



**HAL**  
open science

## La deutération dans les protoétoiles de faible masse

Béregère Parise

► **To cite this version:**

Béregère Parise. La deutération dans les protoétoiles de faible masse. Astrophysique [astro-ph]. Université Paul Sabatier - Toulouse III, 2004. Français. NNT: . tel-00009303

**HAL Id: tel-00009303**

**<https://theses.hal.science/tel-00009303>**

Submitted on 25 May 2005

**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.

**Université Toulouse III - Paul SABATIER**

**U.F.R. Physique, Chimie, Automatique**

**THESE**

pour obtenir le grade de

**Docteur de l'Université Toulouse III**

**Discipline : Astrophysique**

présentée et soutenue par

**Bérengère Parise**

le 20 septembre 2004

Titre :

**LA DEUTERATION DANS LES PROTOETOILES  
DE FAIBLE MASSE**

Rapporteurs :

Prof. Tom Millar  
Dr. Evelyne Roueff

Jury :

Prof.	Sylvie	Vauclair	Président
Dr.	Evelyne	Roueff	Rapporteur
Dr.	Paola	Caselli	Examineur
Dr.	Michel	Guélin	Examineur
Dr.	Emmanuel	Caux	Directeur de thèse
Dr.	Cecilia	Ceccarelli	Directeur de thèse
Prof.	A.G.G.M.	Tielens	Invité



# Résumé de la thèse

Malgré la faible abondance du deutérium dans l'Univers ( $D/H \sim 1.5 \times 10^{-5}$ ), des molécules deutérées sont détectées en grande abondance dans les régions de formation d'étoiles, avec un fractionnement (rapport de l'abondance de la molécule deutérée à celle de son isotope principal) supérieur de plusieurs ordres de grandeur à l'abondance cosmique du deutérium. En particulier, le gaz dense et chaud constituant les Cœurs Chauds autour des protoétoiles de faible masse est enrichi en molécules deutérées, permettant même l'observation de molécules doublement deutérées telles que  $D_2CO$ . Ces molécules deutérées représentent des sondes précieuses pour déterminer les conditions physiques régnant lors de la formation d'une étoile. L'incorporation préférentielle d'atomes de deutérium dans les molécules est une conséquence de la différence d'énergie de point zéro entre une espèce deutérée et son isotope principal. Les températures indiquées par les fractionnements observés en phase gazeuse étant bien plus faibles que la température actuelle du gaz, il est généralement admis que ces molécules ont été formées lors d'une phase antérieure froide et dense (phase de cœur préstellaire), par des réactions en phase gazeuse ou à la surface des grains, puis stockées dans les manteaux de glace des grains. Elles sont libérées en phase gazeuse quand la protoétoile nouvellement formée chauffe son enveloppe et évapore les glaces.

Nous étudions dans cette thèse les processus physico-chimiques menant à un tel degré de deutération dans les environnements des protoétoiles de faible masse, progéniteurs d'étoiles telles que notre soleil. Nous présentons dans un premier temps des observations de molécules deutérées (en particulier eau, formaldéhyde et méthanol) dans les enveloppes de gaz et de poussière entourant les jeunes protoétoiles. Des observations dans le domaine millimétrique ont permis de mettre en évidence un fort degré de deutération du méthanol dans le gaz constituant l'enveloppe. En particulier, l'isotope triplement deutéré a été détecté avec un fractionnement  $CD_3OH/CH_3OH$  de 1% dans IRAS16293–2422. Les fractionnements observés sont compatibles avec un scénario de formation du formaldéhyde et du méthanol à la surface des grains de poussière. Le formaldéhyde et le méthanol deutérés ont ensuite été recherchés et détectés dans un échantillon de protoétoiles de faible masse de Classe 0, suggérant que ce haut taux de deutération est une caractéristique de cette classe d'objets. L'analyse de l'émission de l'eau dans ces mêmes environnements conduit paradoxalement à un fractionnement environ dix fois plus faible, en accord avec la limite supérieure sur le fractionnement de l'eau dans les glaces constituant les

manteaux des grains de poussière, déterminée par des observations dans le proche infrarouge. Nous présentons enfin un modèle de chimie à la surface des grains se proposant de comprendre pourquoi le deutérium est préférentiellement incorporé dans les molécules de formaldéhyde et de méthanol plutôt que dans l'eau.

Despite the low deuterium abundance in the Universe ( $D/H \sim 1.5 \times 10^{-5}$ ), high abundances of deuterated molecules are detected in star forming regions, with a fractionation (*i.e.* the ratio of deuterated over main isotopomer) higher than the cosmic abundance of deuterium by several orders of magnitude. Particularly, warm dense gas in hot cores around low-mass protostars is enriched in deuterated species, with even high observed abundances of doubly-deuterated species such as  $D_2CO$ . These deuterated molecules provide valuable tools to probe the physical conditions occurring during star formation. Deuteration is thought to be driven by the small energy differences between a deuterated species and the normal isotope. Because the temperatures indicated by the fractionation are much lower than the present gas temperatures in hot cores, the observed deuterations are thought to reflect a previous cold phase. Likely these molecules formed during the preceding prestellar core phase – either in the gas phase or on the grain surface – and were stored in an ice mantle which evaporated once the YSO heated its environment above the ice sublimation temperature.

We study in this thesis the physical and chemical processes leading to the high molecular deuteration observed in low-mass protostellar environments. We present observations of deuterated molecules (namely methanol, formaldehyde and water) both in the gas and in the icy mantles of dust grains in the envelope surrounding such objects. Millimeter observations unveiled a high deuteration of methanol in the gas of the envelope. In particular, triply-deuterated methanol was detected with a fractionation  $CD_3OH/CH_3OH \sim 1\%$  in IRAS16293-2422. The observed fractionations are consistent with the scenario of formation of methanol on dust grain surfaces. Deuterated methanol and formaldehyde were then searched for and detected on a sample of low-mass Class 0 protostars, suggesting that this high deuteration is common in this class of objects. Analysis of the gas-phase water emission in the IRAS16293-2422 envelope leads paradoxically to a fractionation one order of magnitude lower, in agreement with the upper limit on water deuteration in ices, derived by near-infrared observations towards slightly more evolved objects. The last chapter of the thesis presents a grain chemistry model that studies in details water fractionation.

# Remerciements

Une thèse, c'est une expérience scientifique et humaine fantastique de trois ans, qui est l'aboutissement d'un certain nombre d'années d'études (quand on aime, on ne compte pas!) et de formation personnelle. Au moment où je viens enfin de délaissier ma casquette d'étudiant, je tiens à remercier tous ceux qui m'ont entouré dans ce parcours initiatique, depuis mon plus jeune âge.

C'est à mes parents que vont mes premières pensées. Je voudrais vous remercier pour le soutien sans faille que vous m'avez apporté dans mes études aussi bien que dans ma vie personnelle. Sans vos encouragements et votre soutien logistique, je n'aurais en particulier jamais tenu le coup pendant les difficiles années de classes préparatoires. Merci du fond du cœur de m'avoir ouvert tant de portes. Merci aussi à mes sœurs pour notre complicité, ainsi qu'à toute ma famille. Une pensée pour mon grand-père qui nous a quittés au début de cette thèse.

Un grand merci aussi à mes professeurs de prépa, en particulier Mme Camez et M. Mercier, pour m'avoir initiée respectivement aux plaisirs (et parfois aux tortures) des mathématiques et de la physique. Je vous dois en grande partie mon intégration à l'ENS.

Je remercie l'Ecole Normale Supérieure d'avoir financé mes études et de m'avoir offert des opportunités inestimables. La proximité des laboratoires de recherche dans cet établissement est un privilège que peu de mes collègues universitaires ont eu la chance de connaître pour découvrir le milieu de la recherche dès la licence. Je suis tout particulièrement reconnaissante à Laurence Rézeau d'avoir organisé mon stage de 6 mois à l'Institute for Astronomy à Hawaii, stage dont je suis rentrée avec la confirmation de mon goût pour l'astrophysique, et avec une vision internationale de la recherche qui m'a été très bénéfique pour la suite de mes études. Merci à Jeff Kuhn de m'avoir accueillie à Hawaii aussi chaleureusement.

Un grand merci à tous les professeurs du DEA d'Astrophysique et Techniques Associées de Meudon, pour l'année d'enseignement la plus passionnante de ma scolarité. Merci à Daniel Rouan pour l'organisation des séjours à Nançay et à l'OHP, pour lesquels je garde un souvenir impérissable. Merci à Jacqueline Plancy pour sa bonne humeur et son aide pour les multiples démarches administratives.

Pendant cette thèse, j'ai eu la chance de travailler avec de nombreux collaborateurs. Je tiens tout d'abord à remercier chaleureusement Emmanuel Caux et Cecilia Ceccarelli, pour avoir

encadré ma thèse. Merci Emmanuel pour ton soutien et ta bonne humeur de chaque jour, et pour avoir financé tant de missions qui m'ont permis de progresser dans mes travaux. Merci Cecilia pour ton enthousiasme sans limite qui m'a plus d'une fois remonté le moral, et pour, entre autres, m'avoir initié à l'utilisation de ton modèle.

Je tiens aussi à remercier chaleureusement Evelyne Roueff et Tom Millar pour avoir accepté d'être rapporteurs de ma thèse. Merci aussi à Paola Caselli, Michel Guélin, Sylvie Vauclair et Alexander Tielens pour avoir fait partie de mon jury. Un merci tout particulier à Evelyne Roueff et Michel Guélin pour leurs commentaires détaillés sur le manuscrit.

Un grand merci à Bertrand Lefloch pour m'avoir initiée aux joies de l'observation au 30m, et m'avoir fait découvrir quelques coins sympathiques à Grenade. Merci à Alain Castets pour m'avoir accompagnée tant de fois lors de mes runs d'observation au 30m, qu'il neige ou qu'il vente, et même le jour de Pâques! Ta bonne humeur et tes expressions imagées ont égayé les longues heures passées à attendre le retour du beau temps. Merci aussi plus généralement à tous les membres de WAGOS, que j'ai toujours grand plaisir à retrouver au cours de nos réunions rituelles.

Un grand merci aussi à toute l'équipe de l'IRAM à Grenade pour l'organisation des observations, en particulier Esther pour sa gentillesse, et aux opérateurs Manolo et David pour leur aide dans les observations. J'ai eu aussi l'occasion d'aller observer deux fois à Hawaii lors de cette thèse. Merci à John Rayner pour m'avoir initiée à l'utilisation de SpeX sur l'IRTF, et à Remo Tilanus pour m'avoir accueillie et formée aux observations sur le JCMT, et avoir risqué sa vie pour m'apprendre à conduire un 4×4 de Hale Pohaku au télescope!

Je voudrais aussi remercier les collaborateurs étrangers avec qui j'ai eu la chance de travailler et qui m'ont beaucoup appris. Un grand merci à Eric Herbst pour être venu une journée au CESR puis m'avoir accueillie par deux fois à Columbus de manière si hospitalière. Merci à Ted Simon pour la collaboration sur la recherche de HDO sur les grains de poussière et pour être venu faire les observations avec moi. Et un grand merci enfin à Xander Tielens pour m'avoir permis de visiter la Californie et m'avoir fait découvrir divers instituts : Berkeley, Lawrence Livermore National Laboratory, l'ESTEC et le SRON à Groningen.

Merci enfin au CESR et en particulier à toute l'équipe Univers Froid pour m'avoir accueillie pendant cette thèse. Un merci tout particulier à Dolorès pour avoir organisé mes diverses missions plus complexes les unes que les autres avec un sourire et un zèle inébranlables.

Il est maintenant temps de remercier les amis qui ont contribué à rendre toutes ces années agréables. Merci à Régis pour ton amitié à l'épreuve du temps. Je ne t'ai pas vu aussi souvent que je l'aurais voulu (mais bon, Gramat-Californie, ça fait un peu loin...). Félicitation pour ton beau mariage. Si vous avez besoin d'une baby-sitter...;-) Merci à Aline et Xavier ainsi qu'à tous les autres copains de DEA dont l'amitié m'a été très précieuse et que je regrette de voir si rarement maintenant.

Et comme je ne pourrais pas vivre sans musique, je voudrais remercier Eric, mon professeur

de piano, pour avoir supporté mes canards (par intermittences) depuis mes 9 ans ! Elisabeth pour avoir joué ensemble plusieurs 4 mains ces deux dernières années et Simon pour les duos mémorables piano-saxo. L'École de musique me manquera énormément quand je quitterai à nouveau ma belle Ville Rose.

Merci aux amis précaires du CESR qui se sont succédés de thèse en thèse. En particulier, un grand merci aux adeptes de notre petite chorale-pizza, Hanna, Florence, Olivier, Xavier. Ces mardis soirs me laissent un super souvenir. Choukran jazilan à Hanna pour m'avoir réconfortée en début de thèse alors que tout semblait si noir, et m'avoir enseigné des bases d'arabe. A quand le prochain cours ? Merci à Florence pour les rando du week-end dans les Pyrénées et les longues discussions.

Une pensée aussi aux « collocataires » qui se sont succédés dans le poulailler pendant les deux premières années de ma thèse : César, Bruce, Moncef, Nathalie, Julien, Benjamin, Sébastien, Carole, Hubert ...

Merci aux nouvelles générations, en particulier Mathias, Vincent, Ben et Ludo pour les fous-rires du midi, ainsi qu'à Natounette et Cricri les petits nouveaux. Un merci tout particulier à l'équipe des bronzés pour le voyage en Turquie !

Merci aussi aux amis de tous les pays rencontrés au gré des conférences, observations et écoles d'été, et qui m'ont ouvert à de nouvelles cultures. Merci en particulier à Mark pour m'avoir initiée à la culture américaine (« American what ? ») et m'avoir convaincue qu'il existe aux Etats-Unis une diversité d'opinions et de visions du monde beaucoup plus grande que l'on ne pourrait le croire depuis la France.

Merci enfin à tous ceux que je n'ai pas cités ici, mais qui méritent de l'être.





# Table des matières

Présentation générale	13
<b>INTRODUCTION</b>	<b>15</b>
<b>1 Introduction</b>	<b>17</b>
1.1 La formation d'une étoile de faible masse	17
1.1.1 Le scénario physique	17
1.1.2 Les processus chimiques mis en œuvre	18
1.2 Les molécules deutérées : une clef pour contraindre la chimie	21
1.2.1 Chronologie des découvertes observationnelles et avancées dans la modélisation	22
1.2.2 Etat des observations et des modèles en 2001	30
1.3 Objectifs de cette thèse	32
<b>LE FRACTIONNEMENT DU METHANOL ET DU FORMALDEHYDE</b>	<b>33</b>
<b>2 La spectroscopie moléculaire</b>	<b>35</b>
2.1 Introduction	35
2.2 Spectre de rotation des molécules diatomiques	36
2.3 Spectre de rotation des molécules polyatomiques	37
2.3.1 Toupies symétriques	38
2.3.2 Toupies asymétriques	39
2.4 Particularités du méthanol	41
2.4.1 CH <sub>3</sub> OH, CH <sub>3</sub> OD, CD <sub>3</sub> OH et CD <sub>3</sub> OD	42
2.4.2 CH <sub>2</sub> DOH, CH <sub>2</sub> DOD, CHD <sub>2</sub> OD et CHD <sub>2</sub> OH	43
2.5 Calcul approché des fréquences d'une molécule : exemple de D <sub>2</sub> H <sup>+</sup>	45
2.5.1 Intérêt scientifique	45
2.5.2 Méthode	45

<b>3</b>	<b>La deutération du méthanol dans l’enveloppe de la protoétoile IRAS16293–2422</b>	<b>49</b>
3.1	Introduction . . . . .	49
3.2	Les observations . . . . .	52
3.2.1	Méthanol simplement et doublement deutéré . . . . .	52
3.2.2	Méthanol triplement deutéré . . . . .	53
3.2.3	Isotope du méthanol $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$ . . . . .	54
3.3	Dérivation des densités de colonne et du fractionnement . . . . .	56
3.3.1	Principe du diagramme rotationnel . . . . .	56
3.3.2	Les diagrammes rotationnels des différents isotopes . . . . .	60
3.4	Discussion . . . . .	62
3.4.1	Premiers résultats . . . . .	62
3.4.2	Comparaison aux modèles de chimie sur les grains . . . . .	63
3.4.3	Limitation des observations due à la faible résolution spatiale . . . . .	65
3.5	Conclusion . . . . .	66
<b>4</b>	<b>Méthanol et formaldéhyde deutérés sur un échantillon de protoétoiles de faible masse</b>	<b>67</b>
4.1	Introduction . . . . .	67
4.2	Observations et résultats . . . . .	68
4.2.1	Observations . . . . .	68
4.2.2	Résultats . . . . .	75
4.3	Analyse . . . . .	79
4.3.1	Peut-on contraindre la taille de la source ? . . . . .	79
4.3.2	Le fractionnement en formaldéhyde . . . . .	81
4.3.3	Le fractionnement en méthanol . . . . .	81
4.4	Discussion . . . . .	85
4.4.1	Premiers résultats . . . . .	86
4.4.2	Comparaison aux modèles de chimie sur les grains . . . . .	86
4.5	Conclusion . . . . .	89
	<b>LE FRACTIONNEMENT DE L’EAU</b>	<b>91</b>
<b>5</b>	<b>Recherche de glace d’eau deutérée dans le manteau des grains</b>	<b>93</b>
5.1	Introduction . . . . .	93
5.2	Les observations . . . . .	95
5.2.1	Sélection des sources . . . . .	97
5.2.2	L’acquisition des observations . . . . .	98
5.2.3	Traitement de données . . . . .	100
5.3	Analyse des spectres - Dérivation des limites supérieures pour HDO/H <sub>2</sub> O . . . . .	104

5.3.1	La densité de colonne de $\text{H}_2\text{O}$ . . . . .	106
5.3.2	Les limites supérieures sur les densités de colonne de HDO . . . . .	109
5.4	Comparaison à la deutération en phase gazeuse . . . . .	111
5.5	Conclusion . . . . .	114
<b>6</b>	<b>L'abondance de HDO en phase gazeuse dans IRAS16293–2422</b>	<b>115</b>
6.1	Introduction . . . . .	115
6.2	Observations et résultats . . . . .	116
6.2.1	Observations sur IRAS16293–2422 et son outflow . . . . .	116
6.2.2	Résultats . . . . .	118
6.3	Analyse . . . . .	121
6.3.1	Modélisation . . . . .	121
6.3.2	Tests de validité . . . . .	123
6.4	Discussion . . . . .	126
6.5	Conclusion . . . . .	129
<b>7</b>	<b>Emission théorique de HDO - Implications pour Herschel-HIFI</b>	<b>131</b>
7.1	Introduction . . . . .	131
7.2	Description du modèle . . . . .	132
7.3	Résultats . . . . .	134
7.3.1	Le cas d'IRAS16293–2422 . . . . .	134
7.3.2	Contraindre $x_{\text{int}}$ et $x_{\text{ext}}$ à partir des observations . . . . .	140
7.4	Conclusion . . . . .	143
	<b>MODELISATION DE LA CHIMIE A LA SURFACE DES GRAINS</b>	<b>149</b>
<b>8</b>	<b>Formation des molécules deutérées sur les grains de poussière</b>	<b>151</b>
8.1	Introduction . . . . .	151
8.2	Les différents types de modèles sur les grains . . . . .	152
8.2.1	Codes de Monte-Carlo . . . . .	152
8.2.2	Résolution des équations différentielles régissant les abondances . . . . .	152
8.2.3	Résolution de l'équation maîtresse . . . . .	153
8.3	Un modèle simple pour le méthanol : le scénario de Charnley et al. (1997) . . . . .	153
8.3.1	Les hypothèses . . . . .	154
8.3.2	Les équations . . . . .	155
8.4	Le modèle complet . . . . .	158
8.4.1	Présentation du modèle . . . . .	159
8.4.2	Résultats . . . . .	166
8.4.3	Implications astrophysiques . . . . .	173

8.5	Conclusion . . . . .	176
<b>CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES</b>		<b>177</b>
<b>9</b>	<b>Conclusions et Perspectives</b>	<b>179</b>
9.1	Synthèse des résultats de cette thèse . . . . .	179
9.1.1	La deutération du méthanol . . . . .	180
9.1.2	La deutération de l'eau . . . . .	181
9.1.3	Modélisation . . . . .	181
9.2	L'état des connaissances en 2004 . . . . .	182
9.3	Perspectives . . . . .	184
9.3.1	Observations interférométriques du méthanol deutéré . . . . .	184
9.3.2	L'énigme de la deutération de l'eau . . . . .	185
9.3.3	Bilan des molécules deutérées par un relevé spectral non biaisé . . . . .	185
9.3.4	Observations futures . . . . .	186
9.3.5	La deutération : une sonde de la formation stellaire, des nuages froids aux systèmes planétaires et aux comètes. . . . .	186
<b>BIBLIOGRAPHIE</b>		<b>188</b>
<b>ANNEXES</b>		<b>201</b>
<b>A</b>	<b>Le calcul des barres d'erreur sur les rapports isotopiques</b>	<b>203</b>
A.1	Propagation d'erreur . . . . .	203
A.2	Fonction de répartition du rapport de deux variables aléatoires. . . . .	204
A.2.1	Le formalisme . . . . .	204
A.2.2	Application à la détermination des barres d'erreur sur les fractionnements isotopiques. . . . .	205
<b>B</b>	<b>Renseignements complémentaires</b>	<b>209</b>
B.1	Liste des publications dans les journaux à comité de lecture . . . . .	209
B.2	Collaborations . . . . .	210
B.3	Conférences . . . . .	211
B.4	Séminaires de laboratoire . . . . .	212

# Présentation générale

Cette thèse s'inscrit dans la thématique générale de la formation stellaire. Je me suis intéressée à l'étude des molécules deutérées dans les enveloppes des protoétoiles de faible masse – progéniteurs d'étoiles telles que notre Soleil – qui présentent des abondances incroyablement élevées dans ces environnements.

Leur étude est intéressante à plusieurs titres. Comprendre les processus qui ont pu conduire à leur formation représente en soi un intérêt indéniable. En effet, les fractionnements (c'est-à-dire les rapports de l'abondance de l'isotope deutéré sur celle de l'isotope principal) observés peuvent être supérieurs de plusieurs ordres de grandeur au rapport D/H cosmique. Mais ces molécules sont de plus des outils incomparables pour sonder les régions de formation stellaire, puisqu'elles sont caractéristiques des environnements froids et denses, où le CO est extrêmement déplété sur les grains de poussières.

Ce travail de thèse comporte plusieurs volets :

Une majeure partie est observationnelle. Des campagnes d'observation ont été menées sur les grands radiotélescopes de 30 m de l'IRAM (Sierra Nevada - Espagne) et le JCMT (Mauna Kea - Hawaii) pour sonder les molécules en phase gazeuse. D'autres observations ont été effectuées dans le domaine proche infrarouge avec le télescope IRTF de la NASA (Mauna Kea - Hawaii) pour sonder la deutération en phase solide dans les manteaux de glaces qui recouvrent les grains de poussière.

Le deuxième volet consiste en une phase de modélisation. Nous avons développé un modèle de chimie sur les grains pour expliquer les abondances observées. Une étude théorique de l'émission de HDO dans les enveloppes des protoétoiles de faible masse a aussi été menée pour, en particulier, déterminer si l'apport de l'instrument hétérodyne HIFI à bord du satellite Herschel (lancement prévu en 2007) est indispensable à la compréhension du fractionnement de l'eau.

Cette thèse comporte trois grandes parties. Après une introduction à l'étude de la formation des étoiles de type solaire et au problème particulier de la deutération (chapitre 1), la première partie traite du fractionnement du méthanol et du formaldéhyde. Elle est constituée de trois chapitres. Le chapitre 2 propose quelques bases de spectroscopie moléculaire nécessaires à l'analyse des observations présentées dans les chapitres suivants. Les chapitres 3 et 4 présentent l'étude observationnelle de la deutération du méthanol dans la protoétoile de faible masse typique IRAS

16293–2422 puis dans un échantillon de protoétoiles de faible masse. La deuxième partie, divisée en trois chapitres, traite de la deutération de l'eau dans ces mêmes environnements. Le chapitre 5 décrit des observations en phase solide, tandis que le chapitre 6 présente des observations en phase gazeuse. Le chapitre 7 comporte une étude théorique de l'émission de HDO dans les enveloppes des protoétoiles de faible masse. L'apport des futures données Herschel-HIFI y est discuté. La troisième partie comporte un chapitre présentant un modèle de chimie sur les grains, qui se propose d'expliquer les fractionnements observés. Enfin, les conclusions et perspectives de cette thèse sont présentées au chapitre 9. L'annexe A détaille le calcul des barres d'erreur sur la détermination des rapports isotopiques. L'annexe B recense les publications qui ont été écrites pendant la thèse, les collaborations dont a bénéficié cette thèse, ainsi que les communications et conférences où des résultats ont été présentés.

# Introduction





# Chapitre 1

## Introduction

### Sommaire

---

<b>1.1</b>	<b>La formation d'une étoile de faible masse . . . . .</b>	<b>17</b>
1.1.1	Le scénario physique . . . . .	17
1.1.2	Les processus chimiques mis en œuvre . . . . .	18
<b>1.2</b>	<b>Les molécules deutérées : une clef pour contraindre la chimie . . . .</b>	<b>21</b>
1.2.1	Chronologie des découvertes observationnelles et avancées dans la modélisation . . . . .	22
1.2.2	Etat des observations et des modèles en 2001 . . . . .	30
<b>1.3</b>	<b>Objectifs de cette thèse . . . . .</b>	<b>32</b>

---

Etudier les processus physiques et chimiques qui interviennent lors de la formation d'une étoile, particulièrement d'une étoile de faible masse telle notre soleil, est d'un intérêt évident pour l'Homme en quête de ses propres origines. En effet, le futur système stellaire sera formé à partir de la matière constituant l'enveloppe qui entoure les étoiles en gestation, et l'étude de la chimie se produisant dans ces enveloppes peut donc nous apprendre beaucoup sur les mécanismes de formation des molécules complexes voire prébiotiques.

### 1.1 La formation d'une étoile de faible masse

#### 1.1.1 Le scénario physique

Les grandes lignes du scénario de la formation d'une étoile de faible masse sont maintenant connues grâce aux progrès récents de l'instrumentation (développement de grands radiotélescopes au sol munis de récepteurs haute fréquence millimétriques et submillimétriques de plus en plus performants, amélioration de la sensibilité des spectromètres infrarouge équipant les grands télescopes, lancement du télescope ISO...) et à une modélisation de plus en plus sophistiquée des observations.

Il est couramment admis (Shu et al. 1987) qu'au sein d'un nuage moléculaire, des cœurs denses se contractent jusqu'à ce que le champ magnétique ne puisse plus les soutenir face à la gravité. Le gaz entre alors dans une phase d'effondrement qui dure quelque  $10^4$  à  $10^5$  ans. Cette phase est caractérisée par la présence d'un cœur embryonnaire central, la protoétoile, profondément enfouie dans le nuage parent, qui accrète la majeure partie de la masse de la future étoile. A ce stade, la protoétoile est entourée d'un disque circumstellaire et expulse violemment de la matière par des jets supersoniques. Les jets « nettoient » progressivement l'environnement de la protoétoile qui entre ensuite dans une phase dite « T Tauri » où seul subsiste le disque protoplanétaire. Ce scénario est présenté schématiquement dans la Figure 1.1.

### 1.1.2 Les processus chimiques mis en œuvre

Malgré ces avancées scientifiques, la chimie qui intervient dans les différentes phases de formation d'une étoile de faible masse est encore mal connue (*cf.* la revue de van Dishoeck & Blake 1998). Son étude est pourtant fondamentale car elle régit l'effondrement du nuage, à travers par exemple le degré d'ionisation (qui influe sur la diffusion ambipolaire) et l'abondance des différentes molécules (qui conditionne le refroidissement du gaz).

#### A. La chimie interstellaire

##### a) La chimie en phase gazeuse

Les conditions régnant dans le milieu interstellaire gouvernent la chimie qui s'y déroule : aux températures basses caractérisant les nuages interstellaires, seules les réactions exothermiques sont possibles. De plus, certaines réactions, même exothermiques, possèdent des barrières de potentiel qui ne pourront être franchies si la température est trop basse.

Plusieurs types de réactions peuvent avoir lieu (Lequeux 2002) :

##### *Les réactions ion-molécule*

Ce sont des réactions du type  $A + B^+ \rightarrow C + D^+$ . Un ion qui s'approche d'une molécule neutre y engendre un dipôle électrique qui crée une force attractive pour l'ion. Celui-ci peut donc être piégé par la molécule. Ces réactions peuvent se produire même à très basse température si elles sont exothermiques. Aucune barrière d'activation n'empêche l'approche de l'ion.

##### *L'association radiative*

C'est une réaction de combinaison directe de deux partenaires avec désexcitation de la molécule formée par émission d'un photon :  $A + B \rightarrow AB + h\nu$ .

##### *Recombinaison dissociative*

Les molécules neutres sont souvent produites par recombinaison dissociative d'un ion moléculaire avec un électron :  $AB^+ + e^- \rightarrow A + B$ .

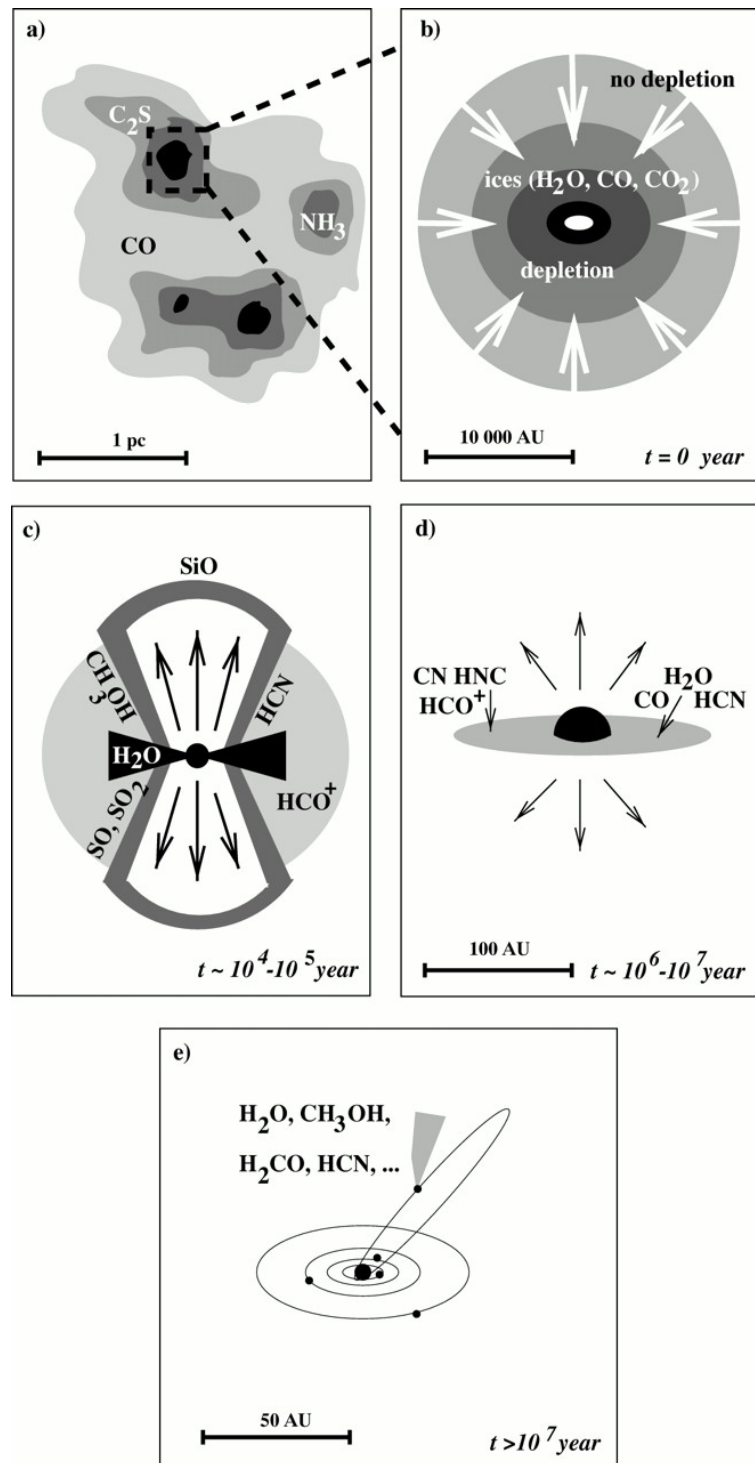


FIG. 1.1 – Vue schématique de la formation d’une étoile de faible masse. (a) Des cœurs denses se contractent jusqu’à ce que (b) la pression magnétique ne soit plus en mesure de les soutenir et que l’effondrement gravitationnel commence ( $t=0$ ). (c) Pendant  $10^4$ – $10^5$  ans a lieu une phase d’accrétion de matière sur l’objet central (protoétoile) très enfoui, depuis le disque d’accrétion. De puissants jets supersoniques nettoient l’enveloppe. (d) Les jets n’épargnent que la jeune étoile T-Tauri ainsi que le résidu du disque protoplanétaire, qui conduira à la formation d’un système planétaire (e). [Figure de M.R. Hogerheijde dans van Dishoeck & Blake (1998)]

### *Réactions neutre-neutre*

Ces réactions sont fondamentales dans les températures élevées des chocs, des régions de photodissociation et des cœurs chauds. Les réactions entre radicaux libres (molécules non saturées, *i.e.* qui possèdent des électrons non appariés) n'ont en général pas de barrière d'activation, et peuvent donc aussi jouer un rôle dans les milieux froids. Par contre les réactions entre molécules saturées possèdent une barrière d'activation.

### *Photodissociation et photoionisation*

C'est le mécanisme principal de destruction des molécules dans les parties externes des nuages moléculaires soumises au rayonnement ultraviolet :  $AB + h\nu \rightarrow A + B$

### **b) La chimie sur les grains**

La chimie en phase gazeuse ne permet pas à elle seule d'expliquer l'abondance de certaines espèces. L'exemple le plus parlant est celui du dihydrogène  $H_2$ , dont la formation en phase gazeuse est très inefficace. Le principal mode de formation proposé pour cette molécule est à la surface des grains de poussière, qui jouent le rôle de catalyseur en offrant une surface de rencontre pour les deux atomes d'hydrogène et en absorbant l'excès d'énergie produite lors de la formation de la molécule.

D'autres molécules semblent aussi se former sur les grains. Ainsi, les modèles de chimie en phase gazeuse échouent de 2 à 3 ordres de grandeur pour reproduire la surabondance de méthanol ( $CH_3OH$ ) détectée dans Orion par Menten et al. (1988). De plus, le méthanol est un important constituant des manteaux des grains (*e.g.* Tielens 1989; Grim et al. 1991). Il est donc suggéré que le méthanol  $CH_3OH$  se forme aussi sur les grains de poussière.

Ces mécanismes sont néanmoins mal connus. Le processus consiste en des réactions entre atomes et/ou molécules piégés à la surface du grain. Les espèces se déplacent par effet tunnel ou saut thermique de site en site sur la surface du grain. Les atomes d'hydrogène, légers, peuvent visiter tous les sites de piégeage d'un grain typique de  $1000 \text{ \AA}$  en  $10^{-3} \text{ s}$ . Les atomes plus lourds tels que C ou O mettent  $10^4 \text{ s}$ , temps qui est faible devant le temps d'accrétion (durée moyenne séparant les arrivées de deux espèces à la surface du grain), de l'ordre du jour pour un milieu de densité  $n = 10^4 \text{ cm}^{-3}$  et de température 10 K (*cf.* chapitre 8). Quand un atome visite un site occupé par une molécule, la probabilité de réaction dépend de la barrière d'activation de la réaction (nulle si l'un des réactants est un radical).

## **B. Scénario chimique de formation d'une étoile de faible masse**

Lors de la formation d'une étoile de type solaire, la chimie est d'abord dominée dans le nuage par des réactions ion-molécule et neutre-neutre (surtout entre radicaux libres) à basse température en phase gazeuse. Pendant la phase de contraction, la densité devient telle que la plupart des constituants gazeux se condensent sur les grains de poussière pour y former un

manteau de glaces. Des réactions peuvent avoir lieu à la surface des grains de poussière, comme par exemple des réactions d'hydrogénation de molécules de CO par des atomes d'hydrogène. Les manteaux de glace entourant les grains sont ensuite évaporés dans les régions les plus internes de l'enveloppe (le « Cœur Chaud »), quand la protoétoile nouvellement formée se met à chauffer son environnement. Les molécules se retrouvent alors libérées dans la phase gazeuse où peut avoir lieu une chimie à haute température ( $\geq 100$  K), produisant des molécules complexes. Néanmoins, beaucoup de questions restent en suspens sur ce scénario chimique. Par exemple, la détection par Cazaux et al. (2003) de molécules complexes formées à partir des molécules évaporées des manteaux des grains dans la partie interne de l'enveloppe (« Cœur Chaud ») de la protoétoile de faible masse IRAS16293–2422 est intrigante car les processus chimiques en phase gazeuse permettant de les synthétiser requièrent de l'ordre de  $10^4$  ans (Charnley et al. 1995), alors que le gaz ne transite dans le Cœur Chaud que pendant une période de  $10^2$  ans avant de s'effondrer sur la protoétoile (Schöier et al. 2002).

Il est donc essentiel de trouver des molécules susceptibles de sonder la chimie qui se produit dans les environnements des protoétoiles. Les molécules deutérées représentent un tel avantage. Elles sont en effet observées en grande abondance dans les régions de formation d'étoiles et sont des outils incomparables pour sonder les régions denses et froides et les processus chimiques qui s'y déroulent (*cf.* partie 1.2).

La présence de molécules doublement deutérées dans l'environnement de protoétoiles de faible masse ( $D_2CO$ , Ceccarelli et al. 1998, *cf.* paragraphe 1.2.1 pour plus de détails), en abondance suffisante pour être détectée, avec un fractionnement de plusieurs ordres de grandeur plus élevé que le rapport D/H cosmique, représente en elle-même une question ouverte qui a motivé les travaux de cette thèse. L'objectif premier de cette thèse est en effet de contraindre les processus de formation des molécules (multiplement) deutérées dans les enveloppes des protoétoiles de faible masse, et de comprendre quels enseignements on peut tirer de la détection de telles molécules sur les conditions physiques régnant dans ces environnements.

Nous détaillons dans la partie suivante les observations de molécules deutérées avant le début de cette thèse et les implications qui découlent de l'analyse de ces observations.

## 1.2 Les molécules deutérées : une clef pour contraindre la chimie

Il est vite apparu que l'étude du fractionnement en deutérium des molécules (*i.e.* du rapport d'abondance entre la molécule deutérée et la molécule hydrogénée) pouvait permettre de contraindre leur processus de formation (en phase gazeuse ou à la surface des grains par exemple), ou si ce processus est connu, les conditions physiques (température, densité) régnant dans le milieu au moment de leur formation. En effet, l'élément deutérium, produit uniquement lors du Big-Bang, et détruit au cœur des étoiles, est sensé être quasiment uniformément réparti dans le milieu interstellaire (à une petite dispersion près :  $D/H = (0,8-2,2) \times 10^{-5}$ , Linsky 2003). L'observation de molécules deutérées abondantes doit donc s'expliquer avec comme hypothèse de

départ un rapport D/H cosmique fixé.

Nous donnons dans cette partie un aperçu (non exhaustif) des différents progrès effectués dans la compréhension du fractionnement des molécules dans le milieu interstellaire depuis une trentaine d'années et jusqu'au début de cette thèse. Nous présentons chronologiquement les différentes avancées observationnelles ainsi que les modèles développés pour expliquer de telles observations, et faisons le point sur l'état des observations et des modèles au commencement de la thèse.

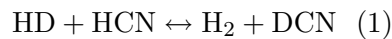
### 1.2.1 Chronologie des découvertes observationnelles et avancées dans la modélisation

#### A. Les premières détections

*DCN, la première molécule deutérée détectée dans le milieu interstellaire*

L'observation du fractionnement moléculaire dans le milieu interstellaire a été initiée par la découverte en 1973 de DCN (cyanure d'hydrogène deutéré) dans le nuage moléculaire d'Orion (Jefferts et al. 1973), confirmée par Wilson et al. (1973). Le fractionnement DCN/HCN de  $6 \times 10^{-3}$  dérivé pour cette molécule apparaissait comme anormalement élevé par rapport au rapport cosmique D/H, à l'époque estimé autour de  $10^{-4}$  (Hoyle & Fowler 1973).

Deux processus ont été proposés pour expliquer cette « anomalie » de fractionnement. Selon Solomon & Woolf (1973), l'enrichissement en molécules deutérées provient de la différence d'énergie de point zéro (énergie de liaison) entre la molécule hydrogénée et son isotope. Cette énergie est plus basse de 861 K pour DCN par rapport à HCN. Un fractionnement important peut donc avoir lieu si la molécule se forme dans un milieu froid. Si le principal réservoir de deutérium est HD, la réaction prépondérante, pour ce qui est du fractionnement, est selon ces auteurs :



(Cette idée sera néanmoins remise en cause par Huntress (1977), du fait de la lenteur de cette réaction, et la deutération sera plutôt produite par réaction avec  $\text{H}_2\text{D}^+$ , cf. plus loin).

La différence d'énergie de point zéro entre  $\text{H}_2$  et HD étant de 405 K, le rapport de l'abondance de DCN à celle de HCN peut s'écrire, à l'équilibre de la réaction (1) :

$$\frac{\text{DCN}}{\text{HCN}} = \frac{\text{HD}}{\text{H}_2} \exp\left(\frac{861 - 405}{T}\right) = \frac{\text{HD}}{\text{H}_2} \exp\left(\frac{456}{T}\right),$$

où T est la température du milieu. Cette réaction (1) ne peut se produire, dans un environnement à basse température, qu'en présence d'un catalyseur, la surface des grains de poussière selon Solomon & Woolf (1973) (rappelons que le travail d'Huntress (1977) remettra en cause ce processus de formation). La différence d'énergie de point zéro entre l'eau et son isotope deutéré étant encore plus extrême (1793 K), ces auteurs prédisent que l'eau doit être énormément frac-

tionnée. Déjà en 1973, les pistes proposées pour mieux comprendre ce phénomène sont d'observer les fractionnements des molécules suivantes : eau ( $\text{H}_2\text{O}$ ), formaldéhyde ( $\text{H}_2\text{CO}$ ), acide isocyanique ( $\text{HNCO}$ ), ammoniac ( $\text{NH}_3$ ), sulfide d'hydrogène ( $\text{H}_2\text{S}$ ) et méthanol ( $\text{CH}_3\text{OH}$ ).

Watson (1973) propose un tout autre processus basé sur les différents écrantages de  $\text{H}_2$  et HD pour expliquer le fractionnement de DCN. En effet, selon cet auteur,  $\text{H}_2$  et HD sont très peu réactifs dans les environnements froids, et seul le deutérium non piégé dans HD pourra être incorporé dans les autres molécules. La molécule  $\text{H}_2$  étant beaucoup plus abondante que HD, son écrantage est plus efficace que pour HD. Le taux de dissociation de HD sera donc plus important que celui de  $\text{H}_2$ , ce qui a pour effet d'augmenter le rapport D/H disponible pour les autres molécules par rapport au rapport cosmique. Un tel mécanisme peut néanmoins seulement expliquer un enrichissement de deux ordres de grandeur, et sera vite écarté par l'observation de nombreuses molécules deutérées très abondantes.

#### *DCN, un moyen de dériver le rapport D/H cosmique ?*

L'observation du fractionnement dans des molécules peu abondantes est vu comme un moyen de déterminer le rapport D/H cosmique, à une période où ce rapport est relativement mal contraint. En effet, avant 1973, l'observation la plus contraignante sur le rapport cosmologique D/H reste la limite supérieure de  $8 \times 10^{-5}$  déterminée dans Cas A (Weinreb 1962). Cesarsky et al. (1973) donnent une limite moins contraignante pour D/H (détection hypothétique) vers le centre galactique de l'ordre de quelques  $10^{-4}$ . Cette détection hypothétique ne semble pas être en contradiction avec les observations de Weinreb (1962) puisque qu'il n'est pas clair que le deutérium est uniformément distribué dans la galaxie.

Ainsi, Watson (1974) déduit une fourchette pour ce rapport entre  $10^{-6}$  et  $10^{-4}$  à partir des observations DCN de Jefferts et al. (1973). Malheureusement cette analyse dépend beaucoup des processus chimiques envisagés (ici des réactions ion-molécule en phase gazeuse) et des énergies impliquées, qui ne sont pas très bien contraintes. Une observation directe des séries de Lyman de H et D vers  $\beta$  Cen avec le satellite Copernicus viendra donner une valeur bien plus précise du rapport D/H cosmique, de  $(1,4 \pm 0,2) \times 10^{-5}$  (Rogerson & York 1973), et la possible détection de deutérium de Cesarsky et al. (1973) vers le centre galactique sera réfutée plus tard par Anantharamaiah & Radhakrishnan (1979) qui ne détectent pas de deutérium avec une limite supérieure de  $\text{D}/\text{H} \leq 5,8 \times 10^{-5}$ .

L'observation de DCN dans plusieurs sources de températures différentes (Penzias et al. 1976) avec peu de variations de fractionnement entre les différents objets est interprétée par Audouze et al. (1976) comme le fait que les simples processus en phase gazeuse évoqués par Solomon & Woolf (1973), très dépendants de la température, ne sont pas aptes à expliquer l'abondance de DCN. En effet, il serait surprenant que les effets de température soient compensés par des rapports élémentaires D/H différents dans les différentes sources. Il est alors suggéré que d'autres réactions en phase gazeuse interviennent, empêchant les réactions citées par Solomon & Woolf (1973) d'atteindre l'équilibre, et que le fractionnement observé soit en fait gouverné plutôt par la



densité électronique, et non pas par la température d'excitation (idée qui sera détaillée plus tard par Guélin et al. (1977) pour l'interprétation d'observations de  $\text{DCO}^+$ ). Une autre possibilité est que la formation de DCN intervienne à la surface des grains, dont la température varie moins d'une source à l'autre que celle du gaz.

Les observations de DCN sur un échantillon de nuages denses situés dans différentes parties de la galaxie (Penzias et al. 1977) apparaissent comme une possibilité de tracer les éventuelles inhomogénéités de D/H à des distances supérieures à 200 parsecs (distances qui ne sont pas sondables par une observation directe par le satellite Copernicus), et de voir si ce rapport est différent entre le centre galactique et les parties plus externes. En particulier, si le deutérium n'a pas seulement une origine cosmologique mais est aussi produit par les étoiles (hypothèse discutée à cette époque (e.g. Ostriker & Tinsley 1975), maintenant réfutée), le rapport DCN/HCN devrait être plus important dans les parties internes de la galaxie riches en métaux. Une faible dispersion du rapport DCN/HCN serait à l'inverse interprétée comme une preuve de l'origine cosmologique du deutérium.

Le centre galactique montre un fractionnement en DCN plus faible que les autres régions, observation qui est interprétée comme le résultat de la destruction du deutérium à l'intérieur des étoiles. La faible variation du rapport DCN/HCN entre les autres sources confirme que le rapport D/H dans les parties externes de la galaxie doit être similaire au rapport « local » de  $(1,8 \pm 0,4) \times 10^{-5}$ , estimé par de nouvelles observations Copernicus (York & Rogerson 1976).

#### *HDO : l'oxygène serait-il essentiellement piégé dans l'eau ?*

La deuxième molécule deutérée détectée dans le milieu interstellaire est l'eau lourde (HDO, Turner et al. 1975). L'observation de la raie  $1_{11}-1_{10}$  dans Orion KL ne permet pas de déterminer directement le fractionnement de l'eau (puisque l'isotope principal  $\text{H}_2\text{O}$  n'est pas observable depuis les télescopes au sol), mais implique que soit l'oxygène est entièrement piégé sous forme d'eau si le rapport HDO/ $\text{H}_2\text{O}$  est de l'ordre du rapport D/H cosmique, soit le rapport HDO/ $\text{H}_2\text{O}$  est grand devant le rapport cosmique.

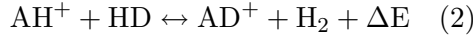
#### *Non détection de HDCO : un indice pour la formation des molécules « complexes » ?*

Alors que les petites molécules interstellaires (telles que HCN et DCN) peuvent être formées en phase gazeuse par des réactions ion-molécule, les processus de formation des molécules plus complexes ne semblent pas évidents. L'idée que l'observation des molécules deutérées doit permettre de contraindre ces processus de formation suit son chemin avec l'étude du formaldéhyde deutéré (HDCO, Watson et al. 1975). La non-détection vers 6 sources avec des limites supérieures  $\text{HDCO}/\text{H}_2\text{CO} \leq 6 \times 10^{-3}$ , valeur identique à celle du fractionnement de DCN observé par Jefferts et al. (1973), est interprétée par Watson et al. (1975) comme la preuve que le formaldéhyde ne se forme pas uniquement par des réactions en phase gazeuse (réactions qui impliqueraient un fractionnement de l'ordre de celui de DCN). Notons que les observations ultérieures de Langer et al. (1979) conduiront à la conclusion inverse (*cf.* paragraphe B.).

$DCO^+$ , un moyen de déterminer la densité électronique et la quantité de CO

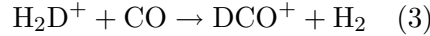
La première détection de  $DCO^+$  a lieu en 1976 (Hollis et al. 1976), suivie par une observation de cette même molécule dans cinq nuages denses (Guélin et al. 1977). Le fractionnement de  $HCO^+$  est un outil puissant pour déterminer la densité électronique, ce qui permet de déduire des propriétés physiques essentielles des nuages. L'état d'ionisation du gaz interstellaire renseigne en effet sur son couplage au champ magnétique et donc sur le freinage de l'effondrement gravitationnel par diffusion ambipolaire.

Les réactions exothermiques d'échange isotopique avec HD du type :



ont été étudiées (à 300 K) pour les molécules  $H_3^+$ ,  $CH_3^+$ ,  $HCO^+$ ,  $H_2CN^+$ ,  $H_3O^+$ , et  $NH_4^+$  (Huntress 1977). Ce processus de fractionnement ne semble jouer un rôle que pour  $H_3^+$  et  $CH_3^+$ , les réactions étant trop lentes dans le cas des autres molécules pour pouvoir concurrencer la recombinaison électronique.

$DCO^+$  est donc principalement produit par la réaction :



et l'augmentation de  $DCO^+$  reflète celle de  $H_2D^+$  (Guélin et al. 1982).

A basse température, l'équilibre de la réaction (2) pour  $AH^+ = H_3^+$  peut être significativement déplacé vers la droite (la réaction inverse étant endothermique). Le rapport  $H_2D^+/H_3^+$  peut alors devenir très grand devant  $HD/H_2$ .

La principale réaction de destruction de  $H_2D^+$  est la recombinaison avec les électrons, ainsi que des réactions avec CO, O, ... A l'équilibre (*i.e.* en égalisant les taux de formation et de destruction de  $H_2D^+$ ), le fractionnement de  $H_3^+$  s'exprime (Guélin et al. 1982) :

$$\frac{H_2D^+}{H_3^+} = \frac{k_1 x(HD)}{k_e x_e + k_1 \exp(-\Delta E/kT) + \sum k_i x_i},$$

où le numérateur est le taux de formation de  $H_2D^+$  par la réaction (2), et les termes du dénominateur sont les taux de destruction de  $H_2D^+$  par recombinaison électronique, réaction retour de (2) et réactions avec d'autres espèces  $i$  respectivement.

Si on suppose que  $DCO^+$  est formé principalement par la réaction (3), qui a un rapport de branchement de 2 : 1 en faveur de la production de  $HCO^+$ , et que les taux de destruction de  $HCO^+$  et de  $DCO^+$  sont identiques, on a, en négligeant la formation de  $HCO^+$  par réaction de  $H_2D^+$  avec CO devant la formation par  $H_3^+$  :

$$\begin{aligned} \frac{d(HCO^+)}{dt} &= k_{H_3^+} x(H_3^+) x(CO) - \tau_{destr} x(HCO^+) \\ \frac{d(DCO^+)}{dt} &= \frac{1}{3} k_{H_2D^+} x(H_2D^+) x(CO) - \tau_{destr} x(DCO^+) \end{aligned}$$

A l'équilibre le fractionnement de  $\text{HCO}^+$  s'écrit donc :

$$\frac{\text{DCO}^+}{\text{HCO}^+} = \frac{\frac{1}{3} k_{\text{H}_2\text{D}^+} x(\text{H}_2\text{D}^+)}{k_{\text{H}_3^+} x(\text{H}_3^+)} = 0,3 \frac{\text{H}_2\text{D}^+}{\text{H}_3^+}$$

d'après les valeurs de  $k_{\text{H}_3^+} = 1,8 \times 10^{-9} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$  et de  $k_{\text{H}_2\text{D}^+} = 1,6 \times 10^{-9} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$  (Guélin et al. 1982).

Une limite inférieure sur le fractionnement de  $\text{HCO}^+$  permet donc de déterminer une limite supérieure sur la densité électronique et sur l'abondance de CO (paramètre important dans la détermination de la masse des nuages).

L'observation de  $\text{DCO}^+$  dans des nuages moléculaires denses (Wootten et al. 1982) suggère que  $\text{HCO}^+$  n'est pas l'ion le plus abondant dans les régions très denses, au profit de  $\text{H}_3^+$  et  $\text{H}_2\text{D}^+$ . L'idée que le CO peut être déplété dans les régions denses fait surface.

## B. Les molécules deutérées comme sonde des processus chimiques : réactions en phase gazeuse versus réactions sur les grains.

### *La prise de conscience*

Au fur et à mesure que les observations directes du rapport D/H s'améliorent et que l'origine des molécules deutérées est un peu mieux comprise, il devient de plus en plus douteux de pouvoir contraindre le rapport D/H par observation des molécules secondaires deutérées. En effet, la forte dépendance de la deutération en fonction de la température du nuage rend difficile la détermination du rapport élémentaire D/H. Par contre, le fractionnement en deutérium permet de sonder les processus de formation des molécules, en considérant le rapport D/H cosmique comme fixé.

La détection de DNC par Snell & Wootten (1977) vient montrer la corrélation entre le fractionnement de DNC et  $\text{DCO}^+$  (confirmant leur formation commune à partir de  $\text{H}_2\text{D}^+$ ), mais aussi les variations du fractionnement entre les nuages de différentes températures. La détection de  $\text{N}_2\text{D}^+$  (Snyder et al. 1977) dans L134N, avec un rapport de fractionnement similaire à celui de  $\text{DCO}^+$ , est un argument supplémentaire en faveur de la formation de ces molécules à partir de  $\text{H}_2\text{D}^+$ . La limite supérieure assez faible sur l'abondance des électrons vient remettre en cause la possibilité que le champ magnétique soutienne efficacement le nuage contre l'effondrement.

En 1978, la détection d'ammoniac deutéré  $\text{NH}_2\text{D}$  (Turner et al. 1978; Rodriguez Kuiper et al. 1978) est intrigante car son fractionnement semble plus important que toutes les autres molécules observées jusqu'à présent. Il s'avèrera finalement que les transitions observées sont polluées par des transitions de méthanoate de méthyle ( $\text{CH}_3\text{OCHO}$ , Ellder et al. 1980), et que le fractionnement a donc été surestimé. La première détection non ambiguë de  $\text{NH}_2\text{D}$  n'interviendra que plus tard dans plusieurs nuages moléculaires (Olberg et al. 1985). Son fractionnement est similaire à celui des autres molécules, sauf dans TMC1, où le fractionnement des molécules azotées (contenant une liaison N–D) est plus faible que celui des molécules carbonées. Les molécules

carbonées étant très abondantes dans ce nuage, cette observation s'explique certainement par le fait que la liaison C–H est plus énergétique que la liaison N–H. Le deutérium est incorporé préférentiellement dans la molécule la plus stable.

Après plusieurs recherches infructueuses (Watson et al. 1975; Angerhofer et al. 1978), le formaldéhyde deutéré (HDCO) est détecté par Langer et al. (1979). La similitude du fractionnement observé par rapport aux autres molécules deutérées connues est alors interprétée comme un argument en faveur de la formation du formaldéhyde par réactions ion-molécule en phase gazeuse plutôt que sur les grains.

La détection de molécules plus complexes dans les nuages interstellaires pose le problème de leur formation. En particulier, il existe plusieurs scénarios de formation possibles pour les chaînes carbonées du type cyanopolyynes ( $\text{HC}_{2n+1}\text{N}$ ) : formation par chimie sur les grains, par dissociation de molécules plus grosses, ou par réactions ion-molécule en phase gazeuse. L'observation de  $\text{DC}_3\text{N}$  (Langer et al. 1980) avec un fractionnement plus important que celui de  $\text{HCO}^+$  est interprétée comme un argument en faveur du troisième scénario. Par contre,  $\text{DC}_5\text{N}$  est détecté en 1981 simultanément par MacLeod et al. (1981) et Schloerb et al. (1981), et son fractionnement est compatible avec une formation à la surface des grains de  $\text{HC}_5\text{N}$  puis deutération dans le gaz par réaction avec  $\text{H}_2\text{D}^+$ . Cependant, la chimie sur les grains entraîne un fractionnement en deutérium des molécules provenant du fractionnement atomique dans le gaz qui accrète sur le grain (idée qui sera développée par Tielens en 1983) qui n'est pris en compte dans aucun de ces travaux, et les processus décrits par Tielens (1983) sur les grains ne peuvent être écartés par ces observations.

#### *L'avènement des modèles de chimie pour expliquer la deutération*

Les années 1980–1990 vont être particulièrement riches pour ce qui est du développement de modèles détaillés de chimie en phase gazeuse (comprenant des centaines voire des milliers de réactions) et de chimie sur les grains.

Tielens (1983) présente une étude détaillée sur le fractionnement produit à la surface des grains. L'enrichissement en deutérium dans les molécules provient à la fois d'un rapport D/H *atomique* en phase gazeuse grand devant le rapport cosmique (c'est en effet le rapport atomique qui importe puisque ce sont les atomes d'hydrogène et de deutérium qui accrètent sur les grains qui vont réagir avec les autres espèces telles que CO, O, ...), et de réactions d'abstractions d'hydrogène sur  $\text{H}_2\text{CO}$ , le ramenant à HCO et permettant de former HDCO. Cette théorie est susceptible d'expliquer les forts fractionnements de HDCO observés par Langer et al. (1979). Le débat entre processus en phase gazeuse et sur les grains ne fait que commencer...

Sur la suggestion de Tielens (1983) que le rapport D/H *atomique* est certainement amplifié en phase gazeuse dans les environnements froids, Dalgarno & Lepp (1984) ajoutent les réactions de fractionnement impliquant le deutérium atomique dans les processus de chimie en phase gazeuse.

En 1988, un modèle de chimie de Cœur Chaud est développé par Brown et al. (1988). Ce

modèle comprend trois phases : une première étape représente la chimie en phase gazeuse dans le nuage en effondrement, suivie par une phase d'accrétion comprenant des réactions sur les grains de poussière puis une phase de chimie à haute température en phase gazeuse après l'évaporation du manteau des grains causée par le chauffage par la protoétoile nouvellement formée. La chimie en phase gazeuse des phases 1 et 3 prend en compte 91 espèces liées par 703 réactions. Le deutérium n'est pas inclus explicitement dans le modèle, mais Brown et al. (1988) concluent par une analyse qualitative que le fractionnement obtenu dans le gaz lors de la première phase n'est pas suffisant pour expliquer l'abondance de  $\text{NH}_2\text{D}$  observée dans le Cœur Chaud d'Orion (Walmsley et al. 1987), et qu'un fractionnement doit donc apparaître sur les grains.

La chimie du deutérium est explicitement introduite dans le modèle d'interaction gaz-grain un an plus tard (Brown & Millar 1989a). Les conclusions qualitatives du modèle précédent (Brown et al. 1988) se trouvent vérifiées. L'abondance de  $\text{NH}_2\text{D}$  peut être expliquée en incluant des réactions à la surface des grains avec le deutérium atomique. La formation des molécules multiplement deutérées (eau, ammoniac et méthane) est incluse peu après (Brown & Millar 1989b). Cette étude prédit la détectabilité de  $\text{NHD}_2$  dans les régions de Cœur Chaud.

Les modèles de chimie en phase gazeuse pure deviennent de plus en plus détaillés, prenant en compte de plus en plus d'espèces chimiques et de réactions. Le modèle de Millar et al. (1989) décrit la chimie de 225 espèces liées par près de 1700 réactions. Ce modèle confirme que la deutération moléculaire est initiée à basse température majoritairement par l'ion  $\text{H}_2\text{D}^+$ , et par l'ion  $\text{CH}_2\text{D}^+$  à plus haute température.

L'effet d'une onde de choc sur la deutération est étudiée pour la première fois par Pineau de Forêts et al. (1989). Leur modèle contient environ 270 réactions, suffisantes pour l'étude de la deutération des molécules considérées. Les fractionnements des ions  $\text{H}_2\text{D}^+$  et de  $\text{DCO}^+$  sont dramatiquement réduits par le passage de l'onde de choc, par rapport à leur valeur dans le nuage froid. Par contre le fractionnement de l'eau reste gelé à sa valeur pré-choc car l'énergie d'activation de la réaction  $\text{HDO} + \text{H} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{D}$  est suffisamment élevée pour inhiber cette réaction, même aux hautes températures du choc.

Une nouvelle étude de la deutération dans les Cœurs Chauds (Rodgers & Millar 1996) montre que le fractionnement des molécules sur les grains est conservé dans la phase gazeuse pendant environ  $10^4$  ans après leur évaporation puisque les molécules deutérées et hydrogénées sont détruites avec la même constante de temps. Les observations en phase gazeuse peuvent donc permettre de contraindre directement le fractionnement sur les grains.

### *Les tests observationnels*

A la suite de l'étude de Tielens (1983) sur la chimie à la surface des grains, un grand nombre d'observations vont être interprétées comme le résultat d'une telle chimie. En effet, les observations de molécules deutérées dans des environnements chauds tels que Orion-KL vont se multiplier. La température actuelle du gaz est bien trop élevée pour que ces molécules deutérées y soient produites, et elles sont donc certainement des fossiles d'une période plus froide (avant que

les protoétoiles ne chauffent l'environnement), et ont été stockées sur les grains puis évaporées peu avant d'être observées. Cette interprétation est avancée entre autres pour la présence dans Orion-KL de  $\text{NH}_2\text{D}$  (Walmsley et al. 1987),  $\text{HDO}$  (Plambeck & Wright 1987; Henkel et al. 1987; Jacq et al. 1988),  $\text{CH}_3\text{OD}$  (première détection, Mauersberger et al. 1988),  $\text{DCN}$  (Mangum et al. 1991),  $\text{CH}_2\text{DOH}$  (première détection, Jacq et al. 1993) et de la première molécule doublement deutérée détectée  $\text{D}_2\text{CO}$  (Turner 1990). Ces exemples ne se veulent bien sûr pas exhaustifs.

Par contre, d'autres molécules sont, elles, expliquées par les modèles de chimie en phase gazeuse. C'est le cas par exemple de  $\text{CCD}$  détecté dans Orion-KL (Combes et al. 1985),  $\text{C}_3\text{HD}$  (détecté dans un échantillon de nuages froids, Bell et al. 1986; Gérin et al. 1987; Bell et al. 1988),  $\text{C}_4\text{D}$  (Turner 1989), et des molécules suivantes détectées en particulier dans le nuage sombre TMC-1 :  $\text{CH}_2\text{DCCH}$  (Gérin et al. 1992),  $\text{DC}_3\text{N}$  (Langer et al. 1980; Howe et al. 1994),  $\text{DCO}^+$  (Guélin et al. 1982; Butner et al. 1995; Anderson et al. 1999),  $\text{HDCS}$  (Minowa et al. 1997).

### C. Le coup de théâtre des molécules doublement deutérées

Au début des années 1990, les modèles de chimie parviennent à expliquer dans l'ensemble relativement bien l'abondance des molécules simplement deutérées détectées. La première molécule doublement deutérée détectée dans Orion ( $\text{D}_2\text{CO}$ , Turner 1990) va cependant relancer les questions. En effet, les modèles de chimie en phase gazeuse n'incluaient pas encore les molécules doublement deutérées, et personne ne pensait qu'elles pouvaient être suffisamment abondantes pour rendre leur détection possible.

La détection de  $\text{D}_2\text{CO}$  par Turner (1990), avec un rapport de fractionnement de  $3 \times 10^{-3}$  est attribuée à la formation de la molécule sur les grains selon les processus décrits par Tielens (1983). L'explication est satisfaisante puisque la température est suffisante pour évaporer les manteaux des grains.

Bizarrement, cette découverte ne va pas susciter d'autres recherches de molécules doublement deutérées. Il faudra attendre 1998 pour que la frénésie entourant l'étude de la deutération trouve un nouvel élan, avec la découverte de  $\text{D}_2\text{CO}$  vers IRAS16293–2422 avec un fractionnement de 5% (Ceccarelli et al. 1998; Loinard et al. 2000), et l'étude de son extension spatiale (Ceccarelli et al. 2001). Les recherches de molécules multiplement deutérées s'accroissent alors, mettant à mal les modèles de chimie.

La détection de la deuxième molécule doublement deutérée,  $\text{NHD}_2$ , dans le nuage dense L134N (Roueff et al. 2000) pose problème aux modélisateurs. En effet, il n'y a *a priori* pas dans ce nuage de source de chauffage permettant d'évaporer les manteaux des grains (contrairement au cas d'Orion, Turner 1990). De plus, le taux d'ionisation par les rayons cosmiques déduit par les observations  $\text{HCO}^+$  et  $\text{DCO}^+$  semble trop faible pour désorber efficacement les molécules des manteaux. Roueff et al. (2000) suggèrent donc que la formation de  $\text{NHD}_2$  doit se produire dans le gaz, et qu'il faut donc se pencher sur les modèles de chimie et y inclure les molécules doublement deutérées.

L'ajout d'une déplétion de CO dans les modèles de phase gazeuse (Roberts & Millar 2000a,b), qui a pour effet de permettre plus de transfert de deutérium depuis le réservoir HD vers  $\text{H}_2\text{D}^+$ , va permettre de reproduire ces observations d'ammoniac doublement deutéré. En effet, le CO est l'un des principaux destructeurs de  $\text{H}_2\text{D}^+$  et de  $\text{H}_3^+$ . Les déplétions requises sont tout de même beaucoup plus grandes que les déplétions observées dans ces environnements, et le mystère de la deutération reste entier au début des années 2000.

## 1.2.2 Etat des observations et des modèles en 2001

### Le paysage observationnel

TAB. 1.1 – Observations du fractionnement en deutérium de diverses molécules (en 2001)

Molécule	Comètes	IRAS 16293–2422	Cœur Chaud d'Orion	L134N
$\text{DCO}^+/\text{HCO}^+$	-	0.0086 <sup>e</sup>	-	0.035 <sup>n*</sup> –0.18 <sup>r</sup>
$\text{N}_2\text{D}^+/\text{N}_2\text{H}^+$	-	-	-	0.12 <sup>n*</sup> –0.35 <sup>r</sup>
$\text{HDO}/\text{H}_2\text{O}$	0.0003 <sup>a,b,c</sup>	$\geq 0.01^e$	0.0005–0.002 <sup>h</sup>	-
$\text{DCN}/\text{HCN}$	0.002 <sup>d</sup>	0.01 <sup>e</sup>	0.001 <sup>m</sup> –0.005 <sup>i</sup>	0.05 <sup>n</sup>
$\text{HDCO}/\text{H}_2\text{CO}$	-	0.15 <sup>f</sup>	0.14 <sup>g</sup>	0.068 <sup>n</sup>
$\text{CH}_2\text{DOH}/\text{CH}_3\text{OH}$	-	-	0.04 <sup>j</sup>	-
$\text{CH}_3\text{OD}/\text{CH}_3\text{OH}$	-	-	0.01–0.06 <sup>k</sup>	$\leq 0.032^{\text{n}}$
$\text{NH}_2\text{D}/\text{NH}_3$	-	0.1 <sup>e</sup>	0.003 <sup>l</sup>	0.057 <sup>n</sup> –0.10 <sup>r</sup>
$\text{D}_2\text{CO}/\text{H}_2\text{CO}$	-	0.05 <sup>q</sup>	0.003 <sup>g</sup>	-
$\text{ND}_2\text{H}/\text{NH}_3$	-	-	-	0.005 <sup>p</sup>

<sup>a</sup>Balsiger et al. (1995)

<sup>b</sup>Bockelée-Morvan et al. (1998)

<sup>c</sup>Meier et al. (1998b)

<sup>d</sup>Meier et al. (1998a)

<sup>e</sup>van Dishoeck et al. (1995).  $\text{H}_2\text{O}$  est estimé à partir d'une limite supérieure sur  $\text{H}_3\text{O}^+$ .

<sup>f</sup>Loinard et al. (2000)

<sup>g</sup>Turner (1990). Emission provenant du Compact Ridge, et non du Cœur Chaud.

<sup>h</sup>Gensheimer et al. (1996)

<sup>i</sup>Mangum et al. (1991)

<sup>j</sup>Jacq et al. (1993)

<sup>k</sup>Mauersberger et al. (1988)

<sup>l</sup>Walmsley et al. (1987). L'étude de Turner (1990) rediscute néanmoins l'origine de l'émission de  $\text{NH}_2\text{D}$  comme provenant du Compact Ridge.

<sup>m</sup>Schilke et al. (1992)

<sup>n</sup>Turner (2001), \* nouveaux rapports déterminés à partir d'observations des isotopes  $\text{N}^{15}\text{NH}^+$ ,  $^{15}\text{NNH}^+$ ,  $\text{H}^{13}\text{CO}^+$ ,  $\text{HC}^{18}\text{O}^+$ .

<sup>p</sup>Roueff et al. (2000)

<sup>q</sup>Loinard et al. (2000)

<sup>r</sup>Tiné et al. (2000)

Les molécules deutérées représentent un outil privilégié pour sonder les régions froides et denses de formation stellaire. Elles sont observées en effet principalement dans les nuages moléculaires, les régions de formation d'étoiles (massives ou de faible masse) et leur observation dans les comètes peut aussi permettre de faire le rapprochement entre la matière les constituant

et la matière interstellaire.

Nous synthétisons dans ce paragraphe les fractionnements de différentes molécules deutérées observées au début de cette thèse dans quatre types d'environnement (comètes, Cœur Chaud d'Orion (protoétoiles massives), IRAS 16293–2422 (protoétoile de faible masse), nuage dense). Les résultats sont présentés dans la Table 1.1.

Au début de cette thèse, seules deux molécules deutérées avaient été observées dans les comètes. HDO a été détecté dans trois comètes (Halley, Hyakutake et Hale-Bopp), et présente un fractionnement similaire de  $3 \times 10^{-4}$  dans les trois sources (Balsiger et al. 1995; Bockelée-Morvan et al. 1998; Meier et al. 1998b). DCN n'a été observé que dans Hale-Bopp, avec un fractionnement de  $2 \times 10^{-3}$  (Meier et al. 1998a).

IRAS 16293–2422 est une protoétoile de faible masse de la région de formation d'étoiles  $\rho$  Oph. Les fractionnements de diverses molécules observées vers cette source sont reportés dans la Table 1.1. D'autres Cœurs Chauds de faible masse ont été étudiés par Roberts et al. (2002). Les fractionnements de HDCO observés semblent être un peu plus bas (0.05-0.07) que pour IRAS16293–2422, mais il faut remarquer que les observations ont été faites avec un lobe plus gros (télescope de 12m du Kitt Peak) que les observations d'IRAS 16293 (télescope de 30m de l'IRAM). Une émission étendue de  $\text{H}_2\text{CO}$  pourrait donc expliquer la « dilution » obtenue.

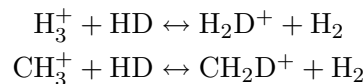
Orion est une région de formation d'étoiles massives, lieu de la première détection d'une molécule doublement deutérée ( $\text{D}_2\text{CO}$ , Turner 1990).

L134N est un nuage sombre, sans formation d'étoile, considéré comme représentatif des nuages sombres riches en oxygène (avec la présence de SO,  $\text{SO}_2$ , NO, ...). C'est donc une bonne référence pour tester les modèles de chimie (Pagani et al. 2002).

## Les modèles en 2001

### *Les modèles de chimie en phase gazeuse*

Au début des années 2000, les modèles de chimie en phase gazeuse sont devenus de plus en plus perfectionnés, impliquant jusqu'à  $\sim 300$  espèces liées par  $\sim 5300$  réactions (Roberts & Millar 2000b). L'abondance des molécules doublement deutérées ( $\text{D}_2\text{CO}$  et  $\text{NHD}_2$ ) peut être expliquée sans avoir recours à la chimie sur les grains, à condition que le CO soit très déplété ( $\sim 30\%$ ; CO est en effet le principal destructeur de  $\text{H}_3^+$  et  $\text{H}_2\text{D}^+$ ). Le deutérium est incorporé dans les molécules  $\text{H}_2\text{D}^+$  et  $\text{CH}_2\text{D}^+$  par les réactions suivantes :



puis propagé aux autres molécules par réactions ion-molécule avec  $\text{H}_2\text{D}^+$  et  $\text{CH}_2\text{D}^+$ .

### *Les modèles de chimie sur les grains*

En 2001, il existe deux types de modèles de chimie sur les grains : les modèles basés sur une méthode de résolution de Monte-Carlo, et les modèles basés sur la résolution des équations aux



dérivées temporelles régissant la formation et la destruction de chaque molécule (*cf.* chapitre 8 pour plus de détails). L'avantage de cette deuxième méthode est le couplage facile avec les modèles de chimie en phase gazeuse (le formalisme étant le même), mais son inconvénient est qu'elle traite incorrectement les cas où le nombre de molécules sur le grain est faible (0, 1, 2...).

Les modèles de Monte-Carlo sont eux très difficiles à coupler aux modèles de chimie dans le gaz. L'accord avec les observations en phase gazeuse ne peut donc être que qualitatif, comme c'est le cas par exemple pour le modèle de Charnley et al. (1997), pour reproduire le fractionnement de CH<sub>2</sub>DOH et CH<sub>3</sub>OD dans le Cœur Chaud d'Orion (Jacq et al. 1993). Le modèle de chimie sur les grains ne suffit pas à expliquer les fractionnements observés, mais doit être complété de processus en phase gazeuse après désorption des molécules pour interpréter le rapport CH<sub>2</sub>DOH/CH<sub>3</sub>OD  $\sim$  1 différent de 3, valeur attendue pour une formation sur les grains.

### 1.3 Objectifs de cette thèse

Ma thèse se propose de répondre à la question de la formation des molécules deutérées observées en grande abondance dans les enveloppes des protoétoiles de faible masse. En particulier, elle vise à comprendre la présence des molécules doublement deutérées dans ces environnements (D<sub>2</sub>CO, Ceccarelli et al. 1998), et à comprendre quels enseignements on peut tirer de l'observation de molécules multiplement deutérées sur les processus chimiques et physiques qui interviennent dans ces environnements.

La double deutération du formaldéhyde observée sur IRAS16293–2422 (Ceccarelli et al. 1998) semble provenir de processus de chimie sur les grains, par deutérations successives de CO. Dans cette théorie, les étapes suivantes d'hydrogénation et de deutération mènent au méthanol, et nous avons donc décidé d'étudier la deutération du méthanol dans les enveloppes des protoétoiles de faible masse, avec pour but de mieux contraindre la chimie sur les grains. Ces études font l'objet des chapitres 3 et 4. Une autre méthode a été envisagée pour contraindre la deutération par réactions sur les grains : l'observation du fractionnement directement en phase solide de la molécule la plus abondante dans les glaces (H<sub>2</sub>O). Cette étude est présentée dans le chapitre 5. Le résultat de ces observations montre que le fractionnement de H<sub>2</sub>O en phase solide est anormalement bas par rapport au fractionnement du méthanol en phase gazeuse. Nous avons en conséquence observé et modélisé l'émission de HDO en phase gazeuse sur la protoétoile IRAS16293–2422, pour contraindre la relation entre deutération sur les grains et dans le gaz. Cette étude fait l'objet du chapitre 6. Cette analyse confirme la sous-deutération de l'eau par rapport au méthanol et au formaldéhyde. Un modèle d'émission théorique d'HDO a été étudié pour déterminer quelles transitions permettent de mieux contraindre les conditions physiques dans les enveloppes des protoétoiles et si l'utilisation d'Herschel-HIFI est indispensable. Cette étude fait l'objet du chapitre 7. Enfin, un modèle de chimie sur les grains a été développé pour comprendre les causes des variations de deutération observées entre les molécules (méthanol et eau en particulier). Il est présenté dans le chapitre 8.

Première partie

# Le fractionnement du méthanol et du formaldéhyde



## Chapitre 2

# La spectroscopie moléculaire

### Sommaire

---

<b>2.1</b>	<b>Introduction</b>	<b>35</b>
<b>2.2</b>	<b>Spectre de rotation des molécules diatomiques</b>	<b>36</b>
<b>2.3</b>	<b>Spectre de rotation des molécules polyatomiques</b>	<b>37</b>
2.3.1	Toupies symétriques	38
2.3.2	Toupies asymétriques	39
<b>2.4</b>	<b>Particularités du méthanol</b>	<b>41</b>
2.4.1	CH <sub>3</sub> OH, CH <sub>3</sub> OD, CD <sub>3</sub> OH et CD <sub>3</sub> OD	42
2.4.2	CH <sub>2</sub> DOH, CH <sub>2</sub> DOD, CHD <sub>2</sub> OD et CHD <sub>2</sub> OH	43
<b>2.5</b>	<b>Calcul approché des fréquences d'une molécule : exemple de D<sub>2</sub>H<sup>+</sup></b>	<b>45</b>
2.5.1	Intérêt scientifique	45
2.5.2	Méthode	45

---

## 2.1 Introduction

La spectroscopie est un outil incomparable pour étudier la chimie du milieu interstellaire. Les fréquences d'absorption ou d'émission d'une molécule dépendent de sa géométrie, de sa structure et de son état physique (phase gazeuse ou solide). Le mouvement des électrons dans les atomes et les molécules produit un spectre dit « électronique » dans le domaine de longueur d'onde optique et ultraviolet. Les mouvements de vibration des atomes dans une molécule, plus lents, donnent eux naissance à un spectre dans le domaine infrarouge. La rotation globale des molécules autour de leur centre de masse, encore plus lente, donne lieu à un spectre dont les fréquences caractéristiques se retrouvent dans le domaine (sub)millimétrique et radio (Figure 2.1). Ce sont ces spectres de rotation que les Astronomes étudient le plus souvent pour déduire les conditions physiques et chimiques du milieu interstellaire.

