS^+ \rightarrow S + HCO^+$	5.00e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
510	$O + HCS^+ \rightarrow OCS^+ + H$	5.00e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
511	$O^+ + OH \rightarrow O_2^+ + H$	3.60e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
512	$O^+ + HCO \rightarrow OH^+ + CO$	4.30e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
513	$O^+ + H_2CO \rightarrow HCO^+ + OH$	1.40e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
514	$O^+ + H_2CO \rightarrow H_2CO^+ + O$	2.10e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
515	$O^+ + CH_4O \rightarrow H_2CO^+ + H_2O$	9.50e-11	0.00	0.00	5	*Herbst*
516	$O^+ + CH_4O \rightarrow H_3CO^+ + OH$	1.33e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
517	$O^+ + H_2S \rightarrow H_2O + S^+$	2.20e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
518	$O^+ + H_2S \rightarrow HS^+ + OH$	4.20e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
519	$O^+ + SO_2 \rightarrow O_2^+ + SO$	8.00e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
520	$OH + OH^+ \rightarrow H_2O^+ + O$	7.00e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
521	$OH + H_2O^+ \rightarrow H_3O^+ + O$	6.90e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
522	$OH + CO^+ \rightarrow HCO^+ + O$	3.10e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
523	$OH + HCO^+ \rightarrow H_2O^+ + CO$	2.33e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
524	$OH + S^+ \rightarrow SO^+ + H$	4.60e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
525	$OH + S^+ \rightarrow HS^+ + O$	2.90e-10	0.00	8820.00	5	*1993Pineau*
526	$OH + HS^+ \rightarrow H_2S^+ + O$	3.10e-10	0.00	7500.00	5	*1993Pineau*
527	$OH + HS^+ \rightarrow H_2O^+ + S$	4.30e-10	0.00	9200.00	5	*1993Pineau*
528	$OH^+ + H_2O \rightarrow H_3O^+ + O$	1.30e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
529	$OH^+ + HCO \rightarrow H_2O^+ + CO$	2.80e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
530	$OH^+ + HCO \rightarrow H_2CO^+ + O$	2.80e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
531	$OH^+ + H_2CO \rightarrow H_3CO^+ + O$	1.10e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
532	$OH^+ + S \rightarrow HS^+ + O$	4.30e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
533	$OH^+ + S \rightarrow SO^+ + H$	4.30e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
534	$OH^+ + H_2S \rightarrow H_3S^+ + O$	8.20e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
535	$H_2O + H_2O^+ \rightarrow H_3O^+ + OH$	2.10e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
536	$H_2O + CO^+ \rightarrow HCO^+ + OH$	8.80e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
537	$H_2O + HCO^+ \rightarrow CO + H_3O^+$	2.10e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
538	$H_2O + H_2CO^+ \rightarrow H_3O^+ + HCO$	2.60e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
539	$H_2O + HS^+ \rightarrow S + H_3O^+$	7.80e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
540	$H_2O + H_2S^+ \rightarrow HS + H_3O^+$	7.00e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*

541	$H_2O + H_3S^+ \rightarrow H_3O^+ + H_2S$	1.90e-09	0.00	2960.00	5	*1993Pineau*
542	$H_2O + HSO_2^+ \rightarrow H_3O^+ + SO_2$	2.13e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
543	$H_2O^+ + CO \rightarrow HCO^+ + OH$	5.00e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
544	$H_2O^+ + HCO \rightarrow H_2CO^+ + OH$	2.80e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
545	$H_2O^+ + HCO \rightarrow H_3O^+ + CO$	2.80e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
546	$H_2O^+ + H_2CO \rightarrow H_3CO^+ + OH$	6.60e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
547	$H_2O^+ + S \rightarrow HS^+ + OH$	4.30e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
548	$H_2O^+ + S \rightarrow HSO^+ + H$	4.30e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
549	$H_2O^+ + H_2S \rightarrow H_3O^+ + HS$	5.90e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
550	$H_2O^+ + H_2S \rightarrow H_3S^+ + OH$	7.00e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
551	$H_2O^+ + SO_2 \rightarrow HSO_2^+ + OH$	2.60e-09	0.00	0.00	5	*1892UMIST*
552	$H_3O^+ + H_2CO \rightarrow H_3CO^+ + H_2O$	2.60e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
553	$H_3O^+ + CH_4O \rightarrow CH_5O^+ + H_2O$	1.91e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
554	$H_3O^+ + S \rightarrow HS^+ + H_2O$	3.20e-10	0.00	3080.00	5	*1993Pineau*
555	$H_3O^+ + HS \rightarrow H_2S^+ + H_2O$	8.10e-10	0.00	2160.00	5	*1993Pineau*
556	$H_3O^+ + H_2S \rightarrow H_3S^+ + H_2O$	1.10e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
557	$H_3O^+ + CS \rightarrow HCS^+ + H_2O$	4.99e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
558	$H_3O^+ + S_2 \rightarrow HS_2+ + H_2O$	2.00e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
559	$H_3O^+ + HS_2 \rightarrow H_2S_2+ + H_2O$	2.02e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
560	$H_3O^+ + H_2S_2 \rightarrow H_3S_2+ + H_2O$	1.21e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
561	$CO + HOC^+ \rightarrow HCO^+ + CO$	4.00e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
562	$CO + HS^+ \rightarrow HCO^+ + S$	3.30e-10	0.00	9400.00	5	*1993Pineau*
563	$CO + H_2S^+ \rightarrow HCO^+ + HS$	8.20e-10	0.00	10310.00	5	*1993Pineau*
564	$CO + HOCS^+ \rightarrow HCO^+ + OCS$	1.10e-09	0.00	4980.00	5	*1993Pineau*
565	$CO^+ + CO \rightarrow HCO^+ + HCO$	1.70e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
566	$CO^+ + H_2S \rightarrow HS + HCO^+$	2.44e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
567	$HCO + HCO^+ \rightarrow H_2CO^+ + CO$	1.00e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
568	$HCO + H_2CO^+ \rightarrow H_3CO^+ + CO$	3.60e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
569	$HCO + S^+ \rightarrow HCO^+ + S$	5.00e-10	-0.50	0.00	5	*Herbst*
570	$HCO + S^+ \rightarrow HS^+ + CO$	5.00e-10	-0.50	0.00	5	*Herbst*
571	$HCO^+ + H_2CO \rightarrow H_3CO^+ + CO$	2.40e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
572	$HCO^+ + CH_4O \rightarrow CH_5O^+ + CO$	1.70e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
573	$HCO^+ + S \rightarrow HS^+ + CO$	3.30e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
574	$HCO^+ + HS \rightarrow H_2S^+ + CO$	1.80e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
575	$HCO^+ + H_2S \rightarrow H_3S^+ + CO$	9.50e-10	-0.50	0.00	5	*Herbst*
576	$HCO^+ + CS \rightarrow HCS^+ + CO$	4.30e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
577	$HCO^+ + H_2CS \rightarrow H_3CS^+ + CO$	1.50e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
578	$HCO^+ + SO \rightarrow HSO^+ + CO$	3.30e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
579	$HCO^+ + OCS \rightarrow HOCS^+ + CO$	1.50e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
580	$HCO^+ + S_2 \rightarrow HS_2+ + CO$	2.00e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
581	$HCO^+ + HS_2 \rightarrow H_2S_2+ + CO$	1.73e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
582	$HCO^+ + H_2S_2 \rightarrow H_3S_2+ + CO$	1.04e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
583	$H_2CO + H_2CO^+ \rightarrow H_3CO^+ + HCO$	1.00e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
584	$H_2CO + O_2^+ \rightarrow HCO^+ + O_2 + H$	2.30e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*

585	$H_2CO + S^+ \rightarrow H_2S^+ + CO$	1.10e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
586	$H_2CO + S^+ \rightarrow HCO^+ + HS$	1.10e-09	-0.50	0.00	5	*Herbst*
587	$H_2CO + H_3S^+ \rightarrow H_3CO^+ + H_2S$	2.20e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
588	$H_2CO^+ + S \rightarrow HS^+ + HCO$	5.50e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
589	$CH_4O + O_2^+ \rightarrow H_3CO^+ + O_2 + H$	5.00e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
590	$O_2 + S^+ \rightarrow SO^+ + O$	2.00e-11	0.00	0.00	5	*Herbst*
591	$O_2 + CS^+ \rightarrow OCS^+ + O$	1.30e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
592	$O_2 + SO_2^+ \rightarrow O_2^+ + SO_2$	2.50e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
593	$O_2^+ + S \rightarrow SO^+ + O$	5.40e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
594	$S + H_3S^+ \rightarrow HS^+ + H_2S$	5.00e-10	0.00	6020.00	5	*1993Pineau*
595	$S + H_3S^+ \rightarrow H_2S_2+ + H$	1.00e-09	0.00	0.00	5	*2457UMIST*
596	$S^+ + H_2S \rightarrow HS_2+ + H$	2.00e-10	-0.50	0.00	5	*Herbst*
597	$S^+ + H_2S \rightarrow S_2+ + H_2$	6.40e-10	-0.50	0.00	5	*Herbst*
598	$S^+ + OCS \rightarrow S_2+ + CO$	9.10e-10	-0.50	0.00	5	*Herbst*
599	$HS^+ + H_2S \rightarrow H_3S^+ + S$	2.90e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
600	$HS^+ + H_2S \rightarrow HS_2+ + H_2$	2.80e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
601	$H_2S^+ + H_2S \rightarrow H_3S^+ + HS$	5.80e-10	0.00	0.00	5	*Herbst*
602	$H_2S + HS_2+ \rightarrow S_2 + H_3S^+$	7.95e-10	-0.50	0.00	5	*Herbst*
603	$H_2S + SO^+ \rightarrow S_2+ + H_2O$	1.10e-09	0.00	0.00	5	*Herbst*
604	$H + H_2^+ \rightarrow H_2 + H^+$	6.40e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
605	$H + CO^+ \rightarrow CO + H^+$	9.00e-11	0.00	0.00	6	*Herbst*
606	$H^+ + CH \rightarrow CH^+ + H$	1.40e-08	-0.50	0.00	6	*Herbst*
607	$H^+ + CH_2 \rightarrow CH_2^+ + H$	1.14e-09	-0.50	0.00	6	*Herbst*
608	$H^+ + CH_3 \rightarrow CH_3^+ + H$	3.40e-09	0.00	0.00	6	*Herbst*
609	$H^+ + CH_4 \rightarrow CH_4^+ + H$	1.50e-09	0.00	0.00	6	*Herbst*
610	$H^+ + C_2 \rightarrow C_2^+ + H$	3.10e-09	0.00	0.00	6	*Herbst*
611	$H^+ + C_2H \rightarrow C_2H^+ + H$	3.70e-09	-0.50	0.00	6	*Herbst*
612	$H^+ + C_2H_2 \rightarrow C_2H_2^+ + H$	2.00e-09	0.00	0.00	6	*Herbst*
613	$H^+ + OH \rightarrow OH^+ + H$	1.60e-08	-0.50	0.00	6	*Herbst*
614	$H^+ + H_2O \rightarrow H_2O^+ + H$	7.30e-09	-0.50	0.00	6	*Herbst*
615	$H^+ + HCO \rightarrow HCO^+ + H$	1.30e-09	-0.50	0.00	6	*Herbst*
616	$H^+ + H_2CO \rightarrow H_2CO^+ + H$	4.60e-09	-0.50	0.00	6	*Herbst*
617	$H^+ + CH_4O \rightarrow CH_4O^+ + H$	3.30e-09	-0.50	0.00	6	*Herbst*
618	$H^+ + O_2 \rightarrow O_2^+ + H$	1.20e-09	0.00	0.00	6	*Herbst*
619	$H^+ + S \rightarrow S^+ + H$	1.30e-09	0.00	0.00	6	*Herbst*
620	$H^+ + HS \rightarrow HS^+ + H$	3.50e-09	-0.50	0.00	6	*Herbst*
621	$H^+ + H_2S \rightarrow H_2S^+ + H$	3.80e-09	-0.50	0.00	6	*Herbst*
622	$H^+ + CS \rightarrow CS^+ + H$	1.80e-08	-0.50	0.00	6	*Herbst*
623	$H^+ + H_2CS \rightarrow H_2CS^+ + H$	6.40e-09	-0.50	0.00	6	*Herbst*
624	$H^+ + SO \rightarrow SO^+ + H$	1.40e-08	-0.50	0.00	6	*Herbst*
625	$H^+ + SO_2 \rightarrow SO_2^+ + H$	5.78e-09	0.00	0.00	6	*2700UMIST*
626	$H^+ + S_2 \rightarrow S_2+ + H$	3.00e-09	0.00	0.00	6	*Herbst*
627	$H^+ + HS_2 \rightarrow HS_2+ + H$	3.80e-09	-0.50	0.00	6	*Herbst*
628	$H^+ + H_2S_2 \rightarrow H_2S_2+ + H$	4.67e-09	-0.50	0.00	6	*Herbst*

