La deutération de l'eau dans les régions de formation stellaire : Apport des données spectroscopiques Herschel/HIFI

Audrey Coutens

▶ **To cite this version:**

Audrey Coutens. La deutération de l'eau dans les régions de formation stellaire : Apport des données spectroscopiques Herschel/HIFI. Astrophysique stellaire et solaire [astro-ph.SR]. Université Paul Sabatier - Toulouse III, 2012. Français. NNT : . tel-00763292

HAL Id: tel-00763292

https://theses.hal.science/tel-00763292

Submitted on 10 Dec 2012

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 de Toulouse

THÈSE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par *l'Université Toulouse III – Paul Sabatier*
Discipline ou spécialité : *Astrophysique*

Présentée et soutenue par *Audrey COUTENS*
Le *30 Octobre 2012*

Titre :
La deutération de l'eau dans les régions de formation stellaire :
Apport des données spectroscopiques Herschel/HIFI

JURY

Rapporteurs :
Cécile GRY – Astronome – LAM, Marseille
Laurent LOINARD – Professeur – Universidad Nacional Autónoma de México

Examinateurs :
Emmanuel DARTOIS – Chargé de recherche – IAS, Orsay
Valentine WAKELAM – Chargée de recherche – LAB, Bordeaux
Laurent WIESENFELD – Chargé de recherche – IPAG, Grenoble

Président :
Alain KLOTZ – Professeur – IRAP, Toulouse

Ecole doctorale :
Sciences de l'Univers, de l'Environnement et de l'Espace (SDU2E)

Unité de recherche :
Institut de Recherche en Astrophysique et Planétologie – UMR 5277

Directeurs de Thèse :
Charlotte VASTEL – Astronome adjoint – IRAP, Toulouse
Emmanuel CAUX – Directeur de recherche – IRAP, Toulouse

Résumé

L'eau (H_2O) est une des molécules les plus abondantes du milieu interstellaire. En plus d'être un ingrédient nécessaire à l'apparition de la Vie, elle joue également un rôle important dans le processus de formation stellaire à travers le refroidissement du gaz chaud et contrôle aussi la chimie de nombreuses autres espèces, que ce soit en phase gazeuse ou à la surface des grains. Etudier sa forme deutérée HDO constitue un moyen unique, à travers l'estimation du rapport HDO/H_2O, de contraindre les mécanismes de formation de l'eau ainsi que de mieux comprendre l'origine de l'eau des océans terrestres. Les résultats récents obtenus avec le satellite Herschel montrent en effet que le rapport HDO/H_2O observé dans les comètes est similaire à celui mesuré dans les océans ($\sim 1.5 \times 10^{-4}$), suggérant que l'eau pourrait avoir été apportée sur Terre par les comètes lors de grands bombardements (Hartogh et al. 2011).

Dans cette thèse, je me suis intéressée à l'étude de l'eau deutérée durant les premières étapes de la formation stellaire, la phase de Classe 0, qui précèdent la formation du disque proto-planétaire menant à la naissance des planètes et des comètes. En modélisant avec un code 1D de transfert radiatif hors-Equilibre Thermodynamique Local les profils des nombreuses raies de HDO et $H_2{}^{18}O$ observées avec l'instrument HIFI (*Heterodyne Instrument for Far-Infrared*) de l'Observatoire Spatial Herschel et des télescopes terrestres (IRAM, JCMT), j'ai déterminé des rapports HDO/H_2O de la proto-étoile de type solaire IRAS 16293-2422 de l'ordre de 2% dans le *hot corino*, la partie interne de l'enveloppe suffisamment chaude ($T > 100$ K) pour que les molécules d'eau collées à la surface des grains désorbent en phase gazeuse, et de 0.5% dans l'enveloppe externe plus froide. Grâce à ce travail (Coutens et al. 2012), la présence en avant-plan d'une couche d'absorption riche en eau a été mise en évidence observationnellement pour la première fois. Elle pourrait être due à des processus de photo-désorption des molécules d'eau piégées dans les manteaux de glace des grains, en bordure de nuage moléculaire, par le champ interstellaire UV. Les estimations des rapports HDO/H_2O ainsi que D_2O/HDO dans cette source permettent de contraindre les conditions de formation de l'eau dans ce type d'objet et suggèrent notamment que l'eau se serait probablement formée avant l'effondrement gravitationnel du nuage. Cette étude a ensuite été étendue à d'autres proto-étoiles de type solaire NGC 1333 IRAS 4A et NGC 1333 IRAS 4B pour lesquelles j'ai estimé les abondances d'eau deutérée et constaté qu'une couche d'absorption étendue entourait également ces sources. Les rapports HDO/H_2O élevés de la proto-étoile IRAS 16293-2422 suggèrent que des mécanismes nécessaires à la diminution de ces rapports isotopiques prennent place entre l'étape de Classe 0 et la formation des comètes. Il faudra néanmoins étudier un plus grand échantillon de proto-étoiles pour savoir si cette tendance est générale ou non. Les abondances de HDO obtenues dans les proto-étoiles NGC 1333 IRAS 4A et NGC 1333 IRAS 4B serviront donc à de prochaines estimations des rapports HDO/H_2O. Enfin, je me suis également attachée à étudier l'eau deutérée dans des sources proto-stellaires beaucoup plus massives et plus lumineuses que les proto-étoiles de type solaire et présente ici le cas de la région HII ultra-compacte G34.26+0.15.

Abstract

Water (H_2O) is one of the most abundant molecules in the interstellar medium. In addition to being a primordial ingredient in the emergence of life, this species plays an essential role in the process of star formation through the cooling of warm gas. It also controls the chemistry for many species, either in the gas phase or on the grain surfaces. Studying its deuterated form HDO is a unique opportunity, through the estimation of the HDO/H_2O ratio, to constrain the mechanisms of water formation and to better understand the origin of water contained in terrestrial oceans. Indeed, recent results obtained with the Herschel satellite show that the HDO/H_2O ratio observed in comets is similar to the value measured in oceans ($\sim 1.5 \times 10^{-4}$), which suggests that comets could have brought a large fraction to Earth to form the oceans during heavy bombardments (Hartogh et al. 2011).

In this thesis, I was interested in the study of deuterated water in the first stages of star formation, the Class 0 stage, which precede the formation of the protoplanetary disk leading to the birth of comets and planets. Through a 1D non-Local Thermodynamic Equilibrium radiative transfer modeling of the line profiles of the numerous HDO and $H_2{}^{18}O$ transitions detected with the HIFI (*Heterodyne Instrument for Far-Infrared*) instrument onboard the Herschel Space Observatory and ground-based telescopes (IRAM, JCMT), I determined that the HDO/H_2O ratios of the solar-type protostar IRAS 16293-2422 was about 2% in the *hot corino*, the inner part of the protostellar envelope sufficiently warm ($T > 100$ K) to desorb in gas phase the water molecules trapped in the icy grain mantles, and about 0.5% in the colder part of the envelope. This study (Coutens et al. 2012) also allowed me to show that an absorbing layer rich in water surrounds the protostar. This layer could be produced by the photo-desorption through the UV field of the water molecules frozen on the grains, on the edges of the molecular cloud. The HDO/H_2O ratios as well as the D_2O/HDO ratios determined in IRAS 16293-2422 enable to constrain the conditions of water formation in this kind of objects and in particular suggest that water would be formed before the gravitational collapse of the cloud. This study was then extended to other solar-type protostars NGC 1333 IRAS 4A and NGC 1333 IRAS 4B, for which I estimated the abundances of deuterated water and noticed that an extended absorbing layer also surrounds these sources. The high HDO/H_2O ratios determined in IRAS 16293-2422 suggest that mechanisms are required between the Class 0 stage and the comets formation to decrease these isotopic ratios. It is however necessary to study a larger sample of protostars to know if this trend is observed in most of the sources. The HDO abundances obtained in NGC 1333 IRAS 4A and NGC 1333 IRAS 4B will consequently be useful to estimate their HDO/H_2O ratios. Finally, I also studied deuterated water in protostellar objects more massive and more luminous than solar-type protostars and show here the case of the ultra-compact HII region G34.26+0.15.

Remerciements

Pour commencer, je tiens à remercier chaleureusement Charlotte Vastel et Emmanuel Caux de m'avoir encadrée lors de cette thèse ainsi que lors des stages de Master 1 et 2 précédemment réalisés avec eux. Ce fut pour moi un vrai plaisir de travailler et d'apprendre à leurs côtés. Je les remercie pour leur disponibilité et l'orientation qu'ils ont su donner à ma thèse. Charlotte, je te remercie tout particulièrement pour les encouragements que tu as prodigués tout au long de ma thèse et qui m'ont beaucoup apporté.

Avec l'aboutissement de ces trois ans de thèse, je souhaite vivement remercier Cécile Gry et Laurent Loinard d'avoir accepté d'être rapporteurs de ma thèse, Valentine Wakelam, Emmanuel Dartois et Laurent Wiesenfeld d'avoir fait partie de mon jury et Alain Klotz de l'avoir présidé.

Je tiens aussi à remercier Claudine Kahane de m'avoir accompagnée lors de mes premières observations à l'IRAM, tout comme Darek Lis pour les observations au CSO. Ils m'ont permis d'acquérir les bases de l'observation et je leur en suis grandement reconnaissante.

Les différentes réunions réalisées dans le cadre des programmes CHESS et PRISMAS ainsi que l'ANR FORCOMS ont été riches en rencontres humaines. Ce fut un grand plaisir de discuter avec un bon nombre de personnes rencontrées à ces occasions. Je les remercie donc, ainsi que Cecilia Ceccarelli et Maryvonne Gerin pour la mise en oeuvre de tels programmes. Merci aussi à Cecilia pour l'enthousiasme qu'elle a su montrer lors des nombreux échanges que nous avons eus pendant ma thèse.

Je remercie les doctorants de l'IRAP (actuels et anciens) pour l'ambiance conviviale qu'ils ont su créer au sein du labo. J'ai une pensée particulière pour Aurélia et Laurianne avec qui j'ai affronté les derniers mois difficiles de rédaction. Bon courage à vous deux pour la dernière ligne droite ! Je remercie aussi les différentes personnes avec qui j'ai pu partager les repas du midi et qui les ont rendus plus qu'agréables. Mention spéciale à Yann et Ritchie pour leur humour inimitable.

Ce fut un grand plaisir de partager mon bureau tout d'abord avec Damien puis avec Sandrine. Je les en remercie vivement. Merci Damien pour l'accueil que tu as su me réserver dès mon arrivée au labo alors que je ne connaissais pas grand monde. Merci aussi au groupe MICMAC pour l'attention qu'il porte à ses doctorants.

Je souhaite aussi remercier plusieurs de mes ami(e)s rencontré(e)s le long de mon cursus scolaire ou ailleurs et qui ont toujours porté un intérêt à ma thèse. Merci donc à Marjorie, Delphine, Zalpha, Brice, Lise, Amanda, Lauréline, Laetitia, Julien, Antoine, ...

Bien évidemment, je remercie grandement Nico pour avoir toujours cru en moi ainsi que pour m'avoir supportée pendant les périodes stressantes de la thèse. Merci pour tout !

Enfin, je tiens à remercier très chaleureusement ma famille, et en particulier mes parents, pour l'aide qu'ils m'ont apportée pendant toutes mes études ainsi que pour le soutien dont ils ont su faire preuve. Malgré mes idées qui ont pu leur paraître bien saugrenues, ils m'ont toujours laissé choisir ma voie et je leur en suis extrêmement reconnaissante.

Sommaire

Introduction **1**

1 Contexte astrophysique **3**
1.1 La formation stellaire . . . 3
1.1.1 La formation d'étoiles de type solaire . . . 3
1.1.2 La formation d'étoiles massives . . . 5
1.2 La chimie associée à la formation stellaire . . . 7
1.2.1 La chimie du milieu interstellaire . . . 7
1.2.2 Les *hot cores* et *hot corinos* . . . 8
1.2.3 Les hydrocarbures et la chimie *WCCC* (*Warm Carbon Chain Chemistry*) 9
1.2.4 La deutération . . . 12
1.2.5 L'eau et ses isotopes . . . 17
1.3 L'Observatoire Spatial Herschel . . . 24
1.3.1 L'Observatoire Spatial Herschel . . . 24
1.3.2 L'instrument HIFI . . . 24
1.3.3 Implications dans les programmes à temps garanti : CHESS et PRISMAS 29

2 Les outils d'analyse et de modélisation **33**
2.1 Des observations à la réduction des données . . . 33
2.1.1 Les observations . . . 33
2.1.2 La préparation des observations HIFI du programme PRISMAS . . . 37
2.1.3 La réduction de données . . . 39
2.2 L'analyse des données . . . 42
2.2.1 L'analyse avec CASSIS . . . 42
2.2.2 Les bases de données spectroscopiques . . . 43
2.2.3 Analyse du relevé spectral TIMASSS . . . 44
2.3 Les modèles de transfert radiatif . . . 50
2.3.1 Transfert radiatif . . . 50
2.3.2 Modélisation ETL : les diagrammes rotationnels . . . 55
2.3.3 Modélisation hors-ETL . . . 57

3 La deutération de l'eau dans la proto-étoile de faible masse IRAS 16293-2422 **65**
3.1 La proto-étoile IRAS 16293-2422 . . . 65
3.2 Observations . . . 67
3.2.1 Données Herschel/HIFI . . . 67
3.2.2 Données IRAM-30m . . . 70
3.2.3 Données JCMT . . . 70
3.3 Modélisation et résultats . . . 71
3.3.1 Modélisation . . . 71
3.3.2 Les coefficients de collision de l'eau deutérée . . . 74

3.3.3 Modélisation de l'eau deutérée . . . 74
3.3.4 Modélisation de l'eau . . . 82
3.3.5 Modélisation de l'eau lourde . . . 88
3.3.6 Rapports HDO/H_2O, D_2O/HDO et D_2O/H_2O . . . 91
3.4 Discussion sur le fractionnement en deutérium de l'eau . . . 93
3.4.1 Comparaison avec de précédentes études . . . 93
3.4.2 Contraintes sur la formation de l'eau . . . 94
3.4.3 Comparaison du rapport HDO/H_2O dans d'autres proto-étoiles . . . 97
3.4.4 Comparaison avec le modèle chimique d'Aikawa et al. (2012) . . . 98

4 L'eau deutérée dans les proto-étoiles de faible masse NGC 1333 IRAS 4A et IRAS 4B 101
4.1 La région de formation stellaire NGC 1333 IRAS 4 . . . 101
4.2 Observations . . . 104
4.2.1 Données Herschel/HIFI . . . 104
4.2.2 Données IRAM-30m . . . 104
4.2.3 Données JCMT . . . 104
4.2.4 Données CSO . . . 106
4.3 Modélisation et résultats . . . 107
4.3.1 Modélisation . . . 107
4.3.2 L'enveloppe proto-stellaire d'IRAS 4A . . . 109
4.3.3 L'enveloppe proto-stellaire d'IRAS 4B . . . 112
4.3.4 Le flot moléculaire d'IRAS 4A . . . 114
4.4 Discussion et perspectives . . . 115
4.4.1 Détermination des rapports HDO/H_2O . . . 115
4.4.2 Comparaison des abondances de HDO entre proto-étoiles de faible masse 117
4.4.3 Perspectives pour la proto-étoile IRAS 4B . . . 117

5 Etude de l'eau deutérée dans des proto-étoiles massives : le cas de la région HII G34.26+0.15 121
5.1 La région HII ultra-compacte G34.26+0.15 . . . 122
5.2 Observations . . . 124
5.2.1 Données Herschel/HIFI . . . 124
5.2.2 Données IRAM-30m . . . 125
5.2.3 Données CSO . . . 126
5.3 Modélisation et résultats . . . 126
5.3.1 La structure de la source G34 . . . 126
5.3.2 Contraintes du profil en vitesse et du paramètre b-doppler . . . 127
5.3.3 Influence du décalage entre observations pointées et pic d'émission du HDO . . . 130
5.3.4 Influence de la température de saut sur la détermination des abondances 131
5.4 Discussion et perspectives . . . 137
5.4.1 Discussion des résultats et perspectives pour le rapport HDO/H_2O . . . 137
5.4.2 Discussion des abondances de HDO . . . 138

6 Conclusion et perspectives **141**

A Etude des hydrocarbures dans la proto-étoile de faible masse IRAS 16293-2422 **147**

A.1 Etude des hydrocarbures dans le relevé spectral TIMASSS 147

A.1.1 Hydrocarbures détectés dans le relevé spectral TIMASSS 147

A.1.2 Diagrammes rotationnels 150

A.2 Etude interférométrique du propyne (CH_3CCH) avec ATCA 154

A.3 Cartographie des hydrocarbures avec le télescope de l'IRAM-30m 156

A.3.1 Présentation des cartes 156

A.3.2 Interprétation des cartes 157

Publications **169**

Acronymes **203**

Table des figures **205**

Liste des tableaux **211**

Bibliographie **213**

Introduction

Ce travail de thèse a permis d'étudier la deutération de l'eau dans plusieurs régions de formation stellaire : trois proto-étoiles de faible masse (IRAS 16293-2422, NGC 1333 IRAS 4A et NGC 1333 IRAS 4B) et une région de formation d'étoiles massives (G34.26+0.15). L'eau est en effet une des molécules les plus abondantes du milieu interstellaire en plus d'être une molécule nécessaire à la Vie. Elle joue aussi un rôle important dans la formation stellaire à travers le refroidissement du gaz. Etudier sa forme deutérée HDO est donc un moyen unique d'en apprendre plus sur la chimie de l'eau et son fractionnement en deutérium et de tenter de comprendre l'origine de l'eau des océans terrestres.

Dans le premier Chapitre, j'évoquerai les différentes étapes de la formation stellaire qu'elle soit de type solaire (faible masse) ou massive, l'évolution de la chimie au sein de ces objets proto-stellaires et notamment la mise en place du fractionnement en deutérium nécessaire à l'explication des rapports D/H élevés observés dans ces objets. Je terminerai ce chapitre en introduisant le satellite Herschel et plus spécifiquement son instrument HIFI, dont les données obtenues dans le cadre de deux programmes de temps garanti CHESS et PRISMAS constituent un aspect majeur de cette thèse, l'acquisition des premières données coïncidant avec le début de ma thèse.

Le Chapitre 2 me permettra de présenter les outils utilisés dans cette thèse depuis l'acquisition des données observationnelles jusqu'à leur modélisation. Je traiterai donc dans un premier temps des méthodes d'observation, de leur préparation et de la réduction des données. Puis j'expliquerai comment j'ai analysé, principalement avec le logiciel CASSIS développé à l'IRAP, les spectres afin de notamment identifier les espèces présentes. Je terminerai ce chapitre en décrivant les différents modèles de transfert radiatif qui ont servi à cette thèse et en particulier le code hors-ETL 1D RATRAN utilisé pour déterminer les abondances internes (dans la région où subliment les manteaux de glace d'eau) et externes d'eau deutérée dans chacune des quatre sources étudiées.

Au Chapitre 3, je présenterai l'analyse en HDO et $H_2{}^{18}O$ de la proto-étoile de type solaire IRAS 16293-2422 réalisée à partir des nombreuses transitions détectées à haute résolution spectrale dans le relevé spectral HIFI (programme CHESS) et qui a mené à de nouvelles estimations des rapports d'abondance HDO/H_2O dans cette source. C'est la première fois qu'un aussi grand nombre de raies de HDO, couvrant une large gamme en énergie, était utilisé pour une telle étude. La transition fondamentale à 894 GHz, très difficile à détecter depuis le sol, a notamment pu être observée avec un très bon rapport signal/bruit avec HIFI, permettant de contraindre fortement les abondances de HDO grâce à une modélisation basée sur les profils de raies et non sur leurs flux intégrés. Les rapports D_2O/HDO ont également pu être déterminés grâce à la première détection de la transition fondamentale de ortho–D_2O à 607

GHz avec HIFI. Je comparerai alors ces résultats avec de précédentes études sur cet objet ainsi que sur des sources similaires. Nous verrons enfin quelles contraintes vont apporter ces résultats sur la chimie de l'eau.

A la suite des résultats obtenus pour la source IRAS 16293-2422, j'ai voulu étendre l'analyse en HDO à d'autres sources dans le cadre d'une collaboration entre trois programmes Herschel CHESS, WISH et HEXOS. Le Chapitre 4 montre l'étude de HDO dans les deux proto-étoiles de type solaire dont j'avais la charge, NGC 1333 IRAS 4A et NGC 1333 IRAS 4B.

Je me suis également intéressée à l'étude de l'eau deutérée dans les proto-étoiles massives du programme Herschel PRISMAS afin de mieux comprendre la chimie de l'eau dans ces objets plus massifs et plus lumineux que les proto-étoiles de type solaire. Le Chapitre 5 présente le cas de la région HII ultra-compacte G34.26+015.

Je terminerai en présentant les conclusions et perspectives de cette thèse.

Une étude des hydrocarbures dans la proto-étoile IRAS 16293-2422 est, par ailleurs, présentée en Annexe A. Elle a débuté, avant l'arrivée des données Herschel, par l'analyse du relevé spectral TIMASSS. Avec les premières données Herschel, ma thèse s'est alors plutôt orientée vers l'étude de l'eau deutérée. Des demandes de temps d'observation ont néanmoins été réalisées au cours de cette thèse pour étudier plus en détail l'émission des chaînes carbonées détectées dans le relevé spectral. Je montre donc succinctement en annexe les résultats obtenus sur cette thématique.

Chapitre 1

Contexte astrophysique

Sommaire

1.1 La formation stellaire 3
1.1.1 La formation d'étoiles de type solaire 3
1.1.2 La formation d'étoiles massives 5
1.2 La chimie associée à la formation stellaire 7
1.2.1 La chimie du milieu interstellaire 7
1.2.2 Les *hot cores* et *hot corinos* 8
1.2.3 Les hydrocarbures et la chimie *WCCC* (*Warm Carbon Chain Chemistry*) 9
1.2.4 La deutération 12
1.2.5 L'eau et ses isotopes 17
1.3 L'Observatoire Spatial Herschel 24
1.3.1 L'Observatoire Spatial Herschel 24
1.3.2 L'instrument HIFI 24
1.3.3 Implications dans les programmes à temps garanti : CHESS et PRISMAS 29

1.1 La formation stellaire

1.1.1 La formation d'étoiles de type solaire

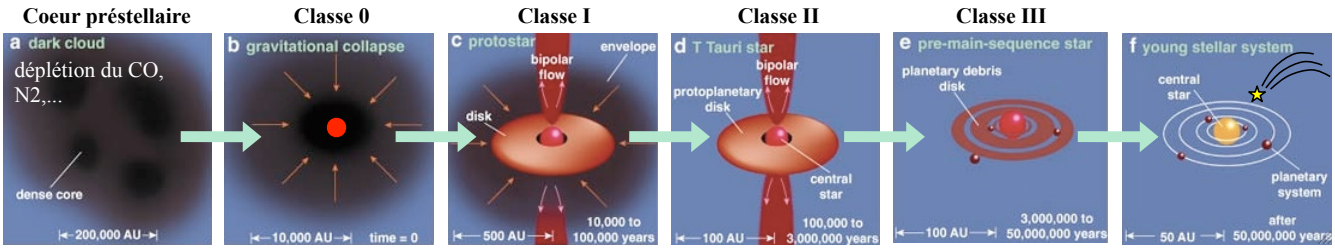


Figure 1.1 – Les différentes étapes de la formation stellaire (Source : Spitzer Science Center).

Les étoiles se forment dans des nuages de gaz (principalement constitués de H_2) et de poussières, appelés *nuages moléculaires*. A l'intérieur de ces nuages présentant des structures filamentaires, notamment révélées par le satellite Herschel, peuvent se former des condensations de matière liées gravitationnellement, du fait que la pression thermique, la turbulence et le champ magnétique s'opposent à la force exercée par leur propre poids. Sous certaines conditions, ces cœurs peuvent devenir instables et s'effondrer gravitationnellement. On parle

alors de *cœurs pré-stellaires*. Ils présentent en leur centre des densités relativement élevées ($\sim 10^5$-10^6 cm^{-3}) et des températures faibles ($\sim$ 10 K).

En raison de l'effondrement, la densité va augmenter considérablement au centre de l'objet, entraînant ainsi une augmentation de la température. Un embryon stellaire hydrostatique se forme alors. On parle, à ce stade, de *proto-étoile de Classe 0*. On se retrouve donc avec un cœur proto-stellaire entouré d'une large enveloppe de poussière. C'est pendant cette étape que l'étoile va acquérir la plus grande partie de sa masse, par accrétion de l'enveloppe sur l'objet central. De puissants jets de matière peuvent également s'échapper de la proto-étoile. L'émission dans le submillimétrique est étendue mais piquée au centre, indiquant la présence d'une enveloppe de poussière de forme plus ou moins sphérique. La luminosité submillimétrique (qui caractérise l'émission de la poussière de l'enveloppe) est plus grande que 0.005 fois la luminosité bolométrique (liée à l'objet central), ce qui signifie que la masse de l'enveloppe est plus importante que celle de la proto-étoile.

Petit à petit, l'enveloppe s'amincit. Quand la masse de l'enveloppe devient inférieure à la masse de l'objet central, la source devient une *proto-étoile de Classe I*. A ce stade, un disque de poussière est observable autour de l'objet central. Il est possible que ce disque commence sa formation à l'étape de Classe 0, mais il n'a encore jamais été observé du fait de l'épaisse enveloppe l'entourant. Les objets de classe I sont également sources de flots de matière, mais ceux-ci sont bien moins collimatés et moins puissants que ceux de la Classe 0. La distribution spectrale d'une proto-étoile de Classe I se caractérise par un excès infrarouge dû à la présence du disque, par comparaison à une proto-étoile de Classe 0.

Quand l'enveloppe a totalement disparu, la proto-étoile est qualifiée de *Classe II* ou *T Tauri classique*. Le disque d'accrétion émet alors un fort rayonnement infrarouge, tandis que le rayonnement visible provenant de l'étoile finit par nous parvenir. Les objets de Classe II peuvent aussi posséder des jets de matière mais moins massifs que lors des phases précédentes. Le disque d'accrétion s'amenuise peu à peu, aboutissant à la formation de planétésimaux. L'excès infrarouge dû à l'émission du disque diminue et la distribution spectrale montre alors principalement l'émission du corps noir de l'étoile dans le visible. Ces objets que l'on appelle *T Tauri faibles* font partie de la *Classe III*.

En même temps que se forment les planètes, l'objet central continue sa contraction jusqu'à ce que sa température soit suffisamment élevée pour démarrer les réactions nucléaires en son sein. Il appartient alors à la séquence principale. L'étoile entourée de ses planètes peut alors présenter un aspect similaire à celui de notre Système Solaire. Il est important de noter que les différentes phases décrites ici ne s'appliquent qu'aux étoiles de faible masse telle que notre Soleil. Pour les étoiles massives, les mécanismes en jeu sont différents et encore mal compris (cf Sect. 1.1.2).

Les étapes successives de la formation d'étoiles de type solaire détaillées ci-dessus sont résumées en Figure 1.1. La classification des proto-étoiles selon l'évolution du spectre du continuum a été mise en évidence par Adams et al. (1987) et André et al. (1993). Elle est représentée en Figure 1.2.

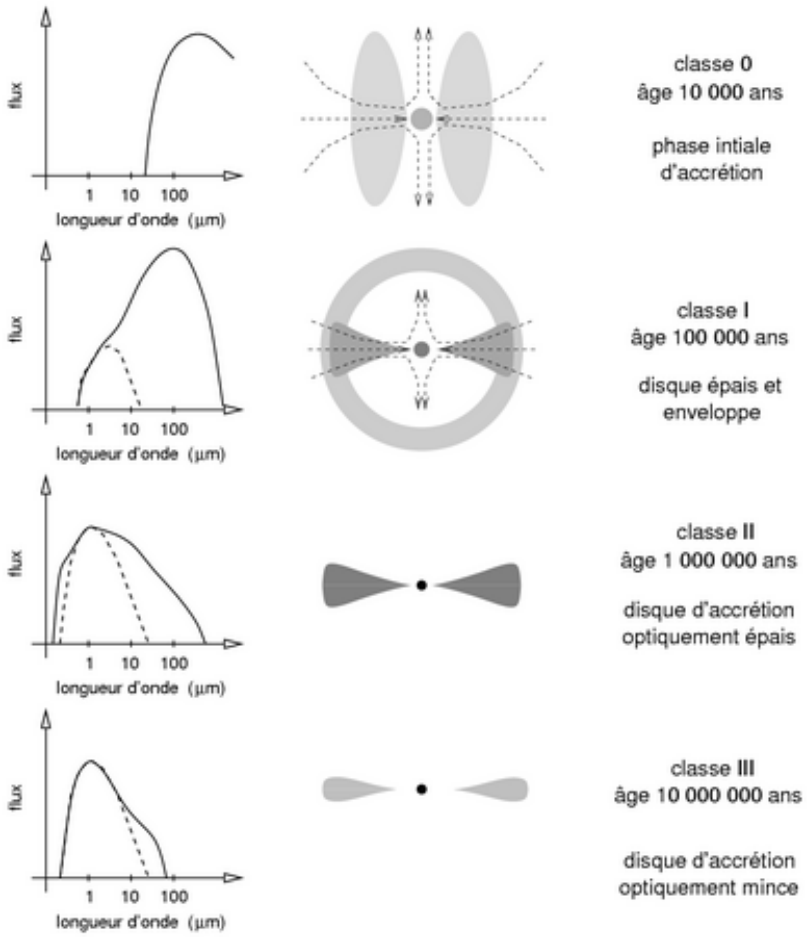


Figure 1.2 – Les quatre classes observationnelles du scénario de formation des étoiles de faible masse (André 1994) : spectre du continuum (à gauche) et géométrie du système (au milieu) au cours de la formation stellaire.

1.1.2 La formation d'étoiles massives

La formation d'étoiles massives est encore mal comprise. Néanmoins, les avis convergent sur le fait qu'elle n'est pas une version à plus grande échelle de la formation d'étoiles de faible masse (Zinnecker & Yorke 2007). Une proto-étoile est considérée comme massive à partir du moment où sa masse dépasse 8 $M_\odot$. Ce type de formation a lieu dans des nuages moléculaires géants, c'est-à-dire présentant des densités de colonne de H_2 de l'ordre de 10^{23}–10^{24} cm^{-2}. Les sources massives se forment plus généralement en amas, elles peuvent ensuite être éjectées hors de l'amas. Il semble néanmoins que dans certains cas, on ne puisse pas retrouver l'amas d'origine, suggérant qu'elles puissent se former isolément (de Wit et al. 2005; Selier et al. 2011; Bestenlehner et al. 2011). Les sources massives en formation peuvent être subdivisées en plusieurs catégories :

- les *nuages sombres infrarouges*, appelés IRDCs pour *InfraRed Dark Clouds* qui ne possèdent pas encore de cœur en leur centre et sont donc encore froids,

- les cœurs moléculaires chauds appelés *hot cores* qui se caractérisent par la présence d'une chimie riche en molécules complexes organiques (cf Sect. 1.2.2),
- les *régions HII hyper-compactes* et *ultra-compactes* qui présentent des poches de gaz ionisé dû à la photo-évaporation des disques (pour les régions HII hyper-compactes) ou à la photo-ionisation du cocon de poussière et de gaz dans lequel elles sont nées (pour les régions HII ultra-compactes),
- les *régions HII compactes* et classiques dans lequel le gaz est totalement ionisé, le plus souvent par plusieurs sources, détruisant ainsi le nuage moléculaire parent. Ces sources sont alors observables en infrarouge proche et en visible.

La séquence d'événements menant à la naissance d'étoiles massives semble être la suivante (Zinnecker & Yorke 2007) :

1. la phase de **compression**, qui correspond à la formation de cœurs ou filaments moléculaires denses, à l'intérieur du nuage moléculaire géant. Deux scénarios s'affrontent : *effondrement monolithique* dans un cœur isolé (McKee & Tan 2003) versus *accrétion compétitive* dans un proto-amas (Bonnell et al. 1997, 2001). Le premier suppose que les cœurs sont des condensations moléculaires dans un quasi-équilibre supporté par la turbulence qui mènent à la formation de proto-étoiles massives uniques ou multiples gravitationnellement liées. La masse est supposée être déterminée avant que le processus de formation stellaire n'ait commencé. La compétition pour le matériel en effondrement a seulement lieu entre des membres proches d'un système multiple. Le deuxième scénario décrit la phase de compression comme transitoire en raison de mouvements aléatoires dans le nuage auto-gravitant. La matière qui va former l'étoile peut venir de divers endroits du nuage parental. Les proto-étoiles bougent relativement au gaz moléculaire. Puisque de multiples sources sont souvent formées simultanément, chaque proto-étoile est donc en compétition avec les autres pour le matériel moléculaire disponible.
2. la phase d'**effondrement** qui se passe de façon non-homologue, c'est-à-dire que la distribution relative de matière change (densité uniforme au centre et gradient de densité fort sur les bords ; Larson 1969), contrairement à l'effondrement "inside-out" d'une sphère singulière isotherme décrit par Shu (1977) et qui est admis comme le meilleur modèle de formation des proto-étoiles de faible masse,
3. la phase d'**accrétion** de la matière des objets proto-stellaires. Contrairement aux proto-étoiles de faible masse pour lesquelles l'accrétion s'arrête bien avant le démarrage des réactions nucléaires, les sources massives en formation peuvent éventuellement brûler leur hydrogène et développer des vents radiatifs alors qu'elles continuent d'accréter et donc évoluer sur la séquence principale vers des états plus chauds et plus lumineux.
4. la **destruction du nuage parental** due aux vents, aux jets et au rayonnement UV produits par les étoiles massives. Quand le nuage a totalement été dissipé, on a généralement un amas d'étoiles OB ou une association OB mêlée à des étoiles de masse plus faibles.

Un scénario de *collision stellaire* peut aussi être évoqué : des sources massives fusionneraient entre elles, créant ainsi un objet encore plus massif. Mais il serait plutôt rare et se limiterait aux étoiles les plus massives des amas jeunes les plus riches (e.g. Zinnecker & Yorke 2007).

1.2 La chimie associée à la formation stellaire

1.2.1 La chimie du milieu interstellaire

La chimie du milieu interstellaire se caractérise par deux types de chimie : l'une en phase gazeuse et l'autre à la surface des grains, et qui bien évidemment interagissent entre elles.

Les réactions en phase gazeuse peuvent être divisées en plusieurs catégories telles que :

- les *réactions ion-molécule* du type $A + B^+ \rightarrow C + D^+$; elles sont très souvent sans barrière d'activation, et donc favorisées dans les milieux froids, permettant ainsi la formation d'ions moléculaires de plus en plus complexes,
- la *recombinaison dissociative*, $A^+ + e^- \rightarrow C + D$, qui produit une grande quantité de molécules neutres grâce à l'intéraction entre les ions précédemment formés et des électrons libres,
- les *réactions neutre-neutre* du type $A + B \rightarrow C + D$, très efficaces dans les régions de hautes températures telles que les régions de chocs, les régions de photodissociation et les cœurs chauds des proto-étoiles ; elles peuvent aussi jouer un rôle à basse température quand elles ont lieu entre radicaux libres ou entre un radical libre et une molécule non saturée car elles n'ont généralement pas de barrière d'activation,
- l'*association radiative*, $A + B \rightarrow AB + h\nu$, processus lent mais potentiellement efficace si l'un des partenaires est très abondant (H_2 par exemple),
- la *photodissociation* du type $AB + h\nu \rightarrow A + B$, mécanisme principal de destruction des molécules dans les parties externes des nuages moléculaires soumises au rayonnement ultraviolet,
- le *détachement associatif*, $A^- + B \rightarrow AB + e^-$, impliqué dans la chimie des anions,
- les *réactions de transfert de charge*, $A^+ + B \rightarrow A + B^+$.

La chimie à la surface des grains joue aussi un rôle très important dans la chimie du milieu interstellaire. De nombreuses molécules ne peuvent pas se former en phase gazeuse ou alors en quantité insuffisante par comparaison aux observations. C'est notamment le cas de l'hydrogène moléculaire, H_2, pour lequel la surface du grain de poussière va jouer le rôle de catalyseur en permettant la rencontre entre deux atomes d'hydrogène, ceux-ci étant particulièrement mobiles à la surface des grains. Dès que la molécule H_2 est formée, elle est rapidement éjectée dans la phase gazeuse. D'autres molécules plus complexes se forment aussi à la surface des grains, comme le dioxyde de carbone (CO_2) détecté dans les manteaux de glace des grains (D'Hendecourt & Jourdain de Muizon 1989), ou bien comme le méthanol (CH_3OH, Menten et al. 1988), le sulfure d'hydrogène (H_2S, Minh et al. 1989), etc, molécules pour lesquelles les abondances observées dans la phase gazeuse ne peuvent pas être reproduites par des modèles ne prenant en compte que les processus en phase gazeuse.

La chimie à la surface des grains et la chimie en phase gazeuse interagissent ensemble par des mécanismes d'*adsorption* et de *désorption*. Dans les milieux froids et denses, les molécules (formées en phase gazeuse) et les atomes peuvent être adsorbés sur les grains, c'est-à-dire se coller à la surface des grains de poussière formant ainsi un manteau autour du cœur silicaté et carboné du grain. La disparition de la phase gazeuse de ces molécules/atomes s'appelle

la *déplétion*. La déplétion est particulièrement marquée dans les cœurs pré-stellaires, où la température est de plus en plus froide et la densité de plus en plus grande vers le centre du cœur. Dans ces objets, le monoxyde de carbone, CO, et le diazote, N_2, vont disparaître de la phase gazeuse, pour se coller à la surface des grains. Nous verrons en Section 1.2.4.2, que la déplétion du CO à l'intérieur des cœurs pré-stellaires va avoir une grande importance sur la deutération des molécules. A la surface des grains, les molécules et/ou atomes peuvent réagir entre eux pour former d'autres molécules. On peut citer, par exemple, l'hydrogénation du CO qui peut mener à la formation du formaldéhyde, H_2CO, et du méthanol, CH_3OH (e.g. Shalabiea & Greenberg 1994; Watanabe & Kouchi 2002).

Ces nouvelles molécules formées à la surface des grains peuvent alors être libérées en phase gazeuse par *désorption*. La désorption peut être thermique (e.g., Fraser et al. 2001). Ce mécanisme est très important dans les cœurs des proto-étoiles où la température est élevée en leur centre. Dans ces cœurs chauds, les molécules complexes sont très abondantes. On ne sait pas vraiment si les molécules complexes observées sont formées directement à la surface des grains et libérées en phase gazeuse ou si des molécules légérement moins complexes sont désorbées et réagissent ensuite entre elles en phase gazeuse pour se complexifier davantage. Les deux processus jouent sûrement un rôle. Le paragraphe suivant décrit plus en détail ces cœurs chauds que l'on appelle *hot cores*/*hot corinos*. La désorption peut aussi être non thermique. Si elle est causée par un photon UV, on parle de *photo-désorption* (e.g., Öberg et al. 2009a,b). Elle a principalement lieu dans les régions externes des nuages moléculaires où le champ UV est important. Elle peut également être induite par des rayons cosmiques (e.g., Herbst & Cuppen 2006). Les molécules piégées à la surface des grains peuvent aussi être libérées en phase gazeuse dans les chocs créés par les jets moléculaires qui vont détruire les grains. On parle de *sputtering* (processus par lequel les atomes et molécules présents à la surface des grains sont éjectés des grains à la suite d'un bombardement par des particules énergétiques ; e.g., Pineau des Forets & Flower 1996).

1.2.2 Les *hot cores* et *hot corinos*

On qualifie de *hot core* un cœur de proto-étoile massive qui se caractérise par une chimie riche en molécules organiques complexes telles que l'éther diméthylique, CH_3OCH_3, l'acide acétique, CH_3COOH, le cyanure de méthyle, CH_3CN, etc (e.g. Turner 1991). Ce type de région se caractérise par une densité importante ($n \geq 10^6$ cm^{-3}) et une température élevée ($T \geq 100$ K) permettant la désorption des molécules composant les manteaux de glace des grains. De grandes quantités d'eau sont aussi libérées dans ces cœurs chauds puisque la température de sublimation de l'eau est de 100 K environ et que l'eau est un composant important des glaces des manteaux de grains (cf Sect. 1.2.5.2).

On a longtemps pensé, en raison de la durée nécessaire pour convertir des molécules de première génération en molécules complexes de seconde génération, que seules les proto-étoiles massives pouvaient conduire à la formation de molécules organiques complexes, jusqu'à la découverte de gaz chaud dans la proto-étoile de type solaire IRAS 16293-2422 et à la mise en évidence de sauts en abondance prononcés pour les molécules de H_2O et H_2CO au centre de l'enveloppe proto-stellaire, comme observés dans les proto-étoiles massives (Cecca-

relli et al. 2000a,b). Cependant, il a aussi été suggéré que cette augmentation d'abondance pourrait être due à une destruction partielle des manteaux de glace des grains dans les chocs (Schöier et al. 2002). Pour confirmer la présence d'un analogue de *hot core* dans la proto-étoile IRAS 16293-2422, il fallait donc démontrer la présence d'une chimie organique riche au sein de cette source. Ce fut fait par Cazaux et al. (2003) avec la découverte d'acide formique, HCOOH, d'acétaldéhyde, CH_3CHO, de formiate de méthyle, CH_3OCHO, d'éther diméthylique, CH_3OCH_3, d'acide acétique, CH_3COOH, de cyanure de méthyle, CH_3CN, et de cyanure d'éthyle, C_2H_5CN, grâce à des observations en direction de cet objet avec le télescope de 30 m de l'IRAM. La présence de molécules complexes fut également mise en évidence dans une autre proto-étoile de type solaire, NGC 1333 IRAS 4A (Bottinelli et al. 2004a). L'origine de l'émission de ces molécules a été confirmée par des données interférométriques en direction de ces deux sources qui montrent bien que l'émission est centrée sur les régions internes chaudes de l'enveloppe proto-stellaire (Bottinelli et al. 2004b, 2005). Par analogie avec les *hot cores* dans les sources massives, on parle de *hot corinos* pour les proto-étoiles de faible masse. D'autres *hot corinos* ont ensuite été découverts dans les proto-étoiles de faible masse NGC 1333 IRAS 4B et NGC 1333 IRAS 2A (Jørgensen et al. 2005a; Sakai et al. 2006; Bottinelli et al. 2007).

1.2.3 Les hydrocarbures et la chimie *WCCC* (*Warm Carbon Chain Chemistry*)

1.2.3.1 La formation des hydrocarbures

Les hydrocarbures sont des espèces particulièrement intéressantes car abondantes dans le milieu interstellaire et à la base d'une chimie très riche. Cette abondance des hydrocarbures peut s'expliquer en phase gazeuse par la capacité du carbone à former des espèces de plus en plus complexes par des réactions ion-molécule qui peuvent être de plusieurs types :

- des réactions de fixation (réaction d'un atome de carbone C avec de petits ions hydrocarbures), par exemple : $C + CH_3^+ \longrightarrow C_2H_2^+ + H$,
- des réactions d'insertion (réaction de l'ion C^+ avec des hydrocarbures neutres), par exemple : $C^+ + CH_4 \longrightarrow C_2H_3^+ + H$,
- des réactions de condensation (réaction entre des ions hydrocarbures et des hydrocarbures neutres), par exemple : $CH_3^+ + C_4H \longrightarrow C_5H_2^+ + H_2$.

Les processus d'hydrogénation (réactions de type $CA^+ + H_2 \rightarrow HCA^+ + H$) sont aussi à prendre en compte, puisque les réactions de fixation et d'insertion permettent de produire de nombreux ions insaturés (i.e. comportant des liaisons multiples carbone-carbone). Toutefois des énergies d'activation sont généralement nécessaires pour initier ces réactions. Une fois que les ions les plus complexes sont formés, ces processus ne sont donc que peu efficaces avant de devenir cinétiquement impossibles. Les recombinaisons électroniques permettent alors de mener à la formation d'hydrocarbures neutres observés dans le milieu interstellaire. Des réactions neutre-neutre sont également à considérer pour certains hydrocarbures (Turner et al. 2000). Tous ces différents mécanismes conduisent alors à la formation du réseau hydrocarbure en phase gazeuse. Ce dernier est à l'origine de nombreuses molécules, telles que les cyanopolyynes ($HC_{2n+1}N$) et des composés carbonylés (molécules présentant une double liaison C=O). Il faut noter que les réactions de recombinaison électronique sont sensibles à la tem-

pérature. Les coefficients des taux de réaction sont plus élevés à basse température, d'où la présence d'hydrocarbures dans les régions froides. Le cyclopropenylidene (c-C_3H_2) comme d'autres radicaux : C_2H, CN, etc, traceraient notamment les régions froides et peu denses (van Dishoeck et al. 1995). Le méthane (CH_4) joue aussi un rôle important dans la chimie des hydrocarbures. Cette molécule est un important constituant des glaces qui se forme par hydrogénation d'un atome de carbone à la surface des grains (Öberg et al. 2008). Le méthane est ensuite désorbé dans les régions où la température est supérieure à $\sim$ 25 K. La libération du méthane en phase gazeuse pourrait favoriser la formation du propyne (CH_3CCH). Il semble néanmoins, d'après Aikawa et al. (2008), que le propyne soit plutôt formé par une combinaison de réactions en phase gazeuse (qui conduisent à la formation de chaînes carbonées insaturées telles que C_3H et C_3H_2) et de réactions en surface des grains (qui les hydrogènent). Le propyne, comme de nombreuses autres molécules organiques, serait donc ensuite libéré en phase gazeuse par désorption thermique. Après la sublimation du CH_4, une fraction réagit avec C^+ pour former du $C_2H_3^+$, précurseur dans la production de plus grands hydrocarbures insaturés. Ce mécanisme peut aboutir à la régénération d'hydrocarbures dans les enveloppes proto-stellaires et à un type particulier de chimie qualifiée de *WCCC* (*Warm Carbon Chain Chemistry*).

1.2.3.2 La chimie *WCCC*

La chimie *WCCC* a été mise en évidence, il y a quelques années, suite à la découverte de nombreuses chaînes carbonées dont du C_4H, C_4H_2, C_5H, C_6H et C_6H_2 ainsi que de longs cyanopolyynes (HC_5N, HC_7N, HC_9N) dans la proto-étoile de faible masse IRAS 04368+2557 située dans le nuage sombre L1527 (Sakai et al. 2007, 2008). La présence d'hydrocarbures à ce stade est plutôt surprenante car l'abondance des hydrocarbures est connue pour être importante dans les cœurs pré-stellaires et décroître au fur et à mesure de la formation stellaire. Or cette source se situe à un stade transitoire entre Classe 0 et Classe I. La présence importante de chaînes carbonées dans L1527 pourrait s'expliquer par un temps d'effondrement rapide pendant la phase pré-stellaire. Dans ces conditions, une partie des hydrocarbures formés dans le cœur pré-stellaire auraient pu survivre. Cela semble ne pas être suffisant pour expliquer les abondances observées et nécessiterait d'impliquer un mécanisme de régénération dans les régions plus chaudes de l'enveloppe après la sublimation du méthane piégé à la surface des grains. Si le méthane présente une abondance supérieure à 10^{-7}, il peut alors être le destructeur principal du C^+, formant ainsi les ions $C_2H_3^+$ et $C_2H_2^+$, ce qui relancerait la formation d'hydrocarbures à grande chaîne (Aikawa et al. 2008; Hassel et al. 2008). En effet, ces ions permettraient de former par recombinaison électronique du C_2H et du C_2H_2. L'acétylène, C_2H_2, peut alors réagir avec C^+ pour former de plus grandes chaînes. Une réaction de condensation entre C_2H_2 et $C_2H_3^+$ produit du $C_4H_3^+$, qui par recombinaison dissociative mène à du C_4H. Des réactions neutre-neutre entre C_2H_2 et CN permettent de former HC_3N. Via ces réactions, des molécules à chaînes carbonées variées sont formées efficacement dans une région dense chauffée par la proto-étoile naissante. Les distributions spatiales des intensités de transitions de C_3H_2, de CCH et de C_4H traduisent également une augmentation de leurs abondances au-dessus d'une température $\sim$ 20-30 K, confirmant que ces molécules sont bien régénérées suite à la sublimation du méthane (Sakai et al. 2010). La chimie *WCCC* a été détectée dans une autre proto-étoile de faible masse, IRAS 15398-3359, située dans la

constellation du Loup (Sakai et al. 2009), avec la découverte de C_4H, C_4H_2, CH_3CCH et HC_5N en direction de l'objet. Ces sources *WCCC* se caractérisent aussi par une déficience en molécules organiques complexes telles que celles découvertes dans les *hot corinos*. Deux types de chimie semblent donc s'opposer dans les proto-étoiles de faible masse : une où les molécules organiques complexes saturées domineraient et une autre où les chaînes carbonées (non-saturées) seraient particulièrement abondantes.

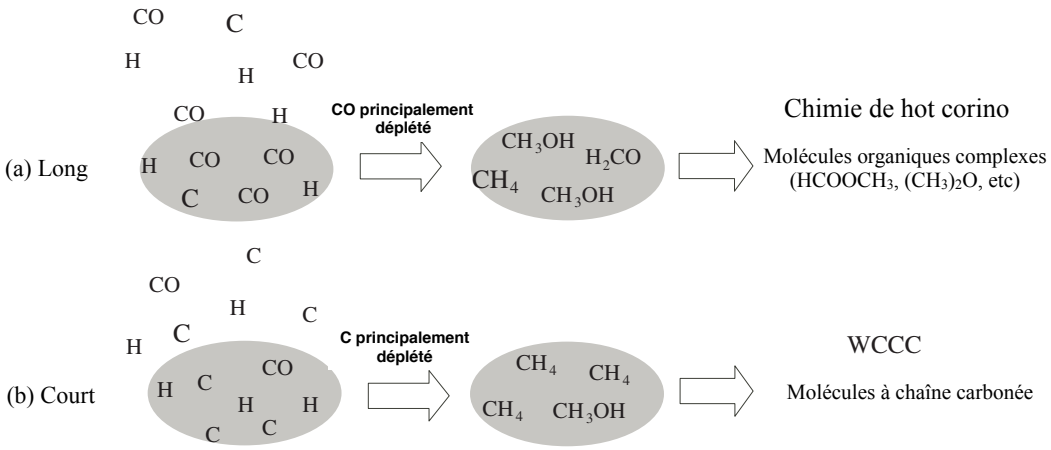


Figure 1.3 – Scénario possible pour expliquer la variation d'abondances des hydrocarbures dans les proto-étoiles de faible masse. Le schéma (a) représente le scénario de phase sans cœur longue qui favorise la conversion du carbone C en CO et par conséquent la chimie de *hot corino*. Le schéma (b) représente le scénario de phase sans cœur courte qui ne permet pas une conversion massive du carbone C en CO. Le carbone C est hydrogéné à la surface des grains pour former du méthane, CH_4. La désorption thermique du CH_4 présent en forte abondance sur les grains permet alors de créer des hydrocarbures à longues chaînes en phase gazeuse : c'est la chimie *WCCC*. Schéma extrait de Sakai et al. (2009).

Une possible explication à cette variation de la composition chimique serait liée à l'échelle de temps de la phase pré-stellaire. En effet, la forme majeure du carbone change de C en CO à travers des réactions en phase gazeuse dans les cœurs pré-stellaires en environ 10^6 ans. Ceci est comparable ou plus long que le temps de chute libre ($\sim 4 \times 10^5$ ans). L'abondance de C peut donc être très importante dans les dernières étapes de la phase sans cœur, si le temps d'effondrement est rapide. Les atomes de carbone peuvent alors dépléter sur les grains avant d'avoir été transformés en CO. Dans ce cas, le CH_4 est efficacement produit sur les grains par hydrogénation du carbone, ce qui peut mener à une chimie *WCCC* après sa désorption. Les chaînes carbonées produites dans la phase pré-stellaire pourraient aussi survivre dans le cas d'un effondrement rapide, ce qui expliquerait une distribution spatiale étendue des hydrocarbures (Sakai et al. 2010). D'un autre côté, la situation est différente si la phase pré-stellaire est plus longue que le temps de chute libre. En effet, dans le cas d'un effondrement lent, le carbone atomique est en grande partie converti en CO dans la phase gazeuse. Le CO déplète alors sur les grains en plus grande quantité que le carbone

atomique. Le méthanol et le formaldéhyde sont alors formés abondamment par hydrogénation du CO, tandis que le méthane est peu produit du fait de la déficience en C sur les grains. Les molécules résultantes H_2CO et CH_3OH peuvent alors contribuer à la production de molécules organiques plus complexes comme le $HCOOCH_3$, menant à une chimie de *hot corino*. Ces deux scénarios sont représentés schématiquement en Figure 1.3. Le type de chimie étant lié au temps d'effondrement, des sources présentant une chimie intermédiaire devraient donc exister.

1.2.4 La deutération

1.2.4.1 Le deutérium

Le deutérium (symbolisé par D) est un isotope de l'hydrogène. Il se caractérise par la présence d'un neutron, en plus du proton et de l'électron qui constituent l'atome d'hydrogène. Il s'est formé, en même temps que l'hydrogène, l'hélium, le lithium et le béryllium, lors de la nucléosynthèse primordiale, dans les premiers instants de l'Univers qui ont suivi le Big-Bang. C'est un élément facilement détruit à haute température uniquement. Sa disparition s'est donc arrêtée au moment de l'expansion de l'Univers et donc de son refroidissement. Depuis, le deutérium est détruit de manière continue en raison des réactions nucléaires à l'intérieur des étoiles. La réaction nucléaire principale causant sa disparition est la réaction entre un proton et le deutérium pour former du ^{3}He. Cette diminution de l'abondance de deutérium est appelée phénomène d'astration. Il n'existe pas de processus de formation du deutérium en dehors de la nucléosynthèse primordiale. Cet atome est par conséquent représentatif du taux d'expansion de l'Univers et un outil clé pour contraindre les conditions physiques des premiers instants de l'Univers et donc la densité baryonique (c'est-à-dire la densité de baryons, dont les représentants les plus connus sont le proton et le neutron). L'abondance du deutérium a été mesurée dans plusieurs QSOs (*Quasi Stellar Objects*), des noyaux de galaxie actifs situés à de très grandes distances. Les abondances mesurées ($\sim 2.82 \times 10^{-5}$; Pettini et al. 2008) sont donc très proches de la valeur primordiale. Dans le milieu interstellaire local, l'abondance de deutérium est d'environ 1.5×10^{-5}, mais de grandes variations sont observées à plus grande distance (Linsky et al. 2006).

1.2.4.2 Le fractionnement en deutérium

La variation de l'abondance de deutérium pourrait s'expliquer par la présence de nuages denses et froids, sur la ligne de visée, où un fractionnement chimique forcerait le deutérium à se stabiliser dans des molécules lourdes (Phillips & Vastel 2003; Bell et al. 2011). Le fractionnement chimique se définit par une augmentation du rapport isotopique d'une molécule (ici XD/XH) comparativement au rapport isotopique cosmique (D/H). Ce fractionnement s'explique par des différences des énergies de vibration de point 0. Ces différences sont négligeables dans notre milieu mais deviennent importantes à très basse température et notamment dans les cœurs froids.

Dans les nuages moléculaires, l'hydrogène et le deutérium sont principalement sous forme de H_2 et HD respectivement [1]. Le rapport HD/H_2 devrait donc suivre a priori le rapport

1. Par mesure de simplification, la séparation ortho/para de molécules telles que H_2 et H_2D^+ n'est pas

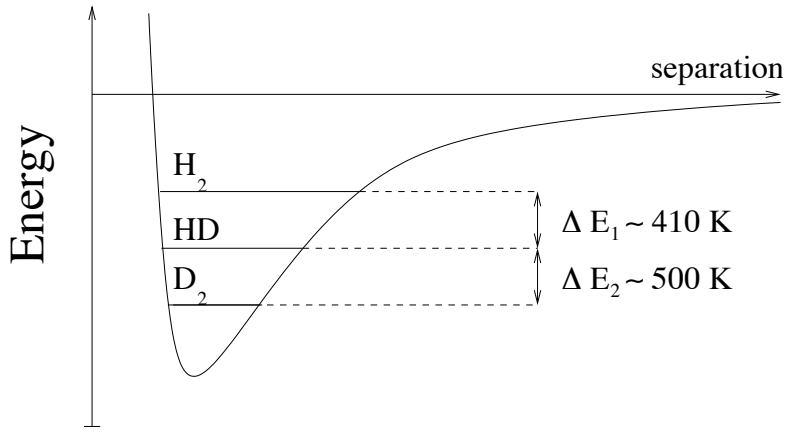


Figure 1.4 – Diagramme d'énergie potentielle des espèces H_2, HD et D_2. La figure n'est pas à l'échelle.

D/H. Or, en raison de différences des énergies de vibration du point zéro (cf Fig. 1.4), la production de HD est favorisée par rapport à H_2. En effet, le deutérium disparaît de la phase atomique à travers l'échange de charge avec H^+ pour former du D^+. Celui-ci réagit alors avec H_2 pour former HD. Le HD résultant peut alors former du D_2 en réagissant avec D^+ :

$$H^+ + D \longleftrightarrow H + D^+ \tag{1.1}$$

$$D^+ + H_2 \longrightarrow HD + H^+ + \Delta E_1 \tag{1.2}$$

$$D^+ + HD \longrightarrow D_2 + H^+ + \Delta E_2 \tag{1.3}$$

Les deux dernières réactions sont exothermiques. Les énergies ΔE_1 et ΔE_2 correspondent à la différence entre les énergies du point zéro des produits et des réactants. Elles sont représentées en Figure 1.4.

Le deutérium est ensuite extrait hors de la molécule HD via trois principales réactions ion-molécule :

$$H_3^+ + HD \longrightarrow H_2D^+ + H_2 + \Delta E_3 \tag{1.4}$$

$$CH_3^+ + HD \longrightarrow CH_2D^+ + H_2 + \Delta E_4 \tag{1.5}$$

$$C_2H_2^+ + HD \longrightarrow C_2HD^+ + H_2 + \Delta E_5 \tag{1.6}$$

où $\Delta E_3/k \sim 230$ K, $\Delta E_4/k \sim 375$ K et $\Delta E_5/k \sim 550$ K, pour une température de 10 K. Les réactions inverses ne sont guère efficaces dans les nuages froids et denses où la température est négligeable par rapport aux ΔE, malgré la forte abondance de H_2. Le fractionnement de l'ion H_2D^+ devient non-négligeable dans les régions froides du milieu interstellaire.

considérée ici. Nous sommes cependant bien conscients que la prise en compte des états ortho et para de H_2 peut avoir un effet non négligeable sur certaines réactions inverses (1.4, 1.13 et 1.14).