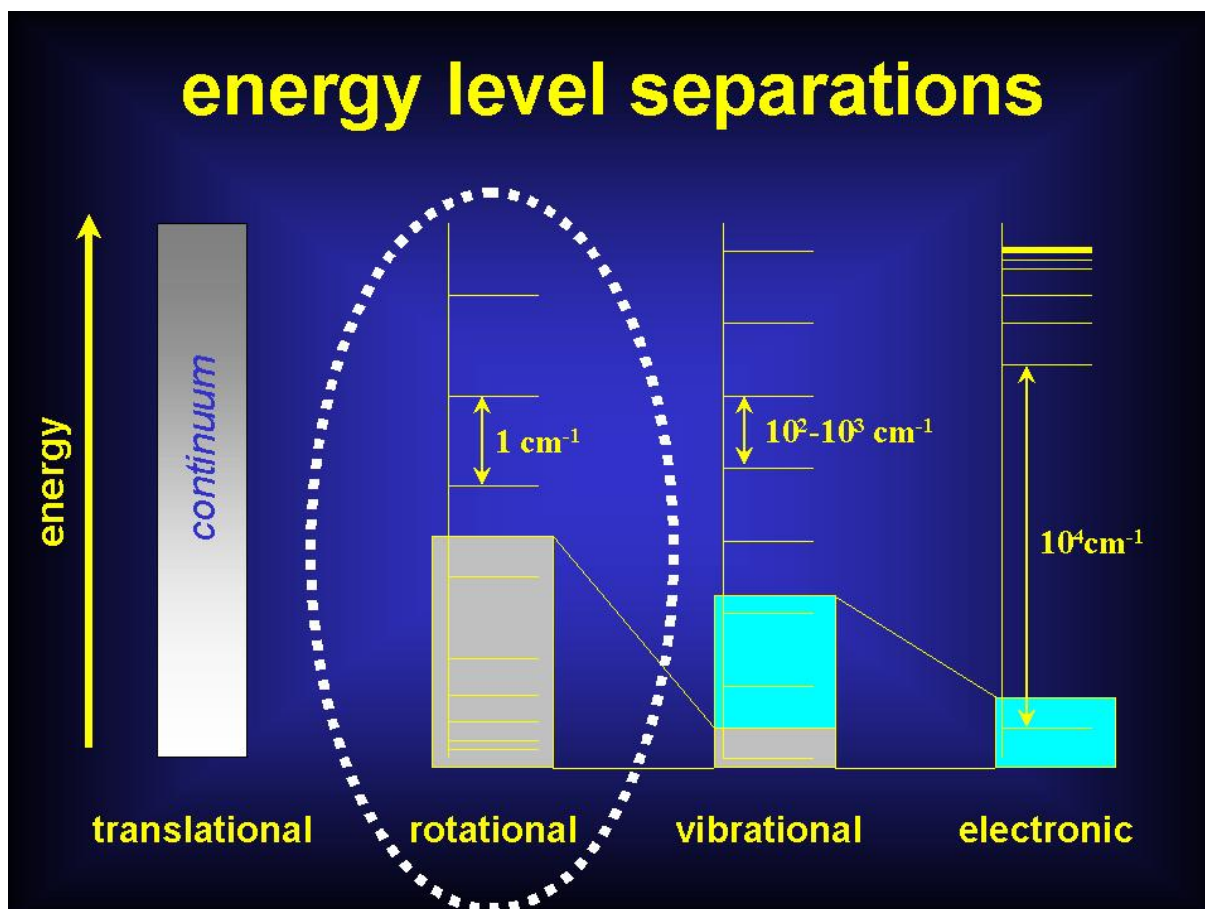


FIG. 2.1 – Séparations typiques entre les niveaux électroniques, vibrationnels et rotationnels d'une molécule (source : <http://www.achem.ic.ac.uk/demello/teaching/l3/index.htm>)

Loin de vouloir concurrencer des ouvrages reconnus et complets tels que les ouvrages de spectroscopie moléculaire de Townes & Schawlow (1975) ou de Gordy & Cook (1984), nous donnons dans ce chapitre quelques modestes bases de la spectroscopie rotationnelle afin de mieux comprendre les processus physiques à la base des observations de cette thèse. Pour un traitement plus détaillé, on se reportera bien entendu aux deux ouvrages de référence cités ci-dessus.

Nous résumons dans la partie 2.2 le cas des molécules diatomiques, puis dans la partie 2.3 le cas des molécules polyatomiques, symétriques et asymétriques. Nous consacrons la partie 2.4 au cas du méthanol et de ses isotopes deutérés, qui ont fait l'objet d'une grande partie des observations de cette thèse.

## 2.2 Spectre de rotation des molécules diatomiques

Dans l'hypothèse du rotateur rigide (c'est-à-dire quand la distance entre les deux atomes est fixée, ou encore que les deux atomes ne vibrent pas l'un par rapport à l'autre), le Hamiltonien

de rotation pour une molécule diatomique s'écrit :

$$H_{\text{rot}} = \frac{L^2}{2I}$$

où  $L$  est le moment cinétique de la molécule et  $I$  son moment d'inertie. La résolution de l'équation de Schrödinger  $H_{\text{rot}}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$  en coordonnées polaires conduit aux états propres  $|\psi\rangle = |J, M\rangle$  tels que  $\hbar^2 J(J+1)$  ( $J$  entier positif) est la norme au carré de  $L$ , et  $M\hbar$  la projection du moment cinétique sur l'axe  $z$  ( $-J \leq M \leq J$ ). L'énergie d'un tel état  $|J, M\rangle$  ne dépend que de  $J$  et vaut  $\frac{\hbar^2 J(J+1)}{2I}$ .

Tous les états  $|J, M\rangle$  ( $J$  fixé et  $-J \leq M \leq J$ ) ont donc même énergie et l'on dit que le niveau d'énergie  $E_J$  a une dégénérescence de  $2J+1$ .

Les fréquences de transition entre deux niveaux d'énergie successifs sont de la forme  $\nu = \frac{E_{J+1} - E_J}{h} = \frac{\hbar(J+1)}{2\pi I} = 2B(J+1)$  où  $B = \frac{\hbar}{4\pi I}$  est une constante ne dépendant que de la géométrie de la molécule et de la nature des atomes la constituant.

Les valeurs typiques de masse des molécules étant de l'ordre de 10 à 100 uma, et les valeurs typiques de liaison entre atomes de l'ordre de 1 Å, le facteur  $B$  est de l'ordre de  $10^{10}$  à  $10^{11}$  Hz, ce qui implique que les transitions purement rotationnelles sont à chercher dans l'infrarouge lointain et le domaine millimétrique.

Bien que les molécules diatomiques se conforment en général bien à l'approximation du rotateur rigide, des mesures spectroscopiques précises révèlent certaines déviations par rapport à cette approximation. En effet, par exemple, plus le nombre quantique  $J$  est grand, plus la molécule tourne vite. Le moment d'inertie  $I$  s'en trouve alors augmenté par distorsion centrifuge. Plus généralement, les atomes vibrent l'un par rapport à l'autre. Un traitement quantique correct doit alors prendre en compte la distance variable entre les noyaux ainsi que son influence sur la structure électronique. Les électrons étant beaucoup plus légers que les noyaux mais étant soumis aux mêmes champs électriques, leur mouvement est beaucoup plus rapide que celui des noyaux et on peut le traiter en considérant dans un premier temps la distance  $r$  fixe entre les noyaux,  $r$  devenant un paramètre du problème. Cette approximation porte le nom d'approximation de Born-Oppenheimer. Seul le niveau électronique fondamental est en général important en spectroscopie millimétrique. Le mouvement des noyaux est ensuite résolu connaissant l'énergie potentielle de la molécule (créée par les électrons et les noyaux) en fonction de  $r$ . L'énergie de chaque niveau rovibrationnel contient alors, en plus du terme de rotateur rigide, un terme de distorsion centrifuge ainsi que d'autres termes provenant du mouvement de vibration des noyaux. Le traitement quantique détaillé peut être consulté dans l'ouvrage de Townes & Schawlow (1975).

## 2.3 Spectre de rotation des molécules polyatomiques

Les molécules polyatomiques linéaires se traitent de façon similaire aux molécules diatomiques (avec toutefois un degré de complication supplémentaire en ce qui concerne les vibrations

atomiques), nous traiterons ici directement le cas des molécules non linéaires.

Dans le cas d'une molécule polyatomique non linéaire, l'énergie rotationnelle s'écrit, selon les trois axes principaux a, b, et c :

$$E_{\text{rot}} = \frac{1}{2} \left( \frac{J_a^2}{I_a} + \frac{J_b^2}{I_b} + \frac{J_c^2}{I_c} \right)$$

où  $J_i = I_i \omega_i$  est la composante du moment angulaire sur l'axe i.

Par convention, les trois axes sont nommés tels que  $I_a \leq I_b \leq I_c$  (l'axe c est donc défini comme l'axe autour duquel le moment d'inertie de la molécule est maximum, et a comme l'axe autour duquel son moment d'inertie est minimum).

### 2.3.1 Toupies symétriques

Dans le cas où deux moments d'inertie au moins sont égaux, on a affaire à une molécule dite « toupie symétrique » (« symmetric top »). Le traitement quantique de cette classe de molécules est plus aisé que le cas général car l'expression de l'énergie peut être simplifiée, et l'on réduit d'un les nombres quantiques nécessaires pour décrire l'état rotationnel de la molécule.

#### Cas de la toupie symétrique prolata

C'est le cas des molécules pour lesquelles  $I_a < I_b = I_c$ . Ces molécules sont allongées (molécules de type « cigare », comme par exemple  $\text{CH}_3\text{CN}$ ).

Pour ces molécules,

$$E_{\text{rot}} = \frac{1}{2} \left( \frac{J^2}{I_b} - \frac{J_a^2}{I_b} + \frac{J_a^2}{I_a} \right) = \frac{1}{2} \left( J_a^2 \left( \frac{1}{I_a} - \frac{1}{I_b} \right) + \frac{J^2}{I_b} \right), \quad \text{avec } J^2 = J_a^2 + J_b^2 + J_c^2$$

$J^2$  est quantifié par unités de  $J(J+1)\hbar^2$ . Chaque projection de J est quantifiée par unités de  $K\hbar$  où K peut prendre toutes les valeurs entières entre  $-J$  et  $J$ . L'énergie rotationnelle s'exprime alors sous la forme :

$$E_{\text{prolate}}/h = (A - B)K^2 + BJ(J + 1)$$

Le terme  $A - B$  étant positif, l'énergie des niveaux pour un J fixé augmente avec K.

#### Cas de la toupie symétrique oblate

C'est le cas des molécules pour lesquelles  $I_a = I_b < I_c$  (molécules de type « soucoupe volante »). Un exemple typique d'une telle molécule est  $\text{NH}_3$ . L'énergie rotationnelle s'écrit alors :

$$E_{\text{oblate}}/h = (C - B)K^2 + BJ(J + 1)$$

Contrairement au cas des toupies symétriques prolates, pour un J fixé, l'énergie des niveaux diminue quand K augmente (car  $C - B$  est négatif).

### Cas de la toupie sphérique

C'est le cas où les trois moments d'inertie sont égaux :  $I_a = I_b = I_c$ . Cette propriété requiert une grande symétrie de la molécule. C'est le cas par exemple pour  $\text{CH}_4$  ou  $\text{SF}_6$ . Ces molécules n'ont pas de moment dipolaire.

Le problème se ramène au cas de la molécule diatomique :  $E_{\text{rot}}/h = BJ(J+1)$ .

Une petite fraction seulement des molécules sont des toupies sphériques ou symétriques. La plupart des molécules sont des toupies asymétriques ( $I_a \neq I_b \neq I_c$ ). Un grand nombre d'entre elles peuvent néanmoins être considérées comme des toupies presque prolates  $I_a < I_b \sim I_c$  ou presque oblates  $I_a \sim I_b < I_c$ .

### 2.3.2 Toupies asymétriques

#### Niveaux d'énergie

Dans le cas d'une toupie asymétrique, on a  $I_a < I_b < I_c$ . C'est le cas de nombreuses molécules intéressantes pour les astrophysiciens telles  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{H}_2\text{CO}$ ... Néanmoins, si  $I_b$  diffère peu de  $I_a$  ou de  $I_c$ , la molécule est dite légèrement asymétrique. Dans ce cas, l'asymétrie a pour effet de lever la dégénérescence qui existait entre les niveaux  $\pm K$  dans le rotor symétrique. Le degré d'asymétrie de la molécule peut être représenté par le nombre  $\kappa = \frac{2B-A-C}{A-C}$ ,  $\kappa$  valant  $-1$  dans le cas prolate et  $+1$  dans le cas oblate.

Les niveaux rotationnels d'une toupie asymétrique peuvent être spécifiés par la donnée de  $J$ ,  $K_{-1}$  et  $K_{+1}$ , les deux derniers nombres étant les nombres quantiques dans les cas limites de toupie symétrique prolate et oblate. Ils peuvent être aussi écrits de manière équivalente sous la forme  $J_\tau$  où  $\tau = K_{-1} - K_{+1}$ .

La figure 2.2 montre comment on peut obtenir qualitativement les niveaux d'énergie d'une toupie asymétrique à partir des cas limites de toupie symétrique prolate et oblate. La constante rotationnelle  $B$  varie de gauche à droite, étant égale à  $C$  à gauche (toupie symétrique prolate) et à  $A$  à droite (toupie symétrique oblate).

Les énergies des premiers niveaux rotationnels peuvent alors s'exprimer relativement simplement en fonction du paramètre d'asymétrie  $\kappa$ , ou plus directement en fonction des constantes rotationnelles  $A$ ,  $B$  et  $C$  de la molécule. Ces énergies sont listées dans la Table 2.1.

La fonction de partition rotationnelle d'une toupie asymétrique s'approxime, dans le cas où la température est suffisamment élevée pour que  $kT/h \gg A$ , par :

$$Z(T) = \sum_{J,K} g_{\text{rot}} e^{-\frac{E_{JK_{-1}K_1}}{kT}} = \sum_{J,K} (2J+1) e^{-\frac{E_{JK_{-1}K_1}}{kT}} \sim \sqrt{\frac{\pi}{ABC}} \left(\frac{kT}{h}\right)^3$$

où  $A$ ,  $B$  et  $C$  sont exprimés en Hz.



$J_{K-1K_1}$	$E_{K-1K_1}/h$
0 <sub>00</sub>	0
1 <sub>01</sub>	B + C
1 <sub>11</sub>	A + C
1 <sub>10</sub>	A + B
2 <sub>02</sub>	$2\left[A + B + C - \sqrt{(B - C)^2 + (A - C)(A - B)}\right]$
2 <sub>12</sub>	A + B + 4C
2 <sub>11</sub>	A + 4B + C
2 <sub>21</sub>	4A + B + C
2 <sub>20</sub>	$2\left[A + B + C + \sqrt{(B - C)^2 + (A - C)(A - B)}\right]$

TAB. 2.1 – Energies des premiers niveaux rotationnels d'une toupie asymétrique, en fonction des trois constantes rotationnelles A, B et C.

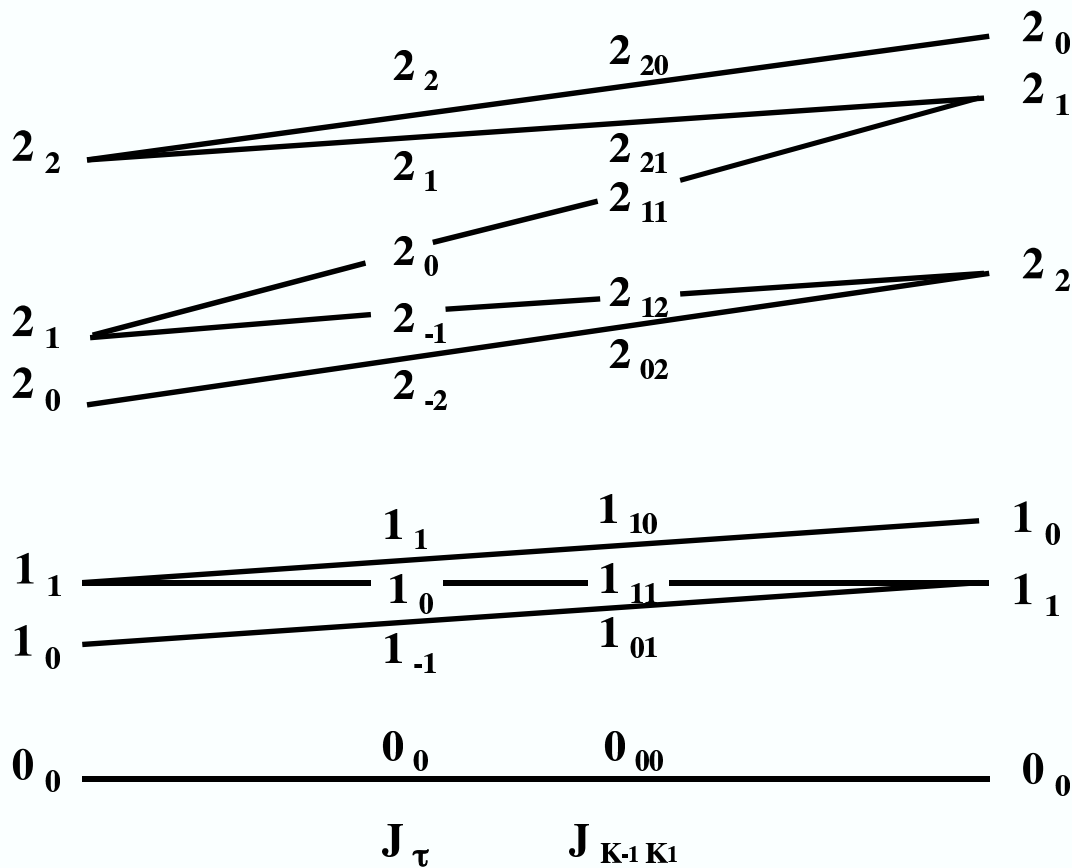


FIG. 2.2 – Comportement qualitatif des niveaux d'énergie des toupies asymétriques. La constante rotationnelle B varie de gauche à droite, étant égale à C à gauche (cas limite de la toupie symétrique prolate) et à A à droite (toupie symétrique oblate).

## Règles de sélection

Les transitions permises entre différents niveaux dépendent du moment dipolaire de la molécule. En effet, les différents niveaux rotationnels sont couplés entre eux dans un champ électromagnétique par le moment dipolaire, et seules des composantes non nulles de ce moment donneront lieu à des transitions. On peut ainsi déjà comprendre que les molécules sans moment dipolaire ( $\text{H}_2$ ,  $\text{H}_3^+$ , ...) n'émettent pas de spectre rotationnel.

Notons  $\mu_a$ ,  $\mu_b$  et  $\mu_c$  les trois composantes du moment dipolaire suivant les trois axes principaux. Toute composante non nulle du moment dipolaire rend permis un certain type de transitions.

Les règles de sélection pour J sont  $\Delta J = 0, \pm 1$ .

### Transitions de type a :

Si  $\mu_a \neq 0$  et  $\mu_b = \mu_c = 0$ , *i.e.* si le moment dipolaire se trouve selon l'axe d'inertie minimum, la molécule obéit aux règles de sélection de type a :

$$\Delta K_a = 0, (\pm 2, \pm 4) \quad \text{et} \quad \Delta K_c = \pm 1, (\pm 3, \pm 5).$$

Le formaldéhyde  $\text{H}_2\text{CO}$  est un exemple d'une telle molécule puisque son dipôle se trouve aligné sur l'axe C–O. Ainsi la transition  $1_{01}-0_{00}$  est permise alors que les transitions  $1_{10}-0_{00}$  et  $1_{11}-0_{00}$  sont interdites.

### Transitions de type b :

Si  $\mu_b \neq 0$  et  $\mu_a = \mu_c = 0$ , la molécule obéit aux règles de sélection de type b :

$$\Delta K_a = \pm 1, (\pm 3, \pm 5) \quad \text{et} \quad \Delta K_c = \pm 1, (\pm 3, \pm 5).$$

### Transitions de type c :

Si  $\mu_c \neq 0$  et  $\mu_a = \mu_b = 0$ , la molécule obéit aux règles de sélection de type c :

$$\Delta K_a = \pm 1, (\pm 3, \pm 5) \quad \text{et} \quad \Delta K_c = 0, (\pm 2, \pm 4).$$

Dans le cas où plusieurs composantes du moment dipolaire sont non nulles, l'ensemble des transitions permises par chaque composante non nulle sont permises. Ainsi, si les trois composantes sont non nulles, les règles de sélection se résument à  $\Delta J = 0, \pm 1$ .

## 2.4 Particularités du méthanol

La spectroscopie du méthanol ayant fait l'objet d'une grande partie de cette thèse, nous détaillons quelques unes de ses caractéristiques, et en particulier le calcul des fonctions de partitions des différents isotopes, nécessaires à la détermination des densités de colonne des molécules à partir des observations (*cf.* chapitre 3).

L'hydrogène du groupe hydroxyle (OH) n'appartient pas à l'axe de symétrie du groupe méthyl ( $\text{CH}_3$ ) mais la liaison OH est au contraire un peu inclinée (*cf.* Figure 2.3). Ceci rompt la symétrie du groupe méthyl et le méthanol doit être considéré comme une toupie asymétrique. Pour les isotopes où le groupe méthyl est constitué de trois atomes identiques ( $\text{CH}_3\text{OH}$ ,  $\text{CH}_3\text{OD}$ ,  $\text{CD}_3\text{OH}$  et  $\text{CD}_3\text{OD}$ ), la molécule est traitée comme une toupie presque symétrique. De plus, le spectre du méthanol est particulièrement complexe car il fait intervenir en plus des mouvements de rotation un mouvement de torsion (ou rotation interne) entre le groupe méthyl et le groupe hydroxyle. La torsion a pour effet de créer des niveaux torsionnels  $T_s = 0, 1, \dots$  (dans le milieu interstellaire, on s'intéresse le plus souvent au niveau fondamental), mais aussi de changer la distribution des niveaux de rotation du fait du couplage entre rotation et torsion.

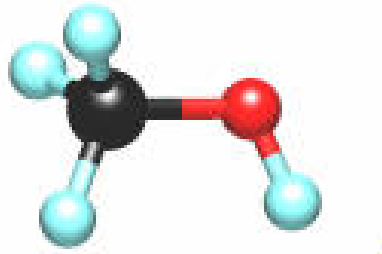


FIG. 2.3 – Molécule de méthanol

#### 2.4.1 $\text{CH}_3\text{OH}$ , $\text{CH}_3\text{OD}$ , $\text{CD}_3\text{OH}$ et $\text{CD}_3\text{OD}$

Ces quatre molécules possèdent la même symétrie, avec un groupe méthyl invariant par rotation de  $2\pi/3$ . Le traitement quantique de ces molécules s'effectue en partant de la toupie symétrique, et en introduisant la torsion comme une perturbation. Ceci revient à remplacer dans l'énergie de rotation le terme  $AK^2$  pour les toupies symétriques par un terme  $A_1k_1^2 + A_2k_2^2$  :

$$E(J, K, k_1, k_2) = BJ(J + 1) - BK^2 + A_1k_1^2 + A_2k_2^2$$

La symétrie de l'état est donnée par  $k_2 = K - k_1$ . Si  $k_2$  est multiple de 3, l'état est de symétrie A non dégénéré (en fait il existe deux symétries  $A_1$  et  $A_2$  souvent notées  $A_+$  et  $A_-$ ). Dans le cas contraire, l'état est de symétrie E (doublement dégénéré). Les règles de sélection de transition dipolaires entre états sont :  $\Delta J = 0, \pm 1$ ,  $\Delta K = \pm 1$ ,  $\Delta k_1 = \pm 1$ ,  $\Delta k_2 = 0$ . Par conséquent, les transitions dipolaires entre des états de symétrie A et E sont impossibles. Ainsi, dans les études spectroscopiques de cette molécule, les gens ont pris le parti de considérer deux états indépendants.

#### $\text{CH}_3\text{OH}$ et $\text{CH}_3\text{OD}$

Les poids statistiques des états A et E dépendent de la nature (plus exactement du spin) des trois atomes du groupement méthyl. Pour un groupe  $\text{CH}_3$  (*i.e.* des spins  $1/2$ ), la statistique

des spins donne un poids  $g_I$  double à l'état A (*cf. e.g.* Townes & Schawlow, p.72), et on peut donc considérer les deux états A et E comme non dégénérés (puisque  $g_A = g_E$ ). Dans cette approximation, la fonction de partition sera égale à deux fois celle du rotateur rigide  $Z_{\text{rig}}$ , en considérant les poids statistiques  $g_I$  unités pour les deux espèces A et E.

$$Z(T) = Z_A(T) + Z_E(T) = Z_{\text{rig}}(T) + Z_{\text{rig}}(T)\exp\left(-\frac{E_0}{kT}\right) \sim 2\sqrt{\frac{\pi}{ABC}}\left(\frac{kT}{h}\right)^3,$$

où  $E_0$  est l'énergie du niveau fondamental des sous-états E, exprimé relativement au fondamental des sous-états A. La dernière approximation est vraie seulement si  $T \gg E_0/k$ .

A titre d'exemple, la Table 2.2 présente les premiers niveaux d'énergie du méthanol.

Niveau	Energie (cm <sup>-1</sup> )	g
0 <sub>0</sub> A+	0.0	1
1 <sub>0</sub> A+	1.6	3
2 <sub>0</sub> A+	4.8	5
1 <sub>1</sub> E2	5.5	3
2 <sub>1</sub> E2	8.7	5
0 <sub>0</sub> E1	9.1	1

TAB. 2.2 – Premiers niveaux d'énergie du méthanol, nombres quantiques et dégénérescences correspondants (source : base spectroscopique du Jet Propulsion Laboratory).

### CD<sub>3</sub>OH et CD<sub>3</sub>OD

L'atome de deutérium ayant un spin 1, le poids statistique de l'état A est 11, et celui de chacun des deux états E est 8 (*cf. e.g.* Townes & Schawlow, p.72).

La fonction de partition peut alors s'exprimer, en prenant par convention des dégénérescences de 1 et 16/11 pour les états A et E :

$$Z(T) = Z_A(T) + Z_E(T) = Z_{\text{rig}}(T) + \frac{16}{11}Z_{\text{rig}}(T)\exp\left(-\frac{E_0}{kT}\right)$$

### 2.4.2 CH<sub>2</sub>DOH, CH<sub>2</sub>DOD, CHD<sub>2</sub>OD et CHD<sub>2</sub>OH

Pour ces quatre molécules, le groupe méthyl n'est plus invariant par rotation de  $2\pi/3$  du fait de la présence simultanée d'atomes H et D. Par contre elles ne possèdent pas d'états ortho et para puisque les deux hydrogènes (ou deutériums) ne sont pas équivalents dans la molécule du fait de la présence du groupe hydroxyle (les deux atomes identiques ne peuvent pas être échangés par rotation de la molécule), contrairement au cas du formaldéhyde H<sub>2</sub>CO où les deux H sont équivalents (la molécule est plane) ou à l'ammoniac NH<sub>2</sub>D où les deux H sont rendus équivalents par le mouvement de retournement de la molécule (mouvement du parapluie).

**CH<sub>2</sub>DOH**

Le niveau torsionnel fondamental de cette molécule est divisé en trois sous-niveaux non dégénérés :  $e_0$  (0 K),  $e_1$  (13,4 K), et  $o_1$  (18,3 K). A moins que l'on observe un nuage froid, ces états peuvent être considérés comme dégénérés.

La fonction de partition totale de la molécule dans le niveau vibrationnel fondamental est :

$$Z = Z(e_0) + Z(o_1)\exp\left(-\frac{E(o_1)}{T}\right) + Z(e_1)\exp\left(-\frac{E(e_1)}{T}\right) \sim 3 Z_i \text{ pour } T \gg 20\text{K}$$

Chacune des fonctions de partition des sous-niveaux  $e_0$ ,  $o_1$  et  $e_1$  est celle du rotateur rigide :

$$Z_i = \sqrt{\frac{\pi T^3}{ABC}}$$

où  $A = 4,8579$  K,  $B = 1,1160$  K et  $C = 1,0303$  K sont les trois constantes moléculaires.

La fonction de partition totale est donc :

$$Z = 0,75 T^{\frac{3}{2}} \left(1 + \exp\left(-\frac{13,4}{T}\right) + \exp\left(-\frac{18,3}{T}\right)\right) \sim 2,25 T^{\frac{3}{2}}$$

**CHD<sub>2</sub>OH**

Le niveau torsionnel fondamental de cette molécule est aussi divisé en trois sous-niveaux non dégénérés, mais cette fois le niveau  $o_1$  est plus bas en énergie que  $e_1$  :  $e_0$  (0 K),  $o_1$  (8,9 K), et  $e_1$  (18,4 K).

La fonction de partition totale de la molécule dans le niveau vibrationnel fondamental est :

$$Z = Z(e_0) + Z(o_1)\exp\left(-\frac{E(o_1)}{T}\right) + Z(e_1)\exp\left(-\frac{E(e_1)}{T}\right) \sim 3 Z_i.$$

Chacune des fonctions de partition des sous-niveaux vaut :

$$Z_i = \sqrt{\frac{\pi T^3}{ABC}}$$

où  $A = 4,0520$  K,  $B = 1,0069$  K et  $C = 0,9895$  K sont les trois constantes moléculaires.

La fonction de partition totale est alors :

$$Z = 0,8821 T^{\frac{3}{2}} \left(1 + \exp\left(-\frac{8,9}{T}\right) + \exp\left(-\frac{18,4}{T}\right)\right) \sim 2,64 T^{\frac{3}{2}}.$$

## 2.5 Calcul approché des fréquences d'une molécule : exemple de $D_2H^+$

### 2.5.1 Intérêt scientifique

Les bases de spectroscopie rappelées dans les paragraphes précédents permettent de calculer approximativement les fréquences des transitions rotationnelles des molécules dès lors que l'on connaît leurs constantes rotationnelles.

J'ai eu l'occasion de faire un tel calcul pour la molécule  $D_2H^+$ . Au cours de l'année 2002, il est devenu de plus en plus évident que cette molécule  $D_2H^+$  devait intervenir dans les processus de deutération en phase gazeuse. En effet, il était reconnu que  $H_2D^+$  est le principal ion qui permet le transfert du deutérium du réservoir HD aux autres molécules. La réaction



étant exothermique, on s'attend à ce que la deutération soit favorisée à basse température, et que l'on puisse obtenir des abondances de  $H_2D^+$  de l'ordre de celles de  $H_3^+$ . L'ion  $H_2D^+$  avait à cette époque-là déjà été détecté dans la protoétoile de faible masse NGC1333–IRAS4A par Stark et al. (1999). Il sera ensuite détecté en grande abondance ( $n(H_2D^+) \sim n(H_3^+)$ ) dans le cœur prestellaire L1544, où le CO est très déplété (Caselli et al. 2003).

Dans ces environnements où  $H_2D^+$  est abondant, il devient nécessaire de prendre aussi en compte la présence de  $D_2H^+$ , qui se forme à partir de  $H_2D^+$  par une réaction du même type que (1). Pour pouvoir observer une telle molécule (ou même dans un premier temps déterminer si elle peut être observée avec un télescope au sol), il fallait connaître les fréquences de ses transitions rotationnelles. Malheureusement, aucune donnée de laboratoire n'était disponible à ce moment-là sur la fréquence de la transition fondamentale de l'état *para* de la molécule, la plus susceptible de se trouver dans une fenêtre atmosphérique. Les calculs préliminaires présentés ici ont été effectués avant l'étude de laboratoire de  $D_2H^+$  de Hirao & Amano (2003), qui déterminera précisément la fréquence cherchée. Nous reportons cependant ces calculs comme un exemple illustratif des paragraphes précédents.

### 2.5.2 Méthode

Dans le cas d'une toupie asymétrique, nous venons de voir les différentes énergies des premiers niveaux de rotation (tableau 2.1). Ces énergies dépendent des trois constantes moléculaires A, B et C. Le calcul de A, B et C peut donc nous permettre de déterminer approximativement les valeurs des fréquences rotationnelles de molécules qui n'ont pas encore été étudiées en laboratoire, pour savoir si ces molécules seront observables dans le milieu interstellaire (La fréquence de la transition se trouve-t-elle dans une fenêtre atmosphérique? Est-elle dans une bande accessible par les instruments?).

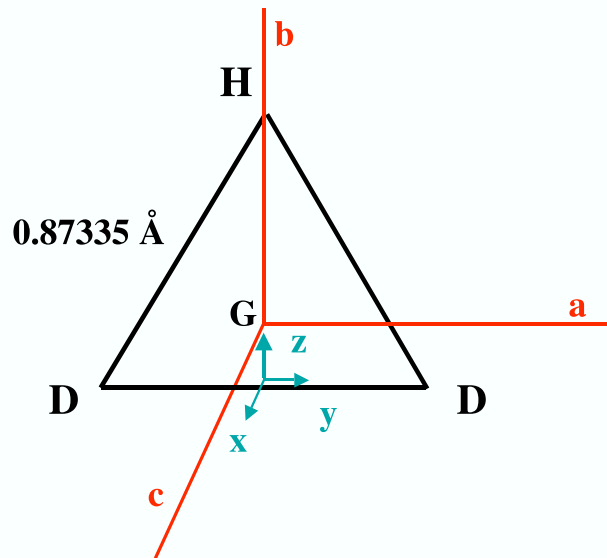


FIG. 2.4 – Schéma de la molécule  $D_2H^+$ , représentant les axes principaux.

La première étape dans ce calcul est donc de déterminer les trois constantes rotationnelles de la molécule. On peut les déterminer de deux manières différentes : soit par calcul géométrique des moments d'inertie, soit en utilisant les valeurs déduites d'études de transitions de  $D_2H^+$  dans d'autres domaines de fréquence.

### Calcul géométrique

Les constantes rotationnelles s'expriment en fonction des moments d'inertie de la molécule selon la formule (Gordy & Cook 1984) :

$$A, B, C \text{ (MHz)} = \frac{505376}{I_{a,b,c}(\text{uma } \text{Å}^2)}$$

Le calcul des moments d'inertie peut se faire simplement à partir de la donnée de la longueur des liaisons entre atomes. La molécule est représentée schématiquement sur la Figure 2.4 avec ses axes principaux. La distance interatomique est de  $0,87335 \text{ Å}$  (Dalgarno et al. 1973).

Les coordonnées du centre de gravité  $G$  dans le repère  $(x, y, z)$  de la Figure 2.4 sont  $(x_G, y_G, z_G) = (0, 0, 0,151 \text{ Å})$ . En notant  $h$  la hauteur du triangle, on calcule ensuite chacun des moments d'inertie :

$$\begin{aligned} I_x &= \sum m_i [(y_i - y_G)^2 + (z_i - z_G)^2] = \sum m_i (z_i - z_G)^2 \\ &= m_H \left(h - \frac{h}{5}\right)^2 + 2 m_D \left(\frac{h}{5}\right)^2 = 0,457 \text{ uma } \text{Å}^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 I_z &= \sum m_i [(x_i - x_G)^2 + (y_i - y_G)^2] = \sum m_i (x_i - x_G)^2 \\
 &= 2 m_D \left( \frac{0,87335}{2} \right)^2 = 0,763 \text{ uma } \text{Å}^2
 \end{aligned}$$

$$I_y = \sum m_i [(x_i - x_G)^2 + (z_i - z_G)^2] = I_x + I_y = 1,220 \text{ uma } \text{Å}^2$$

On a, d'après la géométrie de la molécule,  $I_a = I_y$ ,  $I_b = I_z$  et  $I_c = I_x$ . On en déduit les valeurs des constantes moléculaires  $A = 11,1 \times 10^5$  MHz,  $B = 6,62 \times 10^5$  MHz et  $C = 4,14 \times 10^5$  MHz.

### Constantes déduites d'observations dans le proche-infrarouge

Des transitions vibrationnelles de  $D_2H^+$  ont été étudiées en laboratoire dans le domaine proche infrarouge ( $2600\text{--}3000 \text{ cm}^{-1}$ , Lubic & Amano 1984). Trente-cinq transitions ont été détectées et ont servi à ajuster un Hamiltonien pour déterminer les constantes moléculaires. Leurs valeurs sont  $A = 10,9 \times 10^5$  MHz,  $B = 6,57 \times 10^5$  MHz et  $C = 3,92 \times 10^5$  MHz. Ces valeurs ne sont pas forcément meilleures que celles déduites géométriquement car l'extrapolation à un autre domaine des constantes déduites par ajustement dans un domaine de longueur d'ondes n'est pas toujours évidente.

Une fois les constantes rotationnelles connues, on s'intéresse au dipôle de la molécule pour savoir quelles transitions seront permises. Le dipôle de  $D_2H^+$  est selon l'axe b pour des raisons de symétrie, et donc les transitions permises seront celles de type b, *i.e.* la transition  $1_{10}\text{--}1_{01}$  (contrairement à  $H_2D^+$  qui a son dipôle selon l'axe a). D'après la Table 2.1, la fréquence de cette transition vaut de l'ordre de  $A\text{--}C = 692$  GHz ( $\pm 5$  GHz?). La conclusion de cette étude préliminaire est donc que cette molécule est observable depuis le sol, avec le CSO (Caltech Submillimeter Array) ou le JCMT (James Clark Maxwell Telescope), tous deux situés sur le Mauna Kea, à Hawaii. Bien entendu une étude de laboratoire préalable est requise pour déterminer la fréquence exacte de cette transition avant de tenter l'observation.

Ces calculs préliminaires ont été faits avant que l'étude de laboratoire de  $D_2H^+$  de Hirao & Amano (2003) ne soit annoncée au colloque de Zermatt en septembre 2003. Cette étude fixe la fréquence de la transition en question à  $691,660440$  GHz. De nombreux astrophysiciens se sont dès lors lancés dans la chasse à  $D_2H^+$ . La première détection sera effectuée en 2004 par Vastel et al. (2004) en direction du cœur prestellaire 16293E.





## Chapitre 3

# La deutération du méthanol dans l'enveloppe de la protoétoile IRAS16293–2422

### Sommaire

---

<b>3.1</b>	<b>Introduction</b>	<b>49</b>
<b>3.2</b>	<b>Les observations</b>	<b>52</b>
3.2.1	Méthanol simplement et doublement deutéré	52
3.2.2	Méthanol triplement deutéré	53
3.2.3	Isotope du méthanol $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$	54
<b>3.3</b>	<b>Dérivation des densités de colonne et du fractionnement</b>	<b>56</b>
3.3.1	Principe du diagramme rotationnel	56
3.3.2	Les diagrammes rotationnels des différents isotopes	60
<b>3.4</b>	<b>Discussion</b>	<b>62</b>
3.4.1	Premiers résultats	62
3.4.2	Comparaison aux modèles de chimie sur les grains	63
3.4.3	Limitation des observations due à la faible résolution spatiale	65
<b>3.5</b>	<b>Conclusion</b>	<b>66</b>

---

### 3.1 Introduction

La détection en 1998 de formaldéhyde doublement deutéré ( $\text{D}_2\text{CO}$ ) dans la protoétoile de faible masse IRAS16293–2422 (Ceccarelli et al. 1998) a relancé l'intérêt pour l'étude des molécules deutérées. En effet, il est apparu que la donnée du fractionnement en deutérium d'une molécule pouvait permettre de contraindre ses mécanismes de formation. Ceci est d'un intérêt bien plus large que la simple compréhension de la deutération : l'observation des molécules

deutérees représente alors potentiellement un outil puissant pour contraindre les modèles de chimie et comprendre ainsi par exemple la formation des molécules complexes dans une nébuleuse protostellaire, sujet qui concerne tout particulièrement l'Humanité en la renvoyant à ses propres origines.

Le fractionnement énorme en deutérium du formaldéhyde – de l'ordre de 0,3% dans la région de formation d'étoiles massives d'Orion (Turner 1990) et de 5% dans la protoétoile de faible masse IRAS16293–2422 (Loinard et al. 2000) – semblait invoquer une formation sur les grains, car on pensait, sans l'avoir toutefois véritablement testé, que les modèles de chimie en phase gazeuse étaient incapables de prédire un tel enrichissement en deutérium.

Une étude de l'abondance du  $D_2CO$  sur un échantillon de protoétoiles (Loinard et al. 2002) a ensuite montré que le cas de IRAS16293–2422 est loin d'être isolé, mais qu'au contraire toutes les protoétoiles de faible masse montrent un enrichissement en deutérium du formaldéhyde similaire, tandis que cet enrichissement est absent dans les protoétoiles massives.

Le mécanisme proposé pour la formation du formaldéhyde est la chimie active sur les grains (Tielens 1983) pendant la période froide et dense précédant la formation de la protoétoile (phase de cœur préstellaire). L'augmentation de la densité et la faible température de cette phase provoque l'accrétion des molécules et atomes du gaz sur la surface des grains de poussière. Les atomes légers tels que H et D peuvent ensuite sauter de site en site par effet tunnel sur la surface des grains, et réagir avec les autres espèces rencontrées. Dans ce processus, le grain de poussière se comporte comme un catalyseur permettant d'augmenter les efficacités de réaction entre espèces neutres. C'est d'ailleurs le processus invoqué pour la formation de l'hydrogène moléculaire. La forte deutérotation des molécules formées de cette façon proviendrait donc d'une augmentation du rapport atomique D/H dans la phase gazeuse (et donc dans les atomes accrétant sur le grain) relativement au rapport primordial  $[D]/[H] \sim 1,5 \times 10^{-5}$  (Linsky 2003), et/ou de l'incorporation préférentielle du deutérium dans les molécules sur les grains grâce, par exemple, à des barrières d'énergie plus favorables pour les réactions. Les molécules ainsi formées à la surface des grains forment un manteau de glaces qui s'évapore lorsque la protoétoile nouvellement formée chauffe son enveloppe, nous permettant alors de les observer en phase gazeuse par spectroscopie millimétrique.

La faible deutérotation observée dans les protoétoiles massives s'explique bien dans le cadre de ce schéma, puisque les températures sont plus élevées et les temps caractéristiques impliqués sont plus courts que dans le cas de la formation d'une protoétoile de faible masse. La phase froide propice à la formation des molécules sur les grains est donc moins longue dans les protoétoiles massives.

Cependant, le débat sur la formation des molécules deutérées ne faisait que commencer. En effet, les détections de la deuxième molécule doublement deutérée, l'ammoniac  $ND_2H$ , dans le nuage sombre L134N ( $ND_2H/NH_3 \sim 0.1\%$ , Roueff et al. 2000), et de la première molécule triplement deutérée  $ND_3$  dans la protoétoile de faible masse NGC1333–IRAS4A (van der Tak et al. 2002) et le nuage sombre B1 (Lis et al. 2002) pouvaient s'expliquer par des processus de

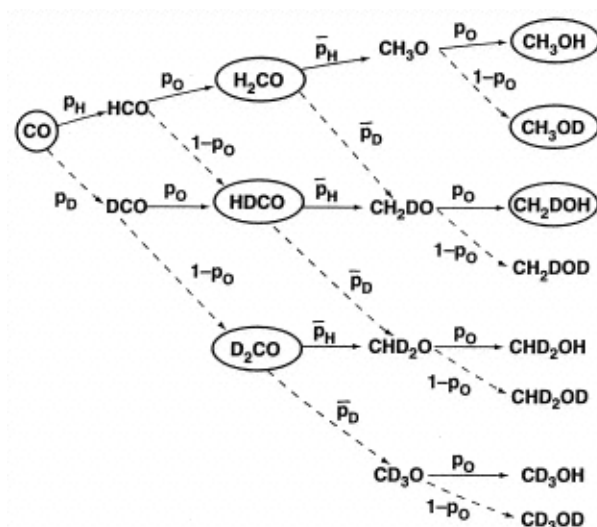


FIG. 3.1 – Processus d’hydrogénation et de deutération du CO par chimie active sur les grains (Charnley et al. 1997). Le formaldéhyde est formé par deux hydrogénations successives du CO, et le méthanol par deux hydrogénations du formaldéhyde.

chimie en phase gazeuse (Roberts & Millar 2000a; Rodgers & Charnley 2001).

Nous avons donc cherché à tester observationnellement la théorie de chimie active sur les grains (cette théorie est détaillée dans le paragraphe 8.3). Le formaldéhyde deutéré étant formé dans ce schéma par hydrogénations du CO (*cf.* Figure 3.1), il est apparu que l’observation de la deutération du méthanol (produit d’hydrogénations du formaldéhyde) pourrait apporter une contrainte cruciale au modèle. En effet, l’observation des différents rapports isotopiques du méthanol permet de dériver le rapport atomique D/H nécessaire lors de l’accrétion. Si le processus de formation sur les grains est correct, les rapports entre les différents isotopes ne dépendent que du rapport atomique D/H (en négligeant les différences de barrières d’énergies entre les réactions impliquant le deutérium et l’hydrogène, Charnley et al. 1997). L’observation de plusieurs isotopes permet donc de valider la consistance d’un tel modèle.

Avant cette thèse, seules les deux espèces simplement deutérées avaient été détectées dans le milieu interstellaire : en direction d’Orion où  $\text{CH}_3\text{OD}/\text{CH}_3\text{OH} \sim 0,01 - 0,06$  (Mauersberger et al. 1988) et  $\text{CH}_2\text{DOH}/\text{CH}_3\text{OH} \sim 0,04$  (Jacq et al. 1993), et de SgB2, où  $\text{CH}_3\text{OD}/\text{CH}_3\text{OH} \sim 0,01$  (Gottlieb et al. 1979). Une limite supérieure de 0,1 sur le fractionnement de  $\text{CH}_3\text{OD}$  avait été établie sur IRAS16293–2422 par van Dishoeck et al. (1995).

Nous avons dans un premier temps fait une demande de temps d’observation au radiotélescope de 30 m de l’IRAM (Figure 3.2) pour observer  $\text{CH}_2\text{DOH}$ ,  $\text{CH}_3\text{OD}$  et  $\text{CHD}_2\text{OH}$  (observations effectuées en mai 2002), puis un an plus tard  $\text{CD}_3\text{OH}$  (avril 2003).

Ces observations ont donné lieu à la publication de deux articles : Parise et al. (2002b) et Parise et al. (2004a).



FIG. 3.2 – Télescope de 30 m de l’IRAM (Pico Veleta, IRAM). Photo Juan Peñalver.

## 3.2 Les observations

Pour notre recherche de méthanol deutéré, nous avons naturellement choisi d’observer la protoétoile de faible masse IRAS16293–2422, source dans laquelle avait été détecté pour la première fois dans une protoétoile de faible masse le formaldéhyde doublement deutéré en 1998 (Ceccarelli et al. 1998). Des observations ultérieures ont confirmé le haut niveau de fractionnement (Loinard et al. 2000), et cartographié sa distribution spatiale (Ceccarelli et al. 2001). Cette protoétoile de classe 0 se trouve dans le complexe de  $\rho$  Ophiucus. Ses coordonnées sont  $\alpha(2000) = 16^{\text{h}} 32^{\text{m}} 22.6^{\text{s}}$  et  $\delta(2000) = -24^{\circ} 28' 33.0''$ . De par sa faible déclinaison, elle reste toujours relativement basse en élévation (son élévation maximale au télescope du Pico Veleta est de l’ordre de  $28^{\circ}$ ), ce qui ne facilite pas son observation : on ne peut observer convenablement qu’à une élévation supérieure à  $\sim 15^{\circ}$ , et donc pas plus de 4 à 5 heures par jour.

### 3.2.1 Méthanol simplement et doublement deutéré

Avant d’écrire la demande de temps pour observer  $\text{CH}_2\text{DOH}$ ,  $\text{CH}_3\text{OD}$ , et  $\text{CHD}_2\text{OH}$ , nous avons rassemblé les données de laboratoire existant sur ces molécules (pour, en particulier connaître les fréquences à observer). Les fréquences pour  $\text{CH}_3\text{OD}$  étaient déjà publiées (An-

derson et al. 1988). Pour la molécule  $\text{CH}_2\text{DOH}$ , nous avons eu accès grâce à J. Pearson, à des données non encore publiées de la base du JPL. Les fréquences de  $\text{CHD}_2\text{OH}$  proviennent de travaux de I. Mukhopadhyay non publiés.

Les observations du méthanol simplement et doublement deutéré ont été faites en novembre 2001 et mai 2002. Nous avons détecté 23 raies de  $\text{CH}_2\text{DOH}$ , 6 raies de  $\text{CH}_3\text{OD}$  et 15 raies de  $\text{CHD}_2\text{OH}$ . Ces transitions sont reportées dans les Tables 3.1 et 3.2.

Nous avons utilisé simultanément quatre récepteurs à 3, 2, 1,3 et 1,1 millimètres, avec des températures système typiques de 100, 200, 400 and 800 K respectivement. Ces récepteurs étaient connectés à un autocorrélateur divisé en plusieurs morceaux (jusqu'à huit suivant le setting). La largeur du lobe du télescope varie entre  $30''$  à 83 GHz et  $11''$  à 226 GHz.

Toutes les observations ont été faites en utilisant le mode « wobbler » (miroir secondaire vibrant) avec une position OFF à  $4'$  du centre. La mise au point a été effectuée à chaque début d'observations sur la source extragalactique 3c279. La précision du pointage, vérifiée régulièrement lors des observations sur la source 1514–241, a toujours été meilleure que  $3''$ . Nos spectres ont été obtenus avec des temps d'intégration allant de 70 minutes à 400 minutes pour certaines transitions de  $\text{CHD}_2\text{OH}$ .

Des exemples de spectres sont présentés sur la Figure 3.3. L'émission est détectée à la vitesse  $v_{\text{LSR}}$  de  $2,9 \text{ km s}^{-1}$ .

Les flux intégrés, largeurs de raie et températures de lobe principal au pic sont reportés dans les Tables 3.1 et 3.2.

### 3.2.2 Méthanol triplement deutéré

Nous avons observé les 12 transitions du méthanol triplement deutéré  $\text{CD}_3\text{OH}$  reportées dans la Table 3.3 en avril 2003 au télescope du Pico Veleta (IRAM). Deux récepteurs ont été utilisés simultanément à 2 mm, pour observer deux bandes autour de 156 et 160 GHz, avec des températures système typiques de 230 et 250 K. Ces récepteurs ont été connectés à l'autocorrélateur VESPA divisé en six morceaux. La taille du lobe du télescope est d'environ  $15''$  à 160 GHz. Toutes les observations ont été effectuées en mode « wobbler » avec une position OFF à  $4'$  de la source. La précision du pointage a été vérifiée régulièrement sur la source extragalactique 1730–130 et était toujours meilleure que  $3''$ . Tous les spectres ont été obtenus avec un temps d'intégration de 750 minutes. Le niveau de bruit atteint est de 8 mK (rms) pour une résolution spectrale de  $0,3 \text{ km s}^{-1}$ .

Les raies observées sont présentées sur la Figure 3.4. Les flux, largeurs de raies et températures au pic sont présentés dans la Table 3.3. Les fréquences de toutes les raies détectées avaient été mesurées en laboratoire avec une précision de 25 kHz (Walsh et al. 1998), tandis que les paramètres moléculaires (coefficients d'Einstein et énergies des niveaux) ont été estimés à partir des constantes spectroscopiques publiées (Predoi-Cross et al. 1998) à l'aide du programme traitant le méthanol à l'Université de l'Ohio.

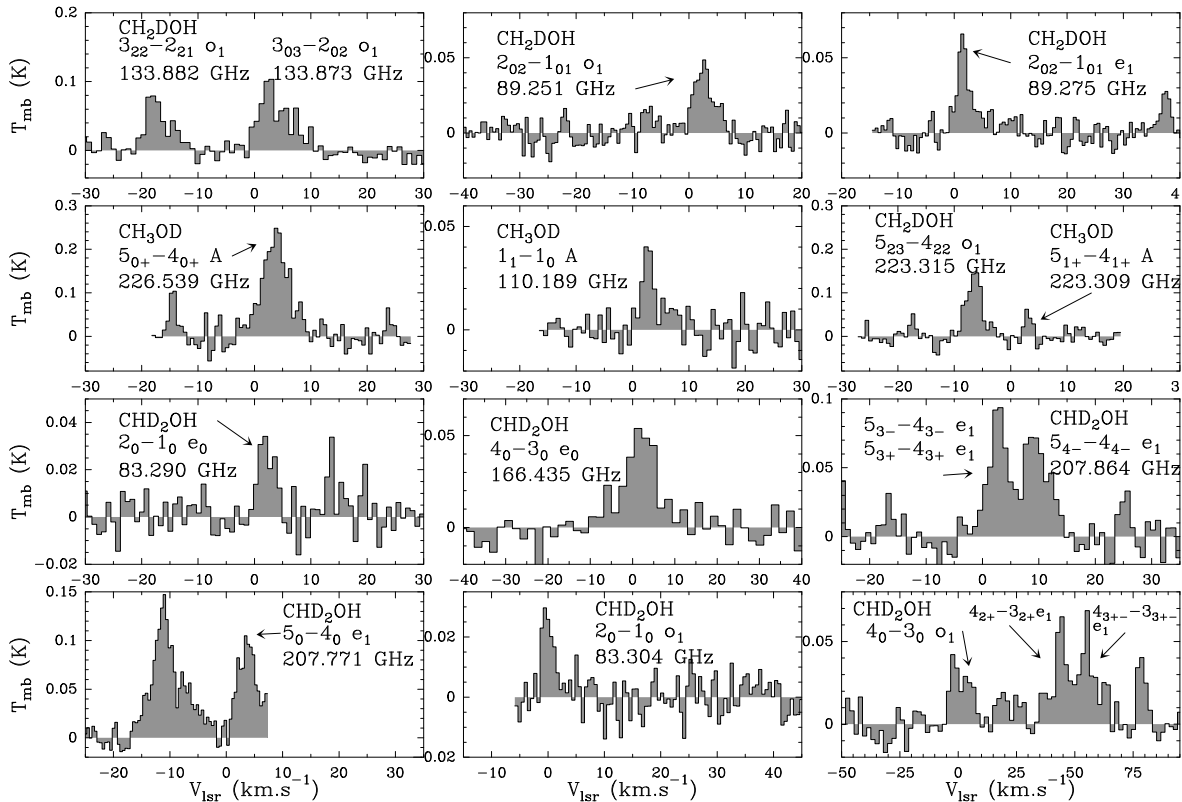


FIG. 3.3 – Exemples de transitions de CH<sub>2</sub>DOH, CH<sub>3</sub>OD et CHD<sub>2</sub>OH. Les intensités sont en température de lobe principal.

Certaines raies du méthanol triplement deutéré sont proches de raies CH<sub>2</sub>DCN. Dans ce cas, leur flux a été dérivé en faisant un ajustement simultané des deux raies par deux gaussiennes. Les flux correspondants sont donc entachés d'une incertitude supplémentaire due à la contribution de la raie CH<sub>2</sub>DCN.

### 3.2.3 Isotope du méthanol <sup>13</sup>CH<sub>3</sub>OH

Un grand nombre de transitions du méthanol ont été observées sur IRAS16293–2422 par van Dishoeck et al. (1995) avec les télescopes JCMT (James Clerk Maxwell Telescope) et CSO (Caltech Submillimeter Observatory) au sommet du Mauna Kea (Hawaii). La densité de colonne déduite d'une analyse en diagramme rotationnel (*cf.* paragraphe 3.3.1) est  $N_{\text{CH}_3\text{OH}} = (8,8 \pm 1,0) \times 10^{14}$  cm<sup>-2</sup> dans un lobe de 20". Néanmoins, pour s'affranchir d'éventuels problèmes d'opacité de l'isotope principal du méthanol, nous analysons de plus des transitions de l'isotope <sup>13</sup>CH<sub>3</sub>OH. Deux telles transitions ont été observées simultanément aux raies CD<sub>3</sub>OH à 156 et 160 GHz. Les autres raies (à 330 GHz) ont été observées sur la même position avec le télescope JCMT en janvier 2000. Le niveau de bruit atteint était de 37 mK (rms). La taille du lobe du JCMT à 330 GHz est de 15", c'est-à-dire équivalente à celle du télescope de l'IRAM à 160 GHz. Les

Fréquence GHz	Transition	$\mu^2S$	$E_{\text{up}}$ $\text{cm}^{-1}$	$\int T_{\text{mb}} dv$ $\text{K km s}^{-1}$	$T_{\text{mb}}$ K	$\Delta v$ $\text{km s}^{-1}$
CH <sub>2</sub> DOH						
89.2512	2 <sub>0,2</sub> -1 <sub>0,1</sub> o <sub>1</sub>	0.7	17.2	0.19±0.04	0.04	4.3±0.6
89.2754	2 <sub>0,2</sub> -1 <sub>0,1</sub> e <sub>1</sub>	0.7	13.8	0.16±0.03	0.06	2.6±0.4
89.4079	2 <sub>0,2</sub> -1 <sub>0,1</sub> e <sub>0</sub>	0.8	4.5	0.31±0.05	0.06	4.7± 0.2
110.1054	9 <sub>1,8</sub> -9 <sub>0,9</sub> o <sub>1</sub>	3.3	83.4	0.42±0.08	0.05	7.4±0.9
133.8473	3 <sub>0,3</sub> -2 <sub>0,2</sub> e <sub>1</sub>	1.1	18.3	0.60±0.11	-	-
133.8729	3 <sub>0,3</sub> -2 <sub>0,2</sub> o <sub>1</sub>	1.1	21.7	0.60±0.11	-	-
133.8818	3 <sub>2,2</sub> -2 <sub>2,1</sub> o <sub>1</sub>	0.6	33.6	0.34±0.07	0.07	4.3±0.9
133.8929	3 <sub>2,2</sub> -2 <sub>2,1</sub> e <sub>1</sub>	0.6	27.4	0.67±0.14	0.05	12.2±2.2
133.8974	3 <sub>2,1</sub> -2 <sub>2,0</sub> o <sub>1</sub>	0.6	33.6	0.30±0.07	0.08	3.4±0.6
133.9302	3 <sub>2,1</sub> -2 <sub>2,0</sub> e <sub>1</sub>	0.6	27.4	0.37±0.15	0.07	4.8±2.2
134.0655	3 <sub>0,3</sub> -2 <sub>0,2</sub> e <sub>0</sub>	1.2	8.9	0.67±0.33	0.10	6.0±3.3
134.1124	3 <sub>2,2</sub> -2 <sub>2,1</sub> e <sub>0</sub>	0.7	20.2	0.43±0.15	0.06	6.4±2.3
134.1854	3 <sub>2,1</sub> -2 <sub>2,0</sub> e <sub>0</sub>	0.7	20.2	0.26±0.06	0.06	4.1±0.8
207.7808	2 <sub>1,2</sub> -3 <sub>0,3</sub> e <sub>0</sub>	0.3	15.9	1.01±0.25	0.11	8.4±2.5
223.0713	5 <sub>2,3</sub> -4 <sub>1,4</sub> e <sub>1</sub>	0.6	33.6	1.13±0.42	0.17	6.3±2.5
223.1073	5 <sub>0,5</sub> -4 <sub>0,4</sub> o <sub>1</sub>	1.8	35.1	0.51±0.18	0.15	3.1±1.2
223.1283	5 <sub>2,4</sub> -4 <sub>2,3</sub> e <sub>1</sub>	1.4	40.8	0.54±0.26	0.22	2.3±0.7
223.1311	5 <sub>4,1</sub> -4 <sub>4,0</sub> o <sub>1</sub>	0.6	79.4	0.41±0.16	0.08	4.8±2.1
223.1311	5 <sub>4,2</sub> -4 <sub>4,1</sub> o <sub>1</sub>	0.6	79.4	0.41±0.16	0.08	4.8±2.1
223.1537	5 <sub>3,3</sub> -4 <sub>3,2</sub> o <sub>1</sub>	1.0	60.8	0.58±0.09	-	-
223.1537	5 <sub>3,2</sub> -4 <sub>3,1</sub> o <sub>1</sub>	1.0	60.8	0.58±0.09	-	-
223.3154	5 <sub>2,3</sub> -4 <sub>2,2</sub> e <sub>1</sub>	1.4	40.8	0.38±0.09	0.16	2.2±0.5
223.4223	5 <sub>2,4</sub> -4 <sub>2,3</sub> e <sub>0</sub>	1.8	33.6	0.55±0.09	0.10	5.2±0.3
CH <sub>3</sub> OD						
110.1889	1 <sub>1</sub> -1 <sub>0</sub>	1.6	7.8	0.10±0.02	0.04	2.3±0.5
110.2626	2 <sub>1</sub> -2 <sub>0</sub>	2.7	10.8	0.17±0.04	0.03	4.5±1.1
110.4758	3 <sub>1</sub> -3 <sub>0</sub>	3.8	15.4	0.30±0.05	-	-
133.9254	1 <sub>1-</sub> -1 <sub>0+</sub>	3.2	6.0	0.55±0.18	0.06	8.4±2.8
223.3086	5 <sub>1+</sub> -4 <sub>1+</sub>	3.4	26.8	0.09±0.03	0.06	1.4±0.4
226.5387	5 <sub>0+</sub> -4 <sub>0+</sub>	3.5	22.7	1.32±0.21	0.23	5.5±0.3

TAB. 3.1 – Caractéristiques des transitions de CH<sub>2</sub>DOH et CH<sub>3</sub>OD détectées. Les flux ont été calculés en ajustant des gaussiennes, et l’incertitude indiquée est déterminée en considérant une incertitude de calibration de 15% en raison de la faible élévation de la source.

paramètres moléculaires (provenant de la base de données CDMS de Cologne) ainsi que les flux des raies <sup>13</sup>CH<sub>3</sub>OH observées sont présentés dans la Table 3.4.



Fréquence GHz	Transition	$\mu^2S$	$E_{\text{up}}$ cm <sup>-1</sup>	$\int T_{\text{mb}} dv$ K km s <sup>-1</sup>	$T_{\text{mb}}$ K	$\Delta v$ km s <sup>-1</sup>
CHD <sub>2</sub> OH						
83.1292	2 <sub>0</sub> -1 <sub>0</sub> e <sub>1</sub>	1.4	16.98	0.07±0.02	0.02	3.1±0.7
83.2895	2 <sub>0</sub> -1 <sub>0</sub> e <sub>0</sub>	1.4	4.17	0.09±0.02	0.03	3.2±0.6
83.3036	2 <sub>0</sub> -1 <sub>0</sub> o <sub>1</sub>	1.4	10.33	0.07±0.01	0.03	2.5±0.5
166.234	4 <sub>0</sub> -3 <sub>0</sub> e <sub>1</sub>	2.8	26.69	0.39±0.08		
166.271	4 <sub>2-</sub> -3 <sub>2-</sub> e <sub>1</sub>	2.1	35.65	0.22±0.07	0.04	5.1±1.8
166.297	4 <sub>3+</sub> -3 <sub>3-</sub> e <sub>1</sub>	1.2	46.54	0.10±0.08	0.03	3.2±2.2
166.298	4 <sub>3-</sub> -3 <sub>3-</sub> e <sub>1</sub>	1.2	46.54	0.10±0.08	0.03	3.2±2.2
166.304	4 <sub>2+</sub> -3 <sub>2+</sub> e <sub>1</sub>	2.1	35.65	0.22±0.06	0.06	3.4±0.9
166.327	4 <sub>0</sub> -3 <sub>0</sub> o <sub>1</sub>	2.8	20.04	0.17±0.10		
166.435	4 <sub>0</sub> -3 <sub>0</sub> e <sub>0</sub>	2.8	13.89	0.48±0.13	0.05	8.7±2.8
207.771	5 <sub>0</sub> -4 <sub>0</sub> e <sub>1</sub>	3.5	33.63	0.44±0.11	0.09	4.4±1.1
207.827	5 <sub>2-</sub> -4 <sub>2-</sub> e <sub>1</sub>	2.9	42.59	0.19±0.11	0.07	2.5±1.3
207.864	5 <sub>4-</sub> -4 <sub>4-</sub> e <sub>1</sub>	1.3	68.41	0.43±0.13	0.07	5.6±1.8
207.868	5 <sub>3-</sub> -4 <sub>3-</sub> e <sub>1</sub>	2.2	53.48	0.17±0.10	0.05	3.4±1.1
207.869	5 <sub>3+</sub> -4 <sub>3+</sub> e <sub>1</sub>	2.2	53.48	0.17±0.10	0.05	3.4±1.1

TAB. 3.2 – Caractéristiques des transitions de CHD<sub>2</sub>OH observées. Les flux ont été calculés en ajustant des gaussiennes, et l’incertitude indiquée est déterminée en considérant une incertitude de calibration de 15% en raison de la faible élévation de la source.

### 3.3 Dérivation des densités de colonne et du fractionnement

La détermination de la densité de colonne des différents isotopes observés s’est faite par la méthode du diagramme rotationnel. Nous détaillons cette méthode dans le prochain paragraphe, puis nous donnons les résultats pour les molécules étudiées dans le paragraphe suivant.

#### 3.3.1 Principe du diagramme rotationnel

Dans l’hypothèse où un gaz est à l’équilibre thermodynamique local (ETL), les différents niveaux d’énergie d’une molécule sont peuplés selon une distribution maxwellienne :

$$N_{\text{up}} = \frac{g_{\text{up}} N_{\text{tot}}}{Z(T)} \exp\left(\frac{-E_{\text{up}}}{kT}\right),$$

où  $N_{\text{up}}$  est la densité de colonne des molécules dans le niveau haut de la transition,  $E_{\text{up}}$  l’énergie de ce niveau,  $N_{\text{tot}}$  la densité de colonne totale de la molécule (*i.e.* la somme sur tous les niveaux des  $N_{\text{up}}$ ),  $T$  la température rotationnelle de la molécule,  $Z(T)$  la fonction de partition de la molécule à cette température (*cf.* chapitre 2).

Les densités de colonne  $N_{\text{up}}$  dans les différents niveaux de la molécule peuvent être dérivées des observations. La température de lobe principal mesurée pendant l’observation d’une source

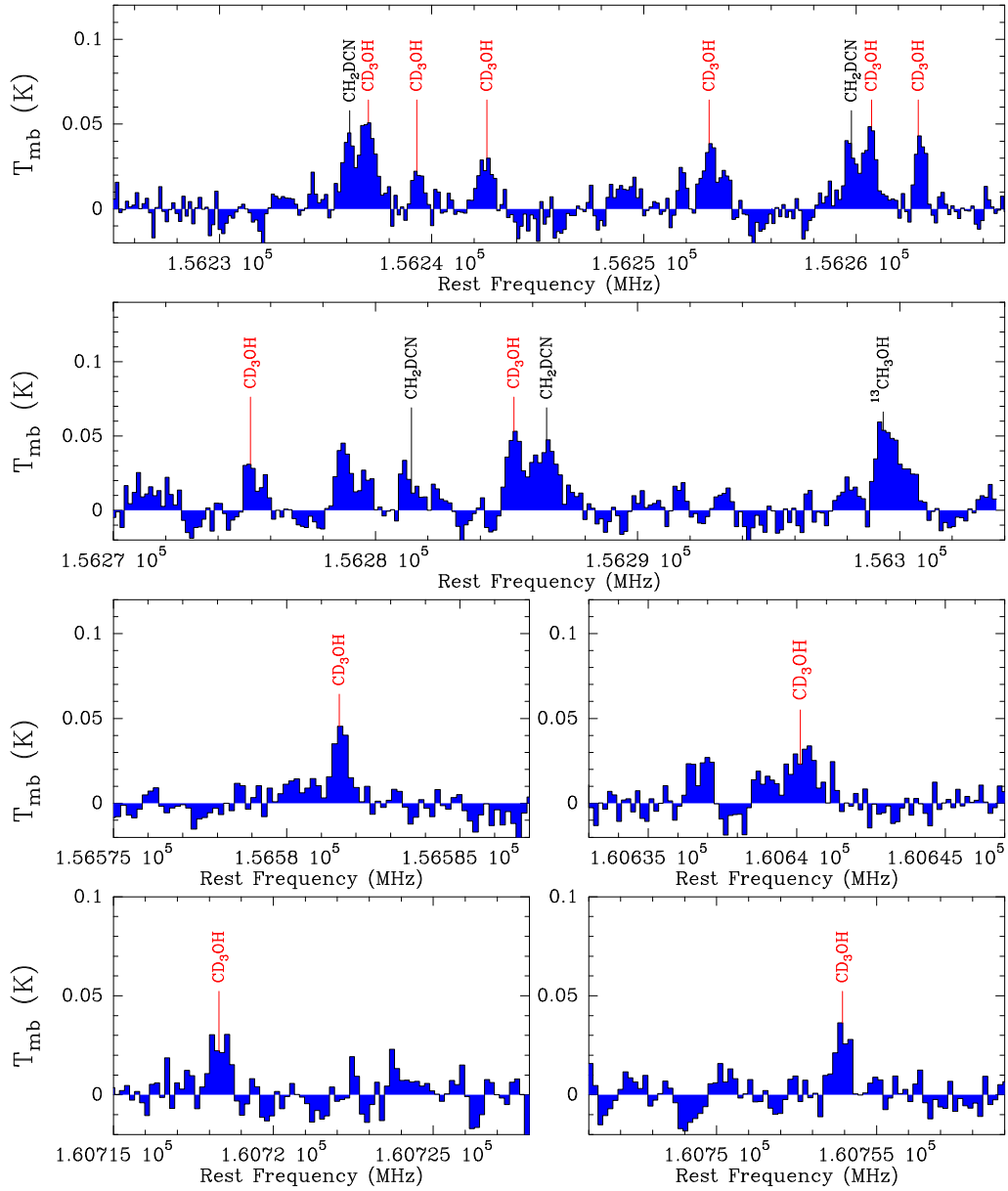


FIG. 3.4 – Raies de méthanol triplement deutéré détectées dans l’enveloppe de IRAS16293–2422.

de luminosité  $B_\nu(\theta, \phi)$  est :

$$T_{\text{mb}} = \frac{A_e}{2k} \int_{\text{lobe}} B_\nu(\theta, \phi) P_n(\theta, \phi) d\Omega$$

où  $P_n(\theta, \phi)$  est le profil de puissance normalisé de l’antenne, qui vaut 1 dans la direction (0,0) et dont l’intégrale sur le lobe principal vaut  $\Omega_{\text{lobe}}$ . Supposons la source de brillance uniforme. Dans les deux cas extrêmes où la source remplit tout le lobe ( $\Omega_{\text{source}} = \Omega_{\text{lobe}}$ ) ou a une extension  $\Omega_{\text{source}}$  petite devant la taille du lobe (*i.e.* on peut approximer  $P_n(\theta, \phi) \sim 1$  sur l’étendue de la

TAB. 3.3 – Intensités de lobe principal<sup>1</sup>, températures au pic<sup>2</sup> et largeurs des raies du méthanol CD<sub>3</sub>OH<sup>3</sup> observées en direction de IRAS16293–2422.

Fréquence GHz	Transition	$\mu^2 S$ Debye <sup>2</sup>	$E_{up}$ K	$\int T_{mb} dv$ K km s <sup>-1</sup>	$T_{mb}$ mK	$\Delta v$ km s <sup>-1</sup>
CD <sub>3</sub> OH						
156.237016*	4 <sub>1</sub> -3 <sub>1</sub> E <sub>2</sub>	2.94	21.5	0.102 ± 0.023	51	1.8 ± 0.4
156.239295	4 <sub>2</sub> -3 <sub>2</sub> A-	2.44	42.0	0.032 ± 0.012	26	1.2 ± 0.5
156.242613	4 <sub>0</sub> -3 <sub>0</sub> A+	3.13	18.8	0.059 ± 0.018	31	1.8 ± 0.5
156.253079	4 <sub>2</sub> -3 <sub>2</sub> A+	2.44	42.0	0.056 ± 0.015	38	1.4 ± 0.4
156.260737*	4 <sub>3</sub> -3 <sub>3</sub> E <sub>2</sub>	1.39	55.5	0.061 ± 0.018	46	1.3 ± 0.4
156.262936	4 <sub>3</sub> -3 <sub>3</sub> E <sub>1</sub>	1.37	46.9	0.044 ± 0.011	43	1.0 ± 0.2
156.275238	4 <sub>1</sub> -3 <sub>1</sub> E <sub>1</sub>	2.93	33.1	0.034 ± 0.021	26	1.2 ± 1.2
156.285288*	4 <sub>2</sub> -3 <sub>2</sub> E <sub>2</sub>	2.35	36.3	0.065 ± 0.021	54	1.1 ± 0.3
156.581519	8 <sub>1</sub> -7 <sub>0</sub> E <sub>2</sub>	4.15	70.2	0.050 ± 0.010	46	1.0 ± 0.2
160.640122	2 <sub>0</sub> -2 <sub>1</sub> E <sub>2</sub>	2.38	15.95	0.090 ± 0.019	26	3.2 ± 0.5
160.718291	6 <sub>2</sub> -5 <sub>1</sub> E <sub>1</sub>	2.22	50.2	0.039 ± 0.009	29	1.3 ± 0.2
160.753934	1 <sub>0</sub> -1 <sub>1</sub> E <sub>2</sub>	1.45	12.2	0.038 ± 0.009	35	1.0 ± 0.2

<sup>1</sup>Les flux ont été dérivés par ajustement d'une gaussienne, et l'incertitude donnée est déterminée en considérant une incertitude de calibration de 15% en raison de la faible élévation de la source. <sup>2</sup>Le niveau de bruit atteint pour ces observations est de 8 mK (rms). <sup>3</sup>Une étoile suivant la fréquence indique que la raie est proche d'une raie de CH<sub>2</sub>DCN. Dans ce cas, les deux raies ont été ajustées simultanément par deux gaussiennes (voir texte).

source), la relation précédente se ramène à :

$$T_{mb} = \frac{A_e}{2k} \Omega_{lobe} \left( \frac{\Omega_{source}}{\Omega_{lobe}} \right) B_\nu$$

où le terme  $\frac{\Omega_{source}}{\Omega_{lobe}}$  est le facteur de dilution. Or, d'après le théorème des antennes,  $\Omega_{lobe} \times A_e = \lambda^2$ , donc la relation précédente se réduit à :

$$T_{mb} = \frac{\lambda^2}{2k} \left( \frac{\Omega_{source}}{\Omega_{lobe}} \right) B_\nu \quad (1)$$

Si la source est étendue sur le lobe du télescope, le facteur de dilution vaut 1, tandis qu'il est très inférieur à 1 dans le cas d'une source dont l'extension est petite devant la taille du lobe.

La brillance produite par une source de température T et d'opacité  $\tau$  est :

$$B_\nu = \frac{h\nu/k}{e^{h\nu/kT} - 1} (1 - e^{-\tau}) \quad (2)$$

TAB. 3.4 – Intensités de lobe principal<sup>1</sup>, températures au pic<sup>2</sup> et largeurs des raies de l'isotope <sup>13</sup>CH<sub>3</sub>OH observées en direction de IRAS16293–2422.

Fréquence GHz	Transition	$\mu^2 S$ Debye <sup>2</sup>	$E_{up}$ K	$\int T_{mb} dv$ K km s <sup>-1</sup>	$T_{mb}$ mK	$\Delta v$ km s <sup>-1</sup>
156.299374	5 <sub>05</sub> -5 <sub>-15</sub>	0.697	47.1	0.19±0.08	65	3.0 ± 0.5
160.507694	2 <sub>12</sub> -3 <sub>03</sub>	0.300	21.3	0.08±0.02	29	2.4 ± 0.6
330.194042	7 <sub>-17</sub> -6 <sub>-16</sub>	5.55	69.0	0.51±0.16	120	3.8 ± 0.6
330.252798	7 <sub>07</sub> -6 <sub>06</sub>	5.66	63.4	0.43±0.15	100	4.0 ± 1.2
330.265233	7 <sub>-61</sub> -6 <sub>-60</sub>	1.50	253.4	0.15±0.10	80	1.7 ± 1.0
330.277270	7 <sub>61</sub> -6 <sub>60</sub>	1.50	258.1	0.12±0.08	60	2.0 ± 0.7
330.277270	7 <sub>62</sub> -6 <sub>61</sub>	1.50	258.1	0.12±0.08	60	2.0 ± 0.7
330.319110	7 <sub>52</sub> -6 <sub>51</sub>	2.78	202.0	0.45±0.21	90	4.8 ± 0.9
330.319110	7 <sub>53</sub> -6 <sub>52</sub>	2.78	202.0	0.45±0.21	90	4.8 ± 0.9
330.342534	7 <sub>44</sub> -6 <sub>43</sub>	3.81	144.2	0.07±0.05	50	1.3 ± 6.7
330.342534	7 <sub>43</sub> -6 <sub>42</sub>	3.81	144.2	0.07±0.05	50	1.3 ± 6.7
330.408395	7 <sub>34</sub> -6 <sub>33</sub>	4.61	111.4	0.91±0.19	200	4.2 ± 0.7
330.442421	7 <sub>16</sub> -6 <sub>15</sub>	5.69	84.49	0.42±0.12	140	2.8 ± 0.9
330.535822	7 <sub>25</sub> -6 <sub>24</sub>	5.14	85.80	0.25±0.11	40	5.6 ± 1.2
330.535890	7 <sub>-26</sub> -6 <sub>-25</sub>	5.20	89.45	0.25±0.11	40	5.6 ± 1.2

<sup>1</sup>Les flux ont été dérivés par ajustement d'une gaussienne, et l'incertitude donnée est déterminée en considérant une incertitude de calibration de 15%. <sup>2</sup>Le niveau de bruit atteint pour ces observations est de 37 mK (rms).

La profondeur optique de la transition s'écrit :

$$\tau = \frac{h}{\Delta\nu} N_u B_{ul} (e^{h\nu/kT} - 1) \quad (3)$$

avec  $N_u$  la densité de colonne de la population du niveau haut de la transition (densité de colonne « vraie », et non pas moyennée dans le lobe d'observation),  $B_{ul}$  le coefficient d'Einstein de la transition et  $\Delta\nu$  la largeur à mi-hauteur (en vitesse) de la raie.

En utilisant la relation  $B_{ul} = A_{ul} c^3 / 8\pi h \nu^3$  entre les deux coefficients d'Einstein et en substituant les relations (2) et (3) dans l'équation (1), on obtient :

$$T_{mb} = \frac{hc^3 N_u A_{ul}}{8\pi k \nu^2 \Delta\nu} \frac{\Omega_{source}}{\Omega_{lobe}} \left( \frac{1 - e^{-\tau}}{\tau} \right)$$

En inversant cette relation, on peut alors déterminer la densité de colonne du niveau haut  $N_{up}$  (diluée dans le lobe puisqu'on a fait disparaître le facteur de dilution) à partir du flux observé pour une transition d'un niveau « up » à un niveau « low » (Goldsmith & Langer 1999) :

$$N_{\text{up}} = g_{\text{up}} \frac{8\pi k\nu^2 \int T_{\text{mb}} dv}{hc^3 A_{\text{ul}} g_{\text{up}}} \left( \frac{\tau}{1 - e^{-\tau}} \right),$$

où  $A_{\text{ul}}$  le coefficient d'Einstein de désexcitation spontanée de la transition « up → low »,  $g_{\text{up}}$  la dégénérescence du niveau « up » considéré.

Ou, de manière équivalente, si l'on connaît les forces de raies  $\mu^2\text{S}$  :

$$N_{\text{up}} = g_{\text{up}} \frac{3k \int T_{\text{mb}} dv}{8\pi^3 \nu (\mu^2\text{S})} \left( \frac{\tau}{1 - e^{-\tau}} \right)$$

Dans le cas où les raies sont optiquement minces ( $\tau \ll 1$ ), cette relation se réduit à une proportionnalité simple entre le flux observé et la population du niveau haut.