629	$H_2 + He^+ \rightarrow He + H_2^+$	9.60e-15	0.00	0.00	6	*Herbst*
630	$H_2^+ + CH \rightarrow CH^+ + H_2$	7.10e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
631	$H_2^+ + CH_2 \rightarrow CH_2^+ + H_2$	1.00e-09	0.00	0.00	6	*Herbst*
632	$H_2^+ + CH_4 \rightarrow CH_4^+ + H_2$	1.40e-09	0.00	0.00	6	*Herbst*
633	$H_2^+ + C_2 \rightarrow C_2^+ + H_2$	1.10e-09	0.00	0.00	6	*Herbst*
634	$H_2^+ + C_2H \rightarrow C_2H^+ + H_2$	1.00e-09	0.00	0.00	6	*Herbst*
635	$H_2^+ + C_2H_2 \rightarrow C_2H_2^+ + H_2$	4.80e-09	0.00	0.00	6	*Herbst*
636	$H_2^+ + H_2O \rightarrow H_2O^+ + H_2$	3.90e-09	0.00	0.00	6	*Herbst*
637	$H_2^+ + CO \rightarrow CO^+ + H_2$	6.00e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
638	$H_2^+ + HCO \rightarrow HCO^+ + H_2$	1.00e-09	0.00	0.00	6	*Herbst*
639	$H_2^+ + H_2CO \rightarrow H_2CO^+ + H_2$	1.40e-09	0.00	0.00	6	*Herbst*
640	$H_2^+ + O_2 \rightarrow O_2^+ + H_2$	8.00e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
641	$H_2^+ + H_2S \rightarrow H_2S^+ + H_2$	2.70e-09	0.00	0.00	6	*Herbst*
642	$He^+ + CH \rightarrow CH^+ + He$	3.83e-09	-0.50	0.00	6	*Herbst*
643	$He^+ + CH_4 \rightarrow CH_4^+ + He$	5.10e-11	0.00	0.00	6	*Herbst*
644	$He^+ + C_2 \rightarrow C_2^+ + He$	5.00e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
645	$He^+ + C_2H_2 \rightarrow C_2H_2^+ + He$	2.50e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
646	$He^+ + H_2O \rightarrow H_2O^+ + He$	1.32e-09	-0.50	0.00	6	*Herbst*
647	$He^+ + O_2 \rightarrow O_2^+ + He$	1.00e-09	0.00	0.00	6	*Herbst*
648	$He^+ + H_2S \rightarrow H_2S^+ + He$	1.40e-10	-0.50	0.00	6	*Herbst*
649	$He^+ + SO_2 \rightarrow SO_2^+ + He$	8.15e-10	-0.50	0.00	6	*Herbst*
650	$C + C_2H_2^+ \rightarrow C_2H_2 + C^+$	1.10e-09	0.00	0.00	6	*Herbst*
651	$C + CO^+ \rightarrow CO + C^+$	1.10e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
652	$C + O_2^+ \rightarrow C^+ + O_2$	5.20e-11	0.00	0.00	6	*Herbst*
653	$C + S^+ \rightarrow C^+ + S$	1.50e-09	0.00	10720.00	6	*1993Pineau*
654	$C + H_2S^+ \rightarrow C^+ + H_2S$	4.25e-10	0.00	9300.00	6	*1993Pineau*
655	$C + CS^+ \rightarrow C^+ + CS$	1.60e-09	0.00	0.00	6	*Herbst*
656	$C + SO^+ \rightarrow C^+ + SO$	2.60e-10	0.00	10930.00	6	*1993Pineau*
657	$C^+ + CH \rightarrow CH^+ + C$	2.70e-09	-0.50	0.00	6	*Herbst*
658	$C^+ + CH_2 \rightarrow CH_2^+ + C$	4.34e-10	-0.50	0.00	6	*Herbst*
659	$C^+ + CH_3 \rightarrow CH_3^+ + C$	1.00e-09	0.00	0.00	6	*Herbst*
660	$C^+ + HCO \rightarrow HCO^+ + C$	6.70e-10	-0.50	0.00	6	*Herbst*
661	$C^+ + H_2CO \rightarrow H_2CO^+ + C$	9.60e-10	-0.50	0.00	6	*Herbst*
662	$C^+ + CH_4O \rightarrow CH_4O^+ + C$	8.10e-10	-0.50	0.00	6	*Herbst*
663	$C^+ + S \rightarrow S^+ + C$	1.50e-09	0.00	0.00	6	*Herbst*
664	$C^+ + H_2S \rightarrow H_2S^+ + C$	3.20e-10	-0.50	0.00	6	*Herbst*
665	$C^+ + CS \rightarrow CS^+ + C$	1.60e-09	0.00	700.00	6	*1993Pineau*
666	$C^+ + SO \rightarrow SO^+ + C$	1.10e-09	-0.50	0.00	6	*Herbst*
667	$C^+ + OCS \rightarrow OCS^+ + C$	4.00e-10	-0.50	0.00	6	*Herbst*
668	$CH + O^+ \rightarrow CH^+ + O$	3.50e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
669	$CH + OH^+ \rightarrow CH^+ + OH$	3.50e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
670	$CH + H_2O^+ \rightarrow CH^+ + H_2O$	3.40e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
671	$CH + CO^+ \rightarrow CO + CH^+$	3.20e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
672	$CH + H_2CO^+ \rightarrow CH^+ + H_2CO$	3.10e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*

673	$CH + O_2^+ \rightarrow CH^+ + O_2$	3.10e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
674	$CH^+ + HCO \rightarrow HCO^+ + CH$	4.60e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
675	$CH^+ + S \rightarrow S^+ + CH$	4.70e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
676	$CH_2 + C_2^+ \rightarrow CH_2^+ + C_2$	4.50e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
677	$CH_2 + O^+ \rightarrow CH_2^+ + O$	9.70e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
678	$CH_2 + OH^+ \rightarrow CH_2^+ + OH$	4.80e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
679	$CH_2 + H_2O^+ \rightarrow CH_2^+ + H_2O$	4.70e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
680	$CH_2 + CO^+ \rightarrow CO + CH_2^+$	4.30e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
681	$CH_2 + H_2CO^+ \rightarrow CH_2^+ + H_2CO$	4.30e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
682	$CH_3^+ + HCO \rightarrow HCO^+ + CH_3$	6.10e-10	-0.50	0.00	6	*Herbst*
683	$CH_4 + O^+ \rightarrow CH_4^+ + O$	8.90e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
684	$CH_4 + CO^+ \rightarrow CH_4^+ + CO$	7.93e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
685	$CH_4^+ + C_2H_2 \rightarrow C_2H_2^+ + CH_4$	1.10e-09	0.00	0.00	6	*Herbst*
686	$CH_4^+ + H_2CO \rightarrow H_2CO^+ + CH_4$	1.62e-09	0.00	0.00	6	*Herbst*
687	$CH_4^+ + CH_4O \rightarrow CH_4O^+ + CH_4$	1.80e-09	0.00	0.00	6	*Herbst*
688	$CH_4^+ + O_2 \rightarrow O_2^+ + CH_4$	4.00e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
689	$CH_4^+ + OCS \rightarrow OCS^+ + CH_4$	4.20e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
690	$C_2 + O^+ \rightarrow C_2^+ + O$	4.80e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
691	$C_2 + OH^+ \rightarrow C_2^+ + OH$	4.80e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
692	$C_2 + H_2O^+ \rightarrow C_2^+ + H_2O$	4.70e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
693	$C_2 + CO^+ \rightarrow CO + C_2^+$	8.40e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
694	$C_2^+ + CH \rightarrow CH^+ + C_2$	3.20e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
695	$C_2^+ + CH_2 \rightarrow CH_2^+ + C_2$	4.50e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
696	$C_2^+ + HCO \rightarrow HCO^+ + C_2$	3.80e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
697	$C_2^+ + S \rightarrow S^+ + C_2$	5.80e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
698	$C_2H + OH^+ \rightarrow C_2H^+ + OH$	4.50e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
699	$C_2H + H_2O^+ \rightarrow C_2H^+ + H_2O$	4.40e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
700	$C_2H + CO^+ \rightarrow CO + C_2H^+$	3.90e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
701	$C_2H^+ + S \rightarrow S^+ + C_2H$	1.20e-09	0.00	0.00	6	*Herbst*
702	$C_2H_2^+ + HCO \rightarrow HCO^+ + C_2H_2$	5.70e-10	-0.50	0.00	6	*Herbst*
703	$C_2H_2^+ + H_2CO \rightarrow H_2CO^+ + C_2H_2$	1.60e-09	-0.50	0.00	6	*Herbst*
704	$C_2H_2^+ + H_2S \rightarrow H_2S^+ + C_2H_2$	9.80e-10	-0.50	0.00	6	*Herbst*
705	$O + CO^+ \rightarrow CO + O^+$	1.40e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
706	$O^+ + H_2O \rightarrow H_2O^+ + O$	3.20e-09	0.00	0.00	6	*Herbst*
707	$O^+ + CO \rightarrow CO^+ + O$	4.90e-12	0.50	4580.00	6	*2907UMIST*
708	$O^+ + HCO \rightarrow HCO^+ + O$	4.30e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
709	$O^+ + CH_4O \rightarrow CH_4O^+ + O$	4.75e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
710	$O^+ + O_2 \rightarrow O_2^+ + O$	3.00e-11	0.00	0.00	6	*Herbst*
711	$O^+ + H_2S \rightarrow H_2S^+ + O$	1.80e-09	0.00	0.00	6	*Herbst*
712	$O^+ + OCS \rightarrow OCS^+ + O$	6.50e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
713	$O^+ + SO_2 \rightarrow SO_2^+ + O$	2.40e-09	0.00	0.00	6	*2919UMIST*
714	$OH + CO^+ \rightarrow CO + OH^+$	3.10e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
715	$OH^+ + H_2O \rightarrow H_2O^+ + OH$	1.50e-09	0.00	0.00	6	*Herbst*
716	$OH^+ + HCO \rightarrow HCO^+ + OH$	2.80e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*

717	$OH^+ + H_2CO \rightarrow H_2CO^+ + OH$	7.40e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
718	$OH^+ + O_2 \rightarrow O_2^+ + OH$	5.90e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
719	$OH^+ + H_2S \rightarrow H_2S^+ + OH$	1.20e-09	0.00	0.00	6	*Herbst*
720	$H_2O + CO^+ \rightarrow CO + H_2O^+$	1.70e-09	0.00	0.00	6	*Herbst*
721	$H_2O^+ + HCO \rightarrow HCO^+ + H_2O$	2.80e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
722	$H_2O^+ + H_2CO \rightarrow H_2CO^+ + H_2O$	1.40e-09	0.00	0.00	6	*Herbst*
723	$H_2O^+ + O_2 \rightarrow O_2^+ + H_2O$	4.30e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
724	$H_2O^+ + S \rightarrow S^+ + H_2O$	4.30e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
725	$H_2O^+ + H_2S \rightarrow H_2S^+ + H_2O$	8.90e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
726	$CO^+ + HCO \rightarrow HCO^+ + CO$	7.40e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
727	$CO^+ + H_2CO \rightarrow H_2CO^+ + CO$	1.40e-09	0.00	0.00	6	*Herbst*
728	$CO^+ + O_2 \rightarrow O_2^+ + CO$	1.20e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
729	$CO^+ + S \rightarrow S^+ + CO$	1.10e-09	0.00	0.00	6	*Herbst*
730	$CO^+ + H_2S \rightarrow H_2S^+ + CO$	2.44e-09	0.00	0.00	6	*Herbst*
731	$HCO + H_2CO^+ \rightarrow HCO^+ + H_2CO$	3.20e-09	0.00	0.00	6	*Herbst*
732	$HCO + O_2^+ \rightarrow HCO^+ + O_2$	3.60e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
733	$HCO + H_2S^+ \rightarrow HCO^+ + H_2S$	7.00e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
734	$H_2CO + O_2^+ \rightarrow H_2CO^+ + O_2$	9.90e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
735	$H_2CO^+ + S \rightarrow S^+ + H_2CO$	5.50e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
736	$CH_4O + O_2^+ \rightarrow CH_4O^+ + O_2$	5.00e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
737	$O_2^+ + S \rightarrow S^+ + O_2$	5.40e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
738	$O_2^+ + H_2S \rightarrow H_2S^+ + O_2$	1.40e-09	0.00	0.00	6	*Herbst*
739	$S + HS^+ \rightarrow HS + S^+$	9.70e-10	0.00	0.00	6	*Herbst*
740	$S + H_2S^+ \rightarrow H_2S + S^+$	1.10e-09	0.00	0.00	6	*Herbst*
741	$S^+ + HS \rightarrow HS^+ + S$	9.70e-10	0.00	350.00	6	*1993Pineau*
742	$S^+ + H_2S \rightarrow H_2S^+ + S$	4.40e-11	-0.50	0.00	6	*Herbst*
743	$HS + H_2S^+ \rightarrow HS^+ + H_2S$	5.00e-10	0.00	0.00	6	*1993Pineau*
744	$HS^+ + H_2S \rightarrow H_2S^+ + HS$	2.50e-10	0.00	0.00	6	*3136UMIST*
745	$H + H^+ \rightarrow H_2^+ + h\nu$	2.00e-20	1.00	0.00	7	*Herbst*
746	$H + O \rightarrow OH + h\nu$	9.90e-19	-0.38	0.00	7	*Herbst*
747	$H + C \rightarrow CH + h\nu$	1.00e-17	0.00	0.00	7	*Herbst*
748	$H_2 + C \rightarrow CH_2 + h\nu$	1.00e-17	0.00	0.00	7	*Herbst*
749	$H_2 + CH \rightarrow CH_3 + h\nu$	3.25e-17	-0.60	0.00	7	*Herbst*
750	$H_2 + C^+ \rightarrow CH_2^+ + h\nu$	4.00e-16	-0.20	0.00	7	*Herbst*
751	$H_2 + CH_3^+ \rightarrow CH_5^+ + h\nu$	1.30e-14	-1.00	0.00	7	*Herbst*
752	$H_2 + S^+ \rightarrow H_2S^+ + h\nu$	1.00e-17	-0.20	0.00	7	*Herbst*
753	$H_2 + HS^+ \rightarrow H_3S^+ + h\nu$	2.40e-16	-0.60	0.00	7	*Herbst*
754	$H_2 + HS_2+ \rightarrow H_3S_2+ + h\nu$	1.00e-14	-1.00	0.00	7	*Herbst*
755	$O + O \rightarrow O_2 + h\nu$	4.90e-20	1.58	0.00	7	*Herbst*
756	$O + SO \rightarrow SO_2 + h\nu$	3.20e-16	-1.60	0.00	7	*Herbst*
757	$CO + S \rightarrow OCS + h\nu$	1.60e-17	-1.50	0.00	7	*Herbst*
758	$CH_3^+ + H_2O \rightarrow CH_5O^+ + h\nu$	5.50e-12	-1.70	0.00	7	*Herbst*
759	$H^+ + e^- \rightarrow H + h\nu$	3.50e-12	-0.70	0.00	8	*Herbst*
760	$H_2^+ + e^- \rightarrow H + H$	9.80e-09	-0.50	0.00	8	*Herbst*