Comme expliqué en Section 1.2.1, les cœurs pré-stellaires se caractérisent par une forte déplétion de CO et N_2. La disparition de ces deux molécules entraîne une modification de la chimie dans les régions où le CO a disparu de la phase gazeuse. En effet, le CO est le principal destructeur de l'ion H_3^+ à travers la réaction :

$$CO + H_3^+ \longrightarrow HCO^+ + H_2 \tag{1.7}$$

De même, on a aussi la réaction entre CO et H_2D^+ :

$$CO + H_2D^+ \longrightarrow DCO^+ + H_2 \tag{1.8}$$
$$\longrightarrow HCO^+ + HD \tag{1.9}$$

N_2 peut aussi détruire H_3^+ et H_2D^+ :

$$N_2 + H_3^+ \longrightarrow N_2H^+ + H_2 \tag{1.10}$$
$$N_2 + H_2D^+ \longrightarrow N_2D^+ + H_2 \tag{1.11}$$
$$\longrightarrow NH_3^+ + HD \tag{1.12}$$

Du fait de la disparition des espèces CO et N_2 de la phase gazeuse, l'ion H_3^+ n'est plus détruit ni par le CO ni par le N_2 et devient particulièrement abondant au centre. En raison des températures froides qui règnent au sein des cœurs pré-stellaires, le fractionnement en deutérium permet alors une augmentation de la production de l'ion H_2D^+ grâce à la réaction 1.4. Il peut alors réagir avec HD pour former du D_2H^+ puis du D_3^+ :

$$H_2D^+ + HD \longrightarrow D_2H^+ + H_2 + \Delta E_6 \tag{1.13}$$
$$D_2H^+ + HD \longrightarrow D_3^+ + H_2 + \Delta E_7 \tag{1.14}$$

où $\Delta E_6/k \sim 180$ K et $\Delta E_7/k \sim 230$ K sont les énergies libérées par les réactions exothermiques. L'abondance des ions H_2D^+ et D_2H^+ serait comparable dans les cœurs pré-stellaires (Vastel et al. 2004), confirmant la nécessité de prendre en compte les réactions 1.13 et 1.14 dans les modèles de chimie de cœurs froids. Ces modèles prédisent d'ailleurs que D_3^+ peut être l'ion le plus abondant et que le rapport D/H est supérieur à 0.1 (soit ~ 4 ordres de grandeur au-dessus de la valeur du milieu interstellaire local ; Walmsley et al. 2004). Il faut noter que, malgré la disparition du CO, les espèces HCO^+ et DCO^+ sont très abondantes au centre des cœurs pré-stellaires du fait des fortes abondances des ions H_3^+ et H_2D^+, via les réactions 1.8 et 1.9 (Caselli et al. 2002; Vastel et al. 2006). Les cœurs pré-stellaires montrent aussi de fortes abondances de N_2H^+ et N_2D^+. En effet, le CO est le principal destructeur de l'ion N_2H^+ selon la réaction :

$$N_2H^+ + CO \longrightarrow HCO^+ + N_2 \tag{1.15}$$

Or le CO ayant disparu de la phase gazeuse, N_2H^+ peut survivre à de plus fortes densités ($n(H_2) \sim 10^6$ cm^{-3}) que le CO ($n(H_2) \sim 10^5$ cm^{-3}). Dans ces conditions, H_2D^+ et N_2 peuvent réagir ensemble pour former N_2D^+ (réaction 1.11). La Figure 1.5 montre le réseau des principales réactions impliquant l'ion H_3^+ et ses formes deutérées.

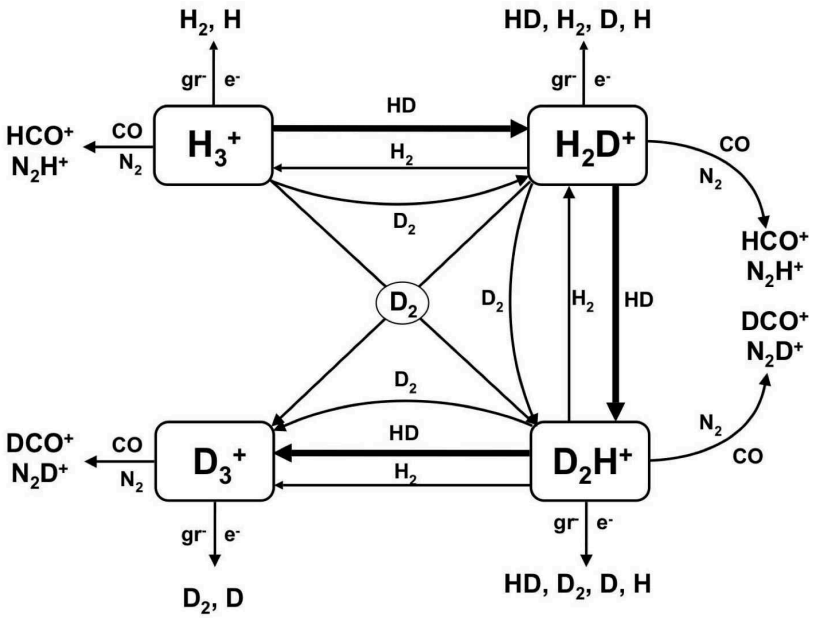


Figure 1.5 – Principales réactions impliquant l'ion H_3^+ et ses formes deutérées. Lorsque CO et N_2 déplètent, les réactions dominantes sont indiquées par des flèches en gras. e^- et gr^- représentent les électrons et grains négativement chargés respectivement. Figure extraite de Pagani et al. (2009).

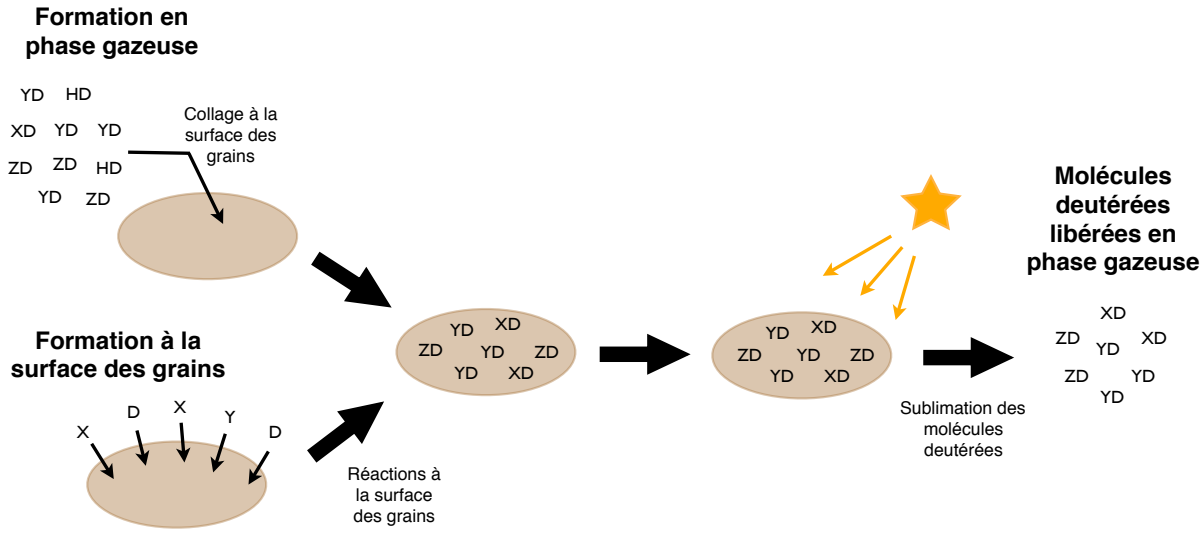


Figure 1.6 – Processus de fractionnement en phase gazeuse et à la surface des grains. Les molécules deutérées piégées sur les grains sont relâchées en phase gazeuse lorsqu'une étoile en formation proche réchauffe l'environnement et sublime les molécules.

Ce fractionnement chimique en deutérium se répercute aussi sur la chimie à la surface des grains à travers le rapport D/H du gaz accrété. Par conséquent, la deutération des molécules qui se forment à la surface des grains est la plus importante là où le rapport D/H du gaz est le plus élevé et donc là où la température est la plus froide. Les molécules deutérées formées à la surface des grains ainsi que celles formées en phase gazeuse puis déplétées sur les grains sont alors libérées en phase gazeuse, par désorption thermique, quand le cœur de la proto-étoile apparaît et chauffe les régions internes de l'enveloppe, c'est-à-dire au stade de Classe 0 (cf Fig. 1.6). Les molécules deutérées observées dans les proto-étoiles de faible masse sont donc un héritage de la phase pré-stellaire.

Les différents mécanismes évoqués ici permettent donc d'expliquer les abondances relativement élevées des molécules deutérées découvertes dans le milieu interstellaire comparativement à leurs homologues non deutérés. La première molécule deutérée, DCN, a été découverte dans le nuage d'Orion en 1973 (Jefferts et al. 1973; Wilson et al. 1973). A partir de ce moment, s'enchaînent les découvertes de nombreuses molécules mono-deutérées : HD, HDO, DCO^+, DNC, NH_2D, HDCO, etc. Une étape importante a ensuite été franchie avec la détection de la première molécule doublement deutérée, D_2CO, dans Orion (Turner 1990). Son fractionnement en deutérium ($D_2CO/H_2CO \sim 2.9 \times 10^{-3}$) a été attribué à une chimie active à la surface des grains. La découverte de D_2CO dans une proto-étoile de faible masse, IRAS 16293-2422, avec un rapport D_2CO/H_2CO particulièrement élevé, ~ 5 % (Ceccarelli et al. 1998; Loinard et al. 2000) va alors motiver la recherche de nouvelles molécules multi-deutérées. Deux molécules triplement deutérées ont même été détectées : ND_3 (Lis et al. 2002b; van der Tak et al. 2002) et CD_3OH (Parise et al. 2004), avec un rapport D/H d'environ 10^{-3} pour l'ammoniac et 10^{-2} pour le méthanol, soit environ 11-12 ordres de grandeur au-dessus du rapport D/H observé dans le milieu interstellaire local ($\sim 1.5 \times 10^{-5}$) . Les différentes molécules deutérées détectées dans le milieu interstellaire sont présentées en Table 1.1. La Section suivante s'attardera plus en détail sur la deutération de l'eau, thème central de cette thèse.

TABLE 1.1 – Liste des molécules deutérées détectées dans le milieu interstellaire.

Molécules mono-deutérées			Molécules doublement deutérées		Molécules triplement deutérées
HD	H_2D^+	CH_3OD	D_2H^+	CHD_2OH	ND_3
OD	HDO	CH_2DOH	D_2O	CH_2DCCD	CD_3OH
ND	NH_2D	CH_3CCD	NHD_2	CHD_2CCH	
HDS	HDCS	CH_2DCCH	D_2S	D_2CO	
CCD	C_4D	HDCO	D_2CS		
DNC	DCN	CH_2DCN			
DC_3N	DC_5N				
N_2D^+	DCO^+				

1.2.5 L'eau et ses isotopes

1.2.5.1 L'omniprésence de l'eau

L'eau est une des molécules les plus intéressantes du milieu interstellaire en raison du rôle qu'elle a joué dans l'apparition de la Vie sur Terre. Elle peut, par ailleurs, jouer un rôle important dans le processus de formation stellaire via le refroidissement du gaz chaud. C'est aussi une molécule-clé du réseau chimique de l'oxygène, que ce soit en phase gazeuse ou à la surface des grains.

En plus d'être très abondante sur Terre, l'eau est omniprésente dans le milieu interstellaire : jets moléculaires, nuages moléculaires, *hot cores*, cœurs denses, disques protoplanétaires, etc. L'eau a été détectée pour la première fois en direction d'Orion en 1969 grâce à l'observation d'une raie maser à 1.35 cm (Cheung et al. 1969). Les raies masers étant non-thermales, il est impossible de déterminer une abondance à partir de la mesure de leur émission. Il faudra attendre le *Kuiper Airborne Observatory* et plus particulièrement le satellite ISO (*Infrared Space Observatory*) pour pouvoir observer les raies rotationnelles de H_2O, pour lesquelles il est nécessaire de s'affranchir de l'atmosphère terrestre. Plusieurs satellites dont Spitzer, SWAS (*Submillimeter Wave Astronomy Satellite*) et ODIN seront ensuite envoyés dans l'espace pour étudier plus en détail cette molécule, jusqu'à l'envoi plus récent de l'Observatoire Spatial Herschel (cf Sect. 1.3) qui, grâce notamment à son instrument HIFI (cf Sect. 1.3.2), permet d'observer de nombreuses transitions de l'eau dont les trois fondamentales à 557, 1113 et 1670 GHz. Ces différents télescopes spatiaux ont permis de montrer que l'abondance de l'eau varie énormément d'un objet à l'autre. A l'intérieur des cœurs préstellaires, l'abondance de l'eau en phase gazeuse est faible, inférieure à 10^{-8} (Bergin & Snell 2002; Caselli et al. 2010), tandis qu'elle peut atteindre des valeurs bien plus élevées dans le gaz des jets moléculaires de proto-étoiles ($\sim 10^{-5}$–10^{-4} ; Liseau et al. 1996; Lefloch et al. 2010; Kristensen et al. 2010). En phase solide, l'eau est un important constituant des manteaux de glace des grains où elle peut présenter des abondances allant jusqu'à 10^{-4} (e.g., Pontoppidan et al. 2004).

1.2.5.2 Les mécanismes de formation de l'eau

L'eau peut se former à la fois en phase gazeuse et à la surface des grains. La Figure 1.7 résume les différents mécanismes à l'oeuvre pour former de l'eau.

En phase gazeuse, la formation de l'eau peut résulter de réactions ion-molécule menant à la formation de l'ion H_3O^+, qui peut alors se recombiner dissociativement pour former H_2O (e.g., Bates 1986; Rodgers & Charnley 2002). Ces mécanismes ont notamment lieu dans les nuages diffus. L'eau peut également être produite en phase gazeuse grâce à la réaction hautement endothermique $O + H_2 \rightarrow OH + H$ suivie par la réaction entre OH et H_2 (Wagner & Graff 1987; Hollenbach & McKee 1989; Atkinson et al. 2004). Du fait de la haute endothermicité de cette première réaction, ce mécanisme est typique de milieux présentant de très hautes températures comme les régions de chocs et les cœurs chauds de proto-étoiles massives.

Dans les régions froides et denses, le mécanisme principal de formation de l'eau a lieu

à la surface des grains, grâce à une série de réactions impliquant des atomes d'oxygène et d'hydrogène ayant accrété (e.g., Tielens & Hagen 1982). De plus en plus d'expériences de laboratoire sont menées pour déterminer l'efficacité des réactions impliquant O, O_2 et O_3 (e.g., Mokrane et al. 2009; Dulieu et al. 2010; Cuppen et al. 2010). Comme expliqué en 1.2.1, les molécules d'eau piégées à la surface des grains sont rapidement libérées en phase gazeuse dès que la température du milieu est suffisamment élevée pour les sublimer ($\sim$ 100 K ; Fraser et al. 2001), augmentant ainsi l'abondance gazeuse de l'eau dans les régions internes chaudes de l'enveloppe proto-stellaire (Ceccarelli et al. 1996, 1999, 2000a). Le *sputtering* créé par les chocs peut aussi libérer les molécules d'eau piégées dans les grains.

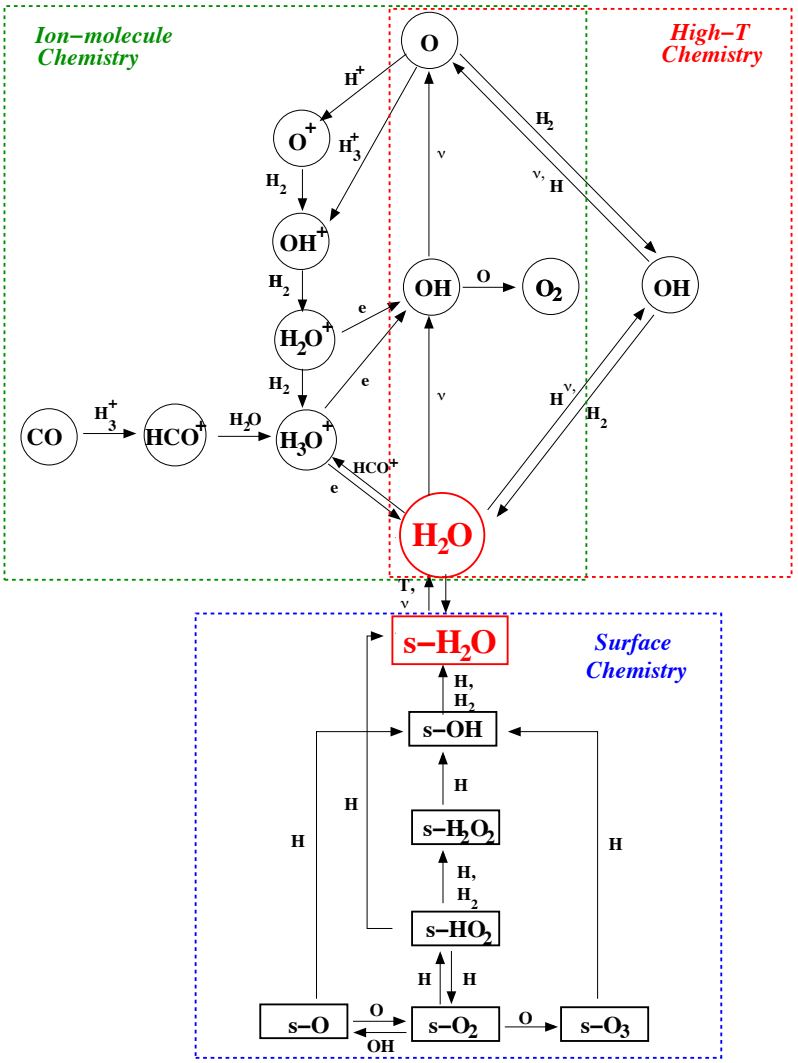


FIGURE 1.7 – Principales réactions en phase gazeuse et à la surface des grains menant à la formation de l'eau. Trois régimes différents peuvent être distingués : chimie ion-molécule en phase gazeuse à faible température, chimie neutre-neutre à haute température et chimie à la surface des grains (Ioppolo et al. 2010). Schéma extrait de van Dishoeck et al. (2011).

1.2.5.3 Le rapport ortho/para de l'eau

La molécule d'eau, H_2O, présente, en raison d'une différence de spin nucléaire total (I), deux formes différentes : ortho–H_2O (I=1, K_a+K_c impair) et para–H_2O (I=0, K_a+K_c pair). Les transitions entre ces deux formes sont interdites et on peut donc considérer ces deux formes comme deux molécules différentes. A l'équilibre, le rapport d'abondance de la forme ortho sur la forme para est de 3 à haute température ($\gtrsim$ 30 K) et diminue vers les températures plus basses (cf Fig. 1.8). Il se calcule comme le rapport de la fonction de partition de la forme ortho (sommation sur tous les niveaux ortho) sur celle de la forme para (sommation sur tous les niveaux para) :

$$\frac{n_o}{n_p} = \frac{\sum g_o \exp(-E_o/kT)}{\sum g_p \exp(-E_p/kT)} \tag{1.16}$$

avec n_o/n_p le rapport de la densité de la forme ortho sur celle de la forme para, k la constante de Boltzmann et T la température. E_o et E_p sont les énergies des niveaux des formes ortho et para. g_o et g_p correspondent aux poids statistiques des formes ortho et para. Pour l'eau, si J est le moment cinétique total d'un niveau, $g_o = 3(2J+1)$ et $g_p = 2J+1$. Pour des températures élevées, le rapport d'abondance est équivalent au rapport des poids statistiques, soit 3 pour la molécule d'eau.

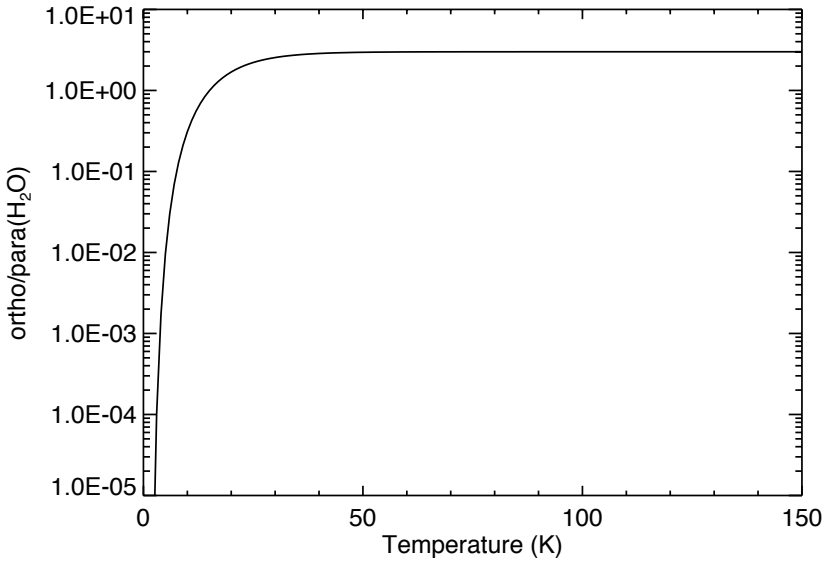


Figure 1.8 – Variation du rapport ortho/para de l'eau à l'équilibre en fonction de la température.

L'étude du rapport ortho/para présente un intérêt non négligeable car il peut garder la mémoire de la formation de la molécule. Supposons que la molécule d'eau soit détectée dans un choc avec un rapport ortho/para inférieur à 2. Les températures dans les chocs étant très élevées, le rapport ortho/para serait, à l'équilibre, de 3 si l'eau s'était formée au moment du choc. Mais si l'eau s'est formée à la surface de grains froids, l'énergie générée par la réaction chimique est partagée avec le grain et les molécules d'eau devraient s'équilibrer à un rapport

ortho/para qui reflète la température du grain. Au moment de son entrée en phase gazeuse via *sputtering* suite au choc, le rapport ortho/para garderait alors la mémoire de la température du grain à laquelle s'est formée l'eau. Un mélange entre formation en phase gazeuse dans le choc et *sputtering* ne peut pas être exclu et donc une mesure de rapport ortho/para inférieur à 3 représenterait une limite supérieure du rapport ortho/para de la glace d'eau contenue dans les manteaux des grains. Des conversions ortho-para peuvent néanmoins avoir lieu via une collision avec un proton ou un ion H_3^+ menant à un échange de protons (Flower et al. 2006; Lis et al. 2010). Au bout d'un temps suffisamment long (qui dépend de l'abondance en ions et de la densité du milieu), le rapport ortho/para peut alors être modifié jusqu'à atteindre l'équilibre avec la température du gaz.

Le rapport ortho/para de l'eau a pu être déterminé pour la première fois avec l'instrument HIFI d'Herschel dans des nuages diffus situés sur la ligne de visée de deux régions de formation stellaire massives SgrB2 et W31C (Lis et al. 2010). Il est de 2.35 ± 0.35 en direction de SgrB2 à des vitesses correspondant à l'anneau moléculaire en expansion. Cela suggère une formation de l'eau à la surface des grains à une température d'environ 27 K ou bien une relaxation en phase gazeuse jusqu'à un équilibre avec la température du gaz des nuages diffus ($T \sim$ 30 K). Le rapport ortho/para est un peu plus élevé sur la ligne de visée de W31C avec une valeur de 2.8 ± 0.2, compatible avec la valeur à l'équilibre à haute température, 3:1. Il a aussi été déterminé dans plusieurs comètes. Les températures de spin nucléaire (températures correspondant aux rapports ortho/para observés à l'équilibre) déduites étaient de l'ordre de 30 K (Bonev et al. 2007), proche de la valeur mesurée en direction de SgrB2. La similarité des rapports ortho/para de l'eau déterminés dans les différentes comètes étudiées montre que les températures de spin ne varient pas avec la distance héliocentrique de la comète (pas d'effet dû au changement de température du gaz ou de la surface), ne varient pas avec la production de gaz de la comète et ne dépendent pas de l'histoire dynamique de la comète (pas d'effet dépendant de l'origine de la comète et de la température interne de son noyau).

1.2.5.4 L'eau deutérée

L'eau deutérée, HDO, est supposée se former de manière similaire à l'eau. Comme expliqué précédemment, en raison des différences d'énergie de vibration de point 0, le rapport HDO/H_2O sera élevé si l'eau est formée à basse température, comme c'est le cas à la surface des grains, tandis qu'il sera faible si l'eau est formée à haute température comme dans les *hot cores* ou les régions de photo-dissociation. La différence d'énergie de vibration de point 0 entre HDO et H_2O est de 886 K (Hewitt et al. 2005).

Les régions de formation stellaire massives :

L'eau deutérée a été détectée pour la première fois en 1975 dans Orion KL (Turner et al. 1975). C'est la troisième molécule deutérée découverte dans le milieu interstellaire après DCN et HD. Néanmoins, à cette époque, le fractionnement de l'eau ne pouvait pas être déterminé puisque l'isotope principal de l'eau (à l'exception des raies masers) n'est pas observable depuis le sol du fait de la grande quantité d'eau dans l'atmosphère. Les premières estimations de rapport HDO/H_2O ont été réalisées en utilisant des observations sol de l'isotope $H_2{}^{18}O$ de

l'eau (Jacq et al. 1988, 1990). Les rapports isotopiques trouvés sont compris entre 3 et 6 $\times$ 10^{-4} (Jacq et al. 1990). Des valeurs similaires sont obtenues par Gensheimer et al. (1996) et Helmich et al. (1996), suggérant une formation de l'eau à la surface des grains. De manière générale, dans les *hot cores*, le rapport HDO/H_2O est inférieur ou égal à $\sim 10^{-3}$. Il semble cependant que, dans Orion, des valeurs plus élevées ($\sim 10^{-2}$) aient été mesurées (Persson et al. 2007; Bergin et al. 2010). On notera que Bergin et al. (2010) ont estimé le rapport HDO/H_2O à partir de la détection du très rare isotope $HD^{18}O$, observé pour la première fois avec l'instrument HIFI d'Herschel.

Les proto-étoiles de faible masse :

L'étude de la deutération dans les proto-étoiles de faible masse a commencé bien plus tard, après la découverte que des molécules deutérées pouvaient être présentes en abondance dans ces environnements (Ceccarelli et al. 1998). Contrairement aux sources massives, les rapports HDO/H_2O déduits semblent très variables. Dans la première source à être étudiée, IRAS 16293-2422, Stark et al. (2004) trouvent un rapport HDO/H_2O dans les parties internes de l'enveloppe de quelques 0.01% tandis que Parise et al. (2005) concluent sur un fractionnement de $\sim$ 3%. Cette différence s'explique par le fait que Stark et al. (2004) n'ont pas fait l'hypothèse d'une désorption thermique au centre de la proto-étoile. Dans le hot corino de la source NGC 1333 IRAS 4B, Jørgensen & van Dishoeck (2010a) obtiennent une limite supérieure de 0.06%. Enfin dans la proto-étoile NGC 1333 IRAS 2A, Liu et al. (2011) trouvent une limite inférieure de 1%. Les Sections 3.4.1 et 3.4.3 décrivent plus précisément les méthodes utilisées dans ces études. Le nombre de raies prises en compte et les modèles utilisés peuvent en effet mener à des résultats assez incertains. L'eau lourde, D_2O, a été détectée par Butner et al. (2007) pour la première fois via la transition fondamentale de para-D_2O à 317 GHz, en direction de la source IRAS 16293-2422. Les rapports isotopiques obtenus dans le *hot corino* sont de $\sim 1.7 \times 10^{-3}$ pour D_2O/HDO et de $\sim 5 \times 10^{-5}$ pour D_2O/H_2O.

L'eau deutérée a aussi été cherchée dans les glaces des grains en direction de jeunes proto-étoiles massives et de masse intermédiaire (Dartois et al. 2003) et de proto-étoiles de faible masse (Parise et al. 2003). Le rapport HDO/H_2O des glaces a été estimé via des observations de bandes d'élongation de O–H et O–D. Seules des limites supérieures ont été déterminées. Elles sont $\lesssim 0.4 - 1\%$ en direction des proto-étoiles massives et de masse intermédiaire (Dartois et al. 2003) et $\lesssim 0.5 - 2\%$ dans les proto-étoiles de Classe I (les sources de Classe 0 ne sont pas assez brillantes dans l'infrarouge proche ; Parise et al. 2003). Il semble, par ailleurs, difficile de pouvoir atteindre des limites inférieures plus basses.

1.2.5.5 L'origine de l'eau des océans terrestres

L'origine de l'eau sur Terre est un sujet qui fait particulièrement débat. La similarité entre la composition de la Terre et celle d'un certain type de météorites, les chondrites enstatites, suggère une proto-Terre particulièrement sèche au départ. Les chondrites font partie des météorites les plus primitives. Elles sont issues d'astéroïdes trop petits pour être différenciés et gardent donc la mémoire des débuts de la formation du Système Solaire. Les chondrites enstatites sont particulièrement sèches et viennent essentiellement de la partie interne de la

ceinture d'astéroïdes ($\sim$ 2 UA). La Terre étant sèche à son début, il a fallu que de l'eau soit apportée par la suite afin de constituer les océans et de permettre l'apparition de la Vie. Plusieurs hypothèses s'affrontent dont l'accrétion locale et les impacts de comètes et d'astéroïdes. Dans le premier scénario, la Terre aurait accrété à la fin de sa formation, des embryons planétaires provenant de la ceinture externe d'astéroïdes (2.5–4 UA) et avec une composition similaire aux chondrites carbonées, météorites riches en eau. La deuxième hypothèse suggère un apport d'eau par des comètes ou des astéroïdes lors de grands bombardements. Les comètes, en plus de l'eau, pourraient aussi avoir apporté des molécules prébiotiques qui, une fois en contact avec l'eau liquide des océans, auraient trouvé un milieu propice à leur évolution.

La deutération dans les comètes et les météorites de l'eau fait donc l'objet d'un grand intérêt. En effet, en comparant le rapport HDO/H_2O de ces corps avec celui de l'eau des océans terrestres pour laquelle le VSMOW (*Vienna Standard Mean Ocean Water*) est de $(1.558 \pm 0.001) \times 10^{-4}$ (Lecuyer et al. 1998), on peut conclure sur les sources potentielles d'apport d'eau sur Terre. Six mesures du fractionnement en deutérium de l'eau ont été réalisées en direction de six comètes du nuage de Oort : Halley (Eberhardt et al. 1995), Hyakutake (Bockelée-Morvan et al. 1998), Hale-Bopp (Meier et al. 1998), 2002 T7 (Hutsemékers et al. 2008), Tuttle (Villanueva et al. 2009) et Ikeya-Zhang (Janini & Gibb 2010), avec une valeur moyenne de $(2.96 \pm 0.25) \times 10^{-4}$, soit deux fois plus que le rapport HDO/H_2O des océans terrestres. Le rapport D/H mesuré dans des chondrites carbonées CI est, par contre, en total accord avec la valeur VSMOW, suggérant ainsi que les astéroïdes constitueraient le principal réservoir de l'eau sur Terre et non pas les comètes (Morbidelli et al. 2000).

Plus récemment, des observations Herschel/HIFI ont cependant relancé l'hypothèse de l'origine cométaire de l'eau terrestre avec la mesure du rapport HDO/H_2O dans une comète de la famille de Jupiter, Hartley 2. Ce type de comètes ne provient pas du nuage de Oort comme les autres comètes étudiées mais de la ceinture de Kuiper. La ceinture de Kuiper se situe au-delà de l'orbite de Neptune, entre 30 et 50 UA, tandis que le nuage de Oort se situe au-delà de 5000 AU (cf Fig. 1.9). Le rapport D/H mesuré dans cette catégorie de comètes est de $(1.61 \pm 0.24) \times 10^{-4}$ et donc en total accord avec la valeur des océans terrestres (Hartogh et al. 2011). Les comètes de la ceinture de Kuiper pourrait donc constituer un réservoir non négligeable de l'eau des océans terrestres. La Figure 1.10 représente le fractionnement en deutérium mesuré dans les comètes comparativement à la valeur des océans terrestres et à la valeur D/H de la nébuleuse solaire.

Si les comètes ont vraiment participé à l'apport de l'eau sur Terre, il est important de comprendre comment l'eau a évolué depuis la formation du cœur pré-stellaire jusqu'à la formation du disque proto-planétaire à partir duquel se forment les planètes et les comètes. Ce rapport était-il prédéfini au tout début de la formation stellaire et conservé jusque dans les comètes et puis sur Terre ou a-t-il subi des modifications au cours de la formation stellaire ? Cette thèse a notamment pour objectif de fournir des réponses à cette question travers l'étude du rapport HDO/H_2O dans plusieurs proto-étoiles de Classe 0, potentiels futurs Soleils. La grande qualité des données de l'instrument HIFI du satellite Herschel a notamment permis de contraindre plus précisément le fractionnement en deutérium dans ces sources. Ce satellite est décrit dans la Section suivante.

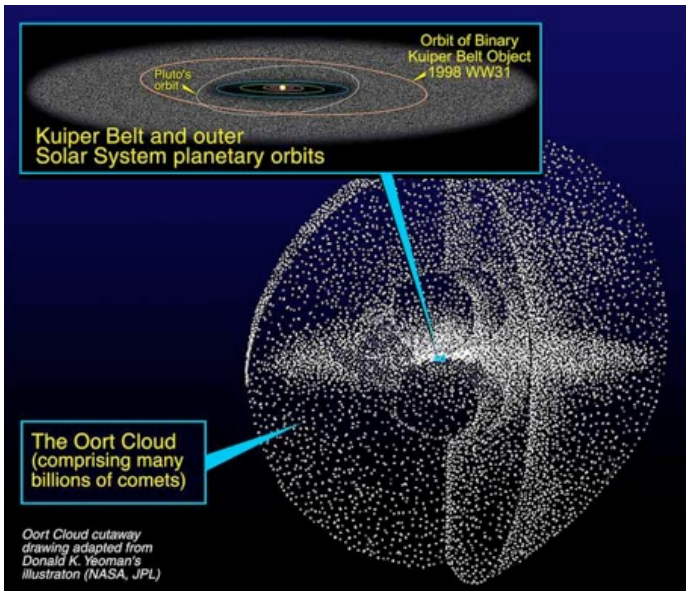


Figure 1.9 – Situation des deux principaux réservoirs de comètes : la ceinture de Kuiper et le nuage de Oort, par rapport au Système Solaire.

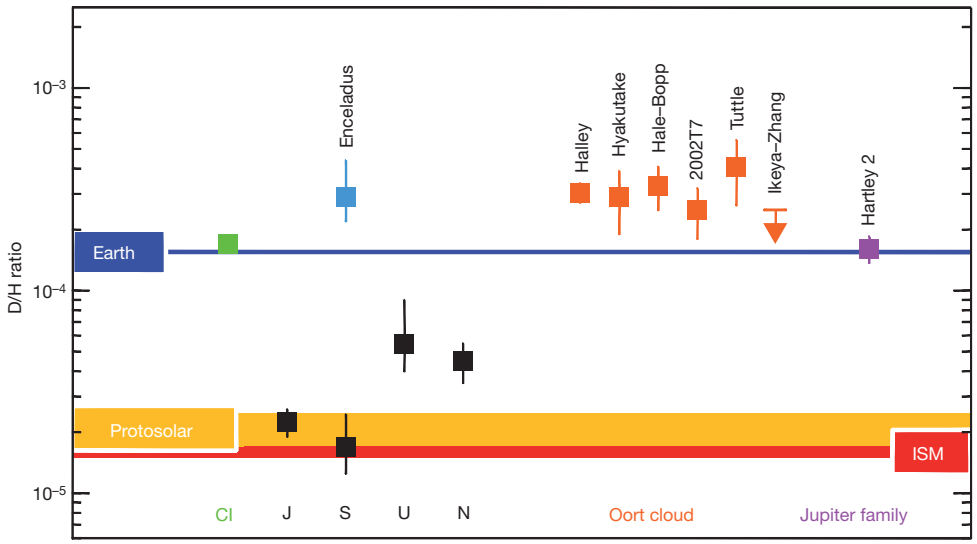


Figure 1.10 – Rapports D/H dans le Système Solaire. Le rapport HDO/H_2O mesuré dans six comètes du nuage de Oort (symboles oranges) est deux fois supérieur à celui des océans terrestres. Ce dernier est par contre en total accord avec celui mesuré dans des chondrites carbonées CI (symbole vert) et dans la comète de la famille de Jupiter Hartley 2 (symbole violet). Les symboles noirs correspondent à la mesure du rapport HD/H_2 dans les atmosphères des planètes gazeuses : Jupiter (J), Saturne (S), Uranus (U) et Neptune (N). Les atmosphères de Neptune et Uranus ont été enrichies en deutérium en se mélangeant avec des glaces proto-planétaires riches en D. Le symbole bleu ciel fait référence à la valeur du rapport HDO/H_2O dans la lune de Saturne, Encelade. Figure extraite de Hartogh et al. (2011).

1.3 L'OBSERVATOIRE SPATIAL HERSCHEL

1.3.1 L'Observatoire Spatial Herschel

L'Observatoire Spatial Herschel, représenté sur la Figure 1.11, a été lancé avec succès depuis Kourou le 14 mai 2009, en même temps que le satellite Planck conçu pour étudier le fond diffus cosmologique. Il a été nommé ainsi en l'honneur de l'astronome William Herschel qui a découvert le rayonnement infrarouge en 1800. Il est arrivé au point L2 de Lagrange, un point d'équilibre situé à 1,5 millions de km de la Terre et à l'opposé du Soleil par rapport à la Terre sur l'axe Soleil-Terre (cf Fig. 1.12), environ un mois plus tard. L'arrivée des données Herschel coïncide donc avec le début de cette thèse.

Ce télescope de type Cassegrain est doté d'un miroir primaire de 3.5 m de diamètre, ce qui en fait le plus grand construit à ce jour pour l'astronomie spatiale. Il mesure 7.5 m de hauteur et 4.3 m de largeur et pesait à son décollage environ 3.3 tonnes. A son bord, sont embarqués trois instruments représentés en Figure 1.13 :

- le spectromètre à très haute résolution spectrale HIFI (*Heterodyne Instrument for the Far-Infrared*, 157–625 μm) qui a pour but l'étude de la chimie du milieu interstellaire (cf Fig. 1.14),
- le spectro-imageur PACS (*Photodetector Array Camera & Spectrometer*, 57–210 μm) destiné à cartographier l'émission infrarouge de la poussière,
- le spectro-imageur SPIRE (*Spectral & Photometric Imaging REceiver*, 200–670 μm) qui remplit les mêmes fonctions que PACS mais à de plus grandes longueurs d'onde dans l'infrarouge submillimétrique.

Le satellite Herschel est équipé d'un cryostat contenant 2400 litres d'hélium liquide permettant de refroidir les éléments du télescope et ainsi de réduire leur émission infrarouge. A ce jour, les tests de cryogénie prédisent une durée de vie de l'observatoire jusqu'à février 2013. Ma thèse s'appuyant essentiellement sur des observations de l'instrument focal HIFI, seul le spectromètre HIFI sera décrit par la suite.

1.3.2 L'instrument HIFI

HIFI est un spectromètre à très haute résolution spectrale, conçu pour observer des signaux de fréquences comprises entre 480 et 1250 GHz et entre 1412 et 1910 GHz. Ces gammes spectrales sont séparées en 7 bandes numérotées de 1 à 7 et décrites en Table 1.2. Le fait d'observer à ces fréquences-là a été rendu possible grâce à la *technique hétérodyne*. Cette technique consiste à convertir le signal reçu en un signal de fréquence plus basse, appelée fréquence intermédiaire, afin de permettre un traitement plus aisé du signal, notamment au niveau de l'amplification. En effet, il n'existe pas de système électronique capable d'amplifier les faibles signaux émis par les molécules à des fréquences élevées comme celles observées par HIFI (480–1910 GHz). Par contre, on dispose de bons amplificateurs à plus basses fréquences. Pour modifier la fréquence du signal, on utilise un oscillateur local et un mélangeur (*mixer* en anglais). L'oscillateur local (OL) génère un signal du type $V_{ol} = A_{ol}\sin(2\pi\nu_{ol}t)$ avec ν_{ol} proche de la fréquence observée ν_s. Le mélangeur est un élément non-linéaire (par exemple une diode, pour laquelle la tension n'est pas proportionnelle à l'intensité du courant) qui va permettre de moduler le signal généré par l'oscillateur local avec le signal astrophysique reçu

Figure 1.11 – Le satellite Herschel (Crédit : ESA/AOES Medialab).

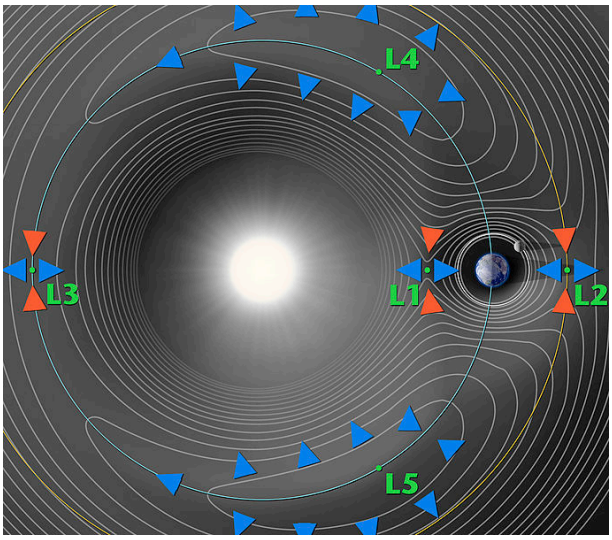


Figure 1.12 – Les cinq points de Lagrange du système Terre-Soleil.

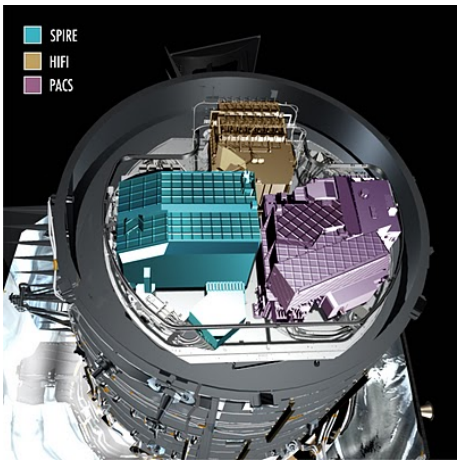


Figure 1.13 – Les trois instruments du satellite Herschel : HIFI, PACS et SPIRE (Crédit : ESA).

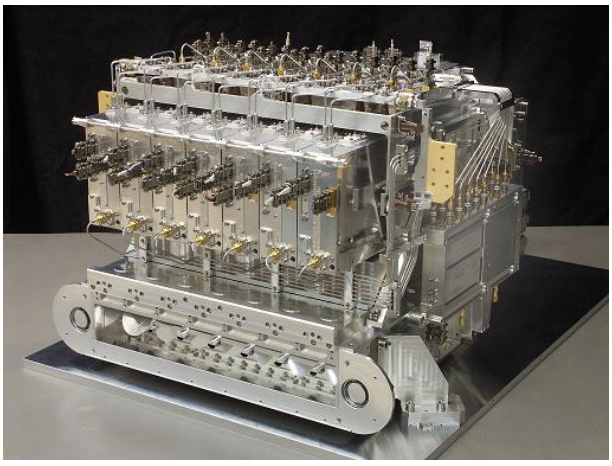


Figure 1.14 – Le spectromètre HIFI (Source : herschel.fr).

défini par $V_s = A_s \sin(2\pi\nu_s t)$. La fonction non-linéaire du mélangeur peut être décomposée en une série de puissances : $F(V) = aV + bV^2 + cV^3 + ...$
Le signal obtenu en sortie du mélangeur sera donc égal à :

$$\begin{aligned} V_m = F(V_{ol} + V_s) = a\ &[A_{ol}\sin(2\pi\nu_{ol}t) + A_s\sin(2\pi\nu_s t)] \\ + b\ &[A_{ol}^2\sin^2(2\pi\nu_{ol}t) + A_s^2\sin^2(2\pi\nu_s t) + 2A_0A_s\sin(2\pi\nu_0 t)\sin(2\pi\nu_s t)] + ... \end{aligned} \quad (1.17)$$

soit

$$V_m = a\ [A_{ol}\sin(2\pi\nu_{ol}t) + A_s\sin(2\pi\nu_s t)] + b\ [\frac{A_{ol}^2}{2}(1-\cos(4\pi\nu_{ol}t)) + \frac{A_s^2}{2}(1-\cos(4\pi\nu_s t)) + A_{ol}A_s(\cos(2\pi(\nu_s-\nu_{ol})t) - \cos(2\pi(\nu_s+\nu_{ol})t)] + ... \quad (1.18)$$

Le signal final comporte alors un signal dont la fréquence est la différence des deux signaux entrants $\nu_{FI} = |\nu_s - \nu_{ol}|$ que l'on définit comme la fréquence intermédiaire. Il contient aussi des signaux présentant des fréquences ν_{ol}, ν_s, leurs harmoniques ($2\nu_{ol}$, $2\nu_s$, $3\nu_{ol}$, $3\nu_s$, etc) ainsi que la somme des fréquences ν_{ol} et ν_s. Ces signaux à haute fréquence peuvent alors être filtrés pour ne garder que le signal de fréquence intermédiaire. La fréquence du signal émis par l'oscillateur local et celle du signal reçu étant proches, la fréquence intermédiaire sera bien plus basse. Le signal peut alors facilement être amplifié à la fréquence intermédiaire. La Figure 1.15 montre un schéma basique de récepteur hétérodyne. Connaissant la fréquence de l'oscillateur local, on peut donc retrouver la fréquence émise par une molécule à une certaine transition. Elle vaut soit $\nu_{ol} - \nu_{FI}$ soit $\nu_{ol} + \nu_{FI}$. Dans HIFI, les spectres obtenus en sortie correspondent à la contribution des spectres observés dans deux bandes spectrales différentes correspondant chacune à $\nu_{ol} - \nu_{FI}$ et $\nu_{ol} + \nu_{FI}$, qualifiées respectivement de *lower sideband* (LSB) et de *upper sideband* (USB), comme cela est représenté sur la Figure 1.16. On qualifie alors le récepteur de DSB, c'est-à-dire de *Double SideBand*. Pour pouvoir déterminer les fréquences réelles où apparaissent les différentes raies du spectre observé, c'est-à-dire pour être capable de savoir si la transition émise vient de la bande LSB ou USB, il suffit d'observer aux mêmes fréquences avec une fréquence intermédiaire légèrement différente. Cela sera détaillé au Chapitre 2. Il faut aussi noter que certains récepteurs hétérodynes sont construits de manière à rejeter le signal venant de la bande image. Ce n'est pas le cas de l'instrument HIFI, mais c'est le cas des récepteurs hétérodynes du télescope de 30 m de l'IRAM (Institut de RadioAstronomie Millimétrique, Espagne). Pour chaque bande, HIFI permet d'observer la polarisation verticale (V) et horizontale (H) du signal, c'est-à-dire l'orientation du champ électrique du signal. HIFI contient donc un système de 14 mélangeurs (7 bandes avec 2 polarisations chacune) placés dans un cryostat à 1.7 K. Pour les bandes 1 à 5, le mélangeur est de type SIS (Supraconducteur - Isolant - Supraconducteur), tandis que pour les bandes 6 et 7, le mélangeur est de type HEB (*Hot Electron Bolometer* : bolomètre à électrons chauds).

Dans HIFI, deux spectromètres mesurent l'intensité du signal en fonction de la fréquence :

- un spectromètre à large bande, le WBS (*Wide Band Spectrometer*), qui permet d'obtenir des données sur une bande de 4 GHz, divisée en canaux de 1.1 MHz.
- un spectromètre à bande étroite mais à très haute résolution, le HRS (*High Resolution Spectrometer*), qui est quant à lui modulable : sa bande passante varie de 230 à 1840 MHz et est divisée en canaux de 0,125 à 1 MHz de large respectivement.

En s'affranchissant de l'atmosphère terrestre, HIFI peut détecter des transitions de molécules invisibles depuis le sol. C'est en particulier le cas de l'eau qui ne peut être observé que depuis l'espace du fait de sa présence en abondance dans l'atmosphère. La Figure 1.17 montre l'opacité de l'atmosphère (opposé de la transmission atmosphérique) pour les différentes fréquences du spectre électromagnétique. Pour la gamme spectrale couverte par Herschel, on

Table 1.2 – Bandes spectrales de l'instrument HIFI

Bande	Mélangeur	Bande spectrale
1	SIS	480 - 640 GHz
2	SIS	640 - 800 GHz
3	SIS	800 - 960 GHz
4	SIS	960 - 1120 GHz
5	SIS	1120 - 1250 GHz
6	HEB	1410 - 1703 GHz
7	HEB	1703 - 1910 GHz

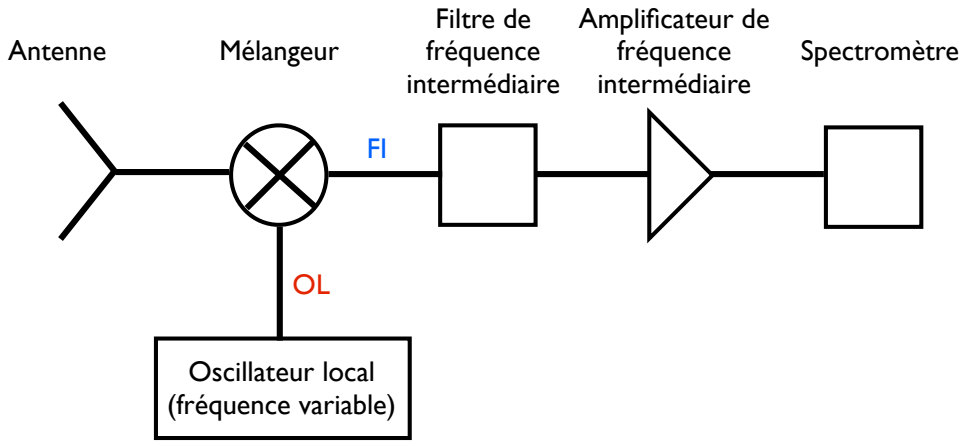


Figure 1.15 – Schéma d'un récepteur hétérodyne.

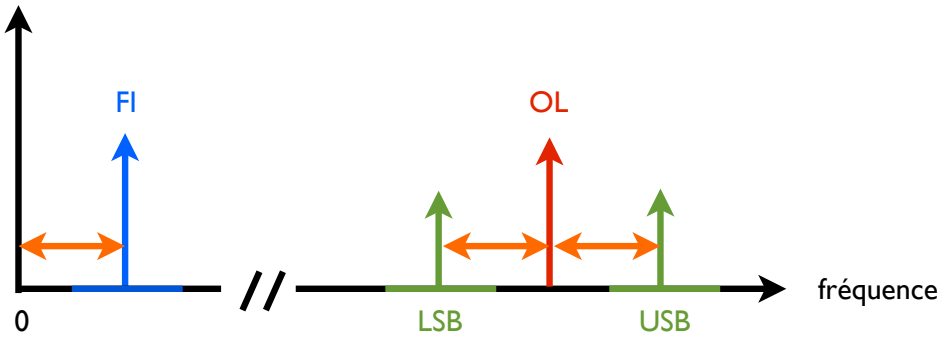


Figure 1.16 – Principe de la technique hétérodyne au niveau fréquentiel.

voit bien que seule une observation depuis l'espace peut permettre une observation aisée à ces fréquences. Certaines fréquences peuvent être accessibles par des télescopes au sol, mais uniquement s'ils sont situés à très haute altitude, comme le CSO (*Caltech Submillimeter Observatory*, Hawaii, 4200 m d'altitude) et APEX (*Atacama Pathfinder EXperiment*, Chili, 5100 m d'altitude), et par très beau temps (c'est-à-dire pour une quantité de vapeur d'eau limitée dans l'atmosphère). Les temps d'observation depuis le sol restent de toute manière considérablement plus élevés par comparaison au temps nécessaire à HIFI pour observer à une même fréquence avec un même rapport signal sur bruit. HIFI couvre des longueurs d'onde encore jamais couvertes auparavant dans le domaine submillimétrique, permettant la découverte de nombreuses espèces encore jamais détectées dans le milieu interstellaire telles que HF, ND, H_2Cl^+, H_2O^+, etc. Auparavant les précédents télescopes spatiaux infrarouges, tels que ISO (2.5–240 μm), Spitzer (3–180 μm) et Akari (aussi appelé Astro-F, 1.7–180 μm), observaient à des longueurs d'onde plus courtes, tandis que les satellites SWAS (540–610 μm) et ODIN étaient focalisés sur certaines raies, dont certaines transitions de l'eau, mais pour des résolutions spectrales moins intéressantes et des lobes bien plus importants que celui de HIFI. A 557 GHz (fréquence de la transition fondamentale de ortho–H_2O), la résolution spatiale est de $3.3' \times 4.5'$ pour SWAS et $126''$ pour ODIN tandis qu'elle est de $38''$ pour HIFI.

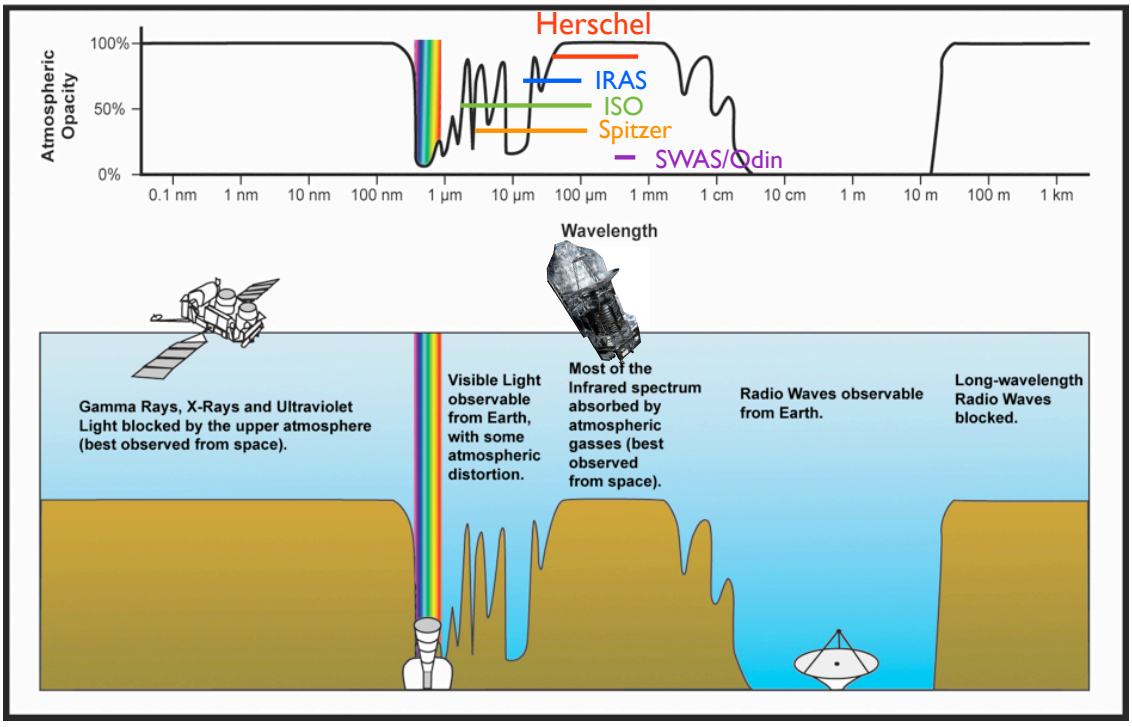


FIGURE 1.17 – Opacité atmosphérique en fonction de la fréquence. L'instrument HIFI d'Herschel couvre une bande spectrale de 157 à 625 μm, difficilement observable depuis la Terre (Source : JPL).

1.3.3 Implications dans les programmes à temps garanti : CHESS et PRISMAS

1.3.3.1 Le programme CHESS

Le programme CHESS (*Chemical HErschel Surveys of Star forming regions*, PI : C. Ceccarelli, IPAG, Grenoble) est un programme du temps garanti HIFI, qui fait l'objet d'une collaboration internationale. Ce programme dispose de 281 heures d'observations réparties entre plusieurs pays dont la France, les Pays-Bas, les Etats-Unis, l'Allemagne, l'Italie et l'Espagne. Il a pour but de faire le recensement le plus précis possible du contenu moléculaire ainsi que de sa complexité dans différents types de régions chimiquement riches de notre Galaxie. Pour cela, des relevés spectraux non biaisés ont été réalisés à haute résolution spectrale grâce à l'instrument HIFI à bord de l'Observatoire Spatial Herschel en direction de plusieurs sources aux caractéristiques différentes :

- les cœurs pré-stellaires 16293E et L1544 (PI : A. Bacmann, IPAG, Grenoble),
- la proto-étoile de faible masse IRAS 16293-2422 (PI : E. Caux, IRAP, Toulouse),
- le jet moléculaire L1157-B1 (PI : B. Lefloch, IPAG, Grenoble),
- la proto-étoile de masse intermédiaire OMC2-FIR4 (PI : C. Dominik, Université d'Amsterdam),
- le cœur chaud de faible luminosité AFGL 2591 ($L = 2 \times 10^4 L_\odot$, PI : F. van der Tak, SRON, Groningen),
- le cœur chaud de luminosité intermédiaire NGC 6334I ($L = 2 \times 10^5 L_\odot$, PI : D. Lis, CIT, Pasadena),
- le cœur chaud de haute luminosité W51e1/e2 ($L = 2 \times 10^6 L_\odot$, PI : C. Comito, Université de Cologne).

Dans le cadre de ce programme, j'ai essentiellement travaillé sur la proto-étoile de faible masse IRAS 16293-2422 et tout particulièrement sur les données de l'eau deutérée et des isotopes de l'eau $H_2{}^{18}O$ et $H_2{}^{17}O$. Ce travail fait l'objet du Chapitre 3.