Si on trace dans un diagramme les valeurs de  $\ln\left(\frac{N_{\text{up}}}{g_{\text{up}}}\right)$  en fonction de  $E_{\text{up}}$  pour chacune des transitions observées, les différents points doivent se trouver sur la droite :

$$\ln\left(\frac{N_{\text{up}}}{g_{\text{up}}}\right) = \ln\left(\frac{N_{\text{tot}}}{Z(T)}\right) - \frac{E_{\text{up}}}{kT},$$

de pente  $-\frac{1}{kT}$  et d'ordonnée à l'origine  $\ln\left(\frac{N_{\text{tot}}}{Z(T)}\right)$ .

Le calcul de la fonction de partition à la température déterminée par la pente de la droite permet donc de déterminer la densité de colonne totale de la molécule. Il est à noter que les différentes transitions ne sont pas toujours observées avec des lobes de même taille. Si on ne fait aucune correction sur les densités de colonne  $N_{\text{up}}$ , cela revient à considérer que la source est plus étendue que le plus grand lobe, et la densité de colonne dérivée est alors la vraie densité de colonne de la source (si celle-ci est homogène bien entendu). Par contre, si la source est moins étendue que le plus grand lobe, il convient de corriger les  $N_{\text{up}}$  en conséquence ( $N_{\text{up}}$  calculé par la formule ci-dessus donne la densité de colonne *moyennée* dans le lobe). En effet, pour que la méthode soit cohérente il faut s'assurer que la densité de colonne de chaque transition est moyennée dans un même lobe  $\Omega_{\text{source}}$ . Il faut donc corriger chaque  $N_{\text{up}}$  d'un facteur  $\Omega_{\text{source}}/\Omega_{\text{lobe}}$ , où  $\Omega_{\text{lobe}}$  dépend de la fréquence et du télescope utilisé.

### 3.3.2 Les diagrammes rotationnels des différents isotopes

Nous avons tracé les diagrammes rotationnels pour chacun des isotopes  $\text{CH}_2\text{DOH}$ ,  $\text{CH}_3\text{OD}$ ,  $\text{CHD}_2\text{OH}$ ,  $\text{CD}_3\text{OH}$  et  $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$  en corrigeant les densités de colonne pour les ramener au lobe le plus petit de nos observations ( $10''$ ), suivant la suggestion de van Dishoeck et al. (1995) d'une émission accrue du méthanol dans la région centrale  $\leq 10''$  de IRAS16293. Nous supposons donc implicitement que la source est homogène sur une étendue de  $10''$ , et qu'aucune émission extérieure ne vient polluer le signal pour les transitions observées avec des lobes plus gros. Il est à noter que si la région émettrice des molécules considérées est plus petite que  $10''$ , comme le suggère l'étude plus récente de Schöier et al. (2002), qui montre la présence d'un saut d'abondance de deux ordres de grandeur pour le méthanol dans la région centrale  $\leq 2''$  (saut

qui provient de l'évaporation des manteaux de glace), les rapports que nous trouvons entre les différents isotopes restent corrects, et seules les densités de colonne absolues doivent être corrigées d'un facteur  $(10''/2'')^2$ .

La Figure 3.5 présente les diagrammes rotationnels des différents isotopes.

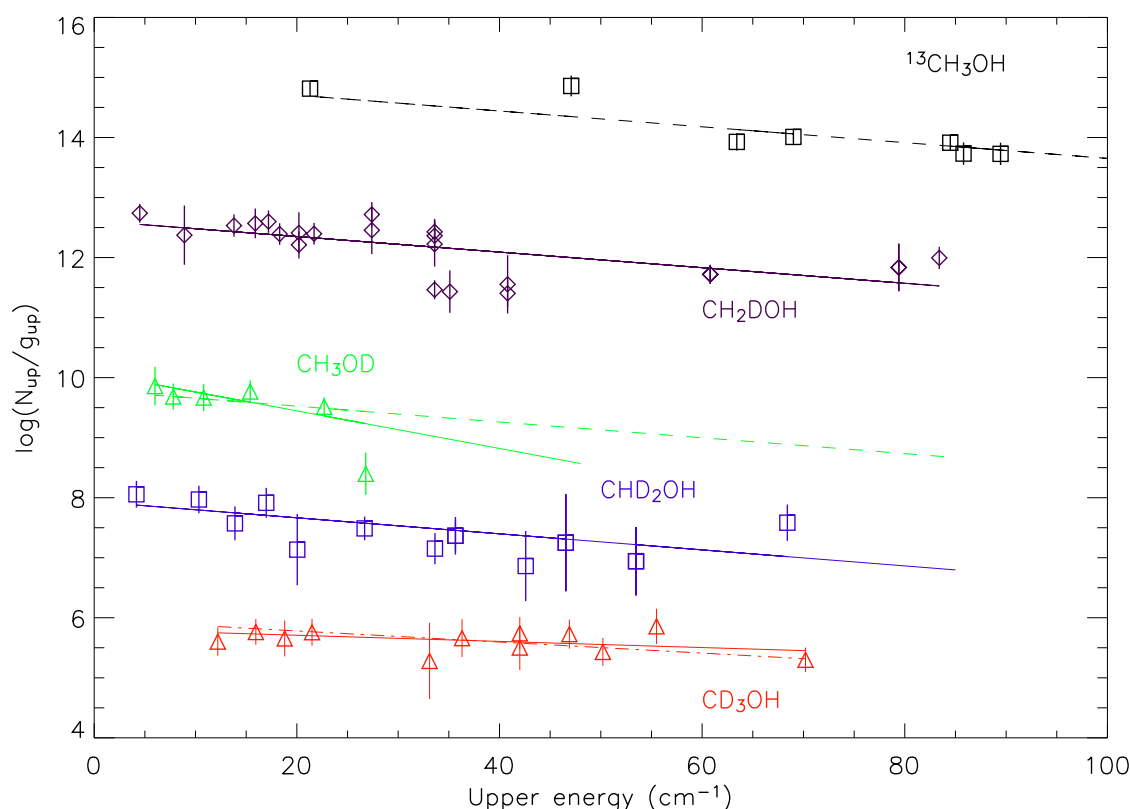


FIG. 3.5 – Diagrammes rotationnels des différents isotopes du méthanol. Noter que les points pour  $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$ ,  $\text{CH}_3\text{OD}$ ,  $\text{CHD}_2\text{OH}$  et  $\text{CD}_3\text{OH}$  ont été traduits verticalement respectivement de +3, -2, -4 et -4 par rapport à  $\text{CH}_2\text{DOH}$ . Les droites sont en pointillés quand la température a été fixée à celle du  $\text{CH}_2\text{DOH}$  (*cf.* texte).

Les températures rotationnelles et densités de colonne obtenues pour les différents isotopes deutérés sont reportées dans la Table 3.5. Les deux molécules pour lesquelles nous avons le plus de transitions sont  $\text{CH}_2\text{DOH}$  et  $\text{CHD}_2\text{OH}$ . Les températures rotationnelles dérivées pour ces deux molécules sont de l'ordre de 50 K.

La température rotationnelle dérivée pour  $\text{CH}_3\text{OD}$  est significativement plus basse, certainement du fait que nous n'avons que des transitions de basse énergie pour la contraindre. Nous avons donc aussi dérivé la densité de colonne de  $\text{CH}_3\text{OD}$  en fixant la température rotationnelle à celle de  $\text{CH}_2\text{DOH}$  et  $\text{CHD}_2\text{OH}$  (47,5 K).

Dans le cas de  $\text{CD}_3\text{OH}$ , la température rotationnelle déduite est par contre plus grande ( $\sim 80$  K). Dans ce cas aussi, nous avons estimé la densité de colonne avec une température

rotationnelle de 47 K.

La densité de colonne de  $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$  a été dérivée par la même méthode, en utilisant les paramètres moléculaires de la base de Spectroscopie Moléculaire de Cologne (Müller et al. 2001). La température rotationnelle déduite est de  $208 \pm 70$  K, et la densité de colonne moyennée sur un lobe de  $10''$  est de  $(2.6 \pm 1.4) \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ . Nous avons aussi calculé la densité de colonne pour une température fixée de 50 K et 80 K. Elle est de  $(1.4 \pm 0.5) \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ , indépendante de la température dans cette gamme de température. En utilisant la valeur du rapport  $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$  de 70 estimée par Boogert et al. (2002a), nous en déduisons une colonne densité de  $(9.8 \pm 3.5) \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$  pour  $\text{CH}_3\text{OH}$ . Les valeurs de fractionnement des différents isotopes deutérés observés sont listés dans la Table 3.5.

Molécule	$T_{\text{rot}}(\text{K})$	$N_{\text{tot}}(\text{cm}^{-2})$	Fractionnement <sup>b</sup> (%)
$\text{CH}_2\text{DOH}$	$48 \pm 3$	$(3.0 \pm 0.4) \times 10^{15}$	$37_{-19}^{+38}$
$\text{CH}_3\text{OD}$	$20 \pm 4$	$(1.5 \pm 0.5) \times 10^{14}$	$1.8_{-1.2}^{+2.2}$
	$47.5^a$	$(2.8 \pm 0.7) \times 10^{14}$	$3.5_{-2.1}^{+3.9}$
$\text{CHD}_2\text{OH}$	$47 \pm 7$	$(6.1 \pm 1.6) \times 10^{14}$	$7.4_{-4.4}^{+8.4}$
$\text{CD}_3\text{OH}$	$85 \pm 28$	$(1.4 \pm 0.7) \times 10^{14}$	$1.7_{-1.5}^{+2.3}$
	$47 \pm 7^a$	$(7.8 \pm 1.8) \times 10^{13}$	$0.96_{-0.56}^{+1.04}$

TAB. 3.5 – Température rotationnelle, densité de colonne et fractionnement. <sup>a</sup> Température rotationnelle fixée, voir texte. <sup>b</sup> Le fractionnement est calculé par rapport à la densité de colonne de  $\text{CH}_3\text{OH}$ , déterminée à partir de celle de  $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$  (pour  $T_{\text{rot}}$  fixée à 50 K, et un rapport  $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$  de 70), voir texte. Les barres d’erreur sur le fractionnement sont associées à un intervalle de confiance de 90%, voir annexe A.

## 3.4 Discussion

### 3.4.1 Premiers résultats

Le résultat principal de cette étude observationnelle est la première détection de méthanol doublement et triplement deutéré dans une source astronomique. Le fractionnement de ces molécules apparaît très élevé, avec un rapport pour la molécule simplement deutérée  $\text{CH}_2\text{DOH}/\text{CH}_3\text{OH} \sim 30\%$ . Le fractionnement de la molécule triplement deutérée est de l’ordre de 1%, ce qui représente un surplus de 13 ordres de grandeur par rapport au fractionnement que l’on attendrait en se basant sur des arguments statistiques simplistes (*i.e.* qui ne prennent pas en compte les problèmes de barrière d’énergie et de thermodynamique) en comparant avec le rapport cosmique  $[\text{D}]/[\text{H}] = 1.5 \times 10^{-5}$  (Linsky 2003).

### 3.4.2 Comparaison aux modèles de chimie sur les grains

Un consensus général semble se dégager pour attribuer la formation du méthanol à une chimie sur les grains. Mais cette idée repose plus sur l'impossibilité pour les modèles de phase gazeuse de reproduire les abondances absolues observées pour le méthanol (la formation du méthanol est très inefficace en phase gazeuse) que sur des preuves concrètes de l'implication de réactions sur les grains.

Les observations de plusieurs isotopes deutérés du méthanol représentent un outil puissant pour contraindre les modèles de formation du méthanol par comparaison des fractionnements des différents isotopes.

L'hypothèse principale sous-jacente aux modèles de formation du méthanol par chimie active sur les grains actuellement publiés est que le méthanol est le produit d'hydrogénations successives du CO, avec comme intermédiaire le formaldéhyde.

#### Prédictions statistiques

Il est intéressant de comparer en tout premier lieu nos observations aux prédictions « statistiques » pour les fractionnements des différents isotopes. Si on néglige toute barrière d'énergie dans les hydrogénations et deutérations successives de CO à la surface des grains (c'est-à-dire qu'on considère qu'elles sont toutes équiprobables), on peut calculer facilement les rapports de fractionnement (que l'on qualifiera de « statistiques ») des différents isotopes en fonction du rapport  $\alpha$  entre les deux taux d'accrétion des atomes de deutérium et des atomes d'hydrogène à la surface des grains (Rodgers & Charnley 2002). En effet, si les atomes de deutérium sont aléatoirement distribués dans les différents isotopes, les fractionnements  $F$  doivent être les suivants :  $F(\text{CH}_3\text{OD}) = \alpha$ ,  $F(\text{CH}_2\text{DOH}) = 3\alpha$ ,  $F(\text{CHD}_2\text{OH}) = 3\alpha^2$  et  $F(\text{CD}_3\text{OH}) = \alpha^3$ . Les trois observations indépendantes de  $\text{CH}_2\text{DOH}$ ,  $\text{CHD}_2\text{OH}$  et  $\text{CD}_3\text{OH}$  sont compatibles aux incertitudes près avec une valeur pour le rapport  $\alpha$  des taux d'accrétion de D et de H de 0,1–0,2. En prenant en compte les différences de masse des deux atomes D et H, ce rapport correspond à un rapport d'abondance en phase gazeuse de  $\text{D}/\text{H} = \sqrt{2} \times (0,1-0,2) = 0,15-0,3$ . Cependant, ce modèle simple échoue pour expliquer la faible abondance de  $\text{CH}_3\text{OD}$ . Le rapport mesuré  $\text{CH}_2\text{DOH}/\text{CH}_3\text{OD} \sim 20$  est en effet grand devant la valeur 3 que l'on attendrait statistiquement. Une explication possible à ce paradoxe est donnée plus loin.

#### Modèle prenant en compte les différentes barrières d'activation

Des modèles de chimie sur les grains plus précis prenant en compte les différentes barrières d'activation pour les réactions ont été développés ces dernières années. Les valeurs des barrières d'énergie utilisées sont en général calculées quantiquement et dépendent bien entendu de la nature des grains ou des glaces. Nous comparons nos observations au modèle développé par Stantcheva & Herbst (2003). Ce modèle est basé sur la résolution directe de l'équation maîtresse



(*cf.* paragraphe 8.2) et donne donc essentiellement les mêmes résultats que les modèles de Monte-Carlo décrits par Caselli et al. (2002a) ou Charnley et al. (1997).

La Figure 3.6 présente les prédictions des fractionnements (relatifs à  $\text{CH}_3\text{OH}$ ) des différents isotopes deutérés du méthanol en fonction du rapport atomique D/H dans le gaz au moment de la formation des manteaux de glace. Dans la limite des faibles températures (10 K), ce modèle donne essentiellement les mêmes résultats que la description « statistique ». Les rapports de fractionnement observés dans l’enveloppe d’IRAS16293–2422 ont été tracés avec leur barre d’erreur à 90% de confiance en trait gras sur chaque courbe, permettant de déduire le rapport D/H atomique dans le gaz requis pour former ces molécules. Les trois molécules  $\text{CD}_3\text{OH}$ ,  $\text{CHD}_2\text{OH}$  et  $\text{CH}_2\text{DOH}$  sont compatibles avec une formation à la surface des grains en présence d’un rapport atomique D/H de 0,1–0,2.

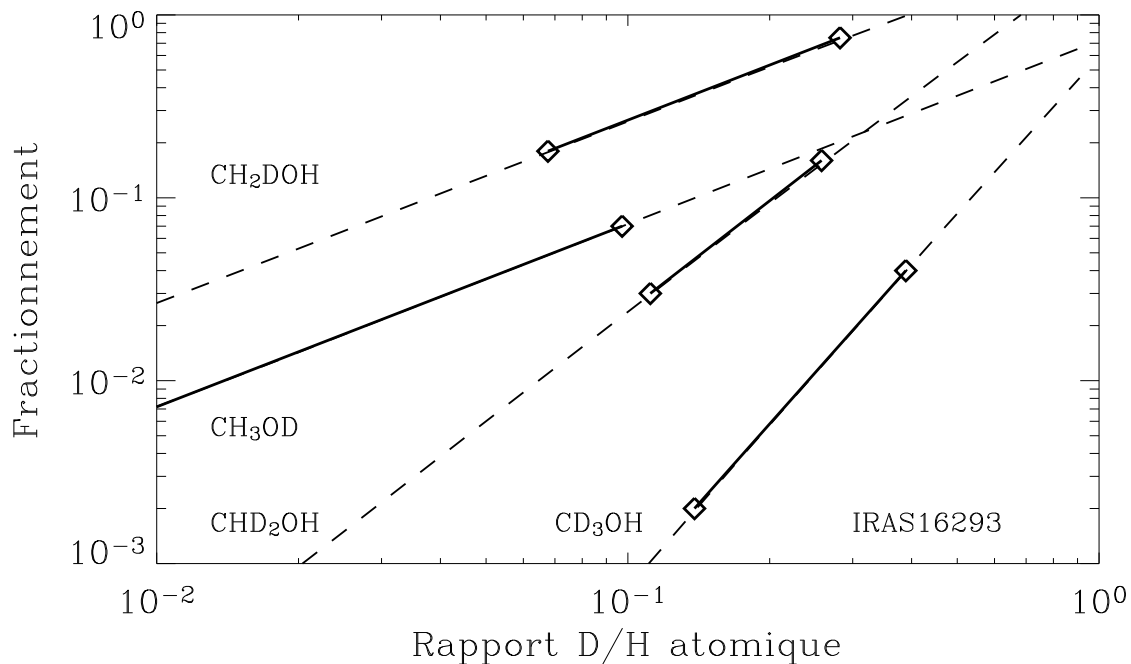
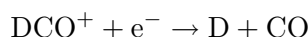
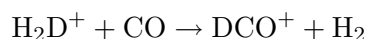


FIG. 3.6 – Fractionnement des différents isotopes en fonction du rapport d’abondance d’atomes de deutérium et d’hydrogène dans la phase gazeuse. Pointillés : prédictions du modèle de Stantcheva & Herbst (2003). Traits gras : observations sur IRAS16293–2422.

### Le rapport D/H atomique en phase gazeuse

Un tel fractionnement atomique dans la phase gazeuse ( $\text{D}/\text{H} \sim 0,1$ ) semblait impossible à expliquer avec les modèles de chimie en phase gazeuse disponibles au moment où  $\text{CH}_2\text{DOH}$  et  $\text{CHD}_2\text{OH}$  ont été détectés (2002). Un nouveau modèle prenant en compte non seulement  $\text{H}_2\text{D}^+$  mais aussi ses isotopes multiples deutérés ( $\text{D}_2\text{H}^+$  et  $\text{D}_3^+$ ) a été développé en 2003 pour

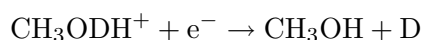
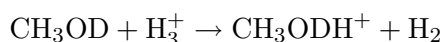
répondre à ce problème (Roberts et al. 2003). Ce modèle prédit une augmentation du rapport atomique D/H jusqu'à des valeurs de 0,1 quand la densité du gaz est très élevée et que les espèces lourdes telles que CO sont très déplétées. En effet, le deutérium atomique est produit à partir de  $\text{H}_2\text{D}^+$  et ses isotopes multiples deutérés par les réactions :



où le CO est recyclé. Un enrichissement en  $\text{H}_2\text{D}^+$ , permis dans les environnements fortement déplétés en CO et atomes lourds (principaux destructeurs de  $\text{H}_3^+$  et de ses isotopes), entrainera donc aussi un enrichissement en deutérium atomique.

### Le problème de $\text{CH}_3\text{OD}$

Le  $\text{CH}_3\text{OD}$  semble sous-abondant par rapport aux prédictions du modèle pour un rapport D/H atomique compris entre 0,1 et 0,2. Une explication plausible est que le fractionnement de  $\text{CH}_3\text{OD}$  est modifié dans le gaz chaud après évaporation des manteaux des grains. En effet, cet isotope pourrait être préférentiellement converti en  $\text{CH}_3\text{OH}$  à la suite de réactions de protonations suivies de dissociation radiative :



Les réactions correspondantes avec les ions  $\text{H}_2\text{D}^+$ ,  $\text{D}_2\text{H}^+$  et  $\text{D}_3^+$  sont négligeables vue leur faible abondance dans le gaz chaud du Cœur Chaud.

Cette hypothèse est confirmée théoriquement par l'étude d'Osamura et al. (2004), motivée par nos observations, qui montre qu'aucun échange intra-moléculaire ne peut changer  $\text{CH}_3\text{OD}$  en  $\text{CH}_2\text{DOH}$ , ce qui entraîne que  $\text{CH}_3\text{OD}$  et  $\text{CH}_2\text{DOH}$  doivent bien être considérés comme deux entités différentes, dont les évolutions dans le gaz après évaporation ne sont pas liées. L'ajout des réactions de protonation présentées ci-dessus aux modèles de phase gazeuse permet effectivement d'expliquer quantitativement les observations de méthanol deutéré dans IRAS16293 (Osamura et al. 2004).

Il est à noter que les autres isotopes du méthanol pour lesquels l'atome de deutérium est fixé sur le carbone sont moins vulnérables aux réactions de protonation (du fait de la faible électronégativité du carbone par rapport à l'oxygène).

### 3.4.3 Limitation des observations due à la faible résolution spatiale

Les observations effectuées avec le radiotélescope de l'IRAM ont une résolution spatiale faible (le lobe le plus petit pour ces observations est de  $10''$ ) comparée à la dimension angu-

laire du Cœur Chaud tel qu'il apparaît dans la modélisation de l'enveloppe de la protoétoile IRAS16293–2422 (de l'ordre de  $2''$ , Ceccarelli et al. 2000a,b; Schöier et al. 2002). Des observations interférométriques de molécules complexes effectuées au Plateau de Bure (Bottinelli et al. 2004b) confirment effectivement la présence du Cœur Chaud, avec une taille de  $1,5''$ , en accord avec la modélisation.

Toutes les densités de colonne que nous avons dérivées ici sont donc toujours diluées dans un lobe de  $10''$ , sans parler d'éventuelles contributions de régions plus externes venant polluer les lobes plus larges. Il semble donc tout à fait urgent de faire des observations interférométriques de quelques transitions bien choisies des isotopes du méthanol pour contraindre plus en détail les rapports de fractionnement dans les différentes parties de l'enveloppe, et pouvoir ainsi mieux comprendre les processus de formation du méthanol.

### 3.5 Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre la détection de plusieurs isotopes deutérés du méthanol en direction de la protoétoile IRAS16293–2422, et la détermination de leur fractionnement : les deux isotopes simplement deutérés  $\text{CH}_2\text{DOH}$  et  $\text{CH}_3\text{OH}$ , l'isotope doublement deutéré  $\text{CHD}_2\text{OH}$  et l'isotope triplement deutéré  $\text{CD}_3\text{OH}$ . Une telle étude multi-isotopes apporte une contrainte forte aux modèles de chimie. Les observations sont en accord avec la formation du méthanol sur les grains, dans une phase où le rapport  $D/H$  *atomique* est de l'ordre de 0,1–0,2 dans le gaz. Ces conditions peuvent intervenir dans l'environnement froid de la phase prestellaire quand le CO est très déplété.

# Chapitre 4

## Méthanol et formaldéhyde deutérés sur un échantillon de protoétoiles de faible masse

### Sommaire

---

<b>4.1</b>	<b>Introduction</b>	<b>67</b>
<b>4.2</b>	<b>Observations et résultats</b>	<b>68</b>
4.2.1	Observations	68
4.2.2	Résultats	75
<b>4.3</b>	<b>Analyse</b>	<b>79</b>
4.3.1	Peut-on contraindre la taille de la source ?	79
4.3.2	Le fractionnement en formaldéhyde	81
4.3.3	Le fractionnement en méthanol	81
<b>4.4</b>	<b>Discussion</b>	<b>85</b>
4.4.1	Premiers résultats	86
4.4.2	Comparaison aux modèles de chimie sur les grains	86
<b>4.5</b>	<b>Conclusion</b>	<b>89</b>

---

### 4.1 Introduction

Le chapitre précédent a présenté la détection de méthanol deutéré très abondant dans la protoétoile de faible masse IRAS 16293–2422. Les fractionnements obtenus sont en effet de l'ordre de 37 % pour  $\text{CH}_2\text{DOH}$ , 7 % pour  $\text{CHD}_2\text{OH}$  et 1 % pour  $\text{CD}_3\text{OH}$ . Ces fractionnements impliquent, pour pouvoir être expliqués dans le cadre de modèles de chimie à la surface des grains, un rapport D/H *atomique* de l'ordre de 0,1–0,2 dans la phase gazeuse au moment de la formation des manteaux de glace, rapport beaucoup plus grand que ce que ne prévoyaient en 2002 les modèles de chimie en phase gazeuse. Il apparaissait donc tout à fait essentiel de vérifier

si IRAS 16293–2422 est une exception en son genre, ou si ce fort fractionnement du méthanol est une constante dans les protoétoiles de faible masse.

Nous avons donc effectué des observations de méthanol deutéré sur un échantillon de protoétoiles de faible masse. Ce programme d’observation a été mené sur une année et demie au télescope de 30 m de l’IRAM. Près de 100 heures d’observation ont été attribuées pour ce projet entre septembre 2002 et septembre 2003. Nous présentons de plus des observations de formaldéhyde deutéré HDCO et D<sub>2</sub>CO vers ces mêmes protoétoiles.

L’analyse approfondie de ces observations est en préparation au moment de la rédaction de cette thèse, et nous ne présentons donc ici que les premiers résultats.

## 4.2 Observations et résultats

### 4.2.1 Observations

Nous avons observé avec le télescope de 30 m de l’IRAM les transitions des cinq molécules HDCO, D<sub>2</sub>CO, CH<sub>2</sub>DOH, CH<sub>3</sub>OD et CHD<sub>2</sub>OH, listées dans les Tables 4.2, 4.3, 4.4 et 4.5 vers les six protoétoiles NGC1333–IRAS4A, IRAS4B, IRAS2, L1448N, L1448mm et L1157mm. Nous présentons également dans la Table 4.2 des observations de formaldéhyde deutéré HDCO et D<sub>2</sub>CO vers la protoétoile de faible masse L1527.

Ces sources sont toutes des protoétoiles de classe 0 (*i.e.* elles sont dans la phase la plus précoce de la période d’effondrement). Elles sont situées dans le nuage de Perseus, à une distance de 220 parsecs (Cernis 1990), à l’exception de L1157mm qui se situe dans une condensation isolée (Bachiller & Perez Gutierrez 1997) et de L1527 qui se situe dans le nuage de Taurus. La Table 4.1 résume les principales caractéristiques de ces sources.

Les observations ont été effectuées en septembre 2002, novembre 2002, septembre 2003 et mars 2004, en mode « beam-switch ». Les coordonnées des sources ainsi que les offsets sont listés dans la Table 4.1. Les flux sont donnés en unités de température de lobe principal, et les barres d’erreur ont été calculées comme la somme quadratique du bruit statistique (rms du bruit dans les données) et de l’incertitude de calibration. Pour prendre en compte l’incertitude de calibration atmosphérique ainsi que les incertitudes de réjection de bande, sachant que toutes les observations ont été prises à haute élévation, nous avons adopté les incertitudes de calibration suivantes : 5% pour les raies observées à des fréquences inférieures à 130 GHz, 10% pour les fréquences comprises entre 130 et 260 GHz, et 15% pour les fréquences plus élevées. Les limites supérieures sont données à  $3\sigma$  :

$$\int T_{\text{mb}} dv \leq 3\sigma(1 + \alpha)\sqrt{\delta v \cdot \Delta v}$$

où  $\alpha$  est l’incertitude de calibration indiquées plus haut,  $\sigma$  le rms des observations,  $\delta v$  leur résolution spectrale et  $\Delta v$  la largeur supposée de la raie (1,5 km s<sup>-1</sup> pour D<sub>2</sub>CO, 3 km s<sup>-1</sup> pour le méthanol deutéré).

TAB. 4.1 – Caractéristiques des protoétoiles observées en méthanol et formaldéhyde deutéré. IRAS 16293–2422 a été rajoutée pour comparaison.

Source	$\alpha$ (2000)	$\delta$ (2000)	Localisation	Distance (parsec)	$L_{\text{bol}}$ ( $L_{\odot}$ )	$M_{\text{env}}$ ( $M_{\odot}$ )	$L_{\text{smm}}/L_{\text{bol}}$ (%)	$T_{\text{bol}}$ (K)	$V_{\text{LSR}}$ ( $\text{km s}^{-1}$ )	offsets (arcsec)
IRAS4A	03 :29 :10.3	31 :13 :32	Perseus	220	6	2,3	5	34	+7	(-150, 240)
IRAS4B	03 :29 :12.0	31 :13 :09	Perseus	220	6	2,0	3	36	+7	(-180, 260)
IRAS2	03 :28 :55.4	31 :14 :35	Perseus	220	16	1,7	$\leq 1$	50	+7	(70, 180)
L1448N	03 :25 :36.3	30 :45 :15	Perseus	220	6	3,5	3	55	+5	(300, 300)
L1448mm	03 :25 :38.8	30 :44 :05	Perseus	220	5	0,9	2	60	+5	(300, 300)
L1157mm	20 :39 :06.2	68 :02 :22	Isolée	325	11	1,6	5	60	+5	(150, 0)
L1527	04 :39 :53.9	26 :03 :10	Taurus	140	2	0,9	0,7	60	+5	(240, 0)
IRAS16293	16 :32 :22.6	-24 :28 :33.0	$\rho$ -Ophiucus	160	27	5,4	2	43	+4	

Les transitions de HDCO observées sont présentées dans la Figure 4.1 pour NGC1333–IRAS4A, IRAS4B et IRAS2 et dans la Figure 4.2 pour L1448N, L1448mm et L1157mm. Les transitions de D<sub>2</sub>CO sont présentées dans les Figures 4.3 et 4.4. La Figure 4.5 présente quelques exemples de raies CH<sub>2</sub>DOH observées en direction de IRAS4A, IRAS4B et IRAS2.

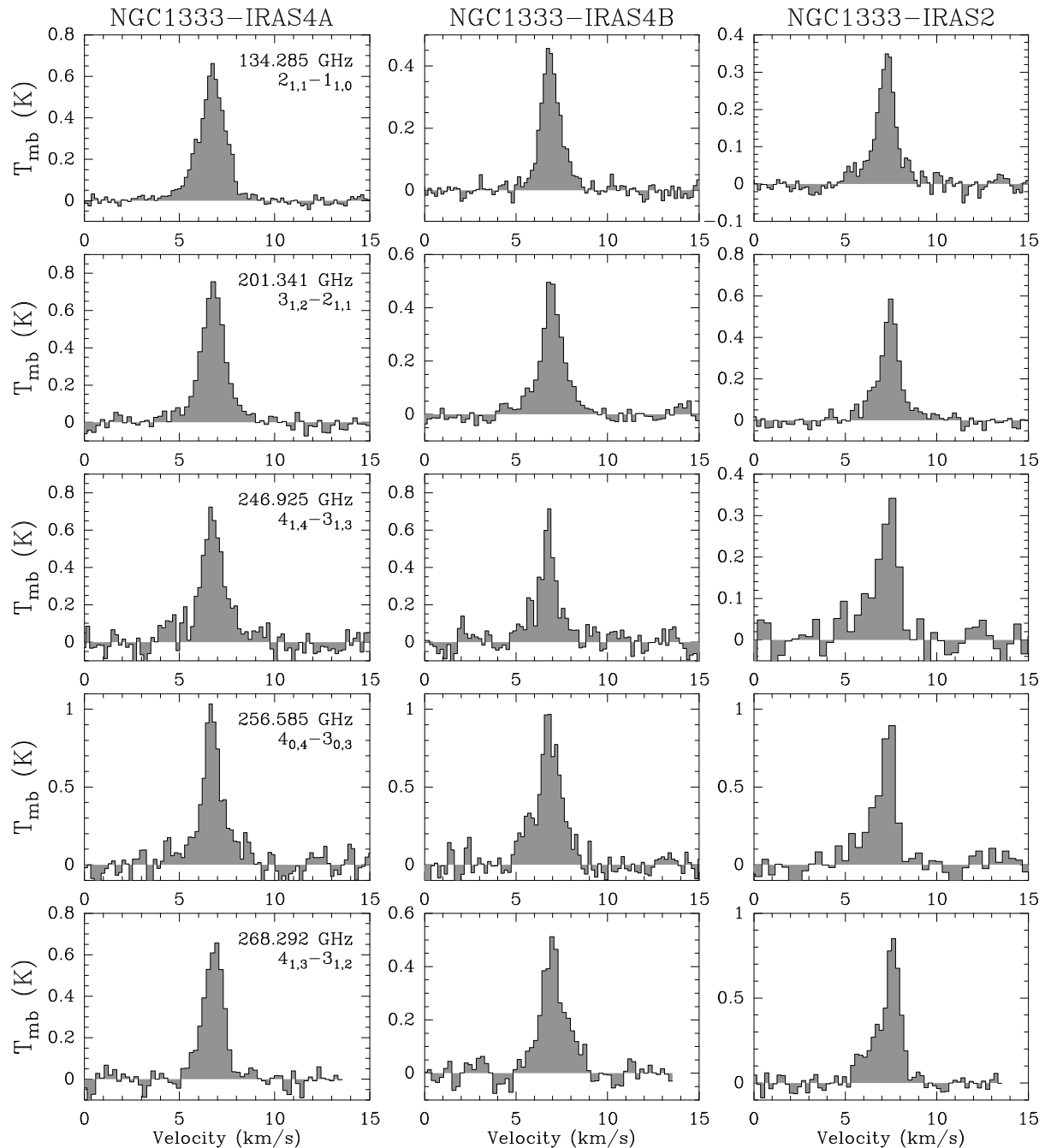


FIG. 4.1 – Transitions de HDCO observées sur IRAS4A, IRAS4B et IRAS2.

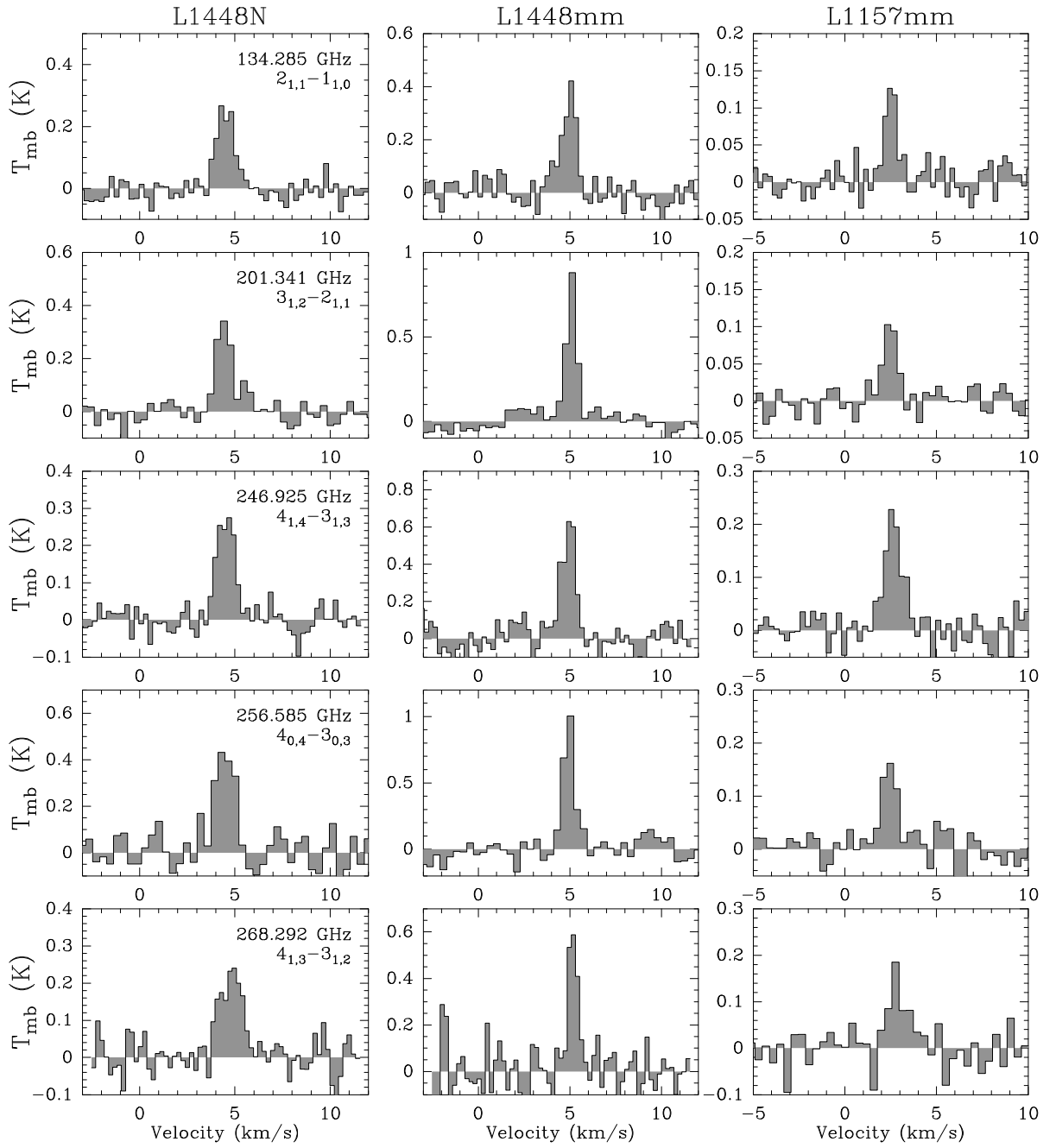


FIG. 4.2 – Transitions de HDCO observées sur L1448N, L1448mm et L1157mm.



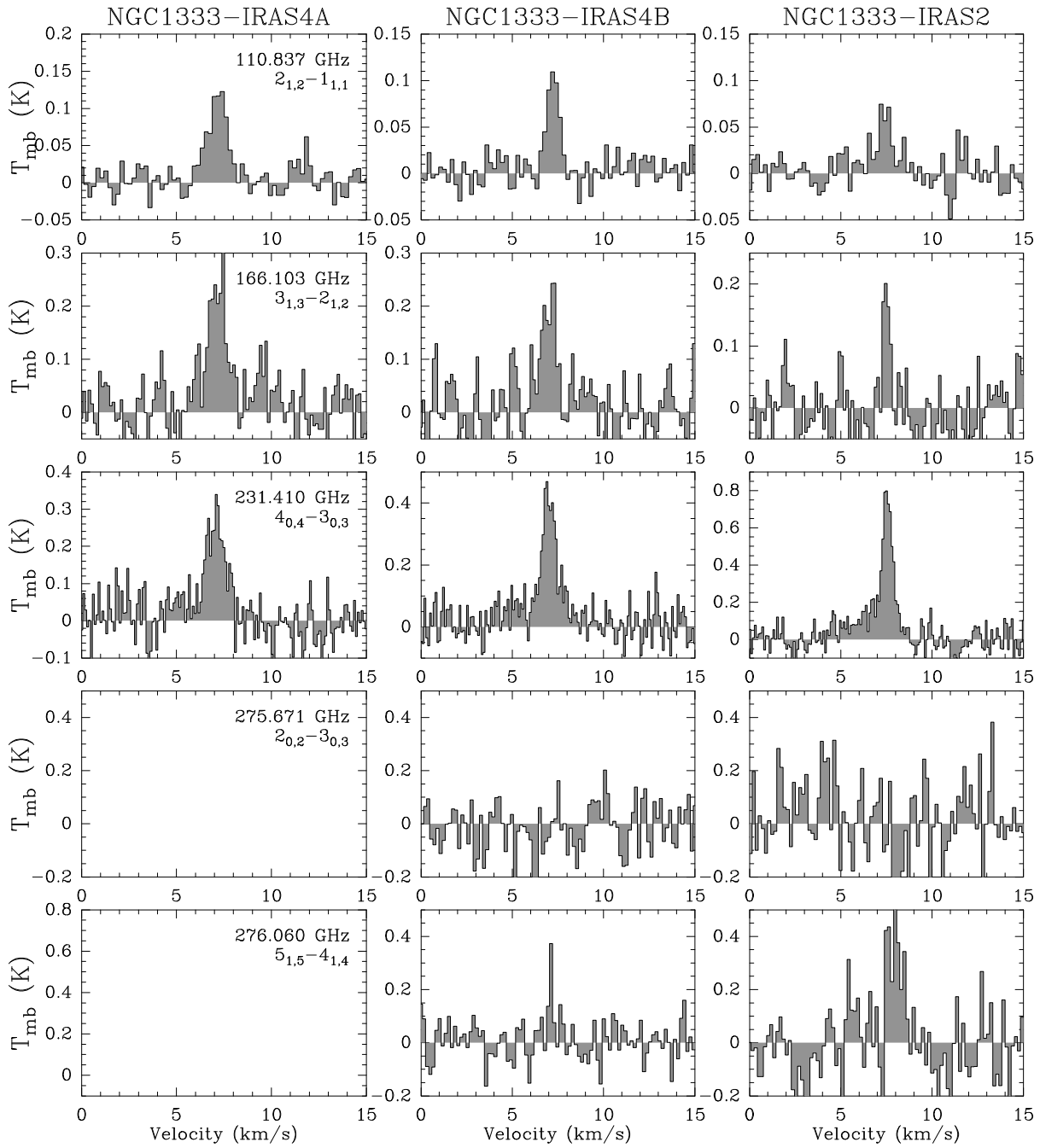


FIG. 4.3 – Transitions de  $\text{D}_2\text{CO}$  observées sur IRAS4A, IRAS4B et IRAS2.

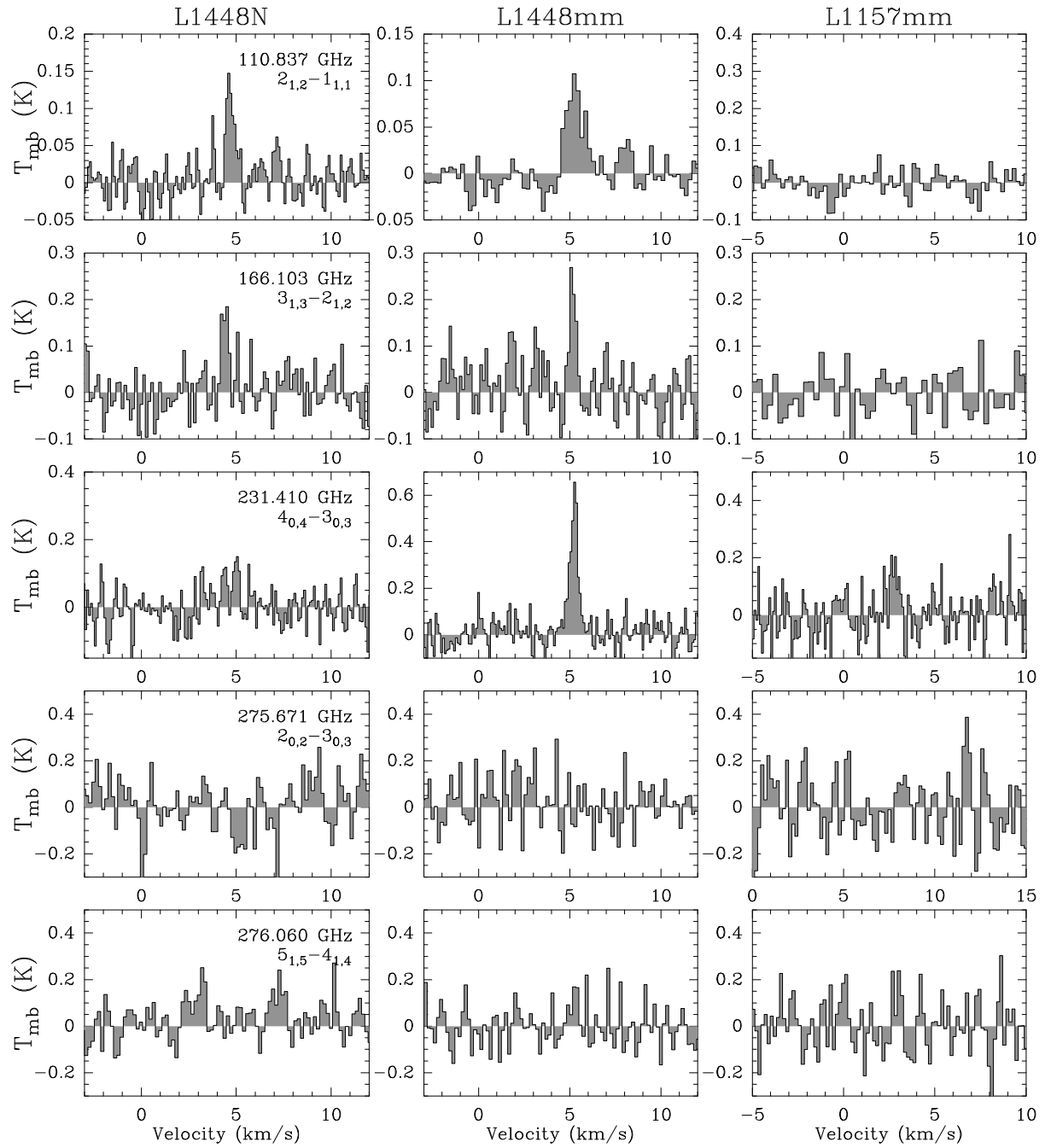


FIG. 4.4 – Transitions de D<sub>2</sub>CO observées sur L1448N, L1448mm et L1157mm.

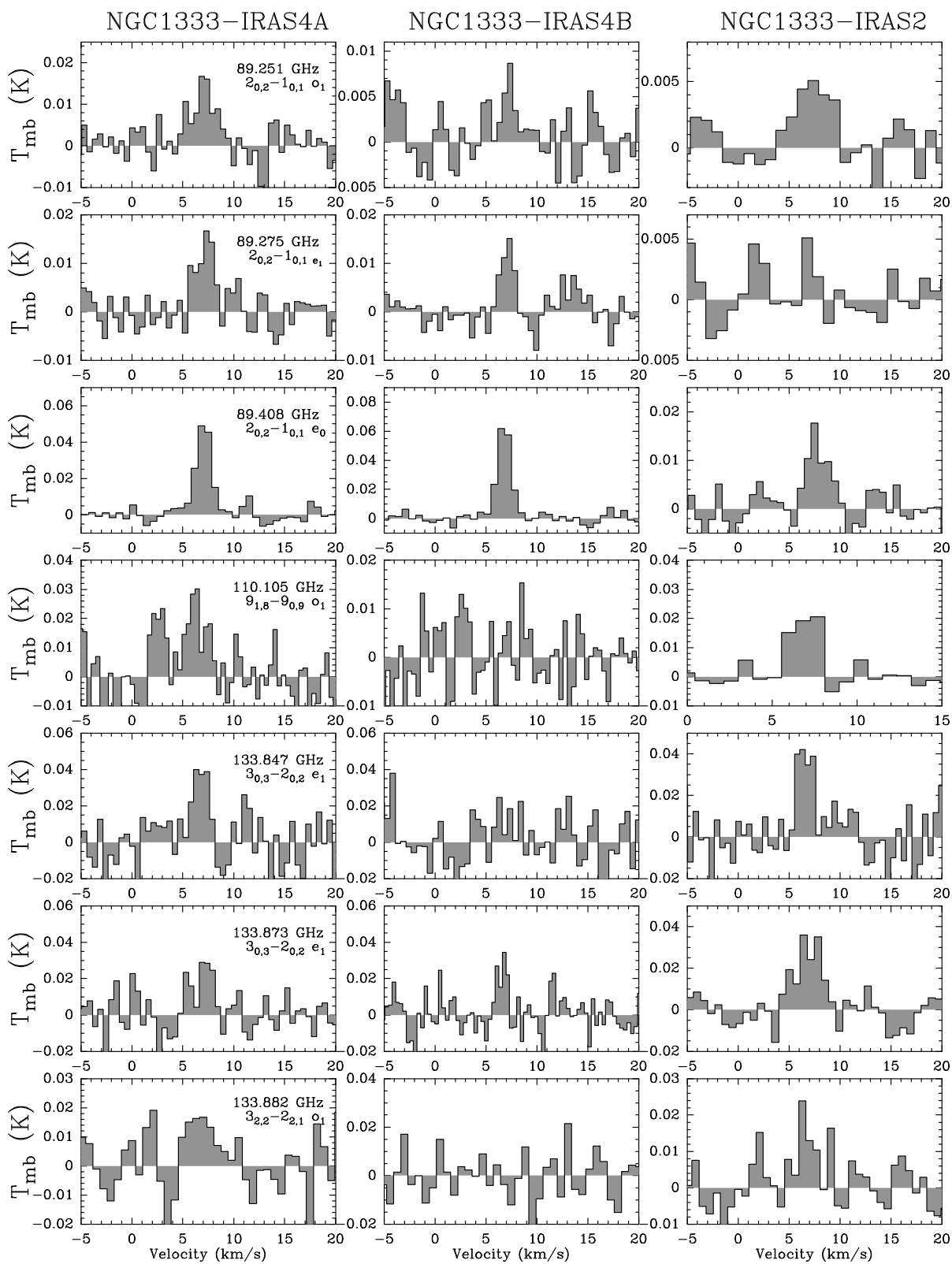


FIG. 4.5 – Exemples de transitions de  $\text{CH}_2\text{DOH}$  observées sur IRAS4A, IRAS4B et IRAS2.

### 4.2.2 Résultats

Nous avons détecté les deux isotopes deutérés du formaldéhyde (HDCO et D<sub>2</sub>CO) en direction de toutes les protoétoiles de l'échantillon. Les flux intégrés, températures de pic et largeurs des raies sont indiqués dans la Table 4.2.

Dans le cas du méthanol deutéré, seules les trois sources IRAS4A, IRAS4B et IRAS2 montrent de bonnes détections. Ces trois sources sont en effet les plus intenses en méthanol CH<sub>3</sub>OH (Maret et al. en prep). CH<sub>2</sub>DOH a été détecté dans toutes les protoétoiles observées, mais dans le cas de L1448N, L1448mm et L1157mm, seule la transition de plus basse énergie a été détectée. CH<sub>3</sub>OD n'a été détecté qu'en direction de IRAS4A, IRAS4B, L1448mm et L1157mm (avec seulement une transition dans ces deux dernières sources). Enfin, le méthanol doublement deutéré CHD<sub>2</sub>OH n'a été détecté qu'en direction de IRAS4A, IRAS4B et IRAS2. Des limites supérieures sont dérivées pour les autres sources. Malgré le temps d'intégration substantiel (420 minutes pour L1448N, 108 minutes pour L1448mm et 264 minutes pour L1157mm), les limites supérieures sur le fractionnement ne sont pas très contraignantes, principalement du fait que le méthanol CH<sub>3</sub>OH est moins abondant dans ces protoétoiles. Les flux intégrés, températures de pic et largeurs de raies sont présentés dans les Tables 4.3 et 4.4. La Table 4.5 recense les limites supérieures à 3 $\sigma$  pour les flux des raies non détectées.

Les raies observées sont relativement étroites, de l'ordre de 1 à 1,5 km s<sup>-1</sup> pour le formaldéhyde deutéré, et jusqu'à 3 km s<sup>-1</sup> pour le méthanol deutéré.

En particulier pour le formaldéhyde, les raies des isotopes deutérés sont moins larges que les raies de l'isotope principal H<sub>2</sub>CO (Maret et al. 2004). Les raies de H<sub>2</sub>CO sont en effet probablement contaminées par une contribution de l'outflow (*cf.* la discussion de Maret et al. 2004). La faible largeur des raies HDCO et D<sub>2</sub>CO plaide en faveur d'une émission dominée par l'enveloppe externe froide des protoétoiles. Ceci est en accord avec l'observation de l'émission étendue du D<sub>2</sub>CO dans la protoétoile IRAS16293–2422 (Ceccarelli et al. 2001). Cette observation a été interprétée comme une indication que D<sub>2</sub>CO provient de l'évaporation de manteaux de glaces riches en CO (qui évaporent autour de 20 K, *i.e.* à une température plus basse que les manteaux principalement constitués d'eau).

Dans le cas du méthanol deutéré, le rapport signal sur bruit des raies observées est trop faible pour tirer une conclusion claire, mais il semble aussi que les raies soient plus étroites que les raies de l'isotope principal et que l'émission soit donc elle aussi dominée par la contribution de l'enveloppe froide.

L'analyse des transitions du H<sub>2</sub>CO et CH<sub>3</sub>OH a conduit à la conclusion que l'abondance de ces deux molécules subit un saut dans la partie interne de l'enveloppe des protoétoiles considérées (Maret et al. 2004, Maret et al. en prep.). Ce saut d'abondance provient de la libération dans le gaz de H<sub>2</sub>CO et CH<sub>3</sub>OH suite à l'évaporation des glaces riches en eau, dans la région où

TAB. 4.2 – Intensités de lobe principal, températures au pic et largeurs de raies des transitions de formaldéhyde deutéré observées vers NGC1333–IRAS4A, IRAS4B, IRAS2, L1448N, L1448mm, L1157mm et L1527. Les barres d'erreur sont la somme quadratique de l'erreur statistique et de l'erreur de calibration (*cf.* texte). Les limites supérieures sont données à  $3\sigma$  (*cf.* texte).

Fréq. GHz	$E_{up}$ $\text{cm}^{-1}$	IRAS4A			IRAS4B			IRAS2		
		$\int T_{mb}dv$ $\text{K.km.s}^{-1}$	$T_{mb}$ K	$\Delta v$ $\text{km.s}^{-1}$	$\int T_{mb}dv$ $\text{K.km.s}^{-1}$	$T_{mb}$ K	$\Delta v$ $\text{km.s}^{-1}$	$\int T_{mb}dv$ $\text{K.km.s}^{-1}$	$T_{mb}$ K	$\Delta v$ $\text{km.s}^{-1}$
HDCO										
134.285	12.3	0.95±0.10	0.58	1.5±0.1	0.59±0.06	0.43	1.3±0.1	0.43±0.04	0.33	1.2±0.1
201.341	19.0	1.09±0.11	0.73	1.5±0.1	0.70±0.07	0.47	1.4±0.1	0.69±0.07	0.53	1.2±0.1
246.924	26.1	0.98±0.11	0.65	1.6±0.1	0.74±0.10	0.57	1.2±0.1	0.50±0.08	0.33	1.4±0.2
256.585	21.4	1.19±0.13	0.94	1.2±0.1	1.38±0.15	0.83	1.6±0.1	1.11±0.14	0.92	1.1±0.1
268.292	27.9	0.82±0.13	0.64	1.2±0.1	0.74±0.12	0.44	1.6±0.1	1.00±0.16	0.76	1.1±0.1
D <sub>2</sub> CO										
110.838	9.3	0.16±0.01	0.12	1.2±0.1	0.095±0.011	0.12	0.8±0.1	0.077±0.017	0.062	1.2±0.4
166.103	14.8	0.33±0.04	0.24	1.3±0.2	0.24±0.04	0.22	1.0±0.2	0.095±0.022	0.21	0.4±0.1
231.410	19.4	0.37±0.05	0.28	1.3±0.1	0.47±0.06	0.41	1.1±0.1	0.63±0.07	0.76	0.8±0.1
275.671	20.9	—	—	—	≤ 0.16	-	-	≤ 0.26	-	-
276.060	31.4	—	—	—	0.10±0.03	0.46	0.2±0.1	0.44±0.10	0.45	0.9±0.2
Fréq. GHz	$E_{up}$ $\text{cm}^{-1}$	L1448N			L1448mm			L1157mm		
		$\int T_{mb}dv$ $\text{K.km.s}^{-1}$	$T_{mb}$ K	$\Delta v$ $\text{km.s}^{-1}$	$\int T_{mb}dv$ $\text{K.km.s}^{-1}$	$T_{mb}$ K	$\Delta v$ $\text{km.s}^{-1}$	$\int T_{mb}dv$ $\text{K.km.s}^{-1}$	$T_{mb}$ K	$\Delta v$ $\text{km.s}^{-1}$
HDCO										
134.285	12.3	0.32±0.04	0.26	1.1±0.1	0.38±0.06	0.38	0.9±0.1	0.11±0.01	0.13	0.8±0.1
201.341	19.0	0.36±0.05	0.38	1.0±0.1	0.53±0.06	0.97	0.6±0.1	0.10±0.03	0.12	0.8±0.1
246.924	26.1	0.35±0.04	0.30	1.1±0.1	0.61±0.08	0.63	0.9±0.1	0.26±0.03	0.20	1.2±0.1
256.585	21.4	0.60±0.10	0.47	1.2±0.2	0.79±0.10	1.11	0.7±0.1	0.18±0.03	0.18	0.9±0.1
268.292	27.9	0.34±0.08	0.24	1.4±0.3	0.40±0.08	0.66	0.6±0.1	0.15±0.05	0.20	0.7±0.4
D <sub>2</sub> CO										
110.838	9.3	0.074±0.010	0.137	0.5±0.1	0.113±0.014	0.10	1.1±0.1	≤ 0.67	-	-
166.103	14.8	0.088±0.018	0.204	0.4±0.1	0.114±0.021	0.27	0.4±0.1	≤ 0.10	-	-
231.410	19.4	≤ 0.11	-	-	0.325±0.038	0.59	0.5±0.4	0.109±0.031	0.182	0.6±0.2
275.671	20.9	≤ 0.20	-	-	≤ 0.16	-	-	≤ 0.26	-	-
276.060	31.4	≤ 0.13	-	-	0.092±0.051	0.14	0.6±0.4	≤ 0.21	-	-
Fréq. GHz	$E_{up}$ $\text{cm}^{-1}$	L1527								
		$\int T_{mb}dv$ $\text{K.km.s}^{-1}$	$T_{mb}$ K	$\Delta v$ $\text{km.s}^{-1}$						
HDCO										
134.285	12.3	0.75±0.08	1.1	0.7±0.1						
201.341	19.0	0.70±0.08	0.98	0.7±0.1						
256.585	21.4	0.77±0.10	0.18	0.9±0.1						
D <sub>2</sub> CO										
110.838	9.3	0.133±0.016	0.243	0.5±0.1						
166.103	14.8	0.219±0.038	0.327	0.6±0.1						
231.410	19.4	0.367±0.047	0.601	0.6±0.1						
276.060	31.4	≤ 0.23	-	-						

TAB. 4.3 – Intensités de lobe principal, températures au pic et largeurs de raies des transitions de méthanol deutéré observées vers NGC1333–IRAS4A, IRAS4B et IRAS2. Les barres d’erreur sont la somme quadratique de l’erreur statistique et de l’erreur de calibration. Les limites supérieures sont données à  $3\sigma$ .

Fréq. GHz	$E_{up}$ $\text{cm}^{-1}$	IRAS4A			IRAS4B			IRAS2		
		$\int T_{mb}dv$ $\text{K.km.s}^{-1}$	$T_{mb}$ K	$\Delta v$ $\text{km.s}^{-1}$	$\int T_{mb}dv$ $\text{K.km.s}^{-1}$	$T_{mb}$ K	$\Delta v$ $\text{km.s}^{-1}$	$\int T_{mb}dv$ $\text{K.km.s}^{-1}$	$T_{mb}$ K	$\Delta v$ $\text{km.s}^{-1}$
CH <sub>2</sub> DOH										
89.251	17.2	0.042±0.008	0.014	2.8±0.6	0.011±0.005	0.008	1.3±0.8	0.021±0.008	0.006	3.4±1.2
89.275	13.8	0.033±0.007	0.015	2.0±0.5	0.023±0.004	0.015	1.4±0.3	≤ 0.013	-	-
89.408	4.5	0.098±0.008	0.054	1.7±0.1	0.113±0.008	0.072	1.5±0.1	0.038±0.005	0.015	2.3±0.4
110.105	83.4	0.054±0.014	0.022	2.3±0.6	≤ 0.027	-	-	0.050±0.009	0.025	1.8±3.4
133.847	18.3	0.084±0.022	0.046	1.7±0.4	≤ 0.077	-	-	0.090±0.017	0.045	1.9±0.3
133.873	21.7	0.064±0.019	0.025	2.4±0.7	0.035±0.009	0.030	1.1±0.2	0.104±0.020	0.034	2.9±0.5
133.882	33.6	0.054±0.019	0.018	2.6±0.9	≤ 0.039	-	-	0.048±0.026	0.016	2.9±2.0
133.893	27.4	≤ 0.052	-	-	0.055±0.018	0.024	2.1±0.7	≤ 0.10	-	-
133.930	27.4	≤ 0.052	-	-	≤ 0.039	-	-	0.080±0.022	0.025	3.0±0.7
134.066	8.9	0.157±0.022	0.107	1.4±0.2	0.197±0.024	0.160	1.2±0.1	0.115±0.021	0.042	2.6±0.4
134.112	20.2	0.068±0.015	0.071	0.9±0.2	≤ 0.052	-	-	≤ 0.065	-	-
207.781	15.9	0.094±0.017	0.067	1.3±0.2	0.089±0.017	0.024	3.6±0.6	0.144±0.029	0.067	2.0±0.5
223.071	33.6	0.116±0.022	0.059	1.9±0.3	0.042±0.011	0.034	1.1±0.3	0.229±0.035	0.081	2.7±0.4
223.107	35.1	≤ 0.10	-	-	0.030±0.010	0.024	1.2±0.4	0.234±0.041	0.098	2.3±0.4
223.128	40.8	≤ 0.083	-	-	0.046±0.013	0.037	1.2±0.4	0.189±0.055	0.073	2.4±0.8
223.131	79.4	0.015±0.01	0.025	0.6±0.2	0.02±0.01	0.02	0.9±0.3	0.04±0.03	0.016	2.3±1.2
223.131	79.4	0.015±0.01	0.025	0.6±0.2	0.02±0.01	0.02	0.9±0.3	0.04±0.03	0.016	2.3±1.2
223.154	60.8	0.046±0.02	0.02	2.0±0.5	0.02±0.01	0.015	1.2±0.5	0.13±0.03	0.05	2.6±0.4
223.154	60.8	0.046±0.02	0.02	2.0±0.5	0.02±0.01	0.015	1.2±0.5	0.13±0.03	0.05	2.6±0.4
223.315	40.8	0.061±0.016	0.040	1.4±0.4	0.083±0.015	0.032	2.5±0.4	0.192±0.032	0.061	3.0±0.4
223.422	33.6	0.126±0.024	0.061	2.0±0.4	0.062±0.010	0.042	1.4±0.2	0.229±0.038	0.064	3.4±0.5
CH <sub>3</sub> OD										
110.189	7.8	≤ 0.03	-	-	0.022±0.009	0.054	0.5±0.2	≤ 0.025	-	-
110.263	10.8	0.041±0.014	0.018	2.0±0.7	≤ 0.03	-	-	≤ 0.02	-	-
110.476	15.4	≤ 0.02	-	-	≤ 0.02	-	-	≤ 0.02	-	-
133.925	6.0	0.076±0.020	0.024	2.7±0.8	0.046±0.015	0.038	1.1±0.5	≤ 0.05	-	-
223.309	26.8	≤ 0.07	-	-	0.035±0.009	0.029	1.2±0.3	≤ 0.15	-	-
226.539	22.7	≤ 0.06	-	-	≤ 0.04	-	-	≤ 0.17	-	-
CHD <sub>2</sub> OH										
83.1292	17.0	≤ 0.03	-	-	0.018±0.005	0.026	0.7±0.2	≤ 0.021	-	-
83.2895	4.2	0.009±0.002	0.016	0.5±0.1	0.024±0.004	0.027	0.9±0.2	≤ 0.021	-	-
83.3036	10.3	0.015±0.006	-	-	0.011±0.004	0.012	0.9±0.3	≤ 0.021	-	-
207.771	33.6	0.066±0.040	0.022	2.8±1.7	0.089±0.025	0.025	3.4±0.9	0.115±0.041	0.029	3.7±1.4
207.827	42.6	≤ 0.07	-	-	0.097±0.027	0.021	4.4±1.0	0.087±0.045	0.016	5.2±2.3
207.864	68.4	0.062±0.030	0.036	1.6±0.7	≤ 0.035	-	-	0.088±0.033	0.035	2.3±1.0
207.868	53.5	0.12±0.04	0.03	3.7±0.8	0.034±0.011	0.02	1.8±0.4	0.13±0.03	0.03	4.8±0.9
207.869	53.5	0.12±0.04	0.03	3.7±0.8	0.034±0.011	0.02	1.8±0.4	0.13±0.03	0.03	4.8±0.9

la température est supérieure à 100 K. Une telle étude n’est malheureusement pas encore possible pour les isotopes deutérés du formaldéhyde et du méthanol, car une telle modélisation nécessite la connaissance des coefficients de collision de ces molécules, données qui ne sont pas

TAB. 4.4 – Intensités de lobe principal, températures au pic et largeurs de raies des transitions de méthanol deutéré détectées vers L1448N, L1448mm et L1157mm. Les barres d’erreur sont la somme quadratique de l’erreur statistique et de l’erreur de calibration. Les limites supérieures sont données à  $3\sigma$ .

Fréq. GHz	$E_{up}$ $\text{cm}^{-1}$	L1448N			L1448mm			L1157mm		
		$\int T_{mb}dv$ $\text{K.km.s}^{-1}$	$T_{mb}$ K	$\Delta v$ $\text{km.s}^{-1}$	$\int T_{mb}dv$ $\text{K.km.s}^{-1}$	$T_{mb}$ K	$\Delta v$ $\text{km.s}^{-1}$	$\int T_{mb}dv$ $\text{K.km.s}^{-1}$	$T_{mb}$ K	$\Delta v$ $\text{km.s}^{-1}$
CH <sub>2</sub> DOH										
89.408		0.029±0.002	0.053	0.5±0.1	0.040±0.007	0.034	1.1±0.2	0.021±0.004	0.057	0.3±1.0
CH <sub>3</sub> OD										
110.189		≤ 0.04	-	-	0.078±0.010	0.073	1.0±0.1	0.025±0.013	0.050	0.5±0.3

TAB. 4.5 – Limites supérieures à  $3\sigma$  sur les intensités de lobe principal des transitions de méthanol deutéré observées vers L1448N, L1448mm et L1157mm.

Fréq. GHz	L1448N	L1448mm	L1157mm
	$\int T_{mb}dv$ $\text{K.km.s}^{-1}$	$\int T_{mb}dv$ $\text{K.km.s}^{-1}$	$\int T_{mb}dv$ $\text{K.km.s}^{-1}$
CH <sub>2</sub> DOH			
89.251	≤ 0.015	≤ 0.03	≤ 0.02
89.275	≤ 0.015	≤ 0.03	≤ 0.02
110.105	≤ 0.03	≤ 0.05	≤ 0.04
207.781	≤ 0.08	≤ 0.08	≤ 0.05
223.071	≤ 0.05	≤ 0.08	≤ 0.05
223.107	≤ 0.05	≤ 0.08	≤ 0.05
223.128	≤ 0.05	≤ 0.08	≤ 0.05
223.131	≤ 0.05	≤ 0.08	≤ 0.05
223.131	≤ 0.05	≤ 0.08	≤ 0.05
223.154	≤ 0.05	≤ 0.08	≤ 0.05
223.154	≤ 0.05	≤ 0.08	≤ 0.05
223.315	≤ 0.04	≤ 0.06	≤ 0.05
223.422	≤ 0.04	≤ 0.06	≤ 0.04
CH <sub>3</sub> OD			
110.263	≤ 0.03	≤ 0.05	≤ 0.03
110.476	≤ 0.02	≤ 0.04	≤ 0.03
223.309	≤ 0.04	≤ 0.06	≤ 0.05
CHD <sub>2</sub> OH			
207.771	≤ 0.08	≤ 0.08	≤ 0.04
207.827	≤ 0.08	≤ 0.08	≤ 0.04
207.864	≤ 0.08	≤ 0.08	≤ 0.04
207.868	≤ 0.08	≤ 0.08	≤ 0.04
207.869	≤ 0.08	≤ 0.08	≤ 0.04

encore disponibles. Cependant, nous pouvons estimer la densité critique de telles molécules. Par exemple pour  $\text{CH}_2\text{DOH}$ , les coefficients d'Einstein des transitions observées varient entre  $10^{-6}$  et  $10^{-5} \text{ s}^{-1}$ . On s'attend à des taux de désexcitation collisionnelle de l'ordre de  $10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ , ce qui conduit à des densités critiques de  $10^5$  à  $10^6 \text{ cm}^{-3}$ . L'approximation de l'équilibre thermodynamique local est ainsi valable dans les parties internes de l'enveloppe. Nous analyserons donc nos données par la méthode du diagramme rotationnel, et on obtiendra ainsi l'abondance de ces molécules moyennée sur l'étendue de la source. Seules des observations interférométriques pourraient permettre de remonter à la distribution spatiale de ces molécules.

Pour une question de cohérence, nous utilisons l'abondance des isotopes principaux  $\text{H}_2\text{CO}$  et  $\text{CH}_3\text{OH}$  déterminée aussi par diagramme rotationnel (et non par le modèle détaillé de Maret et al. 2004). Les fractionnements obtenus sont donc des fractionnements moyens sur l'étendue de la source.

### 4.3 Analyse

Comme nous venons de le discuter, l'analyse des observations se fait par la méthode du diagramme rotationnel (voir paragraphe 3.3.1). Les observations ayant été obtenues à des fréquences très différentes les unes des autres, le lobe du télescope n'est pas le même pour toutes les transitions. En effet, la taille du lobe du télescope de 30 m de l'IRAM est de  $30''$  à 83 GHz et de  $9''$  à 276 GHz. Si la taille de la source est plus petite que le lobe du télescope qui l'observe, il convient de corriger le signal de l'effet de dilution (voir discussion paragraphe 3.3.1). Nous ne connaissons pas la taille des sources émettrices du formaldéhyde et du méthanol dans les protoétoiles considérées. En guise d'exemple illustratif, nous présentons donc dans le prochain paragraphe une étude détaillée des données  $\text{CH}_2\text{DOH}$  sur IRAS4A pour voir si on peut contraindre cette taille d'émission, et pour estimer l'erreur sur le fractionnement apportée par cette incertitude sur la taille de la source.

#### 4.3.1 Peut-on contraindre la taille de la source ?

Nous avons tracé les diagrammes rotationnels de  $\text{CH}_2\text{DOH}$  pour IRAS4A dans les hypothèses où la source a une taille de  $10''$ ,  $15''$ ,  $20''$ ,  $25''$  et  $30''$ . Les données pour  $\text{CH}_2\text{DOH}$  ont été obtenues à des fréquences allant de 89 GHz à 223 GHz, ce qui implique des tailles de lobe de presque  $30''$  à  $11''$ . Les différentes hypothèses sur la taille de la source vont donc avoir pour effet de corriger différemment les effets de dilution suivant la fréquence de la transition (et donc de relever certains points dans le diagramme rotationnel par rapport à d'autres) : si le lobe d'observation est plus petit que la taille de la source, il n'y a pas de correction de dilution à faire, tandis qu'il faut corriger de la dilution les observations effectuées avec un lobe plus grand que la source. Le méthanol ayant la particularité (contrairement à la molécule de CO par exemple) de ne pas présenter de bijection entre l'énergie du niveau haut de la transition et la fréquence de la transition, la correction de dilution a un effet assez imprévisible sur le diagramme rotationnel.



Nous avons calculé dans chaque cas le  $\chi^2$  réduit de l'ajustement d'une droite dans le diagramme rotationnel. Si seule la taille supposée de la source est la cause de la dispersion des points dans le diagramme rotationnel, le  $\chi^2$  est minimum dans le cas où la taille supposée de la source est proche de sa taille réelle (en effet les points doivent alors s'approcher de l'alignement).

Les résultats sont présentés dans la Table 4.6. Le  $\chi^2$  réduit diminue quand la taille de la source augmente, ce qui laisse supposer que la source est étendue. Néanmoins, toute cette étude suppose que l'émission est homogène sur la source, qui a la même taille pour toutes les fréquences, et que la dispersion des points dans le diagramme rotationnel est seulement due au fait que la taille de la source est mal contrainte, hypothèses qui ne sont pas forcément remplies. En effet, les différentes transitions peuvent provenir de régions différentes (par exemple les transitions à plus haute énergie proviennent certainement d'une région plus chaude et moins étendue que les transitions à basse énergie) et la dispersion dans le diagramme rotationnel peut aussi être causée par des effets d'opacité, ou des écarts à l'équilibre thermodynamique. Il semble donc illusoire dans ces conditions de déterminer la taille de la source par cette méthode. Seules des observations interférométriques peuvent répondre à cette question.

TAB. 4.6 – Température rotationnelle et densité de colonne de CH<sub>2</sub>DOH suivant la taille supposée de la région émettrice (IRAS4A).

Taille source	T <sub>rot</sub> (K)	N <sub>CH<sub>2</sub>DOH</sub> (cm <sup>-2</sup> )	$\chi^2_{\text{red}}$
10''	27,1±1,3	(4,3±0,4)×10 <sup>14</sup>	13,5
15''	31,3±1,7	(2,4±0,3)×10 <sup>14</sup>	8,5
20''	36,2±2,3	(1,8±0,2)×10 <sup>14</sup>	5,2
25''	42,2±3,2	(1,7±0,2)×10 <sup>14</sup>	3,2
30''	46,2±3,8	(1,7±0,2)×10 <sup>14</sup>	2,9

Il est néanmoins intéressant d'étudier l'erreur qui est commise sur la densité de colonne des différents isotopes suivant l'hypothèse faite sur la taille de la source. La Table 4.7 présente les densités de colonne des isotopes du méthanol en fonction de la taille de la source.

Les densités de colonne de CH<sub>3</sub>OD et CHD<sub>2</sub>OH ont été déterminées en fixant la température rotationnelle à celle dérivée pour CH<sub>2</sub>DOH (*cf.* Table 4.6), pour laquelle nous avons un plus grand nombre de transitions. Les densités de colonne changent d'un facteur 2 à 3 suivant la taille de la source. Dans le cas de CH<sub>3</sub>OH, seules les estimations de densité de colonne pour des sources de taille inférieure à 15'' sont valables puisque les observations ont été prises avec des lobes de taille inférieure à 15''. Par contre, les rapports entre les différents isotopes varient très peu avec la taille de la source (*cf.* Table 4.7). Pour la suite de l'étude, nous donnerons donc les densités de colonne en supposant que les sources émettrices sont incluses dans le plus petit lobe d'observation, *i.e.* 10''. Les rapports de fractionnement relativement à l'isotope principal (CH<sub>3</sub>OH ou H<sub>2</sub>CO) devront être utilisés avec précaution du fait de la possible opacité de ces

TAB. 4.7 – Densités de colonne pour les isotopes du méthanol dans IRAS4A, déterminées en fixant la température rotationnelle à celle dérivée pour CH<sub>2</sub>DOH (*cf.* Table 4.6), et rapports entre isotopes.

Taille source	CH <sub>2</sub> DOH ( $\times 10^{14}$ cm <sup>-2</sup> )	CH <sub>3</sub> OD ( $\times 10^{13}$ cm <sup>-2</sup> )	CHD <sub>2</sub> OH ( $\times 10^{13}$ cm <sup>-2</sup> )	CH <sub>3</sub> OH <sup>a</sup> ( $\times 10^{14}$ cm <sup>-2</sup> )	$\frac{\text{CH}_3\text{OD}}{\text{CH}_2\text{DOH}}$	$\frac{\text{CHD}_2\text{OH}}{\text{CH}_2\text{DOH}}$
10''	4,3±0,4	3,1±0,7	11±1,7	6,9±2,0	$(7,2\pm 1,8)\times 10^{-2}$	0,26±0,05
15''	2,4±0,3	1,6±0,4	6,3±1,0	6,0±1,5	$(6,7\pm 1,9)\times 10^{-2}$	0,26±0,05
20''	1,8±0,2	1,2±0,3	5,0±0,9	—	$(6,7\pm 1,8)\times 10^{-2}$	0,28±0,06
25''	1,7±0,2	1,4±0,3	4,4±0,8	—	$(8,2\pm 2,0)\times 10^{-2}$	0,26±0,06
30''	1,7±0,2	1,5±0,4	3,9±0,7	—	$(8,8\pm 2,6)\times 10^{-2}$	0,23±0,05

<sup>a</sup>A partir des données de Maret et al. (en prep), sans correction d'opacité éventuelle. Les observations ont été faites dans deux bandes de fréquences avec des lobes de 10'' et 14'', et les densités de colonne dans le cas de sources de tailles supérieures à 15'' sont donc les mêmes que pour 15''.

deux molécules. Par contre les rapports entre isotopes deutérés sont certainement exempts de ces problèmes.

### 4.3.2 Le fractionnement en formaldéhyde

La Figure 4.6 présente les digrammes rotationnels obtenus pour les isotopes deutérés du formaldéhyde pour IRAS4A, IRAS4B, IRAS2, L1448N, L1448mm et L1157mm et L1527 dans l'hypothèse que l'émission provient d'une région de 10''.

La Table 4.8 présente les températures rotationnelles et les densités de colonne obtenues. Pour raisons de cohérence avec l'analyse de HDCO et D<sub>2</sub>CO, la densité de colonne de H<sub>2</sub>CO a été recalculée par diagramme rotationnel à partir des données de Maret et al. (2004), en fixant le rapport ortho/para à sa valeur statistique (contrairement à l'étude de Maret et al. (2004) où ce rapport était considéré comme un paramètre libre), et en tenant compte des opacités des raies pour lesquelles H<sub>2</sub><sup>13</sup>CO a été observé.

### 4.3.3 Le fractionnement en méthanol

Les Figures 4.7, 4.8 et 4.9 représentent les diagrammes rotationnels pour IRAS4A, IRAS4B et IRAS2 respectivement dans l'hypothèse d'une source de 10''.

Les densités de colonne obtenues pour chacun des isotopes sont présentées dans la Table 4.9.