761	$H_3^+ + e^- \rightarrow H + H + H$	5.44e-08	-0.50	0.00	8	*Herbst*
762	$H_3^+ + e^- \rightarrow H_2 + H$	1.36e-08	-0.50	0.00	8	*Herbst*
763	$He^+ + e^- \rightarrow He + h\nu$	4.50e-12	-0.67	0.00	8	*Herbst*
764	$C^+ + e^- \rightarrow C + h\nu$	4.40e-12	-0.61	0.00	8	*Herbst*
765	$CH^+ + e^- \rightarrow C + H$	1.50e-07	-0.42	0.00	8	*Herbst*
766	$CH_2^+ + e^- \rightarrow C + H + H$	4.00e-07	-0.60	0.00	8	*Herbst*
767	$CH_2^+ + e^- \rightarrow C + H_2$	7.60e-08	-0.60	0.00	8	*Herbst*
768	$CH_2^+ + e^- \rightarrow CH + H$	1.60e-07	-0.60	0.00	8	*Herbst*
769	$CH_3^+ + e^- \rightarrow CH_2 + H$	4.00e-07	-0.30	0.00	8	*Herbst*
770	$CH_3^+ + e^- \rightarrow CH + H + H$	1.60e-07	-0.30	0.00	8	*Herbst*
771	$CH_3^+ + e^- \rightarrow CH + H_2$	4.00e-07	-0.30	0.00	8	*Herbst*
772	$CH_3^+ + e^- \rightarrow CH_3 + h\nu$	1.10e-10	-0.70	0.00	8	*Herbst*
773	$CH_4^+ + e^- \rightarrow CH_2 + H + H$	3.00e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*
774	$CH_4^+ + e^- \rightarrow CH_3 + H$	3.00e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*
775	$CH_5^+ + e^- \rightarrow CH_4 + H$	1.40e-08	-0.52	0.00	8	*Herbst*
776	$CH_5^+ + e^- \rightarrow CH_3 + H_2$	1.40e-08	-0.52	0.00	8	*Herbst*
777	$C_2^+ + e^- \rightarrow C + C$	2.00e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*
778	$C_2H^+ + e^- \rightarrow CH + C$	1.35e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*
779	$C_2H^+ + e^- \rightarrow C_2 + H$	1.35e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*
780	$C_2H_2^+ + e^- \rightarrow C_2 + H + H$	1.70e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*
781	$C_2H_2^+ + e^- \rightarrow CH + CH$	7.50e-08	-0.50	0.00	8	*Herbst*
782	$C_2H_2^+ + e^- \rightarrow C_2H + H$	2.00e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*
783	$O^+ + e^- \rightarrow O + h\nu$	3.40e-12	-0.63	0.00	8	*Herbst*
784	$OH^+ + e^- \rightarrow O + H$	2.00e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*
785	$H_2O^+ + e^- \rightarrow O + H + H$	2.72e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*
786	$H_2O^+ + e^- \rightarrow O + H_2$	4.00e-08	-0.50	0.00	8	*Herbst*
787	$H_2O^+ + e^- \rightarrow OH + H$	8.80e-08	-0.50	0.00	8	*Herbst*
788	$H_3O^+ + e^- \rightarrow O + H_2 + H$	1.70e-08	-0.83	0.00	8	*Herbst*
789	$H_3O^+ + e^- \rightarrow OH + H + H$	2.90e-07	-0.83	0.00	8	*Herbst*
790	$H_3O^+ + e^- \rightarrow OH + H_2$	4.70e-08	-0.83	0.00	8	*Herbst*
791	$H_3O^+ + e^- \rightarrow H_2O + H$	7.70e-08	-0.83	0.00	8	*Herbst*
792	$CO^+ + e^- \rightarrow O + C$	1.80e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*
793	$HCO^+ + e^- \rightarrow CO + H$	2.00e-07	-0.75	0.00	8	*Herbst*
794	$HOC^+ + e^- \rightarrow CO + H$	2.00e-07	-0.75	0.00	8	*Herbst*
795	$H_2CO^+ + e^- \rightarrow CO + H + H$	5.00e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*
796	$H_2CO^+ + e^- \rightarrow HCO + H$	1.00e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*
797	$H_2CO^+ + e^- \rightarrow H_2CO$	1.10e-10	-0.70	0.00	8	*Herbst*
798	$H_3CO^+ + e^- \rightarrow CO + H + H_2$	2.00e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*
799	$H_3CO^+ + e^- \rightarrow HCO + H + H$	2.00e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*
800	$H_3CO^+ + e^- \rightarrow H_2CO + H$	2.00e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*
801	$CH_4O^+ + e^- \rightarrow CH_3 + OH$	3.00e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*
802	$CH_4O^+ + e^- \rightarrow H_2CO + H_2$	3.00e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*
803	$CH_5O^+ + e^- \rightarrow CH_4O + H$	1.50e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*
804	$CH_5O^+ + e^- \rightarrow H_2CO + H_2 + H$	1.50e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*

805	$O_2^+ + e^- \rightarrow O + O$	2.00e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*
806	$S^+ + e^- \rightarrow S + h\nu$	3.90e-12	-0.63	0.00	8	*Herbst*
807	$HS^+ + e^- \rightarrow S + H$	2.00e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*
808	$H_2S^+ + e^- \rightarrow HS + H$	1.50e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*
809	$H_2S^+ + e^- \rightarrow S + H + H$	1.50e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*
810	$H_2S^+ + e^- \rightarrow H_2S + h\nu$	1.10e-10	-0.70	0.00	8	*Herbst*
811	$H_3S^+ + e^- \rightarrow H_2S + H$	3.00e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*
812	$H_3S^+ + e^- \rightarrow HS + H + H$	1.00e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*
813	$CS^+ + e^- \rightarrow S + C$	2.00e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*
814	$HCS^+ + e^- \rightarrow CS + H$	5.00e-08	-0.75	0.00	8	*Herbst*
815	$H_2CS^+ + e^- \rightarrow H_2CS + h\nu$	1.10e-10	-0.70	0.00	8	*Herbst*
816	$H_2CS^+ + e^- \rightarrow CS + H + H$	3.00e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*
817	$H_2CS^+ + e^- \rightarrow HCS + H$	3.00e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*
818	$H_3CS^+ + e^- \rightarrow CS + H_2 + H$	3.00e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*
819	$H_3CS^+ + e^- \rightarrow H_2CS + H$	3.00e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*
820	$SO^+ + e^- \rightarrow S + O$	2.00e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*
821	$HSO^+ + e^- \rightarrow SO + H$	2.00e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*
822	$OCS^+ + e^- \rightarrow CO + S$	3.00e-07	0.00	0.00	8	*Herbst*
823	$OCS^+ + e^- \rightarrow CS + O$	1.50e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*
824	$HOCS^+ + e^- \rightarrow CS + OH$	2.00e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*
825	$HOCS^+ + e^- \rightarrow OCS + H$	2.00e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*
826	$SO_2^+ + e^- \rightarrow SO + O$	1.00e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*
827	$HSO_2^+ + e^- \rightarrow SO + O + H$	1.00e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*
828	$HSO_2^+ + e^- \rightarrow SO + OH$	1.00e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*
829	$HSO_2^+ + e^- \rightarrow SO_2 + H$	2.00e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*
830	$S_2+ + e^- \rightarrow S + S$	2.00e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*
831	$HS_2+ + e^- \rightarrow S_2 + H$	1.50e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*
832	$HS_2+ + e^- \rightarrow HS + S$	1.50e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*
833	$H_2S_2+ + e^- \rightarrow HS_2 + H$	1.50e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*
834	$H_2S_2+ + e^- \rightarrow HS + HS$	1.50e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*
835	$H_3S_2+ + e^- \rightarrow HS_2 + H_2$	1.50e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*
836	$H_3S_2+ + e^- \rightarrow H_2S_2 + H$	1.50e-07	-0.50	0.00	8	*Herbst*
837	$CH + O \rightarrow HCO^+ + e^-$	2.00e-11	0.44	0.00	9	*Herbst*
838	$H \rightarrow JH$	1.00e+00	0.00	350.00	10	**
839	$H_2 \rightarrow JH_2$	2.01e+00	0.00	450.00	10	**
840	$He \rightarrow JHe$	4.00e+00	0.00	100.00	10	**
841	$C \rightarrow JC$	1.20e+01	0.00	800.00	10	**
842	$CH \rightarrow JCH$	1.30e+01	0.00	654.00	10	**
843	$CH_2 \rightarrow JCH_2$	1.40e+01	0.00	956.00	10	**
844	$CH_3 \rightarrow JCH_3$	1.50e+01	0.00	1160.00	10	**
845	$CH_4 \rightarrow JCH_4$	1.60e+01	0.00	1360.00	10	**
846	$C_2 \rightarrow JC_2$	2.40e+01	0.00	1210.00	10	**
847	$C_2H \rightarrow JC_2H$	2.50e+01	0.00	1460.00	10	**
848	$C_2H_2 \rightarrow JC_2H_2$	2.60e+01	0.00	1610.00	10	**

849	$O \rightarrow JO$	1.59e+01	0.00	800.00	10	**
850	$OH \rightarrow JOH$	1.70e+01	0.00	1260.00	10	**
851	$H_2O \rightarrow JH_2O$	1.80e+01	0.00	1860.00	10	**
852	$CO \rightarrow JCO$	2.80e+01	0.00	1210.00	10	**
853	$HCO \rightarrow JHCO$	2.90e+01	0.00	1510.00	10	**
854	$H_2CO \rightarrow JH_2CO$	3.00e+01	0.00	1760.00	10	**
855	$CH_4O \rightarrow JCH_4O$	3.20e+01	0.00	2060.00	10	**
856	$O_2 \rightarrow JO_2$	3.19e+01	0.00	1210.00	10	**
857	$S \rightarrow JS$	3.20e+01	0.00	1100.00	10	**
858	$HS \rightarrow JHS$	3.30e+01	0.00	1500.00	10	**
859	$H_2S \rightarrow JH_2S$	3.41e+01	0.00	1800.00	10	**
860	$CS \rightarrow JCS$	4.41e+01	0.00	2000.00	10	**
861	$HCS \rightarrow JHCS$	4.51e+01	0.00	2000.00	10	**
862	$H_2CS \rightarrow JH_2CS$	4.61e+01	0.00	2250.00	10	**
863	$SO \rightarrow JSO$	4.80e+01	0.00	2000.00	10	**
864	$OCS \rightarrow JOCS$	6.01e+01	0.00	3000.00	10	**
865	$SO_2 \rightarrow JSO_2$	6.40e+01	0.00	3070.00	10	**
866	$S_2 \rightarrow JS_2$	6.41e+01	0.00	2000.00	10	**
867	$HS_2 \rightarrow JHS_2$	6.51e+01	0.00	2300.00	10	**
868	$H_2S_2 \rightarrow JH_2S_2$	6.61e+01	0.00	2600.00	10	**
869	$JH \rightarrow H$	1.00e+00	0.00	350.00	11	**
870	$JH_2 \rightarrow H_2$	2.01e+00	0.00	450.00	11	**
871	$JHe \rightarrow He$	4.00e+00	0.00	100.00	11	**
872	$JC \rightarrow C$	1.20e+01	0.00	800.00	11	**
873	$JCH \rightarrow CH$	1.30e+01	0.00	654.00	11	**
874	$JCH_2 \rightarrow CH_2$	1.40e+01	0.00	956.00	11	**
875	$JCH_3 \rightarrow CH_3$	1.50e+01	0.00	1160.00	11	**
876	$JCH_4 \rightarrow CH_4$	1.60e+01	0.00	1360.00	11	**
877	$JC_2 \rightarrow C_2$	2.40e+01	0.00	1210.00	11	**
878	$JC_2H \rightarrow C_2H$	2.50e+01	0.00	1460.00	11	**
879	$JC_2H_2 \rightarrow C_2H_2$	2.60e+01	0.00	1610.00	11	**
880	$JO \rightarrow O$	1.59e+01	0.00	800.00	11	**
881	$JOH \rightarrow OH$	1.70e+01	0.00	1260.00	11	**
882	$JH_2O \rightarrow H_2O$	1.80e+01	0.00	1860.00	11	**
883	$JCO \rightarrow CO$	2.80e+01	0.00	1210.00	11	**
884	$JHCO \rightarrow HCO$	2.90e+01	0.00	1510.00	11	**
885	$JH_2CO \rightarrow H_2CO$	3.00e+01	0.00	1760.00	11	**
886	$JCH_4O \rightarrow CH_4O$	3.20e+01	0.00	2060.00	11	**
887	$JO_2 \rightarrow O_2$	3.19e+01	0.00	1210.00	11	**
888	$JS \rightarrow S$	3.20e+01	0.00	1100.00	11	**
889	$JHS \rightarrow HS$	3.30e+01	0.00	1500.00	11	**
890	$JH_2S \rightarrow H_2S$	3.41e+01	0.00	1800.00	11	**
891	$JCS \rightarrow CS$	4.41e+01	0.00	2000.00	11	**
892	$JHCS \rightarrow HCS$	4.51e+01	0.00	2000.00	11	**