1.3.3.2 Le programme PRISMAS

Dans le cadre de ma thèse, j'ai aussi participé à un autre programme à temps garanti Herschel appelé PRISMAS (*PRobing InterStellar Molecules with Absorption line Studies*, PI : M. Gerin, LERMA, Paris). Il se situe lui aussi dans un contexte international fort. Le temps d'observation alloué à ce programme est de 128 heures. Son but est de mener une étude spectroscopique des hydrures et de chaînes carbonées, pour lesquels de nombreuses transitions peuvent être observées dans la gamme spectrale de HIFI, et ainsi permettre de mieux comprendre la chimie du milieu interstellaire. Les hydrures sont des composés chimiques de l'hydrogène associé à d'autres éléments comme le carbone C, l'azote N, l'oxygène O, le fluor F et le chlore Cl. Huit régions de formation stellaire massives ont été choisies afin de pouvoir observer ces molécules : Sgr A*, W28A, W31C, W33A, G34.3, W49N, W51 et DR21(OH). Ces sources ont d'une part l'avantage d'émettre une émission de continuum de la poussière particulièrement forte et d'autre part de se situer à une assez grande distance (1–11.5 kpc) dans la Galaxie pour que des nuages diffus soient situés en avant-plan sur la ligne de visée. Les proto-étoiles massives situées à l'arrière créent donc un fort continuum qui va pouvoir

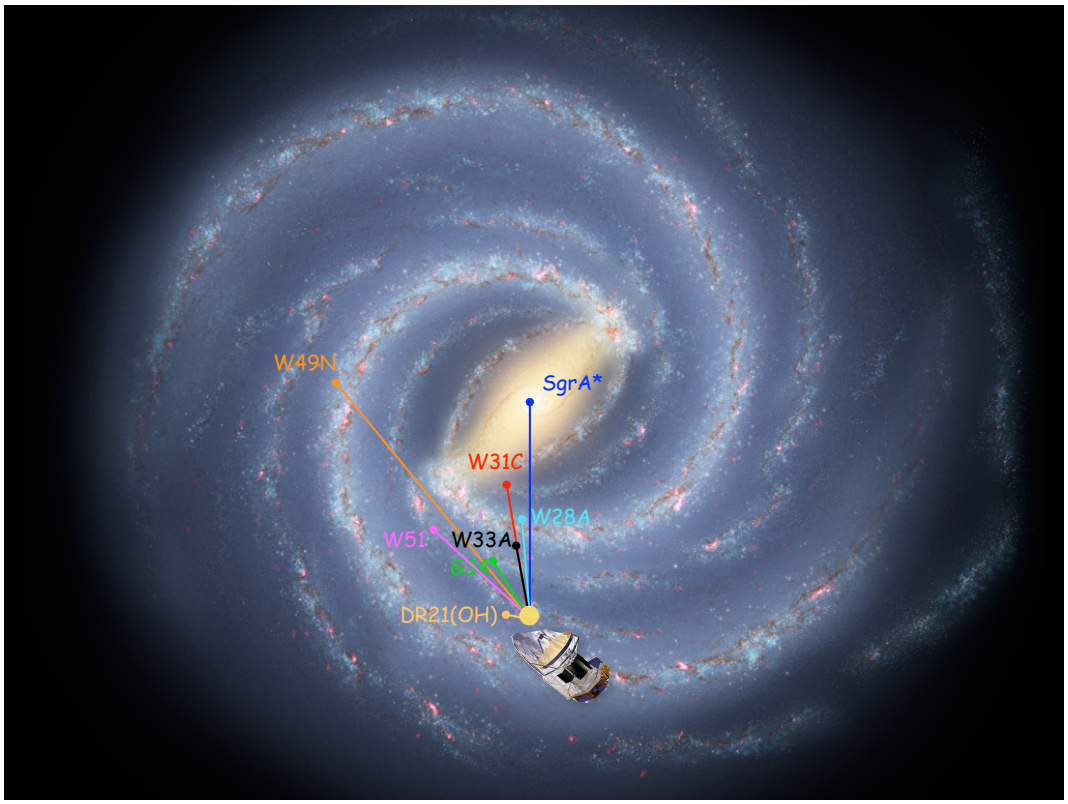


FIGURE 1.18 – Position des sources PRISMAS dans le plan galactique.

être absorbé par les molécules, notamment les hydrures, contenues dans les nuages diffus. Ces nuages diffus se situent dans les différents bras spiraux de la Galaxie et présentent donc des vitesses différentes de celle de la région de formation stellaire. De multiples composantes en absorption ainsi qu'en émission peuvent donc être détectées pour une même transition. L'émission ou absorption d'une raie dépend de la densité et de la température des milieux traversés ainsi que des paramètres spectroscopiques des molécules comme le coefficient d'Einstein par exemple. La Figure 1.18 montre la position des huit sources du programme dans le plan de la Galaxie tandis que la Figure 1.19 illustre le fait de détecter une même transition à différentes vitesses révélant la présence de nuages sur la ligne de visée. La vitesse de la source est qualifiée de v_{LSR} pour *Local Standard of Rest*. Elle se calcule à partir de la fréquence via la formule suivante :

$$v_{LSR} = \frac{\Delta\nu}{\nu} \times c = -\frac{\nu - \nu_0}{\nu_0} \times c \tag{1.19}$$

où c est la vitesse de la lumière dans le vide ($c = 299\ 792\ 458$ m s^{-1}), ν la fréquence de la molécule au repos et $\Delta\nu$ la différence entre la fréquence observée à la vitesse de la source et la fréquence au repos. En plus de fournir de nombreuses informations sur la chimie des nuages diffus, ce programme permet de mieux comprendre la chimie des régions de formation stellaire massive via les relevés spectraux biaisés effectués autour des transitions ciblées de ce programme. Il faut noter que de nombreuses transitions sont observables simultanément dans un même spectre en raison de la large bande de mesure instantanée (4 GHz) de l'instrument

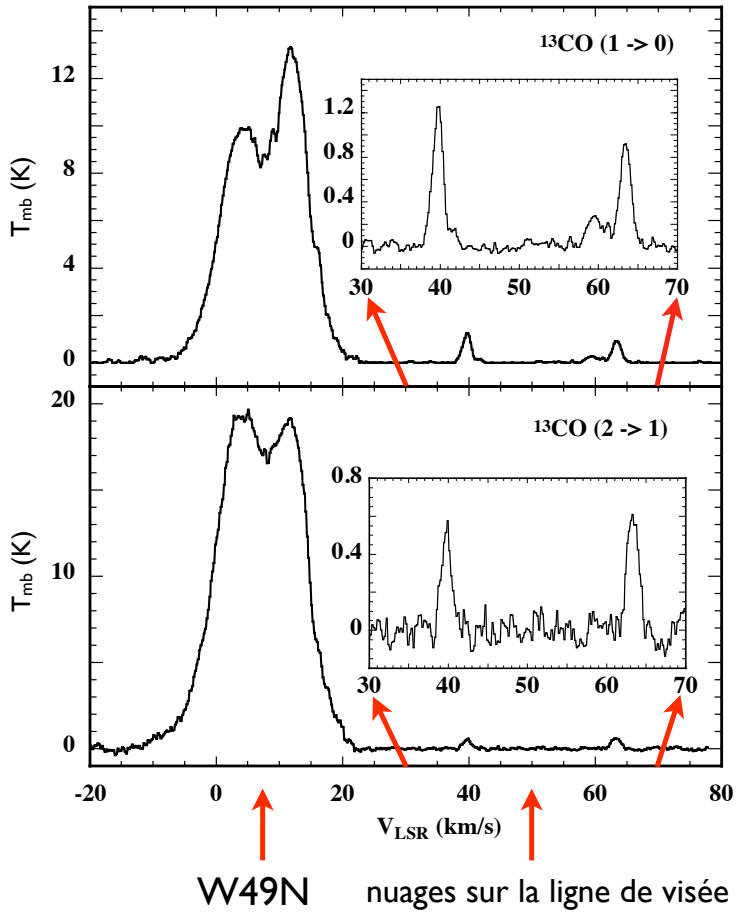


Figure 1.19 – Signature spectrale du ^{13}CO (1-0) et (2-1) de la région de formation d'étoiles W49N, émettant à environ 8 km s^{-1}, ainsi que des nuages moléculaires sur la ligne de visée (en zoom, entre 30 et 70 km s^{-1}). Figure extraite de Vastel et al. (2000).

HIFI. Le programme PRISMAS est divisé en plusieurs sous-projets :

- l'eau H_2O et les espèces liées à la chimie de l'eau ainsi que le fluorure d'hydrogène HF (PI : D. Neufeld, Université Johns Hopkins, Philadelphie),
- les hydrures CH^+, CH, NH et espèces liées (PI : E. Falgarone, LERMA, Paris),
- les chaînes carbonées et notamment le C_3 (PI : T. Giesen, Université de Cologne),
- les données PACS observées en complément des observations HIFI (PI : J. Goicoechea, Centre d'astrobiologie de Madrid),
- les espèces deutérées (PI : C. Vastel, IRAP, Toulouse),
- l'émission des sources massives (PI : D. Lis, CIT, Pasadena).

Durant ma thèse, j'ai été impliquée dans la préparation des AORs (cf Sect. 2.1.2), dans la réduction des données (cf Sect. 2.1.3) ainsi que dans l'étude des molécules deutérées. Il faut

noter que la seule espèce deutérée à avoir été détectée dans le cadre du programme PRISMAS est HDO et uniquement en direction des sources massives (pas dans les nuages diffus). Pour les espèces deutérées ciblées (DF, ND, NH_2D, D_2O), des limites supérieures sont seulement disponibles. J'ai donc participé à l'étude de HDO dans ces sources. Pour compléter le projet, j'ai également mené des observations de transitions de HDO observables depuis le sol avec le CSO en septembre 2011 et avec le télescope de 30 m de l'IRAM en décembre 2011.

Chapitre 2

Les outils d'analyse et de modélisation

Sommaire

2.1 Des observations à la réduction des données 33
2.1.1 Les observations 33
2.1.2 La préparation des observations HIFI du programme PRISMAS 37
2.1.3 La réduction de données 39
2.2 L'analyse des données 42
2.2.1 L'analyse avec CASSIS 42
2.2.2 Les bases de données spectroscopiques 43
2.2.3 Analyse du relevé spectral TIMASSS 44
2.3 Les modèles de transfert radiatif 50
2.3.1 Transfert radiatif 50
2.3.2 Modélisation ETL : les diagrammes rotationnels 55
2.3.3 Modélisation hors-ETL 57

2.1 Des observations à la réduction des données

2.1.1 Les observations

2.1.1.1 Radiotélescopes vs interféromètres

Pour observer dans le submillimétrique/millimétrique, les astronomes disposent de deux types d'instruments :

- les radiotélescopes qualifiés de *single-dish*, c'est-à-dire à antenne unique (cf Fig. 2.1),
- les interféromètres constitués de plusieurs antennes (cf Fig. 2.2).

Du fait de leur antenne unique, les radiotélescopes *single-dish* permettent d'obtenir une résolution angulaire, c'est-à-dire spatiale, de quelques dizaines de secondes d'arc en général. Elle varie avec la fréquence observée et se calcule selon la formule :

$$\theta_B \sim 1.2\frac{\lambda}{D} \tag{2.1}$$

où θ_B est la résolution angulaire (en rad), λ la longueur d'onde à laquelle se fait l'observation et D le diamètre du télescope. Le lobe principal du télescope peut généralement être approximé par une Gaussienne. La taille du lobe θ_B correspond alors à la largeur à mi-hauteur de la Gaussienne. Une telle résolution spatiale ne permet cependant pas de différencier de

FIGURE 2.1 – Le radiotélescope de l'IRAM de 30 m de diamètre (Pico Veleta, Espagne).

FIGURE 2.2 – L'interféromètre ATCA composé de 6 antennes de 22 m de diamètre (Narrabri, Australie).

manière évidente l'émission de deux sources proches. Les émissions de toutes les composantes contenues dans le lobe sont mélangées. Pour démêler l'émission de plusieurs sources séparées de quelques secondes d'arc, l'utilisation d'interféromètres est recommandée. Ils exploitent les interférences intervenant entre plusieurs ondes cohérentes entre elles et permettent d'obtenir une résolution spatiale équivalente à celle d'un radiotélescope de diamètre équivalent à l'écart entre les instruments combinés. La résolution spatiale d'un interféromètre s'exprime alors par :

$$\theta_I \sim \frac{\lambda}{B_{max}}, \tag{2.2}$$

B_{max} étant la ligne de base maximale, c'est-à-dire la plus grande distance entre deux antennes. Contrairement aux télescopes *single-dish*, les interféromètres ne permettent pas cependant d'étudier l'émission étendue d'une source. L'information est perdue si l'émission provient d'une région avec une taille angulaire supérieure à :

$$\theta_{LAS} \sim 0.6\frac{\lambda}{B_{min}}, \tag{2.3}$$

B_{min} étant la distance minimale entre deux antennes. Le lobe principal, c'est-à-dire la taille de la région où des structures de taille inférieure à θ_{LAS} peuvent être observées, se calcule selon l'équation 2.1.

Même si j'ai pu m'intéresser à l'interférométrie à travers l'étude des hydrocarbures dans la proto-étoile IRAS 16293 (cf Annexe A), ma thèse est essentiellement basée sur l'exploitation de données de télescopes *single-dish* tels que :

- l'Observatoire Spatial Herschel (cf 1.3)
- les radiotélescopes au sol :
  - IRAM (Institut de Radio-Astronomie Millimétrique, $D = 30$ m, Espagne),
  - JCMT (*James Clark Maxwell Telescope*, $D = 15$ m, Hawaii),

– CSO (*Caltech Submillimeter Observatory*, $D = 10.4$ m, Hawaii).

La suite du Chapitre se limitera, par conséquent, aux observations et à la réduction de données obtenues avec un radiotélescope.

2.1.1.2 Observer avec un radiotélescope

Une antenne se compose d'un miroir primaire (de diamètre d'ouverture D) qui renvoie le signal reçu vers un miroir secondaire. Ce dernier concentre alors le signal pour le diriger vers les récepteurs (cf Fig. 2.3). Le signal obtenu en sortie d'un radiotélescope contient, en plus de l'émission de la source, l'émission de l'arrière-plan à savoir le fond diffus cosmologique. Il est également absorbé par l'atmosphère terrestre, selon une loi exponentielle dépendant de l'opacité au zénith τ_0 et de la distance atmosphérique traversée par le rayonnement. Lors des observations, des phases de calibration sont nécessaires pour ne conserver que le signal qui intéresse l'utilisateur, à savoir celui provenant de la source étudiée. Plusieurs techniques existent pour soustraire le signal d'arrière-plan :

- le *position switching* (PSW) : Cela consiste à observer de manière alternée en direction de la source (position ON) et en direction d'une position hors de la source (position OFF) en modifiant l'orientation de l'antenne. Le signal émis uniquement par la source est alors égal à la différence entre l'observation ON et l'observation OFF.
- le *wobbler switching* (WSW), appelé aussi *dual beam switching* (DBS) : L'orientation du miroir secondaire varie de manière régulière pour observer alternativement position ON et position OFF.
- le *frequency switching* (FSW) : Cette technique est basée sur une alternance entre deux fréquences proches de l'Oscillateur Local. L'antenne et le miroir restent fixes. Cette méthode peut être utile s'il n'y a pas de position OFF à proximité de la source pointée, mais est déconseillée pour les objets montrant une très grande richesse spectrale tels que certains *hot cores* par exemple. En effet, il faut que le signal soit exempt de raies à la fréquence utilisée pour le OFF pour correctement déterminer l'émission propre à la source.

Au final, le signal mesuré est donc égal à :

$$T_{mes} = \mathrm{ON} - \mathrm{OFF} = (T'_A \exp(-\frac{\tau_0}{\sin(el)}) + T_{bg}) - T_{bg}. \tag{2.4}$$

el est l'élévation de la source, T_{bg} l'émission de l'arrière-plan et T'_A la température d'antenne hors atmosphère. La température T'_A n'est pas corrigée des pertes situées à l'arrière de l'antenne. Elle est reliée à la température d'antenne corrigée des pertes (hors atmosphère) T^*_A par le coefficient d'efficacité F_{eff} :

$$T^*_A = \frac{T'_A}{F_{\mathrm{eff}}}. \tag{2.5}$$

Le facteur F_{eff}, appelé *forward efficiency* (efficacité du lobe avant), correspond à la fraction de puissance reçue qui entre dans le lobe avant :

$$F_{\mathrm{eff}} = k_0 \frac{\Omega_F}{\Omega_A}. \tag{2.6}$$

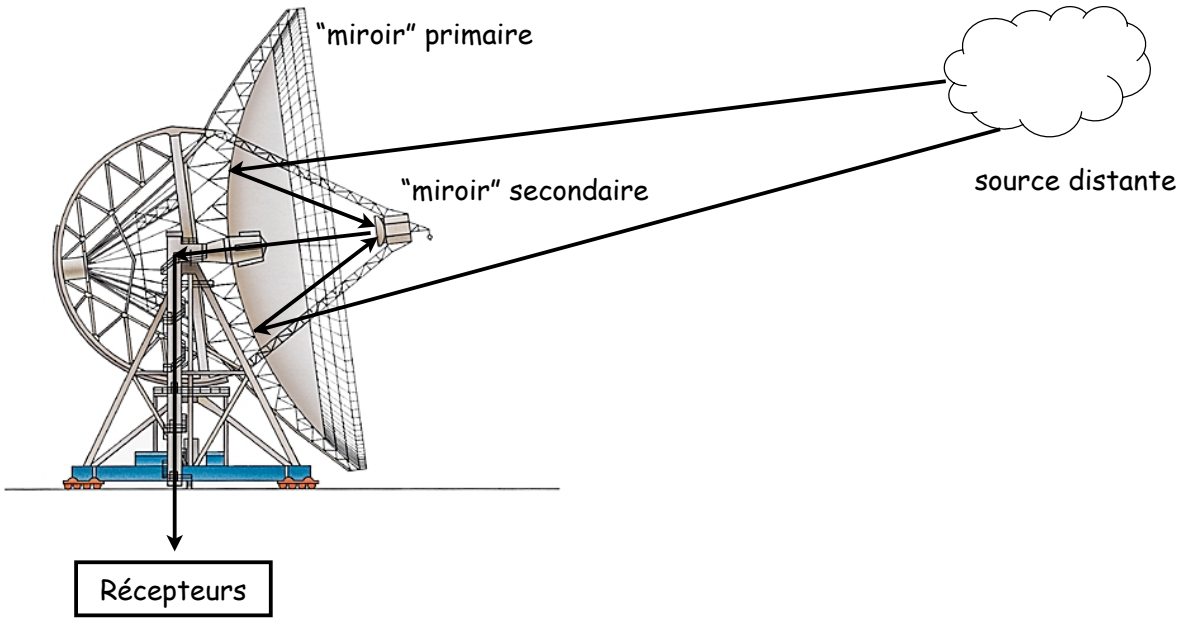


FIGURE 2.3 – Principe d'un radiotélescope. Le signal est reçu par le miroir primaire puis renvoyé vers le miroir secondaire qui le concentre dans un cornet (*feed horn*). Le signal est alors transmis le long de câbles vers les récepteurs.

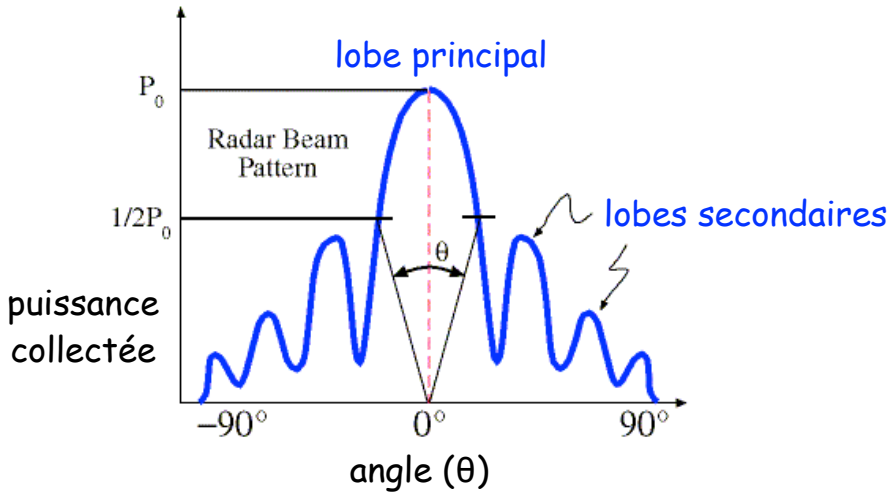


FIGURE 2.4 – Diagramme de rayonnement reçu par une antenne. Des lobes secondaires (que l'on souhaite les plus petits possible) sont présents en plus du lobe principal.

k_0 est le facteur de pertes ohmiques de l'antenne. Ω_F est l'angle solide sous-tendu par les 2π stéradians situés à l'avant de l'antenne :

$$\Omega_F = \iint_{2\pi \text{ avant}} P_n(\theta, \varphi) d\Omega, \tag{2.7}$$

$P_n(\theta, \varphi)$ étant la puissance reçue selon différentes directions désignées par les variables θ et φ et normalisée. Ω_A est l'angle solide sous lequel l'antenne peut détecter un signal :

$$\Omega_A = \iint_{4\pi} P_n(\theta, \varphi) d\Omega, \tag{2.8}$$

Les températures d'antenne ne sont pas directement comparables aux températures de brillance prédites par les modèles de transfert radiatif, car elles sont dépendantes du télescope utilisé. Il est donc nécessaire de les convertir en *main beam temperatures* (températures de lobe principal) $T_{\rm mb}$:

$$\boxed{T_{\rm mb} = \frac{T'_A}{B_{\rm eff}} = T^*_A \times \frac{F_{\rm eff}}{B_{\rm eff}}} \tag{2.9}$$

Le facteur $B_{\rm eff}$ est appelé *beam efficiency*. C'est la fraction de puissance reçue qui entre dans le lobe principal :

$$B_{\rm eff} = \frac{\Omega_M}{\Omega_A}, \tag{2.10}$$

avec Ω_M l'angle solide sous-tendu par le lobe principal (voir le diagramme de rayonnement en Fig. 2.4) :

$$\Omega_M = \iint_{\rm MB} P_n(\theta, \varphi) d\Omega. \tag{2.11}$$

Il faut noter que la température de brillance observée est dépendante de la taille de la source. Pour comparer des observations entre plusieurs télescopes de diamètre différent, on applique un facteur de dilution défini comme :

$$f_D = \frac{\theta_S^2}{\theta_S^2 + \theta_B^2}, \tag{2.12}$$

θ_S étant la taille de la source et θ_B la taille du lobe.

2.1.2 La préparation des observations HIFI du programme PRISMAS

Avant de pouvoir envoyer les instructions d'observation à l'Observatoire Spatial Herschel, il est nécessaire de préparer des AORs (*Astronomical Observation Requests*) grâce au logiciel HSPOT (*Herschel SPace Observations planning Tools*). Les AORs permettent de spécifier les différents paramètres d'observation et d'estimer le temps d'intégration nécessaire pour le type d'observation souhaité. Pour les observations HIFI, il faut notamment définir : le type d'observation (observations pointées, cartes ou relevés spectraux), la source (c'est-à-dire ses coordonnées et sa vitesse au repos v_{LSR}), la bande d'observation, le spectromètre utilisé : HRS et/ou WBS, le mode d'observation (par exemple *position switching*, *frequency switching*, *dual beam switching*), le temps d'observation ou le *rms* requis et surtout la fréquence de l'Oscillateur Local (appelé ci-après fréquence OL).

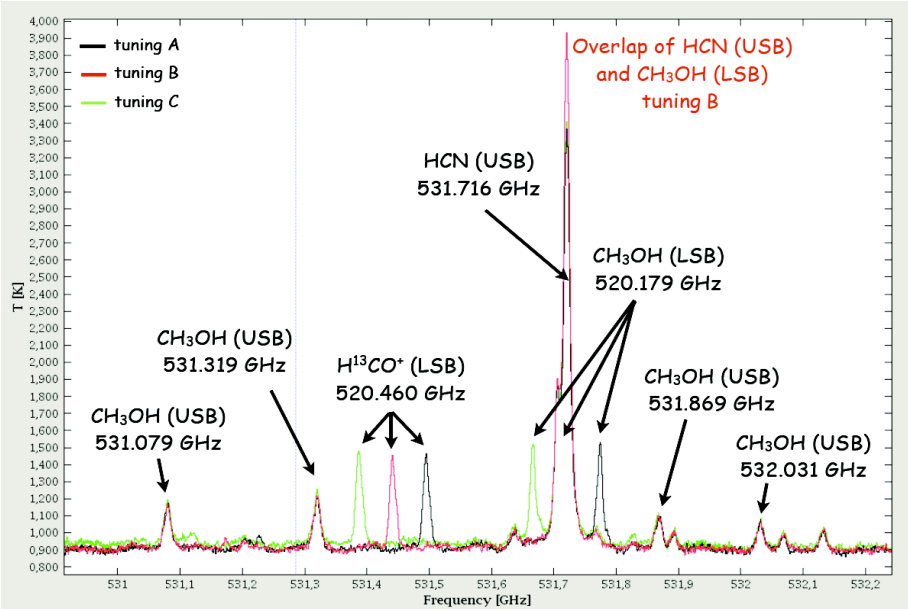


FIGURE 2.5 – Exemples d'observations réalisées en direction de la région HII compacte W31C dans le cadre du programme PRISMAS. Les trois couleurs montrent les spectres obtenus pour trois fréquences d'Oscillateur Local séparées de 15 km s^{-1}. Les transitions appartenant à la bande USB (ici la bande signal) sont superposées tandis que celles de la bande LSB (ici la bande image) apparaissent décalées. On peut remarquer l'importance d'observer à différentes fréquences pour la transition de HCN à 531.716 GHz, mélangée à une raie de CH_3OH dans la configuration B.

Dans le cadre du programme PRISMAS, les observations étaient pointées. Pour observer une même transition, trois observations à des fréquences OL décalées de 15 km s^{-1} étaient réalisées. En effet, les régions HII compactes étant particulièrement riches en raies, il faut faire attention à éviter la contamination de la transition étudiée par une autre transition de la bande image. Malgré ses catalogues de raies, le logiciel HSPOT ne permet pas d'optimiser le choix de la fréquence OL. C'est d'autant plus complexe que les spectres des régions étudiées par PRISMAS montrent plusieurs composantes à des vitesses différentes (donc décalées en fréquence) : le *hot core* et plusieurs nuages diffus situés en avant-plan de celui-ci. J'ai donc participé à la préparation des AORs en déterminant les meilleurs choix pour les fréquences OL. Des modèles basés sur la littérature ont été créés pour chaque source du programme PRISMAS. Ils incluent toutes les molécules potentiellement observables dans les différentes composantes situées sur la ligne de visée aux abondances attendues dans ces régions. Le logiciel CASSIS [1] (Centre d'Analyse Scientifique de Spectres Infrarouges et Submillimétriques), développé au sein de l'IRAP pour l'analyse des spectres astrophysiques dans le domaine infrarouge et submillimétrique, a alors été utilisé pour faire une modélisation à l'équilibre thermodynamique local aux fréquences ciblées en faisant varier la fréquence de l'Oscillateur Local. Il fallait donc trouver trois fréquences séparées de 15 km s^{-1} de façon à ce que la

1. `http://cassis.irap.omp.eu/`

transition observée ne soit pas recouverte par une raie venant de la bande image, que ce soit aux vitesses des nuages diffus ou des *hot cores*. Le choix de la bande observée (LSB ou USB) était aussi à définir. Il fallait, par la suite, vérifier avec HSPOT qu'il était possible d'observer avec les trois fréquences choisies. La présence de *spurs* (intenses pics dus à la source de l'oscillateur local qui dégradent la qualité du spectre) dans l'une des configurations choisies nécessitaient, par exemple, de trouver une autre optimisation des fréquences. Il faut noter que ce travail a joué un rôle important dans ce programme puisque toutes les observations des transitions ciblées dépendaient du bon choix des configurations des fréquences. La Figure 2.5 illustre comment le fait d'observer avec trois fréquences OL différentes permet d'assigner à quelle bande appartient la raie observée et être ainsi capable de l'identifier.

2.1.3 La réduction de données

Avant d'analyser les observations issues de radiotélescopes, une réduction des données est nécessaire. De manière générale, cela consiste à éliminer les spectres problématiques (présence de *spurs* par exemple), soustraire des lignes de base, puis à moyenner les spectres. Le fait d'ajuster une ligne de base sur les données permet notamment de déterminer la valeur rms (*root mean square*, aussi appelée moyenne quadratique) du signal qui est définie comme :

$$rms = \sqrt{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(T_i - \langle T_i \rangle)^2} \tag{2.13}$$

Pour essayer de détecter une transition, on peut réduire le rms des observations en *smoothant* les données, c'est-à-dire en réduisant leur résolution spectrale. En effet, le rms est relié à la résolution spectrale à travers l'équation suivante :

$$rms \sim \frac{2\ T_{sys}}{\sqrt{\delta\nu\ \tau}} \tag{2.14}$$

avec T_{sys} la température du système, $\delta\nu$ la résolution spectrale et τ le temps d'intégration. Il diminue donc d'un facteur $\sqrt{2}$ quand la résolution spectrale est réduite d'un facteur 2. Le continuum est nécessaire à l'analyse des raies en absorption (cf Sect. 2.3.1.1). Il est, par conséquent, important de relever la valeur observée du continuum T_{cont} avant de soustraire les lignes de base. Il faut ensuite rajouter au spectre réduit le continuum de valeur T_{cont} dans le cas de récepteurs SSB (*Single SideBand*) et $T_{cont}/2$ dans le cas de récepteurs DSB (*Double SideBand*). Il faut aussi convertir les températures d'antenne en *main beam temperatures* selon l'équation 2.9 afin de les comparer aux prédictions des modèles de transfert radiatif (cf Sect. 2.1.1.2).

Pour réduire les données provenant de télescopes au sol, j'ai utilisé le logiciel CLASS [2] (*Continuum and Line Analysis Single-dish Software*) alors que, pour la réduction des observations Herschel/HIFI, le logiciel HIPE (*Herschel Interactive Processing Environment*) fournit les données jusqu'au niveau 2 (spectres DSB). A partir de là, deux choix se présentent :

- faire la réduction restante avec HIPE et sortir les données résultantes sous un format lisible par les logiciels CASSIS et CLASS,

2. `http://www.iram.fr/IRAMFR/GILDAS/`

- exporter les données de HIPE de suite après le niveau 2 au format CLASS pour les traiter avec le logiciel CLASS.

La méthode de réduction de données HIFI est différente selon le type d'observations : relevés spectraux ou observations pointées. Les relevés spectraux, du fait de la redondance des observations sur de larges bandes, permettent de faire une déconvolution des spectres observés pour obtenir des données SSB, ce qui n'est pas le cas des données pointées. On peut néanmoins, dans le deuxième cas, réussir à déterminer la bande d'émission des transitions en observant à différentes fréquences LO, comme cela a été fait pour le programme PRISMAS (cf Sect. 2.1.2).

Réduction des données HIFI dans le cadre du programme CHESS :

Des relevés spectraux de régions de formation stellaire ont été réalisés dans le programme CHESS. Pour obtenir des données SSB, une déconvolution des observations était donc nécessaire. A l'arrivée des premières données du relevé de la proto-étoile IRAS 16293-2422, deux démarches, l'une avec HIPE, l'autre avec CLASS, ont été réalisées pour comparer les spectres obtenus en sortie et vérifier la fiabilité des deux méthodes. J'ai participé, à ce moment-là, à la réduction des données avec le logiciel HIPE. Avant de déconvoluer les spectres, il a notamment fallu vérifier tous les spectres un à un, éliminer les sous-bandes inutilisables ainsi que les canaux contenant des *spurs*, puis soustraire les lignes de base afin de correctement déconvoluer les données. Les polarisations V et H étaient moyennées à la suite de cela et enfin exportées sous un format lisible par le logiciel d'analyse spectrale CASSIS en tant que données SSB.

Les valeurs du continuum ont été relevées au fur et à mesure de la détermination des lignes de base. Elles sont représentées en $T_{\rm mb}$ en fonction de la fréquence en Figure 2.6. Dans chaque sous-bande de 1 GHz des bandes SIS (1–5), un polynôme de bas degré a été ajusté sur les régions sans raie. La valeur médiane du continuum DSB a alors été divisée par 2 pour obtenir le continuum SSB. L'ajustement du continuum SSB de la bande 1 à 5 par un polynôme de degré 2 est égal à :

$$T_{cont,SSB} = -(0.399 \pm 0.018) + (9.367 \pm 0.440) \times 10^{-4} \times \nu_{GHz} + (3.733 \pm 0.254) \times 10^{-7} \times \nu_{GHz}^2.$$

Pour les bandes HEB (6–7), les données ne pouvaient pas être exportées dans CLASS et la soustraction de la ligne de base avec HIPE n'était pas optimale. Les données ont donc simplement été déconvoluées dans HIPE sans soustraction du continuum puis tracées en fonction de la fréquence (cf Fig. 2.6). L'ajustement du continuum SSB obtenu sur les bandes HEB par un polynôme de degré 1 donne :

$$T_{cont,SSB} = (0.076 \ \pm \ 0.035) + (0.858 \ \pm \ 0.221) \times 10^{-3} \times \nu_{GHz}.$$

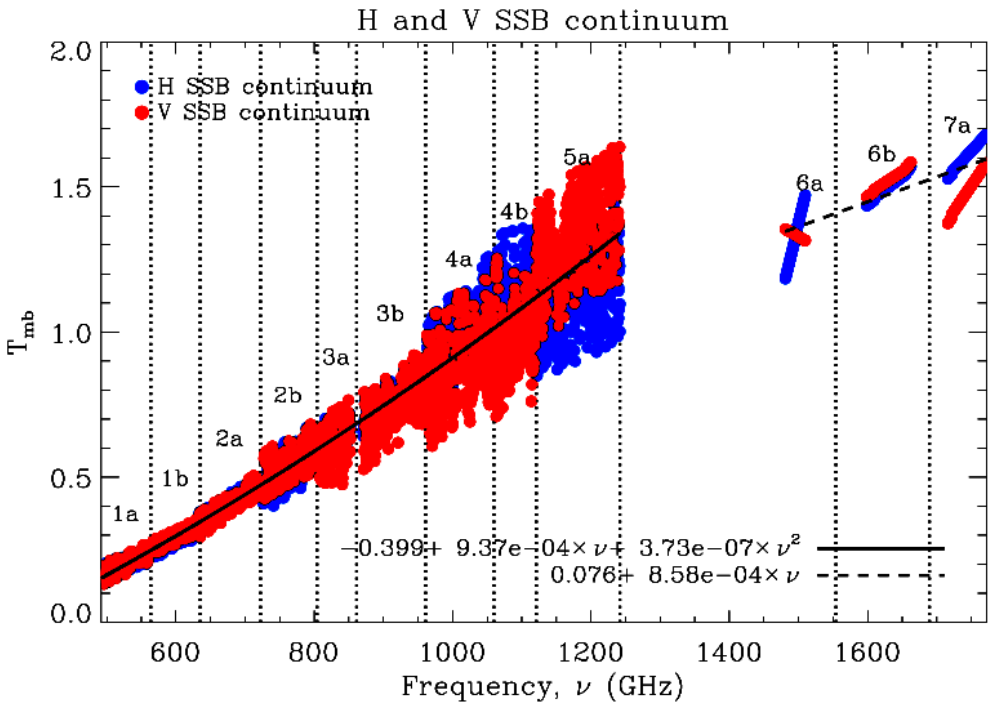


Figure 2.6 – Continuum SSB de la proto-étoile IRAS 16293-2422 observé avec HIFI en fonction de la fréquence pour les polarisations H (en bleu) et V (en rouge). Un polynôme de degré 2 a été ajusté sur les bandes SIS (en trait continu), tandis qu'un ajustement par un polynôme de degré 1 a été effectué sur les bandes HEB (en pointillés).

Réduction des données HIFI dans le cadre du programme PRISMAS :

Pour les observations pointées PRISMAS, la réduction est plus simple puisqu'il suffit de comparer les trois observations et faire la moyenne des spectres entre eux (après soustraction du continuum) pour la transition étudiée s'il n'y a pas de chevauchement avec des raies de la bande image. Le continuum est alors estimé d'après le rapport de gain des bandes signal/image. Ce dernier est proche de 1 (Roelfsema et al. 2012), ce qui nécessite de diviser le continuum observé par ∼2 puis d'ajouter cette valeur au spectre moyenné. Il a néanmoins fallu, à l'arrivée des premières données, vérifier que les observations étaient en accord avec les AORs et s'assurer que la stratégie d'observation était bonne dans le but de la préparation des AORs restants. La qualité des données a été inspectée. Il a notamment été vérifié :

- la présence éventuelle de *spurs* : comme cela a été vu pour le programme CHESS, de nombreux *spurs* pouvaient ne pas être pas éliminés automatiquement,
- la cohérence entre les polarisations V et H et les observations WBS et HRS,
- la présence éventuelle de *platforming* (le continuum apparaît décalé d'une sous-bande à l'autre),
- la présence éventuelle de *standing waves* (le continuum oscille de manière sinusoïdale).

Les données ont aussi été comparées aux modèles dans le but de préparer et d'optimiser les

AORs restants :

- Les vitesses des différentes composantes de la source sont-elles en accord avec les précédentes études ? Des composantes jamais identifiées auparavant pourraient être présentes sur la ligne de visée.
- Le continuum des sources est-il en accord avec les observations ?
- Les raies ciblées sont-elles détectées ?
- Y a-t-il du chevauchement entre les raies ciblées et les raies de la bande image ? Des molécules pourraient dans ce cas être rajoutées aux modèles utilisés pour optimiser les fréquences de l'Oscillateur Local.

2.2 L'ANALYSE DES DONNÉES

2.2.1 L'analyse avec CASSIS

Le logiciel intéractif CASSIS a été utilisé tout au long de cette thèse pour l'analyse des spectres d'observation. Il a, en grande partie, servi à identifier les espèces moléculaires et à s'assurer que les transitions des molécules étudiées n'étaient pas contaminées par d'autres espèces. La meilleure stratégie pour identifier des raies dans de larges relevés spectraux est de rechercher la présence de molécules, espèce après espèce. Pour cela, CASSIS permet d'indiquer sur les spectres observés toutes les transitions potentielles d'une molécule contenue dans les bases de données spectroscopiques (cf Sect. 2.2.2). Quand les transitions (les plus probables) coïncident avec la présence de plusieurs raies du relevé spectral, on peut dire qu'il y a détection. Après avoir procédé ainsi pour les principales espèces présentes dans le milieu interstellaire, il ne devrait plus rester que quelques transitions encore non-identifiées sur le relevé complet. On peut alors afficher, dans une gamme de fréquence donnée, toutes les transitions possibles de toutes les espèces des bases de données spectroscopiques et voir quelles molécules pourraient être potentiellement présentes.

Au fur et à mesure de l'identification des raies, on peut avec CASSIS faire un ajustement gaussien des raies observées. L'ajustement gaussien se caractérise par 3 paramètres : I_o l'intensité au pic de la gaussienne (en K), v_o la vitesse du pic de la gaussienne (en $\mathrm{km\,s^{-1}}$) et $FWHM$ (Full Width at Half Maximum) la largeur à mi-hauteur de la gaussienne (en $\mathrm{km\,s^{-1}}$). La gaussienne s'exprime alors selon :

$$T(v) = I_o \exp(-\frac{(v - v_o)^2}{2\sigma^2}) \tag{2.15}$$

avec $\sigma = FWHM/(2\sqrt{2\ln(2)})$.

Ces différentes informations ainsi que l'aire intégrée des gaussiennes et le flux intégré des raies peuvent être sauvegardés dans un fichier propre à chaque molécule. Les paramètres de $FWHM$ et x_o sont utiles dans l'étude cinématique des raies, comme nous le verrons pour l'analyse du relevé spectral TIMASSS (cf Sect. 2.2.3). Quand la molécule a été identifiée sur un grand nombre de transitions, on peut, à partir des valeurs des flux intégrés sauvegardés,

réaliser des diagrammes rotationnels qui permettent de vérifier l'hypothèse d'équilibre thermodynamique local et, si tel est le cas, de déterminer la température d'excitation et la densité de colonne de la molécule étudiée. Cela sera détaillé par la suite en Section 2.3.2.

CASSIS permet aussi de modéliser l'émission (ou l'absorption) de molécules. Cela peut être réalisé avec un modèle simple à l'équilibre thermodynamique local. Il faut alors donner la température d'excitation, la densité de colonne de la molécule, la largeur à mi-hauteur et la taille de la source. Le modèle hors-ETL RADEX a aussi été implémenté dans CASSIS (cf Sect. 2.3.3.2). CASSIS sert donc également à la préparation des observations astrophysiques pour prédire par exemple l'intensité des raies mais aussi pour éviter le recouvrement de transitions de molécules entre la bande signal et la bande image. CASSIS a d'ailleurs été largement utilisé dans la préparation des AORs PRISMAS (cf Sect. 2.1.2).

2.2.2 Les bases de données spectroscopiques

Pour connaître les fréquences des nombreuses transitions des différentes espèces composant les spectres observés, il est nécessaire d'avoir accès à des bases de données spectroscopiques. Ces données sont obtenues à partir de mesures de laboratoires qui permettent alors de contraindre les paramètres spectroscopiques des molécules et ainsi de générer les prédictions de leur spectre. L'essentiel des molécules d'intérêt astrophysique et atmosphérique se trouvent dans ces deux bases : JPL [3] (*Jet Propulsion Laboratory* ; Pickett et al. 1998) et CDMS [4] (*The Cologne Database for Molecular Spectroscopy* ; Müller et al. 2001, 2005). La base de données NIST [5] (*National Institute of Standards and Technology*) est elle aussi implémentée dans CASSIS afin de fournir les prédictions spectroscopiques de nombreux atomes neutres ou ionisés. Pour chaque espèce, on peut alors trouver l'information nécessaire pour tout calcul de transfert radiatif (à l'équilibre thermodynamique local) telles que les fréquences des transitions du spectre de la molécule, les nombres quantiques associés, les poids statistiques, les coefficients d'Einstein ($A_{\rm ij}$), les énergies de niveau inférieur (E_{low}), etc. Deux mêmes molécules peuvent être présentes dans les deux bases de données, JPL et CDMS. Le choix peut alors se baser sur la date des études spectroscopiques ainsi que sur le nombre de raies prises en compte dans la détermination des paramètres spectroscopiques. Les espèces sont classées en fonction de leur poids moléculaire en unités de masse atomique. Le poids moléculaire constitue les trois premiers chiffres du *tag* (numéro personnel attribué à chaque molécule) qui est composé de 6 chiffres au total. Le quatrième chiffre indique la base de données : 0 pour le JPL et 5 pour le CDMS. Ces bases de données sont intégrées au logiciel CASSIS. La séparation de molécules présentant deux formes (par exemple ortho et para–H_2O, A et E–CH_3CCH) est elle aussi implémentée dans cet outil (base VASTEL : cinquième chiffre du *tag* désigné par les chiffres 8 et 9), permettant ainsi de réaliser une étude séparée des différentes formes d'une molécule et de déterminer le rapport entre ces formes (ortho/para ou A/E).

En juin 2008, dans le cadre d'un stage libre, j'ai eu l'occasion de réaliser des mesures spectroscopiques de la molécule de cyanure d'*iso*-propyl (en anglais *iso-propyl cyanide*, $(CH_3)_2CHCN$)

3. `http://spec.jpl.nasa.gov/`
4. `http://www.astro.uni-koeln.de/cdms/`
5. `http://www.nist.gov/pml/data/asd.cfm`

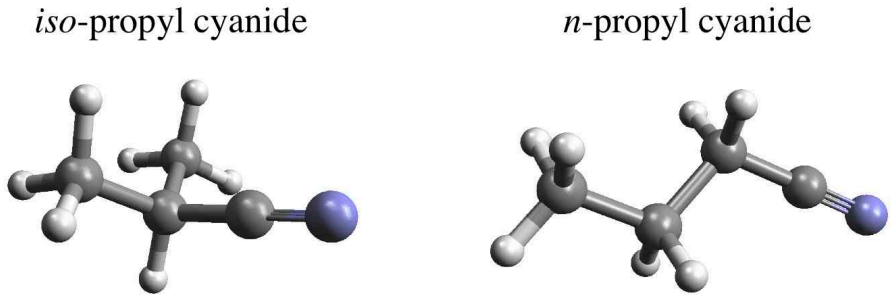


FIGURE 2.7 – Isomères du C_3H_7CN : le cyanure d'*iso*-propyl (à gauche) et le cyanure de *n*-propyl (à droite).

à l'Université de Cologne. Cette molécule représentée en Figure 2.7 présente un branchement, contrairement au cyanure de *n*-propyl (en anglais *n-propyl cyanide*, $CH_3CH_2CH_2CN$) qui est linéaire. La découverte de cette dernière dans le relevé spectral à 3 mm de la région de formation stellaire massive, Sgr B2(N) (Belloche et al. 2009) a alors suscité un intérêt pour son isomère, le cyanure d'*iso*-propyl. En effet, les rapports d'abondance entre isomères permettent de contraindre les mécanismes de formation des molécules, qu'ils aient lieu sur les grains ou en phase gazeuse. Le cyanure d'*iso*-propyl, ayant été peu étudié (quelques raies de fréquence inférieure à 40 GHz), a alors fait l'objet de nouvelles mesures spectroscopiques (entre 37 et 600 GHz) afin de déterminer précisément les fréquences de cette molécule. Sa recherche dans le relevé spectral réalisé à 3 mm avec l'IRAM par Belloche et al. (2007) n'est pas concluante, en raison du grande nombre de raies qui se chevauchent. L'interféromètre ALMA (*Atacama Large Millimeter Array*) permettrait sûrement de réduire la confusion provoquée par l'enchevêtrement des raies grâce à sa haute résolution spatiale et de déterminer le rapport d'abondances entre les deux isomères. Durant ce stage, j'ai pu avoir un aperçu du travail de spectroscopiste et me familiariser avec les logiciels de spectroscopie tels que SPFIT et SPCAT (Pickett 1991). L'article relatif à cette étude (Müller et al. 2011) a été publié durant ma thèse.

2.2.3 Analyse du relevé spectral TIMASSS

2.2.3.1 Le relevé spectral TIMASSS

Le relevé spectral TIMASSS (*The IRAS 16293 Millimeter and Submillimeter Spectral Survey* ; Caux et al. 2011) a été réalisé en direction de la proto-étoile IRAS 16293-2422 entre 2004 et 2007 avec le télescope de 30 m de l'IRAM et le JCMT. Il a été obtenu en environ 300 heures d'observation pour une couverture spectrale de ∼220 GHz. L'avantage de faire un relevé spectral non-biaisé est de pouvoir détecter de nouvelles espèces et de pouvoir observer plusieurs raies d'une même espèce grâce aux larges bandes spectrales couvertes. Les raies avec des énergies de niveau supérieur et des coefficients d'Einstein différents étant excitées à des températures et à des densités différentes, elles permettent donc de sonder des régions différentes. Une analyse méticuleuse peut alors permettre de distinguer plusieurs composantes physiques différentes dans le lobe. Grâce à l'information cinétique fournie par les profils de

raie, il est possible d'identifier des sous-structures, même si la résolution spatiale des observations n'est pas adéquate. L'essentiel des relevés spectraux effectués avant celui-ci portaient sur des régions de formation stellaire massive (voir la liste complète des relevés spectraux dans Herbst & van Dishoeck 2009). Parmi les proto-étoiles de type solaire, seule la proto-étoile IRAS 16293-2422 avait fait l'objet de ce type d'étude (Blake et al. 1994; van Dishoeck et al. 1995). La sensibilité obtenue (∼40 mK) a permis la détection de 265 raies de 24 espèces différentes. Mais le *rms* obtenu ne permettait cependant pas de détecter les molécules organiques complexes émises par cette source. Cette source est une cible idéale pour sa brillance et sa proximité (120 pc). Elle est composée de deux cœurs A et B séparés d'environ 5″. Le Chapitre 3 est dédié à l'étude de l'eau deutérée dans cette source. Je renvoie donc à la Section 3.1 pour une description plus détaillée de cette source. Trois bandes spectrales ont été observées avec l'IRAM : 3 mm (80–115.5 GHz), 2 mm (129–177.5 GHz) et 1 mm (198–281.5 GHz), tandis que la bande à 0.9 mm (328–366 GHz) a été observée avec le JCMT. Le *rms* atteint est en moyenne de ∼10 mK, ce qui en fait le relevé spectral le plus sensible jamais publié dans ces bandes en direction d'une proto-étoile de type solaire. Ce relevé est complémentaire du relevé spectral effectué avec l'instrument HIFI, pour lequel l'IRAP (PI : E. Caux) a le leadership, dans le cadre du programme CHESS (cf Sect. 1.3.3.1). Il sera, par ailleurs, bientôt complété entre 270 et 330 GHz par des mesures avec le télescope APEX.

Au final, 20 raies par GHz (soit ∼4000 raies au total) ont été détectées en moyenne avec un rapport signal/bruit supérieur à 3. La densité de raies est comparable à ce qui est vu pour les *hot cores*, à l'exception de SgrB2 qui peut atteindre jusqu'à 100 raies par GHz dans la bande à 3 mm (Belloche et al. 2007). Elle semble légèrement augmenter avec la fréquence : 17 raies/GHz à 3 mm, 19 à 2 mm, 23 à 1 mm et 26 à 0.9 mm. Pour quantifier plus rigoureusement les raies et les molécules détectées dans le relevé, j'ai participé à l'identification des nombreuses raies contenues dans les spectres et à leur ajustement par des Gaussiennes, en utilisant le logiciel CASSIS (cf Sect. 2.2.1). Quatre critères ont été définis pour considérer qu'une raie était détectée :

- Seules les raies appartenant à des espèces incluses dans les bases de données JPL et CDMS ainsi que les transitions des isotopologues deutérés du méthanol ont été recherchées.
- La raie doit être détectée avec une certitude de plus de 3σ par rapport à son intensité intégrée. L'incertitude sur le flux, σ, comprend l'incertitude due au *rms* ainsi que l'incertitude de calibration :

$$\sigma = \sqrt{\left((1+x)\ rms\ \sqrt{2\ dv\ FWHM}\right)^2 + (x\ Flux)^2}, \tag{2.16}$$

  dv étant la résolution spectrale et x l'incertitude de calibration.
- La raie ne peut pas être émise par une autre espèce ou être le mélange de deux espèces de manière relativement probable.
- Seules les raies avec une énergie de niveau supérieur $E_{\rm up}$ inférieur à 250 K sont recherchées. Cette condition affecte seulement les raies de méthanol (CH_3OH), puisque les raies d'autres molécules avec $E_{up} > 250$ K sont trop faibles pour être détectées dans ce relevé.

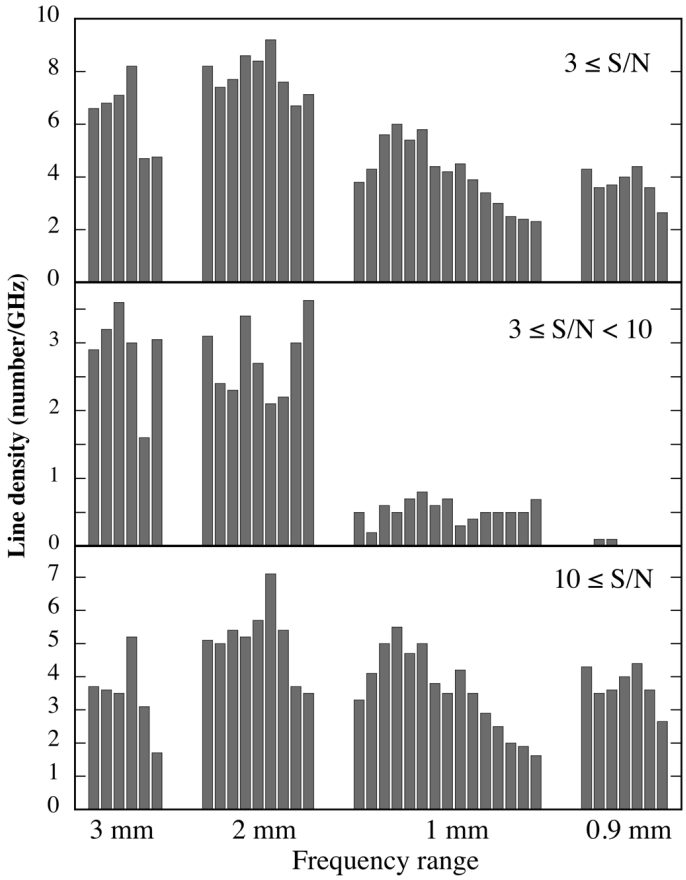


FIGURE 2.8 – Distribution de la densité (moyennée sur des intervalles de 10 GHz) des raies identifiées dans chacune des 4 bandes spectrales. Le graphe supérieur correspond aux raies avec un rapport signal sur bruit S/N > 3, le graphe central aux raies avec $3 \leq S/N < 10$ et le graphe inférieur aux raies avec $S/N \geq 10$. Figure extraite de Caux et al. (2011).

Selon ces critères, ∼1000 raies ont été identifiées. La Figure 2.8 montre les densités de raies remplissant les critères précédents dans chacune des bandes spectrales observées, pour différents rapports signal sur bruit (S/N). A 2 et 3 mm, ces densités sont un facteur entre 2 et 3 inférieur aux estimations des densités totales incluant notamment les raies dont l'émission est mélangée. Cet effet est même plus important à 1 et 0.9 mm, où le manque de raies faibles ($3 \leq S/N < 10$) est particulièrement frappant (cf Fig. 2.8). Cela provient d'un biais dans notre critère de sélection de raies non-mélangées. A ces fréquences, la résolution spectrale est relativement pauvre et les spectres sont très riches en molécules complexes, qui émettent des raies d'intensité assez faibles. Le critère de raie non-mélangée élimine donc une large fraction de ces raies de faible rapport S/N. La bande à 2 mm, qui bénéficie d'une meilleure résolution spectrale comparée aux bandes à 1 et 3 mm, est moins affectée par cet effet de sélection.

En se basant sur les quatre critères définis ci-dessus, 69 molécules, dont 32 espèces dis-

tinctes et 37 isotopologues rares, ont été détectées dans le relevé. Le nombre important de molécules deutérées détectées, parmi ces isotopes rares, confirme, par ailleurs, que la source IRAS 16293-2422 se démarque des *hot cores* par son abondance élevée en espèces deutérées. Sur les 1000 raies détectées, à peu près la moitié appartiennent aux trois espèces complexes : CH_3OH, CH_3CHO et $HCOOCH_3$. Le relevé est dominé, en terme de flux total, par les molécules simples riches en oxygène telles que CO, SO, H_2CO, SO_2 et CH_3OH, ce qui était déjà noté dans les études de Blake et al. (1994) et van Dishoeck et al. (1995).

2.2.3.2 Analyse de la cinématique des raies dans la proto-étoile IRAS 16293-2422

Un ajustement gaussien a été effectué, avec le logiciel CASSIS, sur chacune des raies qui respectait la liste des quatre critères définis précédemment. Ce travail (plus que fastidieux) a néanmoins permis de réaliser une analyse cinématique inattendue basée sur les largeurs à mi-hauteur $FWHM$ et les vitesses v_{LSR} au pic des Gaussiennes ajustées. En effet, la Figure 2.9 montre que la distribution de la $FWHM$ en fonction de la v_{LSR} varie selon la molécule. On notera que les incertitudes sur les $FWHM$ et les v_{LSR} prennent en compte les erreurs statistiques (sur l'ajustement) et l'incertitude due à la résolution spectrale limitée (qui en fait domine). Quatre types de comportements cinématiques ont pu être reportés :

- Type I : La vitesse moyenne $\langle v_{LSR} \rangle$ est d'environ 4 $\mathrm{km\,s^{-1}}$ et la largeur à mi-hauteur moyenne $\langle FWHM \rangle$ d'environ 2.5 $\mathrm{km\,s^{-1}}$. Les raies montrent peu de dispersion en terme de vitesse et de largeur de raie. Les petits hydrocarbures et les "petites molécules" comme CN, NO et C_2S appartiennent à ce groupe.
- Type II : $\langle v_{LSR} \rangle \sim 3.7$ $\mathrm{km\,s^{-1}}$ avec très peu de dispersion et $\langle FWHM \rangle$ entre 2 et 8 $\mathrm{km\,s^{-1}}$. Toutes les espèces de ce groupe sont des molécules soufrées et azotées. On notera que HCO^+ et C_3H_2 ont des propriétés entre les types I et II.
- Type III : $\langle v_{LSR} \rangle \sim$ 2.5-3.0 $\mathrm{km\,s^{-1}}$ et $\langle FWHM \rangle \leq 4.0$ $\mathrm{km\,s^{-1}}$. Quatre molécules organiques complexes (CH_3CHO, $HCOOCH_3$, CH_3OCH_3, H_2CCO) montrent ce comportement.
- Type IV : $\langle v_{LSR} \rangle$ et $\langle FWHM \rangle$ ont des comportements variés avec des caractéristiques appartenant aux deux derniers groupes. Les raies de CH_3OH ont des v_{LSR} entre 2 et 4 $\mathrm{km\,s^{-1}}$ et des $FWHM$ entre 2 et 9 $\mathrm{km\,s^{-1}}$. H_2CO et CH_3CCH montrent des $FWHM$ modérées ($\leq$ 4–5 $\mathrm{km\,s^{-1}}$) et des v_{LSR} entre 2.5 et 4 $\mathrm{km\,s^{-1}}$. Les raies des isotopes de OCS ont des $v_{LSR} \sim 2.5$ $\mathrm{km\,s^{-1}}$ et des $FWHM \leq 4$ $\mathrm{km\,s^{-1}}$.

Pour mieux comprendre la signification physique de ces catégories, la Figure 2.10 montre les $FWHM$ en fonction de l'énergie E_{up} des transitions des différentes espèces. Ici aussi, un comportement différent est observé pour chaque type de molécules. Les molécules de type I ont des raies avec des E_{up} inférieurs à 50 K. Au contraire, les espèces de type II, III et IV ont des raies avec des E_{up} jusqu'à 200 K. Pour le type II, la $FWHM$ augmente avec le E_{up}, alors que pour les groupes III et IV, elle reste constante et ne dépend pas du E_{up}. Des graphes similaires de v_{LSR} en fonction du E_{up} n'indiquent cependant pas de relation entre ces deux paramètres.