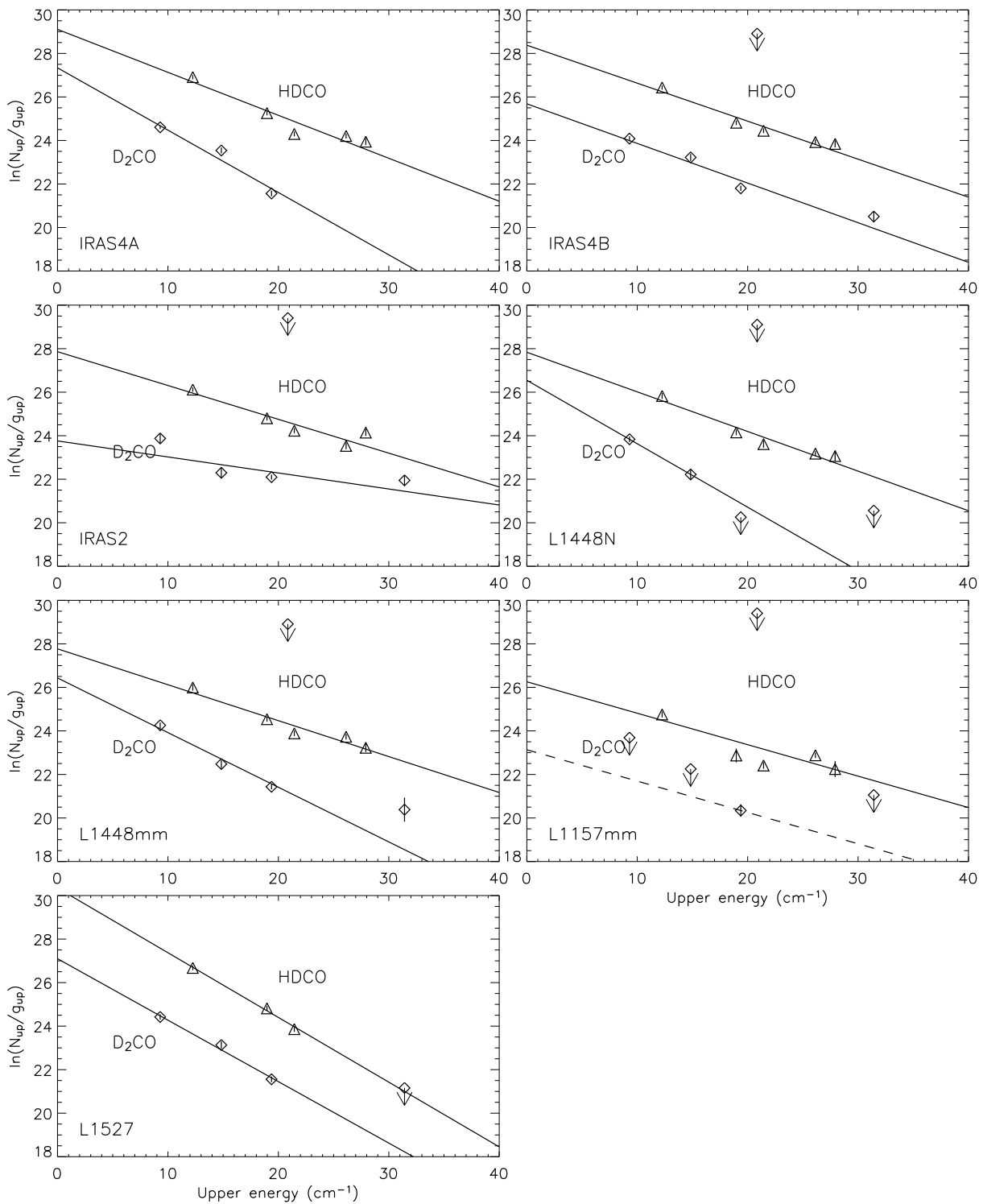
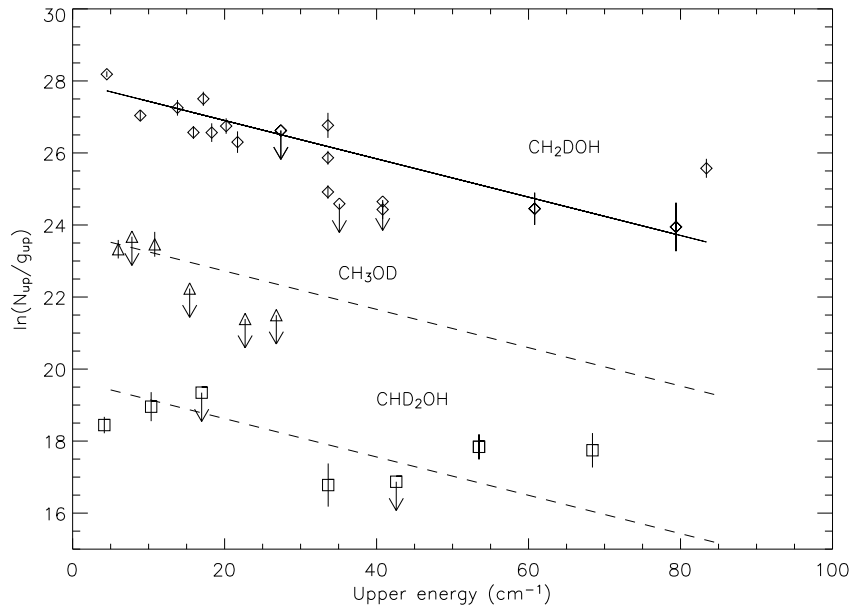


FIG. 4.6 – Diagrammes rotationnels du formaldéhyde deutéré pour les sept sources étudiées.

TAB. 4.8 – Température rotationnelle et densité de colonne du formaldéhyde simplement et doublement deutéré dans l’hypothèse de sources de 10".

Source	H <sub>2</sub> CO <sup>a</sup>		HDCO		D <sub>2</sub> CO	
	T <sub>rot</sub> (K)	N <sub>tot</sub> (×10 <sup>14</sup> cm <sup>-2</sup> )	T <sub>rot</sub> (K)	N <sub>tot</sub> (×10 <sup>13</sup> cm <sup>-2</sup> )	T <sub>rot</sub> (K)	N <sub>tot</sub> (×10 <sup>12</sup> cm <sup>-2</sup> )
IRAS4A	20±2	1.7±0.4	7.3±0.3	3.2±0.6	5.0±0.3	19±4
IRAS4B	38±6	1.7±0.5	8.2±0.5	1.9±0.4	7.9±0.5	7.0±1.5
IRAS2	20±2	0.84±0.22	9.3±0.6	1.3±0.3	19.6±3.6	4.0±1.5
L1448N	14±1	1.1±0.2	7.9±0.5	1.0±0.3	4.9±0.8	8.2±4.4
L1448mm	16±1	0.42±0.11	8.7±0.6	1.1±0.3	5.7±0.3	9.1±2.3
L1157mm	12±1	0.20±0.06	10.0±0.9	0.29±0.09	-	≤ 1.5
L1527	12±1	0.42±0.17	4.8±0.3	6.0±1.8	5.1±0.3	14.9±4.2

<sup>a</sup>Analyse en diagramme rotationnel des données de Maret et al. (2004), *cf.* texte.


 FIG. 4.7 – Diagrammes rotationnels du méthanol deutéré pour IRAS4A (les courbes de CH<sub>3</sub>OD et CHD<sub>2</sub>OH ont été translatées de -2 et -7 selon l’axe des ordonnées pour visibilité).

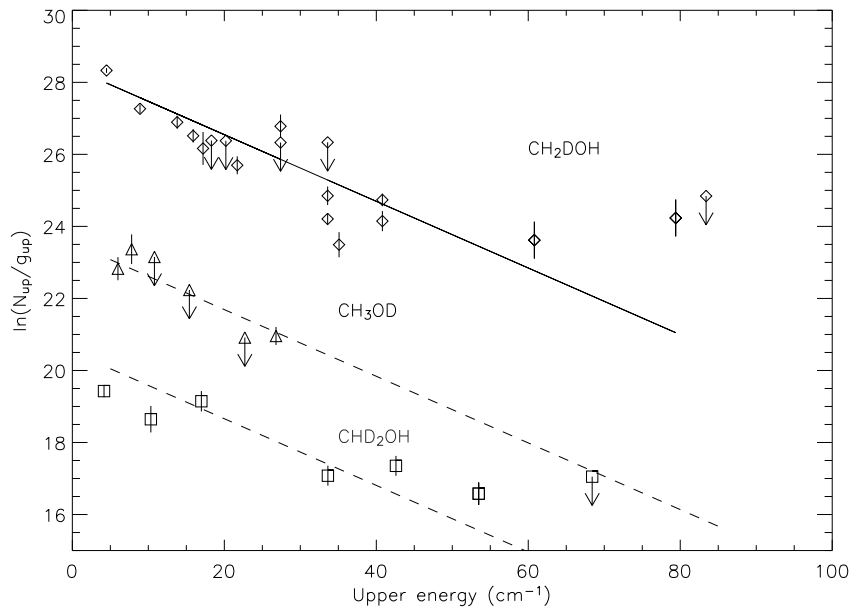


FIG. 4.8 – Diagrammes rotationnels du méthanol deutéré pour IRAS4B (les courbes de CH<sub>3</sub>OD et CHD<sub>2</sub>OH ont été traduites de -2 et -7 selon l'axe des ordonnées pour visibilité).

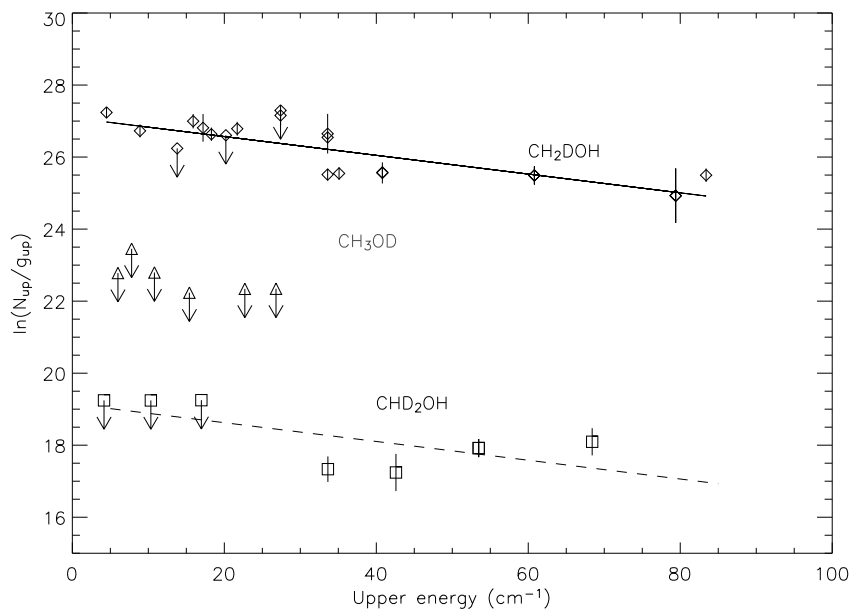


FIG. 4.9 – Diagrammes rotationnels du méthanol deutéré pour IRAS2 (les courbes de CH<sub>3</sub>OD et CHD<sub>2</sub>OH ont été traduites de -2 et -7 selon l'axe des ordonnées pour visibilité).

TAB. 4.9 – Températures rotationnelles et densités de colonne des différents isotopes du méthanol, dans l’hypothèse d’une source de  $10''$ .

Source	CH <sub>3</sub> OH		CH <sub>2</sub> DOH		CH <sub>3</sub> OD	CHD <sub>2</sub> OH
	T <sub>rot</sub> (K)	N <sub>tot</sub> ( $\times 10^{14}$ cm <sup>-2</sup> )	T <sub>rot</sub> (K)	N <sub>tot</sub> ( $\times 10^{14}$ cm <sup>-2</sup> )	N <sub>tot</sub> ( $\times 10^{13}$ cm <sup>-2</sup> )	N <sub>tot</sub> ( $\times 10^{14}$ cm <sup>-2</sup> )
IRAS 4A	38.0±3.2	6.9±1.4	27.1±1.3	4.3±0.4	3.1±0.7 <sup>c</sup>	1.1±0.17 <sup>c</sup>
IRAS 4B	84.9±16.8	8.0±2.7	15.6±0.5	2.9±0.2	1.1±0.20 <sup>c</sup>	0.90±0.10 <sup>c</sup>
IRAS 2	207±48.1	10.1±3.7	55.3±4.9	5.2±0.8	≤ 8.0	2.1±0.4 <sup>c</sup>
L1448N	27.5±4.5	1.2±0.47	27.5±4.5 <sup>a</sup>	2.1±0.6 <sup>b</sup>	≤ 8.0	≤ 10
L1448mm	76.3±19.1	1.6±0.70	76.3±19.1 <sup>a</sup>	11.3±4.7 <sup>b</sup>	40±16 <sup>b</sup>	≤ 6.3
L1157mm	112±201	1.9±5.2	112±201 <sup>a</sup>	10.3±27.7 <sup>b</sup>	22±66 <sup>b</sup>	≤ 9.6

<sup>a</sup> Température fixée à la température rotationnelle de CH<sub>3</sub>OH.

<sup>b</sup> A considérer comme une limite supérieure, puisque la température rotationnelle est certainement surestimée.

<sup>c</sup> Température fixée à la température rotationnelle de CH<sub>2</sub>DOH.

## 4.4 Discussion

Dans cette partie, nous discutons les résultats des observations du formaldéhyde et du méthanol deutérés dans l’échantillon de protoétoiles.

La Table 4.10 récapitule les fractionnements observés en direction des sources étudiées. Pour comparaison, nous avons ajouté IRAS16293–2422, étudiée au chapitre 3.

TAB. 4.10 – Récapitulatif des fractionnements du formaldéhyde et du méthanol dans l’hypothèse d’une source de  $10''$ . Les barres d’erreur sont associées à un intervalle de confiance de 90% (*cf.* annexe A).

Source	$\frac{\text{HDCO}}{\text{H}_2\text{CO}}$	$\frac{\text{D}_2\text{CO}}{\text{H}_2\text{CO}}$	$\frac{\text{D}_2\text{CO}}{\text{HDCO}}$	$\frac{\text{CH}_2\text{DOH}}{\text{CH}_3\text{OH}}$	$\frac{\text{CH}_3\text{OD}}{\text{CH}_3\text{OH}}$	$\frac{\text{CHD}_2\text{OH}}{\text{CH}_3\text{OH}}$	$\frac{\text{CHD}_2\text{OH}}{\text{CH}_2\text{DOH}}$
	IRAS4A	0.20 <sup>+0.13</sup> <sub>-0.09</sub>	0.12 <sup>+0.08</sup> <sub>-0.05</sub>	0.62 <sup>+0.33</sup> <sub>-0.26</sub>	0.65 <sup>+0.30</sup> <sub>-0.21</sub>	0.047 <sup>+0.029</sup> <sub>-0.021</sub>	0.17 <sup>+0.09</sup> <sub>-0.06</sub>
IRAS4B	0.13 <sup>+0.10</sup> <sub>-0.06</sub>	0.046 <sup>+0.038</sup> <sub>-0.024</sub>	0.39 <sup>+0.23</sup> <sub>-0.17</sub>	0.43 <sup>+0.38</sup> <sub>-0.20</sub>	0.016 <sup>+0.016</sup> <sub>-0.008</sub>	0.13 <sup>+0.12</sup> <sub>-0.07</sub>	0.31 <sup>+0.07</sup> <sub>-0.06</sub>
IRAS2	0.17 <sup>+0.12</sup> <sub>-0.08</sub>	0.052 <sup>+0.048</sup> <sub>-0.034</sub>	0.33 <sup>+0.28</sup> <sub>-0.21</sub>	0.62 <sup>+0.71</sup> <sub>-0.33</sub>	≤ 0.08	0.25 <sup>+0.29</sup> <sub>-0.14</sub>	0.41 <sup>+0.19</sup> <sub>-0.15</sub>
L1448N	0.094 <sup>+0.062</sup> <sub>-0.050</sub>	0.077 <sup>+0.079</sup> <sub>-0.069</sub>	0.93 <sup>+1.14</sup> <sub>-0.83</sub>	≤ 1.8	≤ 0.67	≤ 8.3	–
L1448mm	0.29 <sup>+0.23</sup> <sub>-0.15</sub>	0.24 <sup>+0.18</sup> <sub>-0.12</sub>	0.91 <sup>+0.73</sup> <sub>-0.48</sub>	≤ 7.1	≤ 2.5	≤ 3.9	–
L1157mm	0.16 <sup>+0.15</sup> <sub>-0.10</sub>	≤ 0.08	≤ 0.52	≤ 5.4	≤ 1.2	≤ 5.1	–
L1527	1.7 <sup>+2.6</sup> <sub>-1.1</sub>	0.44 <sup>+0.60</sup> <sub>-0.29</sub>	0.28 <sup>+0.25</sup> <sub>-0.16</sub>	–	–	–	–
IRAS16293	0.15±0.07	0.05±0.025	0.3±0.2	0.37 <sup>+0.38</sup> <sub>-0.19</sub>	0.018 <sup>+0.022</sup> <sub>-0.012</sub>	0.074 <sup>+0.084</sup> <sub>-0.044</sub>	0.21 <sup>+0.11</sup> <sub>-0.10</sub>

Dans un premier paragraphe nous présentons les principaux résultats de ces observations. Nous comparons ensuite les fractionnements observés aux fractionnements prédits par les modèles de chimie sur les grains.

#### 4.4.1 Premiers résultats

Le principal résultat de cette étude est la mise en évidence d'un grand fractionnement du formaldéhyde et du méthanol dans toutes les protoétoiles de faible masse où les isotopes ont été détectés. En effet, les fractionnements mesurés sont du même ordre que celui mesuré dans IRAS16293–2422. Dans le cas où les isotopes n'ont pas été détectés, les limites supérieures n'excluent pas un fractionnement similaire.

Néanmoins, une étude fine de la corrélation entre les fractionnements du formaldéhyde et du méthanol avec d'autres quantités physiques telles que l'abondance de CO dans l'enveloppe, ou le rapport  $L_{\text{smm}}/L_{\text{bol}}$  par exemple, est limitée par les barres d'erreur importantes entachant la mesure du fractionnement. Ces barres d'erreur proviennent de plusieurs facteurs. Evidemment, elles sont causées par le faible rapport signal sur bruit de certaines raies observées, mais aussi par le fait que les points observés dans les diagrammes rotationnels sont dispersés autour de la droite attendue. Ceci résulte en une grande imprécision sur la détermination de la température rotationnelle et par conséquent sur la détermination des densités de colonne. En pratique, la dispersion des points dans le diagramme rotationnel provient de l'incertitude sur la taille de la source, mais elle suggère de plus que l'émission n'est certainement pas homogène sur l'étendue de la source, comme le montre par exemple l'étude de l'émission de  $\text{H}_2\text{CO}$  sur les mêmes sources de Maret et al. (2004), qui met en évidence la présence d'un Cœur Chaud où l'abondance des molécules provenant de l'évaporation des grains est plus grande que dans l'enveloppe externe. Notre analyse est donc intrinsèquement limitée par le fait que nous ne résolvons pas ce Cœur Chaud et considérons que toutes les molécules ont une même température. En l'absence de données sur les coefficients de collisions des isotopes considérés, une modélisation plus fine de l'émission détectée est malheureusement compromise, et le seul moyen de progresser dans cette étude est de faire des observations interférométriques, qui apporteront une meilleure résolution spatiale, permettant ainsi de mesurer le fractionnement des molécules dans les différentes parties de l'enveloppe des protoétoiles.

#### 4.4.2 Comparaison aux modèles de chimie sur les grains

Pour comprendre si le formaldéhyde et le méthanol sont formés simultanément sur les grains, nous comparons les fractionnements observés aux prédictions du modèle de chimie sur les grains de Stantcheva & Herbst (2003, cf. le chapitre 3 pour une discussion des différents modèles).

La Figure 4.10 présente, en traits pointillés, les fractionnements de HDCO,  $\text{D}_2\text{CO}$ ,  $\text{CH}_2\text{DOH}$ ,  $\text{CH}_3\text{OD}$  et  $\text{CHD}_2\text{OH}$  prédits par le modèle de grains, en fonction du rapport D/H atomique en phase gazeuse au moment de la formation des manteaux. Les fractionnements observés avec leurs barres d'erreur ont été superposés en traits gras, permettant ainsi pour chaque molécule de contraindre la valeur du rapport D/H atomique nécessaire à sa formation.

Pour comparaison, la Figure 4.11 présente la même étude pour IRAS16293. Les fractionnements du méthanol proviennent de Parise et al. (2004a, cf. chapitre 3), tandis que le formaldéhyde

a été observé par Loinard et al. (2000).

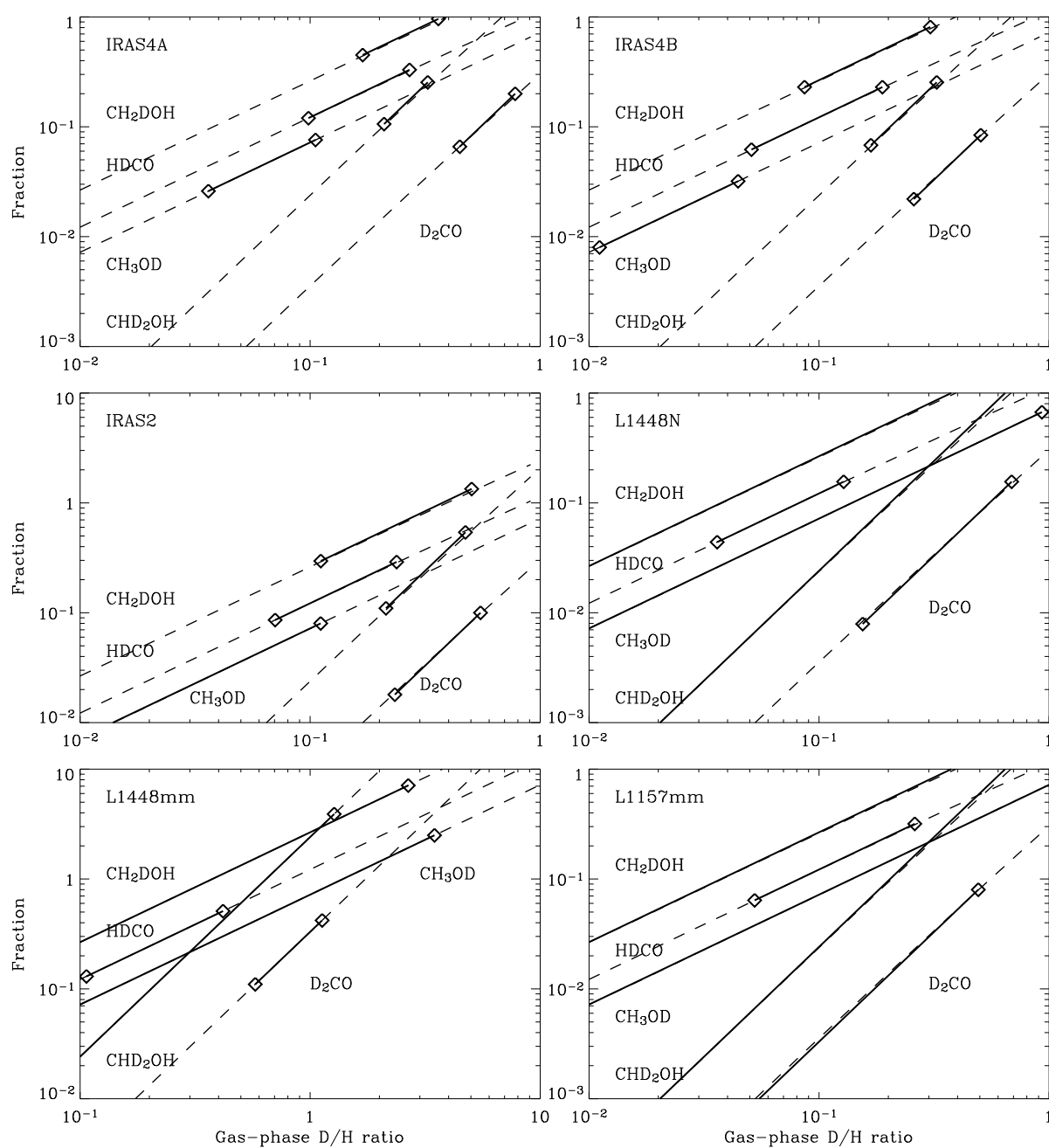


FIG. 4.10 – Comparaison du fractionnement observé dans les 6 sources (traits gras) aux prédictions des modèles de grains (traits pointillés, Stantcheva & Herbst 2003). Les barres d'erreur sur les fractionnements correspondent à un niveau de confiance de 90%.

Toute comparaison entre formaldéhyde d'une part et méthanol d'autre part doit être menée avec précaution puisqu'elle est très dépendante des éventuelles épaisseurs optiques des isotopes principaux CH<sub>3</sub>OH et H<sub>2</sub>CO. Par contre, une comparaison des isotopes du méthanol entre eux



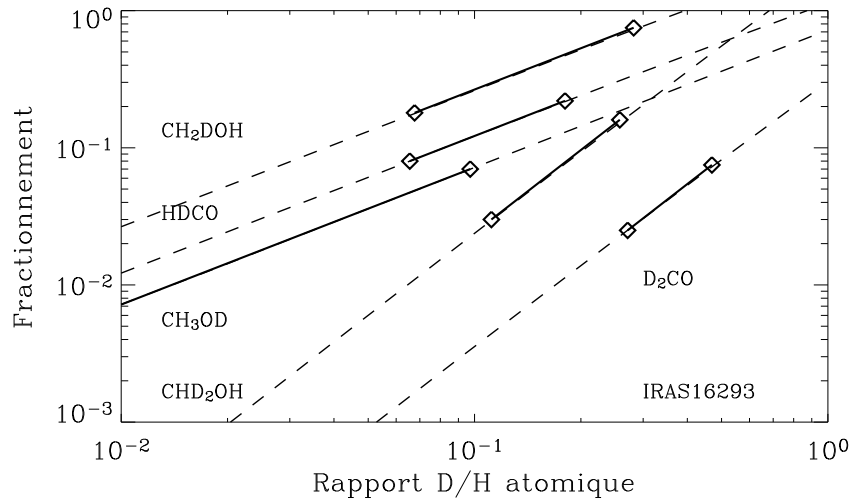


FIG. 4.11 – Comparaison du fractionnement dans IRAS16293 (traits gras) aux prédictions des modèles de grains (traits pointillés, Stantcheva & Herbst 2003).

est beaucoup moins dépendante de ce problème. Nous attribuons à ces problèmes d’opacité le fait que, suivant la source, ce soit plutôt HDCO que  $D_2CO$  (ou le contraire) qui soit compatible avec les fractionnements de  $CH_2DOH$  et  $CHD_2OH$ .

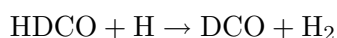
Plusieurs conclusions apparaissent de cette comparaison :

- Dans tous les cas où ils sont bien contraints (IRAS16293, IRAS4A, IRAS4B et IRAS2), les fractionnements de  $CH_2DOH$  et de  $CHD_2OH$  sont compatibles entre eux, *i.e.* ils correspondent à un même intervalle de valeurs pour le D/H atomique dans la phase gazeuse. C’est ce qui avait été remarqué dans le cas d’IRAS16293 au chapitre 3, pour laquelle le  $CD_3OH$  montrait aussi cette même caractéristique. Cette constatation nous avait permis d’affirmer que nos observations argumentaient en faveur de la formation du méthanol sur les grains. Cette même conclusion est confirmée par la présente étude du fractionnement du méthanol dans notre échantillon de protoétoiles de type solaire.

- Dans les cas où il est suffisamment contraint, le  $CH_3OD$  semble sous-abondant par rapport aux autres isotopes du méthanol. Cette constatation avait elle aussi été faite dans le cas de IRAS16293–2422. Nous avons conclu que  $CH_3OD$  doit être détruit en phase gazeuse plus rapidement que les autres isotopes. Cette conclusion est à la fois confirmée par les présentes observations et par les travaux théoriques d’Osamura et al. (2004). Une discussion plus détaillée sur ce sujet a été faite au chapitre 3.

- Le formaldéhyde HDCO semble sous-abondant par rapport au  $D_2CO$ . Ceci provient cer-

tainement du fait que les réactions d’abstraction d’hydrogène du type :



ne sont pas incluses dans les modèles de chimie sur les grains considérés. Ces réactions donnent une chance supplémentaire de conduire à la formation de  $\text{D}_2\text{CO}$ , permettant ainsi de favoriser la formation de formaldéhyde de plus en plus deutéré (Tielens 1983).

Les présentes observations confirment donc les conclusions émises lors de l’observation du méthanol deutéré dans IRAS16293 (Parise et al. 2002b, 2004a). IRAS 16293–2422 n’est donc pas une exception vis-à-vis des processus de deutération. D’autres études confirment aussi que sa chimie n’est pas particulière. Ainsi, Bottinelli et al. (2004a) ont observé des molécules complexes dans le Cœur Chaud d’IRAS4A, molécules détectées pour la première fois dans une protoétoile de type solaire en direction d’IRAS16293 (Cazaux et al. 2003).

## 4.5 Conclusion

Nous avons observé la deutération du formaldéhyde et du méthanol en direction d’un échantillon de protoétoiles de faible masse. Nous avons détecté HDCO,  $\text{D}_2\text{CO}$  et  $\text{CH}_2\text{DOH}$  dans toutes les sources. Par contre,  $\text{CH}_3\text{OD}$  et  $\text{CHD}_2\text{OH}$  n’ont été détectés qu’en direction de 2 et 3 sources respectivement. La sensibilité des observations ne nous a pas permis de placer des limites supérieures significatives pour les autres sources, malgré un temps d’intégration relativement important. Nous avons analysé les données par la méthode du diagramme rotationnel. L’analyse de ces données montre que IRAS16293–2422 n’est pas une exception en ce qui concerne la deutération. En effet, les rapports de deutération déterminés dans l’échantillon de sources pour le formaldéhyde et le méthanol sont du même ordre de grandeur que les fractionnements observés précédemment dans IRAS 16293.

Cette étude est limitée par plusieurs facteurs. Les transitions ont été observées avec des tailles de lobe très diverses, d’au moins  $10''$ , et il est très difficile de déterminer la densité de colonne réelle des molécules dans ces conditions. En effet, la taille de la source étant inconnue, la correction de dilution entre les différentes observations est incertaine. De plus, la résolution spatiale est trop faible pour déterminer les rapports de fractionnement dans les différentes régions d’intérêt (partie interne chaude de l’enveloppe, partie froide externe, ...). Seule l’interférométrie pourra permettre de progresser dans cette étude.

L’observation d’isotopes deutérés et surtout multiplement deutérés requiert une sensibilité très grande. En direction d’IRAS 16293, nous avons pu détecter du méthanol triplement deutéré, mais pour les autres sources, moins lumineuses, la détection du méthanol doublement deutéré pose déjà problème. ALMA, avec sa sensibilité sans précédent devrait permettre de faire des progrès considérables dans cette science.



Deuxième partie

## Le fractionnement de l'eau



# Chapitre 5

## Recherche de glace d'eau deutérée dans le manteau des grains

### Sommaire

---

<b>5.1</b>	<b>Introduction</b>	<b>93</b>
<b>5.2</b>	<b>Les observations</b>	<b>95</b>
5.2.1	Sélection des sources	97
5.2.2	L'acquisition des observations	98
5.2.3	Traitement de données	100
<b>5.3</b>	<b>Analyse des spectres - Dérivation des limites supérieures pour HDO/H<sub>2</sub>O</b>	<b>104</b>
5.3.1	La densité de colonne de H <sub>2</sub> O	106
5.3.2	Les limites supérieures sur les densités de colonne de HDO	109
<b>5.4</b>	<b>Comparaison à la deutération en phase gazeuse</b>	<b>111</b>
<b>5.5</b>	<b>Conclusion</b>	<b>114</b>

---

### 5.1 Introduction

L'incorporation préférentielle d'atomes de deutérium dans les molécules semble être une conséquence de la différence d'énergie de liaison entre une espèce deutérée et l'isotope principal (Solomon & Woolf 1973). Cette différence d'énergie, typiquement de l'ordre de 800 K, favorise la formation de molécules deutérées à basse température. Comme les températures indiquées par les fractionnements observés dans la phase gazeuse des enveloppes des protoétoiles sont bien plus faibles que la température actuelle du gaz, la deutération observée a dû être produite lors d'une phase antérieure froide. Les observations de la deutération du formaldéhyde dans des cœurs prestellaires (Bacmann et al. 2003) confirment cette théorie, puisque le fractionnement qui y est observé est du même ordre que celui observé en direction des protoétoiles de faible masse. Il est généralement admis que les molécules formées pendant la phase de nuage sombre avant la naissance de la protoétoile – par des réactions en phase gazeuse ou à la surface des grains –

sont stockées dans un manteau de glace entourant les grains de poussière, qui s'évapore quand la protoétoile nouvellement formée chauffe son environnement au-dessus de la température de sublimation. La phase gazeuse actuelle n'a probablement pas encore eu le temps de retourner à l'équilibre, ce qui prend environ  $3.10^4$  ans (Charnley et al. 1992; Caselli et al. 1993; Charnley et al. 1997).

Pour confirmer ces processus, nous avons cherché à observer directement les molécules deutérées en phase solide dans le manteau des grains de poussière. Les glaces sont observables en absorption dans le domaine de longueur d'onde du proche infrarouge, où se situent les fréquences typiques des mouvements d'élongation des liaisons moléculaires (O–H, O–D, C–H ...). La sensibilité des observations en phase solide est bien moins bonne que celle des observations en phase gazeuse. En effet, on ne peut détecter que des molécules dont l'abondance est supérieure à  $10^{-6}$ – $10^{-5}$  en phase solide tandis que les observations millimétriques permettent la détection de molécules dont l'abondance relative à  $H_2$  est aussi faible que  $10^{-10}$ .

L'eau est le principal constituant des glaces interstellaires. Son abondance est typiquement de l'ordre de  $10^{-4}$  par rapport à l'hydrogène. Le méthanol n'est qu'un constituant secondaire dont l'abondance est typiquement de l'ordre de 5% de celle de l'eau (Keane et al. 2001) mais peut atteindre 30% dans les sources les plus riches (Dartois et al. 1999). Il apparaît donc préférable dans notre recherche de molécules deutérées de s'intéresser à l'eau deutérée HDO plutôt qu'au méthanol deutéré.

Une telle recherche de HDO solide avait déjà été menée par Teixeira et al. (1999). Ces auteurs ont annoncé la détection avec ISO-SWS de la bande d'absorption d'élongation O–D à 4,1 microns, caractéristique de la glace d'HDO dans deux protoétoiles massives : W33A et NGC7538 IRS9. Cette détection a toutefois été remise en cause par Dartois et al. (2003), qui ont réanalysé les mêmes données ISO et ont suggéré que l'absorption pour NGC7538 IRS9 était en fait un artefact causé par un mauvais raccordement des scans à la jonction des deux bandes ISO-SWS 1E (3,52 – 4,08  $\mu\text{m}$ ) et 2A (4,08 – 5,30  $\mu\text{m}$ ). Dans le cas de W33A, l'absorption à 4,1  $\mu\text{m}$  a été confirmée par Dartois et al. (2003) mais provient en fait du méthanol  $\text{CH}_3\text{OH}$  (probablement une combinaison de bande d'élongation de C–O et de pliage de O–H). Des observations VLT de W33A ont confirmé la non détection de HDO et donnent une limite supérieure pour le rapport HDO/ $\text{H}_2\text{O}$  vers cette source de  $10^{-2}$  (Dartois et al. 2003). Cette limite supérieure est compatible avec la deutération typiquement observée dans le gaz des Cœurs Chauds autour des protoétoiles massives. En effet, le fractionnement du formaldéhyde doublement deutéré ( $\text{D}_2\text{CO}$ ) observé dans le Cœur Chaud d'Orion (Turner 1990) est de  $3 \times 10^{-3}$ , *i.e.* environ 25 fois plus faible que celui observé dans IRAS16293–2422 (Ceccarelli et al. 1998) et dans un relevé de 19 autres protoétoiles de faible masse (Loinard et al. 2002). De même,  $\text{CH}_2\text{DOH}$  présente un fractionnement de 0,04 (Jacq et al. 1993) dans Orion tandis que le fractionnement dans IRAS16293–2422 est de 0,3 (Parise et al. 2002b, 2004a). Comme les protoétoiles de faible masse présentent un fractionnement en deutérium en phase gazeuse de l'ordre de 10 à 100 fois plus important que dans les protoétoiles massives, la signature de la glace d'HDO devrait aussi être plus forte dans ces objets de faible

masse. Il était donc légitime de penser que la recherche de HDO en phase solide dans des protoétoiles de faible masse donnerait de meilleurs résultats que dans les protoétoiles massives.

Les modèles de chimie sur les grains publiés au moment de cette étude prédisaient une deutération de l'eau de 20%, si l'eau deutérée se forme en même temps que le formaldéhyde et le méthanol (Caselli et al. 2002a; Stantcheva & Herbst 2003). [Notons que ceci implique que presque tout le deutérium se retrouverait piégé sous forme d'HDO, mais ce paradoxe provient du fait que ces modèles considèrent les atomes D et H comme des réservoirs infinis, sans en limiter l'abondance à l'abondance élémentaire totale dans le cas du deutérium.]

## 5.2 Les observations

La glace d'eau deutérée peut-être observée en absorption grâce à la bande d'élongation de la liaison O–D à 4,07 microns. Le spectre présenté sur la figure 5.1 montre les absorptions d'élongation des liaisons O–H ( $3300\text{ cm}^{-1}$  ou  $3,03\ \mu\text{m}$ ) et O–D ( $2457\text{ cm}^{-1}$  ou  $4,07\ \mu\text{m}$ ). Nous pouvons ainsi par observation de la bande entre  $2,5\ \mu\text{m}$  et  $4,2\ \mu\text{m}$  déterminer simultanément la quantité d'eau deutérée HDO et d'isotope principal  $\text{H}_2\text{O}$  présents dans les glaces sur la ligne de visée.

Malheureusement cette observation est difficile car la bande d'élongation O–D se trouve à la limite d'une région de forte absorption atmosphérique du  $\text{CO}_2$ . Ainsi l'observation par le satellite ISO aurait-elle pu résoudre ce problème, mais nous venons de voir qu'ISO présente l'inconvénient d'avoir cette bande de fréquence en bord de détecteurs. Le satellite Spitzer (anciennement SIRTf, Space InfraRed Telescope Facility) ne pourra malheureusement pas apporter de réponse à cette question puisque le spectrographe infrarouge IRS n'observera que dans la bande  $5,3\text{--}40\ \mu\text{m}$ . Les spectromètres de première génération sur SOFIA (Stratospheric Observatory for Infrared Astronomy) ne couvriront pas non plus le domaine de longueurs d'onde inférieures à  $5\ \mu\text{m}$ . Jusqu'au lancement du JWST (James Webb Space Telescope, programmé pour 2011), incluant l'instrument NIRSpec (Near InfraRed Spectrograph) dédié à l'observation entre  $0,6$  et  $5\ \mu\text{m}$ , nous serons donc réduits à faire ces observations depuis le sol.

L'instrument au sol le mieux adapté à notre recherche s'est avéré être SpeX au télescope IRTF de la NASA au sommet du Mauna Kea (Figure 5.2). En effet, cet instrument permet une observation simultanée de la bande entre  $2,1$  et  $5,0$  microns, et l'on peut ainsi avoir accès en même temps à la quantité de glace d'eau  $\text{H}_2\text{O}$  (bande d'élongation OH à  $3,0$  microns) et de glace d'eau deutérée ( $4,1$  microns). L'observation simultanée de toute la bande de fréquence qui nous intéresse permet de ne faire qu'un seul setting d'observation par source. Ceci à l'avantage d'utiliser le temps d'intégration plus efficacement, mais surtout d'être assurés que les données  $\text{H}_2\text{O}$  et HDO sont prises dans les mêmes conditions d'atmosphère et proviennent de la même position (aucune erreur n'est introduite par un pointage différent). Il n'y a pas non plus dans ces observations de problème de raccordement de bandes.



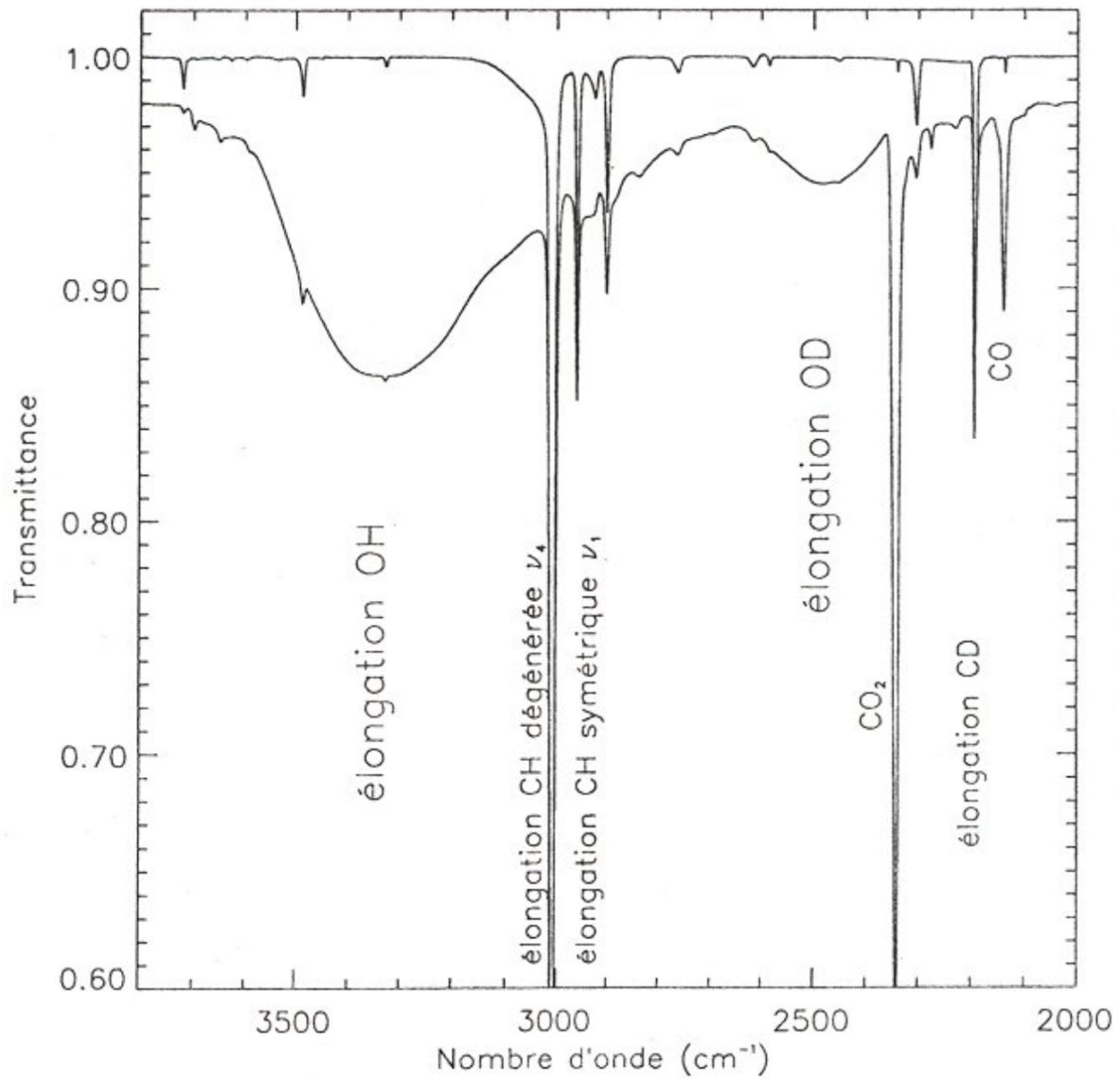


FIG. 5.1 – Spectre obtenu après irradiation par des UV de glaces CH<sub>3</sub>D : O<sub>2</sub> – 1 : 1. La bande d'élongation O–H de l'eau apparaît à 3  $\mu\text{m}$ , et la bande d'élongation O–D à 4,1  $\mu\text{m}$  (source : Dartois et al. 2000).

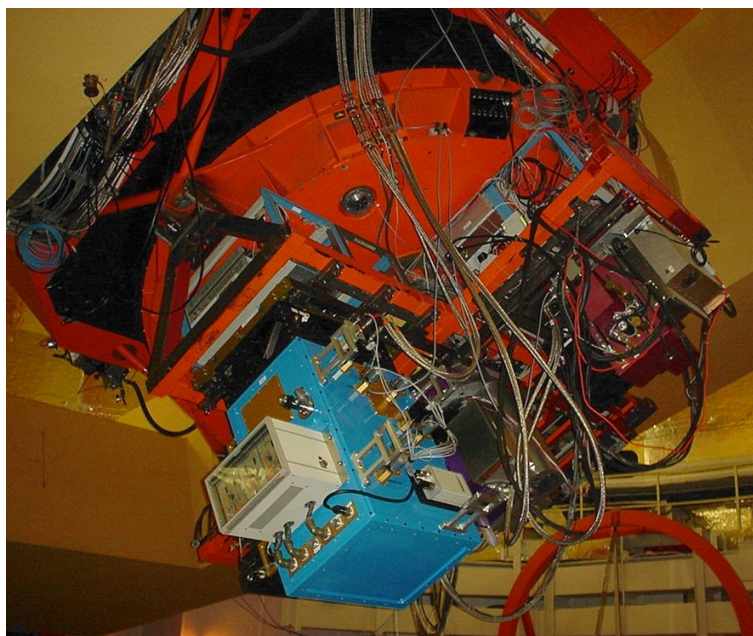


FIG. 5.2 – Instrument SpeX au foyer du télescope IRTF (InfraRed Telescope Facility).

### 5.2.1 Sélection des sources

Comme nous venons de le préciser dans l'introduction, les tentatives précédentes de détection de la glace d'HDO ont pris pour cible des protoétoiles massives, sans succès. Dans cette étude, nous avons choisi pour sources des protoétoiles de faible masse, où le fractionnement dans la phase gazeuse est plus grand que dans les protoétoiles de grande masse.

Les sources observées doivent satisfaire deux critères principaux : elles doivent être suffisamment lumineuses dans le proche infrarouge (bande L :  $2,85 - 4,2 \mu\text{m}$ ) pour que le rapport signal sur bruit obtenu soit suffisant pour détecter une faible absorption sur le continuum, et elles doivent présenter un fort indice de couleur J–K, indicateur d'une grande extinction (et donc de présence de poussière!). Le premier critère exclut par définition les sources les plus enfouies (Classe 0). Les observations doivent donc se porter sur des sources de Classe I, plus évoluées. L'étude de Loinard et al. (2002), qui incluait 19 sources de Classe 0 et quatre sources de Classe I semble indiquer que dans ces objets plus évolués la deutération du formaldéhyde reste forte et comparable à celle des protoétoiles de Classe 0.

Nous présentons brièvement les quatre sources retenues pour ces observations. Leurs caractéristiques principales sont consignées dans la Table 5.1. Deux de ces sources font partie de l'échantillon observé par Loinard et al. (2002).

**NGC1333 SVS12**, aussi nommée IRAS6, est probablement une source de Classe I de luminosité  $\sim 28 L_{\odot}$  dans les bandes IRAS (Jennings et al. 1987) en supposant une distance de 350 parsec. De nouvelles estimations de la distance du complexe NGC1333 tendent cependant à le rapprocher, avec une distance de 220 parsec (Cernis 1990), ce qui ramènerait la

Source	NGC1333/SVS12	NGC1333/SVS13	L1489 IRS	TMR1
$\alpha$ (2000.0)	03 <sup>h</sup> 29' 01.4''	03 <sup>h</sup> 29' 03.7''	04 <sup>h</sup> 04' 42.9''	04 <sup>h</sup> 39' 13.9''
$\delta$ (2000.0)	31° 20' 21''	31° 16' 03''	26° 18' 56''	25° 53' 21''
$m_L$		5.4	6.8	8.9
Flux (Jy) bande L		1.99	0.55	0.08
J–K	4.24	3.74		5.55
K	10.61	8.25	9.3	10.54
Fente / Résolution	0.3'' / 2500	0.3'' / 2500	0.3'' / 2500	0.5'' / 1500
Tps d'int. on-source	20 min	15 min	20 min	53 min
Etoile standard	HD20995	HD20995	HD23258	HD31592

TAB. 5.1 – Sources observées, coordonnées, magnitude proche infrarouge, indice de couleur J–K (indicatif de l’extinction), magnitude K et paramètres de l’observation.

luminosité de SVS12 à  $\sim 10 L_{\odot}$ . Une cartographie dans le domaine millimétrique et sub-millimétrique a résolu la source en trois composantes (Sandell & Knee 2001). Une carte CO (2–1) de la région n’ayant révélé aucun jet émanant de la source (Knee & Sandell 2000), celle-ci est peut-être déjà relativement évoluée et même possiblement un objet de Classe II d’arrière-plan. Dans ce cas, les glaces sondées par notre étude proviendraient plutôt du nuage que de l’enveloppe circumstellaire. Loinard et al. (2002) ont détecté du formaldéhyde doublement deutéré en grande abondance dans le gaz :  $D_2CO/H_2CO \sim 5\%$ .

**NGC1333 SVS13**, aussi appelée IRAS03259+3105 (Jennings et al. 1987), est la source la plus étudiée de la région. C’est une source variable, l’une des plus lumineuses de la région dans le proche infrarouge, avec une luminosité bolométrique de  $85 L_{\odot}$  ( $34 L_{\odot}$  si la distance est de 220 pc, Molinari et al. 1993). C’est également probablement un système multiple (Lefloch et al. 1998a,b; Bachiller et al. 1998; Looney et al. 2000). Loinard et al. (2002) ont détecté dans cette source un grand fractionnement de formaldéhyde :  $D_2CO/H_2CO \sim 4\%$ .

**L1489 IRS** (IRAS04016+2610) est une source de faible luminosité ( $L_{bol} = 3,7 L_{\odot}$ ), que l’on suspecte être un rare exemple de source en transition entre la Classe I et la Classe II (Hogerheijde & Sandell 2000; Hogerheijde 2001). Elle est entourée d’un disque jeune et relativement massif (Boogert et al. 2002b) tandis que son enveloppe semble être largement dispersée.

**TMR1** (IRAS04361+2547) est une protoétoile de Classe I typique, de faible luminosité ( $L_{bol} = 2.9 L_{\odot}$ , Hogerheijde et al. 1998). L1489 IRS et TMR1 appartiennent au complexe du Taureau, à la distance de 140 parsec.

### 5.2.2 L’acquisition des observations

Les observations ont été effectuées début décembre 2002 avec l’instrument SpeX (Rayner et al. 2003, Figure 5.2) au télescope de 3m de diamètre IRTF (InfraRed Telescope Facility) de



FIG. 5.3 – Télescope IRTF (InfraRed Telescope Facility) au sommet du Mauna Kea

la NASA au sommet du Mauna Kea (Figure 5.3). Nous avons bénéficié de deux nuits de beau temps (seeing de  $0,6''$  en moyenne en bande K). Nous avons utilisé le mode LXD de l'instrument, permettant l'acquisition du spectre complet entre  $2,1$  et  $5,0 \mu\text{m}$  simultanément. Nous avons choisi la fente de  $0,3''$ , qui procure une résolution spectrale de 2500, pour les trois premiers objets, et la fente de  $0,5''$  ( $R=1500$ ) pour TMR1, moins lumineuse.

La préparation des observations s'est faite en examinant des cartes de champ disponibles sur le site internet du satellite Hubble (<http://www.stsci.edu/cgi-bin/dss.form>). En effet, la spectroscopie dans le proche infrarouge requiert une bien meilleure précision sur le pointage que la spectroscopie millimétrique (la fente placée sur la source dans le proche infrarouge fait  $0,3''$  à  $0,5''$  de large tandis que le lobe du radiotélescope de 30 m de l'IRAM fait  $10''$  à  $20''$  selon la fréquence!). Avant de passer en mode de spectroscopie, on fait une image photométrique puis on repère la source dans le champ, on mesure sa magnitude infrarouge pour la comparer aux données déjà publiées et confirmer son identification puis on y superpose la fente pour effectuer la spectroscopie.

L'observation infrarouge requiert de plus l'observation régulière (toutes les 10 minutes environ) d'une étoile standard proche de l'étoile cible pour calibrer au mieux la contribution du ciel. Les étoiles standard ont été choisies dans le catalogue d'étoiles A0V du télescope IRTF ([http://irtfweb.ifa.hawaii.edu/IRrefdata/Catalogs/bsc\\_a0.dat](http://irtfweb.ifa.hawaii.edu/IRrefdata/Catalogs/bsc_a0.dat)). La différence de masse d'air entre la source et le standard associé était toujours inférieure à 0,1.

Contrairement aux données millimétriques, les données infrarouge de SpeX ne peuvent pas être réduites en temps réel au télescope et il faut donc avoir bien préparé les observations avec l'outil d'estimation de temps d'observation pour savoir le temps de pose requis (on ne peut

pas vérifier que les données sont suffisamment bonnes avant d'arrêter l'intégration). Les données brutes se présentent en effet sous la forme de la Figure 5.4 et les différentes étapes de la réduction permettant d'obtenir le spectre final sont détaillées dans le paragraphe suivant.

### 5.2.3 Traitement de données

Les données brutes du spectromètre SpeX en mode LXD se présentent sous la forme de traînées lumineuses courbées sur une matrice  $1024 \times 1024$  (Figure 5.4). Ces traînées correspondent aux différents ordres spectraux.

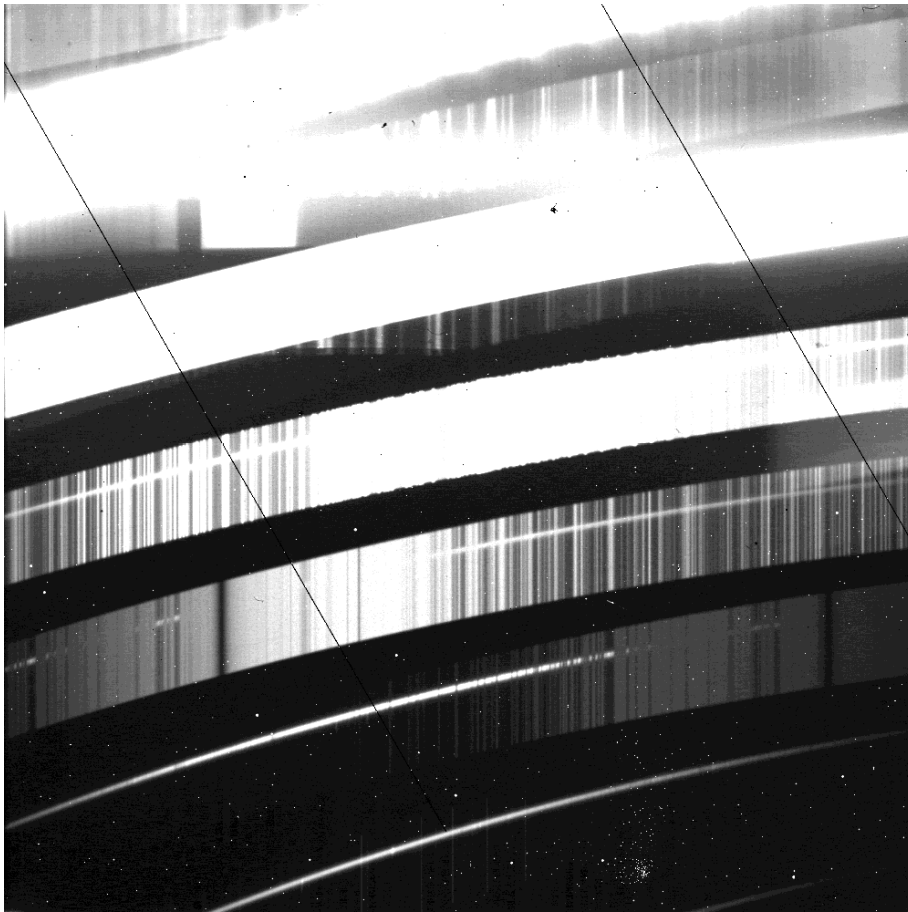


FIG. 5.4 – Exemple de données brutes. Les différents ordres de diffraction sont repliés pour pouvoir tenir sur une matrice carrée CCD. Le spectre de l'objet étudié apparaît sous la forme de la petite ligne blanche sur le haut de l'image de la fente, dans chaque ordre de diffraction.

La longueur de la fente fait environ  $15''$ , ce qui correspond à environ 100 pixels sur le détecteur (qui se traduit par la largeur des traînées sur les données).

Le traitement de données va se faire en trois étapes :

- **Préparation des images de calibration** : Il s'agit de créer un champ plat (« flat field ») normalisé et un « arc » (image contenant des raies bien identifiées permettant l'étalonnage en

longueur d'onde).

- **Extraction des spectres** : Extraction et étalonnage en longueur d'onde des spectres de la source et des standards.
- **Traitement post-extraction** : Correction des spectres de l'absorption tellurique, raccordement des différents ordres, etc.

Toutes ces étapes s'effectuent avec le logiciel Spextool (Vacca et al. 2003; Cushing et al. 2004). Nous les détaillons brièvement dans les paragraphes suivants :

### Préparation des images de calibration

Cette première étape a pour but de préparer une image de champ plat (réponse du détecteur à un éclairage homogène, pour corriger des différences de réponses entre pixels), et un « arc », image contenant des raies de longueurs d'onde connues pour étalonner les spectres en longueur d'onde.

Au cours des observations, nous faisons des champs plats en illuminant la fente par une lampe, au moyen d'un système optique permettant de rendre l'éclairage aussi homogène que possible. Ces images sont ensuite moyennées, pour augmenter le rapport signal sur bruit, avec un poids correspondant à la médiane des luminosités des pixels de l'image (pour corriger des éventuelles différences d'éclairage). La Figure 5.5 montre un exemple d'une telle image. Le champ plat présente l'intérêt de permettre de localiser la position des différents ordres sur le détecteur. Le champ plat est ensuite normalisé.

Pour étalonner les spectres en longueur d'onde, on fabrique un « arc ». On utilise pour cela une lampe à Argon. Malheureusement les transitions de l'argon sont rares au-dessus de  $3\ \mu\text{m}$ , et on se sert donc, de plus, de raies telluriques brillantes pour étalonner les données du mode LXD. Un exemple d'arc est présenté dans la Figure 5.6.

### Extraction des spectres

Les données brutes contiennent le spectre de l'objet étudié contaminé par la contribution du courant d'obscurité (contribution électronique observée même quand on bloque toute illumination), par l'émission du télescope et par l'émission du ciel. On s'affranchit des contributions du courant d'obscurité et de l'émission du télescope en faisant des observations en « beam switch » : on observe successivement deux positions A et B décalées l'une par rapport à l'autre le long de la fente (en dépointant légèrement le télescope). On observe ainsi une succession ABBAAB... La soustraction entre une image A et une image B élimine le courant d'obscurité et l'émission du télescope (en supposant qu'elles sont stationnaires), mais pas forcément tout à fait l'émission du ciel (le télescope pointe deux positions différentes et de plus l'émission du ciel peut fluctuer entre les deux instants d'acquisition des deux poses).

Pour augmenter l'efficacité, lorsque la source est ponctuelle, on s'arrange pour qu'elle soit

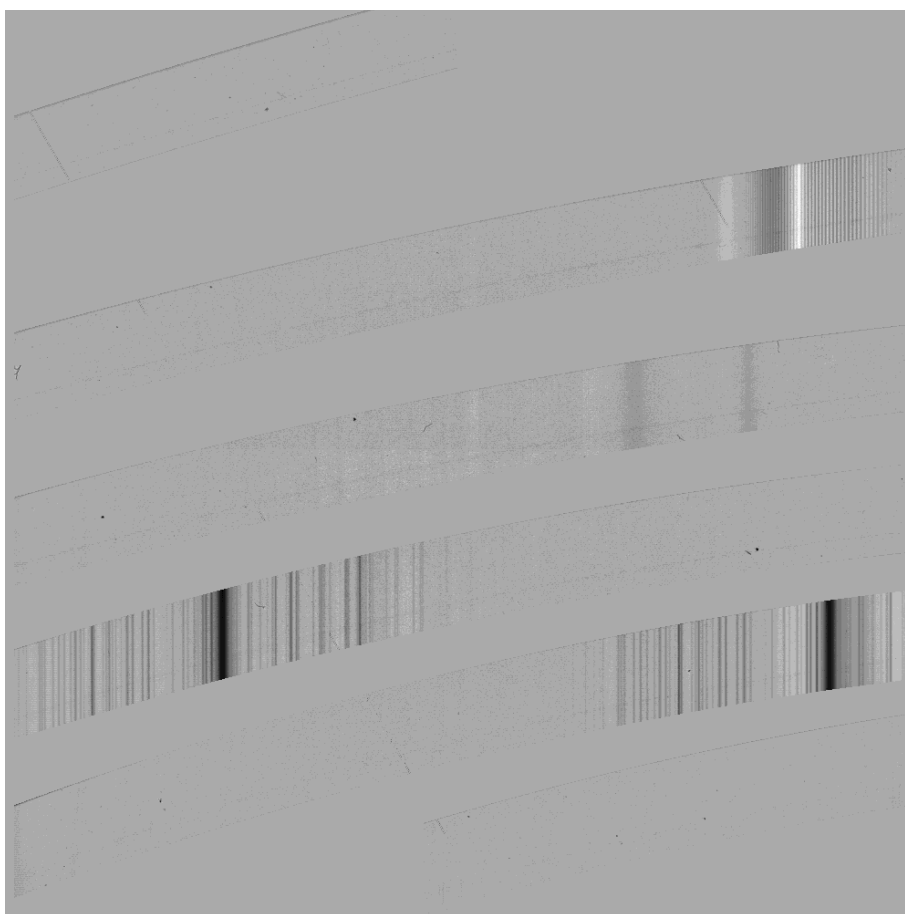


FIG. 5.5 – Exemple de champ plat. Les raies proviennent de la lampe utilisée pour éclairer la fente.

sur les deux positions A et B, mais sur des pixels différents du détecteur. Les données résultant de la soustraction entre les données de la position A et la position B montrent donc la source deux fois dans chaque ordre, une fois en positif (trait blanc) et une fois en négatif (trait noir).

Les images A–B sont ensuite divisées par le champ plat. La Figure 5.7 donne un exemple d’une telle image.

Commence alors l’extraction du spectre de l’image carrée A–B/Flat. Les données du champ plat permettent de localiser spatialement sur l’image les zones utiles (les traînées correspondant aux différents ordres). Si l’on regarde une traînée en coupe (équivalent d’une longueur d’onde), l’intensité montre un pic positif (source de l’image A) et un pic négatif (source de l’image B, en négatif). Le profil de l’intensité ainsi déterminé pour chaque longueur d’onde est moyenné sur toutes les longueurs d’onde de l’ordre considéré (avec des poids calculés itérativement pour tenir compte des différences d’intensité aux différentes longueurs d’onde), pour pouvoir déterminer aisément les limites spatiales (le long de la coupe) sur lesquelles le flux sera intégré pour donner le spectre final (Figure 5.8). Les flux des composantes positive et négative de la source sont ensuite combinés, permettant ainsi d’augmenter le rapport signal sur bruit.

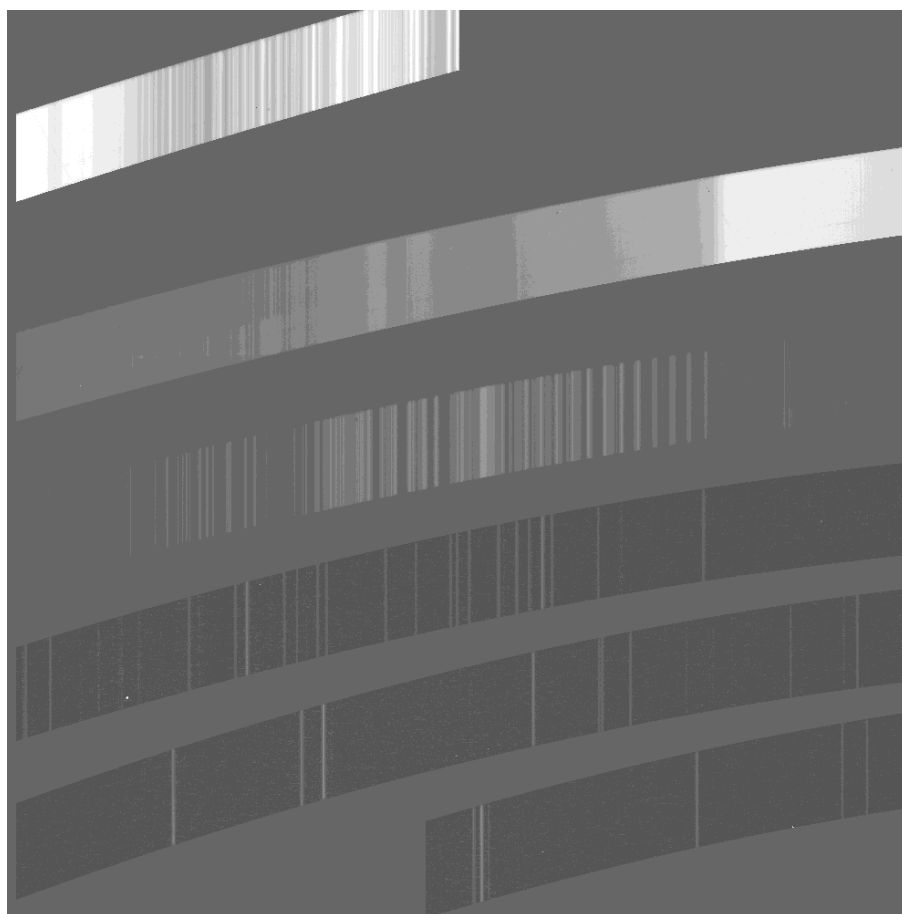


FIG. 5.6 – Exemple d'arc.

La dernière étape de l'extraction consiste à étalonner les longueurs d'onde sur chaque spectre. Pour cela, l'ajustement en longueur d'onde déterminé sur l'arc est appliqué à chaque spectre.

Le résultat de ce traitement se présente, pour chaque paire d'observation A–B, sous la forme de plusieurs sous-spectres correspondant à chacun des ordres.

### Traitement post-extraction

Une fois les sous-spectres extraits, les spectres des différentes expositions A–B sont combinés. On applique alors une correction de l'absorption tellurique (des bandes d'absorption de molécules abondantes dans l'atmosphère peuvent contaminer le spectre de la source). Cette correction s'effectue grâce à l'étoile standard observée à une même masse d'air que la source.

La dernière étape consiste à raccorder les différents ordres, ce qui se fait en appliquant au besoin un facteur de correction sur un ordre par rapport à l'autre (les différents ordres se recouvrent en longueur d'onde, et il est donc aisé de comparer leur hauteur relative). Les spectres obtenus après ce long traitement sont présentés pour nos quatre sources dans la Figure 5.9.



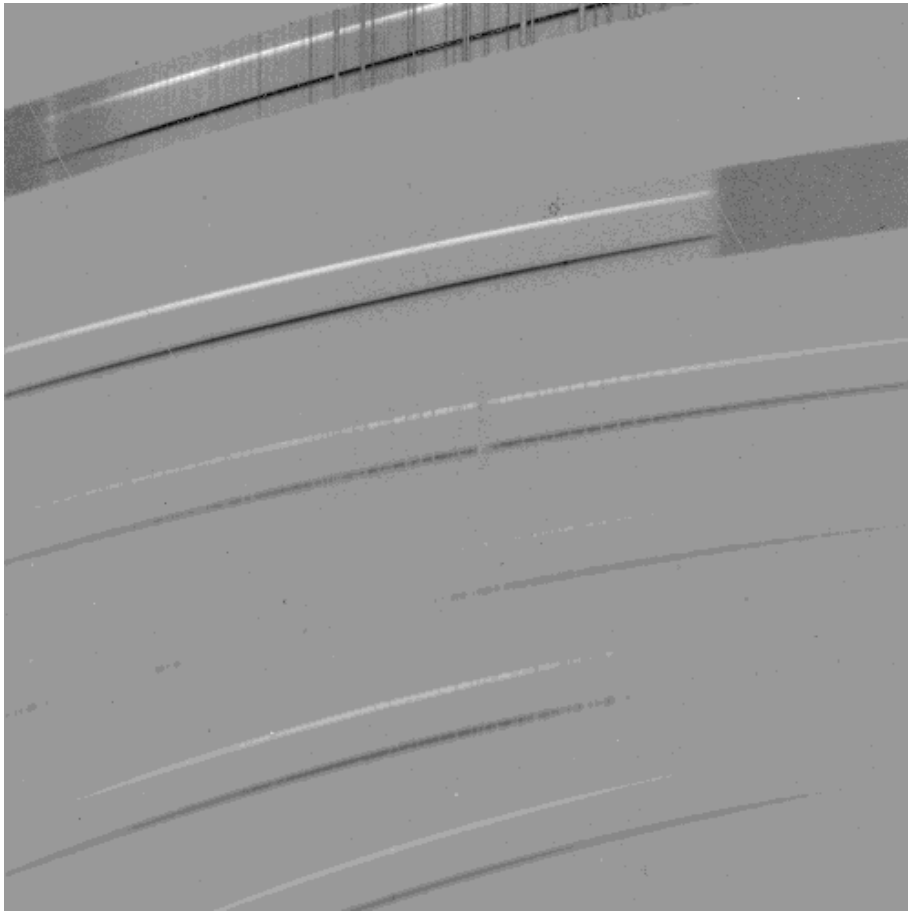


FIG. 5.7 – Exemple d'image A–B/Flat. Le spectre de la source apparaît deux fois, une en positif, l'autre en négatif.

### 5.3 Analyse des spectres - Dérivation des limites supérieures pour HDO/H<sub>2</sub>O

Les spectres obtenus (Figure 5.9) présentent deux raies de l'hydrogène à  $2468\text{ cm}^{-1}$  ( $4,05\ \mu\text{m}$ ) et  $2673\text{ cm}^{-1}$  ( $3,74\ \mu\text{m}$ ), ainsi que des raies de CO en émission dans le cas de SVS13 (Carr & Tokunaga 1992).

Les quatre spectres présentent une profonde bande d'absorption d'élongation de la liaison O–H à  $3,03\ \mu\text{m}$ . L'abondance de la glace d'eau hydrogénée peut être déduite de cette absorption. Sur l'aile droite de cette bande, le fameux « motif à  $3,47\ \mu\text{m}$  » ( $2882\text{ cm}^{-1}$ ) est visible. La bande d'élongation O–D n'est détectée sur aucun de ces quatre spectres.

Nous déterminons dans les prochains paragraphes la densité de colonne de glaces d'HDO en direction des quatre sources, puis les limites supérieures sur les densités de colonne des glaces de HDO.

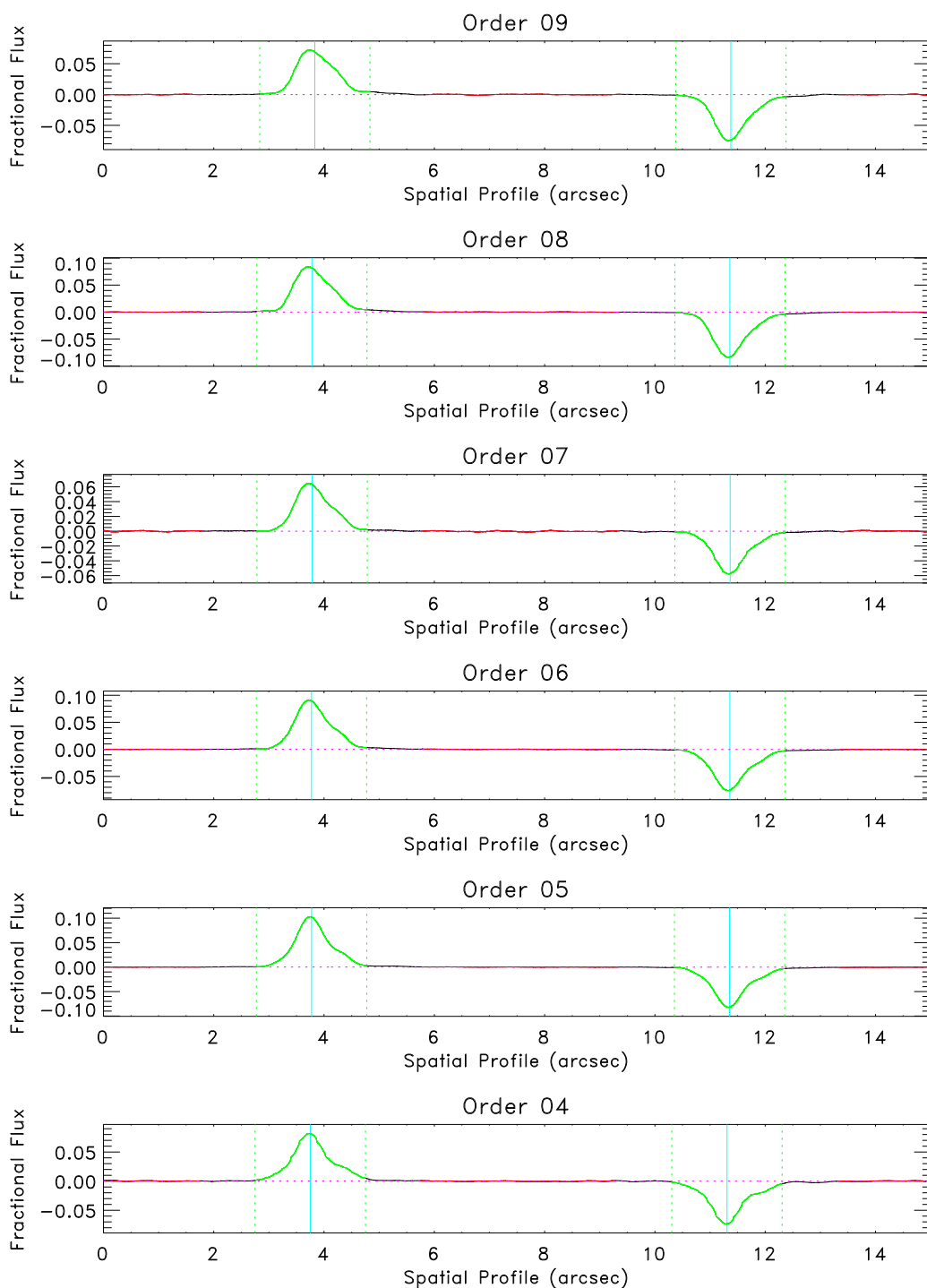


FIG. 5.8 – Profil de luminosité dans les différents ordres d’une image A–B/Flat (exemple d’observations de SVS13). La source apparaît en positif et en négatif sur chaque ordre, du fait de l’observation en « beam switch ». Les pointillés verticaux délimitent la zone utile qui sera gardée pour la suite de la réduction.

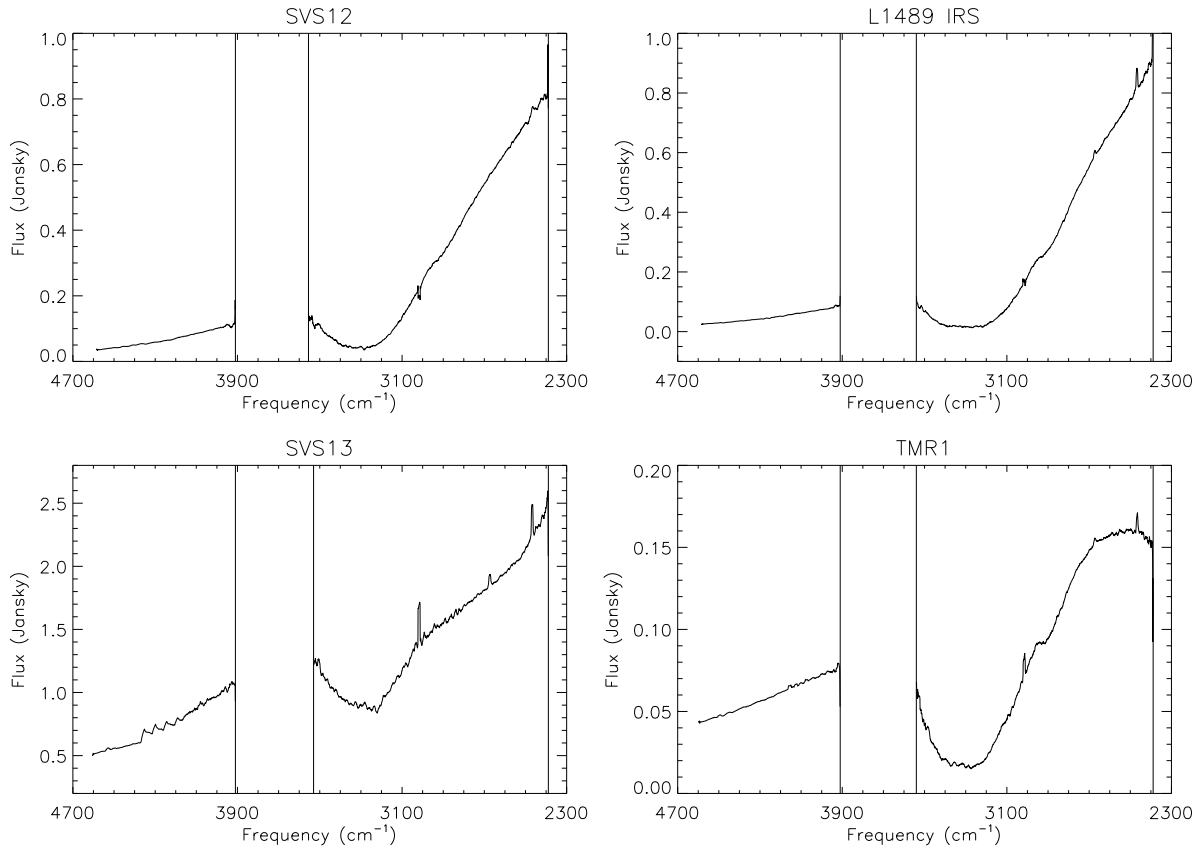


FIG. 5.9 – Spectres des quatre sources observées, lissés à une résolution de  $10 \text{ cm}^{-1}$ . Les traits verticaux délimitent les régions de forte absorption atmosphérique.

### 5.3.1 La densité de colonne de H<sub>2</sub>O

La première étape dans la détermination de l'abondance des glaces H<sub>2</sub>O consiste à définir le continuum  $I_{\text{cont}}$  autour du motif spectral d'élongation O–H.

On peut ensuite tracer le spectre en profondeur optique  $\tau$  définie par :

$$I/I_{\text{cont}} = e^{-\tau}.$$

La densité de colonne totale de molécules de glace d'eau peut alors être déduite de la profondeur optique grâce à la relation suivante :

$$N_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{\int \tau d\nu}{A_{\text{H}_2\text{O}}},$$

où la section efficace d'absorption intégrée de la transition  $A_{\text{H}_2\text{O}} = 2 \times 10^{-16} \text{ cm/molécule}$  (Dartois 1998) et  $\int \tau d\nu$  est exprimée en  $\text{cm}^{-1}$ .

## SVS12, L1489 IRS et TMR1

Pour ces trois sources, on définit un continuum local autour de la bande O–H en ajustant un polynôme du second degré sur les intervalles de fréquence [2400 – 2500, 2700] et [4000, 4400 – 4600]  $\text{cm}^{-1}$ . Ces intervalles ont été choisis pour éviter la région autour du motif à  $3,47 \mu\text{m}$  dans l'ajustement du continuum. Un exemple de détermination du continuum est présenté dans la Figure 5.10.