893	$JH_2CS \rightarrow H_2CS$	4.61e+01	0.00	2250.00	11	**
894	$JSO \rightarrow SO$	4.80e+01	0.00	2000.00	11	**
895	$JOCS \rightarrow OCS$	6.01e+01	0.00	3000.00	11	**
896	$JSO_2 \rightarrow SO_2$	6.40e+01	0.00	3070.00	11	**
897	$JS_2 \rightarrow S_2$	6.41e+01	0.00	2000.00	11	**
898	$JHS_2 \rightarrow HS_2$	6.51e+01	0.00	2300.00	11	**
899	$JH_2S_2 \rightarrow H_2S_2$	6.61e+01	0.00	2600.00	11	**
900	$JH + \gamma \rightarrow H$	1.00e+00	0.00	350.00	12	**
901	$JH_2 + \gamma \rightarrow H_2$	2.01e+00	0.00	450.00	12	**
902	$JHe + \gamma \rightarrow He$	4.00e+00	0.00	100.00	12	**
903	$JC + \gamma \rightarrow C$	1.20e+01	0.00	800.00	12	**
904	$JCH + \gamma \rightarrow CH$	1.30e+01	0.00	654.00	12	**
905	$JCH_2 + \gamma \rightarrow CH_2$	1.40e+01	0.00	956.00	12	**
906	$JCH_3 + \gamma \rightarrow CH_3$	1.50e+01	0.00	1160.00	12	**
907	$JCH_4 + \gamma \rightarrow CH_4$	1.60e+01	0.00	1360.00	12	**
908	$JC_2 + \gamma \rightarrow C_2$	2.40e+01	0.00	1210.00	12	**
909	$JC_2H + \gamma \rightarrow C_2H$	2.50e+01	0.00	1460.00	12	**
910	$JC_2H_2 + \gamma \rightarrow C_2H_2$	2.60e+01	0.00	1610.00	12	**
911	$JO + \gamma \rightarrow O$	1.59e+01	0.00	800.00	12	**
912	$JOH + \gamma \rightarrow OH$	1.70e+01	0.00	1260.00	12	**
913	$JH_2O + \gamma \rightarrow H_2O$	1.80e+01	0.00	1860.00	12	**
914	$JCO + \gamma \rightarrow CO$	2.80e+01	0.00	1210.00	12	**
915	$JHCO + \gamma \rightarrow HCO$	2.90e+01	0.00	1510.00	12	**
916	$JH_2CO + \gamma \rightarrow H_2CO$	3.00e+01	0.00	1760.00	12	**
917	$JCH_4O + \gamma \rightarrow CH_4O$	3.20e+01	0.00	2060.00	12	**
918	$JO_2 + \gamma \rightarrow O_2$	3.19e+01	0.00	1210.00	12	**
919	$JS + \gamma \rightarrow S$	3.20e+01	0.00	1100.00	12	**
920	$JHS + \gamma \rightarrow HS$	3.30e+01	0.00	1500.00	12	**
921	$JH_2S + \gamma \rightarrow H_2S$	3.41e+01	0.00	1800.00	12	**
922	$JCS + \gamma \rightarrow CS$	4.41e+01	0.00	2000.00	12	**
923	$JHCS + \gamma \rightarrow HCS$	4.51e+01	0.00	2000.00	12	**
924	$JH_2CS + \gamma \rightarrow H_2CS$	4.61e+01	0.00	2250.00	12	**
925	$JSO + \gamma \rightarrow SO$	4.80e+01	0.00	2000.00	12	**
926	$JOCS + \gamma \rightarrow OCS$	6.01e+01	0.00	3000.00	12	**
927	$JSO_2 + \gamma \rightarrow SO_2$	6.40e+01	0.00	3070.00	12	**
928	$JS_2 + \gamma \rightarrow S_2$	6.41e+01	0.00	2000.00	12	**
929	$JHS_2 + \gamma \rightarrow HS_2$	6.51e+01	0.00	2300.00	12	**
930	$JH_2S_2 + \gamma \rightarrow H_2S_2$	6.61e+01	0.00	2600.00	12	**

Annexe G

Figures des réactions chimiques importantes

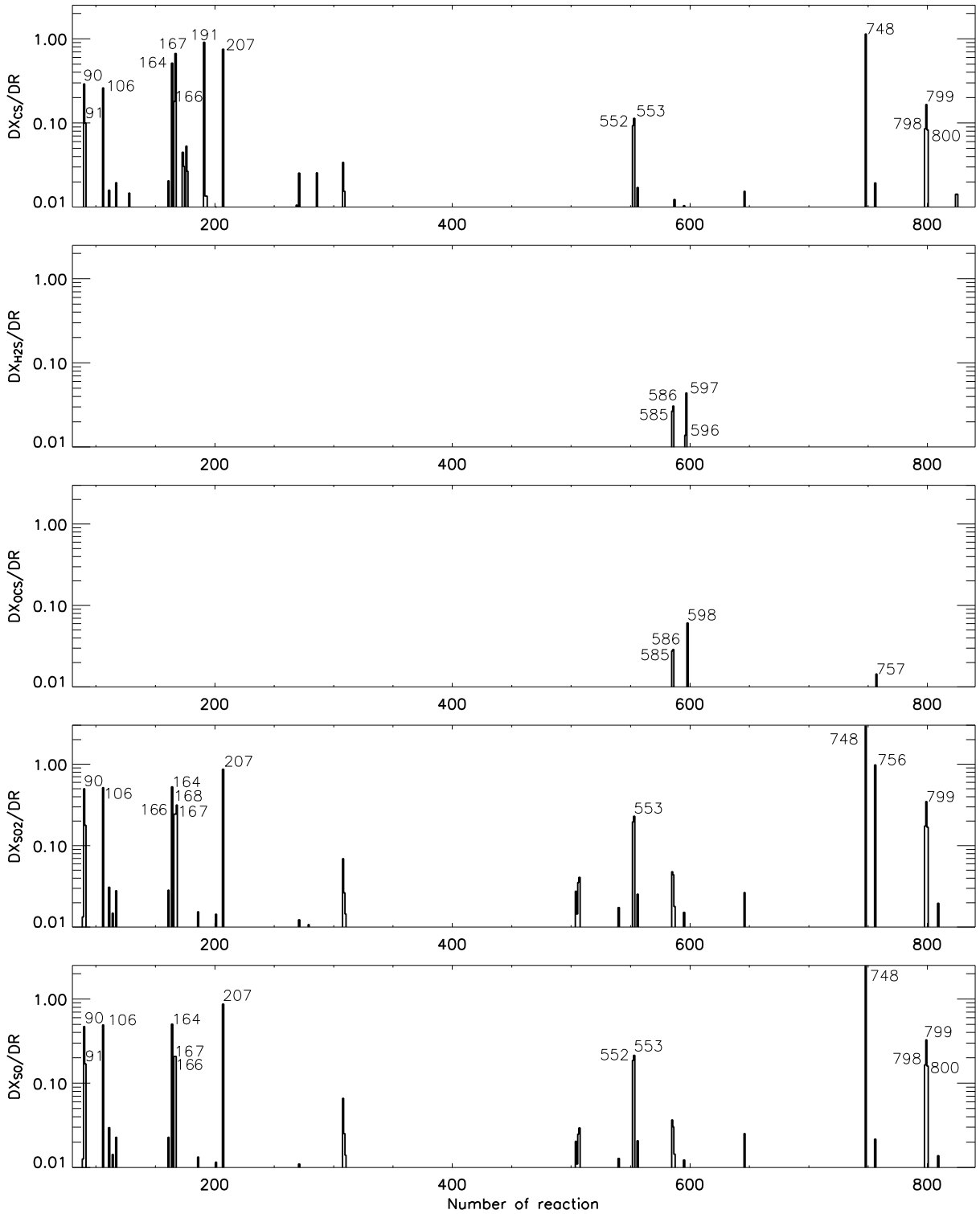

FIG. 79: *Représentation graphique des réactions sensibles obtenues selon la méthode expliquée la section 3.3 pour la formation et la destruction de SO, SO_2, OCS, H_2S et CS. Les variations des abondances ont été calculées pour la composition initiale en phase gazeuse B, une température de 100 K, une densité de 10^7 cm^{-3}, un temps d'intégration de 10^3 ans et le modèle 1.*

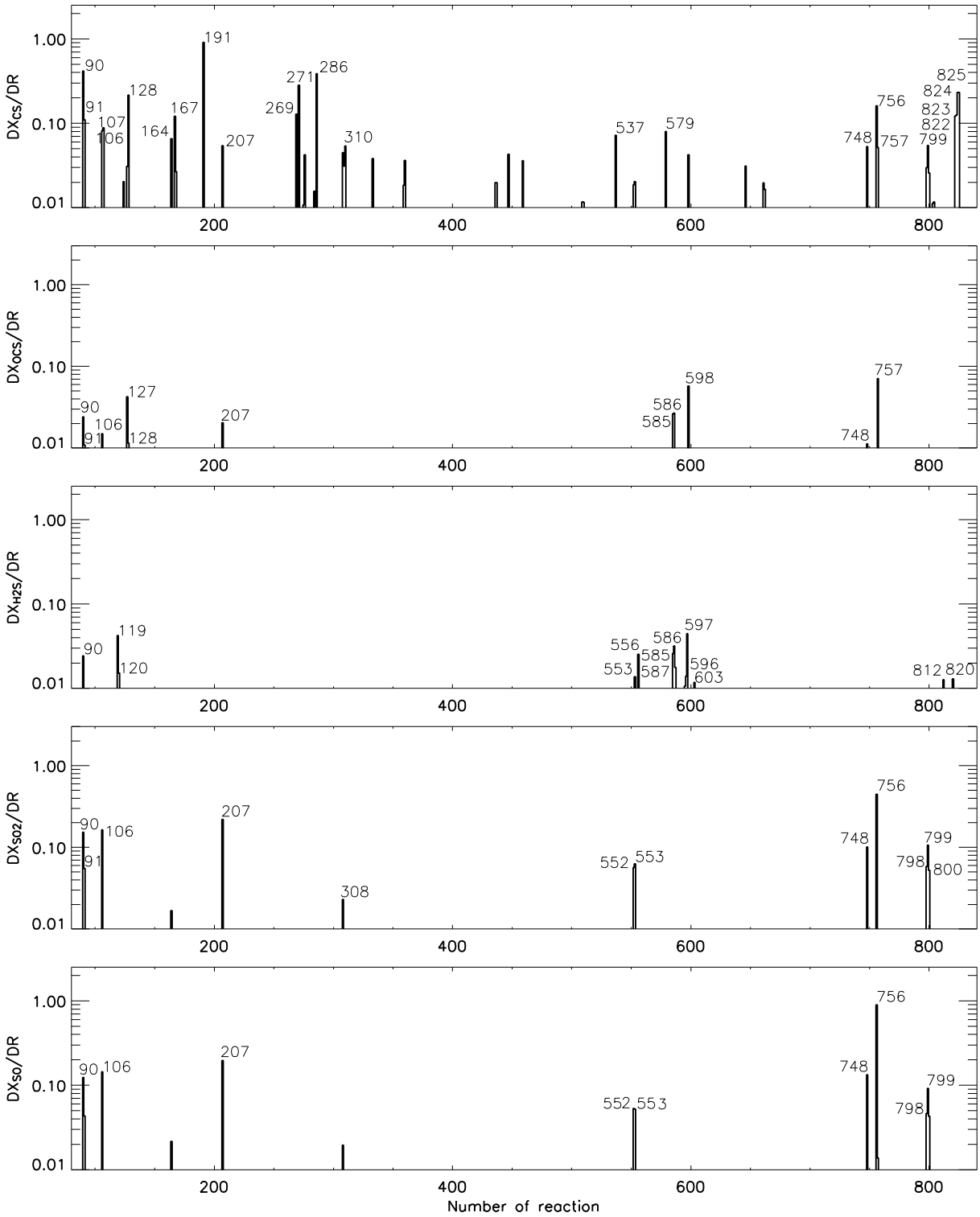

FIG. 80: *Représentation graphique des réactions sensibles obtenues selon la méthode expliquée la section 3.3 pour la formation et la destruction de SO, SO_2, OCS, H_2S et CS. Les variations des abondances ont été calculées pour la composition initiale en phase gazeuse B, une température de 100 K, une densité de* 10^7 *cm^{-3}, un temps d'intégration de* 10^4 *ans et le modèle 1.*

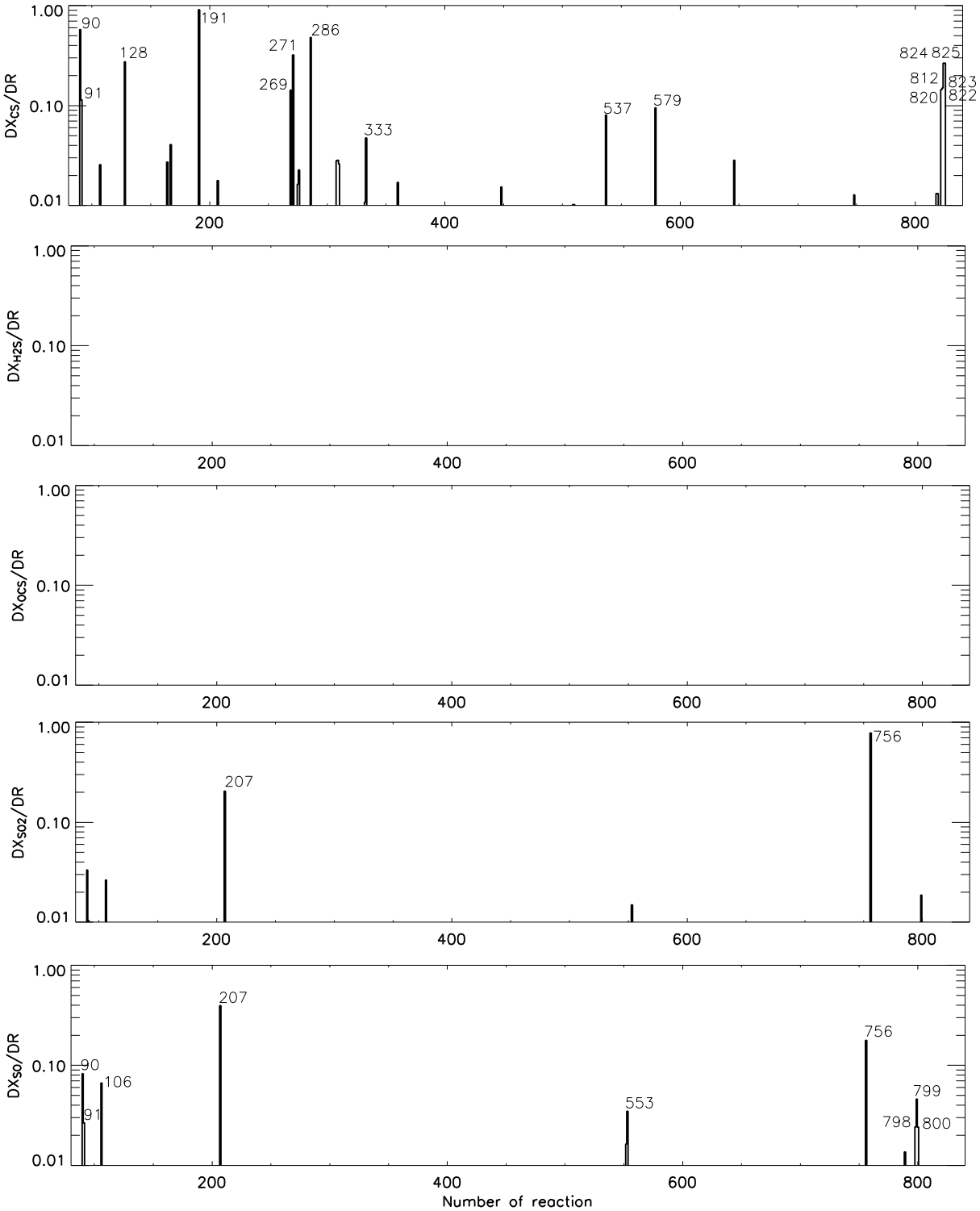

FIG. 81: *Représentation graphique des réactions sensibles obtenues selon la méthode expliquée la section 3.3 pour la formation et la destruction de SO, SO_2, OCS, H_2S et CS. Les variations des abondances ont été calculées pour la composition initiale en phase gazeuse A, une température de 100 K, une densité de* 10^7 *cm*$^{-3}$*, un temps d'intégration de* 10^3 *ans et le modèle 1.*