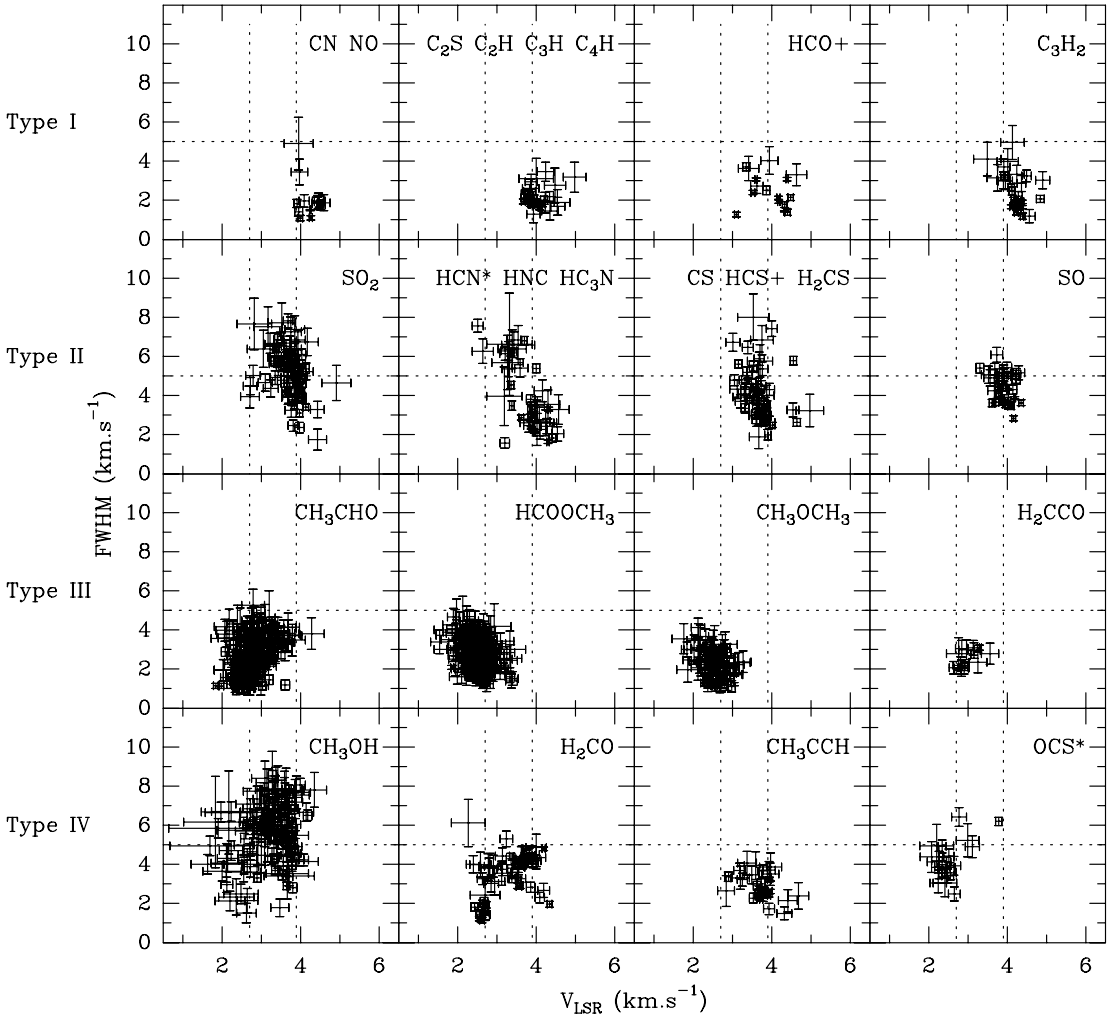


FIGURE 2.9 – Graphes des largeurs à mi-hauteur $FWHM$ en fonction des vitesses au repos v_{LSR} déduits des ajustements gaussiens des raies. Les notations HCN* et OCS* indiquent que les isotopes principaux de ces espèces n'ont pas été inclus à cause de leur profils non-gaussiens. Les barres d'incertitude à 1σ incluent à la fois les incertitudes d'ajustement et de résolution spectrale. Les traits verticaux à $v_{LSR} = 2.7$ et 3.9 km s^{-1} correspondent aux vitesses des cœurs B et A respectivement. Le trait horizontal à 5 km s^{-1} correspond approximativement à la moyenne des $FWHM$. Figure extraite de Caux et al. (2011).

En se basant sur des publications de données interférométriques de cette source (Kuan et al. 2004; Bottinelli et al. 2004b; Schöier et al. 2004; Chandler et al. 2005; Huang et al. 2005; Remijan & Hollis 2006; Takakuwa et al. 2007; Bisschop et al. 2008), nous avons comparé l'émission des molécules avec les quatre types d'espèces observés ci-dessus. Prenons par exemple CN : il présente des caractéristiques cinématiques de type I et a seulement été observé dans l'enveloppe d'IRAS 16293-2422. Aucune émission de CN n'est vue dans les *hot corinos* des sources A et B. Au contraire, CH_3CHO, qui est du type III, a seulement été détecté

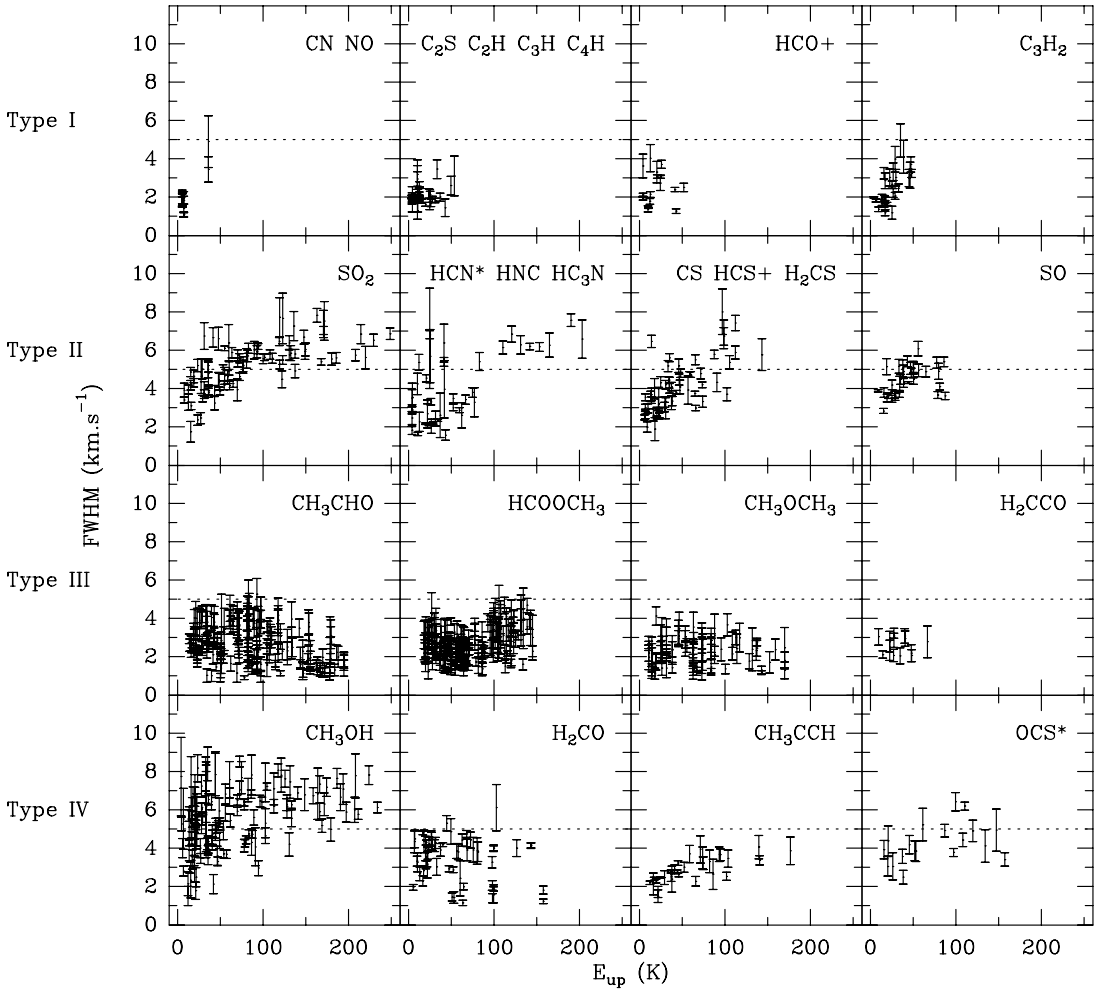


FIGURE 2.10 – Graphes des largeurs à mi-hauteur $FWHM$ en fonction des énergies de niveau supérieur $E_{\rm up}$ des différentes transitions. Les notations HCN* et OCS* indiquent que les isotopes principaux de ces espèces n'ont pas été inclus à cause de leur profils non-gaussiens. Les barres d'incertitude à 1σ incluent à la fois les incertitudes d'ajustement et de résolution spectrale. Le trait horizontal à 5 km s^{-1} correspond approximativement à la moyenne des $FWHM$. Figure extraite de Caux et al. (2011).

dans le cœur de B. La correspondance entre les quatre types de molécules et les différentes observations interférométriques suggèrent que les types cinématiques sont associés avec une origine spatiale différente : enveloppe froide, source A et/ou source B. Le type I serait en fait associé à l'enveloppe froide de la proto-étoile (de vitesse 3.9 km s^{-1}), ce qui expliquerait les basses énergies $E_{\rm up}$ des transitions de ces molécules. Le type II semblerait associer de manière dominante avec le cœur A (de vitesse 3.9 km s^{-1}), alors que le type III contiendrait plutôt celles émises par le cœur B (de vitesse 2.7 km s^{-1}). Enfin le type IV désignerait les molécules émises à la fois par les sources A et B et peut-être aussi par l'enveloppe. Cette séparation permet de mieux comprendre la nature des deux *hot corinos*. Comme déjà remarqué dans

plusieurs études, la source B semble plus riche en molécules organiques complexes, alors que la source A est plus riche en molécules à base de soufre et d'azote. Les $FWHM$ sont aussi plus larges dans la source A que la source B. Cette analyse a néanmoins permis de montrer que, d'une part, les deux sources ont des vitesses différentes. D'autre part, les $FWHM$ des raies augmentent avec leur énergie de niveau supérieur $E_{\rm up}$ dans la source A alors qu'elles restent constantes et peu élevées dans la source B. Une comparaison avec le relevé spectral effectué récemment avec l'interféromètre du SMA (*SubMillimeter Array*, Hawaii) par Jørgensen et al. (2011) est actuellement en cours pour valider cette analyse.

Pour finir, on peut, à partir de cette étude, étudier plus précisément la dynamique des sources A et B. L'augmentation de la $FWHM$ avec l'énergie de niveau supérieur $E_{\rm up}$ peut mener à deux hypothèses :

- soit le gaz est en effondrement autour de l'objet proto-stellaire (Ceccarelli et al. 2003),
- soit des intéractions vent/jet avec l'enveloppe dense interne créent des chocs (Schöier et al. 2002; Jørgensen et al. 2002).

Si l'on suppose que l'enveloppe est en effondrement, on peut alors estimer la masse centrale des deux sources A et B. En effet, dans le cas d'une émission optiquement mince, la vitesse de chute libre peut être estimée à partir de la largeur de raie selon :

$$M(M_\odot) = 1.4 \times 10^{-4} (FWHM^2 - \delta_{th}^2)\ r(\mathrm{AU}) \tag{2.17}$$

avec $FWHM$ la largeur à mi-hauteur en $\mathrm{km\,s^{-1}}$ et δ_{th} l'élargissement turbulent en $\mathrm{km\,s^{-1}}$. On peut alors estimer l'élargissement δ_{th} à environ 2 $\mathrm{km\,s^{-1}}$, à partir des largeurs de raie des molécules de type I qui tracent l'enveloppe froide (pratiquement statique). D'après les observations interférométriques des espèces de type II et III, les deux sources montrent un rayon de $\sim$1.5″, soit 180 AU à une distance de 120 pc. Pour le cœur A, les $FWHM$ typiques sont plus larges que $\sim$6 $\mathrm{km\,s^{-1}}$, ce qui conduit à une masse centrale d'au moins 0.8 $M_\odot$ alors que, pour le cœur B où la $FWHM$ est inférieure à $\sim$3 $\mathrm{km\,s^{-1}}$, la masse centrale ne peut excéder 0.1 $M_\odot$. La différence de v_{LSR} des deux sources peut, quant à elle, être interprétée comme le fait que la source B serait en rotation autour de A. En effet, pour une masse centrale de 0.8 $M_\odot$ pour le cœur A et une distance d'environ 500 AU ($\sim$4-5″) entre les deux sources, la vitesse de rotation de B serait de 1.2 $\mathrm{km\,s^{-1}}$, ce qui est totalement compatible avec la différence de vitesse entre les cœurs A et B ($v_{LSR} \sim 3.9$ et 2.7 $\mathrm{km\,s^{-1}}$ respectivement).

2.3 LES MODÈLES DE TRANSFERT RADIATIF

2.3.1 Transfert radiatif

2.3.1.1 Equation de transfert radiatif

Considérons le cas d'un nuage d'épaisseur L (cf Fig. 2.11). La propagation des photons le long d'une ligne de visée est décrite par l'équation de transfert radiatif :

$$\boxed{\frac{dI_\nu}{ds} = -\alpha_\nu I_\nu + j_\nu} \tag{2.18}$$

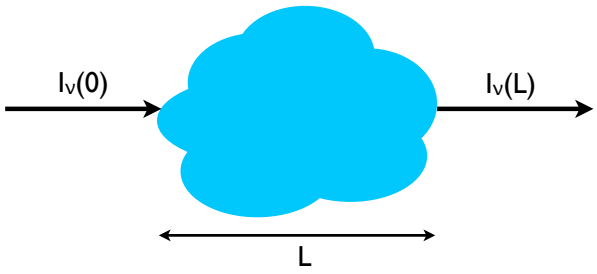


Figure 2.11 – Propagation de photons à travers un nuage. L'intensité $I_\nu(0)$ est modifiée par la traversée du nuage et perçue comme $I_\nu(L)$ à la sortie du nuage.

où I_ν est l'intensité spécifique à la fréquence ν, j_ν le coefficient émissif, α_ν le coefficient d'absorption et ds la variation sur la ligne de visée qui entraîne une variation dI_ν de I_ν. En divisant l'équation 2.18 par α_ν, on peut réécrire l'équation de transfert radiatif sous la forme :

$$\frac{dI_\nu}{d\tau_\nu} = -I_\nu + S_\nu \tag{2.19}$$

où τ_ν est l'épaisseur optique définie par $d\tau_\nu \equiv \alpha_\nu ds$ et S_ν la fonction source définie par $S_\nu \equiv j_\nu/\alpha_\nu$. Le coefficient émissif j_ν s'exprime par :

$$j_\nu = \frac{h\nu}{4\pi} n_u A_{ul} \phi(\nu) \tag{2.20}$$

et le coefficient d'absorption α_ν par :

$$\alpha_\nu = \frac{h\nu}{c}(n_l B_{lu} - n_u B_{ul})\phi(\nu). \tag{2.21}$$

A_{ul} est le coefficient d'Einstein d'émission spontanée, B_{ul} le coefficient d'émission stimulée et B_{lu} le coefficient d'absorption d'Einstein entre 2 niveaux u et l de densité n_u et n_l présentant une différence d'énergie $E_{ul} = h\nu$. Les coefficients d'Einstein sont reliés par les relations :

$$A_{ul} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} B_{ul} \tag{2.22}$$

et

$$g_u B_{ul} = g_l B_{lu} \tag{2.23}$$

où g_u et g_l sont les poids statistiques des niveaux u et l (pour une molécule linéaire, $g = 2J+1$). $\phi(\nu)$ est le profil normalisé de la raie. Dans le cas d'une agitation thermique, ce profil est gaussien :

$$\phi(\nu) = 2\left(\frac{\ln(2)}{\pi}\right)^{1/2} \frac{1}{\Delta\nu} \exp\left(-4\ln(2)\frac{(\nu-\nu 0)^2}{\Delta\nu^2}\right). \tag{2.24}$$

Si la fonction source S_ν est constante, l'équation 2.19 s'intègre facilement pour donner :

$$I_\nu(\tau_\nu) = I_\nu(0)\exp(-\tau_\nu) + S_\nu(1 - \exp(-\tau_\nu)). \tag{2.25}$$

$I_\nu(0)$ représente l'émission du fond diffus cosmologique. L'intensité émise par le fond diffus cosmologique est contenue dans I_ν. Pour déterminer l'intensité provenant uniquement de la source, on calcule :

$$I_{\nu\text{obs}}(\tau_\nu) = I_\nu(\tau_\nu) - I_\nu(0) = (S_\nu - I_\nu(0))(1 - \exp(-\tau_\nu)). \tag{2.26}$$

En remplaçant S_ν et $I_\nu(0)$ par la loi de Planck à la température du milieu T_{ex} (hypothèse d'équilibre thermodynamique local) et à la température du fond diffus cosmologique, $T_{cmb} = 2.7$ K, respectivement, on aboutit à :

$$I_{\nu\text{obs}}(\tau_\nu) = \frac{2h\nu^3}{c^2}\left(\frac{1}{\exp(h\nu/kT_{ex}) - 1} - \frac{1}{\exp(h\nu/kT_{cmb}) - 1}\right)(1 - \exp(-\tau_\nu)). \tag{2.27}$$

La température de brillance T_b, utilisée en radioastronomie pour caractériser l'intensité d'un rayonnement, se définit comme la température de la loi de Planck dans la limite de Rayleigh-Jeans ($h\nu \ll kT$). On en déduit donc que :

$$T_b = \frac{h\nu}{k}\left(\frac{1}{\exp(h\nu/kT_{ex}) - 1} - \frac{1}{\exp(h\nu/kT_{cmb}) - 1}\right)(1 - \exp(-\tau_\nu)). \tag{2.28}$$

Pour simplifier l'équation, on définit :

$$J_\nu(T) = \frac{h\nu}{k}\frac{1}{\exp(h\nu/kT) - 1}. \tag{2.29}$$

L'équation 2.28 devient :

$$T_b = (J_\nu(T_{ex}) - J_\nu(T_{cmb}))(1 - \exp(-\tau_\nu)). \tag{2.30}$$

Continuum et raies en absorption/émission :

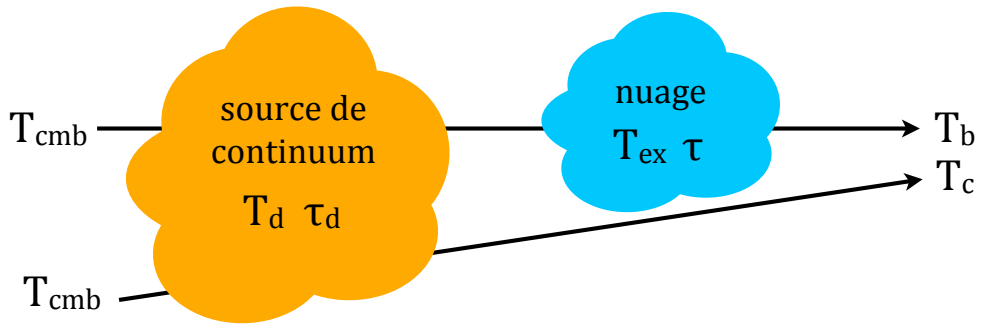


FIGURE 2.12 – Propagation de photons à travers un nuage couplé à une source de continuum située en arrière-plan. La température de brillance mesurée sur la ligne de visée du nuage est appelée T_b, tandis que la température de brillance du continuum est appelée T_c.

Considérons maintenant le cas d'une source de continuum située à l'arrière plan d'un nuage (cf Fig. 2.12). Le nuage se caractérise par une température d'excitation T_{ex} et une opacité τ

tandis que la source de continuum est définie par une température T_d et une opacité τ_d. La température de brillance en direction du nuage s'exprime alors comme :

$$T_b = J_\nu(T_{cmb})\exp(-\tau_d)\exp(-\tau) + J_\nu(T_d)(1-\exp(-\tau_d))\exp(-\tau) + J_\nu(T_{ex})(1-\exp(-\tau)) - J_\nu(T_{cmb}) \quad (2.31)$$

Hors du nuage mais en direction de la source du continuum, la température de brillance du continuum vaut :

$$T_c = J_\nu(T_{cmb})\exp(-\tau_d) + J_\nu(T_d)(1-\exp(-\tau_d)) - J_\nu(T_{cmb}) \quad (2.32)$$

En combinant les équations 2.31 et 2.32, on peut montrer que :

$$T_b = T_c\exp(-\tau) + (1-\exp(-\tau))(J_\nu(T_{ex}) - J_\nu(T_{cmb})) \quad (2.33)$$

L'intensité d'une raie en émission s'exprime alors comme :

$$T_b - T_c = \Delta T = (1-\exp(-\tau))(J_\nu(T_{ex}) - J_\nu(T_{cmb}) - T_c), \quad (2.34)$$

tandis que la profondeur d'une raie en absorption est définie comme :

$$T_c - T_b = T_{abs} = (1-\exp(-\tau))(T_c - J_\nu(T_{ex}) + J_\nu(T_{cmb})). \quad (2.35)$$

Dans le cas de l'absorption, l'expression $J_\nu(T_{ex}) - J_\nu(T_{cmb})$ est généralement négligeable devant T_c. L'équation 2.35 devient :

$$T_c - T_b = T_{abs} = (1-\exp(-\tau))\ T_c, \quad (2.36)$$

L'opacité peut donc être facilement déterminée en utilisant les valeurs observées du continuum et de la profondeur de la raie :

$$\tau = -\ln\left(1 - \frac{T_{abs}}{T_c}\right). \quad (2.37)$$

C'est pour cette raison que, dans le cadre de l'étude de raies en absorption, la valeur du continuum est nécessaire. Pour les raies en émission, le continuum n'affecte que très peu l'intensité de la raie. On peut donc travailler avec des spectres sur lesquels le continuum est soustrait.

2.3.1.2 Equation d'équilibre statistique

Dans le cas d'un système à 2 niveaux u et l, à l'état stationnaire, le rayonnement détermine les niveaux de population via l'équation d'équilibre statistique :

$$n_u(A_{ul} + B_{ul}U_\nu) = n_l B_{lu} U_\nu \quad (2.38)$$

où U_ν est la densité d'énergie :

$$U_\nu \equiv \frac{4\pi}{c} J_\nu \quad (2.39)$$

et J_ν l'intensité moyenne locale du champ de rayonnement :

$$J_\nu \equiv \frac{1}{4\pi}\int I_\nu d\Omega. \quad (2.40)$$

En considérant les collisions en plus du rayonnement, l'équation d'équilibre statistique devient :

$$\boxed{n_u(A_{ul} + B_{ul}U_\nu + C_{ul}) = n_l(B_{lu}U_\nu + C_{lu}),} \tag{2.41}$$

C_{ul} étant le coefficient de collision de désexcitation et C_{lu} le coefficient de collision d'excitation. La Figure 2.13 illustre les différentes contributions du rayonnement et des collisions pour le transfert de population entre deux niveaux.

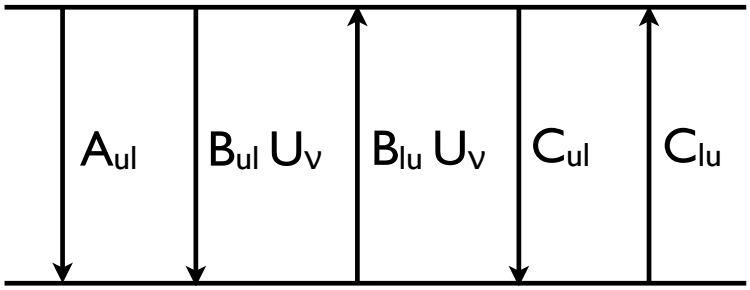


FIGURE 2.13 – Equilibre statistique entre deux niveaux de population.

Si on étend cette équation à plusieurs niveaux, on obtient donc :

$$n_l \left[\sum_{k<l} A_{lk} + \sum_{k\neq l}(B_{lk}U_\nu + C_{lk})\right] = \sum_{k>l} n_k A_{kl} + \sum_{k\neq l} n_k(B_{kl}U_\nu + C_{kl}). \tag{2.42}$$

sachant que

$$\sum_l n_l = n_{tot}. \tag{2.43}$$

L'équation d'équilibre statistique dépendant de l'intensité du rayonnement par l'intermédiaire de U_ν et l'équation de transfert radiatif de la population des niveaux, les deux équations sont couplées. Il faut avoir recours de manière générale à des résolutions numériques pour pouvoir résoudre le problème.

2.3.1.3 Equilibre thermodynamique local (ETL)

La densité critique est définie comme la densité moléculaire telle que :

$$n_{cr} = \frac{\sum_{k>l} A_{kl}}{\sum_{k\neq l} C_{kl}}. \tag{2.44}$$

Lorsque la densité est très grande devant la densité critique, les molécules sont dites à **l'équilibre thermodynamique local** (ETL). Cela signifie que les collisions dominent, c'est le cas quand la densité des collisionneurs est très grande ou que la température est suffisamment élevée pour augmenter l'agitation et donc les collisions. Les termes radiatifs deviennent donc négligeables devant les collisions, ce qui donne à partir de l'équation 2.41 :

$$n_u C_{ul} = n_l C_{lu}. \tag{2.45}$$

Les coefficients de collision C_{ul} et C_{lu} sont reliés par la relation :

$$g_u C_{ul} = g_l C_{lu} \exp(E_{ul}/kT_k), \tag{2.46}$$

où k est la constante de Boltzmann et T_k la température cinétique du milieu. On arrive donc à l'équation :

$$\frac{n_u}{n_l} = \frac{g_u}{g_l} \exp(-E_{ul}/kT_k). \tag{2.47}$$

Sachant que la température d'excitation T_{ex} est définie comme la température pour laquelle les populations des niveaux suivent une loi de Boltzmann :

$$\frac{n_u}{n_l} = \frac{g_u}{g_l} \exp(-E_{ul}/kT_{ex}), \tag{2.48}$$

la température d'excitation et la température cinétique sont donc égales à l'ETL. Le milieu est dit "thermalisé".

2.3.2 Modélisation ETL : les diagrammes rotationnels

Définissons pour commencer la densité de colonne comme :

$$N_i = \int_0^L n_i ds \tag{2.49}$$

et la fonction de partition comme :

$$Q(T) = \sum_i g_i \exp\left(\frac{-E_i}{kT_{ex}}\right). \tag{2.50}$$

Un diagramme rotationnel est une représentation graphique de la densité de colonne pour un niveau d'énergie E_u donné divisée par la dégénérescence (ou poids statistique) de ce niveau, N_u/g_u en fonction de l'énergie de ce niveau par rapport à l'énergie du niveau fondamental (Goldsmith & Langer 1999). Il permet de savoir si les populations des niveaux d'énergie sont décrites par le modèle à l'ETL et si l'émission est optiquement mince ou pas. En effet, si l'on part du fait que, à l'ETL, les populations des niveaux suivent la loi de Boltzmann, on a donc :

$$\frac{N_u}{g_u} = \frac{N_l}{g_l} \exp\left(\frac{-(E_i - E_l)}{kT_{ex}}\right). \tag{2.51}$$

La densité de colonne totale N_{tot} correspondant à la somme des densités de colonnes des différents niveaux, on peut donc écrire :

$$N_{tot} = \sum_i N_i = \sum_i \frac{N_0}{g_0}\, g_i \exp\left(\frac{-(E_i - E_0)}{kT_{ex}}\right) = \frac{N_0}{g_0}\, Q(T_{ex}), \tag{2.52}$$

en supposant $E_0 = 0$. D'où

$$\frac{N_u}{g_u} = \frac{N_0}{g_0} \exp\left(\frac{-E_u}{kT_{ex}}\right) = \frac{N_{tot}}{Q(T_{ex})} \exp\left(\frac{-E_u}{kT_{ex}}\right). \tag{2.53}$$

Puis,

$$\ln\left(\frac{N_u}{g_u}\right) = \ln\left(\frac{N_{tot}}{Q(T_{ex})}\right) - \frac{E_u}{kT_{ex}}. \tag{2.54}$$

Tracer $\ln(N_u/g_u)$ en fonction de E_u/k permet donc d'obtenir, si les populations des niveaux suivent une loi de Boltzmann, une droite de pente $-1/T_{ex}$ avec une ordonnée à l'origine $\ln(N_{tot}/Q(T_{ex}))$. On pourra donc en déduire la température d'excitation et la densité de colonne totale de la molécule étudiée, puisque la fonction de partition est donnée par les bases de spectroscopie. Avant toute chose, il faut néanmoins connaître N_u.

En intégrant l'opacité de la raie $\tau_\nu = \int \alpha_\nu ds$ sur dv et sachant que $dv = cd\nu/\nu$, on obtient :

$$\tau = \int_0^L \int \frac{h\nu}{c}(n_l B_{lu} - n_u B_{ul})\phi(\nu)\frac{cd\nu}{\nu}ds \tag{2.55}$$

$\phi(\nu)$ étant normalisé, on aura : $\int \phi(\nu)d\nu = 1$. Donc

$$\tau = \int_0^L h(n_l B_{lu} - n_u B_{ul})ds \tag{2.56}$$

En utilisant les relations 2.22 et 2.23 liant les coefficients d'Einstein entre eux ainsi que la définition de température d'excitation (équation 2.48), on arrive à :

$$\tau = \int_0^L h(n_l \frac{g_u}{g_l} - n_u)B_{ul}ds = \int_0^L hn_u(\exp\left(\frac{h\nu}{kT_{ex}}\right) - 1)\frac{A_{ul}c^3}{8\pi h\nu^3}ds \tag{2.57}$$

D'après la définition de densité de colonne (équation 2.49), l'équation devient :

$$\tau = hN_u(\exp\left(\frac{h\nu}{kT_{ex}}\right) - 1)\frac{A_{ul}c^3}{8\pi h\nu^3} \tag{2.58}$$

D'autre part, on peut aussi intégrer τ_ν en lui supposant une forme gaussienne :

$$\tau_\nu = \tau_0 \exp\left(\frac{(v - v_0)^2}{2\sigma_v^2}\right). \tag{2.59}$$

On obtient alors :

$$\tau = \tau_0 \int \exp\left(\frac{(v - v_0)^2}{2\sigma_v^2}\right)dv = \tau_0\sqrt{2\pi}\sigma_v = \tau_0\frac{\sqrt{\pi}\Delta v}{2\sqrt{\ln(2)}}. \tag{2.60}$$

En égalisant les équations 2.58 et 2.60, on obtient :

$$\tau_0 = \frac{N_u A_{ul}c^3}{8\pi\nu^3\frac{\Delta v\sqrt{\pi}}{2\sqrt{\ln(2)}}}(\exp\left(\frac{h\nu}{kT_{ex}}\right) - 1). \tag{2.61}$$

D'après l'équation 2.28, et en négligeant le rayonnement du fond diffus cosmologique ($h\nu/k \gg$ 2.7 K), on arrive à :

$$T_b = \frac{h\nu}{k}\frac{1}{\exp(\frac{h\nu}{kT_{ex}}) - 1}\frac{1 - \exp(-\tau_0)}{\tau_0}\tau_0. \tag{2.62}$$

En combinant les équations 2.61 et 2.62, on obtient :

$$W = \int T_b dv = \frac{h\nu}{k}\frac{N_u A_{ul}c^3}{8\pi\nu^3}\frac{1 - \exp(-\tau_0)}{\tau_0}. \tag{2.63}$$

Par conséquent,

$$N_u = W \frac{8\pi k \nu^2}{h A_{ul} c^3} C_\tau. \tag{2.64}$$

où W est le flux intégré de la raie et $C_\tau \equiv \frac{\tau_0}{1-\exp(-\tau_0)}$ le facteur de correction de l'opacité. Si la raie est optiquement mince ($\tau \ll 1$), alors C_τ=1 et N_u est facilement estimable. L'équation 2.54 devient de manière générale :

$$\ln\left(W \frac{8\pi k \nu^2}{h A_{ul} c^3 g_u}\right) = \ln\left(\frac{N_{tot}}{Q(T_{ex})}\right) - \ln(C_\tau) - \frac{E_u}{k T_{ex}}. \tag{2.65}$$

Sous l'hypothèse d'ETL, mais dans le cas où l'émission de la raie est optiquement épaisse, chaque densité de colonne N_u sera sous-estimée d'un facteur C_τ, différent pour chaque transition. Le fait de ne pas obtenir une droite à pente unique signifie donc que :

- soit la molécule n'est pas à l'ETL,
- soit les raies considérées ne sont pas optiquement minces,
- soit la molécule est émise dans différentes composantes de la source à des températures différentes.

2.3.3 Modélisation hors-ETL

2.3.3.1 La méthode d'*escape probability*

Le problème, quand on n'est pas à l'équilibre thermodynamique local, est de découpler les calculs de transfert radiatif des calculs des populations des niveaux. Une approche populaire est d'utiliser la méthode d'*escape probability* (probabilité d'échappement), introduit pour la première fois par Sobolev (1960) pour des enveloppes en expansion. L'idée est de supposer un facteur β exprimant la probabilité qu'a un photon, à une position donnée dans le nuage, de pouvoir s'échapper du système. L'intensité à l'intérieur du nuage devient alors : $J_\nu = S_\nu(1-\beta)$ où S_ν est la fonction source. En remplaçant J_ν par cette expression et en utilisant la définition de S_ν, l'équation 2.41 devient alors :

$$n_l C_{lu} - n_u C_{ul} - \beta n_u A_{ul} = 0 \tag{2.66}$$

Cette méthode simplifie donc considérablement les calculs. Le terme J_ν n'apparaît plus dans l'équation des populations des niveaux. Mais la solution est uniquement locale.

Il est maintenant nécessaire d'estimer la probabilité d'échappement β. Ce terme est supposé dépendre de la géométrie de la source et de la profondeur optique, mais pas du champ de rayonnement. Plusieurs formes ont été proposées pour différents types de géométrie :

- une sphère en expansion :

$$\beta = \frac{1 - \exp(-\tau)}{\tau} \tag{2.67}$$

- un plan parallèle homogène :

$$\beta = \frac{1 - \exp(-3\tau)}{3\tau} \tag{2.68}$$

- un milieu turbulent :

$$\beta = \frac{1}{\tau\sqrt{\pi \ln(\tau/2)}} \tag{2.69}$$

- une sphère uniforme (déterminé par Osterbrock 1974) :

$$\beta = \frac{1.5}{\tau}\left(1 - \frac{2}{\tau^2} + (\frac{2}{\tau} + \frac{2}{\tau^2})\exp(-\tau)\right) \tag{2.70}$$

2.3.3.2 Le modèle RADEX

Le modèle RADEX [6] (van der Tak et al. 2007), implémenté dans CASSIS, est un code de transfert radiatif hors-ETL qui permet de calculer les intensités de raies moléculaires et atomiques produites dans un milieu uniforme. Il est basé sur les calculs d'équilibre statistique impliquant les processus radiatifs et collisionnels et inclut également le rayonnement de sources d'arrière-plan. Les effets d'opacité sont traités avec une méthode d'*escape probability* (cf Sect. 2.3.3.1). Ce code n'est valable que pour des raies optiquement minces ou peu épaisses, le profil de raie obtenu en sortie étant supposé gaussien. Ce modèle étant hors-ETL, il faut donc que des coefficients de collision soient disponibles pour la molécule étudiée. La base LAMDA [7] (Schöier et al. 2005) recense les coefficients de collision disponibles pour les molécules du milieu interstellaire et les présentent sous le format directement utilisables par les modèles de transfert radiatif RADEX et RATRAN (cf Sect. 2.3.3.3). Les paramètres d'entrée décrivant le milieu sont sa densité, sa température et la température de l'arrière-plan. Il faut également définir la largeur à mi-hauteur et la densité de colonne de la molécule étudiée ainsi que la gamme spectrale sur laquelle se situent les raies qui intéressent l'utilisateur. Le code indique alors, pour chaque transition située dans la gamme spectrale voulue, la température d'excitation T_{ex}, la profondeur optique τ au centre de la raie spectrale et la température de rayonnement T_R de la raie. Cette dernière est égale à la température $T_{\rm mb}$ si la source remplit totalement le lobe du télescope.

2.3.3.3 Le modèle sphérique RATRAN

Le modèle RATRAN [8] (Hogerheijde & van der Tak 2000) est un code Monte-Carlo de transfert radiatif sphérique qui se place du point de vue de cellules plutôt que de photons, afin de séparer les contributions locales et externes du champ de rayonnement. Comme pour RADEX, il faut disposer de coefficients de collision afin d'utiliser ce modèle hors-ETL. Un des grands avantages de ce code vient du fait qu'il prend en compte la structure 1D de la source, ce qui est nécessaire pour étudier la chimie des proto-étoiles qui montrent des gradients de densité, de température et de vitesse en fonction du rayon. Il faut donc définir les conditions qui règnent dans chaque couche de l'enveloppe sphérique, à savoir :

- la densité de H_2 (en cm^{-3}) : il faut donner la densité de ortho et para–H_2 séparément si les coefficients de collision sont calculés avec ortho et para–H_2,
- la température du gaz (en K),

6. `http://www.sron.rug.nl/~vdtak/radex/`
7. `http://home.strw.leidenuniv.nl/~moldata/`
8. `http://www.sron.rug.nl/~vdtak/ratran/`

- la température de la poussière (en K),
- la vitesse radiale (en km.s^{-1}) ; dans notre cas, la vitesse sera négative puisque la source est en effondrement,
- le paramètre b-doppler (en km.s^{-1}), qui représente l'élargissement dû à la turbulence et qui vaut : $db = 0.6\ FWHM_{\rm turb}$,
- la densité de la molécule étudiée (en cm^{-3}), reliée à l'abondance de cette molécule par : $X_{\rm m} = n_{\rm m}/n_{\rm H_2}$.

Ce code permet de calculer les profils de raie et le continuum de la poussière. Il prend aussi en compte le pompage du rayonnement par le continuum émis par la poussière. Il faut donc définir une loi pour le coefficient d'absorption massique en entrée du code. Les modèles déterminés par Ossenkopf & Henning (1994) pour différents types de grains couverts ou non de glace et différents temps de coagulation peuvent être utilisés. De simples lois de puissance peuvent aussi être définies. Ce code peut être utilisé pour des épaisseurs optiques allant jusqu'à 10^3–10^4. Il ne prend pas en compte la diffusion, mais celle-ci est négligeable aux longueurs d'onde qui nous intéressent, $\gtrsim 10$ μm (i.e. $\lesssim 30$ THz).

La combinaison du transfert radiatif et de l'équilibre statistique peut être écrite sous forme matricielle comme :

$$J_\nu = \Lambda[S_{ul}(J_\nu)]. \tag{2.71}$$

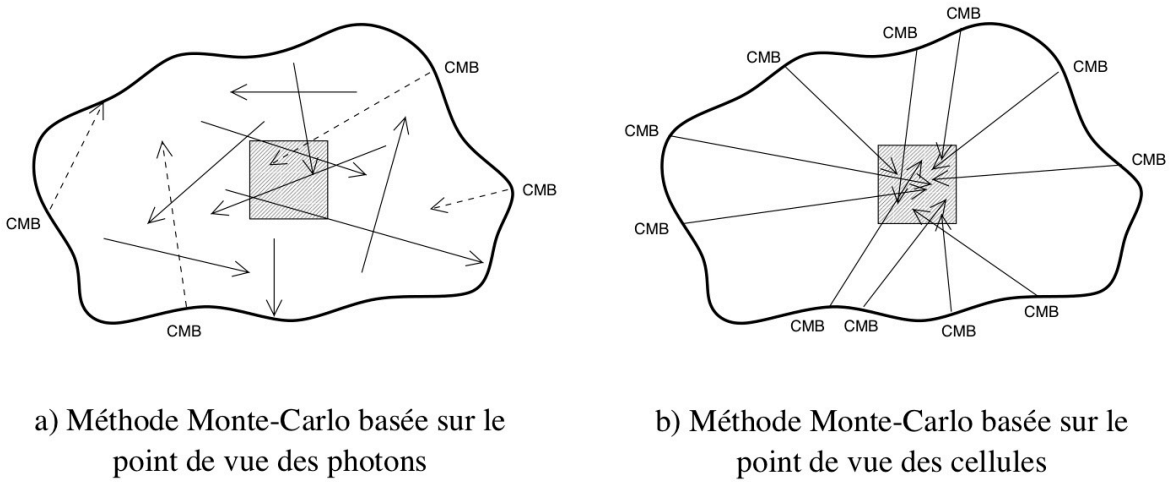
Λ est l'opérateur qui va lier l'intensité moyenne du champ de rayonnement J_ν définie en équation 2.40 et la fonction source S_{ul} qui dépend des populations des niveaux. La fonction source S_{ul} s'exprime ici comme :

$$S_{ul} = \frac{[j_{\nu_0}({\rm dust}) + \int j_\nu^{ul}({\rm gas})d\nu]}{[\alpha_{\nu_0}({\rm dust}) + \int \alpha_\nu^{ul}({\rm gas})d\nu]} \tag{2.72}$$

afin de considérer l'émission et l'absorption de la poussière. Un intervalle ul est pris en compte autour de la fréquence ν_0 pour les coefficients d'émission et d'absorption du gaz. L'équation 2.71 peut être résolue de manière itérative, en calculant J_ν à partir de l'opérateur Λ appliqué aux populations des niveaux de l'itération précédente. L'intensité moyenne du champ de rayonnement J_ν peut être estimée dans une cellule en intégrant les différents rayons reçus de tous les angles solides $d\Omega$ après propagation le long des autres cellules. Cette intégration correspondra en fait à une sommation de la contribution de toutes les autres cellules au champ de rayonnement dans chacune des cellules individuelles. La méthode de Monte-Carlo permet alors de définir aléatoirement les directions d'origine des rayons qui vont arriver dans la cellule. Elle diffère des méthodes de Monte-Carlo habituellement utilisées pour résoudre le transfert radiatif qui se basent du point de vue des photons : les photons sont suivis dans leur propagation et permettent d'approximer ensemble le champ de rayonnement (cf Fig. 2.14). Au contraire, dans RATRAN, la démarche consiste à ne considérer, pour chaque cellule, que les rayons qui l'atteignent et à remonter à leur chemin de propagation jusqu'à l'extrémité du nuage. Cette méthode a l'avantage de diminuer le temps de convergence notamment grâce à la technique d'*Accelerated Lambda Iteration* (ALI) qui définit un opérateur approximatif Λ^* tel que :

$$J_\nu = (\Lambda - \Lambda^*)[S_{ul}^\dagger(J_\nu)] + \Lambda^*[S_{ul}(J_\nu)], \tag{2.73}$$

$S_{ul}^{\dagger}$ étant la fonction source à l'itération précédente. En effet, la méthode Monte-Carlo qui génère des photons à travers toute la source ne permet pas de séparer facilement le champ de rayonnement local du champ incident pour chaque cellule, contrairement à la méthode basée sur le point de vue des cellules. Avec cette dernière, le champ de rayonnement local et l'excitation sont résolus de manière auto-cohérente tandis qu'ils sont séparés du problème de transfert radiatif global, permettant ainsi de limiter le temps de convergence, pour de fortes opacités $\tau \gtrsim 100$ notamment.



a) Méthode Monte-Carlo basée sur le point de vue des photons

b) Méthode Monte-Carlo basée sur le point de vue des cellules

FIGURE 2.14 – A gauche : méthode de Monte-Carlo basée sur le point de vue des photons. A droite : méthode de Monte-Carlo basée sur le point de vue des cellules. Cette dernière est utilisée dans le code de transfert radiatif RATRAN. Figure extraite de Hogerheijde & van der Tak (2000).

Le code RATRAN fonctionne en deux étapes appelées *amc* et *sky*, dont les différents paramètres d'entrée sont résumés en Figure 2.15 :

- La première étape *amc* consiste à calculer les populations des différents niveaux de la molécule pour le rapport signal sur bruit défini en entrée. Pour cela, le code utilise la méthode de Monte-Carlo décrite ci-dessus pour converger de manière itérative sur l'intensité moyenne du champ de rayonnement J_ν. Les niveaux de population sont alors calculés, une fois que J_ν a été déterminé pour chaque couche de l'enveloppe. Le rapport signal sur bruit désiré va dépendre du nombre de directions de propagation des photons N. Les différences entre des solutions successives sont systématiques si elles sont loin de la convergence. Pour cela, la méthode Monte-Carlo est séparée en deux sous-étapes. La première consiste à déterminer une solution grossière avec un nombre de photons fixés N_0, tandis que, pour la seconde sous-étape, le nombre de photons va être augmenté jusqu'à atteindre le rapport signal sur bruit désiré. Lors de la première sous-étape, les directions sont distribuées aléatoirement mais le même jeu de directions aléatoires est utilisé à chaque itération du fait de la réinitialisation du

générateur de nombres aléatoires. La convergence est alors considérée comme acquise quand la différence entre trois solutions successives est inférieure à un dixième de la précision requise par l'utilisateur. S'ensuit alors la deuxième sous-étape pour laquelle chaque itération utilise un jeu différent de directions aléatoires afin d'estimer J_ν : le générateur de nombres aléatoires n'est plus réinitialisé. Le nombre de directions de photons N est alors doublé de manière itérative jusqu'à ce que le bruit sur les populations des niveaux soit inférieur au seuil fixé par l'utilisateur.

- Quand les populations des niveaux ont été déterminées pour le rapport signal/bruit voulu, on peut alors passer à la deuxième étape, *sky*, qui consiste à calculer, par une méthode de *ray-tracing*, la distribution de l'émission pour les transitions définies par l'utilisateur (et qui doivent être présentes dans le fichier de collision LAMDA de la molécule). Le fichier obtenu en sortie est soit au format MIRIAD, soit au format FITS. La carte se présente sous trois dimensions, les deux premiers axes représentant la dimension spatiale (en mesure d'angle) et le troisième l'axe des vitesses nécessaire pour tracer le profil de la raie. Un exemple de carte obtenue avec RATRAN (zoomée entre $-5''$ et $+5''$) est montré en Figure 2.16. L'utilisateur peut définir la taille de la carte et la résolution des pixels spatiaux (en $''$) ainsi que la gamme spectrale et sa résolution spectrale (en km.s^{-1}). Il faut également préciser la distance de la source puisque les rayons des différentes couches sont jusque là exprimés en mètres et non pas en unités d'angle.

A partir de là, la carte obtenue est convoluée avec le profil du lobe du télescope à la fréquence de la transition en question, pour obtenir un profil de raie en $T_{\rm mb}$ en fonction de la vitesse (cf Fig. 2.17). On pourra alors le comparer aux observations.

Il est important de noter que, dans RATRAN, dans le cas de deux collisionneurs, le second collisionneur n'est pas pris en compte dans le calcul de l'opacité de la poussière. Cela ne pose pas de problème si le second collisionneur est l'électron, mais lorsque les deux collisionneurs sont ortho et para–H_2 (ce qui est le cas, comme le verrons plus tard, de l'eau deutérée), il est nécessaire de tenir compte du second collisionneur (en l'occurrence ortho–H_2) pour calculer l'opacité de la poussière. Dans ce cadre-là, j'ai donc légèrement modifié le code RATRAN pour correctement prendre en compte cette situation. Suite à mon intervention, les groupes de travail étudiant l'eau dans le cadre du programme Herschel WISH (*Water in Star-forming regions with Herschel*) ont alors tenu compte de cette modification.

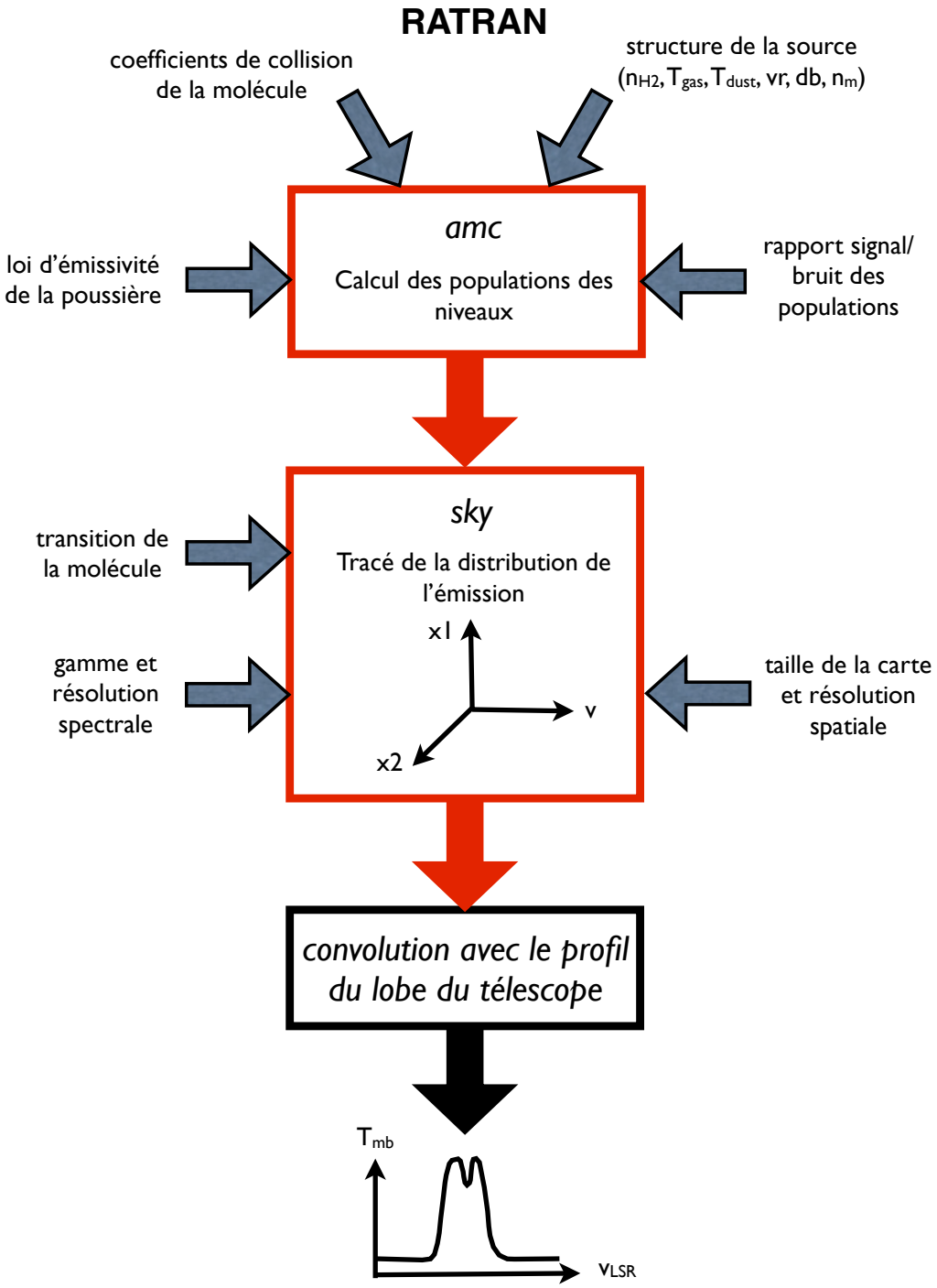


FIGURE 2.15 – Vue schématique du code de transfert radiatif RATRAN. Les différents paramètres décrivant la structure de la source sont : la densité du milieu n_{H_2}, la température du gaz T_{gas}, la température de la poussière T_{dust}, la vitesse radiale v_r, le paramètre b–doppler db et la densité de la molécule étudiée n_m.

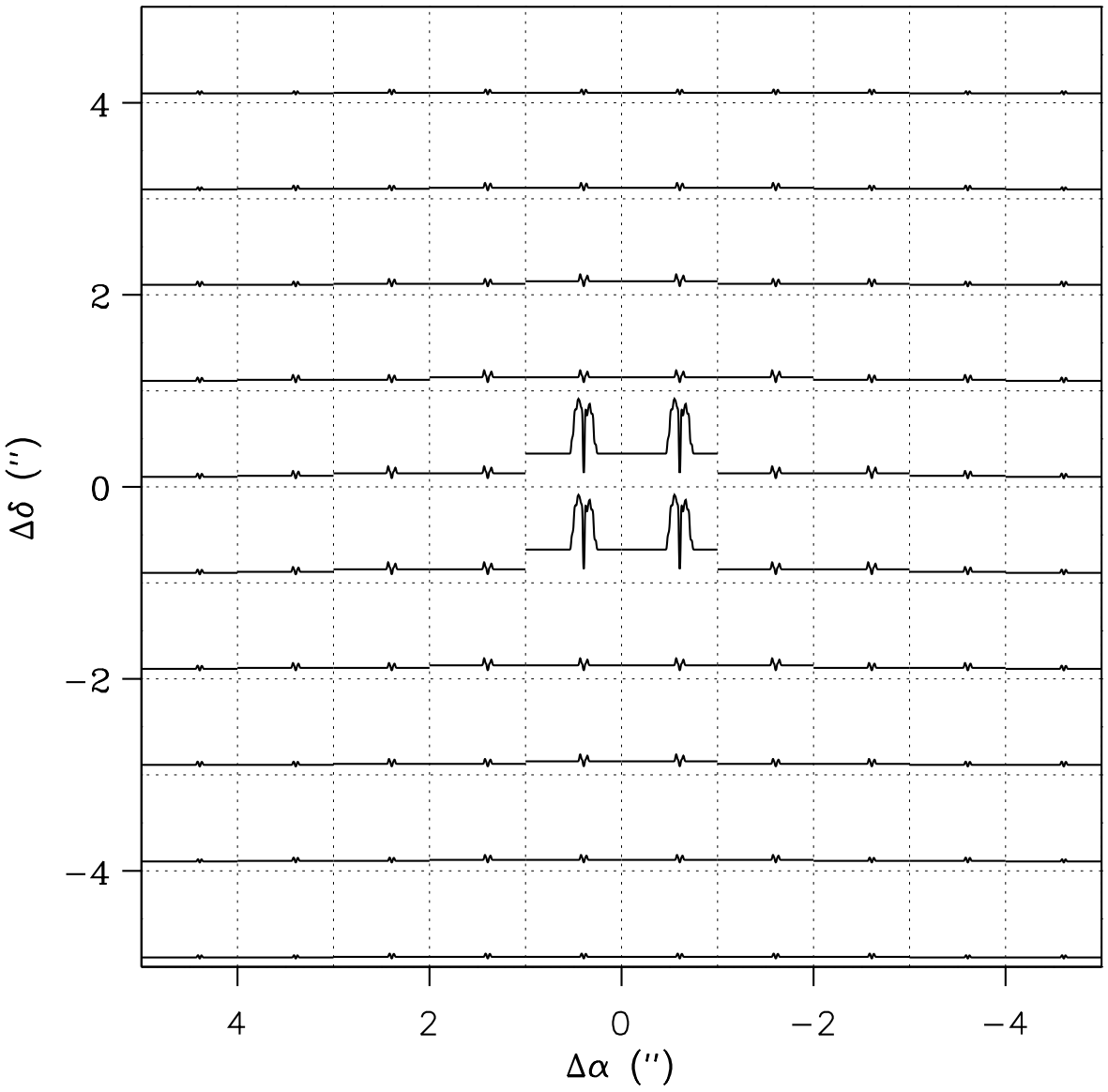


Figure 2.16 – Exemple de carte obtenue avec RATRAN entre $-5''$ et $+5''$ pour la raie fondamentale $1_{0,1} - 0_{0,0}$ de HDO à 465 GHz. Le profil de raie apparaît plus intense dans les quatre pixels centraux représentant le *hot corino*, du fait de la sublimation des molécules piégées sur les grains.

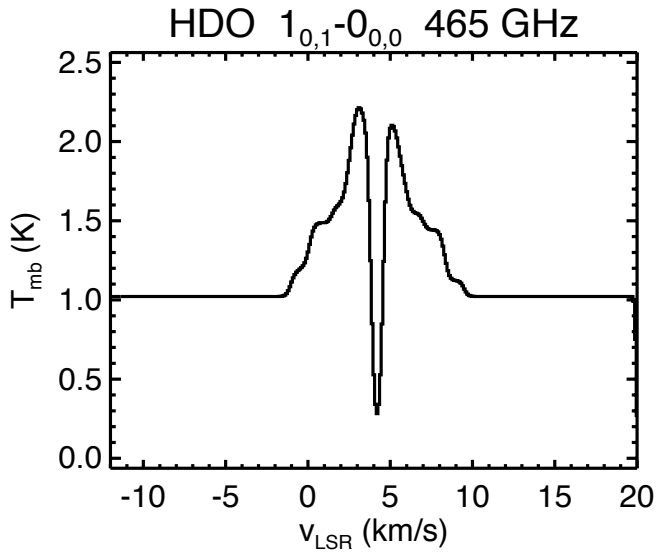


FIGURE 2.17 – Profil de raie obtenu en convoluant la carte modélisée grâce au code de transfert radiatif RATRAN (en Fig. 2.16) avec le lobe du télescope JCMT à 465 GHz.

Chapitre 3

La deutération de l'eau dans la proto-étoile de faible masse IRAS 16293-2422

Sommaire

3.1 La proto-étoile IRAS 16293-2422 65
3.2 Observations 67
3.2.1 Données Herschel/HIFI 67
3.2.2 Données IRAM-30m 70
3.2.3 Données JCMT 70
3.3 Modélisation et résultats 71
3.3.1 Modélisation 71
3.3.2 Les coefficients de collision de l'eau deutérée 74
3.3.3 Modélisation de l'eau deutérée 74
3.3.4 Modélisation de l'eau 82
3.3.5 Modélisation de l'eau lourde 88
3.3.6 Rapports HDO/H_2O, D_2O/HDO et D_2O/H_2O 91
3.4 Discussion sur le fractionnement en deutérium de l'eau 93
3.4.1 Comparaison avec de précédentes études 93
3.4.2 Contraintes sur la formation de l'eau 94
3.4.3 Comparaison du rapport HDO/H_2O dans d'autres proto-étoiles 97
3.4.4 Comparaison avec le modèle chimique d'Aikawa et al. (2012) 98

3.1 La proto-étoile IRAS 16293-2422

La proto-étoile IRAS 16293-2422 (ci-après IRAS 16293) est un objet de référence parmi les proto-étoiles de type solaire. Elle montre en effet un spectre de raies particulièrement intense (e.g. Blake et al. 1994; van Dishoeck et al. 1995). Elle est, de plus, relativement proche, comparée à ses homologues. Elle est abritée, à une distance de 120 pc, par le nuage LDN 1689N (Knude & Hog 1998; Loinard et al. 2008), lui-même situé dans la région de ρ Ophiuchi qui se trouve à proximité des constellations du Scorpion et d'Ophiuchus (cf Fig. 3.1). Elle a été observée pour la première fois par le satellite IRAS (*Infrared Astronomical Satellite*) lancé en 1983 afin de réaliser une cartographie complète du ciel dans les bandes infrarouges à 12, 25, 60 et 100 μm. Sa luminosité bolométrique est estimée à 22 $L_\odot$ par Crimier et al. (2010). Cet

Figure 3.1 – A gauche : constellation du Scorpion. A droite : zoom sur le nuage de ρ Oph. La flèche rouge indique la position de la proto-étoile IRAS16293.