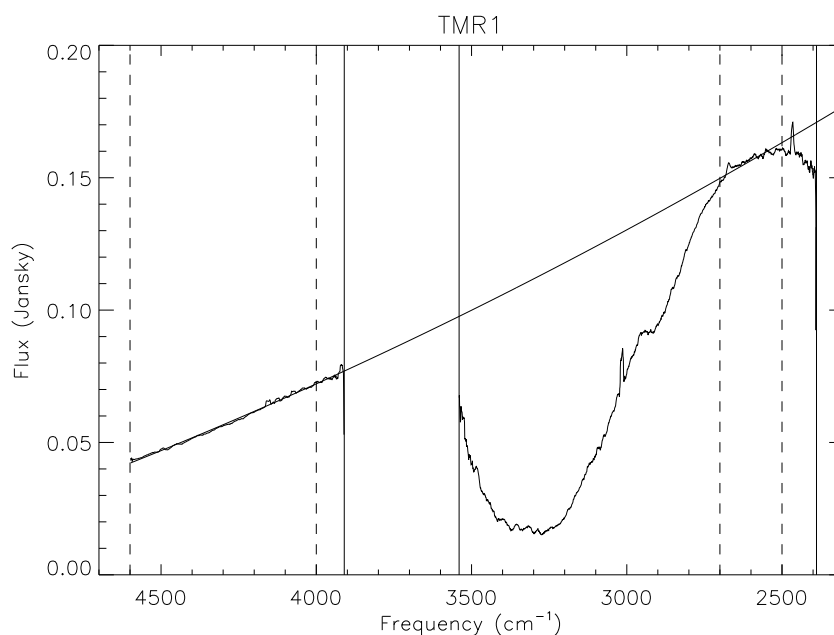


FIG. 5.10 – Exemple de la détermination du continuum pour l'étude de l'absorption à  $3,0 \mu\text{m}$ . Les traits pointillés verticaux délimitent les intervalles de fréquence utilisés pour ajuster le continuum.

La bande d'élongation O–H pour les trois sources ne présente aucune structure et est donc caractéristique de glace amorphe. Nous avons intégré la contribution de la bande entre 3000 et  $3555 \text{ cm}^{-1}$ . Cette profondeur optique intégrée correspond à une limite inférieure sur la densité de colonne de  $\text{H}_2\text{O}$ . Les bandes O–H pour les trois sources sont présentées sur la Figure 5.11 avec une échelle en profondeur optique.

Les profondeurs optiques de la bande d'élongation O–H ainsi que les densités de colonne de glace  $\text{H}_2\text{O}$  dérivées pour chaque source sont consignées dans la Table 5.2. La profondeur optique observée pour L1489 IRS est cohérente avec l'observation à basse résolution ( $R = 150$ ) de Sato et al. (1990,  $\tau = 2,9 \pm 0,2$ ), mais nous trouvons une profondeur optique plus faible ( $\tau = 2,0$ ) dans le cas de SVS12 ( $\tau = 2,9 \pm 0,2$ , Sato et al. 1990). Cette incohérence provient certainement de la détermination du continuum, les observations de Sato et al. (1990) ne couvrant que la bande entre  $2,4 \mu\text{m}$  ( $4167 \text{ cm}^{-1}$ ) et  $3,8 \mu\text{m}$  ( $2632 \text{ cm}^{-1}$ ).

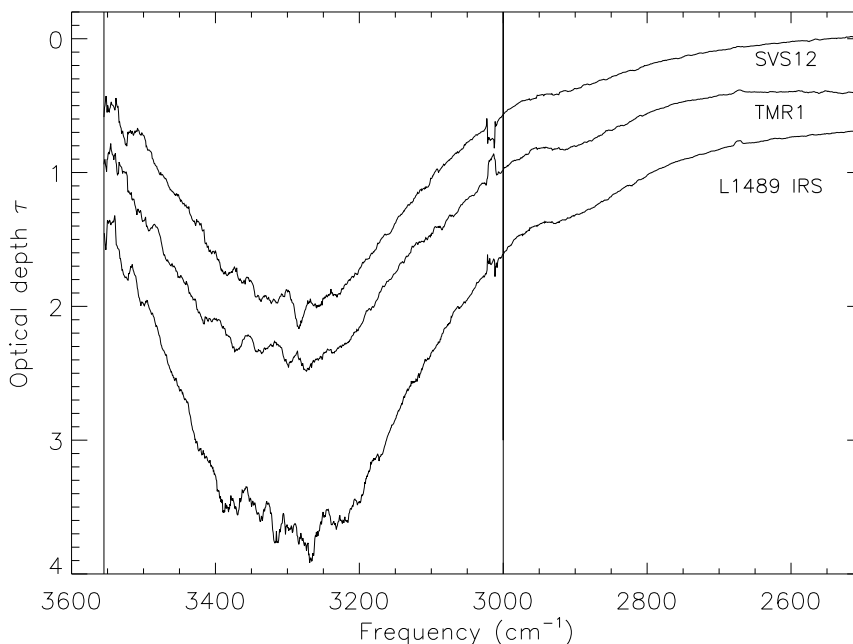


FIG. 5.11 – Bande d'élongation O–H pour SVS12, L1489 IRS et TMR1. Les spectres de TMR1 et de L1489 IRS ont été décalés respectivement de 0,4 et 0,7 pour des raisons de clarté. Les traits verticaux délimitent l'intervalle dans lequel la profondeur optique a été intégrée.

### SVS13

SVS13 présente un spectre étonnant par rapport aux trois autres sources. Tout d'abord la bande d'élongation O–H a une forme non gaussienne, ce qui suggère que la glace est, au moins en partie, sous forme cristalline. Le spectre est de plus caractérisé par une inflexion surprenante dans l'intervalle de fréquence [3900, 4700] ainsi que [2400, 2600]  $\text{cm}^{-1}$ . L'inflexion dans la bande [2400, 2600]  $\text{cm}^{-1}$  ne peut pas être créée par l'étoile standard, puisque nous avons utilisé le même standard pour SVS12, qui ne présente pas la même inflexion. De plus, des observations ISO-SWS à basse résolution de cette source (archive ISO tdt 65201959) montrent la même inflexion. Ce comportement étrange du spectre rend difficile la détermination du continuum local.

Pour contraindre l'incertitude causée par ce problème, nous avons déterminé plusieurs continua, en ajustant des polynômes d'ordre un sur des intervalles de fréquence différents. Quelques exemples de tels continua sont présentés sur la Figure 5.12. Dans tous les cas, les spectres en profondeur optique présentent une large absorption sur l'aile droite de la bande O–H. Cette absorption peut être due à la diffusion dans l'aile O–H (Dartois et al. 2002). Les profondeurs optiques intégrées varient entre 190 et 220  $\text{cm}^{-1}$ . Nous avons donc choisi la valeur la plus faible pour déterminer une limite inférieure sur la densité de colonne de H<sub>2</sub>O.

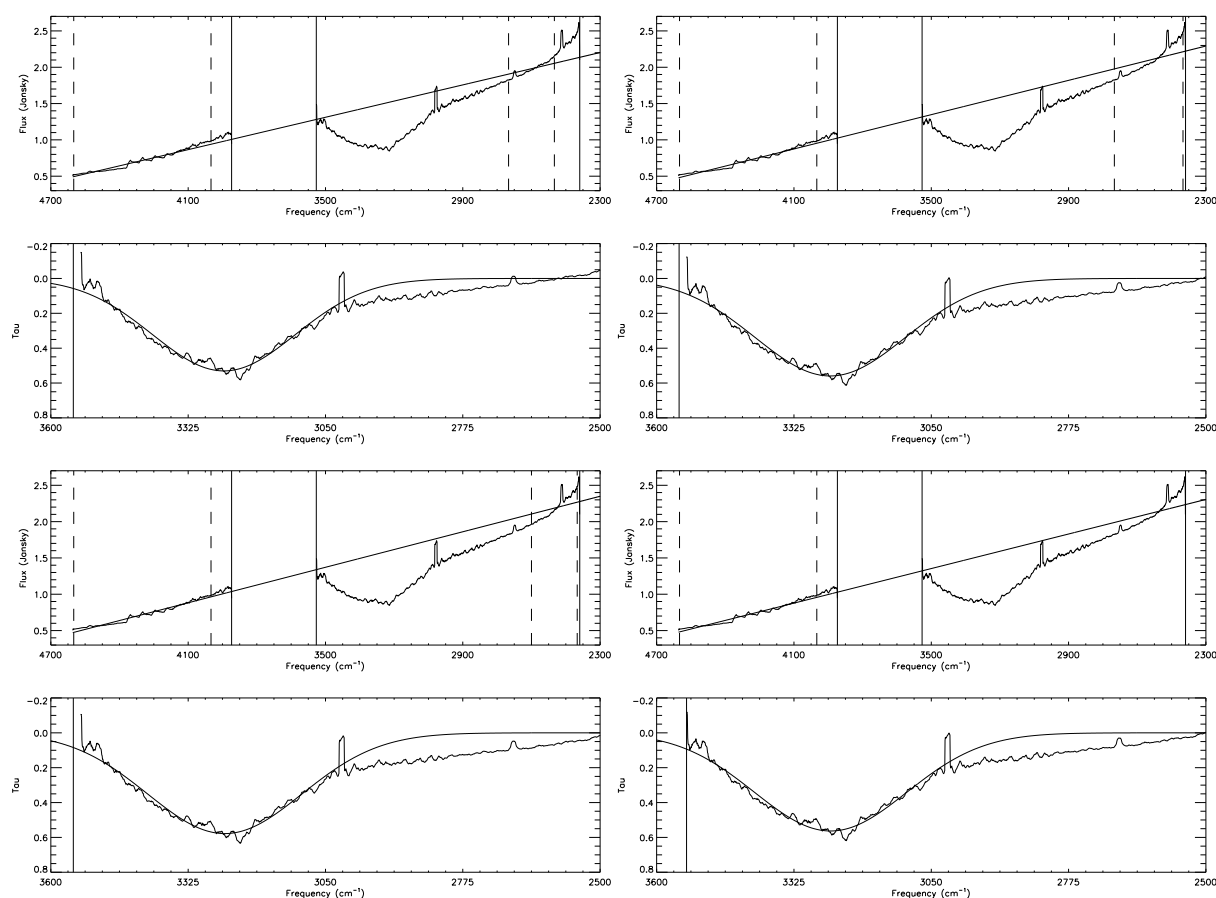


FIG. 5.12 – Déterminations du continuum pour l'étude de l'absorption à  $3,0\ \mu\text{m}$  de SVS13. Les pointillés verticaux délimitent les intervalles de fréquence utilisés pour faire l'ajustement.

### 5.3.2 Les limites supérieures sur les densités de colonne de HDO

Pour déterminer la limite supérieure sur l'abondance de HDO, nous avons tout d'abord soustrait des données les deux raies de l'hydrogène à  $2468$  et  $2673\ \text{cm}^{-1}$ . Pour cela, nous avons ajusté un polynôme de degré un ou deux dans l'intervalle de fréquence  $[2400, 2800]\ \text{cm}^{-1}$ , en évitant une petite zone autour des raies de l'hydrogène (ces zones sont représentées par des marques horizontales sur la Figure 5.13). Le continuum ainsi calculé est superposé en pointillés sur chaque spectre de la Figure 5.13. Les raies de l'hydrogène sont alors soustraites des données en remplaçant les données par le continuum interpolé dans les intervalles de fréquence correspondants.

Nous avons ensuite déterminé un continuum local autour de la bande d'élongation O–D attendue à  $2457\ \text{cm}^{-1}$  ( $4,07\ \mu\text{m}$ ), en ajustant un polynôme de degré un ou deux en prenant appui sur les intervalles de fréquence  $[2410, 2440]$  et  $[2500, 2800]\ \text{cm}^{-1}$ .

La limite supérieure sur la densité de colonne de HDO est ensuite estimée en tenant compte du fait que le motif spectral attendu est plutôt large ( $120\ \text{cm}^{-1}$ , *cf.* plus loin). Les données ont

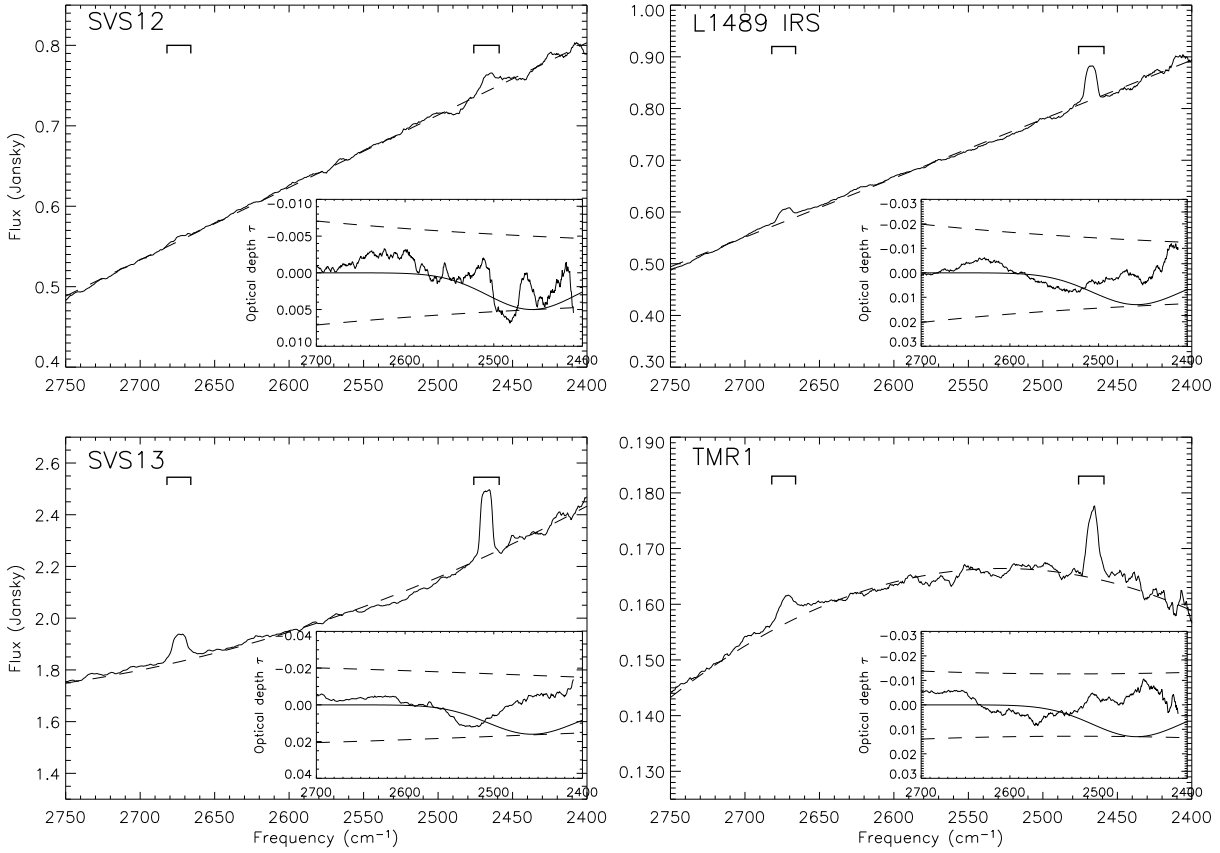


FIG. 5.13 – Bande d'élongation O–D pour les quatre protoétoiles. Les barres horizontales indiquent les intervalles de fréquence ignorés lors de l'ajustement du continuum. Le continuum est superposé en pointillés. En encarts, les données sont tracées en profondeur optique, après avoir été lissées à une résolution de  $30 \text{ cm}^{-1}$ . Les lignes pointillées représentent les limites du flux à  $\pm 3\sigma$ , transposées en échelle de profondeur optique. Les gaussiennes représentent les absorptions O–D maximales ( $3\sigma$ ).

donc été dégradées à une résolution de  $30 \text{ cm}^{-1}$ . La limite supérieure sur la densité de colonne de HDO est alors déduite en estimant l'absorption gaussienne maximale contenue dans une bande de largeur  $3\sigma$  autour de l'ajustement polynomial.

Nous avons fixé la largeur à mi-hauteur (FWHM) de cette gaussienne, centrée sur  $2457 \text{ cm}^{-1}$ , à  $120 \text{ cm}^{-1}$  ( $0,2 \mu\text{m}$ ), d'après les études de laboratoire de glace HDO amorphe (Dartois et al. 2003). Les gaussiennes limites (contenues dans l'intervalle  $I_{\text{cont}} \pm 3\sigma$ ) sont tracées pour chaque source dans les encarts de la Figure 5.13 en profondeur optique. Les lignes pointillées représentent les limites à  $\pm 3\sigma$  associées à la détermination du continuum à la résolution de  $30 \text{ cm}^{-1}$ .

Les limites supérieures sur la densité de colonne de HDO sont alors déduites de la relation :

$$N_{\text{HDO}} \leq \frac{\int \tau d\nu}{A_{\text{OD}}},$$

où  $\int \tau d\nu$  est l'aire de la gaussienne limite, et la valeur choisie pour  $A_{OD}$  est  $3,6 \times 10^{-17}$  pour obtenir une estimation de limite supérieure conservative ( $A_{OD} = (4,3 \pm 0,7) \times 10^{-17}$  cm/molécule, Dartois et al. 2003).

Pour SVS13, nous avons aussi déterminé une limite supérieure de la densité de colonne de HDO pour le cas de glace cristalline. La gaussienne est alors centrée sur  $2427 \text{ cm}^{-1}$  ( $4,12 \mu\text{m}$ ), avec une largeur à mi-hauteur de  $30 \text{ cm}^{-1}$  ( $0,05 \mu\text{m}$ ) d'après les études de laboratoire de Dartois et al. (2003). Dans ce cas, les données ont été lissées à la résolution de  $10 \text{ cm}^{-1}$  (Figure 5.14).

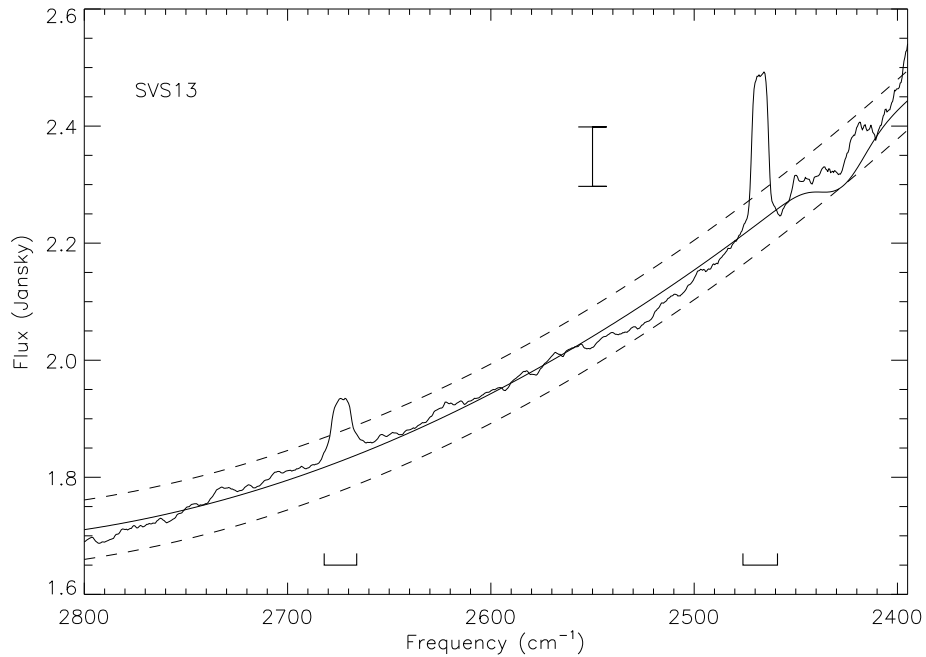


FIG. 5.14 – Bande d'élongation O–D pour SVS13. Les barres horizontales représentent les intervalles de fréquence ignorés lors de l'ajustement du continuum. La barre verticale représente la barre d'erreur  $\pm 3\sigma$  sur le flux. L'absorption gaussienne limite, superposée en trait plein, a été calculée dans l'hypothèse de glace cristalline.

## 5.4 Comparaison à la deutération en phase gazeuse

Les données présentées dans ce chapitre représentent la première tentative d'étude de la deutération en phase solide vers des protoétoiles de faible masse, c'est-à-dire des protoétoiles de luminosité de l'ordre de quelques dizaines de luminosités solaires. Les études précédentes s'étaient portées sur des sources de luminosité supérieure à environ  $200 L_{\odot}$  (e.g. Dartois et al. 2003), dans lesquelles la deutération en phase gazeuse est relativement faible. En particulier, le rapport  $D_2CO/H_2CO$  en phase gazeuse est  $\leq 0,4\%$  dans les protoétoiles massives tandis qu'il est  $\geq 4\%$  dans les protoétoiles de faible masse (Loinard et al. 2002). Les présentes observations sont donc la contrainte la plus forte et un test essentiel pour la relation entre la deutération des



Source	NGC1333/SVS12	NGC1333/SVS13		L1489 IRS	TMR1
		(a)	(b)		
$\tau_{\text{OH}}$	2,0	0,55		3,0	2,0
$\int \tau_{\text{OH}} d\nu$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\geq 750$	$\geq 190$		$\geq 1160$	$\geq 770$
$\text{N}(\text{H}_2\text{O})$ ( $10^{18} \text{ cm}^{-2}$ )	$\geq 3,8$	$\geq 1,0$		$\geq 5,8$	$\geq 3,9$
$\tau_{\text{OD}}$	$\leq 0,005$	$\leq 0,016$	$\leq 0,022$	$\leq 0,013$	$\leq 0,013$
$\int \tau_{\text{OD}} d\nu$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$\leq 0,63$	$\leq 2,0$	$\leq 0,58$	$\leq 1,6$	$\leq 1,6$
$\text{N}(\text{HDO})$ ( $10^{16} \text{ cm}^{-2}$ )	$\leq 1,8$	$\leq 5,6$	$\leq 1,6$	$\leq 4,4$	$\leq 4,4$
HDO/H <sub>2</sub> O	$\leq 0,5 \%$	$\leq 5,9 \%$	$\leq 1,7 \%$	$\leq 0,8 \%$	$\leq 1,1 \%$

TAB. 5.2 – Caractéristiques des bandes d'élongation O–H et O–D. Les limites supérieures pour HDO sont exprimées à  $3\sigma$ . (a) dans le cas de glace H<sub>2</sub>O amorphe (b) dans le cas de glace cristalline (*cf.* texte).

glaces d'eau et la forte deutération d'espèces moins abondantes observées dans le gaz.

Loinard et al. (2002) ont reporté l'observation de D<sub>2</sub>CO/H<sub>2</sub>CO dans deux sources (SVS12 and SVS13) sur les quatre observées ici. Dans chacune de ces deux sources, le rapport mesuré est D<sub>2</sub>CO/H<sub>2</sub>CO  $\sim 4 \%$ , une valeur similaire à celle dérivée dans les deux autres protoétoiles de Classe I étudiées par ces auteurs, et seulement un facteur 2 ou 3 plus faible que la valeur moyenne observée dans les protoétoiles de Classe 0 (Loinard et al. 2002). Ainsi, SVS12 et SVS13 apparaissent comme représentatives de la deutération du formaldéhyde dans les sources de Classe I, et plus généralement dans les protoétoiles plus enfouies, à un facteur deux ou trois près. Il est important de remarquer que le rapport de simple deutération HDCO/H<sub>2</sub>CO dans les protoétoiles de Classe 0 est encore plus élevé, de l'ordre de 15% dans la protoétoile IRAS16293–2422 (Loinard et al. 2000; van Dishoeck et al. 1995). Le méthanol est lui encore plus deutéré, avec un rapport CH<sub>2</sub>DOH/CH<sub>3</sub>OH  $\sim 0,4$  (chapitre 3, Parise et al. 2002b, 2004a).

Les observations présentées montrent clairement que le rapport HDO/H<sub>2</sub>O dans les glaces des protoétoiles de faible masse est inférieur à 2% ( $3\sigma$ ), c'est-à-dire bien plus faible que le fractionnement observé pour le formaldéhyde en phase gazeuse. Cette constatation est un élément essentiel pour la compréhension de la deutération d'un point de vue observationnel.

Avant de discuter les conséquences de la comparaison de ces observations en phase solide avec les observations en phase gazeuse, il est important de comprendre où ces glaces sont situées sur la ligne de visée, et si les glaces que nous sondons ont traversé la même histoire chimique que les glaces qui se sont évaporées dans le Cœur Chaud, libérant les molécules fortement deutérées telles que le formaldéhyde et le méthanol dans la phase gazeuse. A priori, une partie de l'absorption peut se produire dans le gaz quiescent situé en avant-plan et non directement associé à la protoétoile elle-même (Boogert et al. 2002c). L'observation de la bande d'absorption de glaces pures de CO à  $4,67 \mu\text{m}$  peut nous aider à comprendre quels traitements thermiques ont vécu les glaces, et donc leur proximité de la protoétoile. En effet, l'absorption due au CO pur n'apparaît

que pour des glaces dont la température est inférieure à 15 K (température d'évaporation), et on s'attend donc à n'en trouver que dans le nuage sombre d'avant-plan. La bande d'absorption du CO a été observée en direction de L1489 IRS et modélisée par Boogert et al. (2002b). Ces auteurs trouvent une profondeur optique de 0,4 pour la composante de CO pur (*cf.* leur Figure 5). La distribution des glaces de CO pur dans le nuage moléculaire du Taureau a été bien étudiée (Whittet et al. 1989; Chiar et al. 1995). La profondeur optique des glaces de CO pur dans le nuage sombre est proportionnelle à l'extinction totale ( $\tau_{\text{COpur}} = 0,08(A_V - 6)$ , Chiar et al. 1995). La profondeur optique des glaces de CO pur en direction de L1489 IRS correspond donc à une extinction de 11 pour le nuage d'avant-plan, et par conséquent une extinction de 18 pour l'enveloppe associée à la protoétoile (L'extinction totale  $A_V$  est 29 en direction de L1489 IRS, Myers et al. 1987). La profondeur optique de la glace d'eau présente une corrélation similaire avec l'extinction ( $\tau_{\text{H}_2\text{O}} = 0,08(A_V - 3)$ , Chiar et al. 1995). Ainsi, la profondeur optique de la glace d'eau associée au nuage d'avant-plan est seulement de 0,6 et les glaces dans l'enveloppe de L1489 IRS contribuent à la profondeur optique à hauteur de  $\tau_{\text{H}_2\text{O,ice}} = 2,4$ . La limite supérieure du fractionnement de H<sub>2</sub>O dans l'environnement immédiat de cette protoétoile est donc de 1%.

Discutons maintenant les conséquences des deux types d'observations, celles de la deutération en phase solide (étude présente) et celles de la deutération en phase gazeuse (chapitres précédents). Deux possibilités se présentent : soit le formaldéhyde et le méthanol sont formés simultanément aux glaces d'eau, soit les glaces d'eau sont formées dans une phase antérieure et sont donc marquées avec le degré de deutération différent correspondant à cette phase.

Il y a maintenant un consensus général autour de la formation du formaldéhyde et du méthanol à la surface des grains, probablement par hydrogénations successives de molécules de CO adsorbées sur les grains. Cette idée est en effet supportée par exemple par les études théoriques de Shalabiea & Greenberg (1994), Tielens & Whittet (1996) et Charnley et al. (1997) et par les travaux de laboratoire de Watanabe & Kouchi (2002), bien qu'une expérience de laboratoire semble la contester (Hiraoka et al. 2002). Si nous supposons maintenant que les glaces d'eau sont formées simultanément par hydrogénation d'atomes d'oxygène piégés sur les grains, le fractionnement en deutérium est fixé par le rapport D/H atomique dans le gaz accréant sur le grain (e.g. Tielens 1983; Caselli et al. 2002a), et ne peut pas être substantiellement différent dans les trois espèces (eau, formaldéhyde et méthanol), à moins qu'une deutération sélective soit à l'œuvre pour le formaldéhyde et le méthanol, au détriment de l'eau. Des modèles de chimie détaillés ont été développés pour expliquer le fractionnement des molécules sur les grains. Ceux-ci prédisaient un fractionnement accru pour le formaldéhyde par le biais de réactions d'abstraction, causées par la différence d'énergie de point zéro (Tielens 1983). Cependant, les idées sur la chimie active sur les grains ont considérablement évolué depuis et ces modèles n'ont pas été entièrement revisités. Nous proposons dans le chapitre 8 une nouvelle étude des processus pouvant entraîner un fractionnement de l'eau plus faible que celui des autres molécules.

Dans la seconde hypothèse, l'eau, le formaldéhyde et le méthanol seraient formés pendant des phases différentes caractérisées par des conditions physiques différentes qui pourraient conduire

à des fractionnements différents. En particulier, si le formaldéhyde et le méthanol sont formés pendant les dernières étapes de l'accrétion — quand la majeure partie du gaz est déjà déplété sur les grains — leur fractionnement peut être très grand (Roberts et al. 2003). Un tel modèle requiert que les conditions physiques qui favorisent un fort fractionnement atomique dans le gaz favorisent aussi la formation de formaldéhyde et de méthanol, mais pas celle de l'eau. Cette hypothèse rencontre quelques difficultés puisque la grande abondance de formaldéhyde et de méthanol dans les Cœurs Chauds est généralement interprétée comme le résultat de l'évaporation des glaces riches en eau (Loinard et al. 2000; Ceccarelli et al. 2001; Schöier et al. 2002). Cependant, l'observation de  $D_2CO$  dans les régions externes de l'enveloppe de IRAS16293 (Ceccarelli et al. 2001) apporte une preuve observationnelle de la structure multi-couches des manteaux de glaces, les molécules deutérées étant piégées dans les glaces riches en CO qui évaporent autour de 15 K. Dans ce schéma, l'observation en phase gazeuse des molécules deutérées sonderait le fractionnement dans ces glaces riches en CO, alors que les observations de l'eau en phase solide tracerait la masse des glaces d'eau, où la deutération est moins importante.

Alternativement, les glaces d'eau sont formées par condensation de l'eau copieusement produite dans les chocs moléculaires intervenant lors de la phase de nuage moléculaire (Bergin et al. 1999). Dans ce cas, le fractionnement  $HDO/H_2O$  est faible, reflétant les hautes températures ( $\sim 300$  K) auxquelles l'eau est formée. Dans ce scénario, le formaldéhyde et le méthanol ne sont pas produits dans les chocs, et ils peuvent donc avoir un fractionnement différent (plus grand), caractéristique de la formation sur les grains ou dans le gaz dans la phase précédent le choc.

Aucun de ces modèles ne semble complètement développé et tous semblent avoir des difficultés à expliquer les observations. Ces observations mettent en évidence l'urgence de reconsidérer les modèles de deutération sélective du formaldéhyde et du méthanol. Le chapitre 8 fait l'objet d'une telle étude.

## 5.5 Conclusion

Nous avons présenté la recherche de HDO solide dans les manteaux des grains en direction de protoétoiles de faible masse. Nous n'avons pas détecté HDO mais nous dérivons des limites supérieures sur le fractionnement  $HDO/H_2O$  de 0,5 à 2%. Ces limites supérieures montrent définitivement que l'eau solide est beaucoup moins deutérée que les autres molécules telles que le formaldéhyde et le méthanol, observées en phase gazeuse. L'origine de ces différences n'est pas encore complètement comprise.

Cette étude a fait l'objet de la publication Parise et al. (2003c).

## Chapitre 6

# L'abondance de HDO en phase gazeuse dans IRAS16293–2422

### Sommaire

---

<b>6.1</b>	<b>Introduction</b>	<b>115</b>
<b>6.2</b>	<b>Observations et résultats</b>	<b>116</b>
6.2.1	Observations sur IRAS16293–2422 et son outflow	116
6.2.2	Résultats	118
<b>6.3</b>	<b>Analyse</b>	<b>121</b>
6.3.1	Modélisation	121
6.3.2	Tests de validité	123
<b>6.4</b>	<b>Discussion</b>	<b>126</b>
<b>6.5</b>	<b>Conclusion</b>	<b>129</b>

---

### 6.1 Introduction

Le chapitre précédent a montré que les glaces d'eau sont très peu deutérées dans les protoétoiles de faible masse ( $f \leq 2\%$ ) par rapport au fractionnement du formaldéhyde dans la phase gazeuse. Il n'est cependant pas clair si cela vient du fait que l'eau est une molécule particulière qui serait moins favorablement deutérée, ou si ce sont les molécules en phase solide qui sont peu deutérées par rapport aux molécules en phase gazeuse. Un moyen de répondre à cette alternative est de mesurer le fractionnement de l'eau en phase gazeuse. Comme indiqué dans le chapitre d'introduction, le fractionnement de l'eau a été mesuré sur des comètes (Balsiger et al. 1995; Bockelée-Morvan et al. 1998; Meier et al. 1998b) et dans le Cœur Chaud d'Orion (Gensheimer et al. 1996), où le rapport HDO/H<sub>2</sub>O semble bas par rapport au fractionnement des autres molécules. Par contre, HDO a été très peu étudié dans les protoétoiles de faible masse. Seule l'observation d'une transition à 241 GHz a été faite en direction de IRAS16293–2422 par van Dishoeck et al. (1995). Le rapport HDO/H<sub>2</sub>O  $\geq 0.01$  dérivé par ces auteurs est en fait

très mal contraint. En effet, si HDO peut être observé avec les télescopes au sol, ce n'est pas le cas de H<sub>2</sub>O, pour laquelle il est indispensable de s'affranchir de l'atmosphère. Les seules observations directes de H<sub>2</sub>O n'ont donc pu être réalisées que depuis le lancement en 1995 du satellite ISO, suivi de SWAS en 1998, dont l'un des objectifs scientifiques était la détection de H<sub>2</sub>O et H<sub>2</sub><sup>18</sup>O. Notons que c'est aussi un des objectifs principaux du satellite ODIN actuellement en vol. Ces observations satellite ont l'inconvénient d'avoir une résolution spatiale bien moins bonne que celle des radiotélescopes au sol. ISO et SWAS avaient en effet une résolution de 80'' et 4' respectivement, tandis qu'ODIN a une résolution de 2' (à comparer à la résolution de 10'' du télescope de 30 m à haute fréquence). Il n'est donc pas évident de comparer les observations HDO et H<sub>2</sub>O et d'en déduire un rapport HDO/H<sub>2</sub>O pertinent. Dans l'étude de van Dishoeck et al. (1995), l'abondance de H<sub>2</sub>O a été estimée à partir d'une limite supérieure sur l'abondance de H<sub>3</sub>O<sup>+</sup>, et n'est donc pas une mesure directe.

L'unique moyen actuel de déterminer l'abondance de H<sub>2</sub>O dans l'enveloppe des protoétoiles est de passer par une étape de modélisation pour reproduire les flux, et parfois même les profils des différentes raies observées. Ainsi, l'abondance de H<sub>2</sub>O a été déterminée dans les deux zones interne ( $T \geq 100\text{K}$ , température d'évaporation des glaces d'eau) et externe ( $T \leq 100\text{K}$ ) de l'enveloppe de la protoétoile IRAS16293–2422 par modélisation de transitions observées avec les instruments LWS et SWS du satellite ISO (Ceccarelli et al. 2000a). Le modèle utilisé est celui d'une enveloppe en effondrement (Ceccarelli et al. 1996) et est détaillé dans le chapitre 7. Nous nous proposons dans ce chapitre d'observer et de modéliser l'émission de HDO dans la protoétoile IRAS16293–2422 afin de dériver le rapport HDO/H<sub>2</sub>O dans l'enveloppe. La partie 6.2 présente les observations, tandis que la modélisation est détaillée dans la partie 6.3. Les résultats sont discutés dans la partie 6.4.

## 6.2 Observations et résultats

### 6.2.1 Observations sur IRAS16293–2422 et son outflow

Les observations ont été effectuées au JCMT (James Clerk Maxwell Telescope, Mauna Kea, Hawaï) et au télescope de 30 m de l'IRAM (Sierra Nevada, Espagne), sur la source IRAS16293–2422 à  $\alpha(2000.0) = 16^{\text{h}} 32^{\text{m}} 22,6''$  et  $\delta(2000.0) = -24^{\circ} 28' 33''$ . IRAS16293 est une binaire, de composantes A et B séparées de 5'' (Mundy et al. 1992). Notre position est centrée sur la composante B. Chaque observation inclut la contribution des deux sources, puisque le lobe est plus grand que la séparation entre les deux composantes. Nous noterons dans ce chapitre cette position « IRAS16293 “B” » par opposition à « IRAS16293 “A” », centrée sur la composante A de la binaire, dont nous présentons aussi des données, obtenues par Stark et al. (2004).

Certaines de ces observations ont été obtenues dans le cadre du projet de grand relevé spectral non biaisé de IRAS16293, conduit aux télescopes JCMT, 30 m de l'IRAM et APEX

(Atacama Path EXperiment, Cerro Chajnantor, Chili) par un consortium européen regroupant des chercheurs du Kapteyn Astronomical Institute et du SRON (Groningen), de l'observatoire de Leiden (Pays-Bas), du Max-Planck-Institut für Radioastronomie à Bonn (Allemagne), de l'observatoire d'Arcetri de Florence (Italie), des observatoires de Bordeaux et de Grenoble ainsi que du CESR à Toulouse.

### Observation JCMT

La transition fondamentale ( $1_{0,1} - 0_{0,0}$ ) de HDO à 464,9 GHz a été observée le 26 juillet 1999 avec le JCMT. Les observations ont été réalisées avec le récepteur W à polarisation duale, en single-side band. Chaque polarisation du récepteur est connectée à une unité du corrélateur fournissant une largeur de bande de 250 MHz pour une résolution spectrale de 156 kHz, ce qui correspond à cette fréquence à une résolution en vitesse de  $0,1 \text{ km s}^{-1}$ . Les observations ont été réalisées en mode « position-switch » avec une position OFF décalée de  $\Delta\alpha = -180''$  et  $\Delta\delta = 0''$  de la position nominale. Le spectre obtenu est présenté en Figure 6.1. La self-absorption étroite est due au nuage dans lequel la protoétoile est enfouie (Stark et al. 2004).

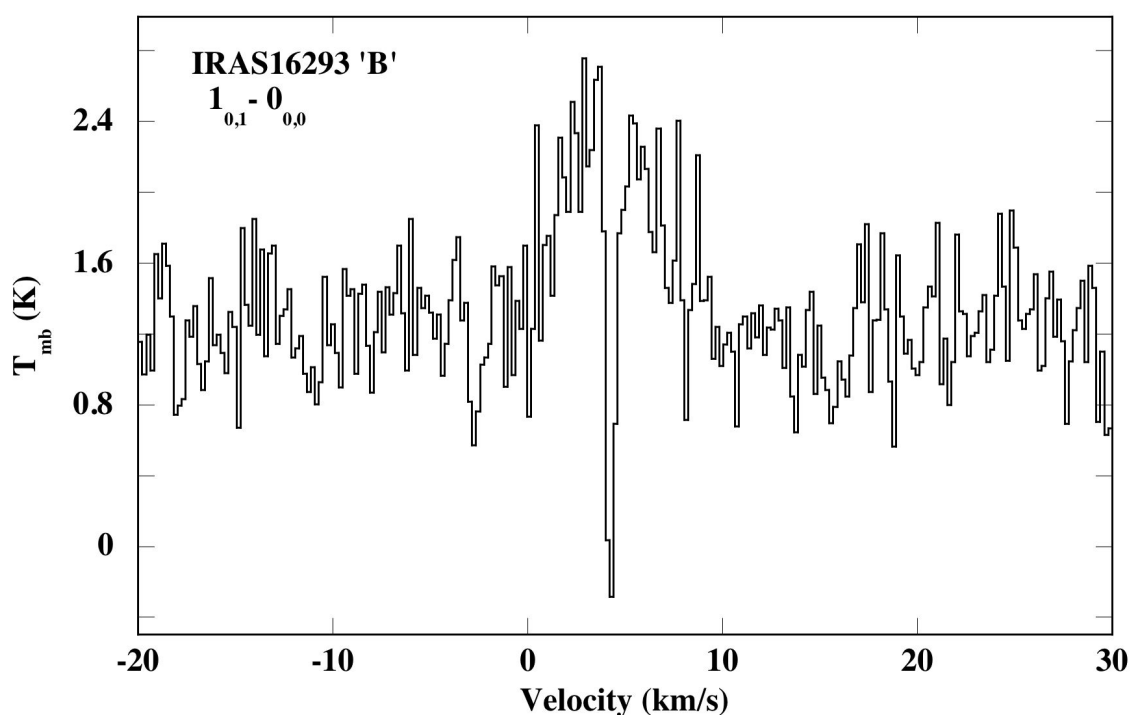


FIG. 6.1 – Raie fondamentale de HDO à 464 GHz, observée sur la source IRAS16293 “B” avec le JCMT.

## Observations IRAM

Toutes les autres observations ont été faites avec le radiotélescope de 30 m de l'IRAM. Pour comprendre l'origine de l'émission de HDO (enveloppe chaude ou outflow ?), nous avons aussi observé une position sur l'outflow, à  $\Delta\alpha = -39''$  et  $\Delta\delta = 0''$  de la position nominale de la source. Le choix de cette position est motivé par deux raisons : c'est la position d'une des émissions les plus brillantes de l'outflow en CO (Stark et al. 2004), et elle est suffisamment éloignée de la position nominale de la source pour éviter que les observations dans le lobe de  $33''$  (à 80,6 GHz) soient contaminées par l'émission des parties externes de l'enveloppe.

Pour les observations sur la source, nous avons utilisé le mode observationnel « beam-switch », avec un décalage symétrique de  $240''$  autour de la position nominale. Pour les observations sur l'outflow, nous avons utilisé le mode observationnel « position-switch », avec un switch de  $\Delta\alpha = -3600''$  et  $\Delta\delta = 0''$  pour s'assurer que la position de référence soit en dehors de l'outflow. Deux récepteurs ont été utilisés simultanément, connectés à une unité de corrélateur ou de la banque de filtres.

Les résolutions spectrales utilisées, les résolutions angulaires du télescope, les temps d'intégration (ON+OFF) et les températures système sont indiqués dans la Table 6.1. Le pointage et la mise au point du télescope ont été vérifiés régulièrement en observant des planètes ou des quasars lumineux, permettant d'atteindre une précision de pointage meilleure que  $3''$  pour chaque télescope et pour toutes les observations.

Toutes les intensités sont reportées en unités de température de lobe principal, obtenues en utilisant les efficacités de lobe disponibles sur les sites web du JCMT et de l'IRAM.

### 6.2.2 Résultats

Les spectres obtenus sont présentés en Fig. 6.1 et 6.2. Il apparaît que les transitions cherchées en direction de l'outflow ne sont pas détectées, tandis que toutes les raies sont clairement détectées sur la source. L'intensité de la transition fondamentale HDO à 464 GHz est très similaire à celle observée par Stark et al. (2004) sur la position IRAS16293 "A", décalée de  $5''$  par rapport à notre position IRAS16293 "B". Leur flux intégré est 10% plus important que le nôtre. Par contre, ce n'est pas le cas pour les transitions à 225,9 et 241,6 GHz, pour lesquelles Stark et al. (2004) ont reporté des limites supérieures faibles ( $\leq 120$  mK km s<sup>-1</sup> en supposant une largeur de raie de 6 km s<sup>-1</sup>). Nous avons récupéré dans la base de données du JCMT et réduit de nouveau les observations originales de Stark et al., réalisées en 1999. Le résultat de cette nouvelle réduction est présenté dans la Figure 6.3. Les deux transitions sont en fait clairement détectées avec une température de pic de 100 mK, ce qui est parfaitement cohérent à la fois avec nos observations (en tenant compte de la dilution dans le lobe du JCMT par rapport au lobe de l'IRAM) et avec les observations publiées par van Dishoeck et al. (1995).

La Table 6.1 résume les résultats de toutes ces observations. Du fait de la présence d'une absorption, évidente sur la raie fondamentale, mais peut-être aussi présente pour les autres raies,

Date d'observation	Transition	Fréquence GHz	$E_{\text{up}}$ K	Lobe "	$t_{\text{int}}$ min	$T_{\text{sys}}$ K	$\delta\nu$ MHz	$\delta v$ km/s	RMS mK	$T_{\text{pic}}$ mK	$\Delta v$ km/s	$\int T_{\text{mb}} dv$ K.km/s
IRAS16293 "B" ( $\alpha(2000.0) = 16^{\text{h}} 32^{\text{m}} 22.6''$ , $\delta(2000.0) = -24^{\circ} 28' 33''$ )												
20/01/04	(1 <sub>1,0</sub> -1 <sub>1,1</sub> )	80.578	46.8	33	42	190	0.32	1.2	10	81	4.9	0.40
25/01/04	(3 <sub>1,2</sub> -2 <sub>2,1</sub> )	225.897	167.7	12	60	650	1.0	1.3	12	245	6.2	1.7
29/03/00	(2 <sub>1,1</sub> -2 <sub>1,2</sub> )	241.561	95.3	11	35	880	0.32	0.4	62	400	6.6	2.0
03/02/04	(2 <sub>2,0</sub> -3 <sub>1,3</sub> )	266.161	157.3	10	68	820	1.25	1.4	14	75	3.0	0.21
26/07/99	(1 <sub>0,1</sub> -0 <sub>0,0</sub> )	464.924	22.3	11	140	3000	0.31	0.2	290	1200	6.0	5.5
Flow ( $\alpha(2000.0) = 16^{\text{h}} 32^{\text{m}} 20''$ , $\delta(2000.0) = -24^{\circ} 28' 33''$ )												
03/09/04	(1 <sub>1,0</sub> -1 <sub>1,1</sub> )	80.578	46.8	33	40	230	0.32	0.58	14	-	6.0*	< 0.05*
03/09/04	(2 <sub>1,1</sub> -2 <sub>1,2</sub> )	241.561	95.3	11	40	950	0.32	0.4	38	-	6.0*	< 0.01*
IRAS16293 "A" ( $\alpha(2000.0) = 16^{\text{h}} 32^{\text{m}} 22.85''$ , $\delta(2000.0) = -24^{\circ} 28' 35.5''$ )												
1999	(1 <sub>0,1</sub> -0 <sub>0,0</sub> )	464.924	22.3	11			0.19			1000	5.9	6.0
1999	(3 <sub>1,2</sub> -2 <sub>2,1</sub> )	225.897	167.7	21	120	715	0.63	0.83	18	87	6.5	0.61
1999	(2 <sub>1,1</sub> -2 <sub>1,2</sub> )	241.561	95.3	20	96	690	0.63	0.78	23	112	5.4	0.62

TAB. 6.1 – Caractéristiques des observations HDO. Les trois parties représentent les trois positions observées. Nous citons en italique les résultats publiés par Stark et al. (2004). \* : Pour les observations de l'outflow, comme aucune largeur de raie ne peut être mesurée, nous avons supposé une largeur moyenne de 6 km/s. Le RMS a été calculé sur les données lissées à la résolution  $\delta\nu$  indiquée dans la colonne 8.



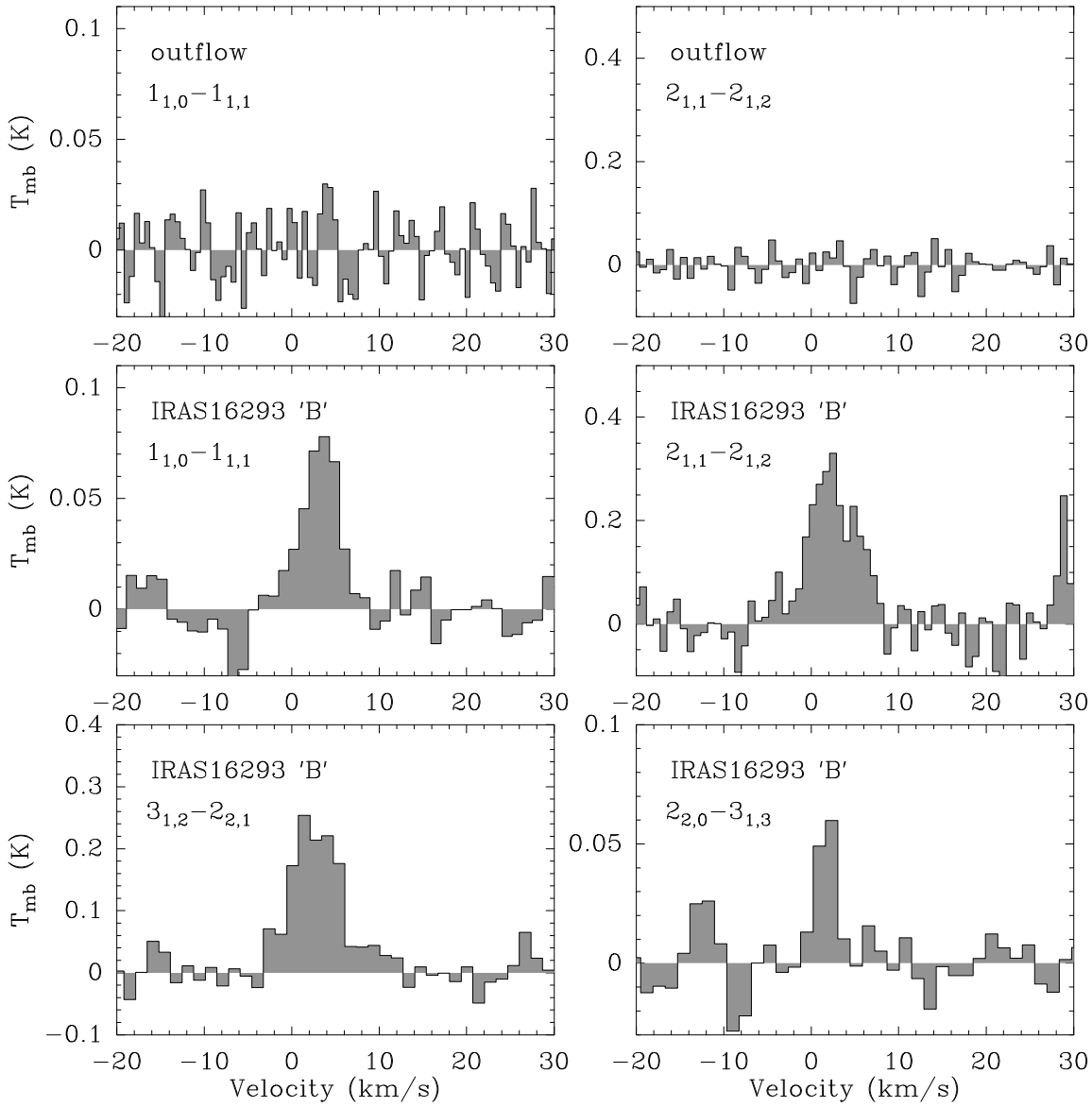


FIG. 6.2 – Transitions observées au télescope de l’IRAM vers IRAS16293–2422 et son outflow.

nous avons calculé le flux intégré en faisant la somme du signal des canaux dans l’intervalle en vitesse de  $-5$  à  $10 \text{ km s}^{-1}$ . Les largeurs de raies indiquées ont été déduites par ajustement d’une gaussienne. Le  $\delta\nu$  est la résolution spectrale obtenue dans les spectres des Figures 6.1 à 6.3 après un éventuel lissage de Hanning.

Les raies observées sont larges – exceptée la plus bruitée à  $266 \text{ GHz}$  –, de l’ordre de  $6 \text{ km s}^{-1}$ , et proviennent donc plutôt de la partie interne chaude en effondrement de l’enveloppe ou de l’outflow que des régions externes froides de l’enveloppe. De plus, l’émission observée pour les

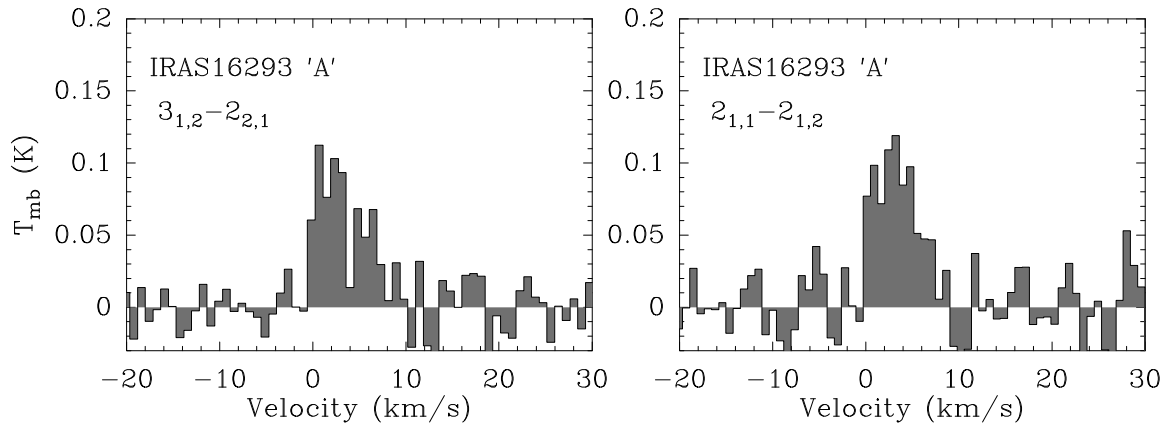


FIG. 6.3 – Nouvelle réduction des transitions observées vers IRAS16293–2422 “A” par Stark et al. (2004) avec le JCMT.

transitions à 225,9 et à 241,6 GHz est très différente entre le JCMT (15 m) et le télescope de 30 m de l’IRAM. Ceci peut s’expliquer si l’émission provient d’une région plus petite que le lobe du télescope de 30 m, et est donc plus diluée dans le lobe du JCMT que dans le lobe de l’IRAM. En effet, si la source émettrice est de l’ordre de  $2''$  (comme indiqué par l’analyse de Ceccarelli et al. 2000a), on attend une température d’antenne 4 fois plus grande à l’IRAM qu’au JCMT, ce qui est proche de ce que l’on observe (2,8 à 225,9 GHz et 3,2 à 241,6 GHz). Nous attribuons le désaccord résiduel aux positions différentes entre les observations de Stark et al. (2004, IRAS16293 “A”) et les nôtres (IRAS16293 “B”).

Le fait que l’émission de HDO provienne d’une petite région argumente en faveur d’une origine dans les parties internes chaudes de l’enveloppe, plutôt que dans l’outflow. Ceci est aussi fortement suggéré par la non-détection des deux raies à 80,6 et 241,6 GHz en direction de l’outflow. Dans la suite nous modélisons donc l’émission de HDO en supposant qu’elle provient de l’enveloppe de la protoétoile.

## 6.3 Analyse

### 6.3.1 Modélisation

La structure de l’enveloppe d’IRAS16293–2422 a été déterminée par Ceccarelli et al. (2000a) à partir d’observations de raies de l’eau  $\text{H}_2\text{O}$  à l’aide des instruments SWS et LWS à bord du satellite ISO. Cette étude a été confirmée par l’étude ultérieure de Schöier et al. (2002). L’émission de l’eau a été simulée par un modèle de « jump » (Ceccarelli et al. 1996, noté CHT96 dans la suite, et détaillé au chapitre 7) où les abondances de l’eau dans la partie interne de l’enveloppe ( $T \geq 100$  K, température d’évaporation des manteaux de glace) et dans la partie externe froide ( $T \leq 100$  K) sont deux paramètres libres. Les abondances déduites sont  $x_{\text{int}}^{\text{H}_2\text{O}} = 3 \times 10^{-6}$  et  $x_{\text{ext}}^{\text{H}_2\text{O}} = 5 \times 10^{-7}$  (Ceccarelli et al. 2000a).

Pour analyser les données HDO, nous avons adapté le modèle CHT96 pour calculer l’émission

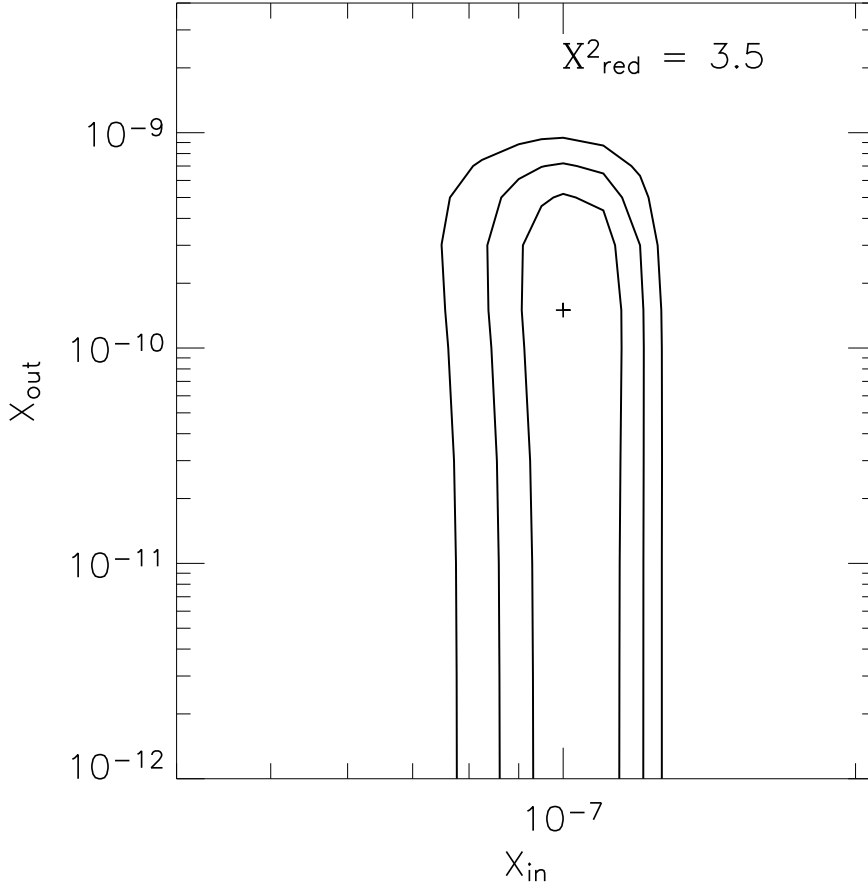


FIG. 6.4 – Intervalles de confiance à 1, 2 et 3  $\sigma$ . Le '+' correspond au meilleur ajustement des données.  $x_{\text{int}}^{\text{HDO}}$  est très bien contraint ( $1 \pm 0,3 \times 10^{-7}$ ), ainsi que la limite supérieure sur  $x_{\text{ext}}^{\text{HDO}}$  ( $\leq 10^{-9}$ ,  $3\sigma$ ).

de HDO. Les coefficients de collision utilisés proviennent de Green (1989). Nous avons adopté les structures en température et densité dérivées pour l'enveloppe par Ceccarelli et al. (2000a) et avons considéré les abondances internes et externes de HDO comme paramètres libres. Nous avons ensuite effectué une analyse en  $\chi^2$  pour des valeurs de  $x_{\text{int}}^{\text{HDO}}$  comprises entre  $1 \times 10^{-9}$  et  $1 \times 10^{-6}$  et de  $x_{\text{ext}}^{\text{HDO}}$  comprises entre  $1 \times 10^{-12}$  et  $1 \times 10^{-8}$ . Le meilleur ajustement des observations intervient pour  $x_{\text{int}}^{\text{HDO}} = 1 \times 10^{-7}$  et  $x_{\text{ext}}^{\text{HDO}} = 1,5 \times 10^{-10}$  et donne une valeur de  $\chi^2$  réduit de 3,5. La Figure 6.4 présente les contours d'iso- $\chi^2$  délimitant les intervalles de confiance à  $1\sigma$ ,  $2\sigma$  et  $3\sigma$  (correspondant respectivement à  $\chi_{\text{red}}^2 = \chi_{\text{min}}^2 + 1.18$ ,  $\chi_{\text{min}}^2 + 2.70$  et  $\chi_{\text{min}}^2 + 5.06$ , puisque le système a 5 raies – 2 paramètres de modèle = 3 degrés de liberté). L'abondance interne est très bien contrainte ainsi que la limite supérieure sur l'abondance externe. Par contre, la limite inférieure sur l'abondance externe est mal contrainte, du fait du faible nombre de transitions de basse énergie (en fait, seule la transition fondamentale contraint cette abondance externe, comme il

apparaît sur les profils d'émission de la Figure 6.5).

Nous avons analysé de façon similaire les trois raies observées par Stark et al. (2004) sur la position IRAS16293 “A” au JCMT (225,9, 241,6 et 464,9 GHz). Les abondances déduites de cette analyse sont  $x_{\text{int}}^{\text{HDO}} = 1,1 \times 10^{-7}$  et  $x_{\text{ext}}^{\text{HDO}} = 3 \times 10^{-10}$ , résultat compatible avec les abondances obtenues sur la position IRAS16293 “B”. L'abondance externe est plus grande qu'avec nos données, du fait du plus grand flux de la transition fondamentale en direction de la composante A. Notons que dans leur analyse Stark et al. (2004) dérivent une abondance constante de HDO dans l'enveloppe de  $3 \times 10^{-10}$ , valeur cohérente avec notre conclusion. Par contre ils ne mettent pas en évidence le saut d'abondance dans les parties internes puisqu'ils ne disposent que de la transition fondamentale, qui ne peut pas contraindre à la fois les abondances interne et externe.

La Figure 6.5 présente les profils radiaux de l'émission des cinq transitions, déterminés dans le cas du modèle procurant le meilleur ajustement des observations. Il apparaît clairement que seule la transition fondamentale contraint la contribution de l'enveloppe externe, et que même pour cette transition, l'émission est dominée par les parties internes, expliquant la largeur de la raie observée.

### 6.3.2 Tests de validité

Pour vérifier la robustesse de l'analyse précédente, nous avons effectué plusieurs tests :

- La validité du saut d'abondance observé est testée en comparant le résultat à ceux d'un modèle avec abondance uniforme.
- La robustesse de la valeur de  $x_{\text{int}}^{\text{HDO}}$  indépendamment de toute absorption éventuelle d'avant-plan est ensuite testée.
- Nous testons l'influence de la valeur choisie pour la température d'évaporation.
- Enfin, nous cherchons à comprendre d'où provient l'émission de la transition fondamentale.

#### Validité du saut d'abondance ?

Nous avons simulé l'enveloppe avec une abondance uniforme de HDO ( $x_{\text{int}}^{\text{HDO}} = x_{\text{ext}}^{\text{HDO}}$ ). Dans ce cas, le meilleur ajustement est obtenu pour  $x_{\text{int}}^{\text{HDO}} = x_{\text{ext}}^{\text{HDO}} = 1,2 \times 10^{-9}$ , mais le  $\chi^2$  réduit est alors très mauvais (40 !). Le rapport observations/modèle est présenté dans le panneau b) de la Figure 6.6. Dans ce cas, le modèle échoue de deux ordres de grandeur pour expliquer les intensités des 4 transitions à haute énergie. La conclusion de cette analyse est qu'un saut d'abondance est requis pour reproduire convenablement l'émission des raies à haute énergie.

#### Robustesse de la valeur de $x_{\text{int}}^{\text{HDO}}$ ?

Pour tester l'influence de la valeur de l'abondance dans les parties externes sur la détermination de l'abondance interne, nous avons arbitrairement fixé l'abondance externe à une valeur un ordre de grandeur plus grand que la valeur déduite avec le meilleur ajustement, simulant ainsi par exemple une absorption extrême de la raie fondamentale par le nuage d'avant-plan. Nous

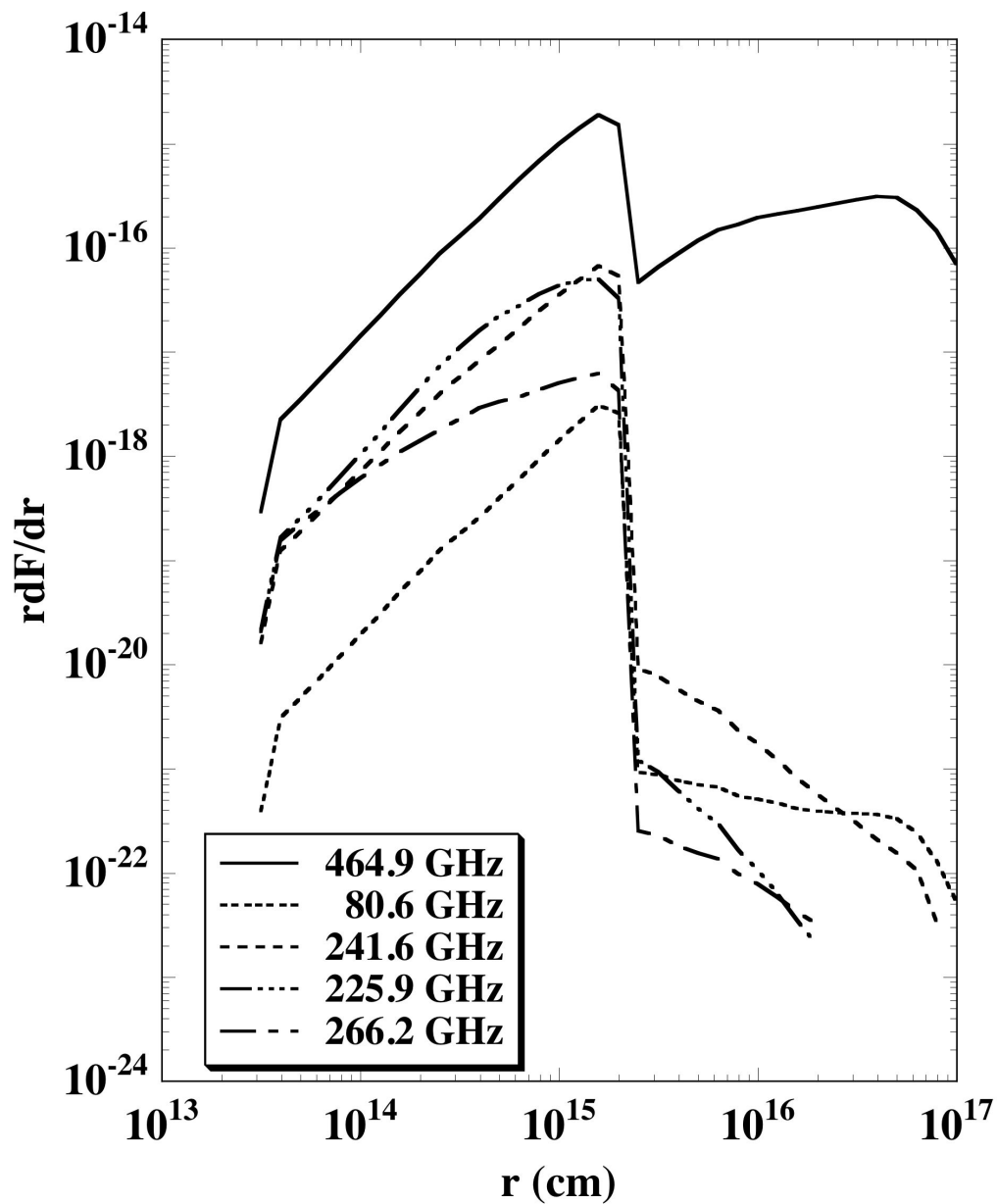


FIG. 6.5 – Profils radiaux de l'émission des 5 raies HDO obtenus dans le cas du meilleur ajustement ( $x_{\text{int}}^{\text{HDO}} = 1 \times 10^{-7}$  et  $x_{\text{ext}}^{\text{HDO}} = 1,5 \times 10^{-10}$ ).

avons ensuite contraint l'abondance interne en n'utilisant que les quatre transitions à haute énergie. Le meilleur ajustement est toujours obtenu pour la même valeur de  $x_{\text{int}}^{\text{HDO}}$ , ce qui nous permet de conclure que ce résultat est robuste indépendamment de toute absorption éventuelle d'avant-plan.

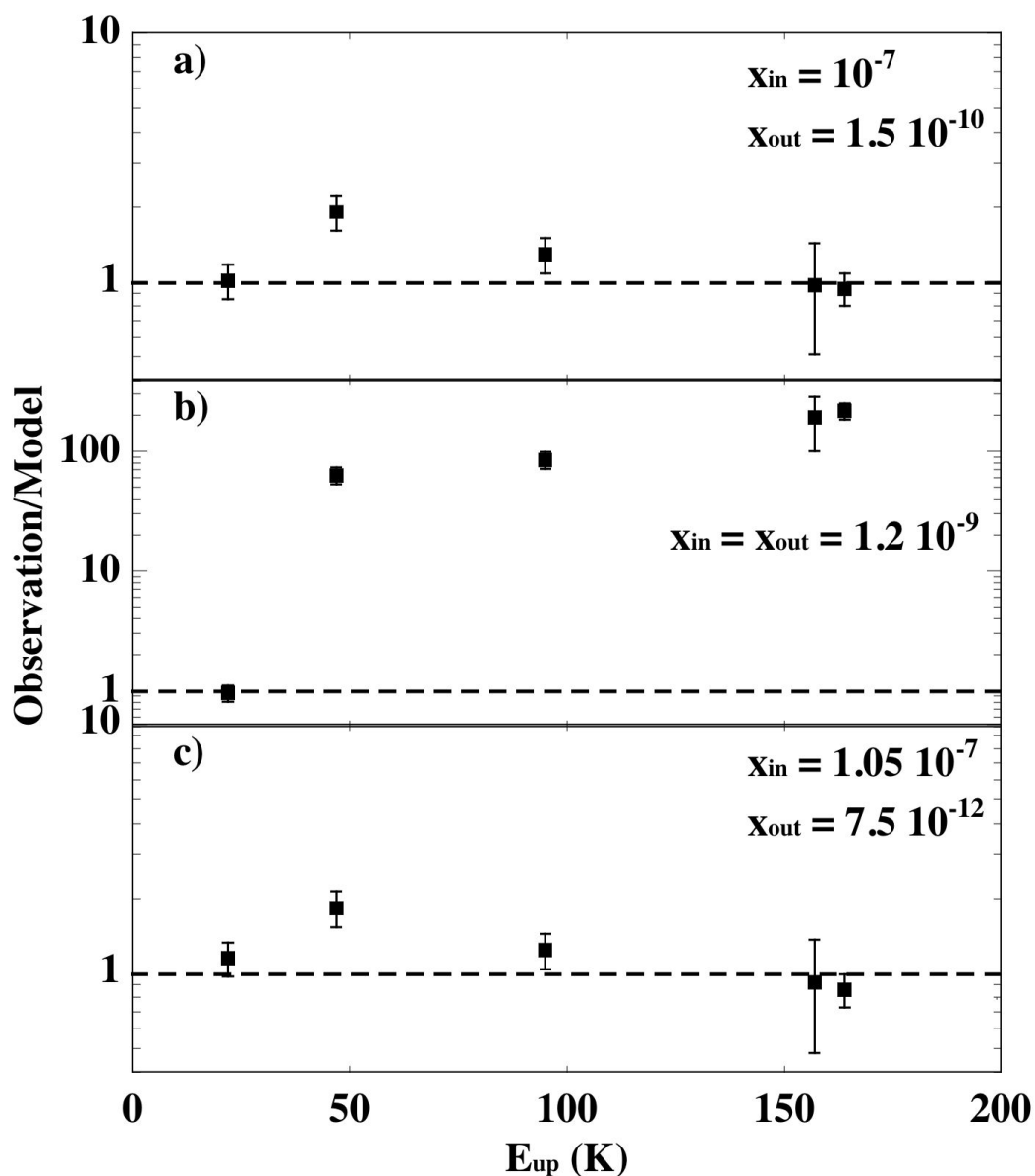


FIG. 6.6 – Rapport entre les observations sur IRAS16293 “B” et les prédictions du modèle dans les trois cas : a) modèle de saut standard, b) modèle avec abondance uniforme de HDO et c) cas où le rapport HDO/H<sub>2</sub>O dans la partie externe de l’enveloppe est égal au rapport cosmique (voir texte).

### Influence de la température d’évaporation ?

Nous avons testé la validité de l’hypothèse utilisée pour la température d’évaporation des glaces (100 K) dans le modèle standard, en simulant les données avec une température d’évaporation de 50 K. Le modèle, utilisé avec ce nouveau paramètre, ajuste mal les observations (le  $\chi^2$  réduit minimum est de 42, à comparer à 3,5 dans le cas du modèle standard). Cette analyse est

en bon accord avec les températures d'évaporation ( $\sim 100$  K) des glaces riches en eau mesurées par Sandford & Allamandola (1990).

### D'où provient la transition fondamentale ?

Comme nous l'avons remarqué précédemment, la raie à 464 GHz a une largeur d'environ  $6 \text{ km s}^{-1}$ , ce qui suggère qu'elle doit provenir de la partie interne chaude de l'enveloppe. Pour vérifier cette hypothèse, nous avons simulé les données en fixant l'abondance de HDO dans l'enveloppe externe à la valeur basse de  $x_{\text{ext}}^{\text{HDO}} = 7,5 \times 10^{-12}$ , c'est-à-dire avec un rapport HDO/H<sub>2</sub>O égal à l'abondance cosmique du deutérium ( $\text{D}/\text{H}_{\text{ISM}} = 1,5 \times 10^{-5}$ , Linsky 2003). Dans ce cas, le meilleur ajustement correspond à la valeur  $x_{\text{int}}^{\text{HDO}} = 1,05 \times 10^{-7}$ , la partie interne de l'enveloppe contribue majoritairement à l'émission de la raie, et le modèle sous-estime le flux observé de seulement 15%. Nous en déduisons que la largeur importante de la raie fondamentale de HDO est en accord avec notre modèle, puisqu'elle est émise principalement dans la partie interne de l'enveloppe.

En guise de synthèse, la Figure 6.6 présente les rapports entre observations et prédictions du modèle dans les trois cas suivants : a) modèle standard avec saut d'abondance, b) modèle avec une abondance constante le long de l'enveloppe et c) modèle où aucun enrichissement en deutérium n'est permis dans la partie externe de l'enveloppe (*i.e.* le rapport HDO/H<sub>2</sub>O est fixé à la valeur du rapport D/H cosmique).

Tous ces tests du modèle permettent d'affirmer que les observations sont en accord avec les abondances de HDO  $x_{\text{int}}^{\text{HDO}} = 1 \times 10^{-7}$  et  $x_{\text{ext}}^{\text{HDO}} \leq 1 \times 10^{-9}$ . En comparant ces valeurs aux abondances de l'eau déterminées par Ceccarelli et al. (1996)  $x_{\text{int}}^{\text{H}_2\text{O}} = 3 \times 10^{-6}$  et  $x_{\text{ext}}^{\text{H}_2\text{O}} = 5 \times 10^{-7}$ , nous déduisons les fractionnements suivants :  $f_{\text{int}} = 3\%$  et  $f_{\text{ext}} \leq 0,2\%$  ( $3\sigma$ ).

## 6.4 Discussion

Notre étude montre clairement que l'abondance de HDO présente un saut entre sa valeur dans les parties internes chaudes, où les glaces s'évaporent des grains, et les régions externes froides de l'enveloppe de la protoétoile. Plus marquant peut-être est le résultat que le fractionnement de l'eau varie aussi entre ces deux régions. Ceci n'est pas en accord avec les résultats de Stark et al. (2004), qui déduisent de leur analyse une distribution homogène de HDO sur toute l'enveloppe et attribuent l'enrichissement en deutérium de l'eau à l'évaporation des manteaux des grains dans l'outflow. Ce désaccord provient du fait que ces auteurs n'ont analysé que la transition fondamentale à 464 GHz, et ne peuvent pas ainsi contraindre l'abondance dans les parties internes de l'enveloppe.

De plus, le fractionnement de l'eau dans les zones internes de l'enveloppe est environ un ordre de grandeur plus faible que celui du méthanol (37%, Parise et al. 2002b, 2004a, voir chapitre 3) et du formaldéhyde (15%, Loinard et al. 2000). Ce résultat est en accord avec la non-détection de

HDO en phase solide en direction de protoétoiles de faible masse présentant une forte deutération du formaldéhyde (Parise et al. 2003c, voir chapitre 4). La présente analyse confirme que l'eau est en effet moins deutérée que le formaldéhyde et le méthanol dans le cœur chaud des protoétoiles de faible masse.

Le fractionnement dérivé pour l'eau dans l'enveloppe interne d'IRAS16293 confirme que les protoétoiles de faible masse présentent une deutération plus forte que les protoétoiles massives. Cette idée était déjà indiquée par les observations de formaldéhyde et de méthanol. Le fractionnement du D<sub>2</sub>CO observé dans le Cœur Chaud d'Orion par Turner (1990) est en effet environ 25 fois plus faible que celui observé dans IRAS16293 (Ceccarelli et al. 1998) et dans un échantillon de protoétoiles de faible masse (Loinard et al. 2002). De même CH<sub>2</sub>DOH a un fractionnement de 0,04 dans Orion (Jacq et al. 1993) tandis que le fractionnement dans IRAS16293 est de 0,4 (Parise et al. 2002b, 2004a, chapitre 3). La présente valeur du fractionnement de l'eau dans le Cœur Chaud d'IRAS16293 (3%) est supérieure de deux ordres de grandeur au fractionnement dérivé dans la région de formation d'étoiles massives W3 (Helmich et al. 1996) et à celui déterminé dans les Cœurs Chauds en direction de SgB2 (Comito et al. 2003).

Le saut de fractionnement de plus d'un ordre de grandeur entre l'enveloppe externe et l'enveloppe interne où les glaces sont évaporées suggère que les processus de fractionnement sont substantiellement différents dans les deux régions.

Dans l'enveloppe externe, où la température n'est pas suffisante pour évaporer efficacement les molécules stockées dans les manteaux des grains, le rapport HDO/H<sub>2</sub>O obtenu doit refléter les processus de fractionnement en phase gazeuse à l'époque actuelle. Dans le scénario de chimie en phase gazeuse, la deutération est initiée par réactions avec H<sub>2</sub>D<sup>+</sup> (et ses isotopes deutérés). Ceci peut conduire à un fractionnement de l'eau de l'ordre de quelques pour cent quand la température est très basse ( $T \sim 10$  K, Roberts & Millar 2000a; Roberts et al. 2004), du fait de l'endothermicité de la réaction  $\text{H}_2\text{D}^+ + \text{H}_2 \rightarrow \text{H}_3^+ + \text{HD}$ , favorisant le rapport H<sub>2</sub>D<sup>+</sup>/H<sub>3</sub><sup>+</sup> par rapport à HD/H<sub>2</sub>. Dans les parties externes de l'enveloppe, les températures varient entre 10 K et 100 K, et le fractionnement mesuré est alors caractéristique d'un gaz plus chaud que 10 K, pour lequel le fractionnement chute très vite par rapport à un gaz à 10 K (cf. la Figure 2b de Roberts & Millar 2000a). Le fractionnement que nous dérivons des observations ( $\leq 0,2\%$ ) est donc en accord avec les modèles de chimie en phase gazeuse.

Par contre, dans les parties internes de l'enveloppe, le fractionnement est certainement un fossile du processus de deutération en action lors d'une période antérieure froide dans des conditions de déplétion de CO extrêmes, telles qu'elles sont observées dans certains cœurs prestellaires (Caselli et al. 1999; Bacmann et al. 2002; Bacmann et al. 2003; Crapsi et al. 2004). Ce fractionnement originel aurait ensuite été conservé dans le manteau des grains jusqu'à évaporation des molécules par le chauffage de la protoétoile.