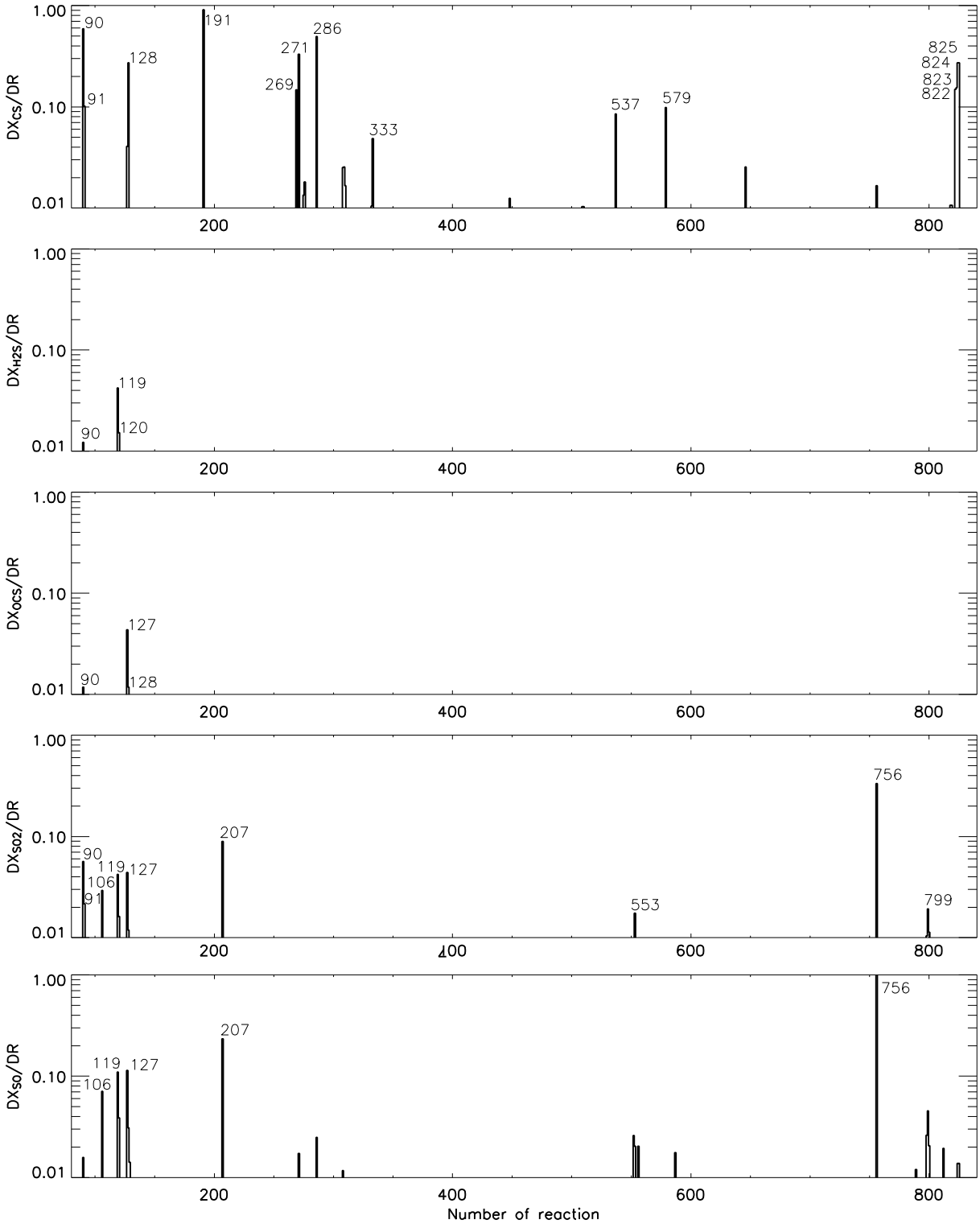

FIG. 82: *Représentation graphique des réactions sensibles obtenues selon la méthode expliquée la section 3.3 pour la formation et la destruction de SO, SO_2, OCS, H_2S et CS. Les variations des abondances ont été calculées pour la composition initiale en phase gazeuse A, une température de 100 K, une densité de* 10^7 *cm^{-3}, un temps d'intégration de* 10^4 *ans et le modèle 1.*

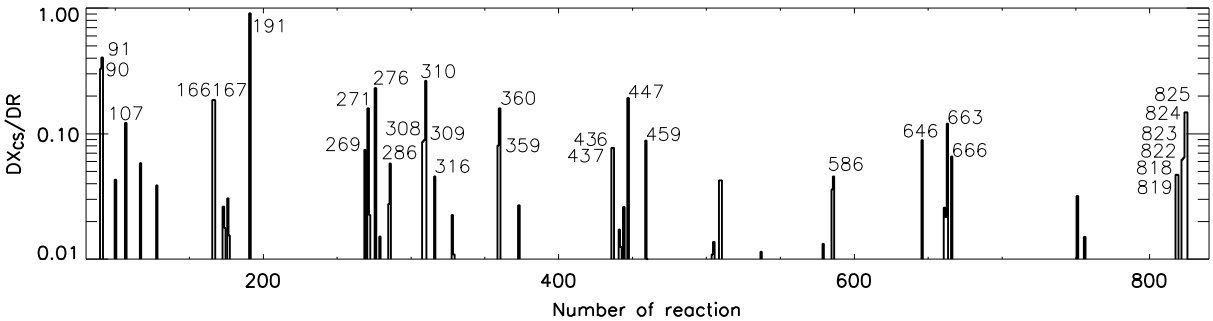

FIG. 83: *Représentation graphique des réactions sensibles obtenues selon la méthode expliquée la section 3.3 pour la formation et la destruction de CS. Les variations des abondances ont été calculées pour la composition initiale en phase gazeuse C, une température de 100 K, une densité de* 10^7 *cm*$^{-3}$*, un temps d'intégration de* 10^2 *ans et le modèle 3.*

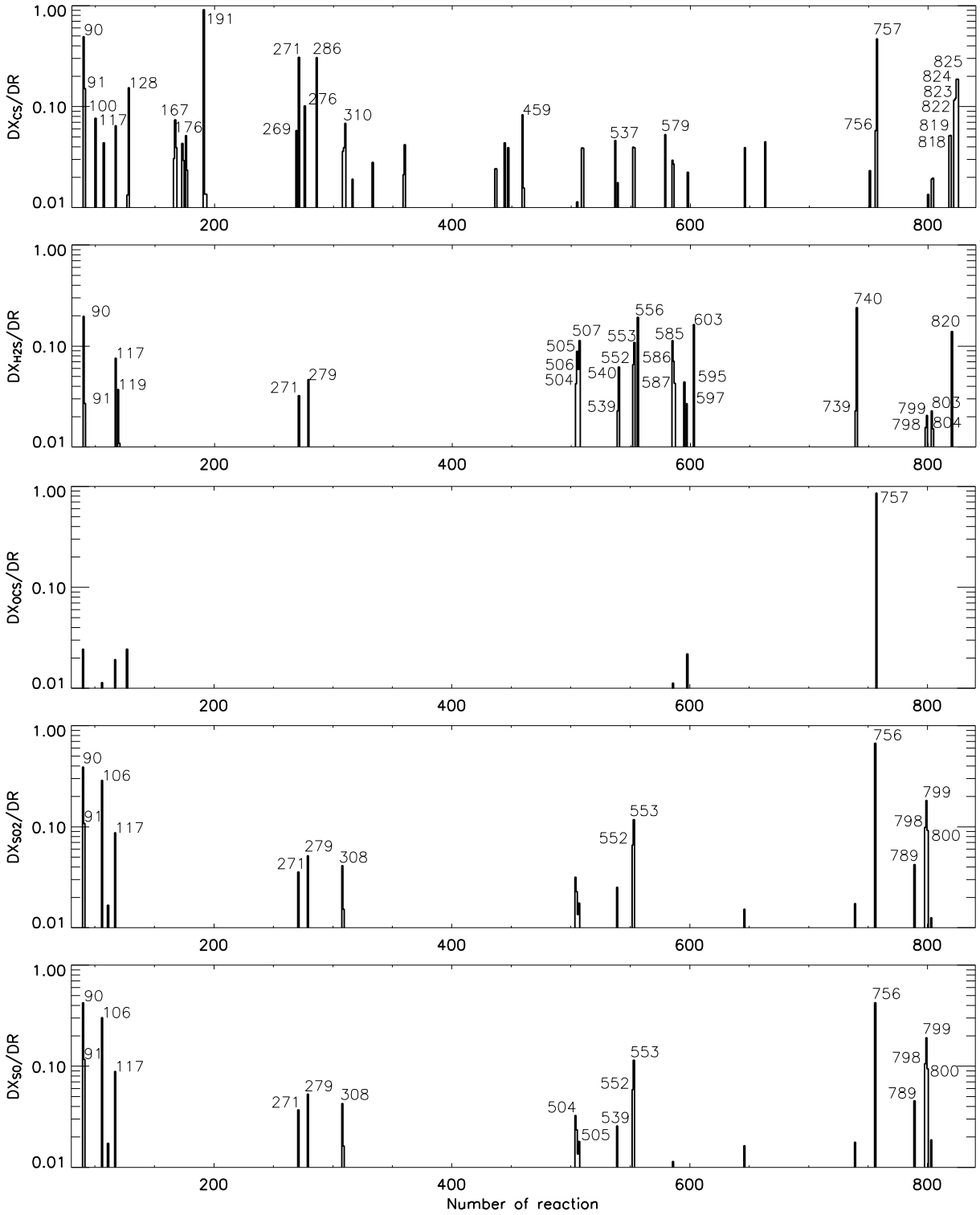

FIG. 84: *Représentation graphique des réactions sensibles obtenues selon la méthode expliquée la section 3.3 pour la formation et la destruction de SO, SO_2, OCS, H_2S et CS et une perturbation d'amplitude 0.1. Les variations des abondances ont été calculées pour la composition initiale en phase gazeuse A, une température de 100 K, une densité de* 10^7 *cm*$^{-3}$*, un temps d'intégration de* 10^4 *ans et le modèle 2.*

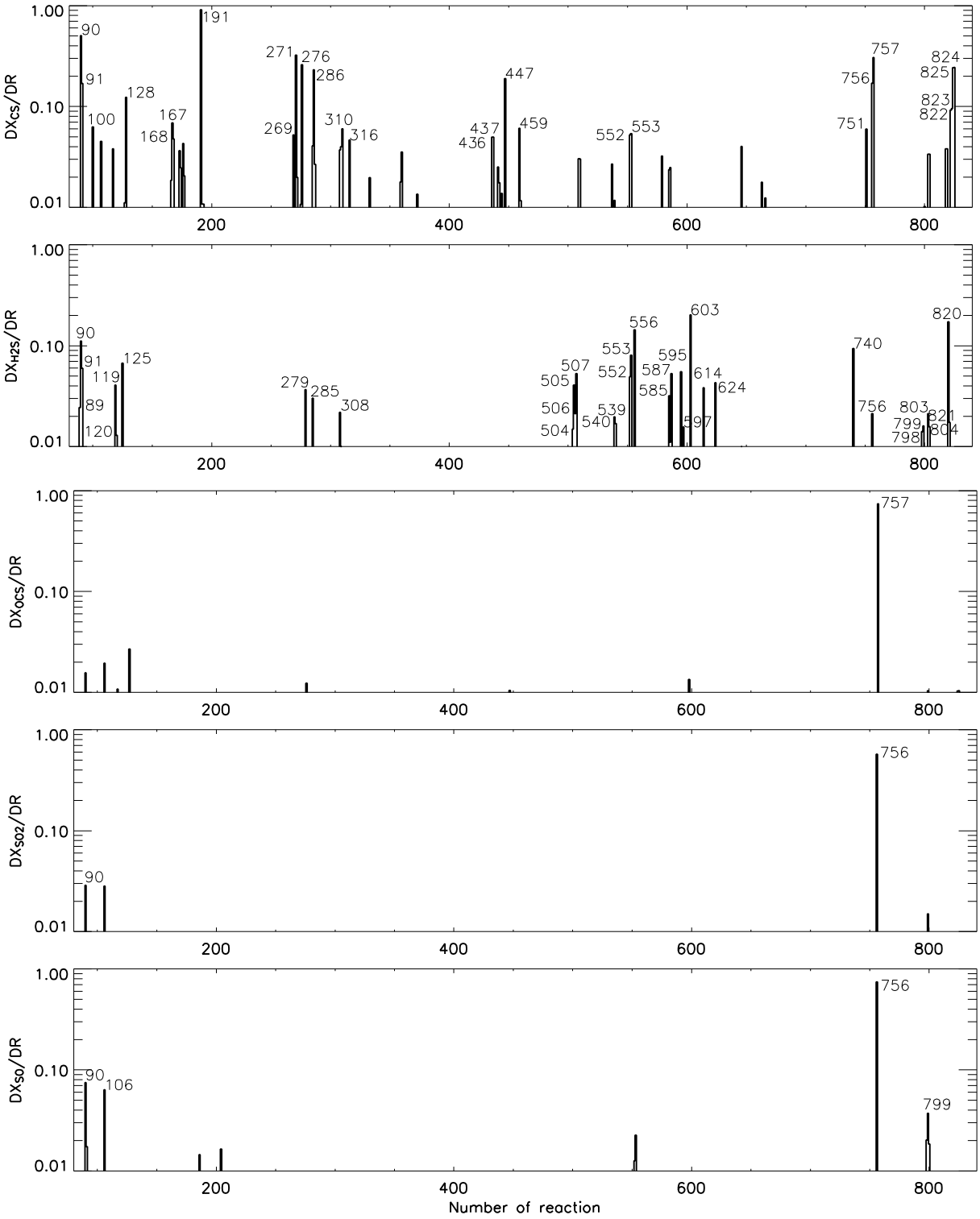

FIG. 85: *Représentation graphique des réactions sensibles obtenues selon la méthode expliquée la section 3.3 pour la formation et la destruction de SO, SO_2, OCS, H_2S et CS et une perturbation d'amplitude 0.1. Les variations des abondances ont été calculées pour la composition initiale en phase gazeuse A, une température de 100 K, une densité de 10^7 cm^{-3}, un temps d'intégration de 10^4 ans et le modèle 3.*