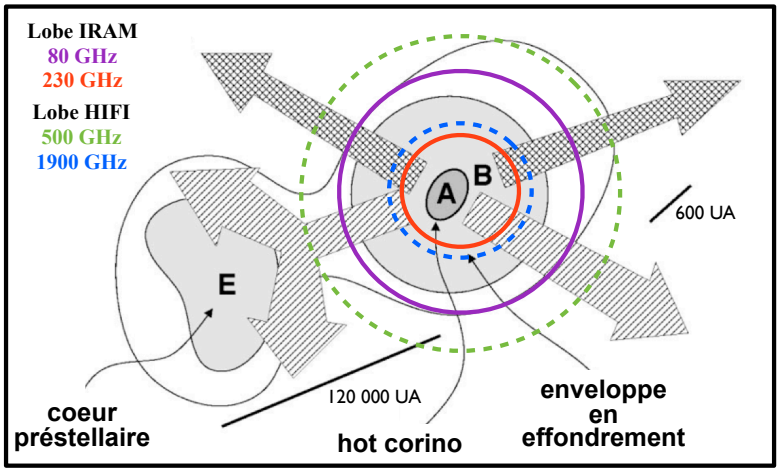


Figure 3.2 – Vue schématique de la proto-étoile IRAS 16293. Les lobes des télescopes IRAM et HIFI sont représentés à différentes fréquences. Adaptation d'une figure extraite de Stark et al. (2004).

objet proto-stellaire est en fait une binaire dont les deux sources, séparées d'environ 5″, sont dénommées IRAS 16293 A et IRAS 16293 B (Looney et al. 2000). La source A pourrait elle-même être un système binaire : deux sources ont en effet été observées dans le centimétrique (A1 et A2 ; Wootten 1989) et dans le submillimétrique (Aa et Ab ; Chandler et al. 2005). La source B ne montre pas, par contre, de signes de sous-structures à ces longueurs d'onde. De puissants jets de matière ont également été détectés autour de cet objet (Castets et al. 2001; Stark et al. 2004; Chandler et al. 2005; Yeh et al. 2008). Cette proto-étoile se situe au stade de Classe 0 (cf Sect. 1.1.1 ; André & Montmerle 1994). Elle est donc constituée d'une enveloppe épaisse entourant une région interne chaude, le *hot corino*, où de nombreuses molécules complexes sont formées. C'est par ailleurs la première source où un *hot corino* a été mis en évidence (Ceccarelli et al. 2000b; Cazaux et al. 2003; Bottinelli et al. 2004b). A proximité de

cette source, se trouve le cœur pré-stellaire 16293E, révélé grâce à une émission d'ammoniac par Mizuno et al. (1990). Les différentes observations pointées en direction d'IRAS 16293 utilisées dans cette thèse n'englobent jamais l'émission venant du cœur 16293E. La Figure 3.2 montre une vue schématique de cette région.

Cette proto-étoile est aussi très étudiée en raison de son fort fractionnement en deutérium. C'est notamment le cas du formaldéhyde pour lequel le rapport $HDCO/H_2CO$ est d'environ 13–16% (Loinard et al. 2000). Sa forme doublement deutérée a même été détectée avec un rapport D_2CO/H_2CO entre 3 et 16% (Ceccarelli et al. 1998, 2001; Loinard et al. 2000). Le méthanol montre également un fort rapport de deutération : 30 ± 20% pour CH_2DOH, 6 ± 5% pour sa forme doublement deutérée CHD_2OH et ∼1.4% pour sa forme triplement deutérée CD_3OH (Parise et al. 2004). Plus récemment, Demyk et al. (2010) ont aussi montré un fractionnement en deutérium important pour le formiate de méthyle ($HCOOCH_3$), qui est d'environ 15%, tandis que Bacmann et al. (2010) ont conclu sur un rapport ND/NH compris entre 30% et 100%. En combinant des observations de H_2O (ISO ; Ceccarelli et al. 2000a) avec son isotope deutéré HDO (IRAM et JCMT ; Parise et al. 2005), l'eau semble cependant montrer un fractionnement en deutérium beaucoup plus faible : ∼ 3% dans le *hot corino* et ≤ 0.2% dans l'enveloppe plus froide (cf Sect. 3.4.1 pour plus de détail).

Dans ce chapitre, nous allons estimer avec une meilleure précision le rapport HDO/H_2O dans cette source en se basant sur les nombreuses transitions de HDO et $H_2{}^{18}O$ présentes dans la gamme spectrale de l'instrument HIFI. L'abondance de l'eau sera déterminée à partir des données de son isotope $H_2{}^{18}O$ moins abondant et donc moins pollué que l'isotope principal $H_2{}^{16}O$ par les jets moléculaires riches en eau. Des observations de $H_2{}^{17}O$ et D_2O seront également utilisées pour renforcer cette étude.

3.2 OBSERVATIONS

3.2.1 Données Herschel/HIFI

Une large couverture spectrale de la proto-étoile de faible masse IRAS 16293 a été réalisée dans les gammes spectrales 480 – 1142 GHz (bandes HIFI 1 à 5), 1481 – 1510 GHz (bande HIFI 6a) et 1573 – 1798 GHz (bandes HIFI 6b et 7a) dans le cadre du programme CHESS (cf Sect. 1.3.3.1). Les observations ont été obtenues en mars 2010 et février 2011, en utilisant le mode *fast chop Spectral Scan Double Beam Switch* (DBS) avec optimisation du continuum. Le spectromètre à large bande de HIFI (WBS ; cf Sect. 1.3.2) a été utilisé, fournissant une résolution spectrale de 1.1 MHz , soit $0.69\,\mathrm{km\,s^{-1}}$ à 490 GHz et $0.18\,\mathrm{km\,s^{-1}}$ à 1800 GHz, sur une largeur de bande instantanée de 4×1 GHz. Les positions de référence DBS étaient situées à environ 3′ à l'Est et à l'Ouest de la source. Les coordonnées des observations sont $\alpha_{2000} = 16^h\ 32^m\ 22\overset{s}{.}75$, $\delta_{2000} = -\ 24^\circ\ 28'\ 34.2''$, une position à égale distance des deux sources A et B constituant la source IRAS 16293.

Dans ces bandes, douze raies de HDO ($E_{\mathrm{up}} < 170$ K) et quinze raies de $H_2{}^{18}O$ ($E_{\mathrm{up}} < 500$ K) ont été observées, avec neuf transitions détectées pour l'eau deutérée et cinq transitions pour l'isotope $H_2{}^{18}O$, dont la transition fondamentale $1_{1,0}$–$1_{0,1}$ du ortho–$H_2{}^{18}O$. La

Table 3.1 – Paramètres des transitions de HDO, $H_2{}^{18}O$, $H_2{}^{17}O$ et D_2O observées en direction de la proto-étoile IRAS 16293.

Espèces	Fréquence (GHz)	$J_{Ka,Kc}$	E_{up}/k (K)	A_{ij} (s^{-1})	Télescope	Lobe ($''$)	F_{eff}	B_{eff}	$rms^{(2)}$ (mK)	$\int T_{mb}dv$ (K.km s^{-1})	$FWHM^{(3)}$ (km s^{-1})	Ref.$^{(6)}$
HDO	481.7795	$3_{1,2}$-$3_{1,3}$	168	4.74×10^{-5}	HIFI 1a	44.0	0.96	0.76	15	≤ 0.12		a
HDO	490.5966	$2_{0,2}$-$1_{1,1}$	66	5.25×10^{-4}	HIFI 1a	43.9	0.96	0.76	9	0.60	4.9	a
HDO	509.2924	$1_{1,0}$-$1_{0,1}$	47	2.32×10^{-3}	HIFI 1a	42.3	0.96	0.76	9	1.08	5.8	a
HDO	599.9267	$2_{1,1}$-$2_{0,2}$	95	3.45×10^{-3}	HIFI 1b	35.9	0.96	0.75	9	0.83	4.9	a
HDO	753.4112	$3_{1,2}$-$3_{0,3}$	168	5.90×10^{-3}	HIFI 2b	28.6	0.96	0.75	22	0.27	4.3	a
HDO	848.9618	$2_{1,2}$-$1_{1,1}$	84	9.27×10^{-4}	HIFI 3a	25.4	0.96	0.75	20	0.54	5.3	a
HDO	893.6387	$1_{1,1}$-$0_{0,0}$	43	8.35×10^{-3}	HIFI 3b	24.1	0.96	0.74	18	0.40	5.2	a
HDO	919.3109	$2_{0,2}$-$1_{0,1}$	66	1.56×10^{-3}	HIFI 3b	23.4	0.96	0.74	25	0.93	5.8	a
HDO	995.4115	$3_{0,3}$-$2_{1,2}$	131	7.04×10^{-3}	HIFI 4a	21.7	0.96	0.74	32	1.10	7.0	a
HDO	1009.9447	$2_{1,1}$-$1_{1,0}$	95	1.56×10^{-3}	HIFI 4a	21.0	0.96	0.74	29	0.38	6.5	a
HDO	1507.2610	$3_{1,2}$-$2_{1,1}$	168	6.58×10^{-3}	HIFI 6a	14.1	0.96	0.72	257	≤ 2.04		a
HDO	1625.4081	$3_{1,3}$-$2_{0,2}$	144	4.49×10^{-2}	HIFI 6b	13.0	0.96	0.71	238	≤ 1.89		a
HDO	80.5783	$1_{1,0}$-$1_{1,1}$	47	1.32×10^{-6}	IRAM-30m	31.2	0.95	0.78	14	0.54	6.0	b,d
HDO	225.8967	$3_{1,2}$-$2_{2,1}$	168	1.32×10^{-5}	IRAM-30m	11.1	0.91	0.54	34	2.15	7.4	b,d
HDO	241.5616	$2_{1,1}$-$2_{1,2}$	95	1.19×10^{-5}	IRAM-30m	10.4	0.91	0.51	23	2.27	6.8	b
HDO	464.9245	$1_{0,1}$-$0_{0,0}$	22	1.69×10^{-4}	JCMT	10.8	-	$0.5^{(5)}$	63	5.50	5.9	c
p-$H_2{}^{18}O$	745.3202	$2_{1,1}$-$2_{0,2}$	136	6.83×10^{-3}	HIFI 2b	28.4	0.96	0.75	18	0.34	5.2	a
p-$H_2{}^{18}O$	970.2720	$4_{2,2}$-$3_{3,1}$	452	6.71×10^{-4}	HIFI 4a	21.9	0.96	0.74	31	≤ 0.23		a
p-$H_2{}^{18}O$	994.6751	$2_{0,2}$-$1_{1,1}$	101	6.02×10^{-3}	HIFI 4a	21.3	0.96	0.74	35	0.81	7.0	a
p-$H_2{}^{18}O$	1101.6983	$1_{1,1}$-$0_{0,0}$	53	1.79×10^{-2}	HIFI 4b	19.2	0.96	0.74	44	0.63	5.3	a
p-$H_2{}^{18}O$	1188.8631	$4_{2,2}$-$4_{1,3}$	452	2.73×10^{-2}	HIFI 5a	17.8	0.96	0.64	125	≤ 0.92		a
p-$H_2{}^{18}O$	1199.0056	$2_{2,0}$-$2_{1,1}$	194	1.76×10^{-2}	HIFI 5a	17.7	0.96	0.64	90	≤ 0.66		a
p-$H_2{}^{18}O$	1605.9625	$4_{1,3}$-$4_{0,4}$	395	3.71×10^{-2}	HIFI 6b	13.2	0.96	0.71	339	≤ 2.49		a
o-$H_2{}^{18}O$	489.0543	$4_{2,3}$-$3_{3,0}$	$430^{(4)}$	6.89×10^{-5}	HIFI 1a	43.4	0.96	0.76	14	≤ 0.10		a
o-$H_2{}^{18}O$	547.6764	$1_{1,0}$-$1_{0,1}$	$60^{(4)}$	3.29×10^{-3}	HIFI 1a	38.7	0.96	0.75	8	0.98	7.0	a
o-$H_2{}^{18}O$	1095.6274	$3_{1,2}$-$3_{0,3}$	$249^{(4)}$	1.62×10^{-2}	HIFI 4b	19.4	0.96	0.74	49	0.38	3.0	a
o-$H_2{}^{18}O$	1136.7036	$3_{2,1}$-$3_{1,2}$	$303^{(4)}$	2.15×10^{-2}	HIFI 5a	18.7	0.96	0.64	103	≤ 0.76		a
o-$H_2{}^{18}O$	1181.3940	$3_{1,2}$-$2_{2,1}$	$249^{(4)}$	2.89×10^{-3}	HIFI 5a	17.9	0.96	0.64	108	≤ 0.79		a
o-$H_2{}^{18}O$	1633.4836	$2_{2,1}$-$2_{1,2}$	$192^{(4)}$	2.91×10^{-2}	HIFI 6b	13.0	0.96	0.71	264	≤ 1.94		a
o-$H_2{}^{18}O$	1655.8676	$2_{1,2}$-$1_{0,1}$	$114^{(4)}$	5.46×10^{-2}	HIFI 6b	12.8	0.96	0.71	226	≤ 1.66		a
o-$H_2{}^{18}O$	1719.2502	$3_{0,3}$-$2_{1,2}$	$196^{(4)}$	5.12×10^{-2}	HIFI 7a	12.3	0.96	0.71	277	≤ 2.04		a
p-$H_2{}^{17}O$	1107.1669	$1_{1,1}$-$0_{0,0}$	53	1.81×10^{-2}	HIFI 4b	19.1	0.96	0.74	47	≤ 0.34		a
o-$H_2{}^{17}O$	552.0210	$1_{1,0}$-$1_{0,1}$	$61^{(4)}$	3.37×10^{-3}	HIFI 1a	38.4	0.96	0.75	11	0.58	7.1	a
p-D_2O	316.7998	$1_{1,0}$-$1_{0,1}$	$33^{(4)}$	6.30×10^{-4}	JCMT	15.6	-	$0.63^{(5)}$	24	0.40	4.0	e,f
o-D_2O	607.3494	$1_{1,1}$-$0_{0,0}$	29	2.96×10^{-3}	HIFI 1b	34.9	0.96	0.74	4	-0.07		f

(1) Les fréquences, les énergies des niveaux supérieurs (E_{up}) et les coefficients d'Einstein (A_{ij}) de HDO et $H_2{}^{18}O$ proviennent du catalogue spectroscopique JPL (Pickett et al. 1998). La séparation ortho/para du $H_2{}^{18}O$ a été établie et implémentée dans la base de données de CASSIS.

(2) Le rms est calculé pour une résolution spectrale de 0.7 km s^{-1} pour les transitions de HDO et 0.6 km s^{-1} pour les transitions de $H_2{}^{18}O$, $H_2{}^{17}O$ et D_2O.

(3) La $FWHM$ est déterminée sur les raies en émission seulement.

(4) Les énergies des niveaux supérieurs du ortho–$H_2{}^{18}O$ et ortho–$H_2{}^{17}O$ supposent que l'énergie du niveau fondamental $1_{1,0}$–$1_{0,1}$ est 34 K et non pas 0 K. De même pour D_2O, l'énergie du niveau fondamental est 19 K.

(5) Cette valeur correspond au rapport entre la *main beam efficiency* B_{eff} et la *forward efficiency* F_{eff}.

(6) Références : a) Coutens et al. (2012) ; b) Caux et al. (2011) ; c) Stark et al. (2004) ; d) Parise et al. (2005) ; e) Butner et al. (2007) ; f) Vastel et al. (2010)

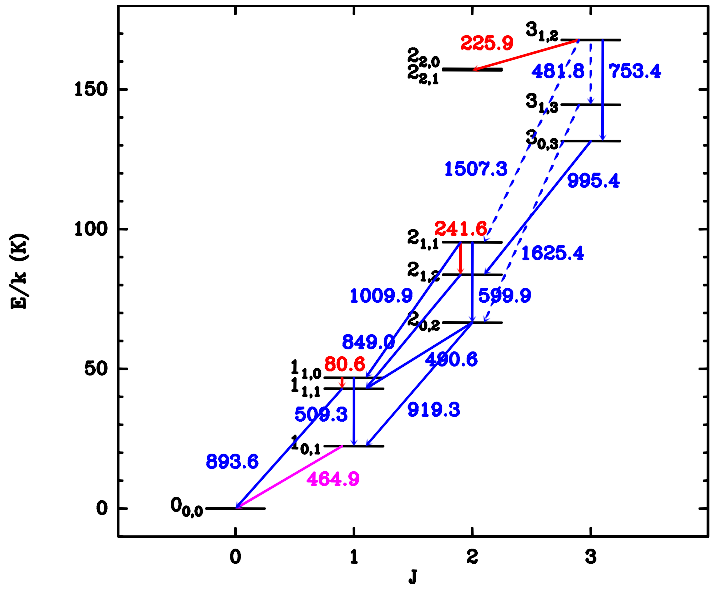


FIGURE 3.3 – Diagramme des niveaux d'énergie des transitions de HDO observées avec le télescope de 30 m de l'IRAM (en rouge), le JCMT (en rose) et l'instrument HIFI (en bleu). Les transitions détectées (non-détectées) sont en traits continus (pointillés). Les fréquences sont exprimées en GHz.

raie fondamentale de ortho–$H_2{}^{17}O$ est elle aussi détectée. On notera également la première détection de la transition fondamentale de ortho–D_2O à 607 GHz dans la bande 1b (Vastel et al. 2010). La Table 3.1 liste, pour toutes les transitions, les paramètres observés.

La *forward efficiency* est d'environ 0.96 à toutes les fréquences. Les *main beam efficiencies* utilisées sont répertoriées dans la Table 3.1 et correspondent aux valeurs mesurées par Roelfsema et al. (2012). Les données ont été réduites en utilisant le pipeline HIFI standard jusqu'à la calibration des fréquences et des amplitudes (niveau 2) avec le package HIPE 5 développé par l'ESA (Ott 2010). Dans le mode utilisé pour nos observations, toutes les raies ont été observées au moins quatre fois (si elles sont en bord de bande), mais plus généralement huit fois (quatre fois en LSB et quatre fois en USB) pour chaque polarisation. Pour produire les spectres finaux, toutes les observations ont été exportées dans le logiciel CLASS. En utilisant ce logiciel, les polarisations H et V ont été moyennées en pondérant par le bruit observé dans chaque spectre. Nous avons vérifié pour chaque spectre qu'aucune émission de transitions de la bande image ne contaminait nos données. HIFI opère comme un récepteur DSB. Les gains pour les bandes hautes fréquences et basses fréquences ne sont donc pas nécessairement égaux. A partir des performances en vol de l'instrument, un rapport de bande de 1 est supposé pour la bande 3b, qui contient la raie fondamentale $1_{1,1}$–$0_{0,0}$ de HDO à 894 GHz vue en absorption. Pour obtenir le continuum SSB de cette transition, il faut donc diviser le continuum observé par 2. Il en est de même pour la transition de ortho–D_2O vue en absorption à 607 GHz dans la bande 1b.

Les limites supérieures à 3σ sur les aires intégrées des raies non-détectées présentées en Table 3.1 sont calculées selon la formule suivante :

$$3\sigma \text{ (K.km s}^{-1}) = 3 \times rms \times \sqrt{2 \times dv \times FWHM} \tag{3.1}$$

avec le *rms* en K, la largeur de canal dv en $\mathrm{km\,s^{-1}}$ et la largeur à mi-hauteur $FWHM$ en $\mathrm{km\,s^{-1}}$. En effet, σ est défini comme :

$$\sigma = rms \times \sqrt{n_{\mathrm{chan}}} \times dv. \tag{3.2}$$

Or n_{chan} est lié à dv par la relation :

$$2 \times FWHM \sim n_{\mathrm{chan}} \times dv, \tag{3.3}$$

menant ainsi à l'équation 3.1. Pour estimer les limites supérieures à 3σ, nous avons supposé $FWHM = 5\,\mathrm{km\,s^{-1}}$, qui est la largeur de raie d'émission moyenne.

3.2.2 Données IRAM-30m

En plus des données Herschel/HIFI, nous disposons du relevé spectral TIMASSS (cf Sect. 2.2.3.1). Quatre transitions de HDO ont été observées mais seulement trois d'entre elles (80.578, 225.897 et 241.561 GHz) ont été utilisées, car la transition à 266.161 GHz se trouve dans une partie du relevé où la calibration est plutôt incertaine (Caux et al. 2011). Les observations sont centrées sur la source B de coordonnées $\alpha_{2000} = 16^h\ 32^m\ 22\overset{s}{.}6$, $\delta_{2000} = -\ 24^\circ\ 28'\ 33''$. La résolution spectrale est de 0.31 MHz ($\sim$1.2 $\mathrm{km\,s^{-1}}$) à 81 GHz et 1 MHz ($\sim$1.3 $\mathrm{km\,s^{-1}}$) à 226 GHz et 242 GHz. La seule transition observable de $H_2{}^{18}O$ dans le relevé spectral TIMASSS à 203.4 GHz est contaminée par une transition de CH_3OCH_3 et donc non utilisée par la suite.

3.2.3 Données JCMT

La transition fondamentale $1_{0,1}$–$0_{0,0}$ d'eau semi-lourde HDO à 464.924 GHz a été observée par Stark et al. (2004) en direction de la source A ($\alpha_{2000} = 16^h\ 32^m\ 22\overset{s}{.}85$, $\delta_{2000} = -\ 24^\circ\ 28'\ 35.5''$) et par Parise et al. (2005) en direction de la source B ($\alpha_{2000} = 16^h\ 32^m\ 22\overset{s}{.}6$, $\delta_{2000} = -\ 24^\circ\ 28'\ 33''$). A cette fréquence, le lobe du JCMT est d'environ $11''$. En dépit des différents pointages, les profils et les intensités des raies observées sont similaires. Les observations montrent une émission large et une absorption profonde et étroite (cf Fig. 3.8). Les observations n'étaient pas optimisées pour une détermination précise du continuum. Néanmoins, du fait de l'absorption de la raie, le niveau du continuum de la raie est un paramètre crucial de la modélisation. Nous verrons ci-après que nous pouvons l'estimer à environ 1 K grâce à la modélisation et au modèle d'émissivité de la poussière choisie. Cela signifie donc que la *self-absorption* absorbe complètement le continuum.

L'eau lourde (D_2O) a été observée pour la première fois dans le milieu interstellaire en 2007 grâce à la détection de sa transition fondamentale de para–D_2O à 317 GHz avec le télescope JCMT (Butner et al. 2007). Cette transition n'a été jusqu'à maintenant détectée que dans un seul objet, la proto-étoile IRAS 16293. Cette transition, tout comme les transitions

fondamentales de HDO, montre un profil particulier avec une émission large et une absorption étroite. A $\sim$10 km s^{-1}, une raie, très probablement la transition (7_0–6_0+) de CH_3OD, contamine légèrement le profil de la raie de D_2O (cf Fig. 3.20). Pour déduire l'intensité de la raie, un ajustement du spectre observé avec trois Gaussiennes (les composantes en émission de D_2O et CH_3OD et la composante en absorption de D_2O) a été effectué. Le lobe est d'environ 15″ à cette fréquence. La *beam efficiency* est de $\sim$0.63. La valeur du continuum est estimée à environ 0.85 K (Butner et al. 2007). Ces données ont été utilisées dans le cadre de la modélisation de l'eau lourde.

3.3 Modélisation et résultats

3.3.1 Modélisation

Pour modéliser l'eau deutérée et l'isotope $H_2{}^{18}O$, nous avons utilisé le modèle de transfert radiatif hors-ETL 1D RATRAN (présenté en Sect. 2.3.3.3) qui prend en compte la structure de la source. Les profils en densité et en température du gaz et de la poussière de la source IRAS 16293 ont été déterminés par Crimier et al. (2010) à partir de cartes *single-dish* d'émission du continuum à 350, 450 et 850 μm ainsi que de données interférométriques du continuum à 1.3 et 3 mm. En fournissant en entrée un profil en densité et une température de l'objet central, le code de transfert radiatif 1D DUSTY (Ivezic & Elitzur 1997) permet alors de produire le profil en température de la poussière et l'émission du continuum. En comparant différents modèles aux observations, Crimier et al. (2010) ont donc déterminé le profil en densité et en température de la poussière. Le profil en température du gaz a ensuite été estimé à partir du code de transfert radiatif de Ceccarelli et al. (1996) qui consiste à égaliser les termes de chauffage et de refroidissement en chaque point de l'enveloppe. L'abondance de l'eau utilisée pour déterminer la température du gaz a été estimée à partir de données du satellite ISO (Ceccarelli et al. 2000a). La Figure 3.4 montre les profils en densité et en température du gaz obtenus. Le rayon s'étend de 22 UA à 6100 UA. On notera néanmoins que la structure dans les parties internes ($\lesssim$ 500 UA) est incertaine du fait de la multiplicité de la source et de la présence éventuelle de disques dans ses *hot corinos*. La vitesse radiale a été exprimée, dans chacune des couches de l'enveloppe, comme la vitesse de chute libre, $v_r = -\sqrt{2GM/r}$ (où M est la masse stellaire, G la constante gravitationnelle et r le rayon), pour une masse de 1 $M_\odot$. Pour une masse supérieure ($\sim$ 2 $M_\odot$), les raies deviennent trop larges pour reproduire les profils observés. De plus, la valeur de 1 $M_\odot$ est en accord avec la masse du cœur A, la masse du cœur B étant d'environ 0.1 $M_\odot$ (Ceccarelli et al. 2000a; Bottinelli et al. 2004b; Caux et al. 2011). Pour un rayon supérieur à 1280 UA, l'enveloppe est considérée statique (Crimier et al. 2010). La vitesse radiale est donc nulle au-dessus de cette valeur. Ce rayon correspond à un changement dans la pente du profil de densité, marquant la transition entre l'enveloppe statique et l'enveloppe en effondrement (Shu 1977). Pour reproduire les largeurs des raies en absorption, le paramètre b-doppler (cf Sect. 2.3.3.3) est fixé à 0.3 km s^{-1}. Si une valeur plus faible (respectivement plus élevée) est adoptée, les raies en absorption modélisées sont trop fines (respectivement trop larges) par comparaison aux observations.

D'après des observations interférométriques de la transition de HDO à 226 GHz, l'eau deutérée serait principalement émise par le cœur A (cf Fig. 3.5 ; Jørgensen et al. 2011). Aucune

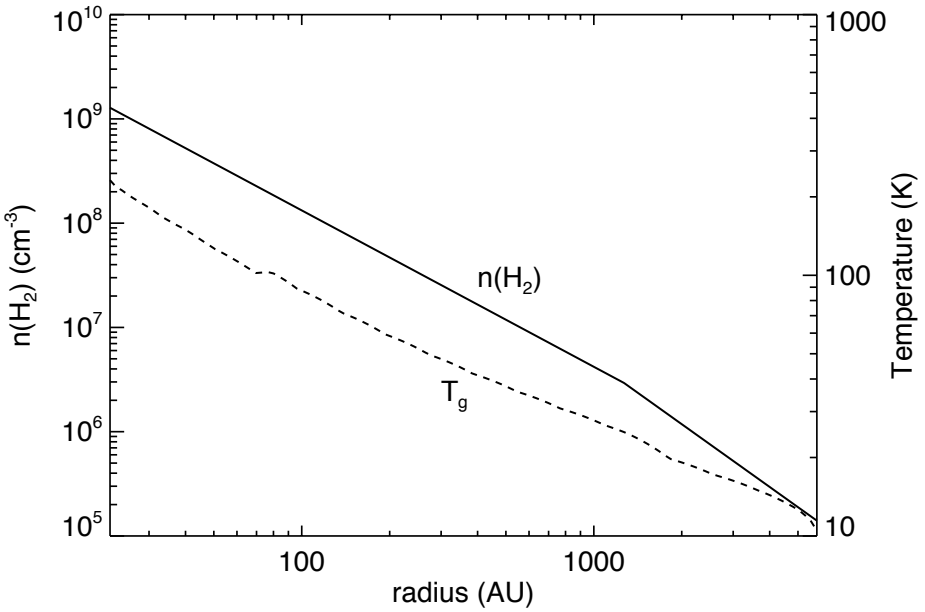


Figure 3.4 – Structure de la source IRAS 16293 déterminée par Crimier et al. (2010). La densité est représentée en trait continu et la température du gaz en trait pointillé.

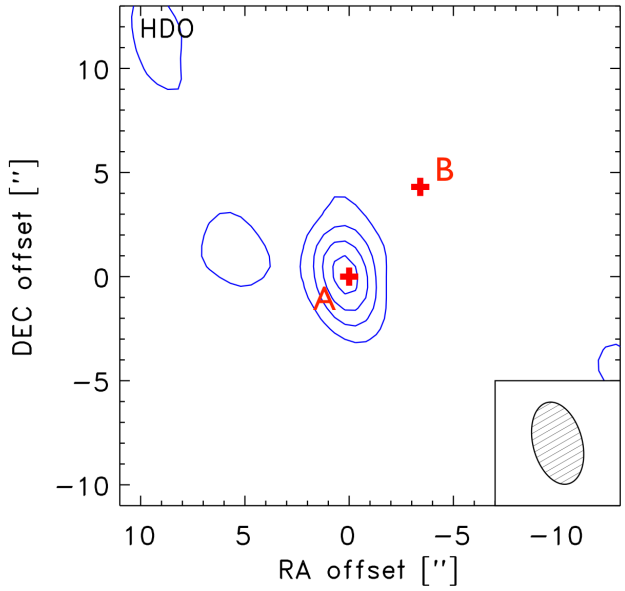


Figure 3.5 – Observations interférométriques de la transition HDO à 226 GHz en direction de la proto-étoile IRAS 16293. Le point (0″, 0″) a pour coordonnées $\alpha_{2000} = 16^h\ 32^m\ 22\overset{s}{.}91$, $\delta_{2000} = -\ 24°\ 28'\ 35.5''$. Figure extraite de Jørgensen et al. (2011).

émission ne semble venir du cœur B. L'hypothèse d'un modèle 1D centré sur A est donc raisonnable. Etant donné que les observations IRAM étaient pointées sur la source B et non sur la source A et que le lobe est relativement petit ($\sim 11''$) à 226 et 242 GHz, nous avons convolué la carte obtenue avec RATRAN avec le profil de lobe du télescope décalé spatialement pour le centrer en B. Ainsi les profils modélisés sont directement comparables avec les observations.

L'opacité de la poussière est fonction de la fréquence. Pour reproduire le continuum observé avec HIFI de la bande 1 à 4 (pour les bandes HEB, le continuum est trop incertain) en utilisant la structure de la source présentée ci-dessus, le coefficient d'absorption massique κ a été défini selon un modèle en loi de puissance :

$$\kappa = \kappa_0 \left(\frac{\nu}{\nu_0}\right)^{\beta} \tag{3.4}$$

avec $\beta = 1.8$, $\kappa_0 = 15$ cm^{-2}/g$_{\rm dust}$ et $\nu_0 = 10^{12}$ Hz. En utilisant ce modèle d'émissivité et la structure de la source, le continuum de la transition à 464 GHz observée avec le JCMT est prédit à $\sim$1 K. L'absorption de la raie par rapport au continuum est donc totale dans ce cas-ci. Le continuum modélisé, montré par la suite sur les Figures 3.8 et 3.10, a été conservé pour les deux raies fondamentales montrant de l'absorption tandis qu'il a été soustrait pour toutes les raies qui présentaient uniquement de l'émission. Les profils obtenus ont été ré-échantillonnés à la résolution spectrale des observations. Un lissage a été appliqué sur certaines observations quand la raie était non-détectée ou faiblement détectée (cf Figs. 3.10 et 3.16). Pour la détermination des meilleurs paramètres par minimisation du χ^2 (cf Sect. 3.3.3), les spectres ont aussi été ré-échantillonnés à une même résolution spectrale pour toutes les observations ($0.7\,{\rm km\,s^{-1}}$ pour HDO et $0.6\,{\rm km\,s^{-1}}$ pour $H_2{}^{18}O$ et $H_2{}^{17}O$, ce qui correspond à la plus faible résolution spectrale des données HIFI).

De précédentes études (e.g. van Kempen et al. 2008) ont montré que, dans les enveloppes proto-stellaires, la poussière peut devenir optiquement épaisse, empêchant l'émission de l'eau venant du plus profond de l'enveloppe de s'échapper. Le continuum de la poussière pourrait donc cacher les raies de HDO et $H_2{}^{18}O$ aux plus hautes fréquences venant du *hot corino*. La profondeur optique de la poussière se calcule via la relation :

$$\tau = \int \kappa_\nu dl \tag{3.5}$$

avec

$$\kappa_\nu = \frac{\kappa\ 2.4\ uma\ n_{\rm H_2}}{gas/dust} \tag{3.6}$$

où κ est le coefficient d'absorption massique défini précédemment, $n_{\rm H_2}$ la densité de H_2, *uma* l'unité de masse atomique ($1\ uma = 1.66 \times 10^{-27}$ kg) et $gas/dust$ le rapport de masse gaz/poussière ($\sim$100). Dans notre cas, la profondeur optique de la poussière est toujours inférieure à 1 pour toute fréquence inférieure à 1500 GHz. Pour les transitions à des fréquences supérieures, l'opacité de la poussière excède de peu l'unité pour des températures bien au-dessus de 100 K. Par conséquent, pour IRAS 16293, l'opacité de la poussière ne devrait pas cacher les raies à haute fréquence de HDO et $H_2{}^{18}O$ puisque la poussière ne devient optiquement épaisse que dans les régions les plus profondes de l'enveloppe interne.

3.3.2 Les coefficients de collision de l'eau deutérée

Les coefficients collisionnels de l'eau deutérée utilisés dans cette étude ont été récemment calculés, à notre demande, par Faure et al. (2011) pour para–H_2 ($J_2 = 0, 2$) et ortho–H_2 ($J_2 = 1$). Ortho–H_2 et para–H_2 correspondent aux deux formes que peut prendre la molécule de dihydrogène selon l'alignement des spins nucléaires des deux noyaux d'hydrogène qui la composent. Les spins sont parallèles pour ortho–H_2 et anti-parallèles pour para–H_2. Ces coefficients de collision ont été déterminés pour des températures comprises entre 5 et 300 K, et pour toute transition avec une énergie de niveau inférieure à 444 K. Les coefficients de collision pour para–H_2 ont été sommés et moyennés en supposant une distribution thermique de $J_2 = 0, 2$. La méthodologie utilisée par Faure et al. (2011) est décrite en détail dans Scribano et al. (2010) et Wiesenfeld et al. (2011). Ces auteurs ont montré que les coefficients de collision de HDO avec H_2 étaient significativement plus grands, jusqu'à trois ordres de grandeur, que les coefficients de collision avec l'hélium déterminés par Green (1989) et normalisés par rapport à H_2, qui sont couramment employés dans les modèles astrophysiques (cf Fig. 3.6). Les taux de Green (1989) avec He doivent être multipliés par un facteur 1.35 pour être normalisés par rapport à H_2. En effet, les coefficients de collision varient en $1/\sqrt{\mu}$, μ étant la masse réduite du système. Ce facteur 1.35 correspond donc au rapport $\sqrt{\mu_{\mathrm{HDO-He}}/\mu_{\mathrm{HDO-H_2}}} = \sqrt{3.3/1.8}$. En raison de la différence des taux de Faure et al. (2011) et Green (1989), un impact significatif des nouveaux coefficients de collision est attendu dans la détermination des abondances interstellaires de HDO. Par la suite, nous avons supposé un rapport ortho/para de H_2 à l'équilibre thermodynamique local dans chaque couche de l'enveloppe, qui s'exprime par :

$$\left(\frac{n_o}{n_p}\right)_{ETL} = \frac{3\sum_{J\ \mathrm{impair}} (2J+1)\exp[-BJ(J+1)/T_L]}{\sum_{J\ \mathrm{pair}} (2J+1)\exp[-BJ(J+1)/T_L]}, \tag{3.7}$$

avec J le nombre quantique rotationnel, B la constante rotationnelle de H_2 ($B = 87.6$ K) et T_L la température locale. Le rapport ortho/para de H_2 à l'ETL est présenté en fonction de la température en Figure 3.7. Il est proche de 3 à haute température (T $\gtrsim$ 200 K) et diminue, quand la température décroît, jusqu'à tendre vers 0.

3.3.3 Modélisation de l'eau deutérée

Dans un premier temps, j'ai fait tourner une grille de modèles avec un saut en abondance à 100 K, qui correspond à la transition *hot corino*/enveloppe externe (Ceccarelli et al. 1996). L'abondance de l'eau est attendue plus élevée dans le *hot corino* que dans l'enveloppe externe, puisque les molécules d'eau contenues dans les manteaux de glace des grains sont sublimées, et donc libérées en phase gazeuse, quand la température dépasse 100 K (cf Sect. 1.2.5.2). Par la suite, nous désignerons l'abondance interne (c'est-à-dire l'abondance pour des températures $T \geq 100\,\mathrm{K}$) par X_{in} et l'abondance externe ($T < 100\,\mathrm{K}$) par X_{out}. Ce sont deux paramètres libres et les meilleurs paramètres du modèle sont déterminés par minimisation du χ^2. Pour calculer le χ^2 et déterminer les abondances respectant les limites à 3σ (99.73% de probabilité), deux approches ont été considérées. La première méthode est celle utilisée dans l'article publié relatif à cet étude (Coutens et al. 2012). Une deuxième méthode a ensuite été considérée. Les résultats obtenus avec cette autre méthode seront présentés. Dans les deux

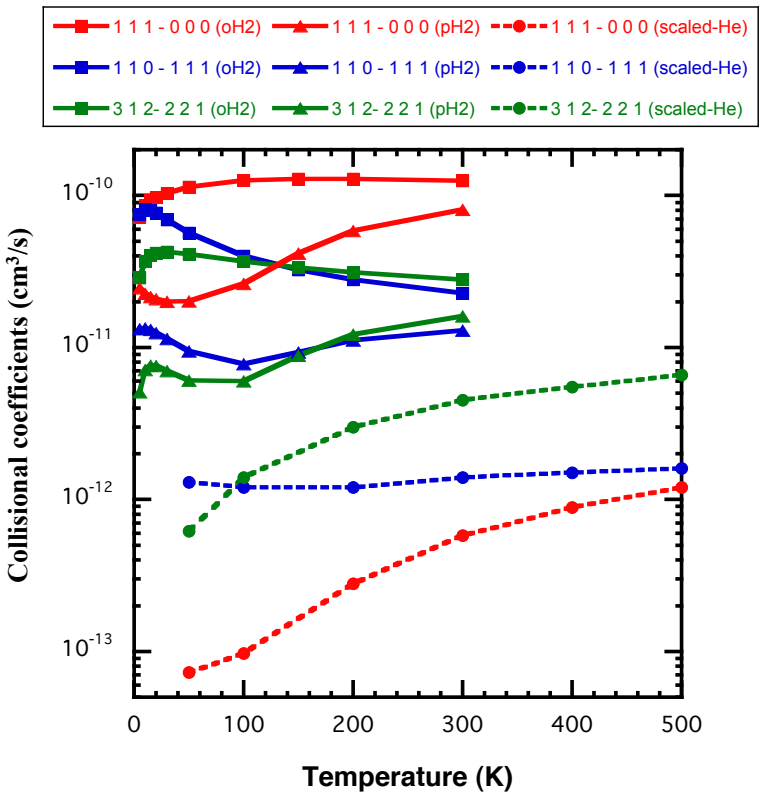


Figure 3.6 – Comparaison entre les coefficients de collision de HDO calculés par Green (1989) avec l'Hélium et normalisés par rapport à H_2 (indiqués par des ronds) et les nouveaux coefficients de collision déterminés par Faure et al. (2011) avec ortho et para–H_2 (indiqués par des carrés et des triangles respectivement).

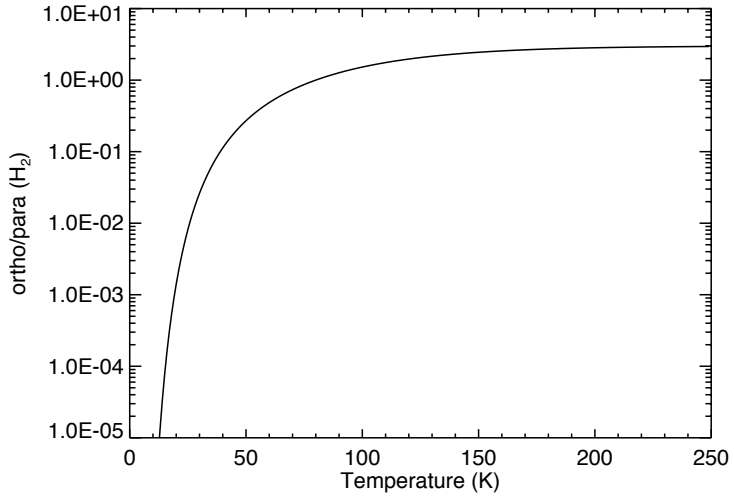


Figure 3.7 – Rapport ortho/para de H_2 à l'équilibre thermodynamique local.

cas, le χ^2 est calculé sur les profils des raies et non sur leurs flux intégrés uniquement, comme cela était fait il y a encore quelques années. Pour prendre en compte les profils et ne pas biaiser les valeurs de χ^2, les spectres observés ainsi que ceux modélisés ont, au préalable, été ré-échantillonnés à une même résolution spectrale (0.7 $\mathrm{km\,s^{-1}}$ pour HDO et 0.6 $\mathrm{km\,s^{-1}}$ pour $H_2{}^{18}O$, cf Table 3.1). Pour une gamme spectrale donnée, le même nombre de points est ainsi considéré pour chaque transition. En effet, si une raie présente une résolution spectrale de 1 $\mathrm{km\,s^{-1}}$ et une autre, 0.25 $\mathrm{km\,s^{-1}}$, la deuxième raie est alors pondérée d'un facteur 4 quand la première raie l'est d'un facteur 1. Le *rms*, variant en racine carrée de la résolution spectrale, est déterminé pour la résolution spectrale choisie pour le ré-échantillonnage.

Méthode du χ^2 n° 1 :

Cette première méthode consiste à calculer, à partir des spectres ré-échantillonnés, le χ^2 via la formule suivante :

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{n_{\mathrm{chan}}} \frac{(T_{\mathrm{obs},ij} - T_{\mathrm{mod},ij})^2}{rms_i^2 + (Cal_i \times T_{\mathrm{obs},ij})^2} \tag{3.8}$$

avec N le nombre de transitions i, n_{chan} le nombre de canaux j pour chaque transition, $T_{\mathrm{obs},ij}$ et $T_{\mathrm{mod},ij}$ l'intensité observée et prédite par le modèle respectivement dans le canal j de la transition i, rms_i le *rms* à la résolution spectrale de 0.7 $\mathrm{km\,s^{-1}}$ (ou 0.6 $\mathrm{km\,s^{-1}}$, cf Table 3.1) et Cal_{i} l'incertitude de calibration. Nous avons supposé une incertitude de calibration totale de 15% pour chaque transition détectée. En effet, en considérant les limites supérieures des erreurs relatives au budget de calibration (Roelfsema et al. 2012), une incertitude de calibration de 15% pour les raies HIFI paraît raisonnable. Cette valeur semble également convenable pour les raies IRAM (Caux et al. 2011) et JCMT, au vu des conditions d'observation. Les contours de χ^2 à 1σ, 2σ et 3σ, qui représentent respectivement 68.26%, 95.44% et 99.73% d'englober les vraies valeurs de X_{in} et X_{out}, ont été calculés avec la méthode de Lampton et al. (1976) : ils correspondent aux contours pour lesquels $\chi^2{=}\chi^2_{\mathrm{min}}{+}2.3$ (1σ), $\chi^2{=}\chi^2_{\mathrm{min}}{+}6.17$ (2σ) et $\chi^2{=}\chi^2_{\mathrm{min}}{+}11.8$ (3σ), quand le nombre de paramètres ajustables est égal à 2 (ici X_{in} et X_{out}), χ^2_{min} étant le χ^2 non-réduit minimum. Le χ^2 réduit est égal à :

$$\chi^2_{\mathrm{red}} = \frac{\chi^2}{N_p - p}, \tag{3.9}$$

N_p étant le nombre de points utilisés dans le calcul du χ^2, soit le nombre de transitions (N) multiplié par le nombre de points (n_{chan}) dans la gamme spectrale désirée, et p le nombre de paramètres ajustables (2 dans notre cas). Pour des résultats fiables, la méthode de Lampton et al. (1976) repose néanmoins sur la condition d'une valeur de χ^2_{min} à peu près égale à $N_p - p$, c'est-à-dire $\chi^2_{\mathrm{min\ red}} = 1$. Or nous verrons par la suite que, dans le cas de notre modélisation de HDO et $H_2{}^{18}O$, les valeurs de χ^2 réduits sont de l'ordre de 2. De telles valeurs ne sont pas aberrantes. Les estimations de meilleurs paramètres restent dignes de confiance. Mais les valeurs représentant les contours à 1σ, 2σ et 3σ pourraient être sous-estimées, en raison d'un χ^2_{min} supérieur à $N_p - p$. Pour correctement déterminer les modèles respectant le critère à 3σ (99.73% de fiabilité), nous avons donc mis au point une deuxième méthode de minimisation de χ^2 afin de respecter la condition $\chi^2_{\mathrm{min}} = 1$.

Méthode du χ^2 n° 2 :

Avec cette nouvelle méthode, le χ^2 est calculé ainsi :

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{n_{\rm chan}} \frac{(T_{{\rm obs},ij} - T_{{\rm mod},ij})^2}{(\alpha\ rms_i)^2} \tag{3.10}$$

Cette fois-ci, on introduit un facteur α appliqué sur le rms de manière à ce que le $\chi^2_{\rm min}$ soit égal à $N_p - p$, i.e. $\chi^2_{\rm min\ red} = 1$. Nous ne prenons plus en compte d'incertitude de calibration. En effet, cette incertitude de calibration peut biaiser les résultats. Même si l'incertitude est de 20% pour une certaine transition, cela ne veut pas dire que l'erreur est de 20% et le profil observé peut être en accord avec le profil "réel" à moins de 5%. Comme il nous est impossible de savoir, sur quelles transitions, l'erreur peut être importante ou pas, nous préférons directement appliquer un facteur sur le rms (le même pour chaque transition). Sachant que le rms est divisé d'un facteur $\sqrt{2}$ quand la largeur d'un canal est multiplié d'un facteur 2, cette formule peut s'appliquer à des profils modélisés et observés non ré-échantillonnés à une même résolution spectrale pour toutes les transitions. On notera qu'avec cette méthode, il est néanmoins nécessaire de s'assurer que le coefficient α ne soit pas trop grand. Une valeur $\alpha \lesssim 3$ est acceptable pour dire que le type de modèle utilisé est fiable.

Une grille de modèle a été lancée avec un profil d'abondance présentant un saut à 100 K. Le meilleur modèle obtenu avec la méthode n° 1 est celui pour lequel l'abondance interne est $X_{\rm in} = 1.9 \times 10^{-7}$ et l'abondance externe $X_{\rm out} = 5 \times 10^{-11}$, le χ^2 réduit étant de 3.2. La minimisation avec la méthode n° 2 prédit, quant à elle, $X_{\rm in} = 1.7 \times 10^{-7}$ et $X_{\rm out} = 9 \times 10^{-11}$ avec un paramètre α égal à 3.8. Ces modèles (ainsi que tout autre modèle de la grille) ne prédisent cependant pas de raies d'absorption suffisamment profondes par comparaison aux observations (cf Fig. 3.8). Pour correctement reproduire la profondeur de l'absorption des raies à 465 et 894 GHz, sans ajouter d'émission supplémentaire à ces raies-là ainsi qu'aux autres, il est nécessaire d'ajouter une couche d'absorption en avant-plan de l'enveloppe d'IRAS 16293. On notera que les résultats dépendent uniquement de la densité de colonne de HDO dans cette couche et qu'ils sont insensibles à la densité (pour des densités inférieures à $\sim 10^5$ cm^{-3}) et à la température (pour des températures inférieures à $\sim$30 K). La densité de colonne de HDO dans cette couche d'absorption doit être d'environ 2.3×10^{13} cm^{-2}. Pour comprendre à quoi correspond cette couche d'absorption, nous pouvons considérer deux options :

- Premièrement, la structure de la source pourrait être étendue à un rayon externe plus grand de manière à inclure la contribution totale du nuage moléculaire, sans avoir besoin d'introduire de mécanismes physico-chimiques à l'origine d'une modification de l'abondance de HDO. Cela revient à supposer une abondance constante égale à celle de l'enveloppe externe dans cette couche (cf Hypothèse 1 de la Figure 3.9), ce qui implique donc une colonne de densité de H_2 dans cette couche d'environ 2.9×10^{23} cm^{-2}. Néanmoins, cette valeur est exclue car bien trop importante pour un nuage moléculaire. La densité de colonne de N(H_2) dans le nuage de ρ Oph a été estimée à $\sim 1.5 \times 10^{22}$ cm^{-2} par van Dishoeck et al. (1995) à partir de données C^{18}O à une position située à 120″ au Sud de la source et à $\gtrsim 5 \times 10^{22}$ cm^{-2} par Caux et al. (1999) d'après une

ré-estimatimation de l'abondance de CO à partir de mesures de l'émission de l'oxygène atomique en direction du nuage L1689N avec l'instrument LWS de l'Observatoire spatial ISO. Ajouter un nuage moléculaire avec ces caractéristiques à la structure déterminée par Crimier et al. (2010) ne permet pas une absorption suffisante des raies fondamentales de HDO. Cette hypothèse doit donc être rejetée.

- La seule façon d'expliquer la profondeur des raies en absorption est donc de supposer une abondance dans la couche d'absorption supérieure à l'abondance déterminée dans la couche froide d'IRAS 16293. Une telle structure a déjà été évoquée pour plusieurs molécules comme le monoxyde de carbone, CO, et le formaldéhyde, H_2CO (Schöier et al. 2004; Jørgensen et al. 2004, 2005b) et est présentée en tant qu'Hypothèse 2 sur la Figure 3.9. L'augmentation de l'abondance dans les régions les plus externes de l'enveloppe est expliquée par un temps de déplétion plus long que la durée de vie de la proto-étoile ($\sim 10^4$–10^5 ans) pour des densités de H_2 inférieures à $\sim 10^4$–10^5 cm^{-3} (e.g., Caselli et al. 1999; Jørgensen et al. 2004). Le temps de déplétion peut être estimé via l'équation suivante :

$$t_{depletion} \sim \frac{1}{n_{gr}\sigma_{gr}v} \tag{3.11}$$

avec v la vitesse thermique de la molécule, $n_{gr}\sigma_{gr}$ la densité de grains et σ_{gr} la section efficace du grain. Pour une distribution de taille de grain classique, $n_{gr}\sigma_{gr}$ vaut $\sim 2 \times 10^{-21}\ n$ cm^{-1} où n est la densité de noyaux d'hydrogène en phase gazeuse. Dans le cas de l'eau, le temps de déplétion est donc, pour n(H_2) $\sim 10^4$ cm^{-3}, d'environ 6×10^4 ans. Il pourrait donc être supérieur à la durée de vie de la proto-étoile.

D'autre part, Hollenbach et al. (2009) ont montré qu'en bordure des nuages moléculaires, les manteaux de glace des grains pouvaient être photo-désorbés par le champ UV, donnant naissance à une couche étendue avec une abondance d'eau élevée à des extinctions visuelles $A_V \sim 1$–4 mag (pour $G_0 = 1$). Le modèle chimique d'Hollenbach et al. (2009) est basé sur un code de région de photodissociation dans lequel le collage des espèces à la surface des grains, la chimie à la surface des grains et la désorption (dont la photo-désorption par le champ UV) ont été inclus, permettant ainsi de prédire la structure chimique des nuages moléculaires en fonction de la profondeur dans le nuage, pour différentes densités n et différents flux UV incidents G_0. En supposant une extinction visuelle $A_V \sim 1$–4 mag et en utilisant la relation $N(H_2)/A_V = 9.4 \times 10^{20}$ cm^{-2} mag^{-1} (Frerking et al. 1982), l'abondance de HDO dans cette riche couche d'eau créée par la photo-désorption des glaces devrait être d'environ 6×10^{-9} – 2.4×10^{-8}. Nous verrons par la suite qu'en analysant les raies de $H_2{}^{18}O$, cette hypothèse est tout à fait en accord avec les prédictions théoriques de Hollenbach et al. (2009).

L'absorption des raies fondamentales à 465 et 894 GHz étant reproduites avec cette couche externe (cf Fig. 3.8), une deuxième grille de modèles a été lancée en l'ajoutant à la structure de Crimier et al. (2010). Le meilleur ajustement est obtenu pour $X_{\rm in} = 1.7 \times 10^{-7}$ et $X_{\rm out} = 8 \times 10^{-11}$ en utilisant la méthode n$^{\rm o}$ 1. Le χ^2 réduit est d'environ 2.4. Les contours de χ^2 à 1σ,

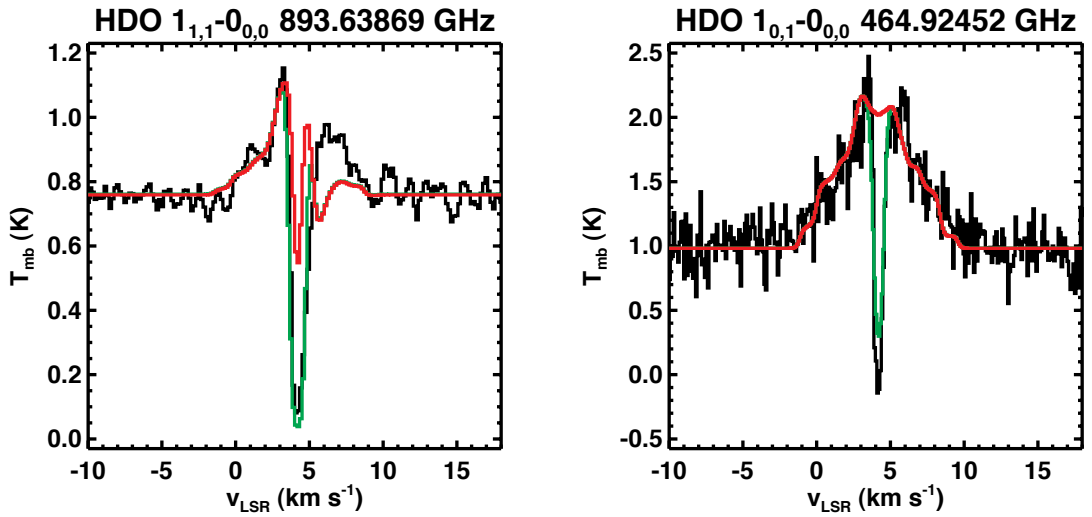


Figure 3.8 – En *noir* : les deux transitions fondamentales $1_{1,1}$–$0_{0,0}$ et $1_{1,0}$–$0_{0,0}$ de HDO observées respectivement à 894 GHz avec HIFI et à 465 GHz avec JCMT, qui montrent de profondes absorptions. En *rouge* : la modélisation de HDO sans couche d'absorption. En *vert* : la modélisation de HDO avec une couche d'absorption dont la densité de colonne de HDO est d'environ $\sim 2.3 \times 10^{13}$ cm^{-2}.

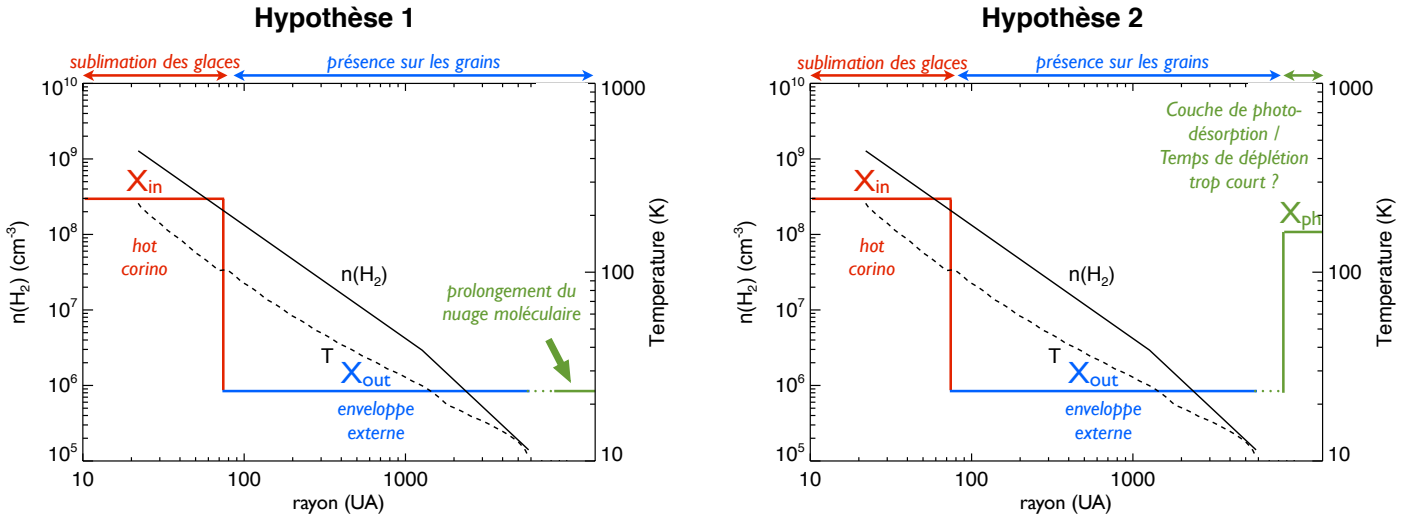


Figure 3.9 – Hypothèses sur les profils en abondance de HDO afin de reproduire les absorptions à 465 et 894 GHz. Seule l'Hypothèse 2 est compatible avec la densité de colonne de H_2 du nuage moléculaire.