Dans l'enveloppe interne, la différence entre le fractionnement de l'eau d'une part et le



fractionnement du formaldéhyde et du méthanol d'autre part est une contrainte forte pour les modèles de chimie, comme il a déjà été discuté dans le chapitre 5. Du fait de la faible efficacité de sa production en phase gazeuse et de sa grande abondance dans les manteaux des grains, on pense que le méthanol doit être formé sur les grains par chimie active à leur surface, par hydrogénations successives du CO (Tielens 1983; Charnley et al. 1992; Charnley et al. 1997). Si l'eau est aussi produite par chimie sur les grains, son fractionnement plus faible indique que soit le deutérium est incorporé préférentiellement dans la formation du formaldéhyde et du méthanol (hydrogénations/deutérations successives de CO) plutôt que dans la formation de l'eau, soit que l'eau n'est pas formée simultanément avec le méthanol. Une telle ségrégation des glaces est en effet indiquée par les observations de CO solide en direction d'un échantillon de protoétoiles de faible masse, montrant que 60% à 90% du CO solide est sous une forme pure (*i.e.* non mélangée à de l'eau, Tielens et al. 1991; Boogert et al. 2002b; Pontoppidan et al. 2003). De même, les observations de glaces de CO<sub>2</sub> apportent une preuve de la présence de composantes de glaces différentes sur la même ligne de visée, bien que ces derniers résultats soient généralement attribués à la ségrégation de mélanges de glaces H<sub>2</sub>O/CH<sub>3</sub>OH/CO<sub>2</sub> sous le chauffage de la nouvelle protoétoile (Ehrenfreund et al. 1998, 1999; Gerakines et al. 2000; Boogert et al. 2000).

Une des possibilités discutées dans le chapitre 5 peut être rejetée grâce à ces nouvelles observations. En effet, la possibilité que l'eau soit formée lors d'un choc durant la phase de nuage moléculaire puis condensée sur les grains (comme suggéré par Bergin et al. 1999) peut être écartée puisque dans cette hypothèse, le fractionnement devrait être inférieur à quelques 10<sup>-3</sup> (caractéristique de la haute température du choc), c'est-à-dire au moins 10 fois plus faible que la valeur déterminée dans l'enveloppe interne par notre étude.

Une autre possibilité pour expliquer l'abondance de HDO dans l'enveloppe interne est que l'eau est produite en phase gazeuse à basse température pendant la phase de cœur prestellaire, avant d'être stockée sur les grains. Les prédictions des modèles de chimie en phase gazeuse de Roberts & Millar (2000a) semblent être en accord avec ce scénario. En effet, le fractionnement de l'eau peut atteindre quelques pour cent dans un gaz à 10 K et de densité  $n = 5 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$ , même sans considérer de déplétion de CO (voir la Figure 3 de Roberts & Millar 2000a). L'abondance attendue de l'eau est alors de l'ordre de 10<sup>-6</sup>, c'est-à-dire seulement un facteur 3 plus faible que l'abondance  $x_{\text{int}}^{\text{H}_2\text{O}}$  dérivée par Ceccarelli et al. (2000a). Les observations de H<sub>2</sub>O ainsi que celles de HDO présentées ici pourraient donc bien être consistantes avec la formation de l'eau dans la phase gazeuse, les grains ne jouant alors qu'un rôle passif, en maintenant le fractionnement à sa valeur « froide » pendant le stockage des molécules.

Bien qu'un tel modèle soit consistant avec nos observations en phase gazeuse de H<sub>2</sub>O et de HDO (à la fois avec les abondances absolues et le fractionnement), les observations des glaces déduisent toujours une abondance de H<sub>2</sub>O de 10<sup>-4</sup> en direction des protoétoiles massives (Gibb et al. 2004), et de 5 × 10<sup>-5</sup> dans les protoétoiles de faible masse (Boogert et al. 2004), soit au

moins dix fois plus grand que l'abondance observée en phase gazeuse dans le Cœur Chaud d'IRAS16293. De telles abondances de glaces d'eau sont généralement interprétées comme un signe de chimie active sur les grains (comme par exemple l'hydrogénation de l'oxygène à la surface des grains, Jones et al. 1990; Tielens & Hagen 1982). Cette incohérence entre l'abondance d'eau gazeuse dans le Cœur Chaud d'IRAS16293 et l'abondance des glaces d'eau observée dans des environnements similaires pourrait refléter une histoire particulière de cette source, mais cette solution ne semble pas très satisfaisante puisque IRAS16293 apparaît sur bien d'autres points comme une protoétoile typique, partageant beaucoup de similitudes avec d'autres protoétoiles de Classe 0 (e.g. Ceccarelli et al. 2000b; Maret et al. 2004, ou encore le chapitre 4 de cette thèse). Dans ce sens, tous les modèles – y compris les modèles de chimie sur les grains – doivent faire face à ce même problème de la différence d'abondance de vapeur d'eau dans le Cœur Chaud et celle observée dans les glaces. Si la composition du gaz du Cœur Chaud reflète l'évaporation des glaces, on s'attendrait à une abondance de l'eau plus importante dans le gaz.

## 6.5 Conclusion

Nous avons détecté cinq raies de HDO dans la protoétoile IRAS16293–2422 avec les télescopes de l'IRAM et du JCMT. Deux transitions (80,6 et 241,6 GHz) ont été cherchées mais pas détectées en direction de l'outflow.

Nous avons modélisé l'émission de HDO avec le modèle d'enveloppe en effondrement CHT96 et nous avons dérivé l'abondance de HDO dans les parties interne et externe de l'enveloppe :  $x_{\text{int}}^{\text{HDO}} = 10^{-7}$  et  $x_{\text{ext}}^{\text{HDO}} = 1,5 \times 10^{-10}$ , résultat confirmant l'enrichissement en HDO dû à l'évaporation des glaces dans la partie interne de l'enveloppe.

Le fractionnement subit aussi un saut avec  $f_{\text{int}} = 3\%$  et  $f_{\text{ext}} \leq 0,2\%$  dans les régions internes et externes respectivement. Ces résultats sont en accord avec le fait que l'eau se forme en phase gazeuse pendant la période de cœur prestellaire, et que les molécules sont stockées sur les grains, ce qui a pour effet de « geler » la valeur du fractionnement. Cependant, la question de la différence entre l'abondance de l'eau dans le gaz du Cœur Chaud et la valeur typique de l'abondance de l'eau observée dans les glaces, au moins 10 fois plus grande, reste ouverte.



## Chapitre 7

# Emission théorique de HDO - Implications pour Herschel-HIFI

### Sommaire

---

<b>7.1</b>	<b>Introduction</b>	<b>131</b>
<b>7.2</b>	<b>Description du modèle</b>	<b>132</b>
<b>7.3</b>	<b>Résultats</b>	<b>134</b>
7.3.1	Le cas d'IRAS16293–2422	134
7.3.2	Contraindre $x_{\text{int}}$ et $x_{\text{ext}}$ à partir des observations	140
<b>7.4</b>	<b>Conclusion</b>	<b>143</b>

---

### 7.1 Introduction

L'eau est une molécule essentielle dans l'étude de la formation des étoiles à plusieurs titres. C'est en effet un des principaux refroidisseurs du gaz, le composant principal du manteau de glace des grains, et dans certaines conditions le principal réservoir d'oxygène.

Cependant, l'eau oppose encore beaucoup de mystères aux astrophysiciens. Son origine, dans les régions de formation d'étoiles, n'est pas encore tout à fait comprise. En particulier, la faible limite supérieure sur l'abondance de l'eau dans la région de formation d'étoiles  $\rho$  Oph (Snell et al. 2000) est difficile à expliquer sans invoquer une déplétion du CO très forte (Roberts & Herbst 2002), en désaccord avec les observations. De plus, nous avons vu dans le chapitre précédent que l'abondance de l'eau dans le gaz du cœur chaud d'IRAS 16293 est au moins 10 fois plus faible que la valeur à laquelle on s'attendrait si elle provenait de l'évaporation des manteaux des grains. Une partie de ces paradoxes provient certainement du fait que l'émission de l'eau est difficilement observable avec une bonne résolution spatiale. En effet, les raies rotationnelles de  $\text{H}_2\text{O}$  étant absorbées par la vapeur d'eau présente dans l'atmosphère terrestre, leur observation dans les sources astronomiques requiert l'utilisation d'instruments embarqués à bord de télescopes

spatiaux tels que les satellites ISO, SWAS ou ODIN (dont les tailles de lobe sont supérieures à 1'), ou le futur satellite Herschel dont le lancement est prévu en 2007.

Cependant, certaines transitions rotationnelles de l'isotope deutéré HDO sont observables depuis le sol et peuvent être utilisées, sous certaines conditions, pour sonder le contenu en eau des sources astrophysiques. De plus, HDO est une molécule intéressante en elle-même car, d'une part, elle donne des informations sur les processus de formation de l'eau, et d'autre part, sur les conditions physiques présentes et passées des régions observées. En effet, dans le cas de la formation des protoétoiles de faible masse, des manteaux de glace sont certainement formés dans la phase antérieure à l'effondrement, soit par accréation de molécules du gaz, soit par chimie active sur les grains. Les molécules sont ensuite libérées dans le gaz dans les régions chauffées par la protoétoile. Dans ce cas, l'abondance de HDO est un fossile des processus intervenant dans la phase pré-effondrement.

Deux classes de molécules apportent des preuves du rôle joué par les grains dans le stockage des molécules et même peut-être dans leur formation :

- i) Les molécules hydrogénées telles que le formaldéhyde et le méthanol (e.g. Maret et al. 2004), et des molécules plus complexes, observées dans les Cœurs Chauds (Cazaux et al. 2003; Bottinelli et al. 2004a). Ces molécules sont observées en grande abondance dans les régions internes de l'enveloppe des protoétoiles, où la température est supérieure à la température d'évaporation, et en plus faible abondance dans les régions externes froides.
- ii) Les molécules deutérées, observées en très grande abondance, ne peuvent se former que pendant une phase dense et froide, déplétée en CO (Roberts & Millar 2000b,a; Roberts et al. 2003), la phase pré-effondrement. C'est ainsi le cas par exemple du méthanol et du formaldéhyde deutérés présentés aux chapitres 3 et 4.

HDO appartient à la deuxième classe de molécules témoins de la phase pré-effondrement passée. Et elle est apparemment exceptionnelle dans le sens où elle présente une deutération moins forte que les autres molécules (*cf.* chapitres précédents).

Il est donc intéressant de modéliser l'émission de HDO, pour comprendre quelles transitions sont mieux à même de contraindre son abondance dans les parties internes et externes de l'enveloppe. Cette modélisation est d'un intérêt tout particulier dans la perspective du lancement du satellite Herschel, pour déterminer si l'utilisation de l'instrument HIFI est indispensable dans l'étude de HDO, ou si les télescopes au sol sont suffisants.

## 7.2 Description du modèle

Le modèle utilisé pour calculer l'émission de HDO dans les enveloppes en effondrement est une adaptation du modèle développé par Ceccarelli et al. (1996, CHT96 dans la suite de ce chapitre) pour prédire les transitions de OI, CO et H<sub>2</sub>O, ultérieurement modifié pour calculer l'émission de H<sub>2</sub>CO (Ceccarelli et al. 2003). Nous décrivons brièvement dans cette partie les hypothèses du modèle.

La structure en densité de l'enveloppe et la dynamique suit le scénario d'effondrement « inside-out » (Shu 1977) pour une sphère initialement en équilibre isothermique subissant un effondrement. Dans la partie externe de l'enveloppe, non encore affectée par l'effondrement, la distribution de la densité de l'hydrogène moléculaire  $n_{\text{H}_2}(r)$  est donnée par :

$$n_{\text{H}_2}(r) = \frac{a^2}{2\pi\mu m_{\text{H}}G} r^{-2} = 2.8 \times 10^8 \left( \frac{a}{0.35 \text{ kms}^{-1}} \right)^2 r_{100\text{UA}}^{-2} \text{ cm}^{-3} \quad (7.1)$$

avec  $a$  la vitesse du son,  $m_{\text{H}}$  la masse de l'hydrogène,  $\mu$  la masse moléculaire moyenne en unités de masse atomique (égale à 2,8),  $r_{100\text{UA}}$  la distance au centre en unités de 100 unités astronomiques, et  $G$  la constante gravitationnelle.

Dans les régions internes en effondrement, la densité est décrite par la solution de chute libre :

$$n_{\text{H}_2}(r) = \frac{1}{4\pi\mu m_{\text{H}}} \left( \frac{\dot{M}^2}{2GM_{\star}} \right)^{\frac{1}{2}} r^{-\frac{3}{2}} = 1.2 \cdot 10^7 \left( \frac{\dot{M}_{-5}^2}{M_{\star} r_{100\text{UA}}^3} \right)^{\frac{1}{2}} \text{ cm}^{-3} . \quad (7.2)$$

La vitesse de chute libre est donnée par :

$$v(r) = \left( \frac{2GM_{\star}}{r} \right)^{\frac{1}{2}} = 4.2 \left( \frac{M_{\star 1}}{r_{100\text{UA}}} \right)^{\frac{1}{2}} \text{ km s}^{-1} , \quad (7.3)$$

avec  $\dot{M}$  le taux d'accrétion en masse, relié à la vitesse du son par :

$$\dot{M} = 0.975 \frac{a^3}{G} = 10^{-5} \left( \frac{a}{0.35 \text{ km s}^{-1}} \right)^3 M_{\odot} \text{ an}^{-1} . \quad (7.4)$$

où  $\dot{M}_{-5}$  est  $\dot{M}$  en unités de  $10^{-5} M_{\odot} \text{ an}^{-1}$ , et  $M_{\star 1}$  est la masse de l'objet central  $M_{\star}$  en unités de  $1 M_{\odot}$ . La symétrie sphérique est conservée dans ce modèle tout au long de l'effondrement. Dans ce sens, le modèle ne donne des résultats corrects que pour la partie de l'enveloppe pour laquelle la symétrie sphérique est une bonne approximation, *i.e.* probablement pour des rayons de plus de quelques dizaines d'unités astronomiques (Ceccarelli et al. 2000a). A plus petite échelle, on s'attend à ce que de grandes déviations par rapport à la symétrie sphérique interviennent du fait de la présence de disques.

La température du gaz est calculée de manière auto-consistante en égalant les mécanismes de chauffage et de refroidissement en chaque point de l'enveloppe. De plus amples détails sur ce calcul peuvent être trouvés dans CHT96. Il est important de remarquer que le refroidissement dépend du profil d'abondance dans l'enveloppe de l'oxygène atomique, du CO et de H<sub>2</sub>O, les refroidisseurs du gaz les plus efficaces. Ces abondances sont donc des paramètres cachés du modèle. La température du gaz ainsi calculée suit de près celle de la poussière le long de l'enveloppe, sauf dans la zone où les manteaux s'évaporent. En effet, du fait de l'injection de grandes quantités d'eau dans la phase gazeuse, augmentant par conséquent le refroidissement du gaz, les températures du gaz et des grains se découplent.

Enfin, le profil d'abondance de HDO est approximé par une fonction en marche d'escalier. Dans l'enveloppe externe, l'abondance de HDO,  $x_{\text{ext}}$ , est relativement faible. Dans les régions internes de l'enveloppe, où la température des grains atteint la valeur d'évaporation  $T_{\text{evap}}$ , l'abondance de HDO,  $x_{\text{int}}$ , est plus élevée. Ces trois derniers paramètres,  $x_{\text{ext}}$ ,  $x_{\text{int}}$  et  $T_{\text{evap}}$ , sont les trois paramètres libres du modèle.

Les flux des raies ont été calculés pour une source à 160 parsecs. Le modèle calcule la population des 34 premiers niveaux de HDO. Les données moléculaires proviennent du catalogue du JPL (<http://spec.jpl.nasa.gov/home.html>), et les coefficients de collision sont de Green (1989), pour des collisions He-HDO entre 50 et 500 K. Toutes les abondances sont exprimées ici relativement à  $\text{H}_2$ .

## 7.3 Résultats

Nous présentons d'abord le spectre d'émission de HDO pour le cas d'étoile d'IRAS16293–2422, pour illustrer les caractéristiques générales de cette émission, ainsi que les différents télescopes permettant son observation. Nous étudions ensuite les variations de ce spectre d'émission en fonction des deux paramètres : abondance de HDO dans l'enveloppe externe ( $x_{\text{ext}}$ ) et abondance dans l'enveloppe interne ( $x_{\text{int}}$ ).

### 7.3.1 Le cas d'IRAS16293–2422

Les paramètres adoptés pour cet exemple sont répertoriés dans la Table 7.1. Les valeurs des paramètres cachés sont les mêmes que celles utilisées dans l'exemple présenté dans Ceccarelli et al. (2003) pour discuter le spectre d'émission de  $\text{H}_2\text{CO}$ . Elles ont été dérivées à partir de plusieurs observations d'IRAS16293–2422. Les valeurs de  $x_{\text{int}}$ ,  $x_{\text{ext}}$  et  $T_{\text{evap}}$  proviennent de l'analyse des données HDO présentée au chapitre 6 (Parise et al. 2004b).

Dans la suite, tous les flux sont donnés en  $\text{erg s}^{-1} \text{cm}^{-2}$  et représentent l'émission intégrée sur toute l'enveloppe. Bien que la conversion en  $\text{K km s}^{-1}$  eût été plus pratique pour les observateurs, celle-ci dépend du lobe du télescope utilisé pour l'observation, et en particulier sa taille par rapport à l'étendue de l'émission. Nous donnerons la valeur du signal en  $\text{K km s}^{-1}$  pour quelques transitions observables avec les télescopes au sol pour faciliter la comparaison avec les observations.

### Les différents instruments d'observation

Nous répertorions dans ce paragraphe certains instruments qui fonctionnent (ou fonctionneront dans un futur proche) dans les bandes de fréquence intéressantes pour l'émission de HDO.

- Télescopes au sol

TAB. 7.1 – Valeurs des paramètres adoptées pour le test. La partie supérieure présente les valeurs adoptées pour les trois paramètres libres du modèle (abondances de HDO dans les parties interne et externe de l’enveloppe et température d’évaporation), tandis que la partie inférieure donne les valeurs des paramètres cachés.

Paramètre	Valeur
$x_{\text{int}}$	$1 \times 10^{-7}$
$x_{\text{ext}}$	$1.5 \times 10^{-10}$
$T_{\text{evap}}$	100 K
$M_{\star}$	$0.8 M_{\odot}$
$\dot{M}$	$3 \times 10^{-5} M_{\odot} \text{ an}^{-1}$
$x(\text{CO})$	$1 \times 10^{-4}$
$x(\text{O})$	$2.5 \times 10^{-4}$
$x_{\text{ext}}(\text{H}_2\text{O})$	$5 \times 10^{-7}$
$x_{\text{int}}(\text{H}_2\text{O})$	$3 \times 10^{-6}$

- IRAM (Institut de Radioastronomie Millimétrique, Espagne) : le télescope de 30 m de l’IRAM fonctionne entre 80 et 281 GHz.
- JCMT (James Clerk Maxwell Telescope, Hawaii) : ce télescope de 15 m observe les bandes de fréquences à 230, 345, 450 et 650 GHz. L’instrument à 800 GHz n’est plus disponible, mais cette bande est observable sur APEX.
- CSO (Caltech Submillimeter Observatory, Hawaii) : cette antenne de 10 m observe à peu près dans les mêmes bandes de fréquence que le JCMT.
- APEX (Atacama Path EXperiment, Chili) : les instruments sont en cours de commissioning sur ce télescope. Les bandes à 230 et 345 GHz devraient être disponibles en janvier 2005, et les bandes à 650 et 850 GHz au cours du printemps 2005.

- HSO (Herschel Space Observatory)

Ce télescope de 3,5 m, embarqué dans un satellite dont le lancement est prévu en 2007, sera équipé de l’instrument HIFI (Heterodyne Instrument for the Far Infrared) qui permettra l’observation des bandes 480-1250 et 1410-1910 GHz.

- SOFIA (Stratospheric Observatory For Infrared Astronomy)

Ce télescope de 2,5 m, embarqué dans un Boeing 747, sera équipé de plusieurs instruments intéressants pour l’observation de HDO. En particulier, CASIMIR (CALtech Submillimeter Interstellar Medium Investigations Receiver), permettra l’observation dans la bande 500-2100 GHz et GREAT (German REceiver for Astronomy at Terahertz frequencies) celle dans la bande 1,5-5 THz. Pour toutes les bandes de fréquences couvertes aussi par HSO/HIFI, il conviendra de privilégier ce dernier, puisque son télescope est plus large, et qu’il est affranchi de toute atmosphère résiduelle.



### Le spectre d'émission de HDO

HDO est une toupie asymétrique plane. Son dipôle se trouve le long de ses axes a et b (*cf.* chapitre 2), avec des moments dipolaires  $\mu_a = 0,657$  et  $\mu_b = 1,732$  Debye (Clough et al. 1973), et les transitions permises sont donc les transitions de types a et b :

$$\Delta K_a = 0 \quad \text{et} \quad \Delta K_c = \pm 1$$

ou

$$\Delta K_a = \pm 1 \quad \text{et} \quad \Delta K_c = \pm 1$$

Les premiers niveaux d'énergie de HDO sont représentés sur la Figure 7.1.

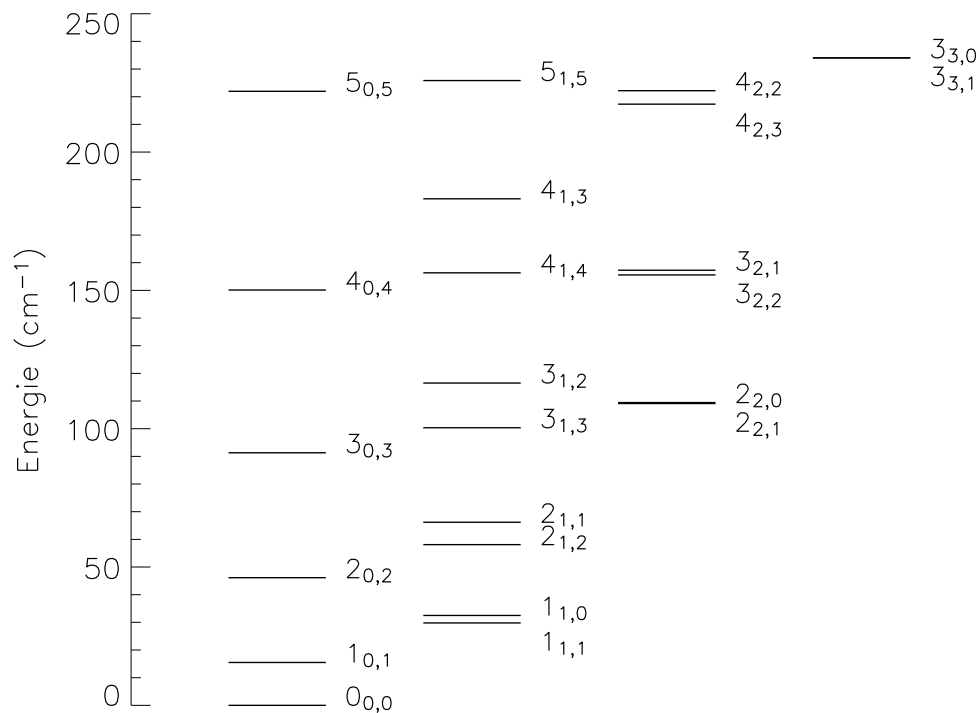


FIG. 7.1 – Premiers niveaux d'énergie de la molécule HDO.

Les Tables 7.3, 7.4 et 7.5 (en annexe de ce chapitre) répertorient les flux prédits pour les transitions de HDO observables avec les télescopes actuels ou futurs présentés au paragraphe précédent.

La Figure 7.2 montre les transitions de HDO respectivement observables depuis le sol, avec HSO/HIFI et avec SOFIA.

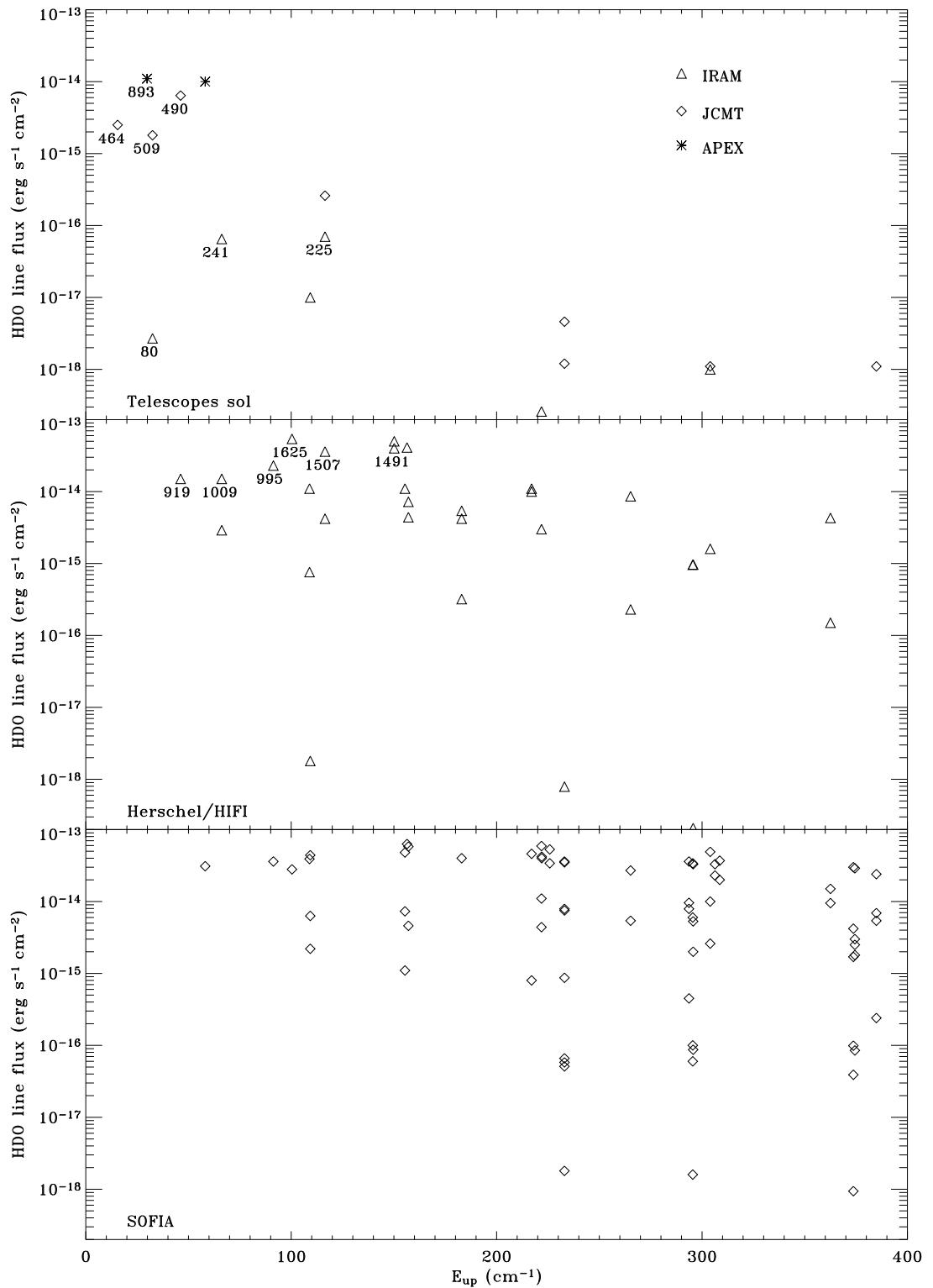


FIG. 7.2 – Flux prédits pour les transitions de HDO par le modèle dans le cas d’IRAS 16293, en fonction de l’énergie du niveau haut. Le graphe du haut fait apparaître les transitions observables avec les télescopes au sol, celui du milieu les transitions observables avec Herschel/HIFI, et le graphe du bas représente celles observables seulement avec SOFIA. Les fréquences des transitions qui vont être étudiées plus en détails sont indiquées en GHz.

Dans la suite de ce chapitre, nous étudions plus en détail la comparaison entre les apports des télescopes au sol et de Herschel/HIFI pour l’observation des raies de HDO. En particulier, nous nous concentrons sur l’étude de quelques transitions, mises en évidence sur la Figure 7.2.

La Figure 7.3 montre la contribution à l’émission des différentes coquilles de l’enveloppe pour plusieurs transitions d’énergies différentes observables avec des télescopes au sol (figure du haut) et avec l’instrument Herschel-HIFI (figure du bas). Notons que la transition à 893 GHz a été incluse dans les transitions observables depuis le sol puisqu’elle sera observable d’ici peu avec le télescope APEX (Atacama Pathfinder EXperiment, Chili). Certaines de ces transitions ont été observées en direction d’IRAS16293–2422 avec le JCMT et le télescope de l’IRAM (80, 225, 241 et 464 GHz, *cf.* chapitre 6).

Il apparaît sur la Figure 7.3 que la contribution relative des régions internes ( $r \leq 150$  UA) au flux de la raie augmente quand l’énergie du niveau haut de la transition augmente. Alors que les émissions de toutes les raies sont dominées par l’émission dans la région interne (où l’abondance de HDO est 3 ordres de grandeur plus forte que dans la partie externe), les transitions dont l’énergie est basse présentent aussi une contribution non négligeable provenant des régions externes de l’enveloppe.

### Observation de HDO avec les télescopes au sol

Transition	Fréquence (GHz)	Télescope	Coef. conversion $\text{erg s}^{-1} \text{cm}^{-2}$ (= 1 K km s <sup>-1</sup> )	IRAS16293–2422		
				(K km s <sup>-1</sup> ) Conversion <sup>a</sup>	(K km s <sup>-1</sup> ) Convolution <sup>b</sup>	(K km s <sup>-1</sup> ) Obs <sup>c</sup>
1 <sub>1,0</sub> – 1 <sub>1,1</sub>	80.578	IRAM	$1.4 \times 10^{-17}$	0.19	0.21	0.40
3 <sub>1,2</sub> – 2 <sub>2,1</sub>	225.897	IRAM	$4.1 \times 10^{-17}$	1.7	1.8	1.7
2 <sub>1,1</sub> – 2 <sub>1,2</sub>	241.561	IRAM	$4.4 \times 10^{-17}$	1.5	1.6	2.0
2 <sub>2,0</sub> – 3 <sub>1,3</sub>	266.161	IRAM	$4.9 \times 10^{-17}$	0.20	0.22	0.21
1 <sub>0,1</sub> – 0 <sub>0,0</sub>	464.924	JCMT	$4.0 \times 10^{-16}$	6.3	5.4	5.5

TAB. 7.2 – Facteurs de conversion de l’intensité de la raie en  $\text{erg s}^{-1} \text{cm}^{-2}$  en température de lobe principal intégrée ( $T_{\text{mb}}\Delta v$ ) aux télescopes de l’IRAM ou du JCMT selon la fréquence pour les cinq transitions observées en direction d’IRAS16293–2422 (*cf.* chapitre 6). <sup>a</sup>Flux prédit par le modèle en effectuant une conversion simple en K km s<sup>-1</sup>, à l’aide du coefficient de conversion. <sup>b</sup> Flux prédit par le modèle en effectuant la convolution adéquate du signal avec le lobe du télescope. <sup>c</sup>Flux observé en direction d’IRAS 16293 (*cf.* chapitre 6).

Pour faciliter la comparaison entre les observations et le modèle, nous donnons dans la table 7.2 les facteurs de conversion du flux en  $\text{erg s}^{-1} \text{cm}^{-2}$  en température de lobe principal intégré ( $T_{\text{mb}}\Delta v$ ) suivant le télescope utilisé (IRAM ou JCMT) pour plusieurs transitions. Notons que ces facteurs ne sont valables que si la source est ponctuelle dans le lobe d’observation. Quand la source est étendue, il faut en toute rigueur effectuer une convolution du signal émis par toute l’enveloppe avec le lobe du télescope. La comparaison entre les deux résultats est donnée dans la Table 7.2. Comme attendu, il apparaît que dans le cas des transitions dont l’émission est dominée par les régions internes de l’enveloppe, la conversion simple donne un accord raisonnable avec la

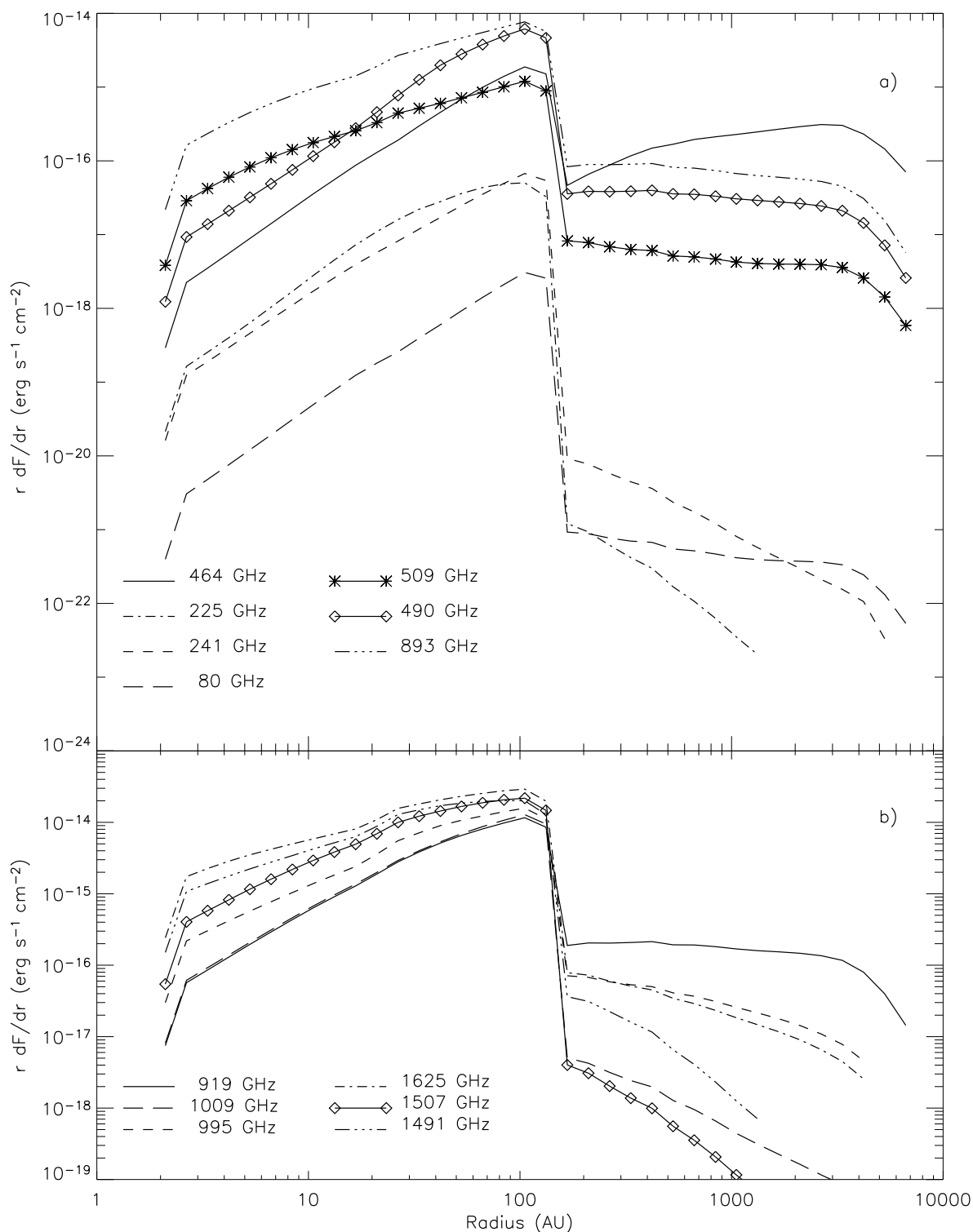


FIG. 7.3 – Profil de l'émission en fonction du rayon pour plusieurs transitions observables avec des télescopes au sol (incluant la raie à 893 GHz prochainement observable avec APEX, graphe du haut), et avec l'instrument HIFI à bord d'Herschel (graphe du bas).

méthode adéquate de convolution. En effet, l'enveloppe interne, de taille environ  $2''$ , peut-être considérée comme ponctuelle devant la taille des lobes d'observation. Par contre, dans le cas de la transition fondamentale, la méthode de conversion simple donne de moins bons résultats parce qu'une partie de l'émission provient de l'enveloppe externe étendue. Néanmoins l'erreur n'est que de 15% puisque l'abondance de HDO dans l'enveloppe externe est trois ordres de grandeur plus petite que dans les parties internes. Une attention toute particulière devra donc être donnée dans le cas des raies à faible énergie pour lesquelles l'émission dans l'enveloppe froide n'est pas négligeable, ce qui se produit d'autant plus que l'abondance de HDO dans l'enveloppe froide devient non négligeable devant l'abondance interne.

### 7.3.2 Contraindre $x_{\text{int}}$ et $x_{\text{ext}}$ à partir des observations

Une question importante est de savoir quelles transitions sont les plus aptes à contraindre les abondances de l'eau deutérée dans les parties interne et externe de l'enveloppe. Cette étude est particulièrement intéressante pour comprendre si les observations Herschel-HIFI seront absolument indispensables pour cette tâche. En effet, de par sa taille réduite par rapport aux télescopes au sol, le télescope d'Herschel aura une moins bonne résolution spatiale que le grand radiotélescope de l'IRAM ou même le JCMT, le CSO ou APEX.

La Figure 7.4 représente le flux attendu pour les six transitions de HDO observables depuis le sol à 464, 80, 893, 241, 509 et 225 GHz en fonction des abondances dans les parties internes et externes de l'enveloppe de la protoétoile. Comme attendu, les transitions à plus haute énergie contraignent particulièrement bien la valeur de l'abondance dans la partie interne de l'enveloppe. Les transitions observables par HIFI, à plus haute énergie encore, n'ajouteront donc pas d'information cruciale pour contraindre  $x_{\text{int}}$ .

Par contre, seule la transition à 464 GHz permet de contraindre correctement l'abondance de HDO dans la partie externe de l'enveloppe. Comme le montre la Figure 7.3, les transitions observables avec HSO/HIFI seront encore moins à même de contraindre cette  $x_{\text{ext}}$ .

#### Quelles transitions observer ?

Il est intéressant d'étudier quelles transitions sont les plus utiles pour contraindre les valeurs de  $x_{\text{int}}$  et  $x_{\text{ext}}$ . Nous prenons ici l'exemple des observations sur IRAS 16293, présentées au chapitre 6. La raie fondamentale est indispensable pour contraindre la valeur de  $x_{\text{ext}}$  ainsi que le montre la Figure 7.5, qui représente les intervalles de confiance à 1, 2 et 3  $\sigma$  obtenus en utilisant seulement les observations des raies à 225, 241 et 266 GHz (cette figure est à comparer avec la Figure 6.4).

Nous pouvons de plus comprendre à la lueur de la présente étude pourquoi nous n'avons pas réussi à contraindre la valeur inférieure de  $x_{\text{ext}}$  au chapitre 6. En effet, la Figure 7.4 montre que quand le flux mesuré dans la raie à 464 GHz est inférieur à une valeur de l'ordre de  $3 \times 10^{-15} \text{ erg s}^{-1} \text{ cm}^{-2}$ ,  $x_{\text{ext}}$  peut prendre toutes les valeurs inférieures à environ  $5 \times 10^{-10}$  quand

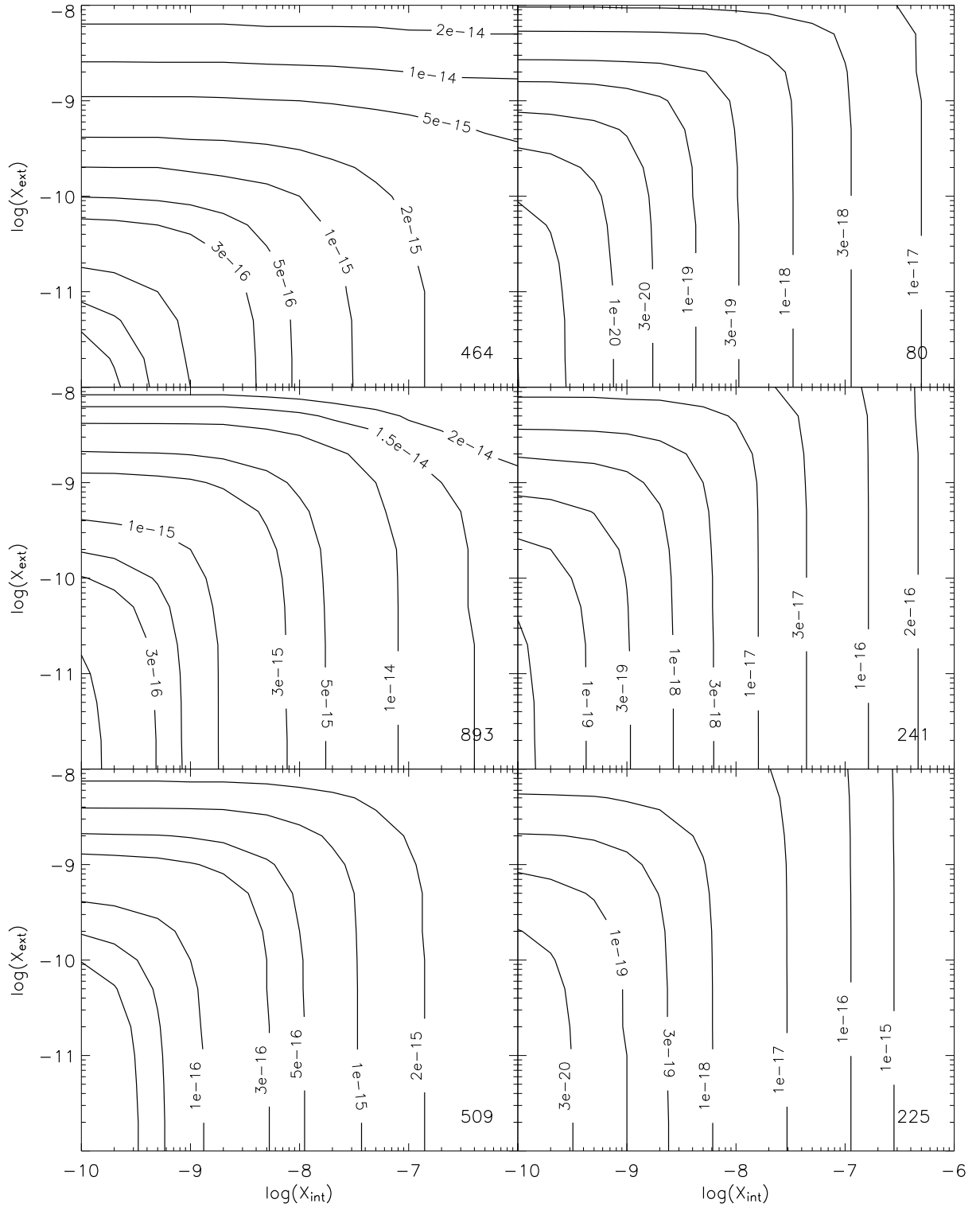


FIG. 7.4 – Contours représentant le flux (en  $\text{erg s}^{-1} \text{cm}^{-2}$ ) attendu pour les six transitions de HDO à 464, 80, 893, 241, 509 et 225 GHz en fonction des abondances dans les parties internes et externes de l'enveloppe de la protoétoile.

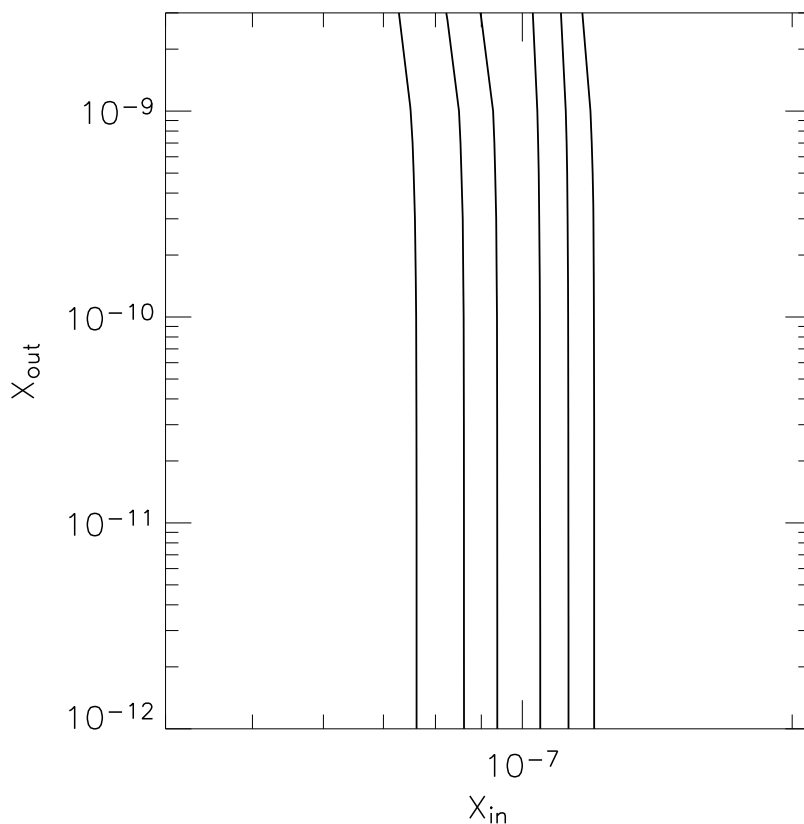


FIG. 7.5 – Intervalles de confiance à 1, 2 et 3  $\sigma$  en n'utilisant que les données à 225, 241 et 266 GHz.

$x_{\text{int}}$  est supérieur à  $10^{-7}$ . On est bien dans ce cas de figure pour IRAS 16293 puisque le meilleur ajustement prédit un flux de  $2,5 \times 10^{-15} \text{ erg s}^{-1} \text{ cm}^{-2}$  pour la raie fondamentale. La Figure 7.6 présente les intervalles de confiance pour les données présentées au chapitre 6, pour lesquelles on a augmenté artificiellement la valeur du flux observé dans la raie fondamentale. On remarque que l'on arrive dans ce cas à contraindre la valeur inférieure sur  $x_{\text{ext}}$ . En effet, on se retrouve ici dans le cas où le flux dans la raie 464 GHz est supérieur à  $3 \times 10^{-15} \text{ erg s}^{-1} \text{ cm}^{-2}$ , et la Figure 7.4 indique que  $x_{\text{ext}}$  peut alors être parfaitement contraint.

Revenons au cas de figure des données observées sur IRAS 16293, et vérifions si on peut restreindre le nombre de raies nécessaires à observer sans perdre de l'information sur la structure de la protoétoile, pour pouvoir planifier des observations en direction d'autres sources. Pour éviter de faire des observations avec un lobe trop large, nous choisissons d'évincer en priorité la raie à 80 GHz. D'autre part, la raie à 266 GHz est excitée moins facilement que les autres (voir par exemple la Figure 6.5), du fait de coefficients de collisions faibles liant les niveaux de basses énergies au niveau  $2_{2,0}$ . En conséquence, nous préférons observer en priorité les raies à 464, 225 et 241 GHz. Vérifions si un tel set d'observations serait suffisant pour contraindre les valeurs de

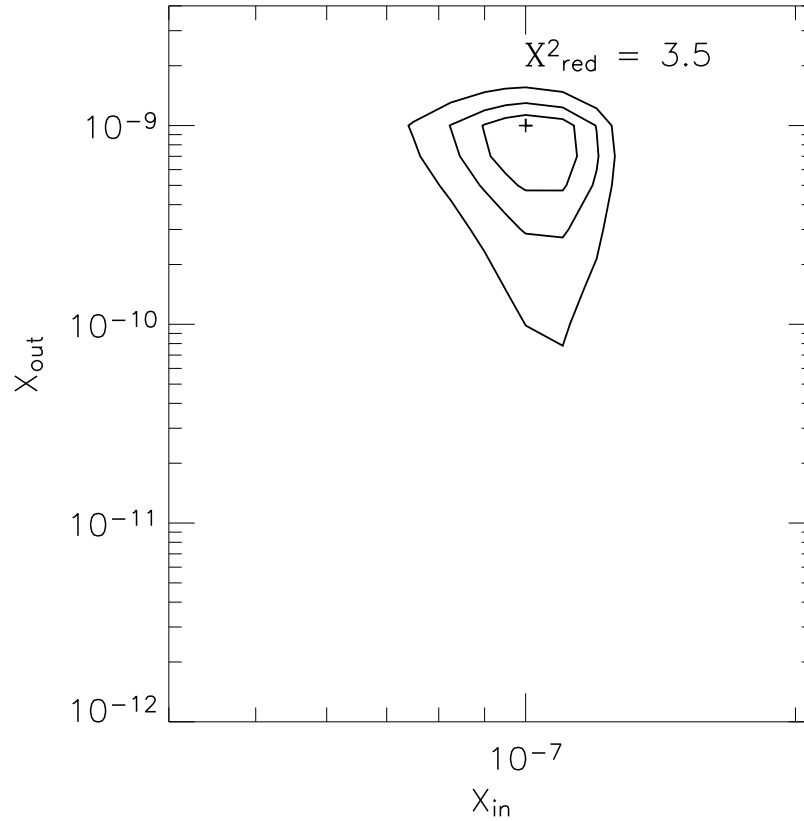


FIG. 7.6 – Intervalles de confiance à 1, 2 et 3  $\sigma$  en utilisant les 5 observations du chapitre 6, mais en augmentant artificiellement de 50% la valeur du flux mesuré dans la transition fondamentale.

$x_{\text{int}}$  et  $x_{\text{ext}}$ . La Figure 7.7 présente les intervalles de confiance sur ces paramètres obtenus en n'utilisant les observations que de ces trois raies.

Il apparaît que les deux paramètres  $x_{\text{int}}$  et  $x_{\text{ext}}$  sont aussi bien contraints qu'avec l'utilisation des 5 transitions.

En résumé, l'observation des trois raies à 464, 225 et 241 GHz est suffisante pour déduire avec une bonne précision les abondances interne et externe de HDO dans l'enveloppe des protoétoiles. Néanmoins, il faut remarquer que moins la source est lumineuse, plus il sera difficile de contraindre la valeur de  $x_{\text{ext}}$ .

## 7.4 Conclusion

La brève étude présentée dans ce chapitre montre que l'utilisation de HSO/HIFI n'est pas indispensable pour caractériser la distribution de HDO dans l'enveloppe des protoétoiles de faible masse, et que cette étude pourra être faite à partir d'observations à l'aide de télescopes au sol. Nous avons de plus donné les outils nécessaires à l'estimation des abondances  $x_{\text{int}}$  et  $x_{\text{ext}}$



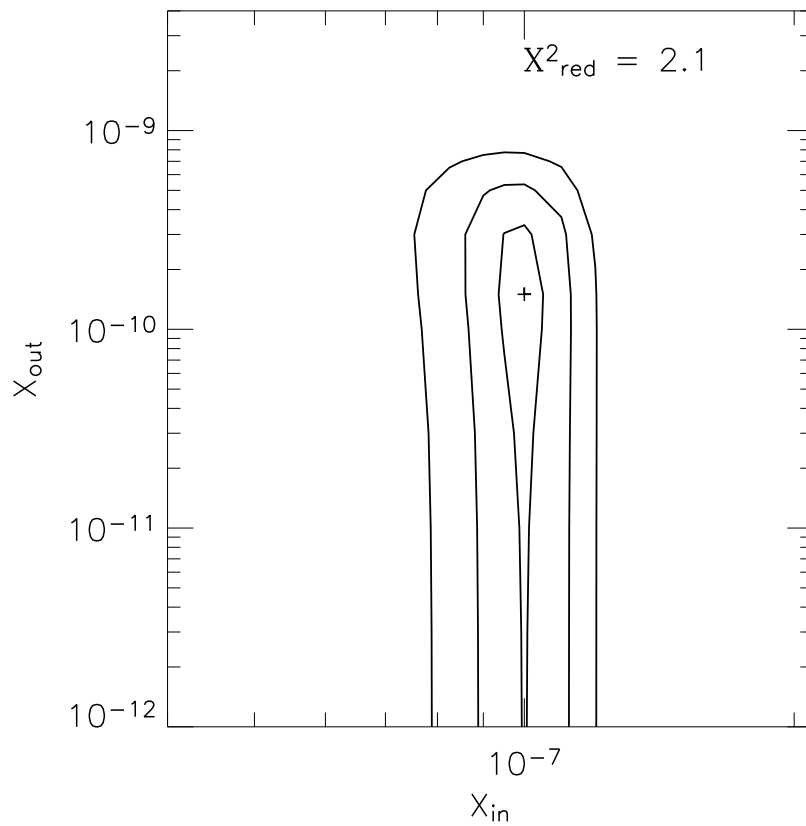


FIG. 7.7 – Intervalles de confiance à 1, 2 et 3  $\sigma$  en utilisant les données à 225, 241 et 464 GHz.

à partir d'observations de transitions de HDO avec les télescopes IRAM et JCMT, et indiqué les transitions les plus à même de contraindre les valeurs des abondances de HDO dans la partie interne et dans la partie externe de l'enveloppe (transition fondamentale à 464 GHz, et transitions à 225 et 241 GHz). Nous insistons sur le fait que ces outils sont approximatifs, et qu'il faut en toute rigueur modéliser chaque source avec le profil particulier de température et de densité de son enveloppe.

Transition	Fréquence (GHz)	$E_{\text{up}}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$A_{ul}$ ( $\text{s}^{-1}$ )	Flux ( $\text{erg s}^{-1}\text{cm}^{-2}$ )
Transitions observables depuis le sol				
$1_{1,0} - 1_{1,1}$	80.5783	32.4939	$1.32 \times 10^{-6}$	$2.7 \times 10^{-18}$
$6_{1,6} - 5_{2,3}$	138.531	308.612	$1.43 \times 10^{-6}$	$9.7 \times 10^{-20}$
$4_{2,2} - 4_{2,3}$	143.727	221.832	$2.80 \times 10^{-6}$	$2.6 \times 10^{-19}$
$3_{2,1} - 4_{0,4}$	207.111	157.060	$1.14 \times 10^{-7}$	$4.2 \times 10^{-20}$
$3_{1,2} - 2_{2,1}$	225.897	116.456	$1.31 \times 10^{-5}$	$7.0 \times 10^{-17}$
$2_{1,1} - 2_{1,2}$	241.562	66.1781	$1.18 \times 10^{-5}$	$6.5 \times 10^{-17}$
$5_{2,3} - 4_{3,2}$	255.050	303.989	$1.78 \times 10^{-5}$	$1.0 \times 10^{-18}$
$2_{2,0} - 3_{1,3}$	266.161	109.262	$1.75 \times 10^{-5}$	$1.0 \times 10^{-17}$
$3_{3,1} - 4_{2,2}$	335.396	233.016	$2.61 \times 10^{-5}$	$1.2 \times 10^{-18}$
$5_{3,2} - 6_{1,5}$	356.836	374.402	$3.53 \times 10^{-7}$	$5.8 \times 10^{-21}$
$1_{0,1} - 0_{0,0}$	464.925	15.4975	$1.69 \times 10^{-4}$	$2.5 \times 10^{-15}$
$3_{3,0} - 4_{2,3}$	479.947	233.039	$7.28 \times 10^{-5}$	$4.6 \times 10^{-18}$
$3_{1,2} - 3_{1,3}$	481.780	116.449	$4.74 \times 10^{-5}$	$2.6 \times 10^{-16}$
$2_{0,2} - 1_{1,1}$	490.597	46.1612	$5.25 \times 10^{-4}$	$6.4 \times 10^{-15}$
$1_{1,0} - 1_{0,1}$	509.292	32.4844	$2.32 \times 10^{-3}$	$1.8 \times 10^{-15}$
$4_{1,3} - 4_{1,4}$	797.487	182.965	$1.31 \times 10^{-4}$	$3.2 \times 10^{-16}$
$4_{1,3} - 3_{2,2}$	827.263	182.964	$1.28 \times 10^{-3}$	$4.2 \times 10^{-15}$
$2_{1,2} - 1_{1,1}$	848.962	58.1067	$9.27 \times 10^{-4}$	$1.0 \times 10^{-14}$
$1_{1,1} - 0_{0,0}$	893.639	29.7880	$8.35 \times 10^{-3}$	$1.1 \times 10^{-14}$

TAB. 7.3 – Flux prédits par le modèle pour les transitions observables avec les télescopes IRAM, JCMT, CSO et APEX.

Transition	Fréquence (GHz)	$E_{\text{up}}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$A$ ( $\text{s}^{-1}$ )	Flux ( $\text{erg s}^{-1} \text{cm}^{-2}$ )
Transitions observables avec HSO/HIFI				
$2_{2,0} - 3_{0,3}$	537.793	109.256	$9.94 \times 10^{-7}$	$1.8 \times 10^{-18}$
$3_{1,2} - 3_{0,3}$	753.411	116.444	$5.90 \times 10^{-3}$	$4.2 \times 10^{-15}$
$4_{3,1} - 5_{1,4}$	912.605	295.656	$2.74 \times 10^{-6}$	$2.1 \times 10^{-19}$
$2_{0,2} - 1_{0,1}$	919.311	46.1517	$1.56 \times 10^{-3}$	$1.5 \times 10^{-14}$
$4_{1,3} - 4_{0,4}$	984.138	182.961	$1.07 \times 10^{-2}$	$5.4 \times 10^{-15}$
$3_{0,3} - 2_{1,2}$	995.411	91.3064	$7.04 \times 10^{-3}$	$2.3 \times 10^{-14}$
$2_{1,1} - 1_{1,0}$	1009.94	66.1608	$1.56 \times 10^{-3}$	$1.5 \times 10^{-14}$
$5_{2,3} - 5_{1,4}$	1161.95	303.968	$2.19 \times 10^{-2}$	$1.6 \times 10^{-15}$
$4_{2,2} - 4_{1,3}$	1164.77	221.809	$2.00 \times 10^{-2}$	$3.0 \times 10^{-15}$
$5_{1,4} - 5_{1,5}$	1180.32	265.208	$2.97 \times 10^{-4}$	$2.3 \times 10^{-16}$
$3_{2,1} - 3_{1,2}$	1217.26	157.036	$1.89 \times 10^{-2}$	$4.4 \times 10^{-15}$
$3_{2,1} - 2_{2,0}$	1432.88	157.032	$3.54 \times 10^{-3}$	$7.2 \times 10^{-15}$
$5_{1,4} - 4_{2,3}$	1444.83	265.202	$1.02 \times 10^{-2}$	$8.6 \times 10^{-15}$
$4_{0,4} - 3_{1,3}$	1491.93	150.121	$3.07 \times 10^{-2}$	$4.0 \times 10^{-14}$
$3_{3,0} - 4_{1,3}$	1500.99	233.016	$3.67 \times 10^{-6}$	$7.9 \times 10^{-19}$
$3_{1,2} - 2_{1,1}$	1507.26	116.426	$6.58 \times 10^{-3}$	$3.6 \times 10^{-14}$
$2_{2,1} - 2_{1,2}$	1522.93	108.890	$2.06 \times 10^{-2}$	$1.1 \times 10^{-14}$
$6_{1,5} - 6_{1,6}$	1615.63	362.469	$5.84 \times 10^{-4}$	$1.5 \times 10^{-16}$
$3_{1,3} - 2_{0,2}$	1625.41	100.353	$4.49 \times 10^{-2}$	$5.4 \times 10^{-14}$
$3_{2,2} - 3_{1,3}$	1648.80	155.350	$3.08 \times 10^{-2}$	$1.1 \times 10^{-14}$
$4_{1,4} - 3_{1,3}$	1678.58	156.343	$9.92 \times 10^{-3}$	$4.1 \times 10^{-14}$
$6_{1,5} - 6_{0,6}$	1684.61	362.468	$3.47 \times 10^{-2}$	$4.3 \times 10^{-15}$
$4_{0,4} - 3_{0,3}$	1763.56	150.115	$1.20 \times 10^{-2}$	$5.0 \times 10^{-14}$
$4_{2,3} - 4_{1,4}$	1818.53	217.000	$4.12 \times 10^{-2}$	$1.0 \times 10^{-14}$
$4_{2,3} - 3_{2,2}$	1848.31	216.999	$1.06 \times 10^{-2}$	$1.1 \times 10^{-14}$
$4_{3,2} - 3_{3,1}$	1872.61	295.443	$6.46 \times 10^{-3}$	$9.6 \times 10^{-16}$
$4_{3,1} - 3_{3,0}$	1877.49	295.634	$6.51 \times 10^{-3}$	$9.7 \times 10^{-16}$
$2_{2,1} - 2_{0,2}$	1881.29	108.883	$1.21 \times 10^{-4}$	$7.6 \times 10^{-16}$

TAB. 7.4 – Flux prédits par le modèle pour les transitions observables avec Herschel.

Transition	Fréquence (GHz)	$E_{\text{up}}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$A_{ul}$ ( $\text{s}^{-1}$ )	Flux ( $\text{erg s}^{-1}\text{cm}^{-2}$ )
Transitions observables avec SOFIA				
$3_{1,3} - 2_{1,2}$	1267.04	100.361	$3.91 \times 10^{-3}$	$2.8 \times 10^{-14}$
$2_{1,2} - 1_{0,1}$	1277.68	58.0972	$2.19 \times 10^{-2}$	$3.1 \times 10^{-14}$
$2_{2,0} - 2_{1,1}$	1291.64	109.239	$1.59 \times 10^{-2}$	$6.3 \times 10^{-15}$
$5_{1,4} - 5_{0,5}$	1297.81	265.206	$1.97 \times 10^{-2}$	$5.4 \times 10^{-15}$
$3_{0,3} - 2_{0,2}$	1353.78	91.2989	$5.30 \times 10^{-3}$	$3.6 \times 10^{-14}$
$3_{2,2} - 2_{2,1}$	1392.92	155.357	$3.25 \times 10^{-3}$	$7.3 \times 10^{-15}$
$3_{2,2} - 3_{0,3}$	1920.43	155.344	$3.04 \times 10^{-4}$	$1.1 \times 10^{-15}$
$4_{2,2} - 3_{2,1}$	1941.80	221.791	$1.23 \times 10^{-2}$	$1.1 \times 10^{-14}$
$5_{3,3} - 6_{1,6}$	1950.15	373.620	$1.11 \times 10^{-5}$	$9.4 \times 10^{-19}$
$5_{3,3} - 6_{1,6}$	1950.15	373.620	$1.11 \times 10^{-5}$	$6.3 \times 10^{-14}$
$5_{0,5} - 4_{1,4}$	1965.55	221.900	$8.28 \times 10^{-2}$	$4.2 \times 10^{-14}$
$4_{1,3} - 3_{1,2}$	1994.29	182.937	$1.66 \times 10^{-2}$	$4.0 \times 10^{-14}$
$4_{2,3} - 4_{0,4}$	2005.18	216.995	$5.46 \times 10^{-4}$	$8.0 \times 10^{-16}$
$5_{3,3} - 6_{0,6}$	2019.13	373.618	$4.52 \times 10^{-4}$	$3.9 \times 10^{-17}$
$5_{2,4} - 5_{1,5}$	2031.74	293.589	$5.43 \times 10^{-2}$	$7.9 \times 10^{-15}$
$6_{1,5} - 5_{2,4}$	2064.69	362.459	$4.07 \times 10^{-2}$	$9.5 \times 10^{-15}$
$5_{1,5} - 4_{1,4}$	2083.04	225.816	$1.98 \times 10^{-2}$	$3.4 \times 10^{-14}$
$4_{3,2} - 5_{1,5}$	2087.23	295.438	$9.50 \times 10^{-6}$	$1.6 \times 10^{-18}$
$5_{3,2} - 5_{2,3}$	2110.99	374.360	$8.12 \times 10^{-2}$	$3.0 \times 10^{-15}$
$5_{2,4} - 5_{0,5}$	2149.22	293.587	$8.51 \times 10^{-4}$	$4.5 \times 10^{-16}$
$5_{0,5} - 4_{0,4}$	2152.20	221.896	$2.23 \times 10^{-2}$	$4.0 \times 10^{-14}$
$4_{3,2} - 5_{0,5}$	2204.71	295.436	$3.39 \times 10^{-4}$	$6.0 \times 10^{-17}$
$4_{3,1} - 4_{2,2}$	2213.71	295.626	$7.73 \times 10^{-2}$	$5.3 \times 10^{-15}$
$5_{1,5} - 4_{0,4}$	2269.69	225.812	$1.36 \times 10^{-1}$	$5.3 \times 10^{-14}$
$3_{3,0} - 3_{2,1}$	2278.02	232.998	$5.79 \times 10^{-2}$	$7.5 \times 10^{-15}$
$6_{2,5} - 6_{1,6}$	2286.21	384.822	$7.15 \times 10^{-2}$	$5.4 \times 10^{-15}$
$2_{2,1} - 1_{1,0}$	2291.31	108.873	$1.26 \times 10^{-1}$	$3.9 \times 10^{-14}$
$5_{2,4} - 4_{2,3}$	2296.25	293.583	$2.32 \times 10^{-2}$	$9.6 \times 10^{-15}$
$3_{3,1} - 4_{1,4}$	2297.65	232.970	$5.62 \times 10^{-6}$	$1.8 \times 10^{-18}$
$3_{3,1} - 3_{2,2}$	2327.43	232.970	$6.09 \times 10^{-2}$	$7.9 \times 10^{-15}$
$5_{3,3} - 4_{3,2}$	2343.74	373.612	$1.89 \times 10^{-2}$	$1.7 \times 10^{-15}$
$4_{3,2} - 4_{2,3}$	2351.73	295.432	$8.88 \times 10^{-2}$	$6.0 \times 10^{-15}$
$6_{2,5} - 6_{0,6}$	2355.19	384.820	$1.23 \times 10^{-3}$	$2.4 \times 10^{-16}$
$5_{3,2} - 4_{3,1}$	2360.34	374.355	$1.93 \times 10^{-2}$	$1.8 \times 10^{-15}$
$2_{2,0} - 1_{1,1}$	2382.17	109.214	$1.29 \times 10^{-1}$	$4.4 \times 10^{-14}$
$5_{3,3} - 5_{2,4}$	2399.22	373.610	$1.07 \times 10^{-1}$	$4.2 \times 10^{-15}$
$6_{0,6} - 5_{1,5}$	2411.83	306.258	$1.70 \times 10^{-1}$	$3.3 \times 10^{-14}$
$5_{2,3} - 4_{2,2}$	2463.05	303.938	$2.89 \times 10^{-2}$	$1.0 \times 10^{-14}$
$5_{1,4} - 4_{1,3}$	2465.87	265.179	$3.27 \times 10^{-2}$	$2.7 \times 10^{-14}$

Transition	Fréquence (GHz)	$E_{\text{up}}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$A_{ul}$ ( $\text{s}^{-1}$ )	Flux ( $\text{erg s}^{-1}\text{cm}^{-2}$ )
$6_{1,6} - 5_{1,5}$	2480.81	308.558	$3.44 \times 10^{-2}$	$2.0 \times 10^{-14}$
$3_{3,1} - 4_{0,4}$	2484.30	232.966	$1.56 \times 10^{-4}$	$5.1 \times 10^{-17}$
$6_{0,6} - 5_{0,5}$	2529.31	306.256	$3.67 \times 10^{-2}$	$2.3 \times 10^{-14}$
$6_{1,6} - 5_{0,5}$	2598.29	308.556	$2.18 \times 10^{-1}$	$3.7 \times 10^{-14}$
$3_{2,2} - 2_{1,1}$	2674.28	155.327	$1.59 \times 10^{-1}$	$4.8 \times 10^{-14}$
$6_{2,5} - 5_{2,4}$	2735.28	384.812	$4.22 \times 10^{-2}$	$6.9 \times 10^{-15}$
$2_{2,0} - 1_{0,1}$	2810.88	109.204	$2.43 \times 10^{-4}$	$2.2 \times 10^{-15}$
$6_{1,5} - 5_{1,4}$	2916.11	362.440	$5.53 \times 10^{-2}$	$1.5 \times 10^{-14}$
$3_{2,1} - 2_{1,2}$	2966.08	156.995	$1.62 \times 10^{-1}$	$5.8 \times 10^{-14}$
$4_{2,3} - 3_{1,2}$	3015.33	216.972	$2.05 \times 10^{-1}$	$4.6 \times 10^{-14}$
$5_{3,3} - 5_{1,4}$	3250.64	373.591	$7.43 \times 10^{-4}$	$9.9 \times 10^{-17}$
$5_{2,4} - 4_{1,3}$	3317.29	293.559	$2.63 \times 10^{-1}$	$3.6 \times 10^{-14}$
$3_{2,1} - 2_{0,2}$	3324.45	156.988	$8.77 \times 10^{-4}$	$4.6 \times 10^{-15}$
$4_{3,2} - 4_{1,3}$	3372.77	295.409	$4.06 \times 10^{-4}$	$1.0 \times 10^{-16}$
$3_{3,1} - 3_{1,2}$	3494.45	232.943	$1.57 \times 10^{-4}$	$6.6 \times 10^{-17}$
$6_{2,5} - 5_{1,4}$	3586.70	384.793	$3.37 \times 10^{-1}$	$2.4 \times 10^{-14}$
$4_{2,2} - 3_{1,3}$	3640.83	221.751	$1.96 \times 10^{-1}$	$5.9 \times 10^{-14}$
$3_{3,1} - 2_{2,0}$	3710.07	232.938	$6.26 \times 10^{-1}$	$3.6 \times 10^{-14}$
$3_{3,0} - 2_{2,1}$	3721.17	232.965	$6.30 \times 10^{-1}$	$3.5 \times 10^{-14}$
$4_{2,2} - 3_{0,3}$	3912.47	221.746	$1.99 \times 10^{-3}$	$4.4 \times 10^{-15}$
$3_{3,0} - 3_{1,3}$	3977.05	232.958	$1.37 \times 10^{-4}$	$5.8 \times 10^{-17}$
$4_{3,2} - 3_{2,1}$	4149.80	295.391	$6.85 \times 10^{-1}$	$3.4 \times 10^{-14}$
$4_{3,1} - 4_{1,4}$	4175.96	295.581	$3.25 \times 10^{-4}$	$8.7 \times 10^{-17}$
$4_{3,1} - 3_{2,2}$	4205.74	295.580	$7.02 \times 10^{-1}$	$3.3 \times 10^{-14}$
$3_{3,0} - 3_{0,3}$	4248.69	232.953	$2.23 \times 10^{-3}$	$8.7 \times 10^{-16}$
$4_{3,1} - 4_{0,4}$	4362.61	295.576	$8.17 \times 10^{-3}$	$2.0 \times 10^{-15}$
$5_{2,3} - 4_{1,4}$	4425.31	303.892	$2.21 \times 10^{-1}$	$4.9 \times 10^{-14}$
$5_{3,2} - 5_{1,5}$	4453.27	374.306	$5.25 \times 10^{-4}$	$8.5 \times 10^{-17}$
$5_{3,3} - 4_{2,2}$	4551.74	373.561	$7.54 \times 10^{-1}$	$3.0 \times 10^{-14}$
$5_{3,2} - 5_{0,5}$	4570.75	374.304	$1.73 \times 10^{-2}$	$2.5 \times 10^{-15}$
$5_{2,3} - 4_{0,4}$	4611.96	303.888	$3.35 \times 10^{-3}$	$2.6 \times 10^{-15}$
$5_{3,2} - 4_{2,3}$	4717.77	374.300	$7.96 \times 10^{-1}$	$2.9 \times 10^{-14}$

TAB. 7.5 – Flux prédits par le modèle pour les transitions observables avec SOFIA.

Troisième partie

# Modélisation de la chimie à la surface des grains



# Chapitre 8

## Formation des molécules deutérées sur les grains de poussière

### Sommaire

---

<b>8.1</b>	<b>Introduction</b>	<b>151</b>
<b>8.2</b>	<b>Les différents types de modèles sur les grains</b>	<b>152</b>
8.2.1	Codes de Monte-Carlo	152
8.2.2	Résolution des équations différentielles régissant les abondances	152
8.2.3	Résolution de l'équation maîtresse	153
<b>8.3</b>	<b>Un modèle simple pour le méthanol : le scénario de Charnley et al. (1997)</b>	<b>153</b>
8.3.1	Les hypothèses	154
8.3.2	Les équations	155
<b>8.4</b>	<b>Le modèle complet</b>	<b>158</b>
8.4.1	Présentation du modèle	159
8.4.2	Résultats	166
8.4.3	Implications astrophysiques	173
<b>8.5</b>	<b>Conclusion</b>	<b>176</b>

---

### 8.1 Introduction

Les modèles de chimie en phase gazeuse ne parviennent pas à eux seuls à expliquer les abondances absolues de certaines molécules. C'est le cas pour le méthanol observé en surabondance dans Orion par Menten et al. (1988), mais aussi pour l'eau. En effet, le modèle de Roberts & Herbst (2002) prédit une abondance de l'eau formée en phase gazeuse de  $10^{-6}$  au plus. Il doit avoir recours à l'hydrogénation de l'oxygène sur les grains pour expliquer l'abondance de l'eau de l'ordre de  $10^{-4}$  observée dans les glaces (*e.g.* Nummelin et al. 2001, observations vers Elias 16, sondant les glaces du nuage du Taureau).



Il est donc probable que l'eau observée en abondance dans les manteaux des glaces dans les enveloppes de protoétoiles ainsi que le méthanol observé dans le gaz soient produits par des réactions à la surface des grains de poussière. Le grain a pour effet, entre autres, d'augmenter la probabilité de rencontre entre espèces neutres qui scannent sa surface.

L'étude des molécules deutérées amène des contraintes importantes aux modèles de chimie. En effet ces modèles doivent être en mesure non seulement de prédire les abondances absolues des isotopes principaux mais aussi d'expliquer la dispersion des rapports isotopiques observée dans les différentes molécules.

Différents types de modèles ont été développés par plusieurs équipes avant et pendant cette thèse. Les modèles précédents ne peuvent pas expliquer simultanément une faible deutération de l'eau et une forte triple deutération du méthanol. Nous présentons les différents types de modèles, avec leurs avantages et leurs inconvénients, dans la première partie. En deuxième partie, nous présentons un nouveau modèle de chimie sur les grains développé en vue d'expliquer les observations de méthanol et d'eau deutérés décrites dans les chapitres précédents.

## 8.2 Les différents types de modèles sur les grains

### 8.2.1 Codes de Monte-Carlo

Dans les environnements qui nous intéressent, les atomes accrètent à raison d'un par jour sur le grain (pour un milieu de densité  $10^4 \text{ cm}^{-3}$  et de température 10 K, *cf.* paragraphe 8.4). Les espèces se déplacent de site en site à la surface du grain par effet tunnel. Les atomes d'hydrogène, légers, peuvent visiter tous les sites de piégeage d'un grain typique de 1000 Å en  $10^{-3}$  s. Les atomes plus lourds tels que C ou O mettent  $10^4$  s, temps toujours faible devant le temps caractéristique d'accrétion. Les atomes ont donc le temps de réagir avec un coréactant avant que la prochaine espèce n'accrète sur le grain. On peut alors considérer que la chimie sur les grains est limitée par le taux d'accrétion des espèces sur le grain. Dans ces conditions, le modèle le plus rigoureux est le code de Monte-Carlo.

Son inconvénient principal est qu'il est difficilement couplable à un code de chimie en phase gazeuse, basé sur la résolution d'équations différentielles.

### 8.2.2 Résolution des équations différentielles régissant les abondances

Les réactions chimiques à la surface des grains peuvent aussi être modélisées avec le même formalisme que les réactions en phase gazeuse. Dans l'hypothèse où le temps caractéristique d'accrétion des espèces sur le grain est petit devant le temps de réaction, il est possible de modéliser la chimie en résolvant les équations différentielles couplées des abondances des espèces par rapport au temps :

$$\frac{dn_k}{dt} = k_{\text{accr},k} + \sum k_{\text{form},ij} n_i n_j - \sum k_{\text{destr},kl} n_k n_l - k_{\text{evap},k}$$

où  $k_{\text{accr},k}$  est le taux d'accrétion de l'espèce  $k$ ,  $k_{\text{form},ij}$  est le taux de formation de l'espèce  $k$  par réaction entre espèces  $i$  et  $j$  (et la somme est sur toutes les réactions où  $k$  est produit),  $k_{\text{destr},kl}$  est le taux de destruction de  $k$  par réaction avec une espèce  $l$  (et la somme est sur toutes les réactions où  $k$  est un réactif), et  $k_{\text{evap},k}$  est le taux d'évaporation de l'espèce  $k$ .

Le modèle est ainsi formellement équivalent aux modèles de chimie en phase gazeuse et son avantage certain est de permettre un couplage facile entre la chimie en phase gazeuse et sur les grains.

Néanmoins, ce type de modèle n'est pas valide quand le nombre de molécules à la surface des grains est petit. Il ne suit en effet que l'évolution du nombre moyen de molécules d'une espèce chimique sur le grain sans tenir compte du caractère discret qui apparaît quand il n'y a qu'une ou deux molécules sur le grain.

Ce problème a été contourné en incluant des taux de réaction modifiés pour les réactions mettant en œuvre des espèces peu représentées (Caselli et al. 1998; Stantcheva et al. 2001). Ces modifications consistent à ralentir artificiellement le taux de diffusion des espèces rapides à la valeur maximale entre les taux d'évaporation et d'accrétion. Ceci a pour effet de limiter la probabilité de réaction d'un atome accrétant avec une espèce réactive à la valeur maximum de 1 pendant la période séparant deux accrétions. La validité de cette méthode n'est malheureusement pas évidente à démontrer dans le cas général, même si une comparaison avec un code Monte-Carlo a montré un bon accord (Caselli et al. 2002a).

### 8.2.3 Résolution de l'équation maîtresse

Une autre méthode, conceptuellement équivalente au code de Monte-Carlo, consiste à résoudre directement l'équation maîtresse, c'est-à-dire les équations qui relient les probabilités que différentes configurations soient présentes sur le grain. Une configuration est définie par le nombre de molécules de chacune des espèces sur le grain. Cette méthode est très exigeante en temps de calcul, mais on peut choisir de l'appliquer seulement dans les cas où le nombre de molécules d'une espèce est faible (0, 1, 2 ou 3) et de garder une résolution d'équations différentielles régissant les abondances pour les autres cas. Cette méthode a été appliquée par Stantcheva & Herbst (2003).

## 8.3 Un modèle simple pour le méthanol : le scénario de Charnley et al. (1997)

Nous avons développé un modèle de Monte-Carlo de chimie sur les grains pour expliquer les observations de méthanol et d'eau deutérés présentées dans les chapitres précédents. Ce modèle a été testé sur le cas simple proposé par Charnley et al. (1997), qui a l'avantage de pouvoir être résolu analytiquement. Nous détaillons la résolution analytique du modèle de Charnley et al. (1997) dans ce paragraphe et présentons ensuite notre modèle complet dans le paragraphe 8.4.