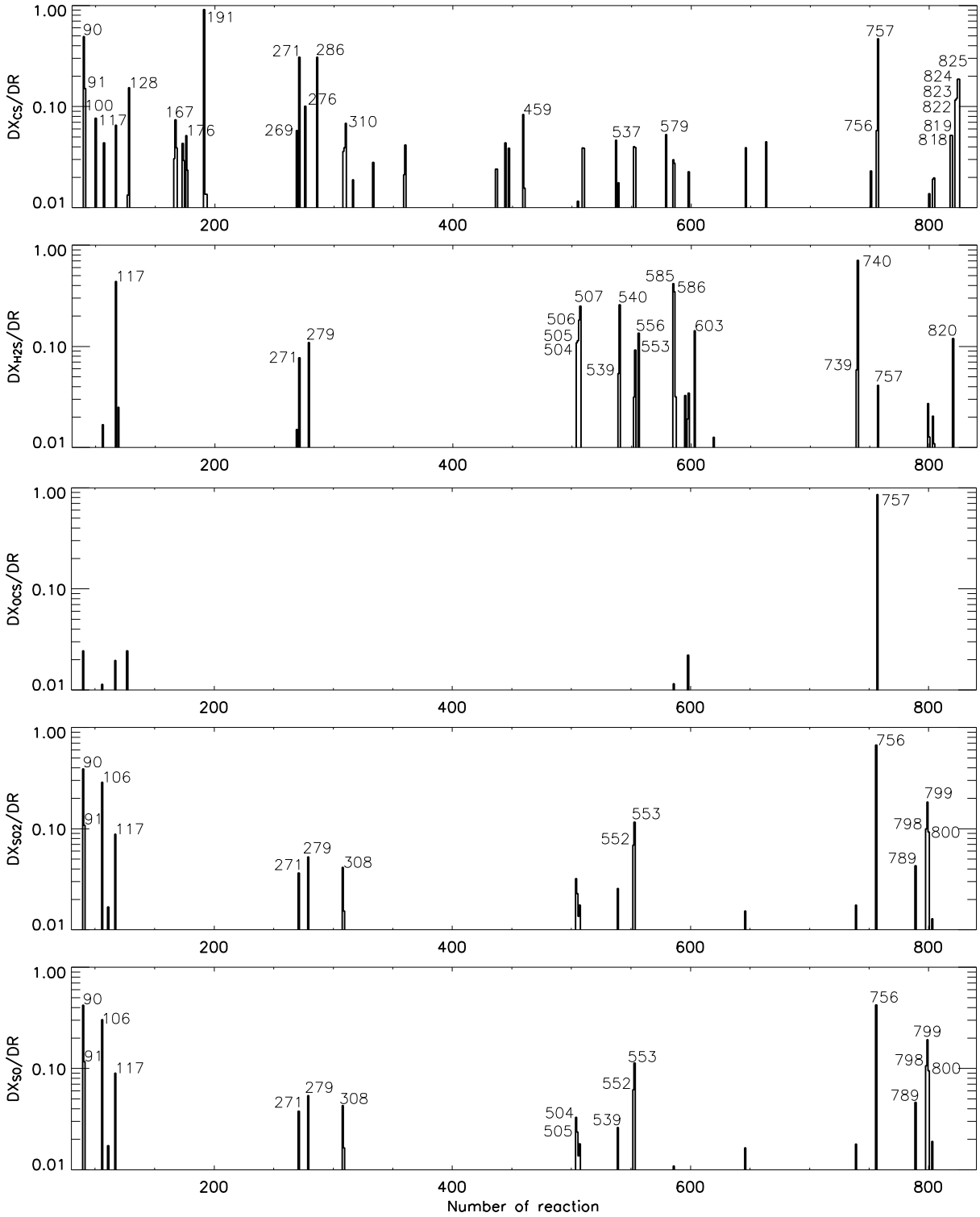

FIG. 86: *Représentation graphique des réactions sensibles obtenues selon la méthode expliquée la section 3.3 pour la formation et la destruction de SO, SO_2, OCS, H_2S et CS et une perturbation d'amplitude 0.1. Les variations des abondances ont été calculées pour la composition initiale en phase gazeuse A, une température de 100 K, une densité de* 10^7 *cm^{-3}, un temps d'intégration de* 10^4 *ans et le modèle 4.*

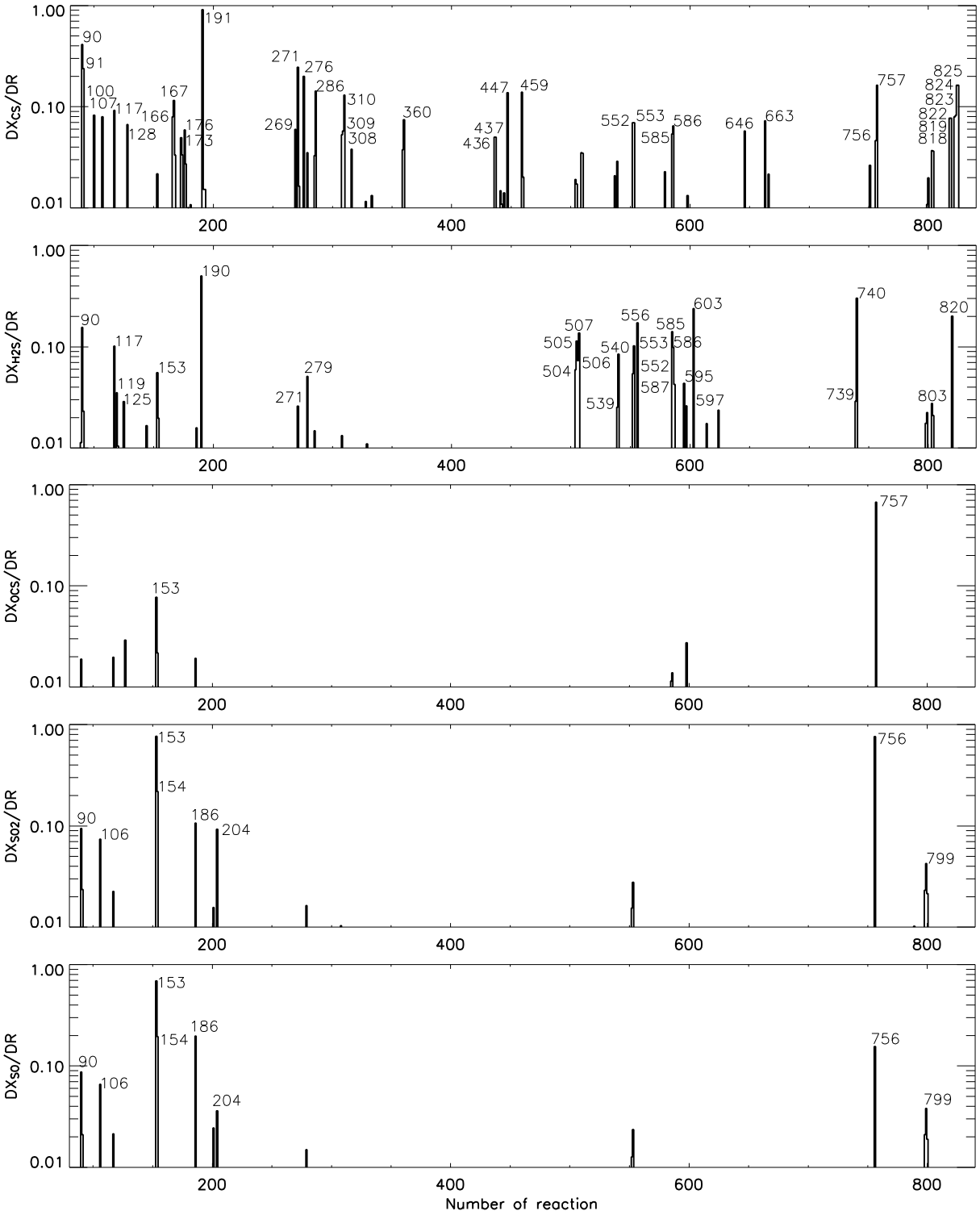

FIG. 87: *Représentation graphique des réactions sensibles obtenues selon la méthode expliquée la section 3.3 pour la formation et la destruction de SO, SO_2, OCS, H_2S et CS et une perturbation d'amplitude 0.1. Les variations des abondances ont été calculées pour la composition initiale en phase gazeuse A, une température de 200 K, une densité de 10^7 cm^{-3}, un temps d'intégration de 10^4 ans et le modèle 2.*

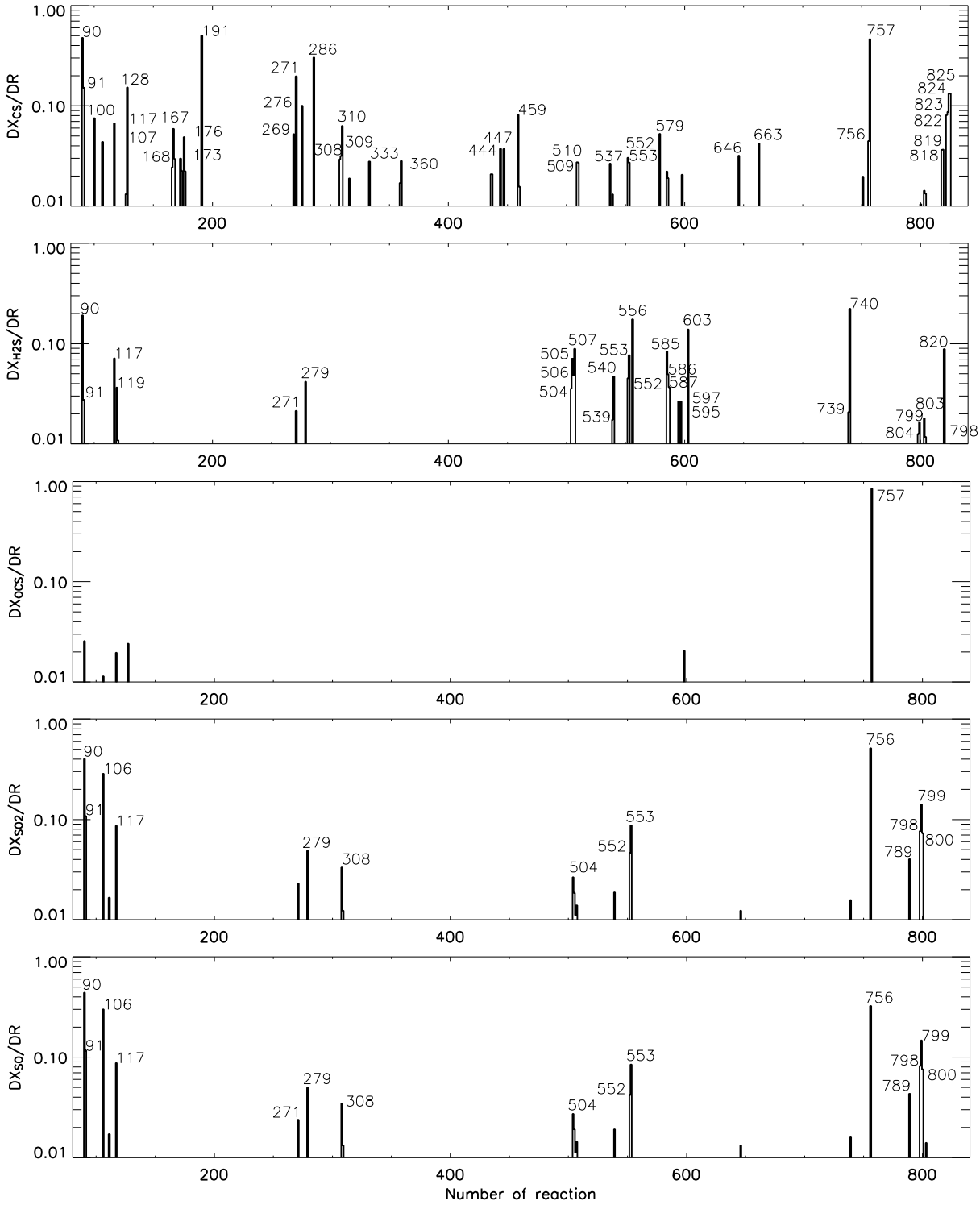

FIG. 88: *Représentation graphique des réactions sensibles obtenues selon la méthode expliquée la section 3.3 pour la formation et la destruction de SO, SO_2, OCS, H_2S et CS et une perturbation d'amplitude 1. Les variations des abondances ont été calculées pour la composition initiale en phase gazeuse A, une température de 100 K, une densité de* 10^7 *cm^{-3}, un temps d'intégration de* 10^4 *ans et le modèle 2.*

Bibliographie

Adams, F. C. et Shu, F. H., Infrared emission from protostars: 1985, *ApJ* **296**, 655

Andre, P., Ward-Thompson, D., et Barsony, M., Submillimeter continuum observations of Rho Ophiuchi A - The candidate protostar VLA 1623 and prestellar clumps: 1993, *ApJ* **406**, 122

Bachiller, R., Codella, C., Colomer, F., Liechti, S., et Walmsley, C. M., Methanol in protostellar outflows. Single-dish and interferometric maps of NGC 1333/IRAS 2: 1998, *A&A* **335**, 266

Bachiller, R., Pérez Gutiérrez, M., Kumar, M. S. N., et Tafalla, M., Chemically active outflow L 1157: 2001, *A&A* **372**, 899

Bachiller, R. et Perez Gutierrez, M., Shock Chemistry in the Young Bipolar Outflow L1157: 1997, *ApJ Lett.* **487**, L93

Baluteau, J.-P., Cox, P., Cernicharo, J., Pequignot, D., Caux, E., Lim, T., Swinyard, B., White, G., Kessler, M., Prusti, T., Barlow, M., Clegg, P. E., Emery, R. J., Furniss, I., Glencross, W., Gry, C., Joubert, M., Liseau, R., Nisini, B., Saraceno, P., Serra, G., Armand, C., Burgdorf, M., Digiorgio, A., Molinari, S., Price, M., Texier, D., Sidher, S., et Trams, N., Detection of [O I] 63μm in absorption toward SGR B2.: 1997, *A&A* **322**, L33