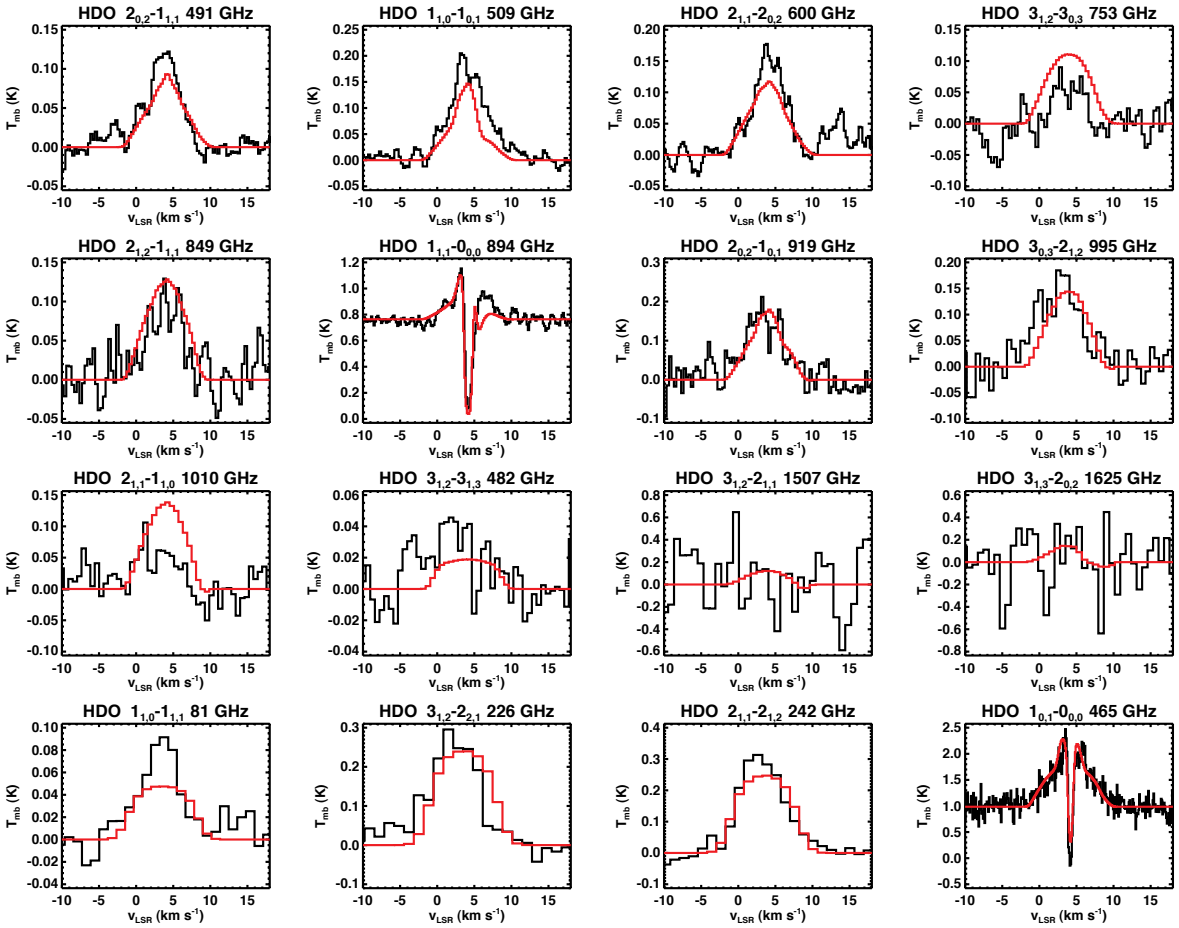


Figure 3.10 – En *noir* : les raies de HDO observées avec HIFI, IRAM et JCMT en direction de la proto-étoile IRAS 16293 . En *rouge* : le meilleur modèle obtenu en ajoutant une couche d'absorption avec une densité de colonne de HDO de $\sim 2.3 \times 10^{13}$ cm^{-2} à la structure. L'abondance interne est de 1.8×10^{-7} et l'abondance externe de 8×10^{-11}.

2σ et 3σ sont présentés en Figure 3.11. Les intervalles de confiance de $X_{\rm in}$ et $X_{\rm out}$ à 3σ sont 1.53×10^{-7} – 2.21×10^{-7} et 4.6×10^{-11} – 1.0×10^{-10}, respectivement. Avec la méthode n° 2, le meilleur modèle est celui avec $X_{\rm in} = 1.8 \times 10^{-7}$ et $X_{\rm out} = 8 \times 10^{-11}$. Ces valeurs sont totalement en accord avec celles de la première méthode. Le paramètre α appliqué au *rms* est d'environ 2.3. Les contours de χ^2 sont superposés à ceux de la méthode n° 1, en Figure 3.11. L'incertitude à 3σ est légérement plus importante pour l'abondance interne avec cette deuxième méthode. La modélisation de toutes les données HDO de HIFI, IRAM et JCMT est présentée en Figure 3.10. Il s'agit du meilleur modèle obtenu en utilisant la méthode de minimisation de χ^2 n° 2. Pour la méthode n° 1, on se référera à la Figure 4 de Coutens et al. (2012), qui est relativement similaire.

Dans le *hot corino*, la plupart des raies de HDO sont optiquement épaisses, à l'exception des transitions à 81, 226, 242 et 482 GHz qui montrent une opacité $\lesssim 1$. La Figure 3.12 repré-

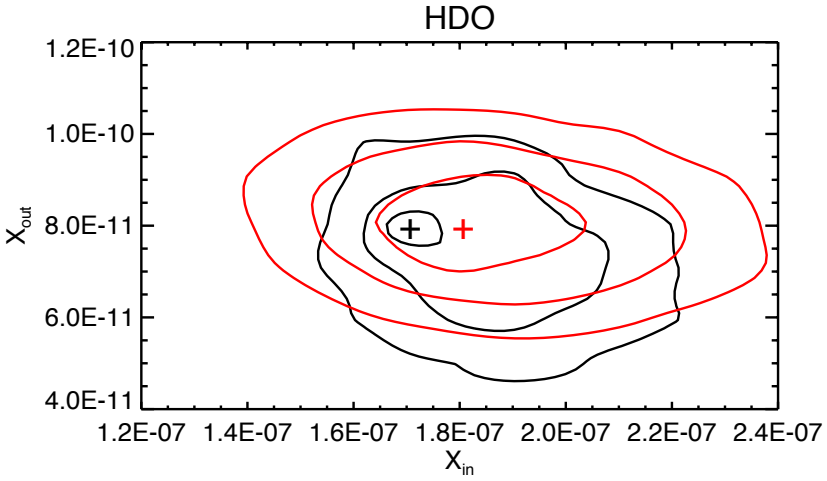


Figure 3.11 – Contours de χ^2 à 1σ, 2σ et 3σ obtenus en ajoutant une couche d'absorption avec une densité de colonne de HDO de $\sim 2.3 \times 10^{13}$ cm^{-2} à la structure d'IRAS 16293 et en utilisant les coefficients de collision de HDO avec ortho et para–H_2 determinés par Faure et al. (2011). Le meilleur modèle est représenté par le symbole "+". En *noir* : avec la méthode de χ^2 n° 1. En *rouge* : avec la méthode de χ^2 n° 2.

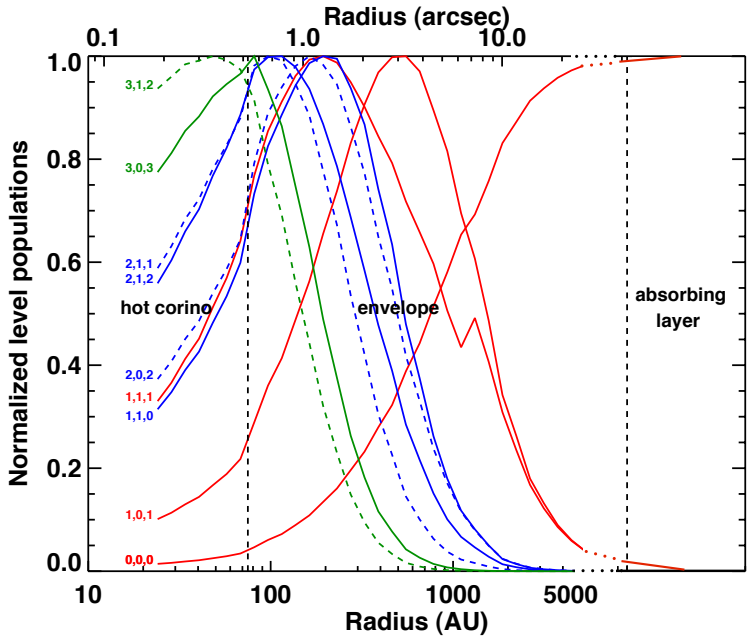


Figure 3.12 – Populations de niveaux de HDO normalisées calculées par RATRAN en fonction du rayon de l'enveloppe proto-stellaire. Pour éviter des confusions, les populations des niveaux $2_{0,2}$, $2_{1,1}$ et $3_{1,2}$ sont indiquées par des traits pointillés. Le saut de population du niveau $1_{1,1}$ visible à ∼1300 AU est un artefact dû au changement du champ de vitesse à l'interface entre l'enveloppe en effondrement et l'enveloppe statique.

sente les populations normalisées de différents niveaux (jusqu'au niveau $3_{1,2}$) en fonction du rayon de la proto-étoile, calculées par RATRAN via l'équation d'équilibre statistique. Cette figure montre que la couche d'absorption est principalement contrainte par les transitions fondamentales, $1_{1,1}$–$0_{0,0}$ et $1_{0,1}$–$0_{0,0}$. En raison de l'opacité des raies ainsi que d'une émission de la plupart des raies venant à la fois des régions externes et internes de l'enveloppe, une simple étude par diagramme rotationnel ne paraît pas judicieuse. En effet, comme expliqué en Section 2.3.2, pour obtenir un ajustement linéaire et pouvoir en déduire une densité de colonne et une température d'excitation, il est nécessaire qu'il n'y ait qu'une seule composante en émission et que les raies soient optiquement minces.

La transition $1_{1,0}$–$1_{1,1}$ observée à 81 GHz avec le télescope de l'IRAM n'est pas correctement reproduite par le meilleur modèle. Le désaccord pourrait être dû à la présence d'émission d'une transition d'une autre molécule à cette fréquence. Néanmoins aucune espèce n'est présente, dans les bases de données spectroscopiques JPL et CDMS, à cette fréquence. La calibration pourrait aussi être remise en cause. Mais cela semble improbable puisque le profil modélisé diffère du profil observé. Une autre explication pourrait venir de l'hypothèse de symétrie sphérique. Des données interférométriques de la transition $3_{1,2}$–$2_{2,1}$ de HDO montrent qu'en plus de l'émission principale venant de la source A, une composante plus faible de HDO est émise à environ $6''$ du cœur A (cf Fig. 3.5 ; Jørgensen et al. 2011). La taille du lobe de l'IRAM à 81 GHz contient cette composante et pourrait expliquer le manque de flux prédit ainsi que le profil de raie différent. Cette hypothèse semble compatible avec les raies mesurées avec HIFI à basse fréquence (491, 509 et 600 GHz, lobe $\gtrsim 36''$) pour lesquels le modèle de meilleur ajustement prédit moins de flux qu'observé.

Les études précédentes menées sur l'eau deutérée utilisaient les coefficients collisionnels calculés par Green (1989) avec l'hélium (et normalisés par rapport à H_2). J'ai donc fait tourner une grille de modèles avec ces taux pour comparaison. Le meilleur ajustement obtenu pour toutes les transitions considérées correspond à une abondance interne $X_{\rm in} = 2.0 \times 10^{-7}$ et une abondance externe $X_{\rm out} = 1 \times 10^{-11}$ avec la méthode n° 1. L'abondance interne est similaire à celle trouvée avec les coefficients de collision déterminés par Faure et al. (2011). Cependant, l'abondance externe est inférieure d'un facteur 8. Le χ^2 réduit est aussi plus grand ($\chi^2_{\rm red} = 2.8$), ce qui montre que les observations sont mieux reproduites avec les taux calculés avec H_2 (plus représentatifs de la réalité) qu'avec He. Il est intéressant de noter qu'avec la méthode de χ^2 n° 2, le meilleur ajustement est obtenu pour $X_{\rm in} = 2.0 \times 10^{-7}$ et $X_{\rm out} = 1.2 \times 10^{-10}$, soit des valeurs beaucoup plus proches de celles obtenues avec les coefficients de collision avec ortho et para–H_2. La méthode de χ^2 n° 2 semblerait donc plus fiable au vu de ces résultats. Le paramètre α appliqué sur le *rms* est de 2.9. Il est donc plus élevé que la valeur obtenue avec les nouveaux taux de collision (~ 2.3) et confirme donc encore la meilleure fiabilité de ces coefficients de collision.

3.3.4 Modélisation de l'eau

Pour déterminer l'abondance de l'eau à travers l'enveloppe, j'ai utilisé les données $H_2{}^{18}O$ du relevé spectral HIFI (cf Table 3.1). En effet, les profils des raies de $H_2{}^{16}O$ suggèrent, par la présence d'ailes, que leur émission est contaminée par les jets moléculaires. Les raies $H_2{}^{16}O$

sont aussi fortement opaques. Elles montrent une largeur de raie $\gtrsim 10\,\mathrm{km\,s^{-1}}$, alors que les largeurs de raie de $H_2{}^{18}O$ sont similaires à celles des raies de HDO (cf Fig. 3.13, $\sim 5\ \mathrm{km\,s^{-1}}$). Aucune aile n'est, par contre, visible sur les raies de $H_2{}^{18}O$ détectées (cf Fig. 3.16). Par conséquent, les jets ne contribuent probablement pas de manière significative à l'émission des raies de $H_2{}^{18}O$. Pour obtenir l'abondance de $H_2{}^{16}O$, on utilisera un rapport isotopique : $^{16}O/^{18}O \sim 500$, estimé à partir d'observations de plusieurs isotopes de CO et H_2CO (Wannier 1980; Wilson & Rood 1994). Les isotopes de l'oxygène ne sont pas fractionnés (e.g. Langer et al. 1984). Une étude directe sur les données $H_2{}^{16}O$ n'est donc pas nécessaire.

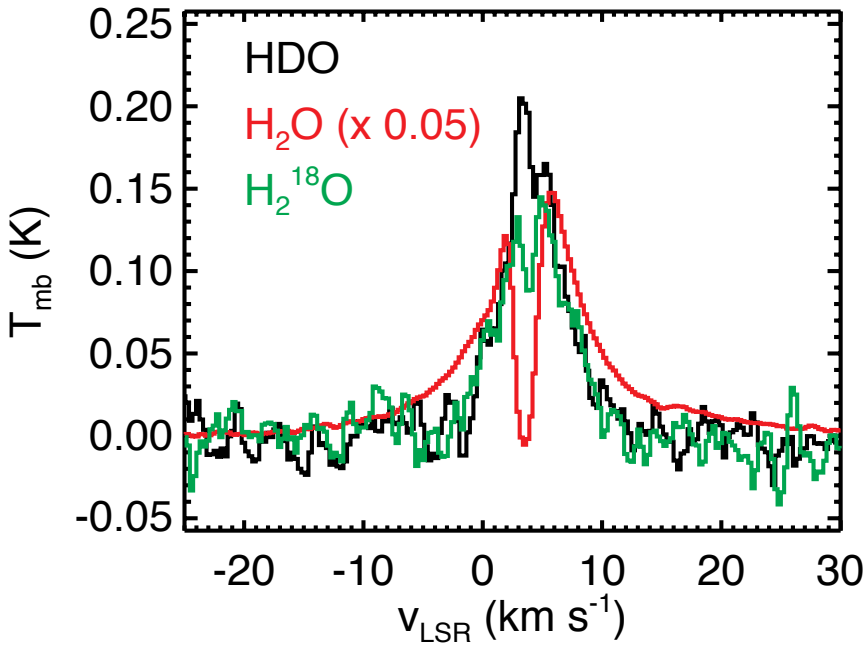


Figure 3.13 – Comparaison des profils des transitions $1_{1,0}$–$1_{0,1}$ de HDO (en noir), $H_2{}^{16}O$ (en rouge) et $H_2{}^{18}O$ (en vert) à 509, 557 et 548 GHz, respectivement. L'intensité de la raie de H_2O a été multipliée par 0.05 pour la comparaison.

Dans un premier temps, j'ai utilisé les coefficients de collision de H_2O avec ortho et para–H_2 déterminés par Faure et al. (2007) (et utilisés dans l'article). Les nouveaux taux déterminés par Daniel et al. (2011) n'étaient alors pas encore disponibles. La même surface d'énergie potentielle (Faure et al. 2005; Valiron et al. 2008) a été prise en compte dans les deux cas. La différence provient de la méthode de calcul utilisée. Daniel et al. (2011) ont réalisé des calculs quantiques avec la méthode de *Close Coupling*, tandis que Faure et al. (2007) ont utilisé une méthode QCT (*Quasi-Classical Trajectory*), moins précise.

Le rapport ortho/para de $H_2{}^{18}O$ a été supposé égal à 3 pour la modélisation (cf Sect. 1.2.5.3). Comme pour HDO, j'ai fait tourner, dans un premier temps, une grille de modèles pour différentes abondances interne et externe sans ajouter de couche d'absorption. Les meilleurs paramètres de la minimisation du χ^2 sont $X_{\mathrm{in}}(H_2{}^{18}O) = 1 \times 10^{-8}$ et $X_{\mathrm{out}}(H_2{}^{18}O)$

$= 3 \times 10^{-11}$ et le χ^2 réduit est d'environ 1.9 (méthode n° 1). L'abondance interne de l'eau est donc de 5×10^{-6}, alors que l'abondance externe est de 1.5×10^{-8}. La Figure 3.14 montre les contours de χ^2 à 1σ, 2σ et 3σ. Une incertitude de calibration de 15% a été supposée pour la transition à 548 GHz et les tentatives de détection (1096, 1102, 994 et 745 GHz). A 3σ, l'abondance externe de $H_2{}^{18}O$ varie entre 9×10^{-12} et 4.9×10^{-11}, alors que l'abondance interne est dans l'intervalle 7.6×10^{-9} – 2.1×10^{-8}. Avec la méthode de minimisation de χ^2 n° 2, le meilleur modèle est obtenu pour $X_{\rm in}(H_2{}^{18}O) = 2 \times 10^{-8}$ et $X_{\rm out}(H_2{}^{18}O) = 3 \times 10^{-11}$ avec $\alpha = 1.7$. Les contours de χ^2 sont superposés à ceux déterminés avec la méthode n° 1 en Figure 3.14.

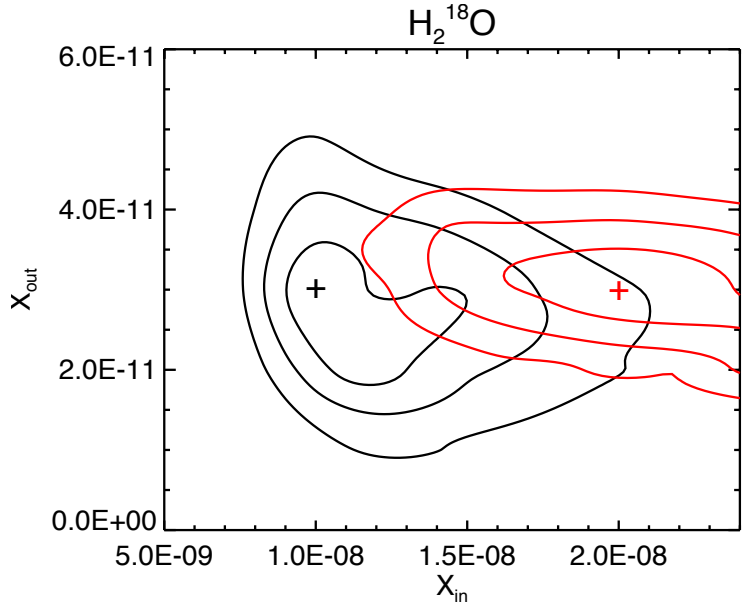


Figure 3.14 – Contours de χ^2 à 1σ, 2σ et 3σ obtenus pour $H_2{}^{18}O$ avec les coefficients de collision avec ortho et para–H_2 determinés par Faure et al. (2007). Le meilleur modèle est représenté par le symbole "+". En *noir* : avec la méthode de χ^2 n° 1. En *rouge* : avec la méthode de χ^2 n° 2. *NB :* La grille utilisée avec la méthode n° 1 n'était pas assez grande pour la méthode n° 2. On renvoie aux résultats obtenus avec les coefficients de Daniel et al. (2011) pour une meilleure comparaison des méthodes.

Une comparaison a ensuite été menée avec les nouveaux coefficients de H_2O déterminés par Daniel et al. (2011). Les meilleurs paramètres sont $X_{\rm in}(H_2{}^{18}O) = 1 \times 10^{-8}$ et $X_{\rm out}(H_2{}^{18}O) = 3 \times 10^{-11}$ avec la méthode n° 1 ($\chi^2_{\rm red} = 1.9$) et $X_{\rm in}(H_2{}^{18}O) = 2 \times 10^{-8}$ et $X_{\rm out}(H_2{}^{18}O) = 3 \times 10^{-11}$ avec la méthode n° 2 ($\alpha = 1.6$). Les nouveaux coefficients de collision ne changent pas la détermination du meilleur modèle par rapport aux taux de collision de Faure et al. (2007). De même, on peut voir que les contours de χ^2 sont relativement similaires (cf Figs. 3.14 et 3.15 avec les coefficients de collision de Faure et al. (2007) et de Daniel et al. (2011) respectivement). Les intervalles de confiance de $X_{\rm in}$ et $X_{\rm out}$ à 3σ sont néanmoins différents entre les deux méthodes de minimisation du χ^2, notamment pour l'abondance interne. En

effet, l'intervalle de confiance est de 7.0×10^{-9} – 1.8×10^{-8} avec la méthode n° 1 alors qu'il est un peu plus large avec la méthode n° 2 : 9.5×10^{-9} – 8.0×10^{-8}. Pour l'abondance externe, il est de 1.0×10^{-11} – 4.7×10^{-11} avec la méthode n° 1 et de 1.4×10^{-11} – 4.5×10^{-11} avec la méthode n° 2, confirmant la bonne contrainte du $X_{\rm out}$ quelle que soit la méthode utilisée.

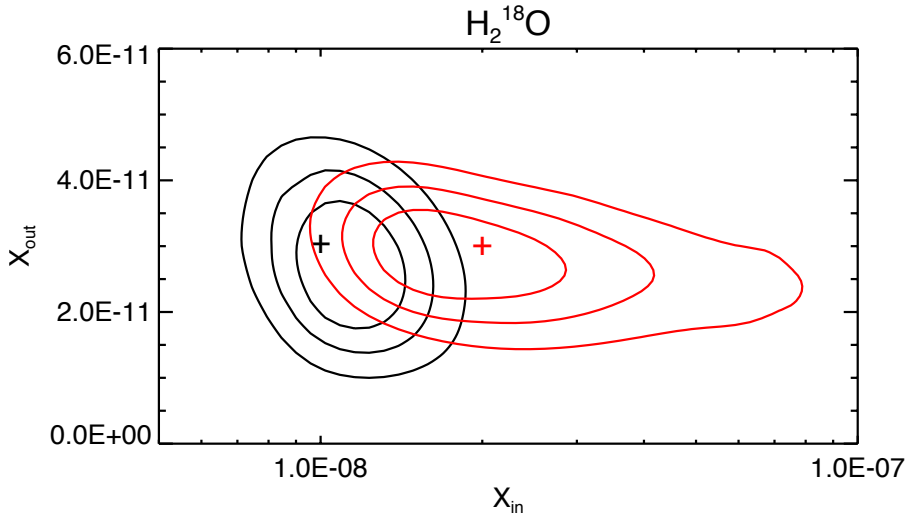


Figure 3.15 – Contours de χ^2 à 1σ, 2σ et 3σ obtenus pour $H_2{}^{18}O$ avec les coefficients de collision avec ortho et para–H_2 determinés par Daniel et al. (2011). Le meilleur modèle est représenté par le symbole "+". En *noir* : avec la méthode de χ^2 n° 1. En *rouge* : avec la méthode de χ^2 n° 2.

En utilisant les meilleurs modèles obtenus pour $X_{\rm in}$ et $X_{\rm out}$, il est nécessaire, pour reproduire la faible absorption de la transition $1_{1,0}$–$1_{0,1}$ à 548 GHz, d'ajouter une couche d'absorption avec une densité de colonne de $H_2{}^{18}O$ d'environ 1×10^{12} cm^{-2}. Pour des densités de colonne plus élevées, les modèles prédisent des absorptions trop profondes pour les transitions fondamentales ortho et para. Pour une extinction visuelle $A_V \sim 1$–4 mag, l'abondance de H_2O dans la couche de photo-désorption est d'environ 1.3 – 5.3×10^{-7}. Ces valeurs sont parfaitement en accord avec les prédictions du modèle de Hollenbach et al. (2009) de 1.5 – 3×10^{-7}. Les prédictions du meilleur modèle obtenu avec la méthode n° 2 sont montrées en Figure 3.16. La Figure 10 de Coutens et al. (2012) montre celles obtenues avec la méthode n° 1. Nous ne pouvons pas exclure une contribution des jets moléculaires à la vue du profil de la raie à 548 GHz, mais cette contribution est très probablement négligeable pour les autres transitions.

Dans le *hot corino*, parmi les transitions de ortho–$H_2{}^{18}O$ et para–$H_2{}^{18}O$, seules les raies à 489, 1181, 970, 1189 et 1606 GHz montrent une opacité inférieure à 1. L'émission des transitions vient à la fois du *hot corino* et de l'enveloppe externe (cf Fig. 3.17). Une étude par diagramme rotationnel n'est donc pas adéquate.

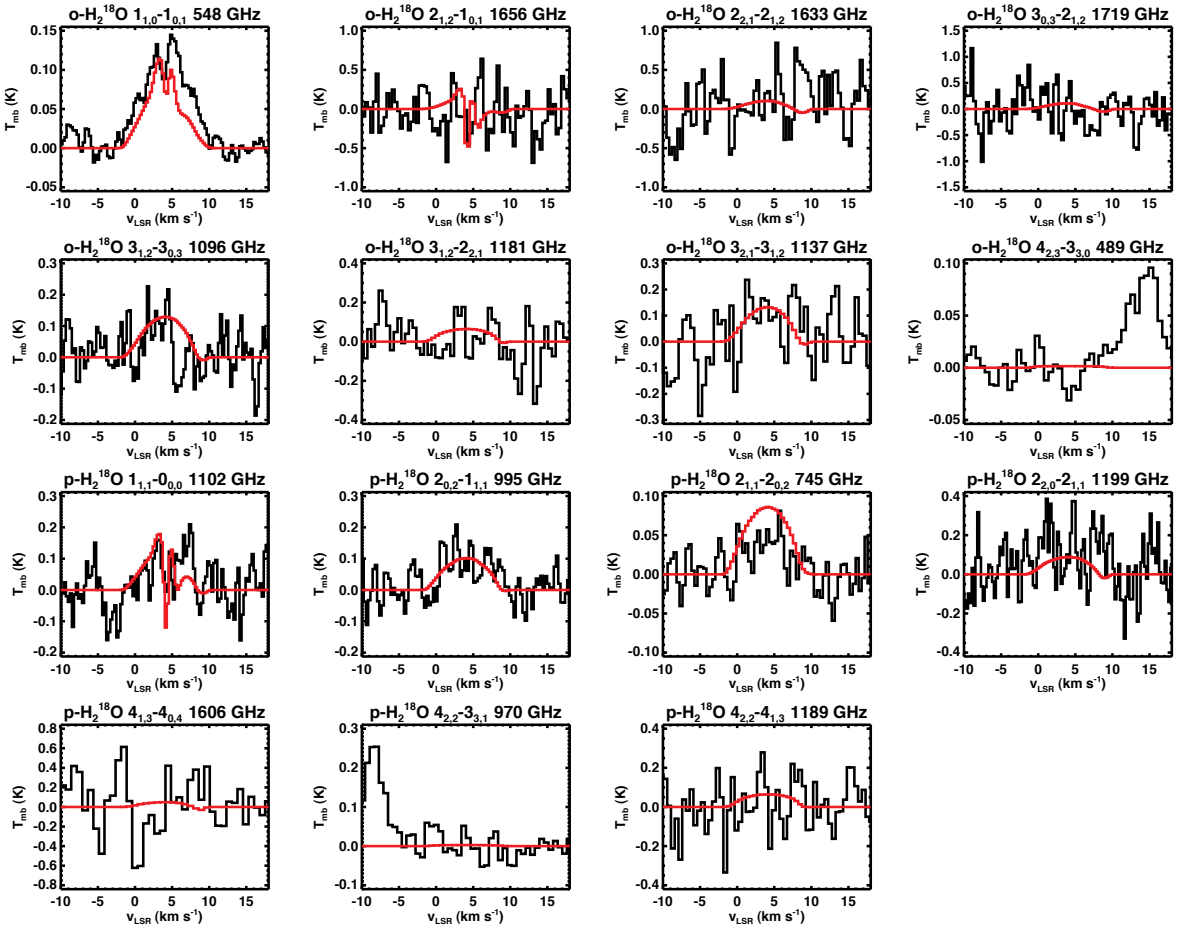


Figure 3.16 – En *noir* : les raies de $H_2{}^{18}O$ observées avec HIFI. En *rouge* : le meilleur ajustement obtenu en ajoutant une couche d'absorption avec une densité de colonne de $H_2{}^{18}O$ de 1×10^{12} cm^{-2}. L'abondance interne est de 1×10^{-8} et l'abondance externe est de 3×10^{-11}. La raie détectée à une vitesse de 15 km s^{-1} dans le panneau de la transition à 489 GHz est une raie de CH_3OH à 489.0368 GHz. La raie observée à -10 km s^{-1} dans le panneau de la transition à 970 GHz est une raie de para–H_2O à 970.3152 GHz.

La transition $1_{1,0}$–$1_{0,1}$ de ortho–$H_2{}^{17}O$ à 552 GHz a aussi été détectée. Pour vérifier la validité des résultats, j'ai fait tourner un modèle similaire à ce qui a été fait pour $H_2{}^{18}O$, en supposant un rapport $^{18}O/^{17}O$ de 4, déterminé par Wouterloot et al. (2008) dans le milieu interstellaire local à partir de données $C^{18}O$ et $C^{17}O$. La Figure 3.18 montre les modèles prédits pour la raie à 552 GHz ainsi que la raie fondamentale $1_{1,1}$–$0_{0,0}$ de para–$H_2{}^{17}O$ non détectée à 1107 GHz pour les meilleurs paramètres de $H_2{}^{18}O$ obtenus avec les deux méthodes de minimisation du χ^2, i.e. pour une abondance interne de $H_2{}^{17}O$ de 2.5×10^{-9} et une abondance externe de $H_2{}^{17}O$ de 7.5×10^{-12} avec la méthode n° 1 et pour une abondance interne de $H_2{}^{17}O$ de 5.0×10^{-9} et une abondance externe de $H_2{}^{17}O$ de 7.5×10^{-12} avec la méthode n° 2. Nous voyons que les prédictions de $H_2{}^{17}O$ sont en accord avec les résultats de $H_2{}^{18}O$, confirmant les abondances déterminées pour l'eau.

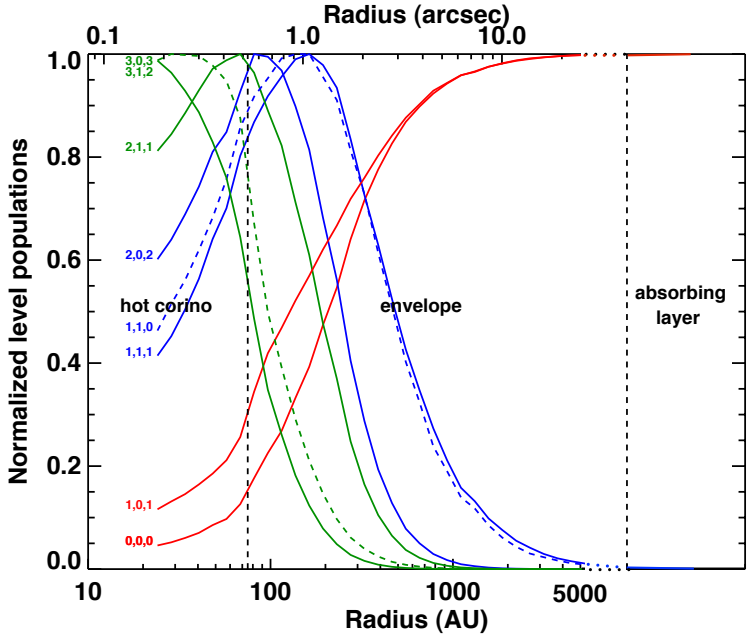


Figure 3.17 – Populations de niveaux de $H_2{}^{18}O$ normalisées calculées par RATRAN en fonction du rayon de l'enveloppe proto-stellaire. Pour éviter des confusions, les populations des niveaux $1_{1,0}$ et $3_{0,3}$ sont indiquées par des traits pointillés.

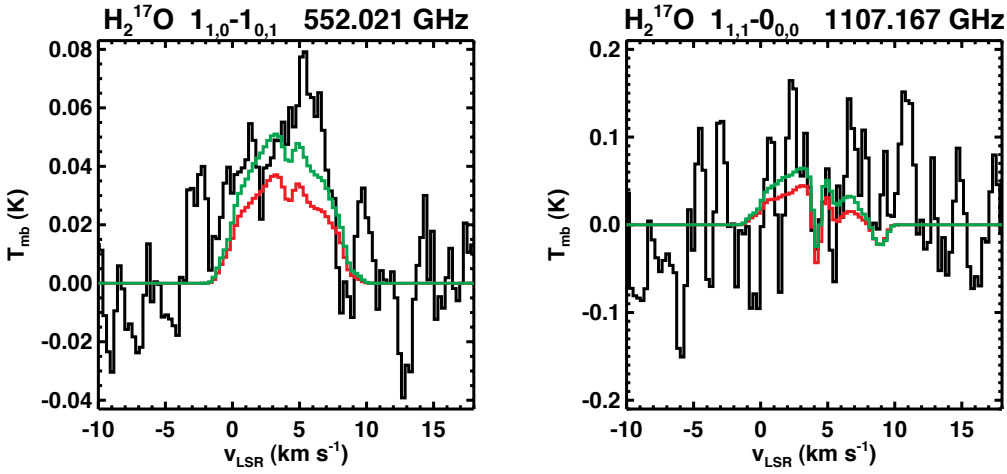


Figure 3.18 – En *noir* : Transitions fondamentales de $H_2{}^{17}O$ observées avec HIFI. En *rouge* : modèle obtenu pour une abondance interne de $H_2{}^{17}O$ de 2.5×10^{-9}, une abondance externe de $H_2{}^{17}O$ de 7.5×10^{-12} et une densité de colonne de $H_2{}^{17}O$ dans la couche d'absorption de 2.5×10^{11} cm^{-2}. En *vert* : modèle obtenu pour une abondance interne de $H_2{}^{17}O$ de 5.0×10^{-9}, une abondance externe de $H_2{}^{17}O$ de 7.5×10^{-12} et une densité de colonne de $H_2{}^{17}O$ dans la couche d'absorption de 2.5×10^{11} cm^{-2}.

3.3.5 Modélisation de l'eau lourde

Deux transitions d'eau lourde ont été observées dans la proto-étoile IRAS 16293 : la transition fondamentale de para–D_2O à 317 GHz observée avec le JCMT (Butner et al. 2007) et la transition fondamentale de ortho–D_2O observée à 607 GHz avec l'instrument HIFI (Vastel et al. 2010), visibles en Figure 3.20. Le diagramme des niveaux de D_2O est montré en Figure 3.19. Seule une profonde et étroite raie en absorption est visible pour la forme ortho tandis que la raie de para–D_2O montre à la fois de l'émission et de l'absorption. Les absorptions apparaissent à une vitesse v_{LSR} d'à peu près 4.2 km s^{-1} pour les deux transitions, tout comme pour les fondamentales de HDO. Elles sont probablement émises par la partie froide de l'envelope proto-stellaire ainsi que la couche d'absorption additionnelle mise en évidence grâce à l'étude sur l'eau semi-lourde. La composante en émission large a été attribuée à l'eau lourde libérée en phase gazeuse dans le *hot corino* de la source (Butner et al. 2007). Elle n'est donc probablement pas observable pour ortho–D_2O en raison de la taille du lobe de télescope qui est de 35″ à 607 GHz avec HIFI alors qu'elle est de 15″ à 317 GHz avec le JCMT.

Une modélisation hors-ETL a été réalisée pour déterminer le rapport ortho/para du D_2O dans les régions froides (T<30K) entourant la proto-étoile IRAS 16293 (Vastel et al. 2010). Les coefficients de collision de D_2O avec ortho et para–H_2 ont été déterminés par Faure et al. (2011). Seul les taux avec para–H_2 ont été considérés vu que H_2 est principalement dans sa forme para aux basses températures (cf Fig. 3.7). La structure de Crimier et al. (2010) a été utilisée pour estimer la valeur maximale de la densité de H_2 à des températures inférieures à 30 K. Les densités de colonne de ortho–D_2O et para–D_2O sont alors respectivement de 8.7 $\pm$ 2.1 $\times$ 10^{11} cm^{-2} et 7.8 $\pm$ 2.6 $\times$ 10^{11} cm^{-2} pour une incertitude de 1σ, ce qui donne un rapport ortho/para de D_2O de 1.1 $\pm$ 0.4. Ce rapport est inférieur à 2.4 à 3σ près (Vastel et al. 2010). Les 3σ incluent à la fois l'erreur statistique précédemment définie ainsi que 10% supplémentaire dû à l'incertitude sur les valeurs de densité et de température. Si on inclut une incertitude maximale de 16% pour le rapport de gain entre les bandes à la fréquence de 607 GHz, on atteint alors une limite supérieure de 2.6, montrée en Figure 3.21. Le rapport ortho/para de D_2O est alors compatible avec la valeur à l'équilibre pour les températures supérieures à 15 K.

Pour déterminer de manière précise le rapport D_2O/HDO et D_2O/H_2O dans les différentes composantes de cette source (*hot corino*, enveloppe externe et couche d'absorption supplémentaire), j'ai réalisé une modélisation similaire à ce qui a été fait pour HDO et $H_2{}^{18}O$. J'ai supposé un rapport ortho/para D_2O de 2:1, compatible avec l'analyse de Vastel et al. (2010), dans l'enveloppe externe et sa partie centrale. Une des premières constatations de cette analyse a été de réaliser que le continuum modélisé à 316 GHz ($\sim$ 0.38 K) n'est pas compatible avec celui observé par Butner et al. (2007) ($\sim$ 0.85 K). Pour comprendre si cette divergence venait d'un problème de modélisation ou d'observation, j'ai utilisé les données APEX récemment obtenues à cette fréquence dans le cadre du relevé spectral TIMASSS. Le continuum SSB observé avec APEX est de 0.235 K en T_A^*. Avec une *beam efficiency*, $B_{\rm eff} = 0.73$ et une *forward efficiency*, $F_{\rm eff} = 0.97$, le continuum est alors de 0.31 K en $T_{\rm mb}$. La modélisation prédit un continuum de $\sim$0.29 K à cette fréquence avec APEX. L'erreur de calibration est pour le moment estimée à $\sim$20%, d'après des comparaisons de raies situées sur des bandes

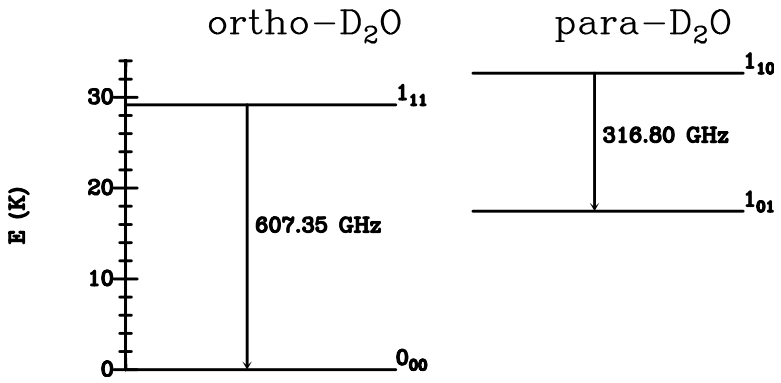


Figure 3.19 – Niveaux en énergie des transitions fondamentales de D_2O. Figure extraite de Vastel et al. (2010).

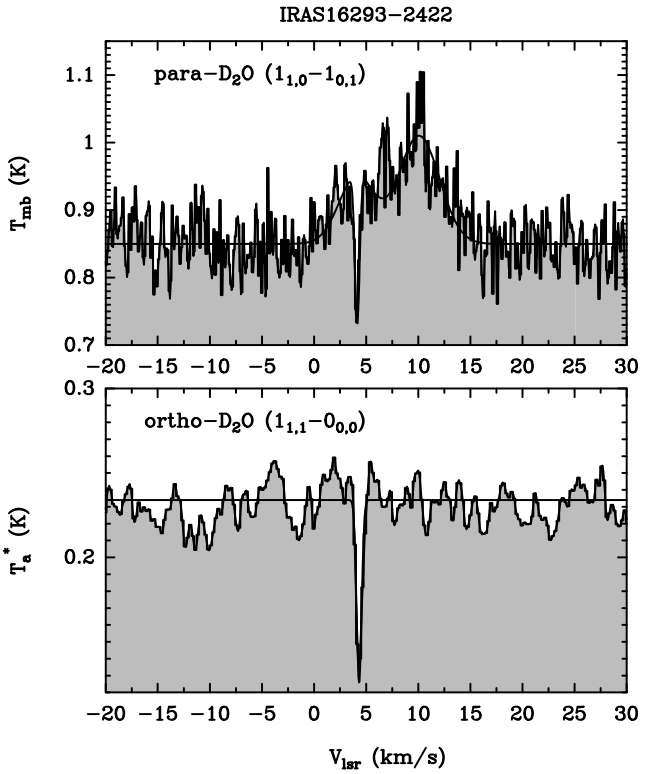


Figure 3.20 – Observations de la transition fondamentale $1_{1,0}$–$1_{0,1}$ de para–D_2O obtenue avec le télescope JCMT (panneau supérieur) et ajustée par une somme de 3 Gaussiennes et de la transition fondamentale $1_{1,1}$–$0_{0,0}$ de ortho–D_2O obtenue avec HIFI (panneau inférieur). La raie située à environ 10 km s^{-1} de la raie de para–D_2O est attribuée à la transition (7_0–6_0+) de CH_3OD. Figure extraite de Vastel et al. (2010).

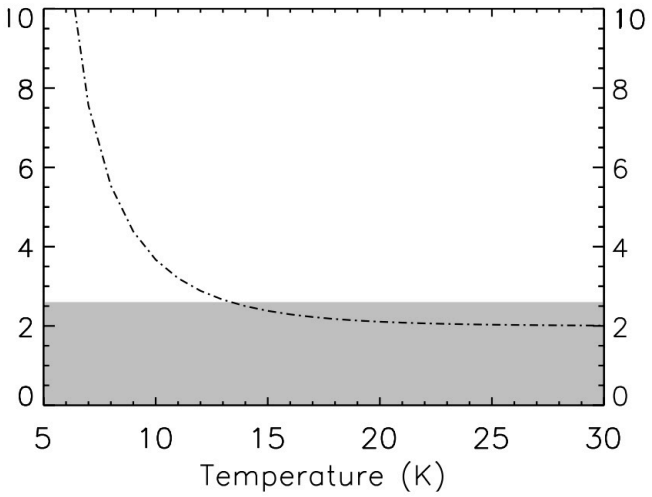


Figure 3.21 – Rapport ortho/para de D_2O estimé dans la proto-étoile IRAS 16293 (zone grisé). En tiret-pointillé, le rapport ortho/para à l'équilibre thermique. Figure extraite de Vastel et al. (2010).

du relevé spectral en recouvrement. Le continuum modélisé apparaît donc parfaitement compatible aux incertitudes près avec les observations. Au vu de ces résultats, le continuum de la modélisation de la raie JCMT a été jugé correct et le continuum des données a été considéré comme valant 0.38 K. Il est fort possible que la mesure du continuum JCMT par Butner et al. (2007) soit incorrecte en raison d'une mauvaise calibration de celui-ci. La raie de para–D_2O est bien détectée avec APEX mais le rapport signal sur bruit reste inférieur à celui observé avec JCMT. C'est pour cela que les données JCMT ont été préférées pour cette étude.

En utilisant uniquement la structure déterminée par Crimier et al. (2010), aucun modèle ne prédit la moindre absorption pour les transitions fondamentales d'ortho et para–D_2O. Toute l'absorption observée est donc causée par la couche d'absorption supplémentaire mise en évidence précédemment avec l'eau semi-lourde. En attribuant à cette couche une densité $n_{H_2} = 10^4$ cm^{-3}, une température $T = 20$ K et un paramètre b–doppler de 0.3 km s^{-1}, la densité de colonne de ortho–D_2O pour reproduire l'absorption de la transition à 607 GHz est d'environ 1.4×10^{12} cm^{-2}, tandis que pour para–D_2O, elle est d'environ 1.1×10^{12} cm^{-2}. La modélisation prédit la présence d'une raie d'absorption à 898 GHz, fréquence de la transition fondamentale $2_{1,2}$–$1_{0,1}$ de para–D_2O. Cette raie n'avait pas été observée à la première réduction des données (avec HIPE 2). Mais une nouvelle réduction (avec HIPE 5) semble indiquer une tentative de détection compatible avec la modélisation (cf Fig. 3.23). Le rapport ortho/para du D_2O est alors d'environ 1.3, proche de la valeur 1.1 déduit par Vastel et al. (2010). Mais les paramètres choisis pour la couche d'absorption et les incertitudes des observations pourraient mener à des résultats compatibles avec le rapport 2:1 à l'équilibre. La température a une influence minime sur la profondeur des raies en absorption, mais la densité de H_2 semble elle jouer un rôle. Avec une densité de 10^5 cm^{-3}, la profondeur des raies est moins importante, nécessitant d'augmenter la densité de colonne d'eau lourde. L'absorption

de la transition de para–D_2O à 898 GHz apparaît néanmoins trop profonde, par comparaison aux observations, suggérant que la densité de H_2 est plus faible que 10^5 cm^{-3} dans cette couche. A 10^3 et 10^4 cm^{-3}, les absorptions prédites sont comparables aux incertitudes près. Les densités de colonne obtenues ici sont légèrement supérieures (moins d'un facteur 2) à celles déterminées auparavant, mais restent en total accord avec les incertitudes à 3σ de Vastel et al. (2010).

Une grille de modèles a alors été lancée en ajoutant la couche d'absorption avec les densités de colonne définies ci-dessus. La meilleure modélisation est obtenue pour $X_{\rm in} = 7 \times 10^{-10}$ et $X_{\rm out} = 5 \times 10^{-12}$ (cf Fig. 3.23) avec la méthode de minimisation du χ^2 n° 2. Le paramètre α est égal à 1.3. A 3σ, seules des limites supérieures sont obtenues. Elles sont de 1.3×10^{-9} pour l'abondance interne et de 1.3×10^{-11} pour l'abondance externe, comme le montrent les contours à 3σ en Figure 3.22. A 2σ, les contours sont néanmoins refermés, $X_{\rm in}$ variant entre 9×10^{-11} et 1.1×10^{-9} et $X_{\rm out}$ entre 8×10^{-13} et 1.1×10^{-11}.

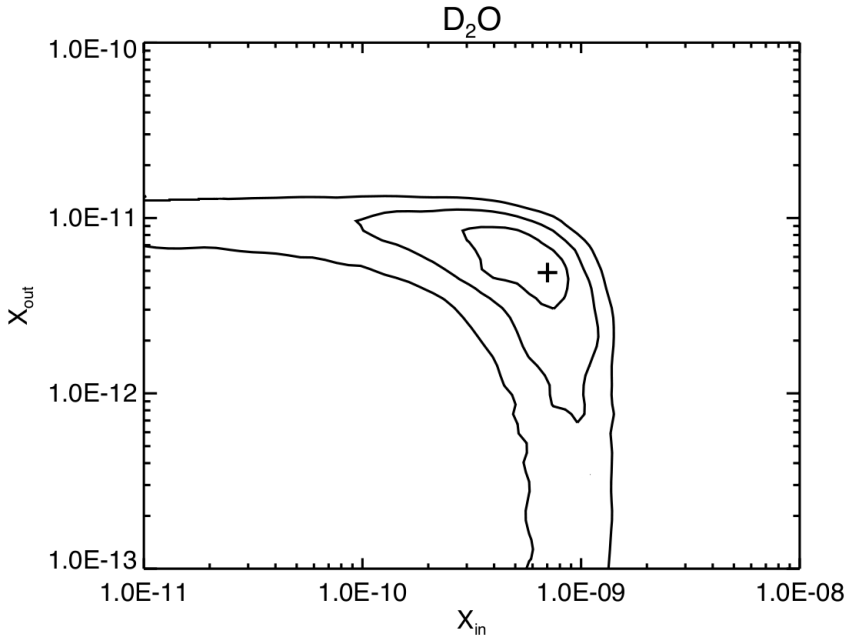


Figure 3.22 – Contours de χ^2 à 1σ, 2σ et 3σ obtenus en ajoutant à la structure une couche d'absorption avec N(para–D_2O) $= 1.1 \times 10^{12}$ cm^{-2} et N(ortho–D_2O) $= 1.4 \times 10^{12}$ cm^{-2}. Le meilleur modèle est représenté par le symbole "+" et a été obtenu avec la méthode de χ^2 n° 2.

3.3.6 Rapports HDO/H_2O, D_2O/HDO et D_2O/H_2O

Les rapports HDO/H_2O obtenus dans les différentes régions de la proto-étoile sont résumés en Table 3.2 pour la méthode de minimisation du χ^2 n° 1 et en Table 3.3 pour la méthode n° 2. Les rapport D_2O/HDO et D_2O/H_2O sont également précisés en Table 3.3. Ces différents rapports sont discutés dans la Section suivante.

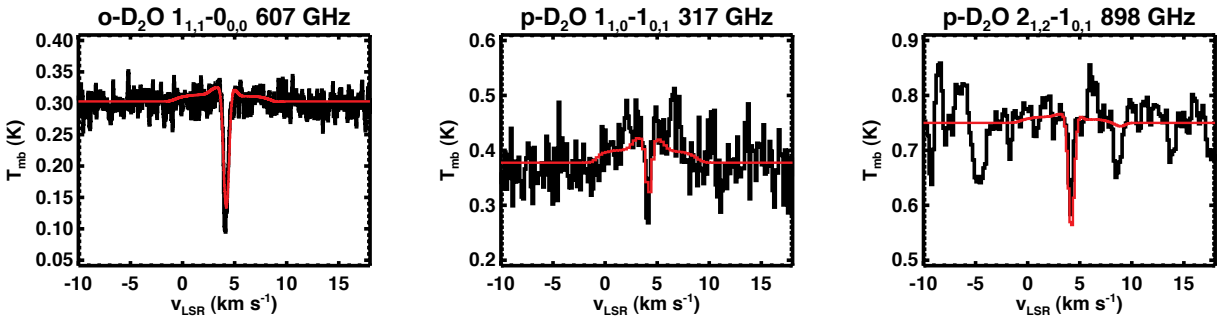


Figure 3.23 – En *noir* : les raies de D_2O observées avec HIFI et JCMT. La transition de CH_3OD qui chevauche la raie de para–D_2O à 317 GHz a été soustraite pour la modélisation. En *rouge* : le meilleur ajustement obtenu en ajoutant une couche d'absorption avec N(para–D_2O) = 1.1×10^{12} cm^{-2} et N(ortho–D_2O) = 1.4×10^{12} cm^{-2}. L'abondance interne est de 7×10^{-10} et l'abondance externe est de 5×10^{-12}.

Table 3.2 – Rapports HDO/H_2O obtenus dans la proto-étoile IRAS 16293 avec la méthode de minimisation du χ^2 n° 1 et présentés dans Coutens et al. (2012).

	Hot corino		Enveloppe externe		Couche de photo-désorption
	Best-fit	3σ	Best-fit	3σ	$A_V \sim 1$ - 4 mag
HDO	1.7×10^{-7}	$1.5 - 2.2 \times 10^{-7}$	8×10^{-11}	$4.6 - 10.0 \times 10^{-11}$	$\sim 0.6 - 2.4 \times 10^{-8}$
H_2O^b	5×10^{-6}	$3.8 - 10.5 \times 10^{-6}$	1.5×10^{-8}	$4.5 - 24.5 \times 10^{-9}$	$\sim 1.3 - 5.3 \times 10^{-7}$
HDO/H_2O	3.4%	1.4% – 5.8%	0.5%	0.2% – 2.2%	$\sim 4.8\%^a$

[a] Ce rapport reste valide si la couche d'absorption n'est pas due à la photo-désorption des molécules d'eau mais à un temps de collage des grains à la surface des grains trop long par rapport à l'âge de la proto-étoile pour de faibles densités.
[b] Paramètres de H_2O obtenus avec les coefficients de collision de Faure et al. (2007).

Table 3.3 – Rapports HDO/H_2O, D_2O/HDO et D_2O/H_2O obtenus dans la proto-étoile IRAS 16293 avec la méthode de minimisation du χ^2 n° 2.

	Hot corino		Enveloppe externe		Couche de photo-désorption
	Best-fit	3σ	Best-fit	3σ	$A_V \sim 1$ - 4 mag
HDO	1.8×10^{-7}	$1.4 - 2.4 \times 10^{-7}$	8×10^{-11}	$5.5 - 10.6 \times 10^{-11}$	$\sim 0.6 - 2.4 \times 10^{-8}$
H_2O^b	1×10^{-5}	$4.7 - 40.0 \times 10^{-6}$	1.5×10^{-8}	$7.0 - 22.5 \times 10^{-9}$	$\sim 1.3 - 5.3 \times 10^{-7}$
D_2O	7×10^{-10}	$\leq 1.3 \times 10^{-9}$	5×10^{-12}	$\leq 1.3 \times 10^{-11}$	$\sim 6.6 - 27 \times 10^{-10}$
HDO/H_2O	1.8%	0.4% – 5.1%	0.5%	0.3% – 1.5%	$\sim 4.8\%^a$
D_2O/HDO	0.4%	$\leq 0.9\%$	6.3%	$\leq 23\%$	$\sim 10.8\%^a$
D_2O/H_2O	0.007%	$\leq 0.03\%$	0.03%	$\leq 0.2\%$	$\sim 0.5\%^a$

[a] Ce rapport reste valide si la couche d'absorption n'est pas due à la photo-désorption des molécules d'eau mais à un temps de collage des grains à la surface des grains trop long par rapport à l'âge de la proto-étoile pour de faibles densités.
[b] Paramètres de H_2O obtenus avec les coefficients de collision de Daniel et al. (2011).

3.4 Discussion sur le fractionnement en deutérium de l'eau

3.4.1 Comparaison avec de précédentes études

L'étude de l'eau deutérée dans la proto-étoile de faible masse IRAS 16293 avait déjà été entreprise sur une transition par Stark et al. (2004), puis sur cinq transitions par Parise et al. (2005), menant à des résultats différents. L'abondance de HDO avait été estimée, par Stark et al. (2004), à 3×10^{-10} à travers l'enveloppe complète pour reproduire la transition $1_{0,1}$–$0_{0,0}$ à 465 GHz, impliquant un rapport HDO/H_2O de quelques 10^{-4} dans la région interne chaude de l'enveloppe. Cependant, leur meilleur modèle ne pouvait reproduire ni la profonde absorption ni la largeur de la raie observée à cette fréquence. Ils supposaient donc qu'une composante produite par les jets moléculaires était nécessaire pour expliquer cette largeur de raie. Malgré cela, le modèle obtenu en ajoutant cette composante échoue à reproduire simultanément la largeur de raie et l'intensité de la raie. Le fait que la largeur de raie observée ne puisse pas être expliquée sans ajouter de composante issue des jets s'expliquerait principalement par l'hypothèse d'une abondance constante le long de l'enveloppe. Par ailleurs, les intensités prédites par leur modèle pour les transitions à 226 et 241 GHz (0.001 K et 0.006 K, respectivement) sont clairement plus faibles que celles observées ici (0.30 et 0.32 K, respectivement).

Peu après, les résultats obtenus par Stark et al. (2004) ont été remis en question par Parise et al. (2005). En utilisant des observations IRAM et JCMT (81, 226, 242, 266 et 465 GHz), ces auteurs ont trouvé une augmentation de l'abondance de HDO dans le *hot corino* ($X_{\rm in} \sim 1 \times 10^{-7}$) par rapport à l'enveloppe externe ($X_{\rm out} \leq 1 \times 10^{-9}$), en accord avec nos résultats en utilisant à la fois les coefficients de collision avec He de Green (1989) et avec ortho et para–H_2 de Faure et al. (2011) (cf Sect. 3.3.3). Leurs résultats ne prenaient cependant pas en compte les profils de raie, la minimisation du χ^2 ne se basant que sur l'aire intégrée des raies. Le profil de la raie à 464 GHz est pourtant particulier avec sa composante étroite et profonde en absorption en plus de son émission. Ils n'ont aussi pu déterminer qu'une limite supérieure relativement élevée pour l'abondance externe.