Nous proposons tout d'abord d'étudier un modèle très simple dans lequel nous ne considérons

que l'accrétion de CO, H et D à la surface du grain. Ce genre d'approche a été introduit par Charnley et al. (1997, modèle CTR dans la suite de ce chapitre). Nous utilisons ici le même réseau chimique que dans le modèle CTR. Les différentes réactions sont présentées dans la Figure 8.1.

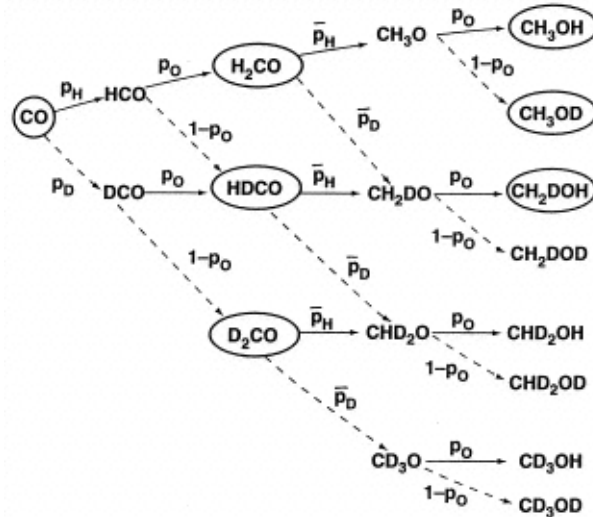


FIG. 8.1 – Formation du formaldéhyde et du méthanol par hydrogénations et deutérations du CO sur les grains. Scénario de Charnley et al. (1997).

La couverture surfacique (abondance à la surface du grain, ramenée au nombre de sites disponibles) de chacune des espèces pour ce modèle peut être facilement résolue à l'équilibre, dans le cas particulier où les barrières d'énergie impliquées pour les réactions avec des espèces hydrogénées sont les mêmes qu'avec les espèces deutérées. Nous présentons ici les différentes hypothèses et équations sous-tendant ce modèle. Outre l'intérêt de démontrer les prouesses de  $\text{\LaTeX}$  (!), cette étude a permis de tester notre code de Monte-Carlo sur un problème simple et résolu entièrement analytiquement.

### 8.3.1 Les hypothèses

Ce modèle repose sur plusieurs hypothèses simplificatrices :

- Nous ne considérons que les réactions de H et D avec le CO, le formaldéhyde et les radicaux.
- Les réactions sont limitées par le taux d'accrétion des espèces sur les grains.
- Quand un radical est présent sur la surface, le prochain atome (H ou D) arrivant sur le grain réagit avec lui.
- Chaque CO atterrissant sur le grain dans un site déjà occupé ensevelit l'espèce qui s'y trouve (CO, formaldéhyde ou méthanol), créant ainsi un manteau de glaces multi-couches. Les radicaux ne sont jamais enterrés (il n'y en a qu'un à la fois à la surface du grain).
- Les espèces enterrées ne sont plus disponibles pour réactions avec les atomes qui accrètent.

### 8.3.2 Les équations

Notons  $a_H$  (resp.  $a_D$  et  $a_{CO}$ ) le taux d'accrétion d'atomes d'hydrogène H (resp. D et CO) par site sur le grain.

La probabilité qu'un atome H réagisse avec une espèce particulière  $j$  ( $j$  représentant toute espèce non radicalaire CO, H<sub>2</sub>CO, HDCO ou D<sub>2</sub>CO) plutôt qu'avec une autre espèce non radicalaire (en supposant qu'il n'y a aucun radical sur la surface) est :

$$\frac{N_j \phi_j^H}{\sum_{i \in NR} N_i \phi_i^H}$$

où  $N_i$  est le nombre de molécules  $i$  sur le grain, NR l'ensemble des espèces non radicalaires {CO, H<sub>2</sub>CO, HDCO, D<sub>2</sub>CO} réagissant avec les atomes accrétés et  $\phi_i^H$  un facteur de pondération tenant compte de la barrière d'énergie que l'atome d'hydrogène doit franchir par effet tunnel.

$$\phi_i^H = \exp\left(-\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m_H E_i}\right),$$

où  $E_i$  et  $a$  sont les hauteur et largeur de la barrière de potentiel et  $m_H$  la masse de l'atome d'hydrogène.

Les relations pour les réactions avec D sont similaires, à l'exception près que l'expression de  $\phi_i^D$  comporte  $m_D$ .

Le nombre d'atomes H disponibles par unité de temps pour réagir avec CO ou le formaldéhyde est  $\frac{a_H}{2}$  car  $\frac{a_H}{2}$  atomes d'hydrogène sont absorbés dans les réactions avec les radicaux formés (HDO, DCO, ...). En effet, chaque réaction de H avec CO ou le formaldéhyde crée un radical libre qui absorbera le prochain atome accrété.

Notons  $\theta_i$  la couverture surfacique de l'espèce  $i$  ( $\theta_i \leq 1$ ),

$\theta_{\text{form}} = \theta_{\text{H}_2\text{CO}} + \theta_{\text{HDCO}} + \theta_{\text{D}_2\text{CO}}$  la couverture surfacique du formaldéhyde,

$\theta_{\text{meth}} = \theta_{\text{CH}_3\text{OH}} + \theta_{\text{CH}_3\text{OD}} + \theta_{\text{CH}_2\text{DOH}} + \theta_{\text{CHD}_2\text{OH}} + \theta_{\text{CH}_2\text{DOD}} + \theta_{\text{CD}_3\text{OH}} + \theta_{\text{CHD}_2\text{OD}} + \theta_{\text{CD}_3\text{OD}}$  la couverture surfacique du méthanol,

et faisons l'hypothèse que les barrières d'énergie impliquées dans les réactions d'un atome avec des espèces hydrogénées ou deutérées sont les mêmes, c'est-à-dire :

$$\phi_{\text{H}_2\text{CO}}^H = \phi_{\text{HDCO}}^H = \phi_{\text{D}_2\text{CO}}^H = \phi_{\text{form}}^H$$

$$\phi_{\text{CH}_3\text{OH}}^H = \phi_{\text{CH}_3\text{OD}}^H = \dots = \phi_{\text{meth}}^H$$

$$\phi_{\text{H}_2\text{CO}}^D = \phi_{\text{HDCO}}^D = \phi_{\text{D}_2\text{CO}}^D = \phi_{\text{form}}^D$$

$$\text{et } \phi_{\text{CH}_3\text{OH}}^D = \phi_{\text{CH}_3\text{OD}}^D = \dots = \phi_{\text{meth}}^D$$

A l'équilibre, chaque site est occupé (*i.e.*  $\theta_{\text{CO}} + \theta_{\text{form}} + \theta_{\text{meth}} = 1$ ). Le méthanol ne disparaît que par ensevelissement (nous ne considérons pas d'évaporation ni de formation de molécules

complexes).

Notons  $p_0$  la probabilité que le prochain atome arrivant sur le grain soit un hydrogène plutôt qu'un deutérium quand il y a un radical sur la surface :  $p_0 = \frac{a_H}{a_H + a_D}$ .

Nous pouvons alors écrire les équations suivantes, qui régissent les couvertures surfaciques de chaque espèce :

$$\frac{d\theta_{CO}}{dt} = a_{CO} - \underbrace{\frac{a_H}{2} \frac{\theta_{CO} \phi_{CO}^H}{\theta_{CO} \phi_{CO}^H + \theta_{form} \phi_{form}^H}}_{CO \rightarrow HCO} - \underbrace{\frac{a_D}{2} \frac{\theta_{CO} \phi_{CO}^D}{\theta_{CO} \phi_{CO}^D + \theta_{form} \phi_{form}^D}}_{CO \rightarrow DCO} - \underbrace{a_{CO} \theta_{CO}}_{CO \text{ enseveli}}$$

$$\begin{aligned} \frac{d\theta_{H_2CO}}{dt} &= \underbrace{\frac{a_H}{2} p_0 \frac{\theta_{CO} \phi_{CO}^H}{\theta_{CO} \phi_{CO}^H + \theta_{form} \phi_{form}^H}}_{HCO \rightarrow H_2CO} - \underbrace{\frac{a_H}{2} \frac{\theta_{H_2CO} \phi_{form}^H}{\theta_{CO} \phi_{CO}^H + \theta_{form} \phi_{form}^H}}_{H_2CO \rightarrow CH_3O} \\ &\quad - \underbrace{\frac{a_D}{2} \frac{\theta_{H_2CO} \phi_{form}^D}{\theta_{CO} \phi_{CO}^D + \theta_{form} \phi_{form}^D}}_{H_2CO \rightarrow CH_2DO} - \underbrace{a_{CO} \theta_{H_2CO}}_{H_2CO \text{ enseveli}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d\theta_{HDCO}}{dt} &= \underbrace{\frac{a_H}{2} (1 - p_0) \frac{\theta_{CO} \phi_{CO}^H}{\theta_{CO} \phi_{CO}^H + \theta_{form} \phi_{form}^H}}_{HCO \rightarrow HDCO} + \underbrace{\frac{a_D}{2} p_0 \frac{\theta_{CO} \phi_{CO}^D}{\theta_{CO} \phi_{CO}^D + \theta_{form} \phi_{form}^D}}_{DCO \rightarrow HDCO} \\ &\quad - \underbrace{\frac{a_H}{2} \frac{\theta_{HDCO} \phi_{form}^H}{\theta_{CO} \phi_{CO}^H + \theta_{form} \phi_{form}^H}}_{HDCO \rightarrow CH_2DO} - \underbrace{\frac{a_D}{2} \frac{\theta_{HDCO} \phi_{form}^D}{\theta_{CO} \phi_{CO}^D + \theta_{form} \phi_{form}^D}}_{HDCO \rightarrow CHD_2O} - \underbrace{a_{CO} \theta_{HDCO}}_{HDCO \text{ enseveli}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d\theta_{D_2CO}}{dt} &= \underbrace{\frac{a_D}{2} (1 - p_0) \frac{\theta_{CO} \phi_{CO}^D}{\theta_{CO} \phi_{CO}^D + \theta_{form} \phi_{form}^D}}_{DCO \rightarrow D_2CO} - \underbrace{\frac{a_H}{2} \frac{\theta_{D_2CO} \phi_{form}^H}{\theta_{CO} \phi_{CO}^H + \theta_{form} \phi_{form}^H}}_{D_2CO \rightarrow CHD_2O} \\ &\quad - \underbrace{\frac{a_D}{2} \frac{\theta_{D_2CO} \phi_{form}^D}{\theta_{CO} \phi_{CO}^D + \theta_{form} \phi_{form}^D}}_{D_2CO \rightarrow CD_3O} - \underbrace{a_{CO} \theta_{D_2CO}}_{D_2CO \text{ enseveli}} \end{aligned}$$

Définissons maintenant :

$$\Phi_H = \frac{\phi_{form}^H}{\phi_{CO}^H}, \quad \Phi_D = \frac{\phi_{form}^D}{\phi_{CO}^D}, \quad \alpha_H = \frac{a_H}{a_{CO}}, \quad \alpha_D = \frac{a_D}{a_{CO}}$$

et :

$$p_H = \frac{\alpha_H}{\theta_{CO} + \Phi_H \theta_{form}}$$

$$p_D = \frac{\alpha_D}{\theta_{CO} + \Phi_D \theta_{form}}$$

$$\bar{p}_H = \frac{\alpha_H}{\theta_{CO} \Phi_H^{-1} + \theta_{form}} = \Phi_H \cdot p_H$$

$$\bar{p}_D = \frac{\alpha_D}{\theta_{CO} \Phi_D^{-1} + \theta_{form}} = \Phi_D \cdot p_D$$

$\Phi_H$  est indicatif de la tendance de H à réagir avec le formaldéhyde plutôt qu'avec le CO.

A l'équilibre, les quatre équations aux dérivées temporelles deviennent :

$$1 - \frac{p_H}{2} \theta_{CO} - \frac{p_D}{2} \theta_{CO} - \theta_{CO} = 0 \quad (8.1)$$

$$\frac{p_H}{2} p_0 \theta_{CO} - \frac{\bar{p}_H}{2} \theta_{H_2CO} - \frac{\bar{p}_D}{2} \theta_{H_2CO} - \theta_{H_2CO} = 0 \quad (8.2)$$

$$\frac{p_H}{2} (1 - p_0) \theta_{CO} + \frac{p_D}{2} p_0 \theta_{CO} - \frac{\bar{p}_H}{2} \theta_{HDCO} - \frac{\bar{p}_D}{2} \theta_{HDCO} - \theta_{HDCO} = 0 \quad (8.3)$$

$$\frac{p_D}{2} (1 - p_0) \theta_{CO} - \frac{\bar{p}_H}{2} \theta_{D_2CO} - \frac{\bar{p}_D}{2} \theta_{D_2CO} - \theta_{D_2CO} = 0 \quad (8.4)$$

Ajoutant (8.2), (8.3) et (8.4) on obtient :

$$\theta_{form} \left( 1 + \frac{\bar{p}_H + \bar{p}_D}{2} \right) = \theta_{CO} \left( \frac{p_H + p_D}{2} \right) = 1 - \theta_{CO} \quad (8.5)$$

Les rapports de fractionnement sont donc donnés par les relations :

$$\frac{HDCO}{H_2CO} = \frac{p_H \alpha_D + p_D \alpha_H}{p_H \alpha_H} = \frac{\alpha_D}{\alpha_H} + \frac{p_D}{p_H} \quad (8.6)$$

$$\frac{D_2CO}{H_2CO} = \frac{p_D \alpha_D}{p_H \alpha_H} \quad (8.7)$$

Remplaçant alors  $p_H$  and  $p_D$  par leurs expressions :

$$\frac{HDCO}{H_2CO} = \frac{\alpha_D}{\alpha_H} \left( 1 + \frac{\theta_{CO} + \Phi_H \theta_{form}}{\theta_{CO} + \Phi_D \theta_{form}} \right) \quad (8.8)$$

$$\frac{D_2CO}{H_2CO} = \left( \frac{\alpha_D}{\alpha_H} \right)^2 \left( \frac{\theta_{CO} + \Phi_H \theta_{form}}{\theta_{CO} + \Phi_D \theta_{form}} \right) \quad (8.9)$$

Il apparaît finalement que l'on peut simplifier le problème à la résolution de deux équations à deux inconnues,  $\theta_{CO}$  and  $\theta_{form}$ .

Les deux équations sont les suivantes, tirées de (8.1) et (8.5) :

$$\left( 1 + \frac{p_H + p_D}{2} \right) \theta_{CO} = 1$$

$$\theta_{\text{form}} \left( 1 + \frac{\bar{p}_{\text{H}} + \bar{p}_{\text{D}}}{2} \right) = 1 - \theta_{\text{CO}}$$

Les fractionnements des différents isotopes s'expriment ensuite en fonction des paramètres  $\theta_{\text{CO}}$  and  $\theta_{\text{form}}$ . En effet, prenons l'exemple de  $\text{CH}_2\text{DOH}$  :

$$\frac{d\theta_{\text{CH}_3\text{OH}}}{dt} = \frac{a_{\text{H}}}{2} p_0 \underbrace{\frac{\theta_{\text{H}_2\text{CO}} \phi_{\text{form}}^{\text{H}}}{\theta_{\text{CO}} \phi_{\text{CO}}^{\text{H}} + \theta_{\text{form}} \phi_{\text{form}}^{\text{H}}}}_{\text{CH}_3\text{O} \rightarrow \text{CH}_3\text{OH}} - \underbrace{\frac{a_{\text{CO}} \theta_{\text{CH}_3\text{OH}}}{\text{CH}_3\text{OH}}}_{\text{enseveli}}$$

$$\frac{d\theta_{\text{CH}_2\text{DOH}}}{dt} = \frac{a_{\text{D}}}{2} p_0 \underbrace{\frac{\theta_{\text{H}_2\text{CO}} \phi_{\text{form}}^{\text{H}}}{\theta_{\text{CO}} \phi_{\text{CO}}^{\text{H}} + \theta_{\text{form}} \phi_{\text{form}}^{\text{H}}}}_{\text{H}_2\text{CO} \rightarrow \text{CH}_2\text{DO} \rightarrow \text{CH}_2\text{DOH}} + \frac{a_{\text{H}}}{2} p_0 \underbrace{\frac{\theta_{\text{HDCO}} \phi_{\text{form}}^{\text{H}}}{\theta_{\text{CO}} \phi_{\text{CO}}^{\text{H}} + \theta_{\text{form}} \phi_{\text{form}}^{\text{H}}}}_{\text{HDCO} \rightarrow \text{CH}_2\text{DO} \rightarrow \text{CH}_2\text{DOH}} - \underbrace{\frac{a_{\text{CO}} \theta_{\text{CH}_2\text{DOH}}}{\text{CH}_2\text{DOH}}}_{\text{enseveli}}$$

A l'équilibre (*i.e.* en écrivant  $\frac{d\theta_{\text{CH}_3\text{OH}}}{dt} = 0$  et  $\frac{d\theta_{\text{CH}_2\text{DOH}}}{dt} = 0$ ), on obtient :

$$\frac{\text{CH}_2\text{DOH}}{\text{CH}_3\text{OH}} = \frac{a_{\text{D}}}{a_{\text{H}}} + \frac{\text{HDCO}}{\text{H}_2\text{CO}}$$

## 8.4 Le modèle complet

Nous avons développé un modèle de Monte-Carlo de chimie active à la surface des grains dans l'hypothèse où la chimie est limitée par le taux d'accrétion des espèces (suivant la méthode de Tielens & Hagen 1982), pour investiguer le fractionnement en deutérium des molécules formées à la surface des grains.

Ce modèle repose sur deux hypothèses simplificatrices :

(i) le temps caractéristique d'accrétion est grand devant les temps caractéristiques des réactions des atomes accrétés H, N, C ou O avec les autres espèces (*cf.* discussion plus loin).

(ii) on ne considère pas la désorption des molécules constituant le manteau des grains, et donc la chimie de surface n'est pas couplée à la chimie dans la phase gazeuse.

Ce modèle est une extension du modèle développé par Keane et al. (en préparation) ne traitant pas les processus de deutération, dont les détails peuvent être consultés dans sa thèse (Keane 2002). Nous présentons dans les paragraphes suivants les détails nécessaires à la compréhension du modèle.

### 8.4.1 Présentation du modèle

#### Composition de la phase gazeuse

La composition du gaz accrétant sur le grain est limitée aux espèces dominant la composition du milieu interstellaire, c'est-à-dire H, C, CO, O, O<sub>2</sub>, N et N<sub>2</sub>. A ces espèces, nous avons ajouté le deutérium atomique D. La composition du gaz est supposée en équilibre.

Les abondances élémentaires adoptées pour la phase gazeuse sont listées dans la Table 8.1.

TAB. 8.1 – Abondance élémentaire (relative à la densité totale de noyaux d'hydrogène  $n_o$ ) des espèces en phase gazeuse.

Elément	Abondance
O	$3,4 \times 10^{-4}$
C	$1,4 \times 10^{-4}$
N	$7,5 \times 10^{-5} \text{ }^a$

<sup>a</sup> Meyer et al. (1997)

Dans les nuages moléculaires, l'hydrogène est principalement sous forme moléculaire. L'ionisation par les rayons cosmiques maintient une faible densité d'atomes d'hydrogène de  $\sim 1 \text{ cm}^{-3}$ , c'est-à-dire une abondance de  $1/n_o$ , où  $n_o$  est la densité totale de noyaux d'hydrogène.

Les observations et études théoriques montrent que dans les nuages denses, le carbone est principalement sous la forme CO (Keene 1990). Le CO est partiellement dissocié par le faible champ FUV créé par l'ionisation de H<sub>2</sub> par les rayons cosmiques. Nous adoptons dans notre modèle un rapport C/CO de 0,03.

Le réservoir d'azote dans les nuages moléculaires est mal connu. Des études théoriques suggèrent que la plupart de l'azote se trouve sous forme de N<sub>2</sub>. Nous avons adopté une abondance pour l'azote atomique de 0,1 par rapport à N<sub>2</sub>.

Bien que l'oxygène joue un rôle crucial dans la chimie interstellaire (pour la formation de H<sub>2</sub>O), l'abondance de l'oxygène moléculaire pose problème depuis longtemps aux astrochimistes. Une fraction importante de l'oxygène se trouve sous forme de CO. Le reste se trouve certainement sous forme atomique (O) ou moléculaire (O<sub>2</sub>), ou sous forme d'eau (H<sub>2</sub>O). Le lancement de SWAS (Submillimeter Wave Astronomy Satellite) a permis pour la première fois de placer des contraintes fortes sur l'abondance d'oxygène moléculaire dans les nuages froids. O<sub>2</sub> n'a pas été détecté, et les résultats semblent en accord avec une limite supérieure de quelques  $10^{-7}$  sur son abondance dans des nuages denses (Goldsmith et al. 2000). Des limites plus faibles encore, de quelques  $10^{-8}$ , ont été déterminées grâce aux récentes observations de ODIN (Pagani et al. 2003). Ces limites mettent en défaut les modèles de chimie actuels. Cependant, ces observations sont difficiles à interpréter aux vues des grands lobes de SWAS (2') et ODIN (9'). Ainsi, bien que beaucoup d'oxygène soit sous forme de CO, une partie substantielle doit se trouver sous



forme atomique, ce qui a des conséquences considérables sur la chimie. Nous avons adopté ici un rapport  $O/O_2$  de l'ordre de 100, comme le suggère l'étude de Keane (2002).

La Table 8.2 liste les abondances adoptées pour toutes les espèces gazeuses (sauf D), pour les trois valeurs de densité totale  $n_o$  de  $10^3$ ,  $10^4$ , et  $10^5$   $\text{cm}^{-3}$ . L'abondance en phase gazeuse du deutérium atomique D est considérée comme un paramètre libre dans cette étude. La densité d'atomes D varie entre 0,001 et  $1 \text{ cm}^{-3}$ . La densité d'atomes H est fixée à  $1 \text{ cm}^{-3}$  par l'ionisation due aux rayons cosmiques, et donc son abondance est inversement proportionnelle à la densité. HD et D sont les deux réservoirs principaux de deutérium dans la phase gazeuse. Le rapport atomique D/H est donc limité à  $1,5 \times 10^{-5} \times n_o$  (cas où tout le deutérium est sous forme atomique). Ceci implique que les grandes valeurs du rapport atomique D/H ne pourront être envisagées qu'à haute densité. Ainsi, la chimie de surface pour D/H = 0,1 peut-être considérée pour  $n_o = 10^4$  et  $10^5$ , tandis qu'un rapport atomique D/H de 1 n'aura de sens que pour  $n_o = 10^5$ .

TAB. 8.2 – Abondances des espèces en phase gazeuse ( $\text{cm}^{-3}$ ) adoptées pour les trois densités  $n_o$  ( $\text{cm}^{-3}$ ).

Espèce	Densité ( $n_o$ )		
	$10^3$	$10^4$	$10^5$
H	1	1	1
O	0.2	2	20
N	0.0085	0.085	0.85
C	0.0042	0.042	0.42
$N_2$	0.033	0.33	3.3
CO	0.135	1.35	13.5
$O_2$	0.0024	0.024	0.24

### Accrétion

Une espèce gazeuse  $i$  accrète sur le grain avec un taux :

$$R_{\text{acc}}(i) = n_i \bar{v}(i) \pi a^2$$

où  $n_i$  est l'abondance en phase gazeuse relative à l'hydrogène et  $\bar{v}(i)$  la vitesse moyenne de l'espèce  $i$ , et  $a$  la taille du grain.

Les vitesses thermiques des espèces du gaz sont données par :

$$\bar{v}(i) = \sqrt{3kT_g/m_i}$$

où  $m_i$  est la masse de  $i$ ,  $T_g$  la température du gaz (ici fixée à 10 K) et  $k$  la constante de Boltzmann. On suppose que le coefficient de collage (c'est-à-dire la probabilité qu'une espèce reste à la surface après collision) vaut 1 pour toutes les espèces entrant en collision avec le grain.

L'accrétion est donc un processus aléatoire de probabilité :

$$P_{\text{acc}}(i) = R_{\text{acc}}(i) / \sum_j R_{\text{acc}}(j)$$

où la somme est effectuée sur toutes les espèces  $j$  de la phase gazeuse.

Le temps caractéristique d'accrétion  $\tau_{\text{acc}}$  est alors donné par :

$$\tau_{\text{acc}} = \left[ \sum_i R_{\text{acc}}(i) \right]^{-1}$$

Pour un grain de taille  $1000 \text{ \AA}$ ,  $\tau_{\text{acc}} \sim 10^5 \text{ s}$  pour une densité  $n = 10^4 \text{ cm}^{-3}$  et  $T = 10 \text{ K}$ .

### Mobilité

Les réactions considérées ici sont supposées intervenir entre des espèces occupant des sites de physisorption (les particules sont liées au grain par une liaison de Van der Waals, d'intensité faible comparée à la chimisorption qui fait intervenir les électrons de valence).

L'étude de la mobilité des espèces est importante dans la détermination des réactions qui pourront se produire à la surface du grain. En effet, deux espèces peu mobiles ont une très faible probabilité de réagir ensemble.

#### *Mobilité des atomes H et D*

Des études théoriques ont montré que la diffusion des atomes d'hydrogène à la surface des manteaux de glace est dominée par l'effet tunnel à  $10 \text{ K}$ . Le temps de traversée d'une barrière d'énergie  $E_m$  de largeur  $a$  par effet tunnel est :

$$\tau_{\text{tun}} = \nu_0^{-1} \exp \left[ \frac{2a}{\hbar} \sqrt{2mE_m} \right]$$

où  $\nu_0$  est la fréquence de vibration caractéristique de la particule ( $2 \times 10^{13}$  pour l'hydrogène). Ce temps caractéristique est compris entre  $10^{-12}$  et  $10^{-9} \text{ s}$  suivant les hypothèses (Hollenbach et al. 1971; Leitch-Devlin & Williams 1984; Tielens & Allamandola 1987). Ces temps caractéristiques de diffusion de H sur les glaces sont très petits devant le temps caractéristique de l'accrétion et la valeur précise du temps de diffusion n'a donc pas d'importance.

En effet, le temps requis pour un atome d'hydrogène pour visiter tous les sites de la surface du grain est :

$$\tau_{\text{vis}} = N \tau_{\text{tun}}$$

Pour un grain de  $1000 \text{ \AA}$ ,  $N \sim 10^6$  et  $\tau_{\text{vis}}$  est donc inférieur à  $10^{-3} \text{ s}$ . L'atome d'hydrogène pourra donc visiter un très grand nombre de fois tous les sites du grain pendant le temps caractéristique de l'accrétion.

#### *Mobilité des atomes plus lourds (N, C, O)*

Les atomes plus lourds ne peuvent pas franchir la barrière d'énergie par effet tunnel. Leur diffusion se fait par saut thermique avec un temps caractéristique :

$$\tau_{\text{saut}}^{-1} = \nu_0 \exp \left[ -\frac{E_{\text{dif}}}{kT_d} \right]$$

où  $T_d$  est la température du grain (10 K) et  $E_{\text{dif}}$  la barrière que doit franchir la particule pour diffuser d'un site à l'autre.  $\nu_0$  est la fréquence de vibration caractéristique de la particule, fixée à  $10^{12} \text{ s}^{-1}$ . Nous avons adopté  $E_{\text{dif}} \sim 0,3 E_b = 240 \text{ K}$  où  $E_b$  est l'énergie de liaison de la particule à la surface du grain, d'une valeur typique de 800 K pour des atomes sur un manteau de glaces (Tielens & Hagen 1982). Le temps caractéristique de saut est donc de l'ordre de  $10^{-2} \text{ s}$  pour ces atomes.

Le temps requis pour ces atomes pour visiter tous les  $N$  sites de la surface du grain est :

$$\tau_{\text{vis}} = N \tau_{\text{saut}}$$

$\tau_{\text{vis}}$  vaut donc de l'ordre de  $10^4 \text{ s}$  pour ces atomes. Encore une fois, ce temps est plus faible que le temps caractéristique de l'accrétion.

#### *Mobilité des molécules*

Les molécules et les radicaux ont une liaison plus forte sur la surface des grains (Tielens & Allamandola 1987), et restent donc immobiles à l'échelle de temps caractéristique de l'accrétion.

#### *Evaporation ?*

Une particule accrétée restera sur le grain pendant le temps caractéristique d'évaporation (désorption thermique) :

$$\tau_{\text{evap}} = \nu_0^{-1} \exp \left[ \frac{E_b}{kT_d} \right]$$

où les barrières d'énergie sont données par Tielens & Allamandola (1987). Le temps caractéristique de désorption de l'atome d'hydrogène est  $\sim 10^3 \text{ s}$ , c'est-à-dire beaucoup plus faible que le temps d'accrétion, mais plus long que  $\tau_{\text{vis}}$ . Un atome H diffusant peut donc visiter chaque site de physisorption au plus  $\eta = \tau_{\text{evap}}/\tau_{\text{vis}} = 10^6$  fois. Si aucun corréactant n'est disponible, l'atome d'hydrogène s'évapore avant la prochaine accrétion. Pour les atomes D, C, N et O, le temps d'évaporation est grand devant tous les autres temps caractéristiques à 10 K.

### **Probabilité de réaction**

La probabilité pour un atome d'hydrogène de réagir avec une espèce non radicalaire  $j$  située dans un site visité dépend de la valeur de la barrière d'activation de la réaction  $E_{a_j}$  :

$$P_{i,j} = \tau \nu_0 \exp \left[ -\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2mE_{a_j}} \right]$$

où  $\tau$  représente le temps passé dans le site (dans ce cas  $\tau_{\text{tun}}$ ). La probabilité pour un atome de réagir avec l'espèce  $j$  pendant le temps caractéristique d'évaporation est donc donnée par :

$$\Phi_{i,j} = \theta_j k P_{i,j}$$

où  $\theta_j$  est la concentration surfacique de l'espèce  $j$ , et  $k$  le nombre de fois que l'atome visite un site spécifique. Dans cette expression le temps caractéristique de diffusion n'intervient plus ( $P_{i,j}$  y est proportionnel tandis que  $k$  y est inversement proportionnel), et donc la probabilité de réaction est indépendante de la vitesse à laquelle la particule diffuse sur la surface.

Pour les réactions faisant intervenir des espèces radicalaires, la probabilité de réaction  $P_{i,j}$  vaut 1. La potentialité d'une réaction se réduit donc à la probabilité de trouver le coréactant :

$$\Phi_{i,j} = \theta_j$$

La probabilité de réaction d'une espèce  $i$  avec une espèce  $j$  doit ensuite être normalisée par rapport à toutes les réactions possibles pour l'espèce  $i$  :

$$R_{i,j} = \Phi_{i,j} / \sum_{l=1}^n \Phi_{i,l}$$

### Les réactions considérées

Ce modèle comporte 152 réactions au total, dont 134 associées à des hydrogénations et deutérations. Les réactions incluant le deutérium sont identiques à celles incluant l'hydrogène. La Table 8.3 recense les réactions d'hydrogénation et de deutération, ainsi que leurs barrières d'activation. Les barrières d'activation pour les réactions faisant intervenir le deutérium sont plus basses que celles des réactions d'hydrogénation associées car les corrections d'énergie de point zéro sont plus faibles, du fait du déplacement des modes harmoniques vers les plus basses fréquences (Woon 2002). La réduction de l'énergie d'activation pour les réactions faisant intervenir D est de l'ordre de 50 à 200 K.

Dans le cas où les réactions ont plusieurs produits possibles (e.g.  $\text{H} + \text{HDO}_2 \rightarrow \text{HDO} + \text{OH}$  ou  $\text{H}_2\text{O} + \text{OD}$ , R63), le produit deutéré est formé car les complexes les plus lourds ont plus d'états de transition ouverts énergétiquement et sont donc favorisés.

Les réactions qui n'impliquent pas d'atomes H ou D sont présentées dans la Table 8.4. Suivant les problèmes soulevés sur la formation de  $\text{CO}_2$  lors de la modélisation avant ajout du deutérium (i.e. l'abondance de l'oxygène atomique en phase gazeuse devait être significativement réduite pour éviter l'oxydation rapide de tout le CO, Keane 2002), nous avons adopté les réactions  $\text{OH}$  et  $\text{OD} + \text{CO}$  (R151 et R152) comme uniques routes de production de  $\text{CO}_2$ .

Réaction	H-Réactant	Produits	$E_a$ (K)	Réaction	D-Réactant	Produits	$E_a$ (K)
R1 :	H	H <sub>2</sub>	—	R2 :	D	D <sub>2</sub>	—
R3 :	D	HD	—				
R4 :	CO	HCO	1000	R5 :	CO	DCO	930 <sup>a</sup>
R6 :	HCO	H <sub>2</sub> CO	—	R7 :	HCO	HDCO	—
R8 :	DCO	HDCO	—	R9 :	DCO	D <sub>2</sub> CO	—
R10 :	H <sub>2</sub> CO	CH <sub>3</sub> O	1000	R11 :	H <sub>2</sub> CO	CH <sub>2</sub> DO	799 <sup>a</sup>
R12 :	HDCO	CH <sub>2</sub> DO	965 <sup>a</sup>	R13 :	HDCO	CHD <sub>2</sub> O	758 <sup>a</sup>
R14 :	D <sub>2</sub> CO	CHD <sub>2</sub> O	925 <sup>a</sup>	R15 :	D <sub>2</sub> CO	CD <sub>3</sub> O	713 <sup>a</sup>
R16 :	CH <sub>3</sub> O	CH <sub>3</sub> OH	—	R17 :	CH <sub>3</sub> O	CH <sub>3</sub> OD	—
R18 :	CH <sub>2</sub> DO	CH <sub>2</sub> DOH	—	R19 :	CH <sub>2</sub> DO	CH <sub>2</sub> DOD	—
R20 :	CHD <sub>2</sub> O	CHD <sub>2</sub> OH	—	R21 :	CHD <sub>2</sub> O	CHD <sub>2</sub> OD	—
R22 :	CD <sub>3</sub> O	CD <sub>3</sub> OH	—	R23 :	CD <sub>3</sub> O	CD <sub>3</sub> OD	—
R42 :	HCOO	HCOOH	—	R43 :	HCOO	HCOOD	—
R44 :	DCOO	DCOOH	—	R45 :	DCOO	DCOOD	—
R46 :	CN	HCN	—	R47 :	CN	DCN	—
R48 :	O	OH	—	R49 :	O	OD	—
R55 :	O <sub>2</sub>	HO <sub>2</sub>	1200	R56 :	O <sub>2</sub>	DO <sub>2</sub>	1200 <sup>b</sup>
R57 :	HO <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	—	R58 :	HO <sub>2</sub>	HDO <sub>2</sub>	—
R59 :	DO <sub>2</sub>	HDO <sub>2</sub>	—	R60 :	DO <sub>2</sub>	D <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	—
R61 :	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O+OH	1400	R62 :	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	HDO+OH	1400 <sup>b</sup>
R63 :	HDO <sub>2</sub>	HDO+OH	1400	R64 :	HDO <sub>2</sub>	D <sub>2</sub> O+OH	1400 <sup>b</sup>
R65 :	D <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	HDO+OD	1400	R66 :	D <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	D <sub>2</sub> O+OD	1400 <sup>b</sup>
R67 :	O <sub>3</sub>	O <sub>2</sub> +OH	450	R68 :	O <sub>3</sub>	O <sub>2</sub> +OD	450 <sup>b</sup>
R69 :	N	NH	—	R70 :	N	ND	—
R71 :	NH	NH <sub>2</sub>	—	R72 :	NH	NHD	—
R73 :	ND	NHD	—	R74 :	ND	ND <sub>2</sub>	—
R75 :	NH <sub>2</sub>	NH <sub>3</sub>	—	R76 :	NH <sub>2</sub>	NH <sub>2</sub> D	—
R77 :	NHD	NH <sub>2</sub> D	—	R78 :	NHD	NHD <sub>2</sub>	—
R79 :	ND <sub>2</sub>	NHD <sub>2</sub>	—	R80 :	ND <sub>2</sub>	ND <sub>3</sub>	—
R81 :	N <sub>2</sub> H	N <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	—	R82 :	N <sub>2</sub> H	N <sub>2</sub> HD	—
R83 :	NO	HNO	—	R84 :	NO	DNO	—
R85 :	NO <sub>2</sub>	HNO <sub>2</sub>	—	R86 :	NO <sub>2</sub>	DNO <sub>2</sub>	—
R87 :	NO <sub>3</sub>	HNO <sub>3</sub>	—	R88 :	NO <sub>3</sub>	DNO <sub>3</sub>	—
R89 :	NCO	HNCO	—	R90 :	NCO	DNCO	—
R91 :	HNCO	HNCHO	—	R92 :	HNCO	HNCDO	—
R93 :	DNCO	DNCHO	—	R94 :	DNCO	DNCDO	—
R95 :	HNCHO	H <sub>2</sub> NCHO	—	R96 :	HNCHO	HDNCHO	—
R97 :	HNCDO	H <sub>2</sub> NCDO	—	R98 :	HNCDO	HDNCDO	—
R99 :	DNCHO	HDNCHO	—	R100 :	DNCHO	D <sub>2</sub> NCHO	—
R101 :	DNCDO	HDNCDO	—	R102 :	DNCDO	D <sub>2</sub> NCDO	—
R109 :	C	CH	—	R110 :	C	CD	—
R111 :	CH	CH <sub>2</sub>	—	R112 :	CH	CHD	—
R113 :	CD	CHD	—	R114 :	CD	CD <sub>2</sub>	—
R115 :	CH <sub>2</sub>	CH <sub>3</sub>	—	R116 :	CH <sub>2</sub>	CH <sub>2</sub> D	—
R117 :	CHD	CH <sub>2</sub> D	—	R118 :	CHD	CHD <sub>2</sub>	—
R119 :	CD <sub>2</sub>	CHD <sub>2</sub>	—	R120 :	CD <sub>2</sub>	CD <sub>3</sub>	—
R121 :	CH <sub>3</sub>	CH <sub>4</sub>	—	R122 :	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub> D	—
R123 :	CH <sub>2</sub> D	CH <sub>3</sub> D	—	R124 :	CH <sub>2</sub> D	CH <sub>2</sub> D <sub>2</sub>	—
R125 :	CHD <sub>2</sub>	CH <sub>2</sub> D <sub>2</sub>	—	R126 :	CHD <sub>2</sub>	CHD <sub>3</sub>	—
R127 :	CD <sub>3</sub>	CHD <sub>3</sub>	—	R128 :	CD <sub>3</sub>	CD <sub>4</sub>	—
R129 :	N <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	N <sub>2</sub> H+H <sub>2</sub>	650	R130 :	N <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	N <sub>2</sub> H+HD	650 <sup>b</sup>
R131 :	N <sub>2</sub> HD	N <sub>2</sub> D+H <sub>2</sub>	650	R132 :	N <sub>2</sub> HD	N <sub>2</sub> D+HD	650 <sup>b</sup>
R133 :	N <sub>2</sub> D <sub>2</sub>	N <sub>2</sub> D+HD	650	R134 :	N <sub>2</sub> D <sub>2</sub>	N <sub>2</sub> D+D <sub>2</sub>	650 <sup>b</sup>

TAB. 8.3 – Réactions de surface impliquant H ou D. <sup>a</sup>Woon (2002). <sup>b</sup>Caselli et al. (2002a).

Réaction	Réactant	Produits	$E_a$ (K)	Réaction	Réactant	Produits	$E_a$ (K)
R135 :	$H_2 + OH$	$H_2O + H$	2600	R136 :	$HD + OH$	$H_2O + D$	2600
R137 :	$H_2 + OD$	$HDO + H$	2600				
R138 :	$O + O$	$O_2$	—	R139 :	$O + O_2$	$O_3$	—
R140 :	$O + HCO$	$HCOO$	—	R141 :	$O + DCO$	$DCOO$	—
R142 :	$O + NO$	$NO_2$	—	R143 :	$O + NO_2$	$NO_3$	—
R144 :	$O + CN$	$OCN$	—				
R145 :	$N + C$	$CN$	—	R146 :	$N + O$	$NO$	—
R147 :	$N + N$	$N_2$	—	R148 :	$N + NH$	$N_2H$	—
R149 :	$N + HCO$	$HNCO$	—	R150 :	$N + DCO$	$DNCO$	—
R151 :	$OH + CO$	$CO_2 + H$	80	R152 :	$OD + CO$	$CO_2 + D$	80

TAB. 8.4 – Réactions impliquant toutes les espèces excepté H et D.

## Méthodologie

La chimie présentée dans les paragraphes précédents est modélisée par une approche Monte-Carlo. Un atome ou une molécule du gaz est accrété aléatoirement sur le grain selon son abondance et sa vitesse moyenne. Si une particule n'est pas mobile (comme c'est le cas pour CO), elle est stockée dans un site de la surface choisi aléatoirement. Si ce site est occupé, l'ancien occupant du site est enseveli, et n'est plus disponible pour des réactions ultérieures. Si la particule accrétée est un atome et qu'il n'y a aucun coréactant sur la surface, l'atome est aléatoirement stocké dans un site de la surface, excepté dans le cas d'un atome H, qui diffusera/s'évaporerait toujours de la surface avant l'arrivée de la prochaine particule.

D'autre part, s'il y a des coréactants disponibles sur la surface pour réagir avec l'atome accrété, le partenaire de réaction est sélectionné aléatoirement selon sa barrière d'activation et sa concentration surfacique (*cf.* paragraphe 8.4.1). Le produit résultant de la réaction est stocké dans le site du coréactant. Quand OH ou OD est créé (*i.e.* R48, R49, R61 à R68), il réagit soit avec CO (R151 et R152) pour former  $CO_2$  et est ensuite stocké dans le site du CO correspondant, soit avec une molécule  $H_2$  pour former  $H_2O$  ou  $HDO$  (via R135, R136 ou R137), ce produit étant ensuite stocké aléatoirement dans un site. Tout atome H ou D créé par les réactions R135 à R137 et R151, R152 reste dans le système jusqu'à ce qu'il soit soit absorbé dans une réaction, soit stocké dans un site de surface s'il n'y a pas de coréactant (cas de D), soit évaporé (cas de H).

Le modèle numérique est basé sur un code de Monte Carlo. Pour la faible densité de  $n_o = 10^3 \text{ cm}^{-3}$ , au moins  $5 \times 10^7$  accréctions ont été calculées pour atteindre l'équilibre. Dans le cas des densités plus élevées, les concentrations surfaciques atteignent l'équilibre après  $7 \times 10^6$  accréctions. Nous avons dans ce cas calculé  $10^7$  accréctions, résultant typiquement en  $5 \times 10^6$  réactions.

## Paramètres gouvernant la chimie

Le nombre de facteurs pouvant influencer la chimie de surface est limité à trois : (1) la densité de noyaux d'hydrogène, (2) le rapport atomique D/H en phase gazeuse et (3) la cascade  $O_3$  (R67 et R135). La densité totale de noyaux d'hydrogène  $n_o$  varie de  $10^3$  à  $10^5 \text{ cm}^{-3}$ , densités auxquelles la chimie de surface est importante. La densité d'atomes H est fixée à  $1 \text{ cm}^{-3}$ . Comme la densité des autres espèces est donnée par leur abondance multipliée par  $n_o$ , le gaz passe de riche en hydrogène à pauvre en hydrogène quand  $n_o$  augmente. La densité de deutérium atomique en phase gazeuse varie entre 0.001 et  $1 \text{ cm}^{-3}$ . Comme indiqué précédemment, le rapport D/H atomique est contraint par l'abondance élémentaire du deutérium. Ainsi, seule une densité de  $10^5 \text{ cm}^{-3}$  pourra être étudiée dans le cas d'un rapport D/H atomique de 1.

Finalement, l'influence de la cascade  $O_3$  (R67 et R135) sur la chimie de surface est investiguée en détail. En effet, à basse température, le grain est partiellement couvert d'une couche d'hydrogène moléculaire qui peut prendre part à la chimie (Tielens & Hagen 1982). En particulier,  $H_2$  peut réagir avec OH ou OD, formé à la surface par réaction de  $O_3$  avec H ou D, pour conduire à  $H_2O$  ou HDO, libérant un atome d'hydrogène (d'où le terme de cascade). Cet atome devient ensuite disponible pour une réaction. Le rapport HD/ $H_2$  à la surface du grain reflète le rapport HD/ $H_2$  dans le gaz, modifié par la différence d'énergie de liaison, et vaut environ  $4 \times 10^{-3}$  (Tielens 1983). Les réactions avec HD seront donc négligeables.

La cascade sera donc successivement permise et interdite dans le modèle pour tester son influence. Elle est interdite en supposant que le produit H ou D créé par les réactions R135-R137 est libéré avec une énergie vibrationnelle suffisante pour quitter la surface du grain. En conséquence l'atome H ou D en question est évacué du système. De plus, nous avons fait varier la barrière d'activation de la réaction initiant la cascade (R67-R68) de la valeur traditionnelle de 450 K à des valeurs de 1000 K et 2000 K.

### 8.4.2 Résultats

Nous reportons ici les résultats de la modélisation, en étudiant l'influence des paramètres gouvernant la chimie. Nous nous focalisons sur les moyens de réduire le fractionnement de l'eau par rapport à celui des autres espèces.

## Chimie de l'hydrogène

### *Tendances générales avec la cascade $O_3$*

La Figure 8.2a présente les abondances relatives des principales molécules hydrogénées sur les grains. A basse densité ( $10^3 \text{ cm}^{-3}$ ), l'hydrogène atomique est l'espèce la plus abondante en phase gazeuse, donnant naissance à un environnement réducteur sur le grain. Les atomes H convertissent tous les atomes O et les molécules  $O_2$  en eau tandis que les molécules de CO sont rapidement réduites en méthanol. Quand la densité augmente à  $10^4 \text{ cm}^{-3}$ , l'environnement reste suffisamment réducteur pour que les abondances d'eau et de méthanol restent élevées.

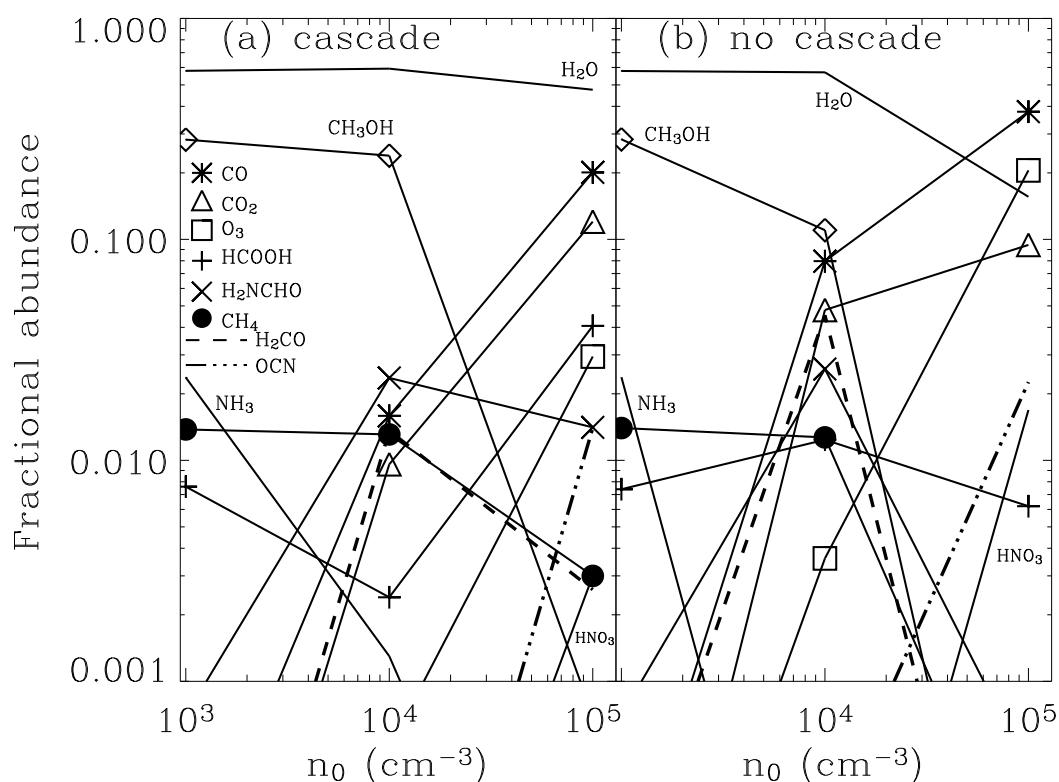


FIG. 8.2 – Abondance relative des principales espèces hydrogénées sur les grains en fonction de la densité totale de noyaux d'hydrogène, pour un rapport D/H atomique de 0,01 (la somme des abondances de tous les constituants du manteau vaut 1 pour chaque densité). (a) Chimie faisant intervenir la cascade. (b) Modèle où la cascade est interdite (voir texte).

A densité  $10^5 \text{ cm}^{-3}$ , l'eau reste abondante du fait des réactions de la cascade R67 et R135. L'atome d'hydrogène produit par la réaction R135 est disponible pour une nouvelle réaction et réagit préférentiellement avec  $\text{O}_3$  (R67) puisque sa barrière d'activation est la plus faible de tous les coréactants possibles. Ceci produit alors  $\text{O}_2$  et  $\text{OH}$  qui peut de nouveau réagir avec  $\text{H}_2$ . C'est ce processus que l'on appelle la « cascade » puisqu'un atome d'hydrogène est continuellement recyclé dans le système. La cascade peut seulement être stoppée si l'atome d'hydrogène généré par R135 est absorbé par un réactant qui n'a pas d'énergie d'activation, ou par une molécule dont la concentration surfacique est suffisante pour être compétitive avec la faible barrière de la réaction R67. La majeure partie de l'hydrogène présent dans le système à cette haute densité provient de  $\text{H}_2$ . Cependant, son abondance n'est pas suffisante pour réduire la totalité des molécules  $\text{O}_3$  et  $\text{CO}$ . Dans ces conditions, la concentration de  $\text{O}_3$  augmente par rapport à sa valeur à plus faible densité. L'abondance de  $\text{CO}$  augmente encore plus que celle de  $\text{O}_3$  puisque qu'il est sélectivement moins réduit que  $\text{O}_3$  du fait de la plus grande énergie d'activation. Ceci



conduit à la formation de moins de formaldéhyde et de méthanol, et CO est préférentiellement converti en CO<sub>2</sub> par réaction avec OH.

#### *Effets produits par l'interdiction de la cascade*

Dans le but d'étudier l'impact de la cascade O<sub>3</sub> sur la chimie à la surface des grains, nous avons stoppé son effet en interdisant le recyclage de l'atome H libéré par R135-R137 dans le système. En effet, les énergies impliquées dans la réaction exothermique R135 sont mal connues, et il est possible que l'atome d'hydrogène soit formé avec une énergie suffisamment importante pour qu'il s'évapore une fois formé. Il est donc important d'étudier aussi le modèle dans lequel la cascade est inhibée.

La Figure 8.2b présente les résultats de la chimie dans le cas où la cascade est interdite. A basse densité, la composition du manteau est essentiellement identique à celle en présence de cascade, puisque la chimie est dominée par les atomes d'hydrogène accrétés. Des différences apparaissent à haute densité puisque moins d'hydrogène est injecté dans le système quand la cascade est coupée. Les espèces oxydées telles que CO, CO<sub>2</sub> et O<sub>3</sub> s'en retrouvent favorisées par rapport aux espèces hydrogénées. A la densité de 10<sup>5</sup> cm<sup>-3</sup>, CO<sub>2</sub> est cependant moins abondant que dans le cas de la chimie avec cascade, du fait du manque de molécules OH pour la réaction CO+OH.

Quand la cascade est coupée, l'abondance de O<sub>3</sub> augmente et cette espèce devient la plus compétitive pour les réactions avec l'hydrogène. Aux densités intermédiaires, un radical HCO formé sera donc préférentiellement oxydé en HCOOH (plutôt que réduit en formaldéhyde). Toutefois il n'y aura pas suffisamment d'hydrogène pour former HCO à haute densité, expliquant ainsi la baisse de l'abondance de HCOOH.

## **Chimie du deutérium**

### *Tendances générales avec la cascade O<sub>3</sub>*

La Figure 8.3 présente les principaux réservoirs de deutérium dans le manteau des grains. Les ordonnées présentent des concentrations relatives en deutérium, c'est-à-dire la concentration de l'espèce étudiée divisée par l'abondance totale de deutérium sur le grain. Ainsi, le fractionnement des différentes molécules peut être étudié en comparant le comportement des molécules deutérées de la Figure 8.3 à celui de leur isotope hydrogéné en Figure 8.2.

A basse densité, quand la concentration d'ozone sur le grain est faible du fait de la surabondance d'atomes d'hydrogène, l'eau se forme principalement à partir des atomes d'hydrogène accrétés sur le grain, et le rapport HDO/H<sub>2</sub>O reflète alors directement le rapport D/H atomique en phase gazeuse. Le fractionnement de CH<sub>2</sub>DOH vaut trois fois le rapport D/H atomique dans le gaz puisqu'il y a trois possibilités de deutérer le groupe méthyl. Cette espèce est donc le réservoir dominant de deutérium sur le grain. Comme OH réagit principalement avec H<sub>2</sub> pour former l'eau, la deutérotation de l'eau ne peut intervenir qu'à la première étape (O+H) et donc le fractionnement de l'eau suit le rapport D/H. Basé sur ces arguments strictement statistiques, le

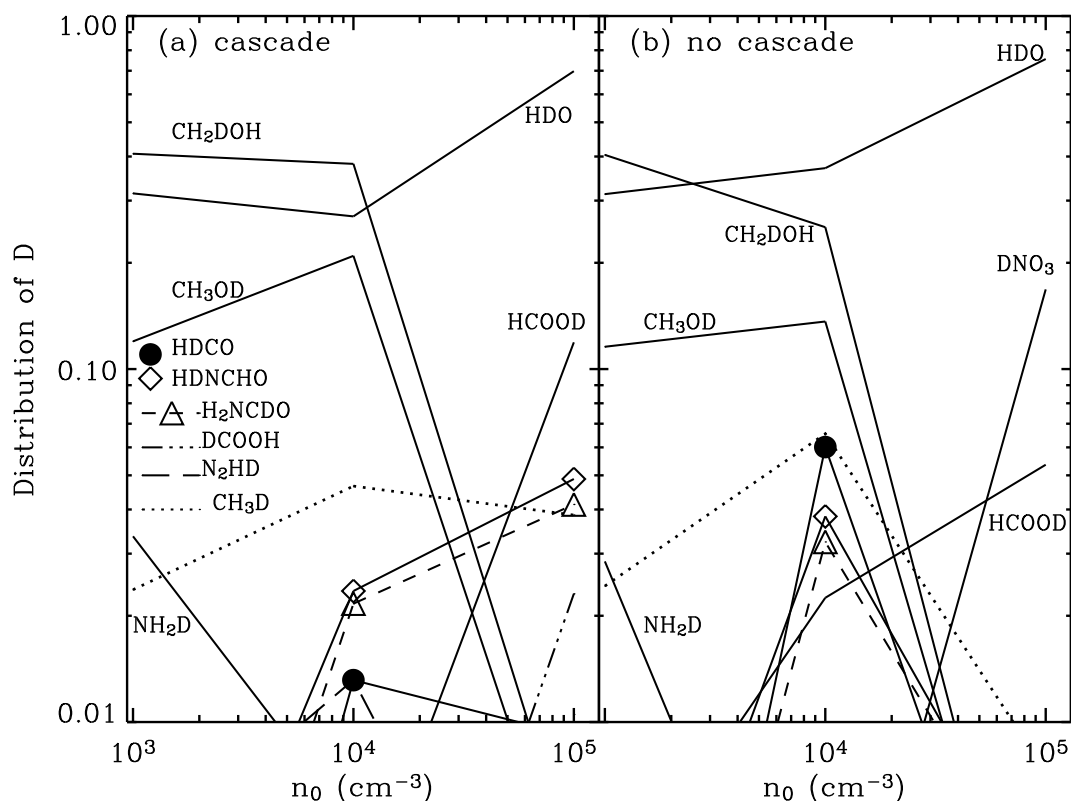


FIG. 8.3 – Principaux réservoirs du deutérium sur les grains en fonction de la densité, pour une valeur de  $D/H = 0,01$ . Les abondances sont exprimées relativement à l'abondance totale de l'élément deutérium. Ainsi dans le cas a) à  $10^3 \text{ cm}^{-3}$ ,  $\text{CH}_2\text{DOH}$  renferme 40% du deutérium présent sur les grains.

fractionnement de  $\text{CH}_2\text{DOH}$  doit donc être 3 fois celui de  $\text{HDO}$ . Cependant, comme la barrière d'activation de la réaction avec  $\text{O}_3$  est plus faible que celle de la réaction avec  $\text{CO}$ , les atomes de deutérium tendent à réagir plus avec l'ozone relativement aux atomes d'hydrogène (comme ils sont plus massifs, ils tendent à être impliqués dans les réactions à plus basse énergie d'activation). Donc on s'attend à ce que le rapport entre les deux fractionnements  $f(\text{CH}_2\text{DOH})/f(\text{HDO})$  soit légèrement inférieur à 3. En effet, ce rapport vaut  $\sim 8/3$ , d'après la comparaison entre les Figures 8.2 et 8.3.

Quand la densité augmente, la concentration d'ozone sur la surface augmente et l'effet de la cascade devient plus important. L'ozone étant principalement converti en  $\text{H}_2\text{O}$  par réaction avec les atomes d'hydrogène produits par la cascade, il reste d'autant plus d'atomes de deutérium disponibles pour incorporation dans les autres molécules, surtout par des réactions impliquant des radicaux. L'incorporation du deutérium dans  $\text{CH}_3\text{OD}$  est maximum pour la densité intermédiaire. En effet, quand la densité passe de  $10^3$  à  $10^4 \text{ cm}^{-3}$ , un plus grand nombre de

coréactants sont disponibles pour réagir avec l'hydrogène. Les réactions avec CO et O<sub>3</sub>, abondants sur la surface deviennent donc compétitives pour H par rapport aux réactions avec les radicaux CH<sub>3</sub>O. Par contre, le deutérium, plus lourd, réagira toujours préférentiellement avec les radicaux. Quand la densité augmente encore, le CO est de moins en moins réduit, et donc la concentration du méthanol chute. Par contre, la concentration des espèces très oxydées produites par réaction de D avec un radical, telles que HCOOD, augmente.

*Effets produits par l'interdiction de la cascade*

Les résultats obtenus dans le cas où la cascade est inhibée sont présentés en Figure 8.3b. A faible densité, la cascade joue un rôle mineur et la distribution du deutérium dans les différentes molécules est très similaire au cas de la cascade. Cependant, quand la densité augmente, les résultats entre les deux modèles commencent à dévier. Dans ce cas, HDO est le principal réservoir de deutérium, et la contribution du méthanol deutéré chute, de paire avec l'abondance de l'isotope principal CH<sub>3</sub>OH. En effet, l'ozone n'est plus consommé par les réactions avec H, et les atomes de deutérium sont alors plus absorbés dans les réactions conduisant à la formation de l'eau que dans le cas de la cascade. A haute densité, l'excès d'ozone est préférentiellement absorbé dans des réactions avec l'azote, et DNO<sub>3</sub> devient un réservoir important de deutérium.

Les rapports de fractionnement HDO/H<sub>2</sub>O calculés par les deux modèles sont présentés dans la Figure 8.4. A basse densité, la formation de l'eau est dominée par les atomes H et D accrétés du gaz et le rapport HDO/H<sub>2</sub>O est donc fixé par les taux d'accrétion relatifs de ces deux atomes, modifiés par les barrières de réaction impliquées (la probabilité de réaction dépend exponentiellement de la masse des particules). Par conséquent, si D et H peuvent choisir entre les mêmes coréactants, D choisira préférentiellement une réaction à barrière plus faible que H. Comme la réaction avec l'ozone a la barrière la plus faible, le deutérium est préférentiellement incorporé dans l'eau, tandis qu'une partie des atomes d'hydrogène accrétés sont absorbés dans le cycle N<sub>2</sub>H-N<sub>2</sub>H<sub>2</sub> et transformés en H<sub>2</sub> (R81 et R129, qui sont moins compétitives pour D puisque l'énergie d'activation est plus haute). Le fractionnement de l'eau est dans ces conditions plus élevé que le rapport D/H accrété sur le grain. Cet effet est néanmoins faible, de l'ordre d'un facteur 1.4 (notons que le rapport D/H indiqué en Figure 8.4 est le rapport en phase gazeuse, et qu'il doit donc être corrigé du rapport  $1/\sqrt{2}$  entre les vitesses thermiques de D et H pour obtenir le rapport D/H accrété sur le grain).

Quand la densité augmente, le rôle des atomes H accrétés diminue, et l'abondance d'ozone augmente à la surface. Parallèlement, le cycle N<sub>2</sub>H-N<sub>2</sub>H<sub>2</sub> perd de l'importance puisque moins d'hydrogène est disponible pour initier l'étape N+H (R69) qui conduit à ce cycle. Dans le cas de la cascade, ceci conduit à une chute du rapport HDO/H<sub>2</sub>O, due au H<sub>2</sub>O additionnel formé à partir des atomes d'hydrogène provenant de H<sub>2</sub>. Cet effet peut atteindre un facteur 5 aux hautes densités calculées ici. Dans le cas où la cascade est inhibée, le rapport HDO/H<sub>2</sub>O devient alors égal au rapport D/H des atomes arrivant sur le grain, puisqu'à la fois les atomes D et H réagissent avec l'ozone pour former de l'eau (le cycle N<sub>2</sub>H-N<sub>2</sub>H<sub>2</sub> n'absorbe plus de H).

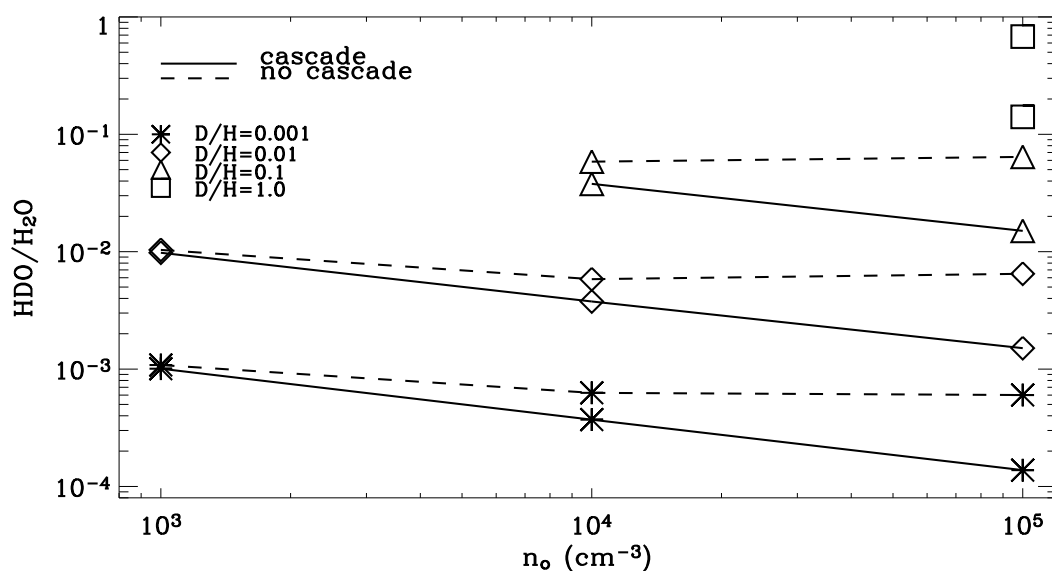


FIG. 8.4 – Fractionnement de l'eau en fonction de la densité, pour différents rapports D/H en phase gazeuse, dans les cas des deux modèles (avec ou sans cascade). L'énergie d'activation de la réaction avec O<sub>3</sub> est fixée à 450 K.

### Influence de la valeur de la barrière d'activation de réaction avec O<sub>3</sub>

#### *Comportement général*

Nous avons étudié l'influence de la valeur de l'énergie d'activation de la réaction R67, qui est mal connue, en calculant les résultats du modèle avec cascade pour les deux nouvelles valeurs 1000 et 2000 K. La composition des glaces pour un rapport D/H de 0,01 dans le cadre de ces deux modèles est présentée dans la Figure 8.5, et doit être comparée à la Figure 8.2a (450 K).

A faible densité, la composition des glaces est similaire pour toutes les valeurs de l'énergie d'activation, l'environnement étant toujours suffisamment réducteur pour franchir les barrières et former de l'eau. Quand la densité augmente, plus l'énergie d'activation est haute, plus l'abondance de l'eau chute rapidement. Ceci reflète la réticence des atomes H (moins abondants) à réagir avec l'ozone par rapport aux autres coréactants possibles (CO, H<sub>2</sub>CO,...). L'abondance de l'ozone augmente donc dans le manteau. CO<sub>2</sub> est de même moins favorisé quand la barrière augmente, car sa formation requiert la formation de OH, qui diminue puisque la réaction R67

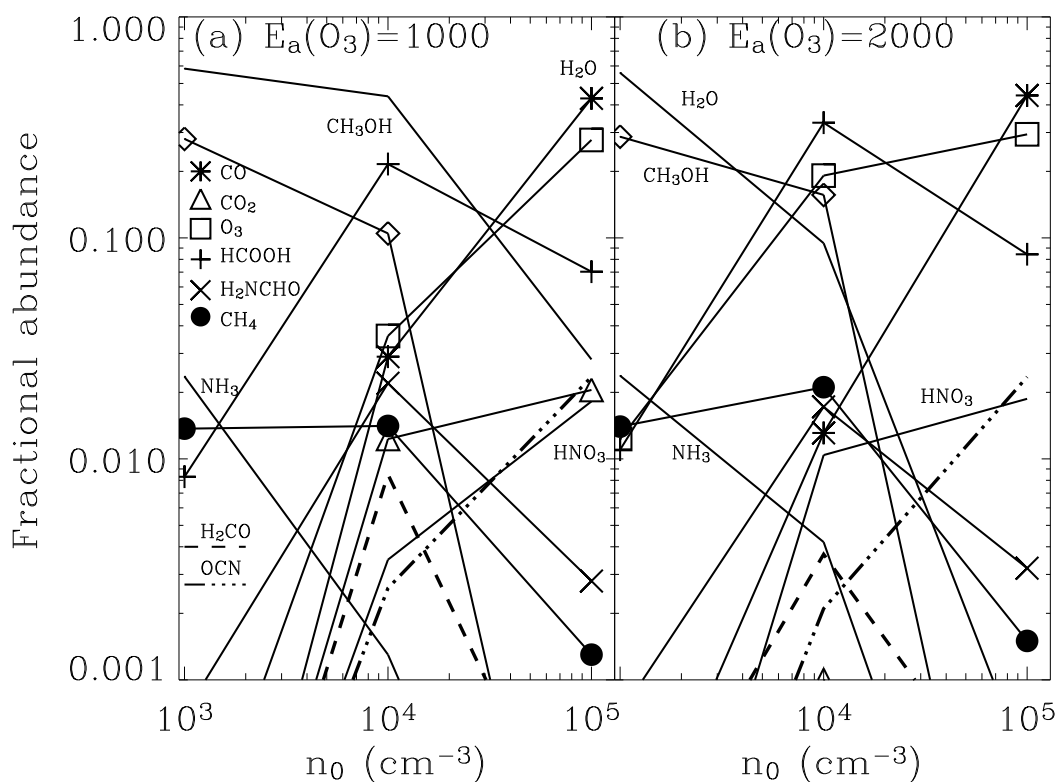


FIG. 8.5 – Abondances relatives des principaux constituants hydrogénés des glaces en fonction de la densité, dans le cadre du modèle avec cascade, pour des barrières d'activation de la réaction  $O_3+H$  ou  $D$  de 1000 et 2000 K.

est moins compétitive. L'abondance de  $CO$ , par contre, augmente.

Notons l'augmentation spectaculaire de l'abondance de  $HCOOH$  quand la barrière de la réaction R67 augmente, associée à la diminution de l'abondance de  $H_2CO$ . En effet, plus la barrière de la réaction de l'ozone avec l'hydrogène atomique augmente, plus l'abondance d'oxygène moléculaire disponible sur la surface diminue. Par conséquent, à la densité de  $10^4 \text{ cm}^{-3}$ , la plupart de l'oxygène atomique accrété réagit avec  $HCO$  (formé par réaction  $H+CO$ ) et se retrouve donc dans  $HCOOH$ . Ainsi, l'abondance de l'acide formique augmente avec l'énergie de la barrière de la réaction  $O_3+H$ , et est l'espèce la plus abondante dans le manteau des grains pour la valeur de la barrière de 2000 K. A haute densité, les processus d'hydrogénation deviennent rares, et  $CO$  et  $O_3$  dominent la composition du manteau.

#### *Effet sur la chimie du deutérium*

La Figure 8.6 présente l'influence de la valeur de la barrière d'activation de R67 sur la deutération. Comme attendu, la quantité de deutérium piégé sous forme  $HDO$  diminue quand la barrière augmente. Quand la densité augmente, l'acide formique devient le principal composant

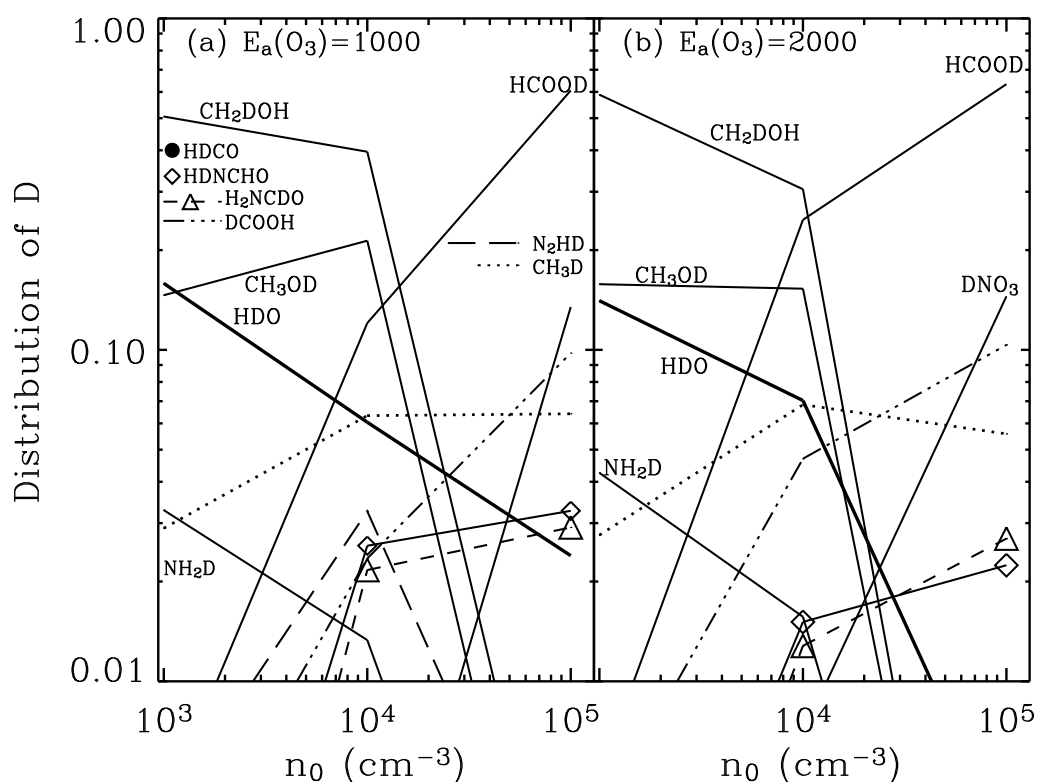


FIG. 8.6 – Principaux réservoirs du deutérium sur les grains en fonction de la densité, pour une valeur de  $D/H=0,01$ , dans le cadre du modèle avec cascade, pour des valeurs de la barrière de réaction avec  $O_3$  de 1000 et 2000 K.

hydrogéné des grains et domine aussi le réservoir de deutérium.

### 8.4.3 Implications astrophysiques

Le fractionnement de l'eau a été déterminé dans plusieurs types d'environnements. La Table 8.5 présente les fractionnements de plusieurs molécules en direction de comètes, d'Orion et d'IRAS16293. Dans tous les cas, le fractionnement de l'eau est plus faible que celui des autres molécules, d'un facteur compris entre 10 et 100. Cependant, des précautions particulières doivent être prises pour les régions de formation d'étoiles massives puisque des observations interférométriques ont révélé que ces régions sont très complexes, constituées de plusieurs composantes qui ont certainement des histoires chimiques et physiques différentes. Ceci est en particulier le cas pour l'eau et le cyanure d'hydrogène dans Orion. En effet, les molécules azotées sont surtout concentrées dans le Cœur Chaud d'Orion tandis que les molécules oxygénées sont plutôt dans le Compact Ridge. Même les deux molécules oxygénées HDO et  $CH_3OH$  semblent avoir une distribution différente dans Orion, avec une différence de  $6''$  entre les positions de pic des

TAB. 8.5 – Comparaison du fractionnement en deutérium de l’eau dans divers environnements.

Molécule	Comètes	IRAS 16293–2422	Cœur Chaud d’Orion
HDO/H <sub>2</sub> O	$3 \times 10^{-4}$ (a,b,c)	0.03 (e)	$(5-20) \times 10^{-4}$ (j)
DCN/HCN	$2 \times 10^{-3}$ (d)	0.01 (f)	$(1-5) \times 10^{-3}$ (k,l)
HDCO/H <sub>2</sub> CO		0.15 (g)	0.14 (m)
D <sub>2</sub> CO/H <sub>2</sub> CO	-	0.05 (h)	$3 \times 10^{-3}$ (m)
CH <sub>2</sub> DOH/CH <sub>3</sub> OH	-	0.37 (i)	0.04 (n)
NH <sub>2</sub> D/NH <sub>3</sub>	-	0.1 (f)	$3 \times 10^{-3}$ (o)

(a) Balsiger et al. (1995)

(b) Bockelée-Morvan et al. (1998)

(c) Meier et al. (1998b)

(d) Meier et al. (1998a)

(e) Chapitre 6 de cette thèse.

(f) van Dishoeck et al. (1995).

(g) Loinard et al. (2000)

(h) Loinard et al. (2000)

(i) Parise et al. (2002b, 2004a) et chapitre 3 de cette thèse.

(j) Gensheimer et al. (1996)

(k) Schilke et al. (1992)

(l) Mangum et al. (1991)

(m) Turner (1990). Emission provenant du Compact Ridge, et non du Cœur Chaud.

(n) Jacq et al. (1993)

(o) Walmsley et al. (1987). L’étude de Turner (1990) rediscute néanmoins l’origine de l’émission de NH<sub>2</sub>D comme provenant du Compact Ridge.

deux molécules (Jacq et al. 1990). La distribution relative de ces molécules dans la protoétoile de faible masse IRAS 16293 n’est pas connue, mais pourrait être différente aussi. Malgré ces incertitudes, le faible degré de deutération de l’eau relativement aux autres molécules semble être caractéristique, et doit refléter l’histoire chimique de ces régions.

Dans cette étude, nous avons investigué le rôle possible de la chimie active sur les grains dans le fractionnement sélectif de l’eau. Nos résultats montrent que l’eau peut être beaucoup moins fractionnée que les autres molécules du fait de la présence de la cascade. La présence de molécules H<sub>2</sub> à la surface des grains peut convertir une large quantité d’ozone préférentiellement en eau. Comme HD est beaucoup moins abondant que H<sub>2</sub>, le fractionnement de l’eau formée ainsi est faible. La plus grande différence de deutération possible de cette façon entre CH<sub>2</sub>DOH et HDO est de l’ordre de 20 à haute densité. Notons qu’une partie de cette différence résulte des trois possibilités de deutérer le groupe méthyl du méthanol.

Un aspect important menant à un fractionnement bas de l’eau sur les grains est le rôle de l’hydrogène moléculaire présent sur la surface. Ce H<sub>2</sub> adsorbé sur le grain peut débiter une cascade convertissant tout l’ozone accumulé sur le grain en eau. Ceci dépend néanmoins de l’hypothèse que l’atome H libéré par la réaction  $H_2 + OH \rightarrow H_2O + H$  reste sur la surface et soit disponible pour une nouvelle réaction. De nouveaux calculs de mécanique quantique sur la fraction d’énergie se dissipant dans le mouvement de translation de H dans cette réaction ainsi que des calculs dynamiques sur le devenir de cet atome d’hydrogène chaud sur le grain devraient permettre de confirmer ou d’infirmier cette hypothèse. Notons qu’une conséquence importante de cette réaction impliquant H<sub>2</sub> est que la chimie sur les grains ne forme pas de D<sub>2</sub>O.

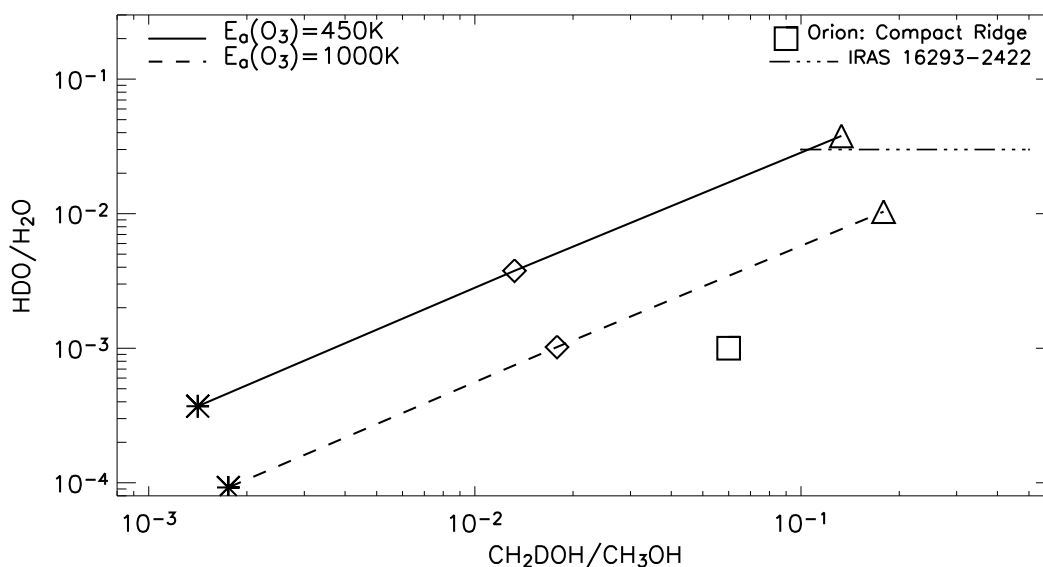


FIG. 8.7 – Fractionnement de l’eau en fonction de celui du méthanol, pour une densité  $n_o = 10^4 \text{ cm}^{-3}$  pour différentes valeurs de l’énergie d’activation de la réaction avec  $O_3$ , dans le cadre du modèle avec cascade.