Bergin, E. A. et Langer, W. D., Chemical Evolution in Preprotostellar and Protostellar Cores: 1997, *ApJ* **486**, 316

Blake, G. A.: 1996, High angular resolution observations of the gas phase composition of young stellar objects, dans *IAU Symp. 178: Molecules in Astrophysics: Probes & Processes*, pp 31–+

Blake, G. A., van Dishoek, E. F., Jansen, D. J., Groesbeck, T. D., et Mundy, L. G., Molecular abundances and low-mass star formation. 1: Si- and S-bearing species toward IRAS 16293-2422: 1994, *ApJ* **428**, 680

Boogert, A. C. A., Helmich, F. P., van Dishoeck, E. F., Schutte, W. A., Tielens, A. G. G. M., et Whittet, D. C. B., The gas/solid methane abundance ratio toward deeply embedded protostars: 1998, *A&A* **336**, 352

Boogert, A. C. A., Tielens, A. G. G. M., Ceccarelli, C., Boonman, A. M. S., van Dishoeck, E. F., Keane, J. V., Whittet, D. C. B., et de Graauw, T., Infrared observations of hot gas and cold

ice toward the low mass protostar Elias 29: 2000, *A&A* **360**, 683

Bottinelli, S. e. a., : 2004, *A&A* submitted

Buckle, J. V. et Fuller, G. A., Sulphur-bearing species as chemical clocks for low mass protostars?: 2003, *A&A* **399**, 567

Cardelli, J. A., Meyer, D. M., Jura, M., et Savage, B. D., The Abundance of Interstellar Carbon: 1996, *ApJ* **467**, 334

Caselli, P., Hartquist, T. W., et Havnes, O., Grain-grain collisions and sputtering in oblique C-type shocks.: 1997, *A&A* **322**, 296

Caselli, P., Walmsley, C. M., Terzieva, R., et Herbst, E., The Ionization Fraction in Dense Cloud Cores: 1998, *ApJ* **499**, 234

Castets, A., Ceccarelli, C., Loinard, L., Caux, E., et Lefloch, B., Multiple shocks around the low-luminosity protostar IRAS 16293-2422: 2001, *A&A* **375**, 40

Caux, E., Ceccarelli, C., Castets, A., Vastel, C., Liseau, R., Molinari, S., Nisini, B., Saraceno, P., et White, G. J., Large atomic oxygen abundance towards the molecular cloud L1689N: 1999, *A&A* **347**, L1

Cazaux, S. et Tielens, A. G. G. M., Molecular Hydrogen Formation in the Interstellar Medium: 2002, *ApJ Lett.* **575**, L29

Cazaux, S., Tielens, A. G. G. M., Ceccarelli, C., Castets, A., Wakelam, V., Caux, E., Parise, B., et Teyssier, D., The Hot Core around the Low-mass Protostar IRAS 16293-2422: Scoundrels Rule!: 2003, *ApJ Lett.* **593**, L51

Ceccarelli, C., Millimeter and infrared observations of deuterated molecules: 2002, *Planet. Space Sci.* **50**, 1267

Ceccarelli, C., Baluteau, J.-P., Walmsley, M., Swinyard, B. M., Caux, E., Sidher, S. D., Cox, P., Gry, C., Kessler, M., et Prusti, T., ISO ammonia line absorption reveals a layer of hot gas veiling Sgr B2: 2002a, *A&A* **383**, 603

Ceccarelli, C., Castets, A., Caux, E., Hollenbach, D., Loinard, L., Molinari, S., et Tielens, A. G. G. M., The structure of the collapsing envelope around the low-mass protostar IRAS 16293-2422: 2000a, *A&A* **355**, 1129

Ceccarelli, C., Caux, E., Tielens, A. G. G. M., Kemper, F., Waters, L. B. F. M., et Phillips, T., Discovery of calcite in the solar type protostar NGC 1333-IRAS 4: 2002b, *A&A* **395**, L29

Ceccarelli, C., Caux, E., Wolfire, M., Rudolph, A., Nisini, B., Saraceno, P., et White, G. J., ISO Detection of CO^+ toward the protostar IRAS 16293-2422: 1998, *A&A* **331**, L17

Ceccarelli, C., Hollenbach, D. J., et Tielens, A. G. G. M., Far-Infrared Line Emission from Collapsing Protostellar Envelopes: 1996, *ApJ* **471**, 400

Ceccarelli, C., Loinard, L., Castets, A., Tielens, A. G. G. M., et Caux, E., The hot core of the solar-type protostar IRAS 16293-2422: H_2CO emission: 2000b, *A&A* **357**, L9

Ceccarelli, C., Loinard, L., Castets, A., Tielens, A. G. G. M., Caux, E., Lefloch, B., et Vastel, C., Extended D_2CO emission: The smoking gun of grain surface-chemistry: 2001, *A&A* **372**, 998

Ceccarelli, C., Maret, S., Tielens, A. G. G. M., Castets, A., et Caux, E., Theoretical H_2CO emission from protostellar envelopes: 2003, *A&A* **410**, 587

Cernis, K., Interstellar extinction in the vicinity of the reflection nebula NGC 1333 in Perseus: 1990, *Ap&SS* **166**, 315

Charnley, S. B., Sulfuretted Molecules in Hot Cores: 1997, *ApJ* **481**, 396

Charnley, S. B., Rodgers, S. D., et Ehrenfreund, P., Gas-grain chemical models of star-forming molecular clouds as constrained by ISO and SWAS observations: 2001, *A&A* **378**, 1024

Charnley, S. B., Tielens, A. G. G. M., et Millar, T. J., On the molecular complexity of the hot cores in Orion A - Grain surface chemistry as "The last refuge of the scoundrel": 1992, *ApJ Lett.* **399**, L71

Chernin, L. et Masson, C., Observations of SO and SiO in the outflow from NGC 2071: 1993, *ApJ Lett.* **403**, L21

Chernin, L. M., Masson, C. R., et Fuller, G. A., High-velocity sulfur monoxide emission from protostellar outflows: 1994, *ApJ* **436**, 741

Chiar, J. E., Adamson, A. J., et Whittet, D. C. B., Three Micron Hydrocarbon and Methanol Absorption in Taurus: 1996, *ApJ* **472**, 665

Chin, Y.-N., Henkel, C., Whiteoak, J. B., Langer, N., et Churchwell, E. B., Interstellar sulfur isotopes and stellar oxygen burning.: 1996, *A&A* **305**, 960

Codella, C. et Bachiller, R., Molecular outflows in intermediate-mass star forming regions: the case of CB3: 1999, *A&A* **350**, 659

Dickens, J. E., Irvine, W. M., Snell, R. L., Bergin, E. A., Schloerb, F. P., Pratap, P., et Miralles, M. P., A Study of the Physics and Chemistry of L134N: 2000, *ApJ* **542**, 870

Doty, S. D., Schöier, F. L., et van Dishoeck, E. F., Physical-chemical modeling of the low-mass protostar IRAS 16293-2422: 2004, *A&A* **418**, 1021

Doty, S. D., van Dishoeck, E. F., van der Tak, F. F. S., et Boonman, A. M. S., Chemistry as a probe of the structures and evolution of massive star-forming regions: 2002, *A&A* **389**, 446

Draine, B. T., Interstellar Dust Grains: 2003, *ARA&A* **41**, 241

Draine, B. T. et Sutin, B., Collisional charging of interstellar grains: 1987, *ApJ* **320**, 803

Fukui, Y., Sugitani, K., Takaba, H., Iwata, T., Mizuno, A., Ogawa, H., et Kawabata, K., Discovery of seven bipolar outflows by an unbiased survey: 1986, *ApJ Lett.* **311**, L85

Garay, G., Mardones, D., Rodríguez, L. F., Caselli, P., et Bourke, T. L., Methanol and Silicon Monoxide Observations toward Bipolar Outflows Associated with Class 0 Objects: 2002, *ApJ* **567**, 980

Genzel, R. et Stutzki, J., The Orion Molecular Cloud and star-forming region: 1989, *ARA&A* **27**, 41

Gibb, E. L., Whittet, D. C. B., Schutte, W. A., Boogert, A. C. A., Chiar, J. E., Ehrenfreund, P., Gerakines, P. A., Keane, J. V., Tielens, A. G. G. M., van Dishoeck, E. F., et Kerkhof, O., An Inventory of Interstellar Ices toward the Embedded Protostar W33A: 2000, *ApJ* **536**, 347

Goldsmith, P. F., Li, D., Bergin, E. A., Melnick, G. J., Tolls, V., Howe, J. E., Snell, R. L., et Neufeld, D. A., Tentative Detection of Molecular Oxygen in the ρ Ophiuchi Cloud: 2002, *ApJ* **576**, 814

Goldsmith, P. F., Melnick, G. J., Bergin, E. A., Howe, J. E., Snell, R. L., Neufeld, D. A., Harwit, M., Ashby, M. L. N., Patten, B. M., Kleiner, S. C., Plume, R., Stauffer, J. R., Tolls, V., Wang, Z., Zhang, Y. F., Erickson, N. R., Koch, D. G., Schieder, R., Winnewisser, G., et Chin, G., O_2 in Interstellar Molecular Clouds: 2000, *ApJ Lett.* **539**, L123

Gould, R. J. et Salpeter, E. E., The Interstellar Abundance of the Hydrogen Molecule. I. Basic Processes.: 1963, *ApJ* **138**, 393

Green, S., Collisional excitation of formaldehyde in 'hot' interstellar molecular regions: 1991, *ApJS* **76**, 979

Green, S., Collisional excitation of interstellar sulfur monoxide: 1994, *ApJ* **434**, 188

Hartquist, T. W., Dalgarno, A., et Oppenheimer, M., Molecular diagnostics of interstellar shocks: 1980, *ApJ* **236**, 182

Hasegawa, T. I. et Herbst, E., New gas-grain chemical models of quiescent dense interstellar clouds - The effects of H_2 tunnelling reactions and cosmic ray induced desorption: 1993, *MNRAS* **261**, 83

Hasegawa, T. I., Herbst, E., et Leung, C. M., Models of gas-grain chemistry in dense interstellar clouds with complex organic molecules: 1992, *ApJS* **82**, 167

Hatchell, J., Thompson, M. A., Millar, T. J., et MacDonald, G. H., Sulphur chemistry and evolution in hot cores: 1998, *A&A* **338**, 713

Herbst, E., Millar, T. J., Wlodek, S., et Bohme, D. K., The chemistry of silicon in dense interstellar clouds: 1989, *A&A* **222**, 205

Hirahara, Y., Masuda, A., Kawaguchi, K., Ohishi, M., Ishikawa, S., Yamamoto, S., Takano, S., et Kaifu, N., The Spatial Distributions of SO and N_2H^+ in Taurus Molecular Cloud-1 (TMC-1): 1995, *PASJ* **47**, 845

Hirano, N., Mikami, H., Umemoto, T., Yamamoto, S., et Taniguchi, Y., SIO Emission in the Multilobe Outflow Associated with IRAS 16293-2422: 2001, *ApJ* **547**, 899

Hollenbach, D. J.: 1998, The physics of molecular shocks in YSO outflows, dans B. Reipurth et Bertout (eds.), *IAU symposium 182, Herbig-Haro flows and the birth of low mass stars*, p. 181

Irvine, W. M., Good, J. C., et Schloerb, F. P., Observations of SO_2 and HCS^+ in cold molecular clouds: 1983, *A&A* **127**, L10

Jensen, M. J., Bilodeau, R. C., Safvan, C. P., Seiersen, K., Andersen, L. H., Pedersen, H. B., et Heber, O., Dissociative Recombination of H_3O^+, HD_2O^+, and D_3O^+: 2000, *ApJ* **543**, 764

Jørgensen, J. K., Hogerheijde, M. R., van Dishoeck, E. F., Blake, G. A., et Schöier, F. L., The structure of the NGC 1333-IRAS2 protostellar system on 500 AU scales. An infalling envelope, a circumstellar disk, multiple outflows, and chemistry: 2004, *A&A* **413**, 993

Jørgensen, J. K., Schöier, F. L., et van Dishoeck, E. F., Physical structure and CO abundance of low-mass protostellar envelopes: 2002, *A&A* **389**, 908

Keane, J. V., Tielens, A. G. G. M., Boogert, A. C. A., Schutte, W. A., et Whittet, D. C. B., Ice absorption features in the 5-8 μm region toward embedded protostars: 2001, *A&A* **376**, 254

Kemper, F., Jäger, C., Waters, L. B. F. M., Henning, T., Molster, F. J., Barlow, M. J., Lim, T., et de Koter, A., Detection of carbonates in dust shells around evolved stars: 2002, *Nat* **415**, 295

Knee, L. B. G. et Sandell, G., The molecular outflows in NGC 1333: 2000, *A&A* **361**, 671

Knude, J. et Hog, E., Interstellar reddening from the HIPPARCOS and TYCHO catalogues. I. Distances to nearby molecular clouds and star forming regions: 1998, *A&A* **338**, 897

Langer, W. D., Castets, A., et Lefloch, B., The IRAS 2 and IRAS 4 Outflows and Star Formation in NGC 1333: 1996, *ApJ Lett.* **471**, L111

Le Teuff, Y. H., Millar, T. J., et Markwick, A. J., The UMIST database for astrochemistry 1999: 2000, *A&AS* **146**, 157

Lee, H.-H., Bettens, R. P. A., et Herbst, E., Fractional abundances of molecules in dense interstellar clouds: A compendium of recent model results.: 1996, *A&AS* **119**, 111

Lefloch, B., Castets, A., Cernicharo, J., Langer, W. D., et Zylka, R., Cores and cavities in NGC 1333: 1998, *A&A* **334**, 269

Lis, D. C., Gerin, M., Phillips, T. G., et Motte, F., The Role of Outflows and C Shocks in the Strong Deuteration of L1689N: 2002, *ApJ* **569**, 322

Lis, D. C., Keene, J., Phillips, T. G., Schilke, P., Werner, M. W., et Zmuidzinas, J., Atomic Oxygen Abundance in Molecular Clouds: Absorption toward Sagittarius B2: 2001, *ApJ* **561**, 823

Liseau, R., Sandell, G., et Knee, L. B. G., The structure of the molecular outflow near SSV 13 and HH 7-11 in the NGC 1333 region: 1988, *A&A* **192**, 153