En utilisant l'abondance de H_2O determinée par Ceccarelli et al. (2000a), Parise et al. (2005) ont conclu sur un saut du rapport HDO/H_2O dans la partie interne de l'enveloppe. Les valeurs d'abondance de l'eau déterminées ici sont néanmoins différentes. A partir de données ISO/LWS de $H_2{}^{16}O$, largement diluées dans un lobe d'environ 80″, Ceccarelli et al. (2000a) ont obtenu une abondance externe de 5×10^{-7}, tandis que nous avons trouvé une abondance bien plus faible, $\sim 1.5 \times 10^{-8}$. L'abondance interne déduite $\sim 3 \times 10^{-6}$ n'est cependant pas tellement différente de notre résultat, $X_{\rm in}(H_2O) \sim 5 \times 10^{-6} - 1 \times 10^{-5}$. Le désaccord sur la détermination de l'abondance externe peut facilement être expliqué par le fait que Ceccarelli et al. (2000a) ont utilisé des données $H_2{}^{16}O$, contaminé par les jets qui n'avaient pas été inclus dans la modélisation. Il faut noter que la température du gaz utilisée ici a été déterminée en supposant l'abondance de l'eau déduite des données ISO. Cependant, puisque le gaz est pratiquement couplé thermalement avec la poussière, l'impact sur la température du gaz est certainement négligeable. La différence la plus grande entre la température de la poussière et la température du gaz est inférieure à 10% (Crimier et al. 2010). La divergence

sur l'abondance de l'eau résulte donc sur un rapport de deutération différent dans l'enveloppe externe. En prenant en compte l'incertitude à 3σ, l'augmentation du fractionnement en deutérium de l'eau dans le *hot corino* ne peut pas être confirmé dans notre étude, contrairement à ce qui avait été conclu dans Parise et al. (2005). Avec une incertitude à 3σ, le fractionnement de l'eau pourrait être similaire à travers toute l'enveloppe avec un rapport HDO/H_2O entre 0.4% et 5.1% dans les régions internes et entre 0.3% et 1.5% dans l'enveloppe externe. Par ailleurs, le rapport HDO/H_2O obtenu ici est en accord avec les limites supérieures du rapport HDO/H_2O (de 0.5% à 2%) déterminé par les observations de bandes d'élongation de O–H et O–D dans quatre proto-étoiles de faible masse (Dartois et al. 2003; Parise et al. 2003).

Butner et al. (2007) ont supposé que l'émission de la raie de para–D_2O à 317 GHz était produite par les molécules d'eau lourde libérées en phase gazeuse dans le *hot corino*. En supposant que dans le *hot corino*, les populations des niveaux de D_2O étaient thermalisées, du fait des hautes densités et températures qui y règnent, ils ont estimé, avec un modèle à l'ETL, la densité de colonne de para–D_2O à $\sim 3.5 \times 10^{12}$ cm^{-2}. En prenant un rapport ortho/para de D_2O à l'équilibre (c'est-à-dire un rapport 2:1), ils obtiennent alors une densité de colonne de D_2O de 1.0×10^{13} cm^{-2}, résultant en une abondance d'eau lourde d'environ 1.7×10^{-10}, d'après l'estimation de la densité de colonne de H_2 de 6×10^{22} cm^{-2} dans le *hot corino* par Ceccarelli et al. (2000a). Cette valeur est quatre fois plus faible que celle obtenue avec RATRAN. Elle reste cependant cohérente avec les incertitudes à 2σ (cf Fig. 3.22). Butner et al. (2007) ont alors utilisé les abondances de HDO et H_2O déterminées par Parise et al. (2005) et Ceccarelli et al. (2000a) respectivement, pour conclure sur un rapport D_2O/HDO d'environ 0.0017 et un rapport D_2O/H_2O d'environ 5×10^{-5} dans la partie interne de l'enveloppe proto-stellaire. A partir de ces rapports d'abondance, ils ont essayé de savoir si l'eau pouvait s'être formée à la surface des grains. En supposant que l'eau se forme par des hydrogénations successives d'atomes d'oxygène et que les réactions de surface soient distribuées statistiquement, l'inégalité suivante devrait alors être respectée :

$$\left(\frac{D_2O}{HDO}\right)_{grain} \geq \frac{1}{4}\left(\frac{HDO}{H_2O}\right)_{grain}. \tag{3.12}$$

Le rapport D_2O/HDO qu'ils ont obtenu est cependant 5 fois inférieur à ce qu'il devrait être, ne soutenant donc pas l'hypothèse d'une formation de l'eau à la surface des grains. Si nous reprenons maintenant les valeurs obtenues dans le *hot corino* avec le modèle RATRAN (cf Table 3.3), le rapport D_2O/HDO devrait être supérieur à 0.45%. Or nous trouvons 0.4%, ce qui reste compatible en prenant en compte les incertitudes à 3σ et notamment la limite supérieure du rapport D_2O/HDO, 0.9%. De même si l'on réalise ce calcul dans la couche d'absorption qui pourrait être due à la photo-désorption des molécules d'eau formées sur les grains, on obtient que le rapport D_2O/HDO ne devrait pas être inférieur à 1.2%. Or il est de 10.8%, appuyant l'hypothèse d'une formation de l'eau à la surface des grains.

3.4.2 Contraintes sur la formation de l'eau

Nous pouvons remarquer que les rapports HDO/H_2O déterminés dans le *hot corino* ($\sim$0.4–5.1%) et dans la couche d'absorption additionnelle ($\sim$4.8%) sont similaires. Ce rapport est du même ordre de grandeur, mais les densités des milieux en question sont très différentes,

le *hot corino* présentant des densités de quelques 10^8 cm^{-3} et la couche d'absorption, des densités typiques de nuage moléculaire ($\sim 10^3$–10^5 cm^{-3}). L'eau présente un comportement différent de molécules telles que le méthanol (CH_3OH) et le formaldéhyde (H_2CO), qui se forment à partir d'hydrogénation du CO sur les grains. En effet, Bacmann et al. (2003, 2007) ont montré que la deutération de H_2CO et CH_3OH augmentent avec la déplétion du CO dans les cœurs pré-stellaires (cf Fig. 3.24). Or la déplétion du CO est fortement corrélée avec la densité de H_2 (Caselli et al. 1999; Bacmann et al. 2002). Le formaldéhyde et le méthanol montrent donc une augmentation de leur deutération avec la densité de H_2 contenue dans les milieux où ces molécules se forment.

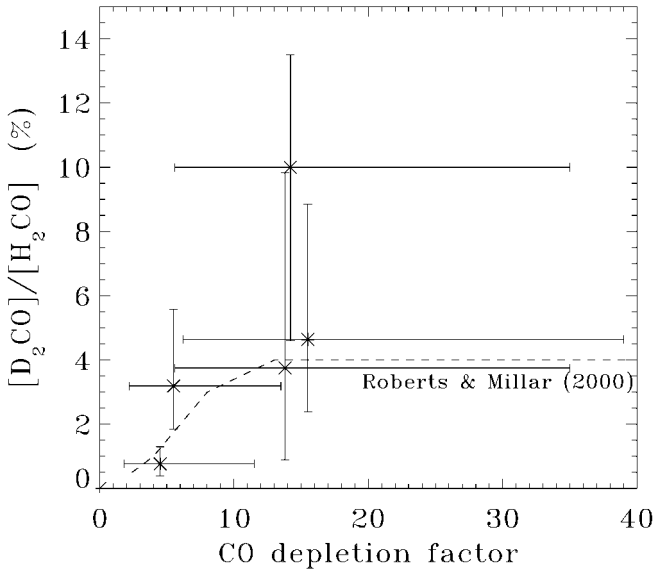


Figure 3.24 – Corrélation entre le rapport D_2CO/H_2CO et la déplétion de CO (Bacmann et al. 2003).

Cette similarité du fractionnement en deutérium de l'eau dans des milieux de densités très différentes pourrait s'expliquer par le fait que l'eau contenue dans cette proto-étoile se serait formée avant l'effondrement gravitationnel de celle-ci. A cette époque, la densité de H_2 était donc homogène et le rapport de deutération de l'eau constant dans le nuage moléculaire. Le rapport HDO/H_2O serait donc un vestige de la phase de nuage moléculaire et aurait été conservé pendant l'effondrement gravitationnel du nuage. Un autre argument appuie cette hypothèse. Les fractionnements en deutérium de formaldéhyde et méthanol sont très élévés dans cette source : $HDCO/H_2CO$ ($\sim$13–16% ; Loinard et al. 2000) et CH_2DOH/CH_3OH ($\sim$30% ; Parise et al. 2004), alors que le rapport HDO/H_2O est d'environ 3%. La densité à laquelle le H_2CO et le CH_3OH se formeraient devraient donc être plus élevée que lors de la formation de l'eau. La formation de ces molécules aurait donc eu lieu une fois que l'effondrement avait commencé, permettant ainsi le collage des molécules de CO à la surface des grains, nécessaire à la formation de ces deux molécules. La formation de l'eau à de faibles densités, avant l'effondrement du nuage, avait déjà été suggérée par Dartois et al. (2003) et Parise

et al. (2003). Ceci est également en accord avec le fait que des glaces d'eau apparaissent à de relativement faibles extinctions visuelles dans la direction du nuage du Taureau (e.g. Jones & Williams 1984). Récemment, des conclusions similaires ont été mentionnées par le modèle de chimie à la surface des grains de Cazaux et al. (2011). Ils ont montré que la deutération du formaldéhyde est sensible au rapport D/H en phase gazeuse dès que le nuage subit un effondrement gravitationnel, tandis que le rapport HDO/H_2O est établi pendant la formation des glaces dans le nuage et reste constant après l'effondrement du nuage. Taquet et al. (2012) confirment également avec leur modèle gaz-grain GRAINOBLE que l'eau serait formée en même temps que le dioxyde de carbone (CO_2) dans une phase translucide contrairement au méthanol et au formaldéhyde qui seraient formés dans des régions plus denses et plus froides. Un nuage est défini comme translucide quand il présente une extinction visuelle $A_V \sim 1$–5 et qu'il est exposé à un champ de rayonnement interstellaire moyen entre 6 et 13.6 eV. van Dishoeck & Black (1988) introduisirent ce terme pour qualifier la classe intermédiaire entre les nuages diffus de faible extinction et les nuages moléculaires sombres.

Le rapport D_2O/HDO semble néanmoins plus important ($\sim$11%) dans la couche d'absorption que dans le *hot corino* ($\sim$0.4%). Si l'on se contente de comparer les meilleurs modèles, cette tendance apparaît déjà pour le rapport HDO/H_2O, mais de manière moins flagrante. L'incertitude sur les observations ne suffit pas à expliquer la différence du rapport D_2O/HDO. Par ailleurs, la modélisation à partir des meilleurs paramètres de la raie à 317 GHz observée avec APEX paraît convenable bien qu'elle soit bruitée. Le problème peut éventuellement venir de l'estimation de l'abondance dans le *hot corino* pour lequel la structure de la source utilisée est incertaine. Les conditions physiques au centre de la proto-étoile pourraient en effet être différentes et ne pas suivre les tendances déterminées dans l'enveloppe plus froide et extrapolées aux parties internes. Les profils en densité et en température sont d'ailleurs essentiellement basés sur des données *single-dish*, qui diluent donc considérablement l'émission du *hot corino*. Des disques pourraient aussi exister au centre des proto-étoiles de Classe 0. L'hypothèse de symétrie sphérique serait donc à remettre en cause et les estimations dans les parties internes pourraient être différentes. Le fait même qu'il y ait un disque pourrait, en plus, mener à des modifications non négligeables de la chimie dans ces régions, entraînant une modification des abondances d'eau et de ses isotopes deutérés. La surface du disque est en effet chauffée par le rayonnement UV, créant un gradient de température radial et vertical. Trois zones chimiques distinctes composeraient alors le disque : une zone externe dominée par la photodissociation, une zone moléculaire chaude et une zone froide dans le plan milieu où les molécules pourraient se coller à la surface des grains (cf Fig. 3.25).

Un moyen supplémentaire pour contraindre la formation de l'eau serait d'étudier la molécule OH et son isotope deutéré OD. En effet, OH est une espèce intermédiaire importante dans le réseau chimique de l'eau (cf Fig. 1.7). OD a, d'ailleurs, été récemment détecté en absorption dans IRAS 16293 via son multiplet de raie $^2\Pi_{3/2}\ J = 5/2 \rightarrow 3/2, l = -1 \rightarrow 1$ à 1391.5 GHz avec l'instrument GREAT du télescope aéroporté SOFIA (*Stratospheric Observatory for Infrared Astronomy*) par Parise et al. (2012). La densité de colonne nécessaire à son absorption a été estimée à 2.0×10^{13} – 1.3×10^{14} cm^{-2} (Parise et al. 2012). Si l'on considère que, comme pour D_2O, l'absorption ne vient que de la couche d'absorption additionnelle et pas de l'enveloppe externe, le rapport OD/HDO est d'environ 0.9 – 5.7. Il n'existe cependant

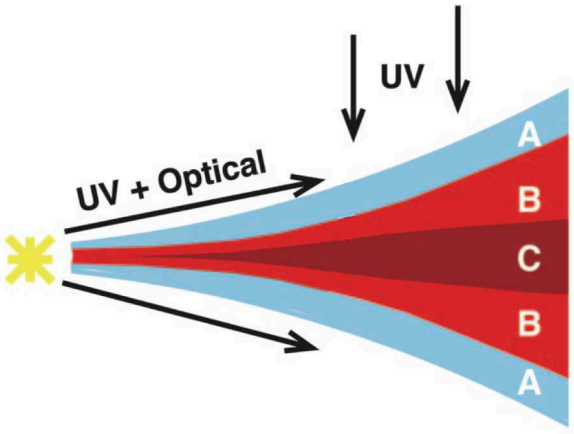


Figure 3.25 – Structure d'un disque proto-planétaire. La surface du disque est chauffée par le rayonnement UV de l'étoile, créant un gradient de température radial et vertical. Trois zones chimiques distinctes peuvent alors être considérées : une région externe dominée par la photodissociation (A), une zone moléculaire chaude (B) et une zone dans le plan milieu suffisamment froide pour que les molécules disparaissent de la phase gazeuse en se collant sur les grains (C). Figure extraite de van Dishoeck (2006).

pas de coefficients de collision disponibles pour OD. Une étude hors-ETL pourrait alors mener à des estimations différentes de la densité de colonne de OD. L'idéal pour contraindre les mécanismes de formation de l'eau serait de comparer le rapport HDO/H_2O avec le rapport OD/OH. En l'absence de fractionnement différentiel entre OH et H_2O, ces rapports devraient être similaires. Bien que le multiplet de raies de OH $^2\Pi_{1/2}$ $J = 3/2 \rightarrow 1/2$ soit observable avec HIFI à 1.83 THz, son énergie de niveau supérieur ($\sim$ 270 K) est trop élevée pour qu'il soit détecté en absorption. Les transitions du multiplet $^2\Pi_{3/2}$ $J = 5/2 \rightarrow 3/2$ à 2.5 THz sont cependant observées en absorption avec l'instrument PACS d'Herschel mais restent encore à analyser. Le détecteur à 2.4 – 2.7 THz de l'instrument GREAT permettra également d'observer ces transitions avec une très bonne résolution spectrale et ainsi de pouvoir déterminer le rapport OD/OH.

3.4.3 Comparaison du rapport HDO/H_2O dans d'autres proto-étoiles

Le rapport HDO/H_2O avait déjà été estimé dans deux autres proto-étoiles de Classe 0, NGC 1333 IRAS 2A et NGC 1333 IRAS 4B.

Dans NGC 1333 IRAS 2A, Liu et al. (2011) ont estimé, à partir de l'observation de cinq transitions depuis le sol (JCMT, APEX et IRAM-30m), un fractionnement en deutérium de l'eau supérieur à 1% dans le *hot corino* et entre 0.9% et 18% dans l'enveloppe externe. Il est donc du même ordre que ce que nous avons trouvé pour IRAS 16293. Il faut cependant noter que de nouvelles données HIFI semblent suggérer une légère surestimation des valeurs d'abondance de HDO. De plus, la couche d'absorption en avant-plan n'a pas été prise en compte. Or l'étroite et profonde absorption présente sur les observations HIFI à 894 GHz

n'est pas reproduite avec le modèle de Liu et al. (2011).

Ce rapport de quelques % ne semble cependant pas typique de toutes les sources de Classe 0, puisqu'une limite supérieure de 6×10^{-4}, comparable aux valeurs observées dans les comètes, a été déterminée dans le *hot corino* de la proto-étoile de faible masse NGC 1333 IRAS 4B (Jørgensen & van Dishoeck 2010a). Cette estimation a été obtenue avec des données de la transition de HDO à 225 GHz et de la transition de $H_2{}^{18}O$ à 203 GHz obtenues avec l'interféromètre du Plateau de Bure. En l'occurrence, la transition de HDO n'a pas été détectée contrairement à celle de $H_2{}^{18}O$. L'analyse ne se basant que sur une seule transition, les conditions d'excitation supposées pourraient néanmoins être différentes. Par ailleurs, des observations de télescopes *single-dish* seraient nécessaires pour contraindre le rapport HDO/H_2O dans l'enveloppe externe.

A partir de là, il est très difficile de savoir si de manière générale, les proto-étoiles de Classe 0 présenteraient des rapports HDO/H_2O d'environ 10^{-4} – 10^{-3}, comme observés dans la proto-étoile NGC 1333 IRAS 4B, dans les comètes ($\sim 1.5 \times 10^{-4}$; Hartogh et al. 2011) et dans les océans terrestres ($\sim 1.5 \times 10^{-4}$; Lecuyer et al. 1998) ou bien des rapports de quelques %, comme les objets proto-stellaires NGC 1333 IRAS 2A et IRAS 16293. Avec une valeur de quelques 10^{-4} dans la phase de Classe 0, le rapport HDO/H_2O pourrait être conservé pendant les différentes étapes de la formation stellaire jusqu'à la formation des objets du système solaire. Des valeurs plus élevées pendant la phase proto-stellaire feraient appel à des mécanismes dans la phase gazeuse et/ou à la surface des grains pour expliquer la diminution du fractionnement en deutérium de l'eau entre la phase de Classe 0 et la formation des comètes. Il est donc nécessaire d'étudier le rapport HDO/H_2O dans un plus grand nombre de proto-étoiles pour savoir si la deutération de l'eau dans ces objets peut être similaire aux valeurs observées dans les comètes et comprendre si l'environnement ou les conditions pendant la phase pré-stellaire pourrait jouer un rôle.

Pour, entre autres, répondre à ces questions, une collaboration a été entreprise entre trois programmes clés Herschel : CHESS, WISH (*Water In Star-forming regions with Herschel* ; PI : E. van Dishoeck) et HEXOS (*Herschel/HIFI Observations of EXtraOrdinary Sources : The Orion and Sagittarius B2 Starforming Regions* ; PI : E. Bergin). Dans ce cadre-là, des transitions d'eau deutérée ont été observées avec HIFI en direction de plusieurs proto-étoiles de faible masse : NGC 1333 IRAS 2A, NGC 1333 IRAS 4A, NGC 1333 IRAS 4B et Ser SMM1. Notre groupe est en charge des deux sources IRAS 4A et IRAS 4B. Cela fait l'objet du Chapitre 4.

3.4.4 Comparaison avec le modèle chimique d'Aikawa et al. (2012)

Aikawa et al. (2012) ont récemment étudié l'évolution moléculaire ainsi que les rapports d'abondance D/H au cours de la formation stellaire depuis l'étape de cœur pré-stellaire jusqu'au cœur proto-stellaire en résolvant un réseau de réactions gaz-grain pour un modèle radiatif hydrodynamique 1D (Masunaga et al. 1998; Masunaga & Inutsuka 2000). L'évolution des profils en densité, en température et en vitesse d'effondrement prédits par le modèle hydrodynamique sont représentés en Figure 3.26 pour différents stades d'évolution : $t = -5.6$

$\times 10^2$ ans, $t = 4.3 \times 10^2$ ans et $t = 9.3 \times 10^4$ ans, le temps $t = 0$ faisant référence à la formation de la proto-étoile. Pour la comparaison des abondances de HDO et H_2O d'IRAS 16293 avec ce modèle, nous utiliserons donc les prédictions à $t = 9.3 \times 10^4$ ans. Les profils prédits sont, de plus, relativement en accord avec la structure déterminée par Crimier et al. (2010) pour IRAS 16293. Le code gaz-grain Nautilus (Hersant et al. 2009; Semenov et al. 2010) a été utilisé pour résoudre les équations des taux de réaction. Le réseau en phase gazeuse et à la surface des grains a été étendu pour inclure les différentes espèces multi-deutérées selon la règle suivante. Si une réaction du type $AH^+ + BH \rightarrow A + BH_2^+$ fait partie de la liste originale des réactions, les réactions suivantes sont alors ajoutées :

$$AD^+ + BH \rightarrow A + BHD^+ \tag{3.13}$$

$$AH^+ + BD \rightarrow A + BHD^+ \tag{3.14}$$

$$AD^+ + BD \rightarrow A + BD_2^+ \tag{3.15}$$

avec des coefficients de réaction supposés égaux à ceux de la réaction originale. S'il y a plus qu'un jeu de produits possibles, par exemple,

$$AHD + BD \rightarrow ABH + D_2 \tag{3.16}$$

$$AHD + BD \rightarrow ABD + HD, \tag{3.17}$$

un rapport de branchement statistique est alors supposé (i.e. 1:2 pour l'exemple), sauf pour les recombinaisons dissociatives des formes deutérées de l'ion H_3^+ pour lesquelles les rapports de branchement listés dans Roberts et al. (2004) ont été préférés.

La distribution radiale de l'abondance de l'eau et de ses isotopes deutérés obtenue avec ce modèle est représentée en Figure 3.27. Dans le *hot corino*, l'abondance de l'eau est d'environ 10^{-4} soit 10 fois plus élevée que celle déterminée dans IRAS 16293, tout comme l'abondance de HDO ($\sim 10^{-6}$) et D_2O d'ailleurs ($\sim 7 \times 10^{-9}$). Malgré cette différence d'abondances, le fractionnement en deutérium de l'eau est donc parfaitement reproduit par ce modèle dans les régions centrales. La différence d'abondance interne pourrait peut-être s'expliquer par la présence d'un disque qui mènerait dans la partie froide à l'adsorption d'une partie des molécules d'eau sur les grains. Dans l'enveloppe externe, la comparaison est plus difficile car les abondances modélisées varient avec le rayon. Elles sont néanmoins beaucoup plus élevées que celles observées dans IRAS 16293. Le rapport HDO/H_2O dépasse les 10% et atteint même 100% à 500 UA en raison de l'efficacité de la réaction d'échange exothermique OH + D → OD + H à ce rayon-là. Ce rapport varie donc de plus d'un facteur 20 dans l'enveloppe externe par rapport aux observations d'IRAS 16293. Il apparaît néanmoins en accord à un peu moins de 10000 UA avec le rapport HDO/H_2O estimé dans la couche d'absorption. Même si les abondances de HDO et D_2O varient dans l'enveloppe, le rapport D_2O/HDO reste à peu près constant avec le rayon avec une valeur de $\sim 1\%$ peut-être compatible avec IRAS 16293 ($X_{\rm out}(D_2O) \lesssim 23\%$ à 3σ). Aux rayons les plus externes, le rapport D_2O/HDO modélisé diffère de celui de la couche d'absorption d'un facteur 5 environ. La divergence des résultats dans l'enveloppe externe est assez difficile à comprendre. Des taux de réaction incorrects dans le réseau chimique ainsi que des rapports de branchement non statistiques pourraient expliquer cela. Les formes ortho et para–H_2 ne sont pas considérées, alors qu'elles pourraient

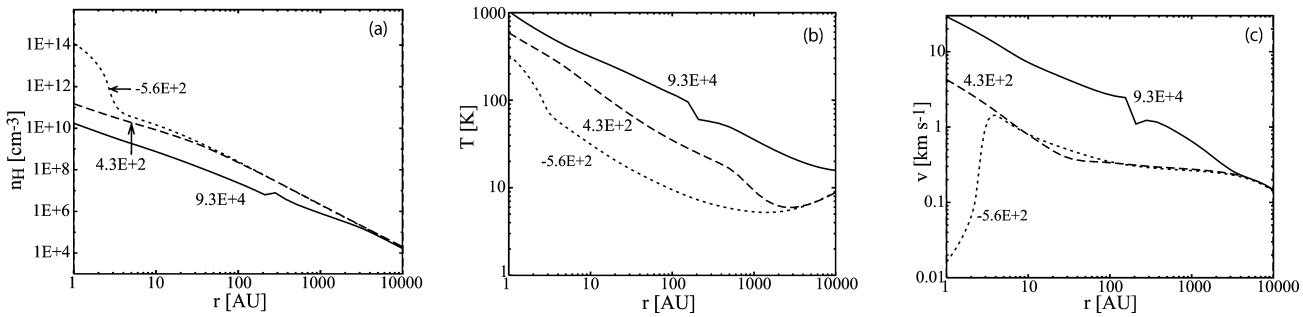


Figure 3.26 – Distributions radiales de la densité, la température et la vitesse d'effondrement prédites par le modèle radiatif hydrodynamique à $t = -5.6 \times 10^2$ ans, $t = 4.3 \times 10^2$ ans et $t = 9.3 \times 10^4$ ans. Figure extraite de Aikawa et al. (2012).

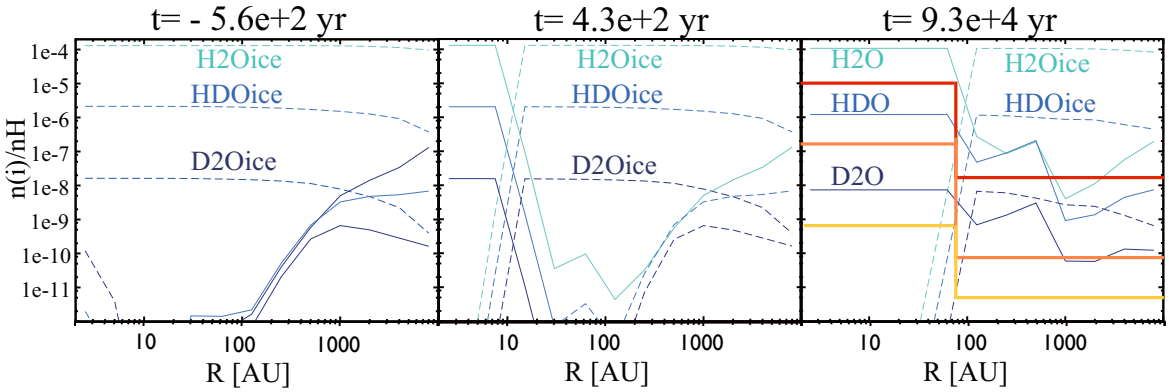


Figure 3.27 – Distributions radiales des abondance de H_2O, HDO et D_2O obtenues avec le modèle chimique de Aikawa et al. (2012) en phase gazeuse (trait continu) et sur les grains (pointillé) à $t = -5.6 \times 10^2$ ans, $t = 4.3 \times 10^2$ ans et $t = 9.3 \times 10^4$ ans. Les profils en abondance de H_2O, HDO et D_2O d'IRAS 16293 sont indiqués par un trait rouge, orange et jaune respectivement. Figure extraite de Aikawa et al. (2012).

mener pour certaines réactions à basse température à des taux de réaction différents. Les abondances initiales supposées dans le nuage moléculaire pourraient aussi jouer. On notera également que la structure en couche des manteaux de glace n'est pas incluse dans le modèle chimique. Enfin l'âge de la proto-étoile IRAS 16293 serait aussi à prendre en compte car les abondances externes à 9.3×10^4 ans sont assez différentes de celles à 4.3×10^2 ans.

Chapitre 4

L'eau deutérée dans les proto-étoiles de faible masse NGC 1333 IRAS 4A et IRAS 4B

Sommaire

4.1 La région de formation stellaire NGC 1333 IRAS 4 101
4.2 Observations 104
4.2.1 Données Herschel/HIFI 104
4.2.2 Données IRAM-30m 104
4.2.3 Données JCMT 104
4.2.4 Données CSO 106
4.3 Modélisation et résultats 107
4.3.1 Modélisation 107
4.3.2 L'enveloppe proto-stellaire d'IRAS 4A 109
4.3.3 L'enveloppe proto-stellaire d'IRAS 4B 112
4.3.4 Le flot moléculaire d'IRAS 4A 114
4.4 Discussion et perspectives 115
4.4.1 Détermination des rapports HDO/H_2O 115
4.4.2 Comparaison des abondances de HDO entre proto-étoiles de faible masse 117
4.4.3 Perspectives pour la proto-étoile IRAS 4B 117

4.1 La région de formation stellaire NGC 1333 IRAS 4

NGC 1333 IRAS 4 est une région active de formation stellaire du complexe de Persée. Elle appartient à la partie sud-ouest de la nébuleuse par réflexion NGC 1333 située dans le nuage sombre L1450 (aussi dénommé B 205) et éclairée par l'association OB2 de Persée. Elle a été détectée, pour la première fois, grâce à des émissions d'eau par effet maser (source $H_2O(C)$; Haschick et al. 1980). Des observations pointées du satellite IRAS par Jennings et al. (1987) ont ensuite mis en évidence une source froide de faible luminosité ($T_d = 33$ K ; $L = 21$ $L_\odot$), démontrant ainsi sa nature proto-stellaire. Plus tard, des observations du continuum dans le submillimétrique par Sandell et al. (1991) ont montré qu'il s'agissait en fait d'un système de deux composantes NGC 1333 IRAS 4A et IRAS 4B (ci-après nommées IRAS 4A et IRAS 4B) séparées de 31″. Les deux proto-étoiles se révèlent même être des systèmes multiples d'après des observations interférométriques millimétriques (Lay et al. 1995; Looney et al. 2000). Une

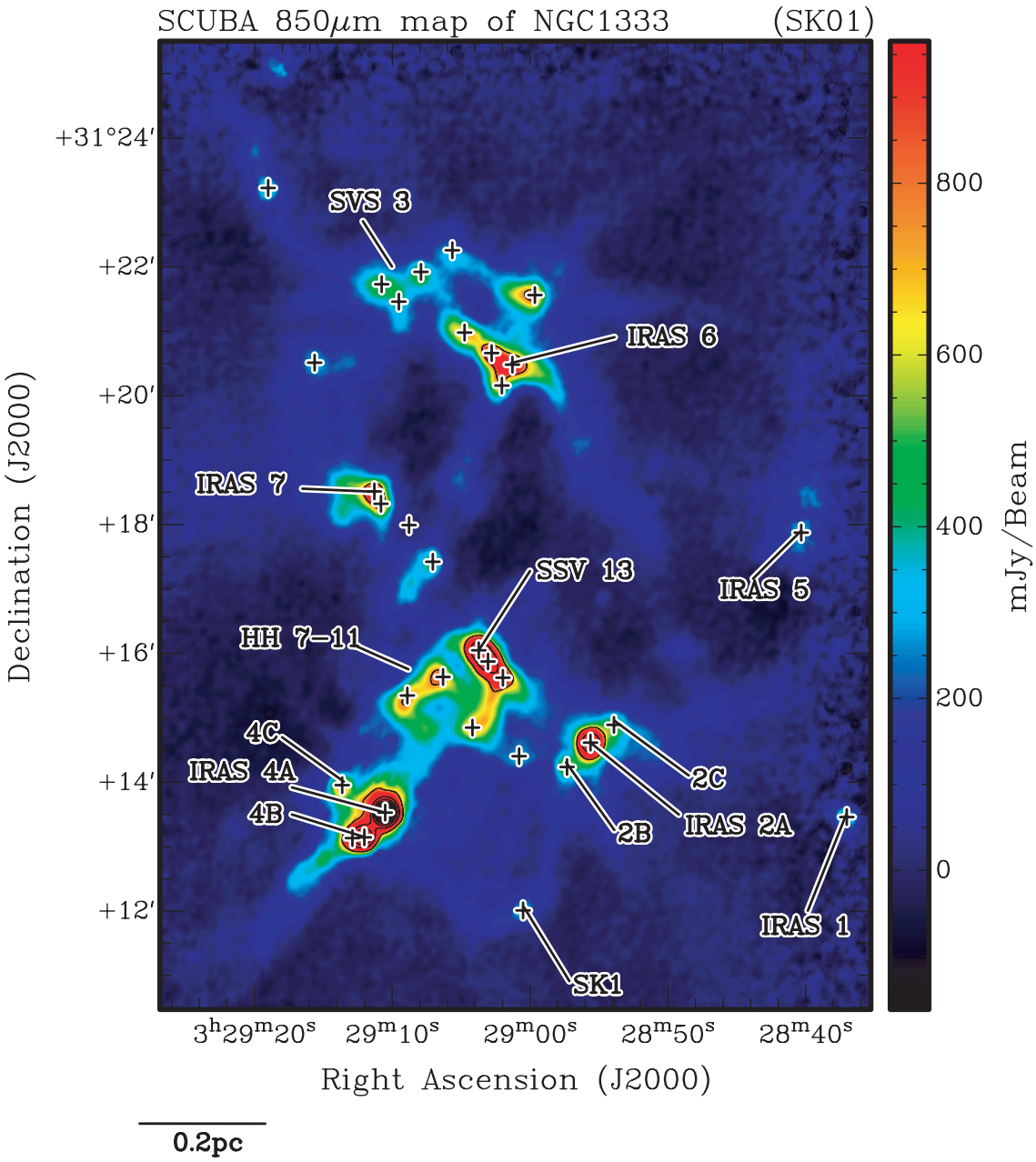


Figure 4.1 – Carte du continuum de la poussière à 850 μm dans NGC 1333 (Sandell & Knee 2001). Les contours représentent 10%, 20%, 30%, ..., 90% du flux maximum de 6.68 Jy beam^{-1}. Les symboles + indiquent les positions des sources de continuum SCUBA identifiées par Sandell & Knee (2001).

source dénommée IRAS 4C fait elle aussi partie de la région NGC 1333 IRAS 4. La Figure 4.1 montre la carte du continuum à 850 μm obtenue avec JCMT/SCUBA (Submillimetre Common User Bolometer Array) par Sandell & Knee (2001) en direction de la région NGC 1333 ainsi que la position des différentes sources qui la composent. La proto-étoile IRAS 4BI est séparée de sa compagne IRAS 4BII par $11''$, tandis que IRAS 4A montre une séparation entre ses composantes IRAS 4A1 et 4A2 de $\sim 1.8''$ (Lay et al. 1995; Looney et al. 2000; Jørgensen et al. 2007). Les sources IRAS 4A et 4BI sont des proto-étoiles de Classe 0, tandis que la nature d'IRAS 4C et d'IRAS 4BII n'est pas claire. La dénomination IRAS 4B désigne souvent la source IRAS 4BI. Sa compagne IRAS 4BII est alors appelée IRAS 4B' (e.g. Jørgensen et al. 2007, 2009). Par la suite, l'appellation IRAS 4B fera donc référence à la source IRAS 4BI.

Les deux proto-étoiles IRAS 4A et 4B se caractérisent par une chimie particulièrement riche. De nombreuses molécules organiques complexes comme $HCOOCH_3$, HCOOH, CH_3CN, C_2H_5CN et CH_3OCH_3 ont été détectées au sein de leurs *hot corinos* (Bottinelli et al. 2004a, 2007; Sakai et al. 2006; Persson et al. 2012). Des flots moléculaires, tracés par des molécules comme CO, CS et SiO, s'échappent également de ces sources (Blake et al. 1995; Lefloch et al. 1998; Yıldız et al. 2012). Les flots d'IRAS 4A sont particulièrement puissants et bien collimatés comme le montre, par exemple, la carte de la transition 6–5 de CO de cette région (cf Fig. 4.2 ; Yıldız et al. 2012). Des mouvements d'effondrement ont été détectés dans l'enveloppe d'IRAS 4A par Choi et al. (1999) grâce à des observations de la raie HCN 1–0 avec l'interféromètre BIMA (*Berkeley-Illinois-Maryland Association*) qui montrent un profil inverse P-Cygni. Ce type de profil présente une composante en absorption décalée vers le rouge et une composante en émission décalée vers le bleu (comme les raies fondamentales de HDO en Fig. 4.3) qui traduisent des mouvements d'effondrement. Les observations de la transition $3_{1,2} - 2_{1,1}$ de H_2CO avec l'interféromètre du Plateau de Bure par Di Francesco et al. (2001) ont permis de confirmer l'effondrement pour IRAS 4A et de le mettre en évidence pour la première fois pour IRAS 4B. Des profils inverses P-Cygni ont aussi été observés en direction d'IRAS 4A pour la transition 4–3 de HCN (Attard et al. 2009) et la transition fondamentale $1_{1,0}$–$1_{0,1}$ de H_2O (Kristensen et al. 2012).

La distance de la nébuleuse NGC 1333 fait l'objet de nombreux débats. Des distances allant de 220 pc (Černis 1990) à 350 pc (Herbig & Jones 1983) ont en effet été suggérées. Les plus grandes distances sont souvent basées sur l'estimation de la distance de l'association OB2 de Persée qui est d'environ 320 pc d'après des mesures de parallaxe du satellite HIPPARCOS (*HIgh Precision PARallax COllecting Satellite*) par de Zeeuw et al. (1999). Il semble cependant que Per OB2 pourrait se situer à l'arrière du nuage d'intérêt probablement plus proche ($\sim$250 pc ; Černis 1993). En fait, il est aussi possible que l'utilisation d'une distance unique pour le nuage entier ne soit pas adaptée. Des études d'extinction suggèrent notamment des distances variant de 220 à 260 pc d'Ouest en Est (e.g. Černis & Straižys 2003). De plus, certains auteurs ont suggéré que le nuage de Persée serait une superposition d'au moins deux nuages plus petits (e.g. Ridge et al. 2006). La mesure la plus fiable de la distance apparaît, à ce jour, être celle du maser H_2O dans NGC 1333 SSV13 estimée à 235 ± 18 pc par Hirota et al. (2008) à partir de mesures de parallaxe par VLBI (*Very Long Baseline Interferometry*). Nous adoptons donc par la suite la distance de 235 pc pour la modélisation hors-ETL.

4.2 Observations

4.2.1 Données Herschel/HIFI

Dans le cadre de la collaboration entre les programmes Herschel CHESS, WISH et HEXOS, deux transitions de HDO ont été observées avec HIFI en direction des deux proto-étoiles IRAS 4A et IRAS 4B : la transition fondamentale $1_{1,1}$–$0_{0,0}$ à 894 GHz et la transition $2_{1,1}$–$2_{0,2}$ à 600 GHz. Les observations étaient pointées et ont été réalisées en août 2011, en utilisant le mode *fast chop Double Beam Switch* avec optimisation du continuum. Pour IRAS 4A, les coordonnées sont $\alpha_{2000} = 3^h\ 29^m\ 10\overset{s}{.}5$, $\delta_{2000} = 31°\ 13'\ 30.9''$ tandis que pour IRAS 4B, elles sont $\alpha_{2000} = 3^h\ 29^m\ 12\overset{s}{.}0$, $\delta_{2000} = 31°\ 13'\ 8.1''$. Ces deux transitions ont également été observées en direction d'une position située dans l'un des flots de la source IRAS 4A, décalé vers le rouge. Les coordonnées ($\alpha_{2000} = 3^h\ 29^m\ 10\overset{s}{.}8$, $\delta_{2000} = 31°\ 13'\ 50.9''$) ont été choisies à partir de la carte en CO 6–5 réalisé par Yıldız et al. (2012) (cf Fig. 4.2) et de manière à ce que les lobes à 600 et 894 GHz n'incluent pas la source proto-stellaire IRAS 4A. Le spectromètre large bande (WBS) a été utilisée, fournissant une résolution spectrale de 1.1 MHz ($0.55\,\mathrm{km\,s^{-1}}$ à 600 GHz et $0.37\,\mathrm{km\,s^{-1}}$ à 894 GHz). Les données ont été produites avec le pipeline HIFI standard jusqu'au niveau 2 (calibrations de fréquence et d'amplitude) avec le package HIPE 7.1 (Ott 2010). Les polarisations H et V ont alors été moyennées en pondérant par le bruit observé avec le logiciel CLASS. Les profils observés à 894 GHz montrent clairement une large composante attribuée aux jets, une composante plus étroite traçant l'enveloppe et une composante en absorption étroite et fine (cf Fig. 4.3). Les profils ont été décomposés en une somme de trois Gaussiennes en utilisant le logiciel CASSIS, dont les paramètres sont reportés en Table 4.2. L'observation à la position du flot montre à la fois la composante large des jets et une raie fine en absorption. Ce profil est superposé à celui observé en direction d'IRAS 4A en Figure 4.3. Le rapport de gain entre bande LSB et bande USB est supposé être égal à 1 pour la bande 3b (Roelfsema et al. 2012). Le continuum est donc divisé par 2 à 894 GHz afin d'étudier la raie en absorption. La raie à 600 GHz est clairement détectée uniquement en direction de la proto-étoile IRAS 4B (cf Figs. 4.8 et 4.10).

4.2.2 Données IRAM-30m

Trois transitions supplémentaires ont été observées à 81, 226 et 242 GHz en direction de la source IRAS 4A avec le télescope de l'IRAM. Seules les transitions à 226 et 242 GHz ont été détectées. Les observations ont été réalisées en novembre 2004 pour les raies à 81 et 226 GHz, alors que la transition à 242 GHz a été observée en avril 2012. La résolution spectrale est de 0.14, 0.24 et 0.1 $\mathrm{km\,s^{-1}}$ pour les observations à 81, 226 et 242 GHz respectivement. En direction de IRAS 4B, seules les transitions à 226 et 242 GHz ont été observées mais non détectées (avril 2005). Le *rms* est de ∼20–21 mK pour une résolution spectrale de ∼0.1 $\mathrm{km\,s^{-1}}$. Les *beam efficiencies* et *forward efficiencies* des différentes observations sont présentées en Table 4.1.

4.2.3 Données JCMT

La transition fondamentale $1_{0,1}$–$0_{0,0}$ de HDO a été observée à 465 GHz en direction de la proto-étoile IRAS 4A avec le JCMT en septembre 2004 (projet M04BN06). La résolution

TABLE 4.1 – Paramètres des transitions de HDO observées en direction des proto-étoiles NGC 1333 IRAS 4A et IRAS 4B[(1)].

Fréquence (GHz)	$J_{\rm Ka,Kc}$	$E_{\rm up}/k$ (K)	$A_{\rm ij}$ ($\rm s^{-1}$)	Télescope	Lobe ($''$)	$F_{\rm eff}$	$B_{\rm eff}$	rms[(2)] (mK)	$\int T_{\rm mb} dv$ (K km $\rm s^{-1}$)
NGC 1333 IRAS 4A									
80.5783	$1_{1,0}$-$1_{1,1}$	47	1.32×10^{-6}	IRAM-30m	31.2	0.95	0.78	4	≤ 0.026
225.8967	$3_{1,2}$-$2_{2,1}$	168	1.32×10^{-5}	IRAM-30m	11.1	0.91	0.54	9	0.263
241.5616	$2_{1,1}$-$2_{1,2}$	95	1.19×10^{-5}	IRAM-30m	10.4	0.90	0.57	18	0.250
464.9245	$1_{0,1}$-$0_{0,0}$	22	1.69×10^{-4}	JCMT	10.8	–	0.44[(3)]	53	1.760
599.9267	$2_{1,1}$-$2_{0,2}$	95	3.45×10^{-3}	HIFI 1b	35.9	0.96	0.75	7	≤ 0.047
893.6387	$1_{1,1}$-$0_{0,0}$	43	8.35×10^{-3}	HIFI 3b	24.1	0.96	0.74	4	0.546
Position dans le flot de NGC 1333 IRAS 4A									
599.9267	$2_{1,1}$-$2_{0,2}$	95	3.45×10^{-3}	HIFI 1b	35.9	0.96	0.75	7	≤ 0.047
893.6387	$1_{1,1}$-$0_{0,0}$	43	8.35×10^{-3}	HIFI 3b	24.1	0.96	0.74	4	0.274
NGC 1333 IRAS 4B									
225.8967	$3_{1,2}$-$2_{2,1}$	168	1.32×10^{-5}	IRAM-30m	11.1	0.91	0.54	16	≤ 0.107
241.5616	$2_{1,1}$-$2_{1,2}$	95	1.19×10^{-5}	IRAM-30m	10.4	0.88	0.51	15	≤ 0.101
464.9245	$1_{0,1}$-$0_{0,0}$	22	1.69×10^{-4}	CSO	16.5	–	0.35[(3)]	86	0.811
599.9267	$2_{1,1}$-$2_{0,2}$	95	3.45×10^{-3}	HIFI 1b	35.9	0.96	0.75	6	0.072
893.6387	$1_{1,1}$-$0_{0,0}$	43	8.35×10^{-3}	HIFI 3b	24.1	0.96	0.74	4	0.401

(1) Les fréquences, les énergies de niveau supérieur ($E_{\rm up}$) et les coefficients d'Einstein ($A_{\rm ij}$) de HDO viennent du catalogue spectroscopique JPL (Pickett et al. 1998).
(2) Le *rms* (en $T_{\rm mb}$) est calculé pour une résolution spectrale de $0.5\,\rm km\,s^{-1}$.
(3) Cette valeur correspond au rapport entre la *main beam efficiency* et la *forward efficiency*.

TABLE 4.2 – Décomposition en différentes composantes des profils de raie de HDO dans les sources IRAS 4A et IRAS 4B[(1)].

		Composante large			Composante moyenne			Composante en absorption		
Fréquence (GHz)	$J_{\rm Ka,Kc}$	$T_{\rm mb}^{\rm peak}$ (K)	$FWHM$ (km $\rm s^{-1}$)	$v_{\rm LSR}$ (km $\rm s^{-1}$)	$T_{\rm mb}^{\rm peak}$ (K)	$FWHM$ (km $\rm s^{-1}$)	$v_{\rm LSR}$ (km $\rm s^{-1}$)	$T_{\rm mb}^{\rm peak}$ (K)	$FWHM$ (km $\rm s^{-1}$)	$v_{\rm LSR}$ (km $\rm s^{-1}$)
NGC 1333 IRAS 4A										
225.8967	$3_{1,2}$-$2_{2,1}$	–	–	–	0.032	7.9	6.0	–	–	–
241.5616	$2_{1,1}$-$2_{1,2}$	–	–	–	0.047	5.4	7.9	–	–	–
464.9245	$1_{0,1}$-$0_{0,0}$	0.121	15.9	5.9	0.251	1.8	7.0	−0.623	0.9	7.7
893.6387	$1_{1,1}$-$0_{0,0}$	0.040	15.9	5.9	0.1373	2.0	7.2	−0.384	1.2	7.6
NGC 1333 IRAS 4B										
464.9245	$1_{0,1}$-$0_{0,0}$	–	–	–	0.285	2.2	6.4	–	–	–
599.9267	$2_{1,1}$-$2_{0,2}$	–	–	–	0.030	2.7	7.6	–	–	–
893.6387	$1_{1,1}$-$0_{0,0}$	0.044	10.0	6.8	0.171	0.9	6.6	−0.182	1.3	7.4

(1) Obtenues à partir d'ajustements Gaussiens sur chaque composante selon l'algorithme Levenberg-Marquardt.

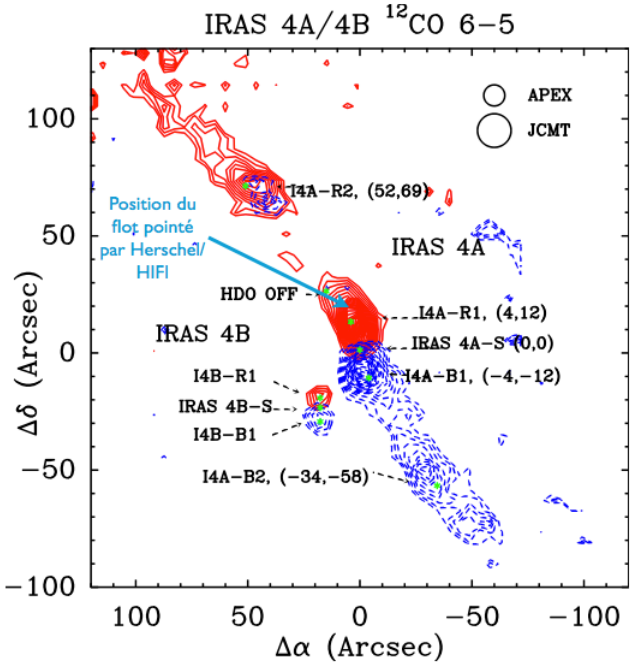


Figure 4.2 – Carte de la transition 6–5 de CO en direction de la région NGC 1333. La carte est centrée sur la position d'IRAS 4A ($\alpha_{2000} = 3^h\ 29^m\ 10\overset{s}{.}5$, $\delta_{2000} = 31°\ 13'\ 30.9''$). La position observée dans le flot décalé vers le rouge est signalée par une flèche turquoise. Figure extraite de Yıldız et al. (2012).

spectrale est de 0.1 km s^{-1}. Les données ont été *smoothées* deux fois afin de réduire le *rms*. Comme pour la transition fondamentale à 894 GHz observée avec HIFI, trois composantes sont visibles : une large composante attribuée aux jets proto-stellaires, une composante en émission plus fine et une composante en absorption étroite et profonde (cf Fig. 4.3). Le continuum SSB est estimé à environ 0.8 K. La $FWHM$ et la vitesse au pic de la Gaussienne ajustée pour la composante large de la raie à 894 GHz sont cohérentes avec celle de la raie à 465 GHz. Ces paramètres ont été fixés pour déterminer l'intensité de la Gaussienne (cf Table 4.2).

4.2.4 Données CSO

En septembre 2011, j'ai réalisé des observations de la transition fondamentale $1_{0,1}$–$0_{0,0}$ de HDO à 465 GHz avec le CSO dans plusieurs sources dont la proto-étoile IRAS 4B. Elles ont été réalisées en mode *wobbler switching* avec une amplitude de 240″. La *beam efficiency* (0.35) et la taille du lobe (16.5″) ont été mesurées en effectuant une observation pointée sur Mars en utilisant le récepteur à 350 GHz. La composante large observée à 894 GHz n'est pas identifiée pour cette transition, très probablement en raison du *rms* relativement élevé (76 mK pour une résolution spectrale de 0.079 km s^{-1}). Le continuum SSB est d'environ 0.18 K.

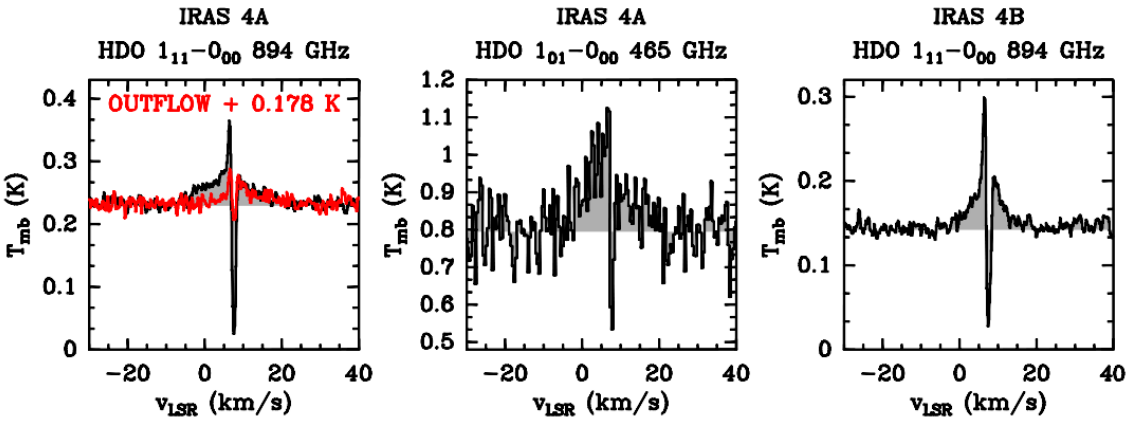


Figure 4.3 – Observations des transitions fondamentales de HDO montrant une composante en émission large traçant les flots moléculaires. A gauche : transition $1_{1,1}$–$0_{0,0}$ à 894 GHz dans IRAS 4A (en noir) et dans un des ses flots moléculaires (en rouge). Au centre : transition $1_{0,1}$–$0_{0,0}$ à 465 GHz dans IRAS 4A. A droite : transition $1_{1,1}$–$0_{0,0}$ à 894 GHz dans IRAS 4B.

4.3 Modélisation et résultats

4.3.1 Modélisation

Comme pour IRAS 16293, j'ai fait tourner des grilles de modèle en utilisant le code de transfert radiatif hors-ETL RATRAN (cf Sect. 2.3.3.3) pour reproduire les profils de raie de HDO observés. La structure des deux sources étudiées ici a été déterminée par Kristensen et al. (2012) dans le cadre du programme Herschel WISH. Le modèle de transfert radiatif 1D DUSTY (Ivezic & Elitzur 1997) a été utilisé pour déterminer les profils en densité et en température de la poussière, à partir de cartes d'émission du continuum obtenues avec PACS, SCUBA (450 et 850 μm ; Di Francesco et al. 2008) et Bolocam. La température du gaz a été supposée égale à la température de la poussière. Les profils en densité et en température des sources IRAS 4A et IRAS 4B sont présentées en Figure 4.4. On notera que la structure est incertaine à faible échelle ($\lesssim$ 100 UA) du fait de la résolution spatiale des cartes utilisées. Le coefficient d'absorption massique utilisé dans l'étude de Kristensen et al. (2012) est défini par le modèle d'Ossenkopf & Henning (1994) pour des manteaux de glace minces qui ont coagulé en 10^6 ans. Le continuum est correctement reproduit pour la source IRAS 4B. Nous utiliserons donc ce modèle-là pour modéliser le continuum des observations. Nous ne pouvons cependant pas l'utiliser pour la source IRAS 4A, car le continuum modélisé est en désaccord avec les observations. Il a donc fallu trouver un coefficient d'absorption massique qui permette de produire un continuum compatible avec les observations d'IRAS 4A, en particulier aux fréquences où des raies en absorption sont détectées. La loi de puissance définie par :

$$\kappa = \kappa_0 \left(\frac{\nu}{\nu_0}\right)^{\beta}, \tag{4.1}$$

avec $\beta = 1.05$, $\kappa_0 = 8.5$ cm^{-2}/g$_{\rm dust}$ et $\nu_0 = 10^{12}$ Hz, paraît la plus adaptée. Cette divergence entre les observations et les prédictions en utilisant le modèle d'Ossenkopf & Henning (1994)

s'explique probablement par les immenses flots qui s'échappent de cette source et contribuent de manière non négligeable au continuum observé. On notera que le choix du coefficient d'absorption massique a un impact négligeable sur les raies en émission.

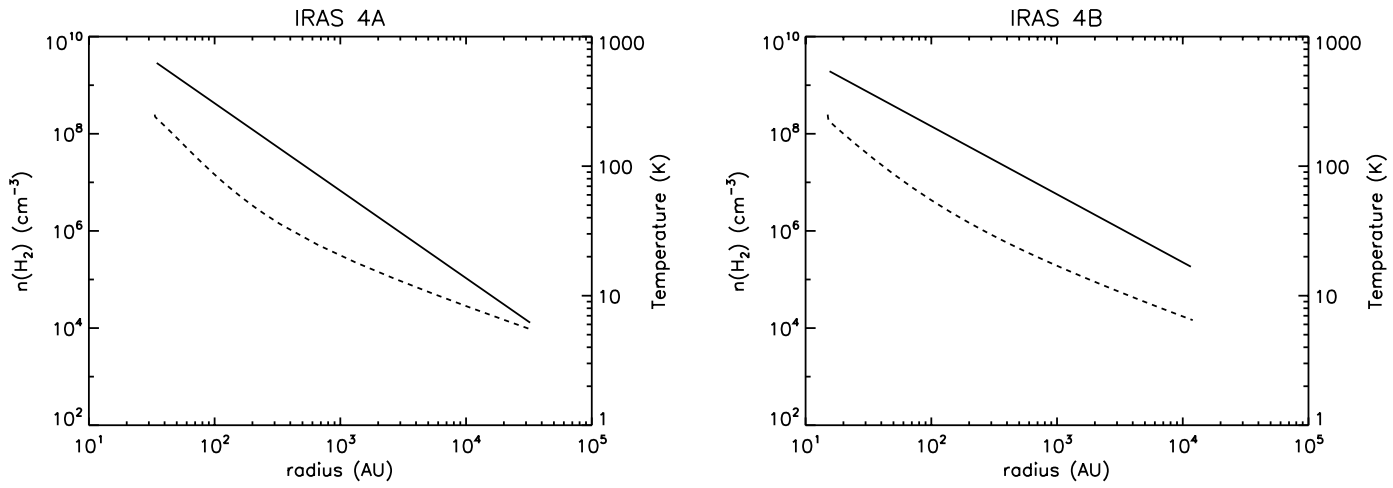


Figure 4.4 – Profils en densité (en trait plein) et en température (en pointillé) des sources IRAS 4A (à gauche) et IRAS 4B (à droite) déterminés par Kristensen et al. (2012).

Le profil en vitesse est défini comme un profil de chute libre ($v_r = -\sqrt{2GM/r}$). Pour IRAS 4A, la masse centrale est fixée à 0.5 $M_\odot$. Cette valeur a été estimée par Maret et al. (2002) dans le cadre de la modélisation des flux de l'eau mesurés par ISO avec le code de Ceccarelli et al. (1996). La distance supposée de la source était de 220 pc, ce qui est comparable à la distance de 235 pc utilisée ici. Di Francesco et al. (2001) avaient, par contre, déterminé une masse de 0.7 $M_\odot$, à une distance de 350 pc, en se basant sur le profil inverse P Cygni de la transition $3_{1,2}$–$2_{1,1}$ de H_2CO observé avec l'interféromètre du Plateau de Bure. Si l'on réutilise la vitesse d'effondrement estimée par Di Francesco et al. (2001) pour la raie de H_2CO, on obtient alors, à une distance de 235 pc, une masse centrale de 0.46 $M_\odot$, en accord avec les 0.5 $M_\odot$ de Maret et al. (2002). Jørgensen et al. (2009) ont estimé la masse des disques entourant les sources IRAS 4A1 et IRAS 4A2 à 0.46 et 0.22 $M_\odot$ respectivement, en se basant sur des observations *single-dish* et interférométriques du continuum. La somme des masses des deux disques apparaît alors supérieure (0.68 $M_\odot$) à 0.5 $M_\odot$. En utilisant des observations interférométriques de NH_3, Choi et al. (2010) trouvent cependant une masse inférieure pour le disque d'IRAS 4A2, $\sim$ 0.08 $M_\odot$, ce qui réduit la masse de la binaire IRAS 4A à 0.54 $M_\odot$ en supposant que la masse d'IRAS 4A1 estimée par Jørgensen et al. (2009) soit correcte. Il n'existe pas pour cette dernière d'estimation plus récente. Pour IRAS 4B, la masse centrale est plus incertaine. Di Francesco et al. (2001) estiment une masse de 0.2 $M_\odot$ à 350 pc, correspondant à 0.16 $M_\odot$ à 235 pc, qui est bien plus faible que celle estimée par Maret et al. (2002) à 0.5 $M_\odot$, mais plus proche de celle (0.24 $M_\odot$) suggérée plus récemment par Jørgensen et al. (2009). Etant donné l'incertitude sur la masse, j'ai donc réalisé pour cette source une

grille de modèles avec trois paramètres d'ajustement : l'abondance interne $X_{\rm in}$, l'abondance externe $X_{\rm out}$ et la masse centrale M qui définit le profil en vitesse. Pour reproduire la largeur des raies en absorptions, le paramètre b-doppler a été fixé à 0.4 km s^{-1} pour IRAS 4A et 0.5 km s^{-1} pour IRAS 4B.