La chimie sur les grains peut aussi conduire à un fractionnement d’autant plus faible de l’eau relativement aux autres espèces que l’énergie d’activation de la réaction de H avec  $O_3$  est haute. Dans ce cas, l’atome de deutérium réagira avec d’autres coréactants dont l’énergie d’activation et/ou l’abondance sont plus favorables. Ceci est illustré dans la Figure 8.7 pour une barrière de 1000 K. Pour cette valeur de barrière, D est préférentiellement absorbé dans les réactions conduisant à la formation du méthanol plutôt que de l’eau. Nous avons reporté sur la Figure 8.7 les observations en direction de IRAS 16293 ainsi que du Compact Ridge d’Orion. Notre modèle est en accord avec les fractionnements de l’eau et du méthanol observés dans IRAS 16293, pour une valeur basse de la barrière d’activation de la réaction avec l’ozone, et une valeur du rapport D/H atomique de l’ordre de 0,1. Les observations d’Orion semblent nécessiter une valeur plus élevée pour la barrière d’activation. Cependant, dans ce cas de figure, les manteaux de glace calculés par le modèle ne sont pas en bon accord avec les observations de glaces interstellaires. En effet, le modèle prédit que l’abondance d’acide formique est dans ce cas bien plus haut (comparable à  $H_2O$ ) que ce qui est observé ( $HCOOH/H_2O = 0,03$ , Keane 2002).

Le fractionnement de l’eau observé dans les Cœurs Chauds pourrait être affecté par d’autres processus. En particulier, dans le gaz chaud, tout atome d’oxygène qui n’a pas accrété sur les grains peut être converti en eau à des températures supérieures à 250 K. Puisque le rapport



HD/H<sub>2</sub> dans la phase gazeuse est faible, ceci aurait pour effet de diluer le fractionnement de l'eau provenant de l'évaporation des grains. Si la température est très élevée ( $\geq 300$  K), l'échange isotopique de l'eau deutérée évaporée des grains avec le principal réservoir d'hydrogène peut aussi être important. Cependant, aucun de ces deux processus ne semble jouer un rôle dans le Compact Ridge d'Orion ou dans la protoétoile IRAS 16293, puisque la température du gaz y est plus faible ( $\sim 100$  K).

Un autre processus qui pourrait affecter le fractionnement de l'eau dans les Cœurs Chauds est la destruction. En effet, comme l'a suggéré Charnley et al. (1997), HDO est préférentiellement détruit par rapport à H<sub>2</sub>O dans le gaz chaud sur un temps caractéristique de  $10^4$  ans du fait d'un transfert de proton suivi d'une recombinaison électronique (processus similaire à celui invoqué pour CH<sub>3</sub>OD au chapitre 3). Il en est de même pour CH<sub>3</sub>OD, relativement à CH<sub>2</sub>DOH. Le fractionnement observé CH<sub>2</sub>DOH/CH<sub>3</sub>OD (compris entre 1 et 4) dans le Compact Ridge est comparable avec les prédictions statistiques, et donc ce processus semble avoir eu moins d'effet dans cet environnement. Au contraire, ces réactions semblent avoir eu un grand rôle dans IRAS 16293 où le rapport observé est CH<sub>2</sub>DOH/CH<sub>3</sub>OD  $\sim 15$ . L'eau et le méthanol sont détruits avec des échelles de temps caractéristique comparables (les réactions de destruction étant similaires). Ainsi, ce scénario impliquerait que l'abondance de l'eau et du méthanol évaporés des grains soit initialement bien plus élevée que celle observée dans le gaz. Ceci ne semble pas irraisonnable pour le cas de IRAS 16293 où l'abondance de l'eau a été mesurée à  $3 \times 10^{-6}$  (chapitre 6), abondance faible devant l'abondance de l'eau dans les glaces de protoétoiles de faible masse ( $5 \times 10^{-5}$ , Boogert et al. 2004). Mais ceci pose un problème dans le cas du Compact Ridge où ces deux espèces sont déjà observées en grande abondance.

## 8.5 Conclusion

Nous avons développé un code de Monte Carlo pour modéliser la chimie à la surface des grains. Nous avons étudié tout particulièrement l'effet des réactions pouvant convertir en cascade l'ozone présent sur le grain en eau. Ces réactions ont pour effet de réduire le fractionnement de l'eau par rapport au fractionnement des autres molécules, en particulier du méthanol. Ce modèle reproduit avec succès les fractionnements observés pour l'eau et le méthanol en direction de IRAS 16293, mais de nouvelles études quantiques des réactions intervenant sur les grains, et notamment du devenir de l'excès d'énergie produit dans la réaction OH + H<sub>2</sub>, sont requises pour valider ces résultats.

# Conclusions et Perspectives



# Chapitre 9

## Conclusions et Perspectives

### Sommaire

---

<b>9.1 Synthèse des résultats de cette thèse . . . . .</b>	<b>179</b>
9.1.1 La deutération du méthanol . . . . .	180
9.1.2 La deutération de l'eau . . . . .	181
9.1.3 Modélisation . . . . .	181
<b>9.2 L'état des connaissances en 2004 . . . . .</b>	<b>182</b>
<b>9.3 Perspectives . . . . .</b>	<b>184</b>
9.3.1 Observations interférométriques du méthanol deutéré . . . . .	184
9.3.2 L'énigme de la deutération de l'eau . . . . .	185
9.3.3 Bilan des molécules deutérées par un relevé spectral non biaisé . . . . .	185
9.3.4 Observations futures . . . . .	186
9.3.5 La deutération : une sonde de la formation stellaire, des nuages froids aux systèmes planétaires et aux comètes. . . . .	186

---

Nous présentons, dans une première partie, la synthèse des travaux effectués pendant cette thèse, en les replaçant dans le contexte de la recherche internationale. Plusieurs équipes ayant travaillé sur ce sujet en parallèle pendant ces trois dernières années, de grandes interactions ont pu avoir lieu entre observations et modèles, permettant d'importantes avancées dans la compréhension de la deutération. Nous présentons dans la deuxième partie le point sur l'état actuel des connaissances sur les processus de deutération. Enfin, la troisième partie présente les perspectives de mon travail de thèse.

### 9.1 Synthèse des résultats de cette thèse

Cette thèse débouche sur deux résultats *observationnels* principaux :

- La découverte d'un fractionnement important du méthanol dans les protoétoiles de faible masse.
- La découverte d'une deutération sélective du formaldéhyde et du méthanol par rapport à l'eau dans ces environnements.

Ces deux résultats ont été suivis par une *modélisation de la chimie sur les grains* pour expliquer les fractionnements observés.

### 9.1.1 La deutération du méthanol

Nous avons détecté pour la première fois dans le milieu interstellaire les deux molécules deutérées CHD<sub>2</sub>OH et CD<sub>3</sub>OH.

Nous avons mesuré le fractionnement des espèces simplement deutérées (CH<sub>2</sub>DOH et CH<sub>3</sub>OD), doublement deutérée (CHD<sub>2</sub>OH) et triplement deutérée (CD<sub>3</sub>OH) du méthanol dans la protoétoile IRAS16293–2422 (chapitre 3).

Cette étude multi-isotopes a permis de contraindre fortement les modèles de chimie. En effet, si les différents isotopes sont formés sur les grains simultanément, leurs rapports isotopiques sont fixés et dépendent seulement du rapport D/H *atomique* en phase gazeuse au moment de la formation des manteaux de glace. Deux résultats principaux découlent de cette comparaison avec les modèles :

- Les fractionnements des isotopes CH<sub>2</sub>DOH, CHD<sub>2</sub>OH et CD<sub>3</sub>OH sont en accord avec un scénario de formation sur les grains, et requièrent un rapport D/H *atomique* entre 0,1 et 0,3. Au moment de la détection de CHD<sub>2</sub>OH, aucun modèle de chimie en phase gazeuse ne prédisait un tel fractionnement atomique. Ces résultats ont motivé à la fois une réforme des modèles de chimie en phase gazeuse, d'autres recherches observationnelles et des travaux de laboratoire pour déterminer les fréquences rotationnelles de D<sub>2</sub>H<sup>+</sup>. La contrainte sur le rapport D/H atomique a été prise en compte dans un nouveau modèle (Roberts et al. 2003), qui, après inclusion de D<sub>2</sub>H<sup>+</sup> et D<sub>3</sub><sup>+</sup> comme précurseurs de la deutération (au même titre que H<sub>2</sub>D<sup>+</sup>), a pu reproduire de tels fractionnements. Au point de vue observationnel, la recherche de H<sub>2</sub>D<sup>+</sup> s'est intensifiée. Observée jusqu'alors seulement dans la protoétoile de faible masse NGC1333/IRAS4A (Stark et al. 1999), elle a été détectée en grande abondance dans le cœur prestellaire L1544 (Caselli et al. 2003) où elle est certainement l'ion principal, et même dans des disques protoplanétaires (Ceccarelli et al. 2004), où elle permet de sonder le degré d'ionisation. Après la publication de la fréquence de sa transition fondamentale *para* mesurée en laboratoire à 691,66044 GHz par Hirao & Amano (2003), et plusieurs mois de recherche, D<sub>2</sub>H<sup>+</sup> a été détectée dans le cœur prestellaire 16293E (Vastel et al. 2004), confirmant l'importance de cette molécule dans les processus de deutération et validant ainsi le modèle de Roberts et al. (2003).

- L'isotope CH<sub>3</sub>OD semble sous-abondant par rapport aux prédictions du modèle de chimie sur les grains. Nous avons suggéré que CH<sub>3</sub>OD est détruit plus vite que CH<sub>2</sub>DOH dans le gaz chaud, par suite de réactions de protonation de l'oxygène et recombinaison électronique qui le convertissent en CH<sub>3</sub>OH. Cette hypothèse a été confirmée théoriquement par Osamura

et al. (2004), qui a montré qu'aucun échange intramoléculaire ne peut transformer  $\text{CH}_3\text{OD}$  en  $\text{CH}_2\text{DOH}$ , et que ces deux espèces sont donc des entités différentes, qui peuvent avoir des durées de vie différentes dans le gaz. L'incorporation des réactions de protonation aux modèles de phase gazeuse ont permis d'expliquer qualitativement les observations de méthanol deutéré dans IRAS 16293 (Osamura et al. 2004).

Un relevé de l'émission du méthanol et du formaldéhyde sur un échantillon de protoétoiles de faible masse (chapitre 4) a confirmé qu'IRAS16293–2422 n'est pas une exception en ce qui concerne la deutération, et que certainement toutes les protoétoiles de faible masse présentent une forte deutération de ces deux molécules. Les résultats principaux découlant de l'analyse du méthanol deutéré sur IRAS 16293–2422 sont confirmés par cette étude multi-sources.

### 9.1.2 La deutération de l'eau

Cette thèse a observationnellement montré que l'eau est moins deutérée que le formaldéhyde et le méthanol.

Une première étude observationnelle en phase solide a permis de montrer que les glaces d'eau formant le manteau des grains de poussière autour de protoétoiles de faible masse de Classe I sont faiblement fractionnées (chapitre 5). Seules les glaces des protoétoiles massives avaient été sondées auparavant (Dartois et al. 2003). L'observation des glaces dans des protoétoiles de faible masse, pour lesquelles la deutération en phase gazeuse avait déjà été étudiée, a permis de faire le lien direct entre la deutération sur les grains et en phase gazeuse.

L'étude en phase gazeuse de HDO dans l'enveloppe d'IRAS16293–2422 a confirmé la faible deutération de l'eau relativement à celle du méthanol (chapitre 6). L'analyse de l'émission de HDO dans le cadre du modèle d'enveloppe de Ceccarelli et al. (1996) a permis de contraindre l'abondance (et le fractionnement) de l'eau dans la partie interne chaude de l'enveloppe (Cœur Chaud). Le fractionnement mesuré est de 3% dans cette région, valeur qui est dix fois plus faible que le fractionnement du méthanol dans la même source.

Ces observations ont incité à revisiter les modèles de formation des molécules sur les grains de poussière (*cf.* plus loin).

Une étude prospective pour déterminer les transitions les plus intéressantes à observer pour contraindre l'abondance de HDO dans les enveloppes des protoétoiles a aussi été menée (chapitre 7). Il apparaît que les observations d'Herschel-HIFI ne seront pas indispensables à l'étude de HDO (mais permettront bien entendu de faire de grands progrès dans l'observation de l'isotope principal  $\text{H}_2\text{O}$ ), et que les observations depuis les télescopes au sol (IRAM, JCMT, CSO, APEX, ALMA) seront suffisantes pour l'étude de HDO.

### 9.1.3 Modélisation

Le chapitre 8 présente un modèle de chimie sur les grains proposant une explication à la sous-deutération de l'eau par rapport aux autres molécules. Ce modèle est basé sur un code de

Monte-Carlo, dans l'hypothèse où les réactions sont limitées par le taux d'accrétion des espèces de la phase gazeuse sur le grain.

Cette étude montre que l'eau peut être sous-deutérée par suite d'un processus en cascade convertissant l'ozone en eau, réaction faisant intervenir l'hydrogène moléculaire. La deutération de l'eau est fortement dépendante de la valeur de l'énergie d'activation de la réaction de réduction de l'ozone, qui n'est pas connue.

## 9.2 L'état des connaissances en 2004

Ces trois dernières années, les connaissances sur la deutération ont beaucoup avancé, grâce à l'interaction entre différents groupes de recherche internationaux. Nous développons dans la suite plusieurs points essentiels qui se détachent de ces études récentes :

- La forte deutération est une caractéristique des protoétoiles de faible masse.
- La deutération est plus forte dans les protoétoiles de faible masse que dans les protoétoiles massives.
- Les processus de deutération des molécules observées dans les protoétoiles interviennent pendant la phase prestellaire froide.
- Le fractionnement moléculaire est favorisé par la déplétion de CO sur les grains.
- L'eau est sous-deutérée par rapport aux molécules telles que le formaldéhyde et le méthanol.
- Une nouvelle génération de modèles en phase gazeuse et sur les grains a fait son apparition.

- *La forte deutération est une caractéristique des protoétoiles de faible masse.*

En effet, l'observation de plusieurs protoétoiles de faible masse a permis de montrer qu'IRAS 16293 n'est pas une exception en ce qui concerne la deutération. Ainsi, les travaux de Loinard et al. (2002) ont montré que le formaldéhyde a un fractionnement similaire dans toutes les protoétoiles de faible masse étudiées. L'observation de la deutération du méthanol aboutit à la même conclusion (chapitre 4 de cette thèse).

- *La deutération est plus forte dans les protoétoiles de faible masse que dans les protoétoiles massives.*

Cette idée avait déjà été suggérée par l'observation de D<sub>2</sub>CO en direction de IRAS16293 (Ceccarelli et al. 1998), qui est beaucoup plus fractionné que dans Orion (Turner 1990). Ce résultat a été confirmé par plusieurs travaux. Les observations de Roberts et al. (2002) de HDCO et DCN sur des protoétoiles de faible masse, comparées aux études précédentes sur Orion, montrent en effet que HDCO et DCN sont plus fractionnés sur les protoétoiles de faible masse. L'observation de D<sub>2</sub>CO sur un échantillon de protoétoiles (incluant des protoétoiles massives et de faible masse) conduit à la même conclusion (Loinard et al. 2002). L'étude du méthanol

deutérisé vers plusieurs protoétoiles de faible masse (chapitre 4 de cette thèse) comparée aux observations de méthanol deutéré dans Orion, confirme cette idée.

Ceci est attribué aux différences de temps caractéristiques et de température dans la formation de ces deux types d'objets : la phase prestellaire traversée par les protoétoiles de faible masse est plus longue et plus froide que pour les protoétoiles massives, permettant à la deutération de se développer. La question reste néanmoins largement ouverte.

- *Les processus de deutération des molécules observées dans les protoétoiles interviennent pendant la phase prestellaire froide.*

Cette idée est validée observationnellement par plusieurs travaux : Roberts et al. (2002) ont observé le fractionnement de HDCO et de DCN vers des protoétoiles de faible masse. Aucune différence notable n'est décelée entre la deutération dans les sources de Classe 0 et dans les sources de Classe I un peu plus évoluées. Les processus chimiques intervenant dans la deutération de ces molécules ont donc lieu avant la phase de Classe 0. L'observation de D<sub>2</sub>CO dans un ensemble de cœurs prestellaires (Bacmann et al. 2003) confirme aussi cette idée. En effet, les fractionnements observés sont similaires à ceux observés dans les protoétoiles de faible masse.

- *Le fractionnement moléculaire est favorisé par la déplétion de CO sur les grains.*

Plusieurs études confirment cette idée. Du point de vue observationnel, le fractionnement important de N<sub>2</sub>D<sup>+</sup> (f=0,2 à comparer avec le fractionnement de DCO<sup>+</sup> de 0,04) dans le cœur prestellaire L1544 (Caselli et al. 2002b) provient des régions où le CO est fortement déplété (l'émission de N<sub>2</sub>D<sup>+</sup> est corrélée avec celle du continuum des poussières), tandis que DCO<sup>+</sup> trace des régions où la déplétion de CO est plus faible. Une étude similaire a été faite sur un autre cœur prestellaire L1521F (Crapsi et al. 2004). L'étude de Bacmann et al. (2003) de D<sub>2</sub>CO dans les cœurs prestellaires montre une corrélation entre la valeur du rapport D<sub>2</sub>CO/H<sub>2</sub>CO et la déplétion de CO.

Du point de vue de la modélisation, la comparaison des fractionnements de H<sub>2</sub>D<sup>+</sup> dans les cas où il n'y a pas de déplétion et où la déplétion est à l'œuvre montre que la deutération de cet ion peut augmenter de plus d'un ordre de grandeur lorsque CO est fortement déplété (Millar 2002). Le modèle de chimie en phase gazeuse de Walmsley et al. (2004) dans le cas d'une déplétion totale explique avec succès les observations de H<sub>2</sub>D<sup>+</sup> en abondance dans L1544 (Caselli et al. 2003), mais est en désaccord avec les valeurs de déplétion (10-15) déterminées observationnellement.

- *L'eau est sous-deutérisée par rapport aux molécules telles que le formaldéhyde et le méthanol*

Après l'étude de Dartois et al. (2003) donnant des limites supérieures au fractionnement de l'eau en phase solide vers des protoétoiles massives, cette thèse a montré que les glaces des protoétoiles de faible masse sont aussi déficientes en HDO (HDO/H<sub>2</sub>O ≤ 2%, chapitre 5 de cette thèse). En phase gazeuse, la comparaison entre fractionnement de l'eau et du méthanol dans la protoétoile IRAS16293–2422 conduit à la conclusion que le fractionnement de l'eau est environ



un ordre de grandeur plus faible que celui du méthanol (chapitre 6 de cette thèse).

- *Une nouvelle génération de modèles en phase gazeuse et sur les grains a fait son apparition.*

Les modèles de chimie en phase gazeuse ont fait un pas décisif avec l'incorporation des isotopes multiples deutérés de  $\text{H}_3^+$  comme précurseurs de la deutération moléculaire (Lis et al. 2002; Roberts et al. 2003). Avec cette amélioration, les modèles sont maintenant en mesure d'expliquer le grand fractionnement *atomique* requis pour la formation du méthanol deutéré sur les grains (chapitre 3 de cette thèse). D'autres modèles ont été publiés depuis, avec toujours comme résultat principal que la deutération est favorisée par une grande déplétion de CO et par l'intervention de  $\text{D}_2\text{H}^+$  et  $\text{D}_3^+$  dans les premières étapes de fractionnement (Walmsley et al. 2004; Roberts et al. 2004).

Les modèles de chimie sur les grains ont aussi été améliorés : dans la catégorie des modèles basés sur la résolution d'équations différentielles décrivant le taux de variation de chaque population (facilement couplables aux modèles de phase gazeuse), l'approche de Stantcheva & Herbst (2003) permet par la résolution de l'équation maîtresse de décrire rigoureusement la chimie pour les faibles populations (cas où il n'y a qu'une ou deux molécules de l'espèce considérée sur la surface), domaine où la validité de ces modèles était jusqu'alors discutable, ouvrant la voie à la possibilité de développer des modèles couplés gaz-grain. Parallèlement, les codes de Monte-Carlo ont vu une amélioration dans le nombre de réactions considérées (chapitre 8 de cette thèse, Keane et al. en preparation). Ce modèle suggère que la sous-deutération de l'eau par rapport aux autres molécules provient de processus chimiques qui convertissent en cascade l'ozone présent sur les grains en eau.

## 9.3 Perspectives

Nous détaillons dans cette partie les perspectives à court terme et à plus long terme de ce travail de thèse.

### 9.3.1 Observations interférométriques du méthanol deutéré

Au cours de l'analyse des observations de méthanol deutéré obtenues au télescope de 30 m de l'IRAM, il est apparu que des observations interférométriques seraient à l'avenir indispensables pour avancer plus dans cette étude. En effet, le lobe du télescope de Grenade est au minimum de  $9''$  (à 270 GHz), ce qui implique qu'on puisse au mieux déterminer les valeurs des densités de colonne moyennées dans une région de  $9''$ . Des observations interférométriques, avec leur meilleure résolution spatiale, permettraient de mieux contraindre les fractionnements des molécules le long de l'enveloppe et donc de mieux comprendre leur origine. De récentes observations interférométriques de molécules complexes en direction d'IRAS 16293 (Bottinelli et al. 2004b) mettent en évidence la binarité de la source (deux composantes A et B), et montrent que A est la principale source d'émission des molécules complexes, avec un  $V_{lsr}$  de  $3,9 \text{ km.s}^{-1}$ .

D'autre part, les molécules observées en direction de B suggèrent que le  $V_{lsr}$  de cette composante est  $2,7 \text{ km.s}^{-1}$ , proche du  $V_{lsr}$  observé en méthanol deutéré, et il semble donc que les molécules complexes et les molécules deutérées ne soient pas émises par la même région. Des observations interférométriques du méthanol deutéré sont donc indispensables pour répondre à cette nouvelle question.

### 9.3.2 L'énigme de la deutération de l'eau

Malgré la suggestion que des réactions en cascade puisse former une grande abondance d'eau hydrogénée sur les grains (chapitre 8), l'énigme de la faible deutération de l'eau reste une question ouverte. Un meilleur cadre observationnel peut permettre de résoudre cette énigme. Une observation de HDO sur l'échantillon de protoétoiles de faible masse étudiées en  $\text{H}_2\text{CO}$  (Maret et al. 2004) ou en méthanol deutéré (chapitre 4) permettra de contraindre beaucoup mieux les processus chimiques mis en œuvre. Dans cette étude, le futur instrument HIFI sur Herschel sera absolument indispensable pour déterminer la distribution de l'isotope principal  $\text{H}_2\text{O}$  dans ces sources. L'étude de l'émission théorique de l'eau deutérée en phase gazeuse (chapitre 7) a permis de montrer que les observations au sol sont suffisantes pour contraindre les propriétés de cette molécule dans les enveloppes des protoétoiles de faible masse, et que pour cela, on n'aura pas besoin d'avoir recours au futur instrument HIFI sur Herschel. Ce travail de thèse sera donc complété par l'observation de HDO dans les enveloppes d'autres protoétoiles de faible masse à partir des télescopes de 30 m de l'IRAM et du JCMT. Une étude du fractionnement de l'eau dans les cœurs prestellaires pourrait permettre de comprendre mieux le contexte de la formation de l'eau deutérée, et en particulier sa contemporanéité éventuelle avec la formation du formaldéhyde et du méthanol. Cependant, les observations d'eau dans les cœurs prestellaires ont jusqu'ici été infructueuses, principalement du fait de la mauvaise résolution spatiale des instruments (ISO, SWAS, ODIN). La meilleure résolution d'Herschel pourrait peut-être permettre de résoudre ce problème.

### 9.3.3 Bilan des molécules deutérées par un relevé spectral non biaisé

Les observations de méthanol deutéré, obtenues après des intégrations longues, ont mis en évidence la présence d'un grand nombre de raies moléculaires dans les bandes de fréquence observées. Le projet de grand relevé spectral sur la protoétoile IRAS16293–2422, commencé au JCMT et à l'IRAM, confirme bien ce constat. Les observations seront complétées dans la gamme submillimétrique par des données APEX (Atacama Path EXperiment). Ce projet permettra en particulier de faire le bilan des raies émises par les molécules deutérées dans cette protoétoile, et de compléter les modèles de chimie pour tenir compte de ces nouvelles contraintes.

### 9.3.4 Observations futures

#### La deutération dans le gaz

Bien entendu, ces études prennent toute leur place dans la perspective des futurs moyens d'observation que vont constituer SOFIA et surtout Herschel-HIFI d'une part (lancement prévu en 2007) et ALMA d'autre part (qui devrait être opérationnel en 2010).

ALMA apportera une résolution et une sensibilité sans précédents, qui permettront de réduire les temps d'intégration parfois longs pour les molécules deutérées.

Les nouvelles bandes de fréquence ouvertes par Herschel permettront d'observer des molécules non détectables jusqu'à présent. La perspective de ce nouvel instrument devrait contribuer à renforcer la collaboration entre astrophysiciens et spectroscopistes, pour en particulier étudier les spectres rotationnels de nouvelles molécules en laboratoire. En effet, les spectres de nombreuses molécules deutérées ne sont pas encore connus, comme par exemple  $\text{H}_2\text{DO}^+$  ou  $\text{HD}_2\text{O}^+$ , dont l'observation pourrait permettre de contraindre les processus de formation de l'eau en phase gazeuse.

#### La deutération dans les glaces

Le rapport entre deutération dans les glaces et dans la phase gazeuse pourra être étudié plus en détail avec le lancement du JWST (prévu en 2011), incluant l'instrument NIRSpec dédié à l'observation entre 0,6 et  $5\ \mu\text{m}$ . En effet, cet instrument rendra possible l'observation, affranchie de l'atmosphère terrestre, de la bande O–D à  $4,07\ \mu\text{m}$  (étudiée au chapitre 5), mais aussi la bande d'élongation C–D à  $4,55\ \mu\text{m}$ , permettant de sonder la deutération du méthanol dans les glaces. Il faudra en effet attendre cet observatoire spatial puisque les instruments à bord du satellite Spitzer, actuellement en fonction, ne permettent pas de réaliser ces observations.

### 9.3.5 La deutération : une sonde de la formation stellaire, des nuages froids aux systèmes planétaires et aux comètes.

Outre l'intérêt de comprendre les processus menant à la deutération moléculaire observée, la deutération est un moyen d'étudier les rapports entre différents environnements, pour mieux comprendre globalement la formation des étoiles et des systèmes planétaires.

La similitude entre fractionnement en deutérium des molécules ( $\text{HDO}$  et  $\text{DCN}$ , seules molécules deutérées détectées jusqu'à présent dans les comètes) et dans le Cœur Chaud d'Orion est en effet un des principaux arguments pour affirmer que les comètes sont formées de l'aggrégation de glaces de la nébuleuse protostellaire (van Dishoeck & Blake 1998; Ehrenfreund & Charnley 2000). Ainsi, la recherche de molécules deutérées dans les comètes se développe : Crovisier et al. (2004) ont déterminé des limites supérieures sur les abondances et fractionnements de nombreuses molécules deutérées (formaldéhyde, méthanol...) en direction de la comète Hale-Bopp.

De même, l'observation du fractionnement en deutérium des molécules dans les disques protostellaires permet de faire le rapprochement avec la matière constituant les comètes, apportant une contrainte sur leur formation. Ainsi, la similarité entre le fractionnement dans les nuages froids, les disques et les comètes suggère que le gaz passe la majeure partie de sa durée de vie à basse température et est incorporé dans le disque avant que la protoétoile ne chauffe son enveloppe (van Dishoeck et al. 2003).

La deutération représente donc une sonde incomparable pour retracer l'histoire de la formation des étoiles et des systèmes planétaires, et nous n'en sommes qu'au début de l'exploration !



# Bibliographie

- Anantharamaiah, K. R. & Radhakrishnan, V. 1979, *A&A*, 79, L9
- Anderson, I. M., Caselli, P., Haikala, L. K., & Harju, J. 1999, *A&A*, 347, 983
- Anderson, T., Crownover, L., Herbst, E., & De Lucia, F. 1988, *ApJS*, 67, 135
- Angerhofer, P. E., Rossano, G. S., & Vestrand, W. T. 1978, *Astronomical Journal*, 83, 1417
- Audouze, J., Lequeux, J., Reeves, H., & Vigroux, L. 1976, *ApJL*, 208, L51
- Bachiller, R., Guilloteau, S., Gueth, F., Tafalla, M., Dutrey, A., Codella, C., & Castets, A. 1998, *A&A*, 339, L49
- Bachiller, R. & Perez Gutierrez, M. 1997, *ApJL*, 487, L93
- Bacmann, A., Lefloch, B., Ceccarelli, C., Castets, A., Steinacker, J., & Loinard, L. 2002, *A&A*, 389, L6
- Bacmann, A., Lefloch, B., Ceccarelli, C., Steinacker, J., Castets, A., & Loinard, L. 2003, *ApJL*, 585, L55
- Balsiger, H., Altwegg, K., & Geiss, J. 1995, *J. Geophys. Res.*, 100, 5827
- Bell, M. B., Avery, L. W., Matthews, H. E., Feldman, P. A., Watson, J. K. G., Madden, S. C., & Irvine, W. M. 1988, *ApJ*, 326, 924
- Bell, M. B., Feldman, P. A., Matthews, H. E., & Avery, L. W. 1986, *ApJL*, 311, L89
- Bergin, E. A., Neufeld, D. A., & Melnick, G. J. 1999, *ApJL*, 510, L145
- Bockelée-Morvan, D., Gautier, D., Lis, D. C., Young, K., Keene, J., Phillips, T., Owen, T., Crovisier, J., Goldsmith, P. F., Bergin, E. A., Despois, D., & Wootten, A. 1998, *Icarus*, 133, 147
- Boogert, A. C. A., Blake, G. A., & Tielens, A. G. G. M. 2002a, *ApJ*, 577, 271
- Boogert, A. C. A., Hogerheijde, M. R., & Blake, G. A. 2002b, *ApJ*, 568, 761

- Boogert, A. C. A., Hogerheijde, M. R., Ceccarelli, C., Tielens, A. G. G. M., van Dishoeck, E. F., Blake, G. A., Latter, W. B., & Motte, F. 2002c, *ApJ*, 570, 708
- Boogert, A. C. A., Pontoppidan, K. M., Lahuis, F., Jørgensen, J. K., Augereau, J., Blake, G. A., Brooke, T. Y., Brown, J., Dullemond, C. P., Evans, N. J., Geers, V., Hogerheijde, M. R., Kessler-Silacci, J., Knez, C., Morris, P., Noriega-Crespo, A., Schöier, F. L., van Dishoeck, E. F., Allen, L. E., Harvey, P. M., Koerner, D. W., Mundy, L. G., Myers, P. C., Padgett, D. L., Sargent, A. I., & Stapelfeldt, K. R. 2004, *ApJS*, 154, 359
- 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., & de Graauw, T. 2000, *A&A*, 360, 683
- Bottinelli, S., Ceccarelli, C., Lefloch, B., Williams, J., Castets, A., Caux, E., Cazaux, S., Maret, S., Parise, B., & Tielens, A. 2004a, *ApJ*, 615, 354
- Bottinelli, S., Ceccarelli, C., Neri, R., Williams, J., & al. 2004b, sous presse
- Brown, P. D., Charnley, S. B., & Millar, T. J. 1988, *MNRAS*, 231, 409
- Brown, P. D. & Millar, T. J. 1989a, *MNRAS*, 237, 661
- . 1989b, *MNRAS*, 240, 25
- Butner, H. M., Lada, E. A., & Loren, R. B. 1995, *ApJ*, 448, 207
- Carr, J. & Tokunaga, A. 1992, *ApJ*, 393, L67
- Caselli, P., Hasegawa, T. I., & Herbst, E. 1993, *ApJ*, 408, 548
- . 1998, *ApJ*, 495, 309
- Caselli, P., Stantcheva, T., Shalabiea, O., Shematovich, V. I., & Herbst, E. 2002a, *Planet. Space Sci.*, 50, 1257
- Caselli, P., van der Tak, F. F. S., Ceccarelli, C., & Bacmann, A. 2003, *A&A*, 403, L37
- Caselli, P., Walmsley, C. M., Tafalla, M., Dore, L., & Myers, P. C. 1999, *ApJL*, 523, L165
- Caselli, P., Walmsley, C. M., Zucconi, A., Tafalla, M., Dore, L., & Myers, P. C. 2002b, *ApJ*, 565, 344
- Cazaux, S., Tielens, A. G. G. M., Ceccarelli, C., Castets, A., Wakelam, V., Caux, E., Parise, B., & Teyssier, D. 2003, *ApJL*, 593, L51
- Ceccarelli, C., Castets, A., Caux, E., Hollenbach, D., Loinard, L., Molinari, S., & Tielens, A. G. G. M. 2000a, *A&A*, 355, 1129
- Ceccarelli, C., Castets, A., Loinard, L., Caux, E., & Tielens, A. G. G. M. 1998, *A&A*, 338, L43

- Ceccarelli, C., Dominik, C., Lefloch, B., Caselli, P., & Caux, E. 2004, *ApJL*, 607, L51
- Ceccarelli, C., Hollenbach, D. J., & Tielens, A. G. G. M. 1996, *ApJ*, 471, 400
- Ceccarelli, C., Loinard, L., Castets, A., Tielens, A. G. G. M., & Caux, E. 2000b, *A&A*, 357, L9
- Ceccarelli, C., Loinard, L., Castets, A., Tielens, A. G. G. M., Caux, E., Lefloch, B., & Vastel, C. 2001, *A&A*, 372, 998
- Ceccarelli, C., Maret, S., Tielens, A. G. G. M., Castets, A., & Caux, E. 2003, *A&A*, 410, 587
- Cernis, K. 1990, *ApSS*, 166, 315
- Cesarsky, D. A., Moffet, A. T., & Pasachoff, J. M. 1973, *ApJL*, 180, L1
- Charnley, S. B., Kress, M. E., Tielens, A. G. G. M., & Millar, T. J. 1995, *ApJ*, 448, 232
- Charnley, S. B., Tielens, A. G. G. M., & Millar, T. J. 1992, *ApJL*, 399, L71
- Charnley, S. B., Tielens, A. G. G. M., & Rodgers, S. D. 1997, *ApJ*, 482, L203
- Chiar, J. E., Adamson, A. J., Kerr, T. H., & Whittet, D. C. B. 1995, *ApJ*, 455, 234
- Clough, S. A., Beers, Y., Klein, G. P., & Rothman, L. S. 1973, *J. Chem. Phys.*, 59, 2254
- Combes, F., Boulanger, F., Encrenaz, P. J., Gerin, M., Bogey, M., Demuynck, C., & Destomb, J. L. 1985, *A&A*, 147, L25
- Comito, C., Schilke, P., Gérin, M., Phillips, T. G., Zmuidzinas, J., & Lis, D. C. 2003, *A&A*, 402, 635
- Crapsi, A., Caselli, P., Walmsley, C. M., Tafalla, M., Lee, C. W., Bourke, T. L., & Myers, P. C. 2004, *A&A*, 420, 957
- Crovisier, J., Bockelée-Morvan, D., Colom, P., Biver, N., Despois, D., Lis, D. C., & the Team for target-of-opportunity radio observations of comets. 2004, *A&A*, 418, 1141
- Cushing, M. C., Vacca, W. D., & Rayner, J. T. 2004, *PASP*, 116, 362
- Dalgarno, A., Herbst, E., Novick, S., & Klemperer, W. 1973, *ApJ*, 183, L131
- Dalgarno, A. & Lepp, S. 1984, *ApJL*, 287, L47
- Dartois, E. 1998, thèse de doctorat, Université Paris VI
- Dartois, E., d'Hendecourt, L., Thi, W., Pontoppidan, K., & van Dishoeck, E. 2002, *A&A*, 394, 1057
- Dartois, E., Gérin, M., & d'Hendecourt, L. 2000, *A&A*, 361, 1095



- Dartois, E., Schutte, W., Geballe, T. R., Demyk, K., Ehrenfreund, P., & D'Hendecourt, L. 1999, *A&A*, 342, L32
- Dartois, E., Thi, W.-F., Geballe, T. R., Deboffle, D., d'Hendecourt, L., & van Dishoeck, E. 2003, *A&A*, 399, 1009
- Ehrenfreund, P. & Charnley, S. B. 2000, *Ann. Rev. Astron. Astrophys.*, 38, 427
- Ehrenfreund, P., Dartois, E., Demyk, K., & D'Hendecourt, L. 1998, *A&A*, 339, L17
- Ehrenfreund, P., Kerkhof, O., Schutte, W. A., Boogert, A. C. A., Gerakines, P. A., Dartois, E., D'Hendecourt, L., Tielens, A. G. G. M., van Dishoeck, E. F., & Whittet, D. C. B. 1999, *A&A*, 350, 240
- Ellder, J., Friberg, P., Hjalmarsen, A., Hoglund, B., Johansson, L. E. B., Olofsson, H., Rydbeck, G., Rydbeck, O. E. H., Guélin, M., & Irvine, W. M. 1980, *ApJL*, 242, L93
- Gensheimer, P. D., Mauersberger, R., & Wilson, T. L. 1996, *A&A*, 314, 281
- Gerakines, P. A., Moore, M. H., & Hudson, R. L. 2000, *A&A*, 357, 793
- Gibb, E. L., Whittet, D. C. B., Boogert, A. C. A., & Tielens, A. G. G. M. 2004, *ApJS*, 151, 35
- Goldsmith, P. F. & Langer, W. D. 1999, *ApJ*, 517, 209
- 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., & Chin, G. 2000, *ApJL*, 539, L123
- Gordy, W. & Cook, R. L. 1984, *Microwave Molecular Spectra (Technics of Chemistry Volume XVIII (third edition))*
- Gottlieb, C. A., Ball, J. A., Gottlieb, E. W., & Dickinson, D. F. 1979, *ApJ*, 227, 422
- Green, S. 1989, *ApJS*, 70, 813
- Grim, R. J. A., Baas, F., Greenberg, J. M., Geballe, T. R., & Schutte, W. 1991, *A&A*, 243, 473
- Gérin, M., Combes, F., Wlodarczak, G., Encrenaz, P., & Laurent, C. 1992, *A&A*, 253, L29
- Gérin, M., Wootten, H. A., Combes, F., Boulanger, F., Peters, W. L., Kuiper, T. B. H., Encrenaz, P. J., & Bogey, M. 1987, *A&A*, 173, L1
- Guélin, M., Langer, W. D., Snell, R. L., & Wootten, H. A. 1977, *ApJL*, 217, L165
- Guélin, M., Langer, W. D., & Wilson, R. W. 1982, *A&A*, 107, 107

- Helmich, F. P., van Dishoeck, E. F., & Jansen, D. J. 1996, *A&A*, 313, 657
- Henkel, C., Mauersberger, R., Wilson, T. L., Snyder, L. E., Menten, K. M., & Wouterloot, J. G. A. 1987, *A&A*, 182, 299
- Hirao, T. & Amano, T. 2003, *ApJ*, 597, L85
- Hiraoka, K., Sato, T., Sato, S., Sogoshi, N., Yokoyama, T., Takashima, H., & Kitagawa, S. 2002, *ApJ*, 577, 265
- Hogerheijde, M. 2001, *ApJ*, 553, 618
- Hogerheijde, M. & Sandell, G. 2000, *ApJ*, 534, 880
- Hogerheijde, M., van Dishoeck, E., Blake, G., & van Langevelde, H. 1998, *ApJ*, 502, 315
- Hollenbach, D. J., Werner, M. W., & Salpeter, E. E. 1971, *ApJ*, 163, 165
- Hollis, J. M., Snyder, L. E., Lovas, F. J., & Buhl, D. 1976, *ApJL*, 209, L83
- Howe, D. A., Millar, T. J., Schilke, P., & Walmsley, C. M. 1994, *MNRAS*, 267, 59
- Hoyle, F. & Fowler, W. A. 1973, *Nature*, 241
- Huntress, W. T. 1977, *ApJS*, 33, 495
- Jacq, T., Henkel, C., Walmsley, C. M., Jewell, P. R., & Baudry, A. 1988, *A&A*, 199, L5
- Jacq, T., Walmsley, C. M., Henkel, C., Baudry, A., Mauersberger, R., & Jewell, P. R. 1990, *A&A*, 228, 447
- Jacq, T., Walmsley, C. M., Mauersberger, R., Anderson, T., Herbst, E., & de Lucia, F. C. 1993, *A&A*, 271, 276
- Jefferts, K. B., Penzias, A. A., & Wilson, R. W. 1973, *ApJL*, 179, L57
- Jennings, R., Cameron, D., Cudlip, W., & Hirst, C. 1987, *MNRAS*, 226, 461
- Jones, A. P., Duley, W. W., & Williams, D. A. 1990, *QJRAS*, 31, 567
- Keane, J. 2002, Origin and evolution of ices around massive young stars (PhD thesis)
- Keane, J. V., Tielens, A. G. G. M., Boogert, A. C. A., Schutte, W. A., & Whittet, D. C. B. 2001, *A&A*, 376, 254
- Keene, J. 1990, in *Carbon in the Galaxy : Studies from Earth and Space*, 181–196
- Knee, L. & Sandell, G. 2000, *ApJ*, 361, 671

- Langer, W. D., Frerking, M. A., Linke, R. A., & Wilson, R. W. 1979, *ApJL*, 232, L169
- Langer, W. D., Schloerb, F. P., Snell, R. L., & Young, J. S. 1980, *ApJL*, 239, L125
- Lefloch, B., Castets, A., Cernicharo, J., Langer, W. D., & Zylka, R. 1998a, *A&A*, 334, 269
- Lefloch, B., Castets, A., Cernicharo, J., & Loinard, L. 1998b, *ApJL*, 504, L109
- Leitch-Devlin, M. A. & Williams, D. A. 1984, *MNRAS*, 210, 577
- Lequeux, J. 2002, *Le milieu interstellaire* (EDP Sciences / CNRS Editions)
- Linsky, J. L. 2003, *Space Science Reviews*, 106, 49
- Lis, D. C., Roueff, E., Gérin, M., Phillips, T. G., Coudert, L. H., van der Tak, F. F. S., & Schilke, P. 2002, *ApJL*, 571, L55
- Loinard, L., Castets, A., Ceccarelli, C., Lefloch, B., Benayoun, J.-J., Caux, E., Vastel, C., Dartois, E., & Tielens, A. G. G. M. 2002, *Planet. Space Sci.*, 50, 1205
- Loinard, L., Castets, A., Ceccarelli, C., Tielens, A. G. G. M., Faure, A., Caux, E., & Duvert, G. 2000, *A&A*, 359, 1169
- Looney, L. W., Mundy, L. G., & Welch, W. J. 2000, *ApJ*, 529, 477
- Lubic, K. G. & Amano, T. 1984, *Can. J. Phys.*, 62, 10886
- Müller, H. S. P., Thorwirth, S., Roth, D. A., & Winnewisser, G. 2001, *A&A*, 370, L49
- MacLeod, J. M., Avery, L. W., & Broten, N. W. 1981, *ApJL*, 251, L33
- Mangum, J. G., Plambeck, R. L., & Wootten, A. 1991, *ApJ*, 369, 169
- 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., & Schöier, F. L. 2004, *A&A*, 416, 577
- Mauersberger, R., Henkel, C., Jacq, T., & Walmsley, C. M. 1988, *A&A*, 194, L1
- Meier, R., Owen, T. C., Jewitt, D. C., Matthews, H. E., Senay, M., Biver, N., Bockelée-Morvan, D., Crovisier, J., & Gautier, D. 1998a, *Science*, 279, 1707
- Meier, R., Owen, T. C., Matthews, H. E., Jewitt, D. C., Bockelée-Morvan, D., Biver, N., Crovisier, J., & Gautier, D. 1998b, *Science*, 279, 842
- Menten, K. M., Walmsley, C. M., Henkel, C., & Wilson, T. L. 1988, *A&A*, 198, 253
- Meyer, D. M., Cardelli, J. A., & Sofia, U. J. 1997, *ApJL*, 490, L103

- Millar, T. J. 2002, *Planet. Space Sci.*, 50, 1189
- Millar, T. J., Bennett, A., & Herbst, E. 1989, *ApJ*, 340, 906
- Minowa, H., Satake, M., Hirota, T., Yamamoto, S., Ohishi, M., & Kaifu, N. 1997, *ApJL*, 491, L63
- Molinari, S., Liseau, R., & Lorenzetti, D. 1993, *A&AS*, 101, 59
- Mundy, L. G., Wootten, A., Wilking, B. A., Blake, G. A., & Sargent, A. I. 1992, *ApJ*, 385, 306
- Myers, P. C., Fuller, G. A., Mathieu, R. D., Beichman, C. A., Benson, P. J., Schild, R. E., & Emerson, J. P. 1987, *ApJ*, 319, 340
- Nummelin, A., Whittet, D. C. B., Gibb, E. L., Gerakines, P. A., & Chiar, J. E. 2001, *ApJ*, 558, 185
- Olberg, M., Bester, M., Rau, G., Pauls, T., Winnewisser, G., Johansson, L. E., & Hjalmarson, A. 1985, *A&A*, 142, L1
- Osamura, Y., Roberts, H., & Herbst, E. 2004, *A&A*, 421, 1101
- Ostriker, J. P. & Tinsley, B. M. 1975, *ApJL*, 201, L51
- 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., Gérin, 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., & Wilson, C. D. 2003, *A&A*, 402, L77
- Pagani, L., Pardo, J.-R., Fich, M., Motte, F., & Stepnik, B. 2002, *EAS Publications Series*, Volume 4, "Proceedings of Infrared and Submillimeter Space Astronomy", held 11-13 June, 2001. Edited by M. Giard, J.P. Bernard, A. Klotz, and I. Ristorcelli. EDP Sciences, 2002, pp.145-145, 4, 145
- Parise, B. 2003, in *The Dense Interstellar Medium in Galaxies*, 641
- Parise, B., Castets, A., Herbst, E., Caux, E., Ceccarelli, C., Mukhopadhyay, I., & Tielens, A. G. G. M. 2004a, *A&A*, 416, 159
- Parise, B., Caux, E., Castets, A., Ceccarelli, C., Loinard, L., Tielens, A. G. G. M., Bacmann, A., Cazaux, S., Comito, C., Helmich, F., Kahane, C., Schilke, P., van Dishoeck, E., Wakelam, V., & Walters, A. 2004b, *A&A* sous presse

- Parise, B., Ceccarelli, C., Castets, A., Caux, E., Herbst, E., & Mukhopadhyay, I. 2003a, in SF2A-2003 : Semaine de l'Astrophysique Francaise, 215
- Parise, B., Ceccarelli, C., Tielens, A. G. G. M., Herbst, E., Lefloch, B., Caux, E., Castets, A., Mukhopadhyay, I., Pagani, L., & Loinard, L. 2002a, in Chemistry as a Diagnostic of Star Formation, 15
- Parise, B., Ceccarelli, C., Tielens, A. G. G. M., Herbst, E., Lefloch, B., Caux, E., Castets, A., Mukhopadhyay, I., Pagani, L., & Loinard, L. 2002b, *A&A*, 393, L49
- Parise, B., Simon, T., Caux, E., Dartois, E., Ceccarelli, C., Rayner, J., & Tielens, A. G. G. M. 2003b, in SF2A-2003 : Semaine de l'Astrophysique Francaise, 217
- Parise, B., Simon, T., Caux, E., Dartois, E., Ceccarelli, C., Rayner, J., & Tielens, A. G. G. M. 2003c, *A&A*, 410, 897
- Penzias, A. A., Wannier, P. G., Wilson, R. H., & Linke, R. A. 1977, *ApJ*, 211, 108
- Penzias, A. A., Wannier, P. G., Wilson, R. W., & Linke, R. A. 1976, *Bulletin of the American Astronomical Society*, 8, 350
- Pineau de Forêts, G., Roueff, E., & Flower, D. R. 1989, *MNRAS*, 240, 167
- Plambeck, R. L. & Wright, M. C. H. 1987, *ApJL*, 317, L101
- Pontoppidan, K. M., Fraser, H. J., Dartois, E., Thi, W.-F., van Dishoeck, E. F., Boogert, A. C. A., d'Hendecourt, L., Tielens, A. G. G. M., & Bisschop, S. E. 2003, *A&A*, 408, 981
- Predoi-Cross, A., Xu, L. H., Walsh, M. S., Lees, R. M., Winnewisser, M., & Lichau, H. 1998, *J. Mol. Spec.*, 188, 94
- Rayner, J. T., Toomey, D. W., Onaka, P. M., Denault, A. J., Stahlberger, W. E., Vacca, W. D., Cushing, M. C., & Wang, S. 2003, *PASP*, 115, 362
- Roberts, H., Fuller, G. A., Millar, T. J., Hatchell, J., & Buckle, J. V. 2002, *A&A*, 381, 1026
- Roberts, H. & Herbst, E. 2002, *A&A*, 395, 233
- Roberts, H., Herbst, E., & Millar, T. J. 2003, *ApJL*, 591, L41
- . 2004, *A&A* sous presse
- Roberts, H. & Millar, T. J. 2000a, *A&A*, 364, 780
- . 2000b, *A&A*, 361, 388
- Rodgers, S. D. & Charnley, S. B. 2001, *ApJ*, 553, 613

- Rodgers, S. D. & Charnley, S. B. 2002, *Planet. Space Sci.*, 50, 1125
- Rodgers, S. D. & Millar, T. J. 1996, *MNRAS*, 280, 1046
- Rodriguez Kuiper, E. N., Kuiper, T. B. H., & Zuckerman, B. 1978, *ApJL*, 219, L49
- Rogerson, J. B. & York, D. G. 1973, *ApJL*, 186, L95
- Roueff, E., Tiné, S., Coudert, L. H., Pineau des Forêts, G., Falgarone, E., & Gérin, M. 2000, *A&A*, 354, L63
- Sandell, G. & Knee, L. B. G. 2001, *ApJL*, 546, L49
- Sandford, S. A. & Allamandola, L. J. 1990, *Icarus*, 87, 188
- Sato, S., Nagata, T., Tanaka, M., & Yamamoto, T. 1990, *ApJ*, 359, 192
- Schöier, F. L., Jørgensen, J. K., van Dishoeck, E. F., & Blake, G. A. 2002, *A&A*, 390, 1001
- Schilke, P., Walmsley, C. M., Pineau des Forêts, G., Roueff, E., Flower, D. R., & Guilloteau, S. 1992, *A&A*, 256, 595
- Schloerb, F. P., Snell, R. L., Young, J. S., & Langer, W. D. 1981, *ApJL*, 251, L37
- Shalabiea, O. M. & Greenberg, J. M. 1994, *A&A*, 290, 266
- Shu, F. H. 1977, *ApJ*, 214, 488
- Shu, F. H., Adams, F. C., & Lizano, S. 1987, *Ann. Rev. Astron. Astrophys.*, 25, 23
- 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., & Melnick, G. J. 2000, *ApJL*, 539, L101
- Snell, R. L. & Wootten, H. A. 1977, *ApJL*, 216, L111
- Snyder, L. E., Watson, W. D., Hollis, J. M., & Buhl, D. 1977, *ApJL*, 218, L61
- Solomon, P. M. & Woolf, N. J. 1973, *ApJL*, 180, L89
- Stantcheva, T., Caselli, P., & Herbst, E. 2001, *A&A*, 375, 673
- Stantcheva, T. & Herbst, E. 2003, *MNRAS*, 340, 983
- Stark, R., Sandell, G., Beck, S. C., Hogerheijde, M. R., van Dishoeck, E. F., van der Wal, P., van der Tak, F. F. S., Schäfer, F., Melnick, G. J., Ashby, M. L. N., & de Lange, G. 2004, *ApJ*, 608, 341

- Stark, R., van der Tak, F. F. S., & van Dishoeck, E. F. 1999, *ApJL*, 521, L67
- Teixeira, T. C., Devlin, J. P., Buch, V., & Emerson, J. P. 1999, *A&A*, 347, L19
- Tielens, A. 1989, in *IAU Symp. 135 : Interstellar Dust*, 239
- Tielens, A. G. G. M. 1983, *A&A*, 119, 177
- Tielens, A. G. G. M. & Allamandola, L. J. 1987, in *ASSL Vol. 134 : Interstellar Processes*, 397–469
- Tielens, A. G. G. M. & Hagen, W. 1982, *A&A*, 114, 245
- Tielens, A. G. G. M., Tokunaga, A. T., Geballe, T. R., & Baas, F. 1991, *ApJ*, 381, 181
- Tielens, A. G. G. M. & Whittet, D. C. B. 1996, in *IAU Symp. 178 : Molecules in Astrophysics : Probes & Processes*, 45
- Tiné, S., Roueff, E., Falgarone, E., Gérin, M., & Pineau des Forêts, G. 2000, *A&A*, 356, 1039
- Townes, C. H. & Schawlow, A. L. 1975, *Microwave Spectroscopy* (Dover Publications)
- Turner, B. E. 1989, *ApJL*, 347, L39
- Turner, B. E. 1990, *ApJ*, 362, L29
- Turner, B. E. 2001, *ApJS*, 136, 579
- Turner, B. E., Fourikis, N., Morris, M., Palmer, P., & Zuckerman, B. 1975, *ApJL*, 198, L125
- Turner, B. E., Zuckerman, B., Morris, M., & Palmer, P. 1978, *ApJL*, 219, L43
- Vacca, W. D., Cushing, M. C., & Rayner, J. T. 2003, *PASP*, 115, 389
- van der Tak, F. F. S., Schilke, P., Müller, H. S. P., Lis, D. C., Phillips, T. G., Gérin, M., & Roueff, E. 2002, *A&A*, 388, L53
- van Dishoeck, E., Blake, G., Jansen, D., & Groesbeck, T. 1995, *ApJ*, 447, 760
- van Dishoeck, E. F. & Blake, G. A. 1998, *Ann. Rev. Astron. Astrophys.*, 36, 317
- van Dishoeck, E. F., Thi, W.-F., & van Zadelhoff, G.-J. 2003, *A&A*, 400, L1
- Vastel, C., Phillips, T. G., & Yoshida, H. 2004, *ApJL*, 606, L127
- Walmsley, C. M., Flower, D. R., & Pineau des Forêts, G. 2004, *A&A*, 418, 1035
- Walmsley, C. M., Hermsen, W., Henkel, C., Mauersberger, R., & Wilson, T. L. 1987, *A&A*, 172, 311

- Walsh, M. S., Xu, L. H., & Lees, R. M. 1998, *J. Mol. Spec.*, 188, 85
- Watanabe, N. & Kouchi, A. 2002, *ApJL*, 571, L173
- Watson, W. D. 1973, *ApJL*, 181, L129
- . 1974, *ApJ*, 188, 35
- Watson, W. D., Crutcher, R. M., & Dickel, J. R. 1975, *ApJ*, 201, 102
- Weinreb, S. 1962, *Nature*, 195, 367
- Whittet, D. C. B., Adamson, A. J., Duley, W. W., Geballe, T. R., & McFadzean, A. D. 1989, *MNRAS*, 241, 707
- Wilson, R. W., Penzias, A. A., Jefferts, K. B., & Solomon, P. M. 1973, *ApJL*, 179, L107
- Woon, D. E. 2002, *ApJ*, 569, 541
- Wootten, A., Loren, R. B., & Snell, R. L. 1982, *ApJ*, 255, 160
- York, D. G. & Rogerson, J. B. 1976, *ApJ*, 203, 378





# Annexes



## Annexe A

# Le calcul des barres d'erreur sur les rapports isotopiques

Le calcul des barres d'erreur sur les quantités physiques dérivées d'observations, bien que crucial, est souvent un problème délicat.

La définition même de la signification d'une barre d'erreur n'est pas évidente. Si la quantité physique mesurée a une distribution gaussienne, la barre d'erreur à  $1\sigma$  détermine l'intervalle de 68.3% de confiance, et la distribution gaussienne a la caractéristique intéressante que l'intervalle  $\pm 3\sigma$  représente une confiance de 99.7%. Cette caractéristique ne s'applique toutefois plus quand la fonction de répartition de la variable n'est pas gaussienne. La donnée d'une barre d'erreur sans précision sur la forme de la fonction de répartition n'a donc pas de signification en soi.

Nous détaillons dans cette annexe le calcul des barres d'erreur sur le rapport d'abondance de deux molécules, en étudiant la fonction de répartition du rapport de deux variables aléatoires. Nous montrons que dans le cas où les deux variables initiales sont gaussiennes et suffisamment bien contraintes ( $\sigma_X \ll \bar{X}$  et  $\sigma_Y \ll \bar{Y}$ ) le rapport X/Y peut être considéré comme gaussien, mais que des écarts importants à la gaussianité peuvent intervenir dès lors que les barres d'erreur sur les variables initiales ne sont plus négligeables.

### A.1 Propagation d'erreur

Généralement, les barres d'erreur sont exprimées en supposant que la fonction de répartition de la variable aléatoire décrivant la quantité physique en question est gaussienne. Si une quantité N est déterminée à partir d'autres variables  $A_i$  à répartition gaussienne, l'approximation que N a une répartition gaussienne est en général valide si les erreurs sur les variables initiales sont petites ( $\sigma_{A_i} < \frac{\bar{A}_i}{6}$ ). Le calcul de l'erreur sur N se fait alors par propagation d'erreur. Prenons l'exemple de l'abondance  $N_{\text{tot}}$  d'une molécule déterminée par la méthode du diagramme rotationnel.  $N_{\text{tot}}$  est déduit de  $\ln\left(\frac{N_{\text{tot}}}{Z(T)}\right) = b$  (où b est l'ordonnée à l'origine de la droite ajustée dans le diagramme). La détermination de  $N_{\text{tot}}$  dépendra donc de l'ordonnée à l'origine b et de la pente de la droite

a (par l'intermédiaire de T) :  $N = f(A, B)$ . En supposant que les variables aléatoires A et B associées à a et b sont gaussiennes, d'écart-types  $\sigma_A$  et  $\sigma_B$ , on peut calculer l'écart-type de N en effectuant un développement limité :

$$N = f(a, b) + \left. \frac{\partial f}{\partial A} \right|_{a,b} (A - a) + \left. \frac{\partial f}{\partial B} \right|_{a,b} (B - b)$$

$$[N - f(a, b)]^2 = \left[ \left. \frac{\partial f}{\partial A} \right|_{a,b} (A - a) \right]^2 + \left[ \left. \frac{\partial f}{\partial B} \right|_{a,b} (B - b) \right]^2 + 2 \left. \frac{\partial f}{\partial A} \right|_{a,b} \left. \frac{\partial f}{\partial B} \right|_{a,b} (A - a)(B - b)$$

En prenant l'espérance mathématique de cette relation, on obtient :

$$\sigma_N^2 = \left[ \left. \frac{\partial f}{\partial A} \right|_{a,b} \right]^2 \sigma_A^2 + \left[ \left. \frac{\partial f}{\partial B} \right|_{a,b} \right]^2 \sigma_B^2 + 2 \left. \frac{\partial f}{\partial A} \right|_{a,b} \left. \frac{\partial f}{\partial B} \right|_{a,b} \text{Cov}(A, B)$$

Quand les deux variables aléatoires A et B sont indépendantes, le troisième terme est nul.

L'écart-type de N est donc la somme quadratique des deux écarts-types de A et B (pondérés par les dérivées partielles de la fonction).

Rappelons que cette approximation n'est valable que quand  $\sigma_A \ll A$  et  $\sigma_B \ll B$ . Ce n'est néanmoins pas toujours le cas. Dans la partie suivante, nous étudions quantitativement l'écart à la gaussianité du rapport de deux variables gaussiennes, et ses conséquences sur la détermination de l'erreur.

## A.2 Fonction de répartition du rapport de deux variables aléatoires.

### A.2.1 Le formalisme

Quand les fonctions de répartition des deux variables aléatoires sont connues, il est possible de calculer la fonction de répartition de leur rapport, en effectuant un changement de variables aléatoires  $A = Y$  et  $B = X/Y$ . Soit X et Y deux variables aléatoires de fonctions de répartition  $f_X$  et  $f_Y$ . La fonction de répartition du rapport  $X/Y$  s'exprime par :

$$f_{X/Y}(u) = \int_{-\infty}^{\infty} f_X(uy) f_Y(y) |y| dy$$

le terme  $|y|$  étant l'inverse du Jacobien du changement de variables.

Nous présentons dans le paragraphe suivant le comportement de  $f_{X/Y}$  quand X et Y sont des variables gaussiennes, en appliquant cette étude à la détermination des barres d'erreur des rapports de fractionnement du méthanol présentés dans cette thèse.

### A.2.2 Application à la détermination des barres d'erreur sur les fractionnements isotopiques.

A titre d'exemple, nous calculons la fonction de répartition du rapport  $\text{CH}_2\text{DOH}/\text{CH}_3\text{OH}$  dans IRAS16293–2422 (cf. chapitre 3). Les diagrammes rotationnels nous ont donné

$$N_{\text{CH}_2\text{DOH}} = (2,98 \pm 0,40) \times 10^{15} \text{cm}^{-2}$$

$$N_{\text{CH}_3\text{OH}} = (9,8 \pm 3,5) \times 10^{15} \text{cm}^{-2},$$

la grande erreur sur  $\text{CH}_3\text{OH}$  étant due au faible rapport signal sur bruit des données  $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$ . La Figure A.1 présente les fonctions de répartition des densités de colonne de  $\text{CH}_2\text{DOH}$  et  $\text{CH}_3\text{OH}$  respectivement, en supposant que ces fonctions sont gaussiennes.

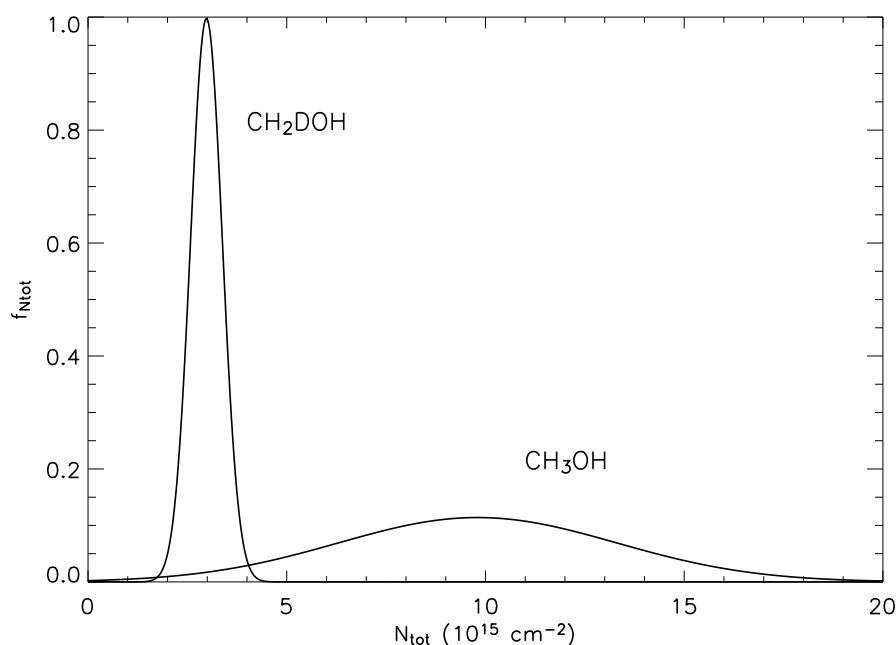


FIG. A.1 – Fonctions de répartition des densités de colonne de  $\text{CH}_2\text{DOH}$  et de  $\text{CH}_3\text{OH}$  dans IRAS16293–2422.

La Figure A.2 présente en trait plein la fonction de répartition du rapport  $\text{CH}_2\text{DOH}/\text{CH}_3\text{OH}$  calculée selon l'expression du paragraphe précédent. Il est intéressant de remarquer que le maximum de probabilité pour  $\text{CH}_2\text{DOH}/\text{CH}_3\text{OH}$  ne coïncide pas avec le rapport des moyennes  $2,98/9,8=0,30$ , mais pour une valeur plus faible. La moyenne est elle de 0,37, du fait de l'aile droite importante de la distribution. En pointillés nous avons superposé la fonction de répartition obtenue quand on fait l'approximation que le rapport est gaussien, et qu'on en calcule l'écart-type par la formule de propagation des erreurs (cf. A.1). Cette gaussienne est alors centrée sur 0,3.

L'approximation gaussienne semble assez grossière dans ce cas. Les barres verticales délimitent les intervalles de confiance à 68% pour chacune des deux distributions. Ces intervalles sont assez similaires, mais il convient de constater que l'intervalle vrai n'est pas symétrique contrairement au cas gaussien. Il est donc dans un tel cas préférable de calculer la barre d'erreur correctement sans faire l'approximation gaussienne. On trouve :

$$\text{CH}_2\text{DOH}/\text{CH}_3\text{OH} = 0,37 \begin{matrix} +0,11 \\ -0,15 \end{matrix} \text{ (intervalle de confiance à 68\%)}$$

$$\text{CH}_2\text{DOH}/\text{CH}_3\text{OH} = 0,37 \begin{matrix} +0,37 \\ -0,19 \end{matrix} \text{ (intervalle de confiance à 90\%)}$$

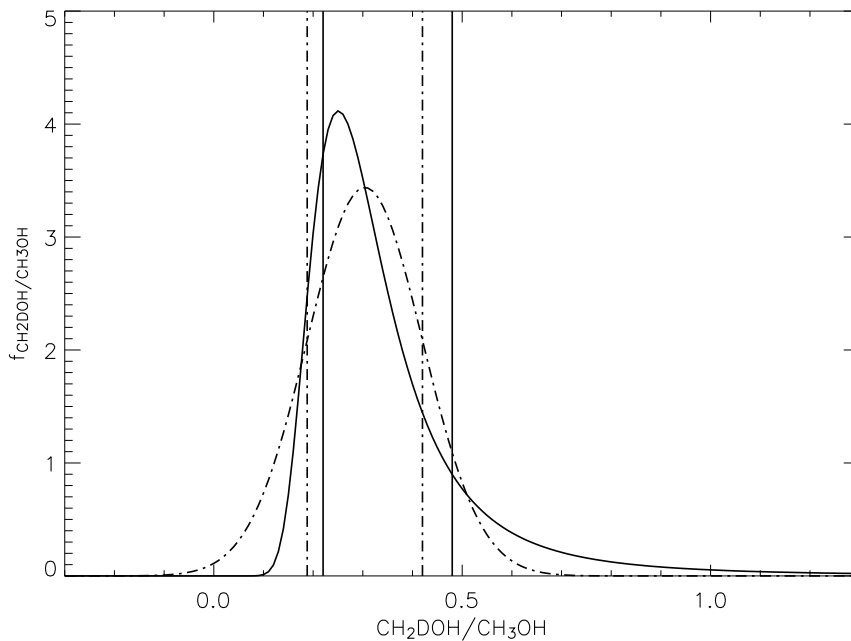


FIG. A.2 – Fonction de répartition exacte du rapport isotopique  $\text{CH}_2\text{DOH}/\text{CH}_3\text{OH}$  (trait plein). Approximation gaussienne (trait pointillé). Les barres verticales délimitent les intervalles de confiance à 68% pour chacune des distributions.

Pour montrer que l'écart à la gaussianité du rapport est simplement dû au fait que l'écart-type de la distribution de  $\text{CH}_3\text{OH}$  n'est pas petit comparé à sa moyenne, nous avons simulé le calcul d'erreur dans le cas où cette densité de colonne serait mieux déterminée. Nous avons conservé les paramètres précédents pour  $\text{CH}_2\text{DOH}$  mais avons supposé  $N_{\text{CH}_3\text{OH}} = (9,8 \pm 1,5) \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$  (Figure A.3). L'approximation gaussienne pour le rapport  $\text{CH}_2\text{DOH}/\text{CH}_3\text{OH}$  est alors dans ce cas très bonne (Figure A.4).

En conclusion, l'approximation gaussienne est valable dans le cas où l'incertitude sur les deux variables initiales sont suffisamment faibles. Dans le cas contraire, il convient de calculer correctement les barres d'erreur sur le rapport, qui peuvent être asymétriques.

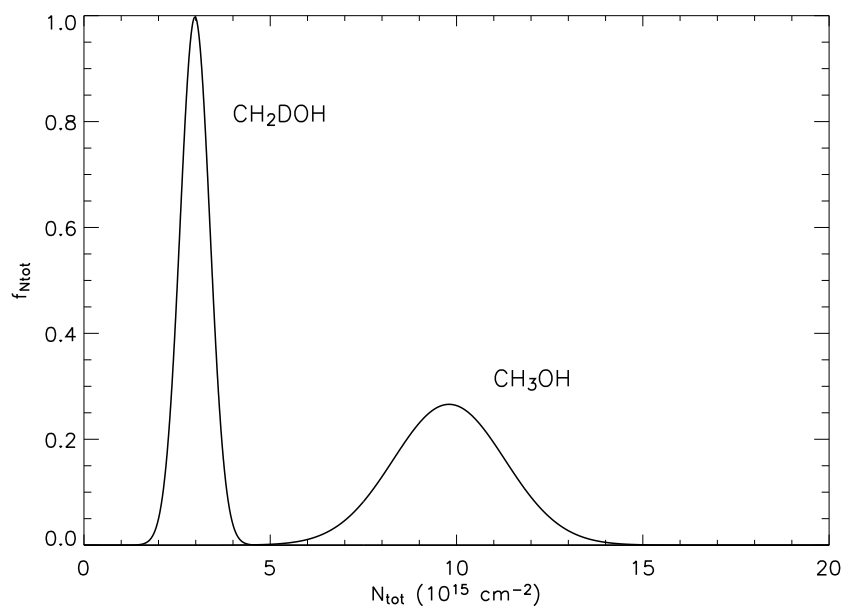


FIG. A.3 – Simulation des fonctions de répartition des densités de colonne de CH<sub>2</sub>DOH et de CH<sub>3</sub>OH dans IRAS16293–2422, en supposant que la densité de colonne de CH<sub>3</sub>OH est mieux contrainte (meilleur rapport signal sur bruit des observations).

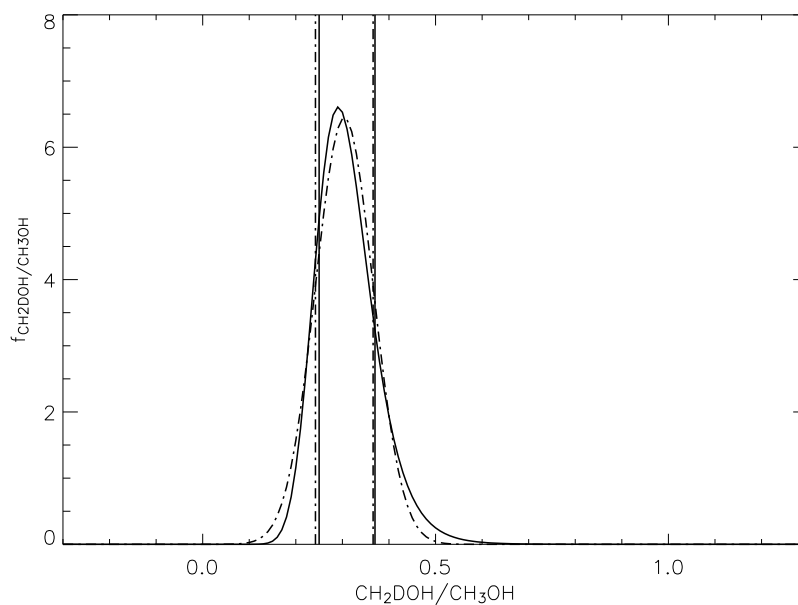


FIG. A.4 – Simulation de la fonction de répartition exacte du rapport isotopique CH<sub>2</sub>DOH/CH<sub>3</sub>OH (trait plein) pour le cas présenté en Fig. A.3. Approximation gaussienne (trait pointillé). Les barres verticales délimitent les intervalles de confiance à 68% pour chacune des distributions.





## Annexe B

# Renseignements complémentaires

### Sommaire

---

<b>B.1</b>	Liste des publications dans les journaux à comité de lecture . . . .	<b>209</b>
<b>B.2</b>	Collaborations . . . . .	<b>210</b>
<b>B.3</b>	Conférences . . . . .	<b>211</b>
<b>B.4</b>	Séminaires de laboratoire . . . . .	<b>212</b>

---

### B.1 Liste des publications dans les journaux à comité de lecture

2004

*Theoretical HDO emission from protostellar envelopes*

**B. Parise**, C. Ceccarelli, S. Maret

en préparation

*Testing grain surface chemistry : a survey of deuterated formaldehyde and methanol towards low-mass Class 0 protostars*

**B. Parise** et al.

en préparation

*Molecular deuteration on grain surfaces*

J.V. Keane, **B. Parise**, A.G.G.M. Tielens

en préparation

*HDO abundance in the envelope and in the flow of the Solar-type protostar IRAS16293–2422*

**B. Parise**, E.Caux, A. Castets, C. Ceccarelli, L. Loinard, A.G.G.M. Tielens, A. Bacmann, S. Cazaux, C. Comito, F. Helmich, C. Kahane, P. Schilke, E. van Dishoeck, V. Wakelam, A. Walters

Astronomy and Astrophysics, sous presse.

*Complex molecules in the hot core of the low-mass protostar NGC1333–IRAS4A*

S. Bottinelli, C. Ceccarelli, B. Lefloch, J.P. Williams, A. Castets, E. Caux, S. Cazaux, S. Maret, **B. Parise**, A.G.G.M. Tielens  
Astrophysical Journal, 615, 354

*The H<sub>2</sub>CO abundance in the inner warm regions of low mass protostellar envelopes*

S. Maret, C. Ceccarelli, E. Caux, A.G.G.M. Tielens, J.K. Jorgensen, E. van Dishoeck, A. Bacmann, A. Castets, B. Lefloch, L. Loinard, **B. Parise** and F.L. Schoier  
Astronomy and Astrophysics, 416, 577

*First detection of triply-deuterated methanol*

**B. Parise**, A. Castets, E. Herbst, E. Caux, C. Ceccarelli, I. Mukhopadhyay, A.G.G.M. Tielens  
Astronomy and Astrophysics, 416, 159  
**2003**

*Search for solid HDO in low-mass protostars*

**B. Parise**, T. Simon, E. Caux, E. Dartois, C. Ceccarelli, J. Rayner and A.G.G.M. Tielens  
Astronomy and Astrophysics 410, 897

*The Hot Core around the low-mass protostar IRAS16293–2422 : Scoundrels rule !*

S. Cazaux, A.G.G.M. Tielens, C. Ceccarelli, A. Castets, V. Wakelam, E. Caux, **B. Parise** and D. Teyssier  
Astrophysical Journal 593, 51  
**2002**

*Submm-FIR CO line emission from the disk of the Class I protostar EL 29*

C. Ceccarelli, A.C.A. Boogert, A.G.G.M. Tielens, E. Caux, M.R. Hogerheijde and **B. Parise**  
Astronomy and Astrophysics 395, 863

*Detection of doubly-deuterated methanol in the solar-type protostar IRAS16293–2422*

**B. Parise**, C. Ceccarelli, A.G.G.M. Tielens, E. Herbst, B. Lefloch, E.Caux, A.Castets, I. Mukhopadhyay, L. Pagani and L. Loinard  
Astronomy and Astrophysics 393, L49  
**2001**

*Imaging polarimetric observations of a new circumstellar disk system*

J. Kuhn, D. Potter and **B. Parise**  
Astrophysical Journal 553, 189

## B.2 Collaborations

J'ai eu la chance pendant ce travail de thèse de pouvoir profiter de collaborations très enrichissantes au cours de plusieurs séjours passés à l'étranger :

- La partie spectroscopie moléculaire a bénéficié d’une collaboration étroite avec Eric Herbst (Ohio State University - Columbus - USA). J’ai effectué deux séjours à Columbus (une semaine en octobre 2002 et 15 jours en juin 2003).
- La partie modélisation sur les grains a été faite en collaboration avec Jacqueline Keane (NASA-Ames) et A.G.G.M. Tielens (Kapteyn - Pays-Bas). Ce travail a été effectué lors de deux séjours en Californie : un mois à Berkeley en novembre 2002 puis un mois et demi à Lawrence Livermore National Laboratory en juillet-août 2003.
- Les observations IRTF ont été préparées et effectuées en collaboration avec Theodore Simon (Institute for Astronomy - Honolulu - USA). J’ai passé une semaine à l’IfA après le run d’observation en décembre 2003.

### B.3 Conférences

J’ai eu aussi l’occasion de participer à des colloques qui m’ont permis de rencontrer les chercheurs et communiquer mes recherches.

- Colloque Franco-Italien sur la formation des étoiles  
31 janvier - 2 février 2002, Lanslebourg, France  
Participation au colloque, communication orale sur le méthanol deutéré dans IRAS 16293–2422.
- Star Formation Workshop ”Magnetohydrodynamics, Radiation Diagnostics, and Chemistry of Star Formation”  
12-16 juin 2002, Taroko Gorge, Taiwan  
Participation au colloque, présentation d’un poster ”Doubly deuterated methanol towards IRAS16293–2422”
- Rencontres de la communauté de Physico-Chimie du Milieu Interstellaire (PCMI)  
Juillet 2002, Bordeaux, France  
Participation au colloque, présentation d’un poster ”Méthanol deutéré dans la protoétoile IRAS16293-2422”
- SFCHEM 2002, Chemistry as a Diagnostic of Star Formation  
21-23 août 2002, Waterloo, Canada  
Présentation d’un poster ”Deuterated methanol towards the protostar IRAS16293–2422”, acte de conférence Parise et al. (2002a)
- Ecole d’Ete d’interférométrie millimétrique de l’IRAM  
30 septembre - 6 octobre 2002, Grenoble, France
- 58<sup>th</sup> Ohio State University International Symposium on Molecular Spectroscopy  
16-20 juin 2003, Columbus, Etats-Unis  
Participation au colloque. Contribution orale “Multiply-deuterated methanol in low-mass protostars”
- Rencontres de la Société Française d’Astronomie et Astrophysique (SF2A)

16-20 juin 2003, Bordeaux, France

Présentation de deux posters :

“Détection de méthanol triplement deutéré”

“Recherche de HDO solide vers des protoétoiles de faible masse”

Actes de conférence Parise et al. (2003a) et Parise et al. (2003b)

- The dense Interstellar Medium in Galaxies

22-26 septembre 2003, Zermatt, Suisse

Participation au colloque. Présentation d’un poster sur la détection de  $\text{CD}_3\text{OH}$  dans IRAS16293–2422, sélectionné pour figurer dans les proceedings (Parise 2003)

- Radiative Transfer Modeling of Water Workshop

22-24 mars 2004, Leiden, Pays-Bas

Participation au workshop. Contribution orale “Modeling HDO lines for HIFI”

## B.4 Séminaires de laboratoire

J’ai aussi eu l’occasion de présenter mes travaux dans divers laboratoires dans le cadre de séminaires hebdomadaires.

- Département de physique, Ohio State University, Columbus

Novembre 2002

”Observation of deuterated molecules in star-forming regions”

- Lunch talk à l’Institute for Astronomy, Honolulu, Hawaii

5 Décembre 2002

“The abundance of deuterated molecules in star-forming regions : a key to understand chemical processes occurring in protostellar envelopes”

- Séminaire au Laboratoire d’Astrophysique de l’Observatoire de Grenoble (LAOG) / IRAM

22 janvier 2004

“La deutération dans les protoétoiles de faible masse”