Loinard, L., Castets, A., Ceccarelli, C., Caux, E., et Tielens, A. G. G. M., Doubly Deuterated Molecular Species in Protostellar Environments: 2001, *ApJ Lett.* **552**, L163

Looney, L. W., Mundy, L. G., et Welch, W. J., Unveiling the Circumstellar Envelope and Disk: A Subarcsecond Survey of Circumstellar Structures: 2000, *ApJ* **529**, 477

Lucas, R. et Liszt, H., Interstellar isotope ratios from mm-wave molecular absorption spectra: 1998, *A&A* **337**, 246

Maret, S., Ceccarelli, C., Caux, E., Tielens, A. G. G. M., et Castets, A., Water emission in NGC 1333-IRAS 4. The physical structure of the envelope: 2002, *A&A* **395**, 573

Maret, S., Ceccarelli, C., Caux, E., Tielens, A. G. G. M., Jørgensen, J. K., van Dishoeck, E., Bacmann, A., Castets, A., Lefloch, B., Loinard, L., Parise, B., et Schöier, F. L., The H_2CO abundance in the inner warm regions of low mass protostellar envelopes: 2004, *A&A* **416**, 577

Martin-Pintado, J., Bachiller, R., et Fuente, A., SiO Emission as a Tracer of Shocked Gas in Molecular Outflows: 1992, *A&A* **254**, 315

McCall, B. J., Huneycutt, A. J., Saykally, R. J., Geballe, T. R., Djuric, N., Dunn, G. H., Semaniak, J., Novotny, O., Al-Khalili, A., Ehlerding, A., Hellberg, F., Kalhori, S., Neau, A., Thomas, R., Österdahl, F., et Larsson, M., An enhanced cosmic-ray flux towards ζ Persei inferred from a laboratory study of the H_3^+-e^- recombination rate: 2003, *Nat* **422**, 500

McCarthy, M. C., Thorwirth, S., Gottlieb, C. A., et Thaddeus, P., The rotational spectrum and geometrical structure of thiozone, S_3: 2004, *J. Am. Chem. Soc.* **126**, 4096

Meyer, D. M., Jura, M., et Cardelli, J. A., The Definitive Abundance of Interstellar Oxygen: 1998, *ApJ* **493**, 222

Millar, T. J., Bennett, A., Rawlings, J. M. C., Brown, P. D., et Charnley, S. B., Gas phase reactions and rate coefficients for use in astrochemistry - The UMIST ratefile: 1991, *A&AS* **87**, 585

Millar, T. J., Farquhar, P. R. A., et Willacy, K., The UMIST Database for Astrochemistry 1995: 1997, *A&AS* **121**, 139

Millar, T. J. et Herbst, E., Organo-sulphur chemistry in dense interstellar clouds: 1990, *A&A* **231**, 466

Minh, Y. C., Irvine, W. M., McGonagle, D., et Ziurys, L. M., Observations of the H_2S toward OMC-1: 1990, *ApJ* **360**, 136

Minh, Y. C., Irvine, W. M., et Ziurys, L. M., Detection of interstellar hydrogen sulfide in cold, dark clouds: 1989, *ApJ Lett.* **345**, L63

Minh, Y. C., Ziurys, L. M., Irvine, W. M., et McGonagle, D., Abundances of hydrogen sulfide in star-forming regions: 1991, *ApJ* **366**, 192

Mizuno, A., Fukui, Y., Iwata, T., Nozawa, S., et Takano, T., A remarkable multilobe molecular outflow - Rho Ophiuchi East, associated with IRAS 16293-2422: 1990, *ApJ* **356**, 184

Narayanan, G., Walker, C. K., et Buckley, H. D., The "Blue-Bulge" Infall Signature toward IRAS 16293-2422: 1998, *ApJ* **496**, 292

Nilsson, A., Hjalmarson, Å., Bergman, P., et Millar, T. J., SO and CS observations of molecular clouds. II. Analysis and modelling of the abundance ratios - probing O_2/CO with SO/CS?: 2000, *A&A* **358**, 257

Nomura, H. et Millar, T. J., The physical and chemical structure of hot molecular cores: 2004, *A&A* **414**, 409

Ohishi, M., Irvine, W. M., et Kaifu, N.: 1992, Molecular Abundance Variations among and Within Cold, Dark Molecular Clouds(rp), dans *IAU Symp. 150: Astrochemistry of Cosmic Phenomena*, Vol. 150, p. 171

Ohishi, M. et Kaifu, N.: 1998, Chemical and physical evolution of dark clouds. Molecular spectral line survey toward TMC-1, dans *Chemistry and Physics of Molecules and Grains in Space. Faraday Discussions No. 109*, p. 205

Pagani, L., Olofsson, A. O. H., Bergman, P., Bernath, P., Black, J. H., Booth, R. S., Buat, V., Crovisier, J., Curry, C. L., Encrenaz, P. J., Falgarone, E., Feldman, P. A., Fich, M., Floren, H. G., Frisk, U., Gerin, M., Gregersen, E. M., Harju, J., Hasegawa, T., Hjalmarson, Å., Johansson, L. E. B., Kwok, S., Larsson, B., Lecacheux, A., Liljeström, T., Lindqvist, M., Liseau, R., Mattila, K., Mitchell, G. F., Nordh, L. H., Olberg, M., Olofsson, G., Ristorcelli, I., Sandqvist, A., von Scheele, F., Serra, G., Tothill, N. F., Volk, K., Wiklind, T., et Wilson, C. D., Low upper limits on the O_2 abundance from the Odin satellite: 2003, *A&A* **402**, L77

Palma, A., Collisional excitation of interstellar sulfur dioxide: 1987, *ApJS* **64**, 565

Palumbo, M. E., Geballe, T. R., et Tielens, A. G. G. M., Solid Carbonyl Sulfide (OCS) in Dense Molecular Clouds: 1997, *ApJ* **479**, 839

Pickett, H. M., Poynter, R. L., Cohen, E. A., Delitsky, M. L., Pearson, J. C., et Mller, H. S. P., Submillimeter, millimeter, and microwave spectral line catalog: 1998, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **60**, 883

Pineau Des Forêts, G., Roueff, E., Schilke, P., et Flower, D. R., Sulphur-bearing molecules as tracers of shocks in interstellar clouds: 1993, *MNRAS* **262**, 915

Plambeck, R. L., Wright, M. C. H., Welch, W. J., Bieging, J. H., Baud, B., Ho, P. T. P., et Vogel, S. N., Kinematics of Orion-KL - Aperture synthesis maps of 86 GHz SO emission: 1982, *ApJ* **259**, 617

Prasad, S. S. et Tarafdar, S. P., UV radiation field inside dense clouds - Its possible existence and chemical implications: 1983, *ApJ* **267**, 603

Pratap, P., Dickens, J. E., Snell, R. L., Miralles, M. P., Bergin, E. A., Irvine, W. M., et Schloerb, F. P., A Study of the Physics and Chemistry of TMC-1: 1997, *ApJ* **486**, 862

Roberts, H. et Herbst, E., The abundance of gaseous H_2O and O_2 in cores of dense interstellar clouds: 2002, *A&A* **395**, 233

Rodgers, S. D. et Charnley, S. B., Chemical Evolution in Protostellar Envelopes: Cocoon Chemistry: 2003, *ApJ* **585**, 355

Ruffle, D. P., Hartquist, T. W., Caselli, P., et Williams, D. A., The sulphur depletion problem: 1999, *MNRAS* **306**, 691

Ruffle, D. P., Rae, J. G. L., Pilling, M. J., Hartquist, T. W., et Herbst, E., A network for interstellar CO - The first application of objective reduction techniques in astrochemistry: 2002, *A&A* **381**, L13

Sandell, G., Knee, L. B. G., Aspin, C., Robson, I. E., et Russell, A. P. G., A molecular jet and bow shock in the low mass protostellar binary NGC 1333-IRAS2: 1994, *A&A* **285**, L1

Scappini, F., Cecchi-Pestellini, C., Smith, H., Klemperer, W., et Dalgarno, A., Hydrated sulphuric acid in dense molecular clouds: 2003, *MNRAS* **341**, 657

Schilke, P., Benford, D. J., Hunter, T. R., Lis, D. C., et Phillips, T. G., A Line Survey of Orion-KL from 607 to 725 GHZ: 2001, *ApJS* **132**, 281

Schilke, P., Walmsley, C. M., Pineau Des Forets, G., et Flower, D. R., SiO production in interstellar shocks.: 1997, *A&A* **321**, 293

Schöier, F. L., Jørgensen, J. K., van Dishoeck, E. F., et Blake, G. A., Does IRAS 16293-2422 have a hot core? Chemical inventory and abundance changes in its protostellar environment: 2002, *A&A* **390**, 1001

Schutte, W. A., Tielens, A. G. G. M., Whittet, D. C. B., Boogert, A., Ehrenfreund, P., de Graauw, T., Prusti, T., van Dishoeck, E. F., et Wesselius, P., The 6.0 and 6.8μm absorption features in the spectrum of NGC 7538: IRS9.: 1996, *A&A* **315**, L333

Shu, F. H., Self-similar collapse of isothermal spheres and star formation: 1977, *ApJ* **214**, 488

Snell, R. L., Howe, J. E., Ashby, M. L. N., Bergin, E. A., Chin, G., Erickson, N. R., Goldsmith, P. F., Harwit, M., Kleiner, S. C., Koch, D. G., Neufeld, D. A., Patten, B. M., Plume, R., Schieder, R., Stauffer, J. R., Tolls, V., Wang, Z., Winnewisser, G., Zhang, Y. F., et Melnick, G. J., Water Abundance in Molecular Cloud Cores: 2000, *ApJ Lett.* **539**, L101

Sobolev, V. V.: 1960, *Moving envelopes of stars*, Cambridge: Harvard University Press, 1960

Sofia, U. J., Cardelli, J. A., et Savage, B. D., The abundant elements in interstellar dust: 1994, *ApJ* **430**, 650

Sofia, U. J. et Meyer, D. M., Interstellar Abundance Standards Revisited: 2001, *ApJ Lett.* **554**, L221

Spaans, M. et van Dishoeck, E. F., The Abundance and Emission of H_2O and O_2 in Clumpy Molecular Clouds: 2001, *ApJ Lett.* **548**, L217

Spitzer, L. J. et Tomasko, M. G., Heating of H i Regions by Energetic Particles: 1968, *ApJ* **152**, 971

Stahler, S. W., Shu, F. H., et Taam, R. E., The evolution of protostars. I - Global formulation and results: 1980, *ApJ* **241**, 637

Stark, R., Wesselius, P. R., van Dishoeck, E. F., et Laureijs, R. J., Neutral carbon in translucent regions of the dark cloud L 183.: 1996, *A&A* **311**, 282

Sutton, E. C., Peng, R., Danchi, W. C., Jaminet, P. A., Sandell, G., et Russell, A. P. G., The distribution of molecules in the core of OMC-1: 1995, *ApJS* **97**, 455

Suzuki, H., Yamamoto, S., Ohishi, M., Kaifu, N., Ishikawa, S., Hirahara, Y., et Takano, S., A survey of CCS, HC_3N, HC_5N, and NH_3 toward dark cloud cores and their production chemistry: 1992, *ApJ* **392**, 551

Swade, D. A., Radio wavelength observations of the L134N molecular core: 1989a, *ApJS* **71**, 219

Swade, D. A., The physics and chemistry of the L134N molecular core: 1989b, *ApJ* **345**, 828

Tieftrunk, A., Pineau Des Forets, G., Schilke, P., et Walmsley, C. M., SO and H2S in low density molecular clouds: 1994, *A&A* **289**, 579

Turner, B. E., The Physics and Chemistry of Small Translucent Molecular Clouds. VII. SO^+ and H_2S: 1996, *ApJ* **468**, 694

Turner, B. E., Chan, K., Green, S., et Lubowich, D. A., Tests of shock chemistry in IC 443G: 1992, *ApJ* **399**, 114

van der Tak, F. F. S. et van Dishoeck, E. F., Limits on the cosmic-ray ionization rate toward massive young stars: 2000, *A&A* **358**, L79

van Dishoeck, E. F. et Blake, G. A., Chemical Evolution of Star-Forming Regions: 1998, *ARA&A* **36**, 317

Vastel, C., Polehampton, E. T., Baluteau, J.-P., Swinyard, B. M., Caux, E., et Cox, P., Infrared Space Observatory Long Wavelength Spectrometer Observations of C^+ and O^0 Lines in Absorption toward Sagittarius B2: 2002, *ApJ* **581**, 315

Wakelam, V., Caselli, P., Ceccarelli, C., Herbst, E., et Castets, A., Resetting chemical clocks of hot cores based on S-bearing molecules: 2004a, *A&A* **422**, 159

Wakelam, V., Castets, A., Ceccarelli, C., Lefloch, B., Caux, E., et Pagani, L., Sulphur-bearing species in the star forming region L1689N: 2004b, *A&A* **413**, 609

Walker, C. K., Lada, C. J., Young, E. T., Maloney, P. R., et Wilking, B. A., Spectroscopic evidence for infall around an extraordinary IRAS source in Ophiuchus: 1986, *ApJ Lett.* **309**, L47

Weingartner, J. C. et Draine, B. T., Dust Grain-Size Distributions and Extinction in the Milky Way, Large Magellanic Cloud, and Small Magellanic Cloud: 2001, *ApJ* **548**, 296

Weisheit, J. C. et Upham, R. J., Electron transfer in ion-dust grain collisions: 1978, *MNRAS* **184**, 227

Wilson, T. L. et Rood, R., Abundances in the Interstellar Medium: 1994, *ARA&A* **32**, 191

Wootten, A. et Loren, R. B., L1689N - Misalignment between a bipolar outflow and a magnetic field: 1987, *ApJ* **317**, 220

Wright, M., Sandell, G., Wilner, D. J., et Plambeck, R. L., High-resolution images of dust emission from Orion-KL: 1992, *ApJ* **393**, 225

Wright, M. C. H., Plambeck, R. L., et Wilner, D. J., A Multiline Aperture Synthesis Study of Orion-KL: 1996, *ApJ* **469**, 216

Zhou, S., Line formation in collapsing cloud cores with rotation and applications to B335 and IRAS 16293-2422: 1995, *ApJ* **442**, 685

Ziurys, L. M., Friberg, P., et Irvine, W. M., Interstellar SiO as a tracer of high-temperature chemistry: 1989, *ApJ* **343**, 201