Pour comparer les profils de raies observés avec ceux modélisés dans l'enveloppe proto-stellaire, il a fallu soustraire la composante large attribuée aux flots moléculaires observée sur les raies fondamentales de HDO (cf Table 4.2). Les coefficients de collision de HDO avec ortho et para–H_2 déterminés par Faure et al. (2011) ont été pris en compte, en supposant un rapport ortho/para de H_2 à l'ETL dans les différentes couches de la structure. Pour déterminer le meilleur modèle et tracer les contours de χ^2 à 1σ, 2σ et 3σ, seule la méthode de minimisation de χ^2 n$^{\rm o}$ 2 (cf Sect. 3.3.3) a été utilisée ici.

4.3.2 L'enveloppe proto-stellaire d'IRAS 4A

Une grille de modèles avec différentes abondances internes et externes a été lancée. Comme pour IRAS 16293, une couche d'absorption doit être ajoutée à la structure de Kristensen et al. (2012) pour reproduire les fines absorptions observées sur les raies fondamentales. Aucun des modèles ne peut produire d'absorption sans prédire un excès de flux pour les raies en émission. La Figure 4.6 montre la différence de modélisation avec et sans la couche d'absorption. Selon la position de la couche d'absorption par rapport aux flots, la composante en absorption doit être plus ou moins profonde après la soustraction de la composante large des flots. En effet, si la couche d'absorption est entre les jets moléculaires et l'enveloppe proto-stellaire (cf cas (a) de la Fig. 4.5), la profondeur de la raie en absorption sera la même car le "continuum" produit par les flots (composante large) ne sera pas absorbé. Par contre, si la couche d'absorption est au premier plan par rapport aux flots (cf cas (b) de la Fig. 4.5), le continuum obtenu après soustraction sera inférieur au "vrai" continuum absorbé, puisque le continuum produit par les flots contribue à l'absorption. Dans ce cas, la profondeur de la raie devra être réduite d'une valeur environ égale à l'intensité de la Gaussienne ajustée sur la composante large (à $\lesssim 10\%$ près) pour les raies étudiées. La présence d'une composante en absorption sur les données à 894 GHz en direction du flot (cf panneau gauche de la Fig. 4.3) suggère néanmoins que la couche d'absorption est plus étendue que les flots, puisque la profondeur de l'absorption est de 0.08 K et le continuum observé à cette position est de $\sim$ 0.05 K. La profondeur des raies en absorption a donc été limitée pour prendre en compte l'absorption par les flots moléculaires après la soustraction de la composante large. Pour reproduire la profondeur des raies en absorption, la densité de colonne de HDO dans cette couche d'absorption est de $\sim 1.4 \times 10^{13}$ cm^{-2}, en accord à moins d'un facteur 2 avec celle d'IRAS 16293 ($\sim 2.3 \times 10^{13}$ cm^{-2}). Si cette couche d'absorption est produite par la photo-désorption des molécules d'eau à des extinctions visuelles entre 1 et 4 comme le prédit le modèle d'Hollenbach et al. (2009), on peut alors estimer l'abondance de HDO dans cette couche à environ 3.7×10^{-9} – 1.5×10^{-8}. La présence d'une couche d'absorption à grande échelle, de vitesse v_{LSR} de 8 km s^{-1}, avait été suggérée par Choi et al. (2004) pour des molécules telles que CO, HCN, HCO^+ et H_2CO. En utilisant des observations *single-dish* de la transition 3–2 de CO, Choi et al. (2004) avaient estimé que cette couche absorbante pourrait être plus étendue que les flots ($> 200''$) qui sont eux-mêmes plus larges que la région IRAS 4 englobant les

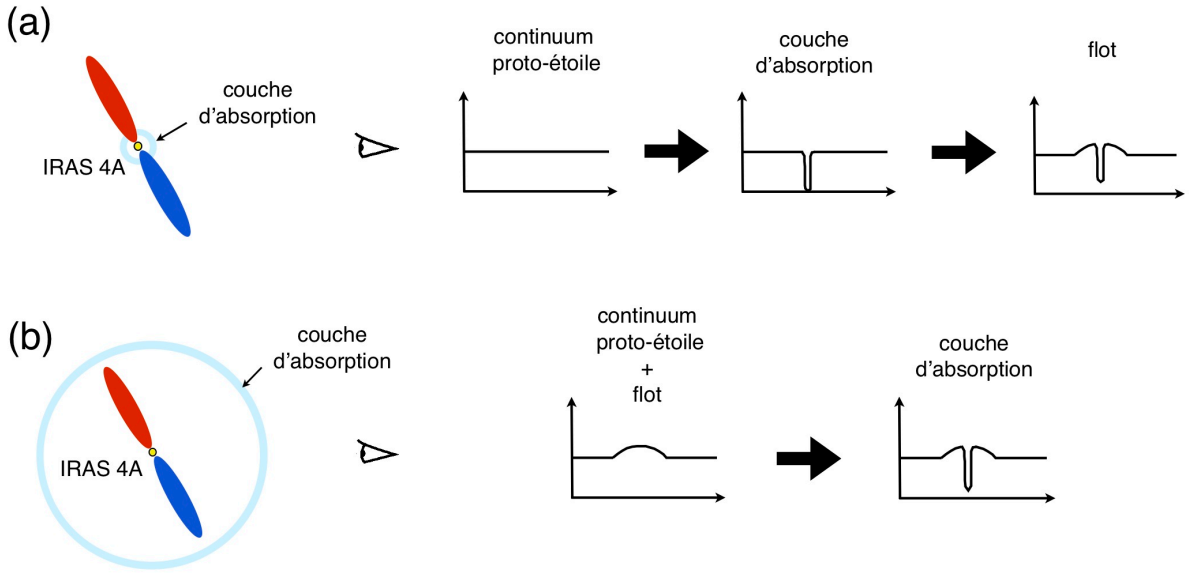


FIGURE 4.5 – Représentation des différentes positions possibles de la couche d'absorption par rapport à la source IRAS 4A et son flot moléculaire et impact sur l'absorption des raies fondamentales. Dans le cas (a), la couche d'absorption est peu étendue par rapport aux flots. Le continuum qui va être absorbé est uniquement dû à la proto-étoile. La composante large produite par les flots s'ajoute dessus. Dans le cas (b), la couche d'absorption est plus étendue que les flots moléculaires. Le continuum qui va être absorbé est donc dû à la proto-étoile et au flot moléculaire.

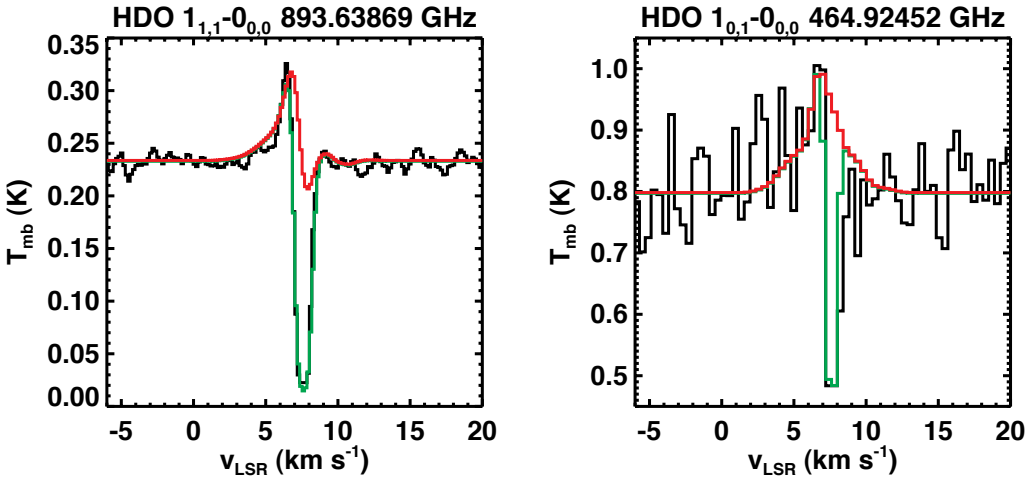


FIGURE 4.6 – En *noir* : les deux transitions fondamentales $1_{1,1}$–$0_{0,0}$ et $1_{1,0}$–$0_{0,0}$ de HDO observées respectivement à 894 GHz avec HIFI et à 465 GHz avec JCMT en direction d'IRAS 4A. En *rouge* : la modélisation de HDO sans couche d'absorption. En *vert* : la modélisation de HDO avec une couche d'absorption dont la densité de colonne de HDO est d'environ $\sim 1.4 \times 10^{13}$ cm^{-2}.

deux cœurs 4A et 4B. Pour l'eau deutérée, la couche d'absorption apparaît à une vitesse v_{LSR} de 7.6 km s^{-1}. Il pourrait donc s'agir de la même couche absorbante observée par Choi et al. (2004) à ∼8 km s^{-1}. A partir d'observations de CS et de N_2H^+, Belloche et al. (2006) avaient cependant remis en cause l'existence de cette couche d'absorption, arguant qu'un mouvement d'effondrement dans l'enveloppe suffirait à expliquer les absorptions observées à 8 km s^{-1} par Choi et al. (2004). Ces derniers avaient en effet supposé une vitesse au repos d'IRAS 4A à 6.7 km s^{-1}, ce qui rendait plus difficile de reproduire les composantes en absorption par un mouvement d'effondrement, tandis que Belloche et al. (2006) considéraient que la vitesse de la source était de 7.2 km s^{-1}. C'est cette dernière valeur qui a été utilisée ici. D'après l'analyse de l'eau deutérée, une combinaison des deux scénarios semble en fait la plus probable, avec un mouvement d'effondrement dans l'enveloppe proto-stellaire auquel s'ajoute la présence en avant-plan d'une large couche d'absorption riche en eau à ∼7.6 km s^{-1}.

Une deuxième grille de modèles a été lancée en ajoutant la couche d'absorption décrite ci-dessus à la structure en densité et température de Kristensen et al. (2012). Le meilleur modèle est obtenu pour une abondance interne $X_{\rm in} = 7.5 \times 10^{-9}$ et une abondance externe $X_{\rm out} = 1.2 \times 10^{-11}$ avec un paramètre α d'environ 1.4. Les profils de raie prédits par ce modèle sont présentés en Figure 4.8. Les contours de χ^2 à 1σ, 2σ et 3σ sont montrés en Figure 4.7. A 3σ, l'abondance interne est comprise entre 4.5×10^{-9} et 1.1×10^{-8}, alors que l'abondance externe est comprise entre 8×10^{-12} et 1.6×10^{-11}. On notera que le fait de choisir une masse différente pour le profil en vitesse n'a pas un grand impact sur les résultats. En effet, pour une masse de 0.3 $M_\odot$, le meilleur modèle est celui avec une abondance interne $X_{\rm in} = 7 \times 10^{-9}$ et une abondance externe $X_{\rm out} = 1.2 \times 10^{-11}$, tandis que pour une masse de 0.7 $M_\odot$, il s'agit du modèle avec $X_{\rm in} = 8.5 \times 10^{-9}$ et $X_{\rm out} = 1.0 \times 10^{-11}$.

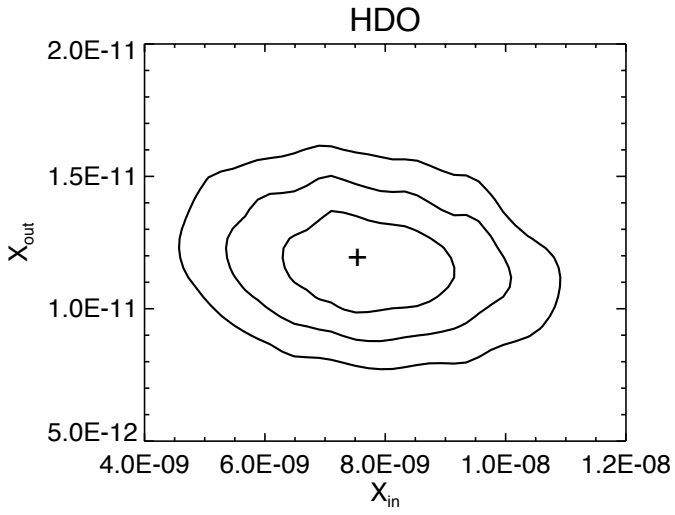


Figure 4.7 – Contours de χ^2 à 1σ, 2σ et 3σ obtenus avec la méthode de χ^2 n° 2 en ajoutant une couche d'absorption avec une densité de colonne de HDO de $\sim 1.4 \times 10^{13}$ cm^{-2} à la structure d'IRAS 4A et en utilisant les coefficients de collision de HDO avec ortho et para–H_2 determinés par Faure et al. (2011). Le meilleur modèle est représenté par le symbole "+".

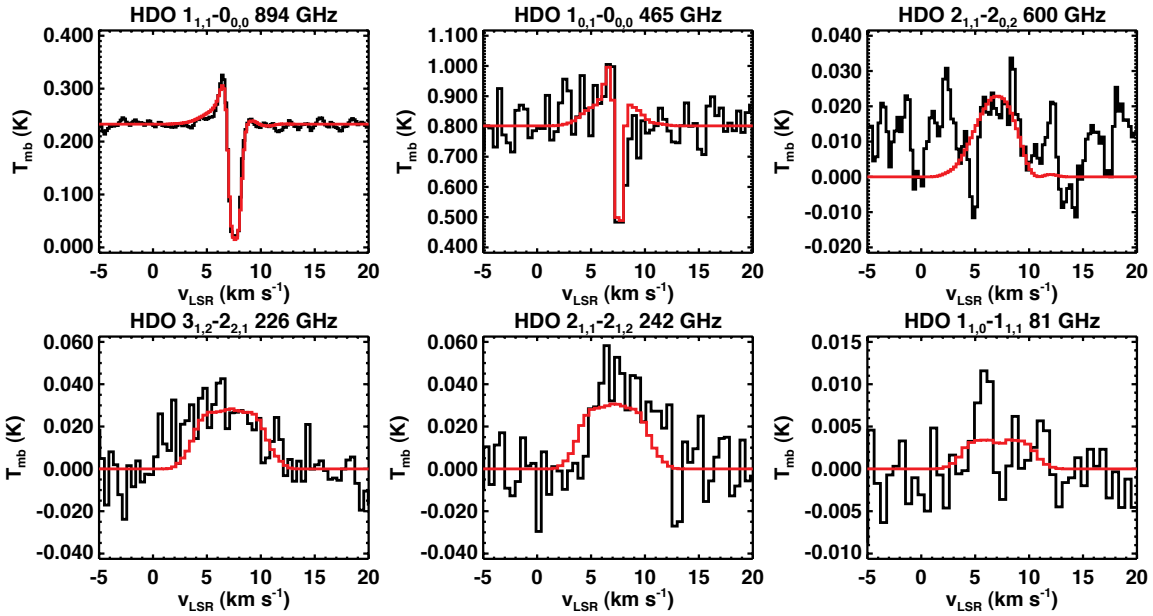


Figure 4.8 – En *noir* : les raies de HDO observées avec HIFI, IRAM et JCMT en direction de la proto-étoile IRAS 4A. La composante large traçant les flots a été soustraite pour les raies fondamentales à 465 et 894 GHz. En *rouge* : le meilleur modèle obtenu en ajoutant une couche d'absorption avec une densité de colonne de HDO de $\sim 1.4 \times 10^{13}$ cm^{-2} à la structure. L'abondance interne est de 7.5×10^{-9} et l'abondance externe de 1.2×10^{-11}.

4.3.3 L'enveloppe proto-stellaire d'IRAS 4B

Pour modéliser l'émission de l'eau deutérée dans l'enveloppe proto-stellaire d'IRAS 4B, j'ai lancé plusieurs grilles de modèle avec différentes valeurs d'abondance interne, d'abondance externe et de masse centrale (0.1, 0.2 et 0.3 M$_\odot$). La couche d'absorption définie pour reproduire les absorptions d'IRAS 4A (N(HDO) = 1.4×10^{13} cm^{-2}, db = 0.4 km s^{-1}) a été ajoutée à la structure d'IRAS 4B définie par Kristensen et al. (2012), puisqu'elle englobe très probablement les deux cœurs d'IRAS 4. Cela paraît, en effet, en accord avec l'absorption observée de la raie fondamentale à 894 GHz (cf Fig. 4.9). La raie fondamentale à 465 GHz apparaît légèrement absorbée en bordure du profil en émission (cf Fig. 4.9), mais la qualité des données CSO n'est cependant pas suffisante pour affirmer que les paramètres de la couche d'absorption définis pour l'étude d'IRAS 4A sont corrects ici. L'absorption ne descend pas en-dessous du continuum car ce dernier est plus faible (0.18 K) que pour IRAS 16293 (1 K) et IRAS 4A (0.8 K). Le lobe du CSO est en effet plus grand à cette fréquence ($\sim$16″ au lieu de $\sim$11″ pour le JCMT) et, par conséquent, dilue plus l'émission du continuum. Le meilleur modèle représenté en Figure 4.10 est obtenu pour une masse centrale de 0.1 M$_\odot$, une abondance interne $X_{\rm in} = 2 \times 10^{-8}$ et une abondance externe $X_{\rm out} = 1.4 \times 10^{-10}$, avec un paramètre α égal à 1.8. Cette étude dépendant de 3 paramètres libres, les contours de χ^2 à 1σ, 2σ et 3σ correspondent aux contours pour lesquels χ^2=$\chi^2_{\rm min}$+3.53 (1σ), χ^2=$\chi^2_{\rm min}$+8.02 (2σ) et χ^2=$\chi^2_{\rm min}$+14.2 (3σ). Ils sont présentés en Figure 4.11. Seule la masse de 0.1 M$_\odot$ respecte

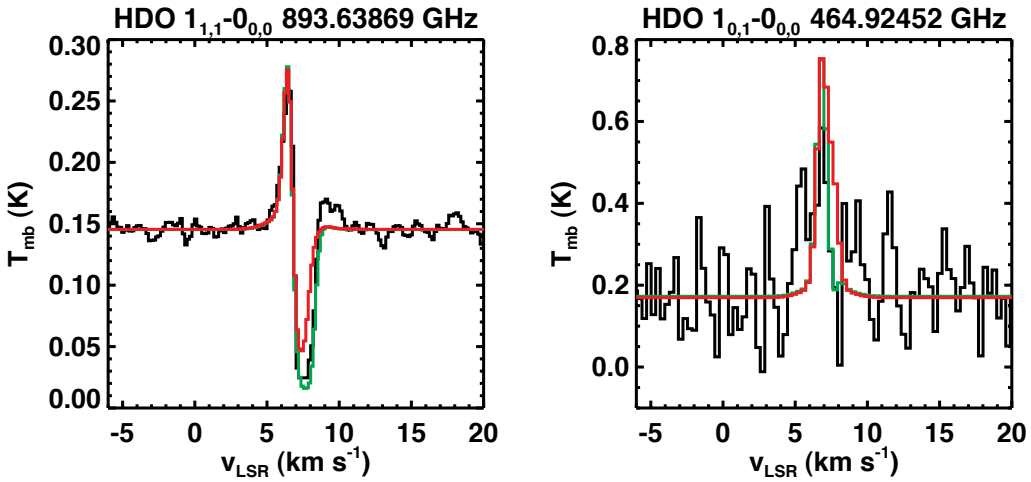


Figure 4.9 – En *noir* : les deux transitions fondamentales $1_{1,1}$–$0_{0,0}$ et $1_{1,0}$–$0_{0,0}$ de HDO observées respectivement à 894 GHz avec HIFI et à 465 GHz avec CSO en direction d'IRAS 4B. En *rouge* : la modélisation de HDO sans couche d'absorption. En *vert* : la modélisation de HDO avec la couche d'absorption définie pour IRAS 4A avec une densité de colonne de HDO d'environ $\sim 1.4 \times 10^{13}$ cm^{-2}.

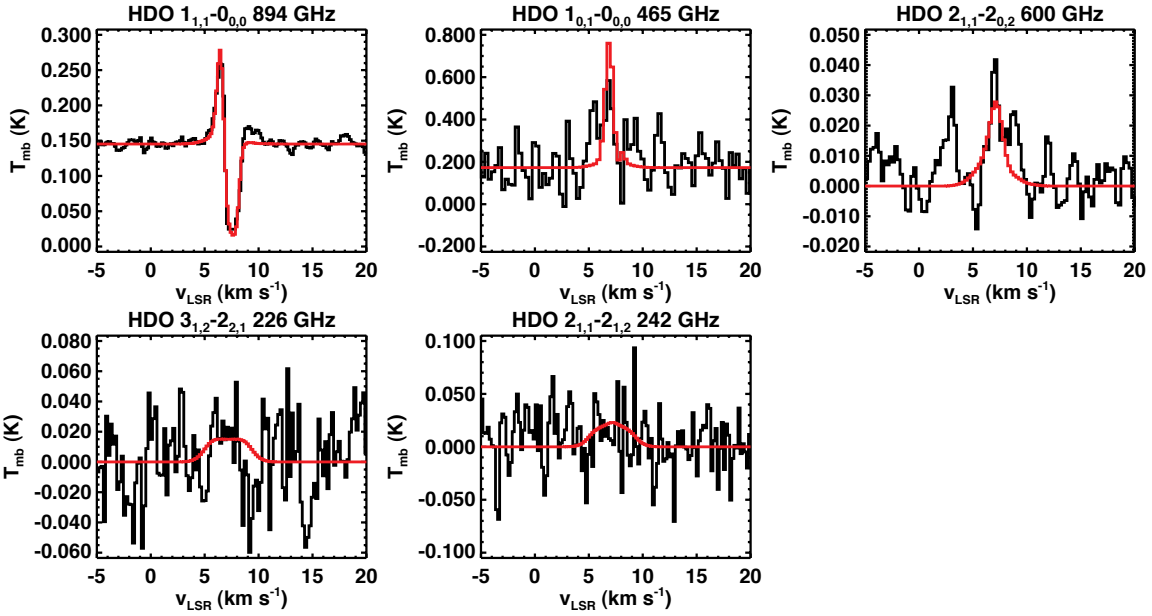


Figure 4.10 – En *noir* : les raies de HDO observées avec HIFI, IRAM et JCMT en direction de la proto-étoile IRAS 4B. La composante large traçant les flots a été soustraite pour la raie fondamentale à 894 GHz. En *rouge* : le meilleur modèle obtenu en ajoutant une couche d'absorption avec une densité de colonne de HDO de $\sim 1.4 \times 10^{13}$ cm^{-2} à la structure. L'abondance interne est de 2×10^{-8} et l'abondance externe de 1.4×10^{-10}.

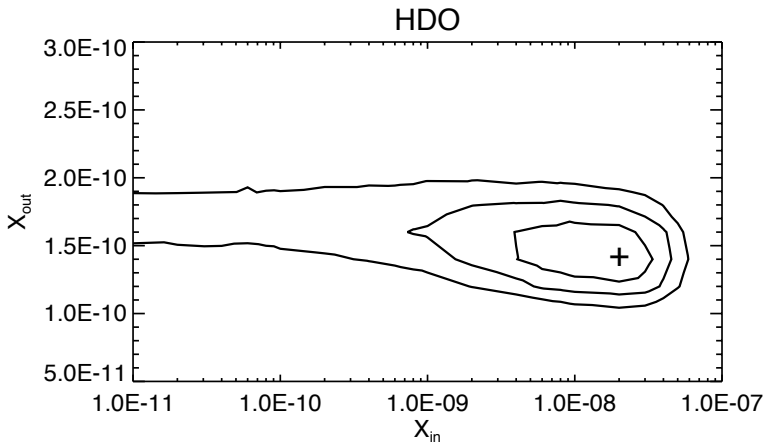


Figure 4.11 – Contours de χ^2 à 1σ, 2σ et 3σ obtenus avec la méthode de χ^2 n° 2 en ajoutant une couche d'absorption avec une densité de colonne de HDO de $\sim 1.4 \times 10^{13}$ cm^{-2} à la structure d'IRAS 4B et en utilisant les coefficients de collision de HDO avec ortho et para–H_2 determinés par Faure et al. (2011). Le meilleur modèle est représenté par le symbole "+". La masse centrale du profil en vitesse est de 0.1 $M_\odot$, les modèles avec des masses de 0.2 et 0.3 $M_\odot$ ne respectant pas le critère à 3σ.

le critère à 3σ. L'abondance externe est comprise entre 1.0×10^{-10} et 2.0×10^{-10}, tandis que l'abondance interne n'est contrainte que par une limite supérieure de 6×10^{-8}. Cette limite supérieure apparaît cohérente avec la non-détection de la raie de HDO à 226 GHz avec l'interféromètre du SMA (Jørgensen & van Dishoeck 2010a).

4.3.4 Le flot moléculaire d'IRAS 4A

Une très large composante associée aux flots est observée sur les deux transitions fondamentales de HDO à 465 et 894 GHz en direction d'IRAS 4A. Leurs profils de raie sont comparables à celui de la raie 6–5 de CO observée avec APEX par Yıldız et al. (2012), suggérant une origine commune de l'émission de HDO et de CO. Une superposition des profils est montrée en Figure 4.12. D'après la carte de CO 6–5 (cf Fig. 4.2), l'émission provient d'une région s'étendant sur environ $20'' \times 50''$. Le modèle de transfert radiatif hors-ETL RADEX (cf Sect. 2.3.3.2) a alors été utilisé pour estimer la densité de colonne de HDO dans les flots. D'après l'étude de Yıldız et al. (2012), aux positions R1 et B1 des flots, la densité de H_2 est de 3×10^5 cm^{-3} tandis que la température est comprise entre 100 et 150 K. En utilisant ces paramètres, la densité de colonne de HDO est alors estimée à $\sim$ 2–4 $\times 10^{13}$ cm^{-2}. On notera que pour des températures inférieures à 100 K, les résultats restent valables puisque la composante large est vue uniquement sur les raies fondamentales peu excitées. En utilisant la densité de colonne de H_2 estimée à 2.06 – 2.8×10^{22} cm^{-2} par Yıldız et al. (2012), l'abondance de HDO dans les flots moléculaires est d'environ 7×10^{-10} – 1.9×10^{-9}.

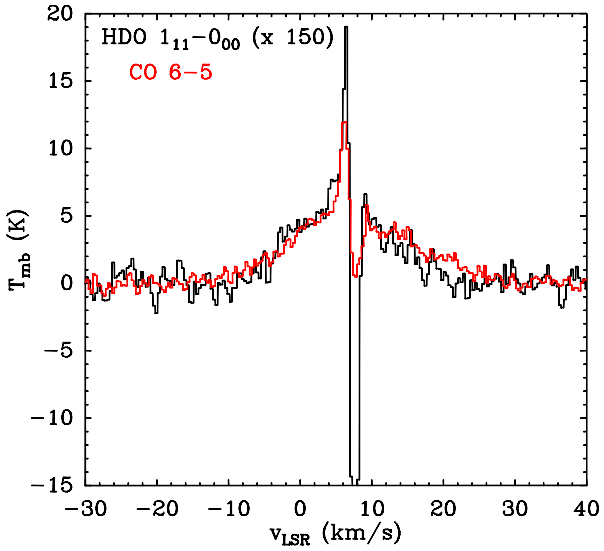


Figure 4.12 – Comparaison des profils des larges composantes traçant les flots moléculaires de la transition 6–5 de CO observée avec APEX (Yıldız et al. 2012) et de la transition $1_{1,1}$–$0_{0,0}$ de HDO observée avec HIFI.

4.4 Discussion et perspectives

4.4.1 Détermination des rapports HDO/H_2O

Les estimations des abondances de l'eau à partir des données HIFI de $H_2{}^{16}O$ et $H_2{}^{18}O$ ne sont pas encore disponibles. Elles doivent être déterminées par le groupe WISH mais des observations de raies excitées de $H_2{}^{18}O$ avec HIFI sont encore attendues. Pour le moment, nous ne pouvons donc pas estimer les rapports HDO/H_2O dans les enveloppes des proto-étoiles IRAS 4A et IRAS 4B. Des estimations d'abondances de l'eau avaient été réalisées à partir d'observations de raies de $H_2{}^{16}O$ avec ISO/LWS (Maret et al. 2002). Mais comme nous l'avons vu pour IRAS 16293, les abondances trouvées sont entâchées d'incertitude puisque les flots émettent des quantités d'eau non négligeables (cf Sect. 3.4.1). Le lobe du satellite ISO englobe, par ailleurs, les deux cœurs d'IRAS 4, complexifiant davantage la détermination des abondances dans chacune des sources.

Persson et al. (2012) ont récemment déterminé l'abondance de H_2O dans le *hot corino* d'IRAS 4A, en se basant sur des observations de la transition $3_{1,3}$–$2_{2,0}$ de para–$H_2{}^{18}O$ à 203 GHz avec l'interféromètre du Plateau de Bure. Ils trouvent une abondance interne de H_2O de 1.4×10^{-7} pour le cœur IRAS 4A2 (appelé dans leur étude IRAS 4A-NW), tandis qu'aucune estimation n'existe pour le cœur IRAS 4A1 (appelé IRAS 4A-SE), la raie de $H_2{}^{18}O$ n'ayant pas été détectée. En raison des incertitudes sur la structure d'IRAS 4A de Kristensen et al. (2012) dans les parties internes de l'enveloppe, on ne peut pas déterminer le rapport HDO/H_2O dans le *hot corino* par une simple division des abondances de HDO et H_2O. En effet, dans l'étude de Persson et al. (2012), la densité de colonne de H_2 estimée à partir des observations de continuum de Jørgensen et al. (2009) vaut 1.26×10^{26} cm^{-2}. Elle est, par

contre, d'après la structure de Kristensen et al. (2012), d'environ 3.21×10^{24} cm^{-2}, soit 40 fois moins que Persson et al. (2012). Le rapport HDO/H_2O pourrait donc être inexact d'un facteur ~ 40 si les abondances étaient considérées telles quelles. En ne se basant que sur les estimations des densités de colonne, c'est-à-dire dans l'hypothèse où la densité de H_2 et la température n'ont pas d'impact sur les profils de raie de HDO, on obtient alors un rapport HDO/H_2O d'environ 0.14%. Pour s'assurer de la fiabilité de ces résultats, il faudrait calculer ce rapport en utilisant les abondances déduites à partir des observations des raies de $H_2{}^{18}O$ avec HIFI et voir si les résultats sont cohérents. La différence des méthodes utilisées rend en effet les résultats assez incertains. La densité de colonne de $H_2{}^{18}O$ estimée par Persson et al. (2012) ne varie pas énormément pour des températures d'excitation entre 100 et 250 K. Mais le fait de n'utiliser qu'une seule raie pour la modélisation peut néanmoins mener à des résultats peu fiables.

La densité de colonne de $H_2{}^{18}O$ a été estimée dans les parties internes d'IRAS 4B à environ 1.6×10^{16} cm^{-2} par Jørgensen & van Dishoeck (2010b) à partir de données interférométriques. A 3σ, la limite supérieure sur la densité de colonne de HDO dans la partie interne de l'enveloppe est, d'après nos résultats, de 6.4×10^{16} cm^{-2}. On obtient donc, en raisonnant sur les densités de colonne, une limite supérieure pour le rapport HDO/H_2O de 0.71%, en accord avec la limite supérieure de 0.06% déterminée par interférométrie par Jørgensen & van Dishoeck (2010a). De plus longs temps d'intégration pour les observations IRAM des raies excitées de HDO à 226 et 242 GHz auraient sûrement permis de réduire significativement la limite supérieure trouvée ici. En effet, ces deux raies tracent essentiellement l'émission venant du *hot corino*. Un *rms* plus bas permettrait donc de réduire la limite supérieure de l'abondance de HDO dans les régions internes de l'enveloppe. La densité de colonne de H_2O avait également été estimée dans les parties internes d'IRAS 4B par Watson et al. (2007) après la détection avec le satellite Spitzer d'un spectre en émission riche en eau à des longueurs d'onde entre 20 et 37 μm, indiquant une origine dans un gaz extrêmement dense et chaud. Elle est environ 25 fois inférieure à celle estimée par Jørgensen & van Dishoeck (2010b), à des échelles similaires (25 UA ; Persson et al. 2012), ce qui montre que l'estimation des densités de colonne dans les régions internes n'est pas si évidente et peut mener à des résultats assez variables selon la méthode utilisée. D'après une étude sur l'émission de l'eau dans les flots d'IRAS 4B basée sur des données PACS par Herczeg et al. (2012), les raies observées avec Spitzer ne seraient cependant pas produits par le disque entourant IRAS 4B comme le suggéraient Watson et al. (2007), mais par les flots moléculaires s'échappant de la source.

A ce jour, il n'existe pas d'estimation de la densité de colonne de H_2O dans les flots d'IRAS 4A. Seuls les flots d'IRAS 4B ont été étudiés par Herczeg et al. (2012), mais uniquement pour les raies hautement excitées de H_2O. L'origine de la large composante d'eau deutérée est très probablement différente de celles des raies excitées de H_2O puisqu'elle est uniquement observée sur les raies fondamentales de basse excitation. Nous ne pouvons néanmoins pas estimer de densité de colonne de HDO pour les flots de la source IRAS 4B car la composante large de HDO est seulement visible sur la raie à 894 GHz (la raie à 465 GHz observée avec le CSO est trop bruitée), ce qui n'est pas suffisant pour contraindre la densité de colonne de HDO.

4.4.2 Comparaison des abondances de HDO entre proto-étoiles de faible masse

La Figure 4.13 résume les différentes abondances de HDO déterminées dans les enveloppes des proto-étoiles IRAS 16293, IRAS 4A, IRAS 4B ainsi que NGC 1333 IRAS 2A étudiée par Liu et al. (2011) et L1448-mm étudiée par Codella et al. (2010). Cette dernière source a fait l'objet de mesures interférométriques de la raie de HDO à 81 GHz avec l'interféromètre du Plateau de Bure, permettant d'estimer son abondance dans le *hot corino* à $\sim 4 \times 10^{-7}$. Aucune estimation d'incertitude n'est cependant fournie. Par conséquent, seul un point est indiqué pour cette source sur les figures suivantes. Les valeurs sont représentées en fonction du rapport de la luminosité submillimétrique L_{smm} sur la luminosité bolométrique L_{bol} de la source. Ce rapport est corrélé avec l'évolution de la proto-étoile. Plus le rapport L_{smm}/L_{bol} est élevé, plus la source est jeune. En effet, la luminosité submillimétrique est liée à l'enveloppe tandis que la luminosité bolométrique est liée à l'objet central. Au fur et à mesure de l'évolution, l'enveloppe s'amenuise, entraînant une diminution du rapport L_{smm}/L_{bol}. Quand ce rapport devient inférieur à 0.005, la source passe au stade de Classe I. Les estimations des rapports L_{smm}/L_{bol} sont tirées de l'étude de Froebrich (2005). Il n'y a pas de tendance claire entre les différentes abondances et les luminosités des sources, si ce n'est peut-être une augmentation de l'abondance interne avec la luminosité bolométrique (cf Fig. 4.14) vu qu'on ignore l'incertitude sur l'abondance interne de L1448-mm estimée à partir d'une seule transition. Il faudrait néanmoins plus de points pour confirmer cette tendance. De plus, les estimations des abondances internes sont peut-être entachées d'incertitude liée à la détermination de la structure physique des proto-étoiles dans leurs régions internes. Dans tous les cas, il est nécessaire de connaître les abondances de H_2O pour voir s'il y a une évolution de l'eau avec les luminosités bolométrique et submillimétrique. Les rapports entre abondance interne et abondance externe d'eau deutérée varient aussi d'une source à l'autre, avec des valeurs entre 40 et 5000 en tenant compte des incertitudes à 3σ (cf Fig. 4.15).

Les abondances internes déterminées dans les différentes proto-étoiles de faible masse confirment bien que les abondances prédites par le modèle physico-chimique de Aikawa et al. (2012) à environ 10^{-6} sont surestimées (cf Sect. 3.4.4). Dans l'enveloppe externe aussi, les abondances de HDO sont bien trop élevées ($\geq 10^{-9}$) par rapport aux observations. Seule la proto-étoile NGC 1333 IRAS 2A pourrait présenter des abondances comparables à environ 1000 UA.

4.4.3 Perspectives pour la proto-étoile IRAS 4B

Les résultats obtenus pour la proto-étoile IRAS 4A font l'objet d'un article en préparation. Ceux d'IRAS 4B seront publiés ultérieurement. De nouvelles données sont en effet attendues suite à l'acceptation d'une proposition d'observation avec le télescope APEX dont je suis le PI. La raie fondamentale $1_{0,1}$–$0_{0,0}$ à 465 GHz devrait être observée en direction d'IRAS 4B, avec le nouveau récepteur SHeFI à 460 GHz, à une résolution spectrale de 0.15 $\mathrm{km\,s^{-1}}$ pour un *rms* de 30 mK, ce qui devrait ainsi permettre de visualiser le profil de la raie avec une meilleure précision, par rapport aux observations CSO beaucoup plus bruitées. L'antenne du télescope APEX a un diamètre de 12 m alors qu'elle est de 10.4 m pour le CSO. L'émission

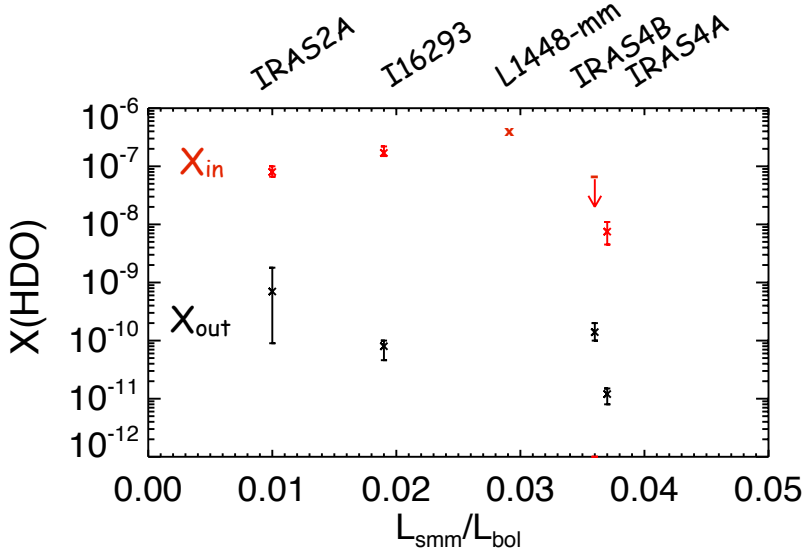


Figure 4.13 – Comparaison des abondances internes (en rouge) et externes (en noir) de HDO dans les proto-étoiles de faible masse IRAS 16293, IRAS 4A, IRAS 4B ainsi que NGC 1333 IRAS 2A étudiée par Liu et al. (2011) et L1448-mm étudiée par Codella et al. (2010). Les barres d'erreur correspondent aux incertitudes à 3σ. L'incertitude sur l'abondance interne de L1448-mm n'est pas connue. Les rapports L_{smm}/L_{bol} sont tirées de l'étude de Froebrich (2005).

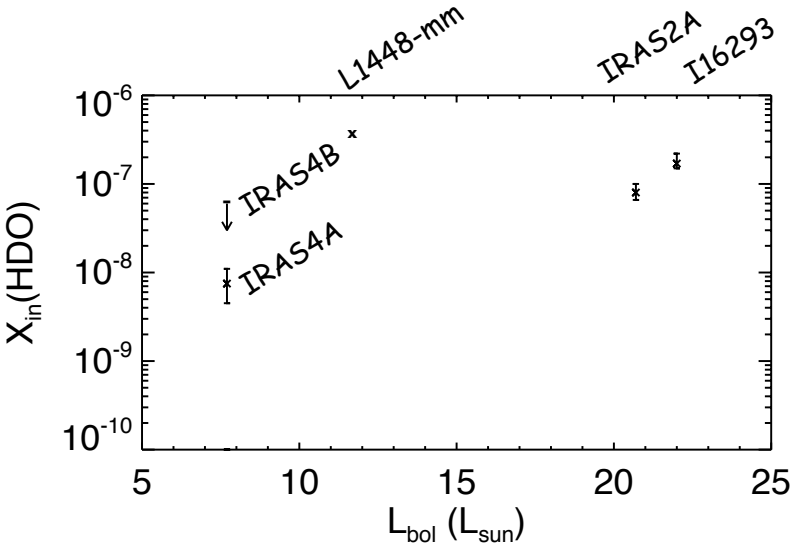


Figure 4.14 – Variation de l'abondance interne de HDO en fonction de la luminosité bolométrique des proto-étoiles de faible masse IRAS 16293, IRAS 4A, IRAS 4B ainsi que NGC 1333 IRAS 2A étudiée par Liu et al. (2011) et L1448-mm étudiée par Codella et al. (2010). Les barres d'erreur correspondent aux incertitudes à 3σ. L'incertitude sur l'abondance interne de L1448-mm n'est pas connue.

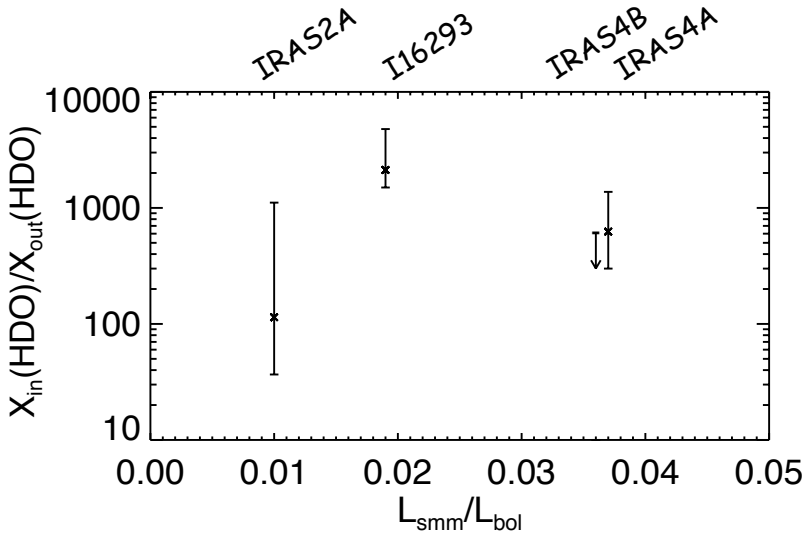


Figure 4.15 – Comparaison des rapports d'abondances $X_{\rm in}/X_{\rm out}$ de HDO dans les proto-étoiles de faible masse IRAS 16293, IRAS 4A, IRAS 4B ainsi que NGC 1333 IRAS 2A étudiée par Liu et al. (2011). Les barres d'erreur correspondent aux incertitudes à 3σ.

sera donc plus intense du fait d'une dilution de l'émission moins importante. Ces nouvelles observations seront notamment utiles pour s'assurer que la couche d'absorption d'IRAS 4B est bien similaire à celle d'IRAS 4A. La composante large devrait aussi être identifiée, permettant ainsi d'estimer la densité de colonne de HDO dans les flots d'IRAS 4B. Enfin, cela permettra de confirmer ou non les abondances déterminées précédemment dans l'enveloppe proto-stellaire.

Chapitre 5

Etude de l'eau deutérée dans des proto-étoiles massives : le cas de la région HII G34.26+0.15

Sommaire

5.1 La région HII ultra-compacte G34.26+0.15 122

5.2 Observations 124

5.2.1 Données Herschel/HIFI 124

5.2.2 Données IRAM-30m 125

5.2.3 Données CSO 126

5.3 Modélisation et résultats 126

5.3.1 La structure de la source G34 126

5.3.2 Contraintes du profil en vitesse et du paramètre b-doppler 127

5.3.3 Influence du décalage entre observations pointées et pic d'émission du HDO 130

5.3.4 Influence de la température de saut sur la détermination des abondances 131

5.4 Discussion et perspectives 137

5.4.1 Discussion des résultats et perspectives pour le rapport HDO/H_2O . . . 137

5.4.2 Discussion des abondances de HDO 138

L'eau semi-lourde est la seule espèce deutérée à avoir été détectée en direction des différentes sources du programme Herschel PRISMAS (cf Sect. 1.3.3.2) : Sgr A*, W28A, W31C, W33A, G34.3, W49N, W51 et DR21(OH). Elle n'est pas détectée aux vitesses des nuages diffus mais uniquement en direction des *hot cores* de ces régions HII. Pour compléter l'information apportée par les raies HIFI, j'ai réalisé des observations en direction de ces sources avec le télescope de l'IRAM-30m ainsi que le CSO. Grâce aux nombreuses raies de HDO observées dans plusieurs de ces sources, on peut réaliser leurs analyses avec le modèle 1D RATRAN comme pour les proto-étoiles de faible masse. La détermination des rapports HDO/H_2O permettra notamment de mieux comprendre les mécanismes de formation de l'eau dans ces régions plus énergétiques que les proto-étoiles de faible masse. Les profils de raie observés apparaissent toutefois relativement complexes et l'analyse ne semble pas forcément évidente pour plusieurs de ces sources. Je montre dans ce chapitre l'exemple de G34.26+0.15.

5.1 La région HII ultra-compacte G34.26+0.15

G34.26+0.15 (ci-après G34) est une région HII ultra-compacte située à ∼3.7 kpc (Downes et al. 1980; Kuchar & Bania 1994). Elle a été largement étudiée en radio à travers l'observation du continuum (Turner et al. 1974; Reid & Ho 1985; Wood & Churchwell 1989; Avalos et al. 2009) et de raies de recombinaison (entre les électrons arrachés suite à l'ionisation de l'hydrogène dans la région HII et des protons principalement ; Garay et al. 1985, 1986; Gaume et al. 1994; Sewilo et al. 2004). Elle est composée de 2 régions HII ultra-compactes nommées A et B, d'une région HII plus évoluée C et d'une région HII étendue de forme circulaire et de diamètre 1′ appelée D. La source C présente une morphologie cométaire (cf Fig. 5.1), qui pourrait être due à une interaction qualifiée de *bow-shock* (choc en forme d'arc) entre un nuage moléculaire ambiant et le vent d'une jeune étoile énergétique se déplaçant de manière supersonique à travers le nuage (Wood & Churchwell 1989; van Buren et al. 1990). Deux sources infrarouges, E et F, ont également été mises en évidence au Sud de C (Campbell et al. 2000). Les Figures 5.1 et 5.2 indiquent la position des différentes sources dans le plan du ciel.

Le gaz moléculaire de cette région a été tracé en NH_3, HCO^+, SO, CH_3CN et CO (Henkel et al. 1987; Heaton et al. 1989, 1993; Carral & Welch 1992; Akeson & Carlstrom 1996; Watt & Mundy 1999). Le *hot core* associé à G34 a été la cible de plusieurs relevés spectraux avec le télescope *single-dish* JCMT (MacDonald et al. 1996; Hatchell et al. 1998) et TRAO (*Taeduk RadioAstronomy Observatory* ; Kim et al. 2000, 2001), révélant entre autres la présence de plusieurs molécules organiques complexes caractéristiques des *hot cores*. Des observations avec l'interféromètre BIMA ont également permis de cartographier l'émission de molécules complexes riches en oxygène (CH_3OCH_3, $HCOOCH_3$) et en azote (CH_3CH_2CN, NH_2CHO) à une résolution angulaire d'environ 1″ (Mookerjea et al. 2007). Les observations de raies moléculaires suggèrent que le *hot core* ne coïncide pas avec la région HII C. Il serait décalé d'environ 1″ vers l'Est (MacDonald et al. 1995; Watt & Mundy 1999; Campbell et al. 2004). Les observations interférométriques de Mookerjea et al. (2007) montrent néanmoins que la position des pics varie selon la molécule. Il y aurait notamment deux pics principaux d'émission situés au Nord-Est et au Sud-Est de la région HII C, qui pourraient soit indiquer la présence de deux cœurs différents soit être la manifestation de différences de température et de densité menant à des variations d'abondances chimiques dans le même cœur, la résolution spatiale n'étant pas suffisante pour trancher entre les deux hypothèses. Le *hot core* ne montre pas de signes de chauffage interne (Watt & Mundy 1999; De Buizer et al. 2003; Mookerjea et al. 2007). La même étoile pourrait être responsable de l'ionisation de la région HII C et du chauffage de la poussière, mais la région HII C et le *hot core* moléculaire n'interagiraient pas (Campbell et al. 2000). Watt & Mundy (1999) avaient notamment suggéré que le *hot core* pourrait être chauffé par des chocs entre les deux régions, mais le chauffage du *hot core* semble être uniquement dû aux photons stellaires. Ceci est conforté par le fait que la molécule SiO qui trace les activités de flot n'est pas détecté à la position du *hot core* mais semble seulement entourer le cœur moléculaire (Hatchell et al. 2001). Les gradients de vitesse du gaz moléculaire et du gaz ionisé sont différents à la fois en direction et en magnitude (Gaume et al. 1994; Watt & Mundy 1999; Mookerjea et al. 2007). Pour expliquer la distribution des vitesses, Gaume et al. (1994) proposèrent un modèle dans lequel les vitesses

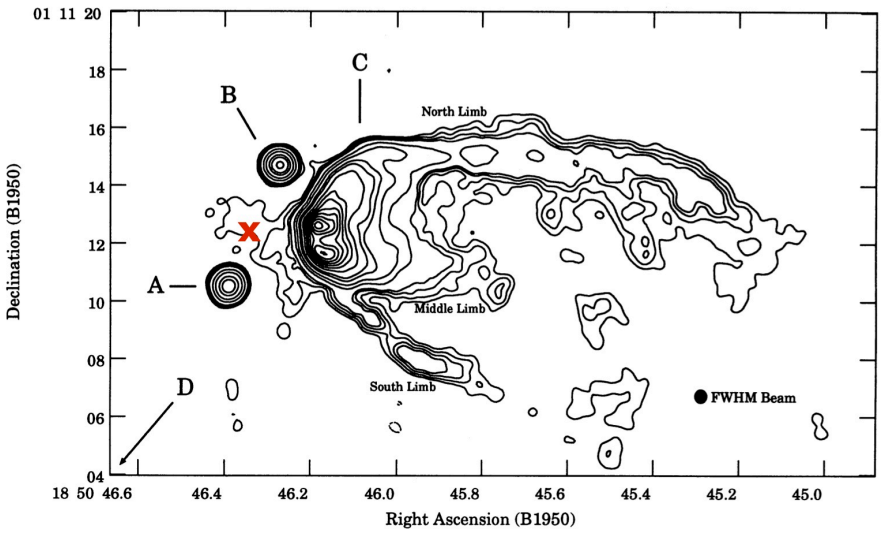


FIGURE 5.1 – Carte du continuum à 2 cm de la région G34. Les niveaux de contour sont -0.3, 0.3, 0.5, 0.75,1.0, 2.5, 5, 10, 15, 25, 35, ..., 95% de la densité de flux au pic 0.303 Jy beam^{-1}. Les sources A, B et C sont indiquées sur la carte. La source circulaire D qui s'étend sur 1′ est hors de la carte. La direction de sa position est indiquée par une flèche. La croix rouge signale la position pointée par Herschel/HIFI. Figure extraite de Gaume et al. (1994).

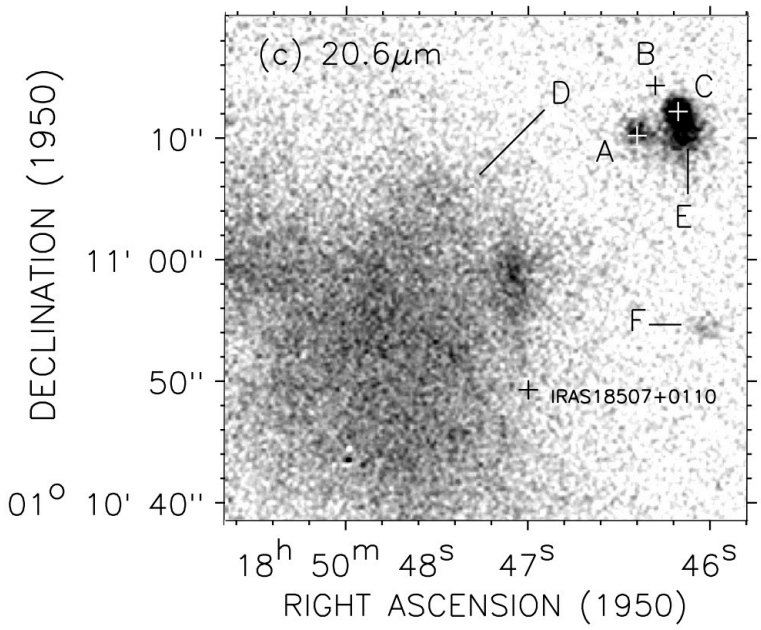


FIGURE 5.2 – Image à 20.6 μm (infrarouge moyen) de la région G34 en échelle de gris. Les croix indiquent la position des différentes sources A, B, C, D, E et F. La région HII ultra-compacte B n'est pas observée à cette fréquence. Figure extraite de Campbell et al. (2000).

seraient gouvernées par les vents stellaires des composantes A et B, tandis que le gaz ionisé qui serait directement photo-évaporé du *hot core* par l'étoile de la région HII C s'écoulerait du cœur moléculaire vers une région de plus faible densité vers l'Ouest, formant la queue de la source cométaire C. Dans ce modèle, le cœur moléculaire ainsi que les sources A et B seraient alors à une distance légèrement plus grande que la composante C. Campbell et al. (2000) ont une vision similaire de ce complexe, mais selon eux, le gaz qui formerait la queue "cométaire" proviendrait non pas du cœur moléculaire mais du nuage moléculaire parental de l'étoile ionisante et de la région HII C.

5.2 Observations

Table 5.1 – Paramètres des transitions de HDO observées en direction de la région HII ultra-compacte G34[(1)].

Fréquence (GHz)	$J_{\rm Ka,Kc}$	$E_{\rm up}/k$ (K)	$A_{\rm ij}$ (s^{-1})	Télescope	Lobe ($''$)	$F_{\rm eff}$	$B_{\rm eff}$	dv (km s^{-1})	rms[(2)] (mK)	$\int T_{\rm mb} dv$ (K.km s^{-1})	$FWHM$ (km s^{-1})
80.5783	$1_{1,0}$-$1_{1,1}$	47	1.32×10^{-6}	IRAM-30m	31.2	0.95	0.81	0.182	56	2.36	5.9
225.8967	$3_{1,2}$-$2_{2,1}$	168	1.32×10^{-5}	IRAM-30m	11.1	0.92	0.61	0.064	101	10.45	6.7
241.5616	$2_{1,1}$-$2_{1,2}$	95	1.19×10^{-5}	IRAM-30m	10.4	0.90	0.56	0.061	84	12.27	6.6
464.9245	$1_{0,1}$-$0_{0,0}$	22	1.69×10^{-4}	CSO	16.5	-	0.35[(3)]	0.078	304	7.48	5.2
509.2924	$1_{1,0}$-$1_{0,1}$	47	2.32×10^{-3}	HIFI 1a	42.3	0.96	0.76	0.294	44	1.76	9.0
893.6387	$1_{1,1}$-$0_{0,0}$	43	8.35×10^{-3}	HIFI 3b	24.1	0.96	0.74	0.167	63	-2.38[(4)]	5.9[(5)]

(1) Les fréquences, les énergies des niveaux supérieurs ($E_{\rm up}$) et les coefficients d'Einstein ($A_{\rm ij}$) de HDO proviennent du catalogue spectroscopique JPL (Pickett et al. 1998).
(2) Le *rms* est calculé à la résolution spectrale des observations indiquée dans la colonne *dv*.
(3) Cette valeur correspond au rapport entre la *main beam efficiency* $B_{\rm eff}$ et la *forward efficiency* $F_{\rm eff}$.
(4) Le flux intégré de la composante en émission est de 0.87 K.km s^{-1} tandis que celui de la composante en absorption est de 3.25 K.km s^{-1}.
(5) La $FWHM$ de la raie fondamentale à 894 GHz est estimée à 5.9 km s^{-1} pour la composante en émission (v_{LSR} = 58 km s^{-1}) et 3.9 km s^{-1} pour la composante en absorption (v_{LSR} = 60.6 km s^{-1}).

5.2.1 Données Herschel/HIFI

La transition fondamentale $1_{1,1}$–$0_{0,0}$ de HDO à 894 GHz a été observée dans le cadre du programme PRISMAS en direction des différentes sources du projet. En direction de G34, cette raie montre un profil P-Cygni inverse traduisant un mouvement d'effondrement. Elle est reproduite par une somme de deux gaussiennes avec une composante en émission d'intensité $T_{\rm mb}$ de 0.404 K, de largeur à mi-hauteur de 5.9 km s^{-1} et de vitesse v_{LSR} de 58 km s^{-1} et une composante en absorption d'intensité $T_{\rm mb}$ 1.1 K, de largeur à mi-hauteur de 3.9 km s^{-1} et de vitesse v_{LSR} de 60.6 km s^{-1}. Le continuum SSB est d'environ 3.8 K à cette fréquence. Les coordonnées définies pour ces observations pointées sont $\alpha_{2000} = 18^h\ 53^m\ 18\overset{s}{.}7$, $\delta_{2000} = 01^\circ\ 14'\ 58''$. La transition $1_{1,0}$–$1_{0,1}$ à 509 GHz a également été observée dans cette source.

5.2.2 Données IRAM-30m

Des observations ont été menées en juillet et décembre 2011 avec le télescope de 30 m afin d'observer trois raies supplémentaires de HDO à 81, 226 et 242 GHz dans les différentes sources PRISMAS. Des cartes ont également été réalisées pour plusieurs sources. Pour G34, les observations pointées ont été réalisées en décembre 2011, tandis qu'une carte des transitions à 81 et 225 GHz a été obtenue en juillet 2011. Cette carte est représentée en Figure 5.3. A 226 GHz, l'émission semble centrée en un point de coordonnées $\alpha_{2000} = 18^h\ 53^m\ 18\overset{s}{.}65$, $\delta_{2000} = 01°\ 15'\ 03''$, soit un décalage d'environ $5''$ en déclinaison par rapport aux observations pointées. La modélisation sphérique semble donc adaptée, du moins à cette fréquence. Les *beam efficiencies* et les *forward efficiencies* utilisées ainsi que les tailles du lobe sont indiquées en Table 5.1. Ces transitions apparaissent relativement brillantes dans cette source, par comparaison aux autres sources PRISMAS, et montrent un profil gaussien de largeur $\sim$ 6–7 km s^{-1}.

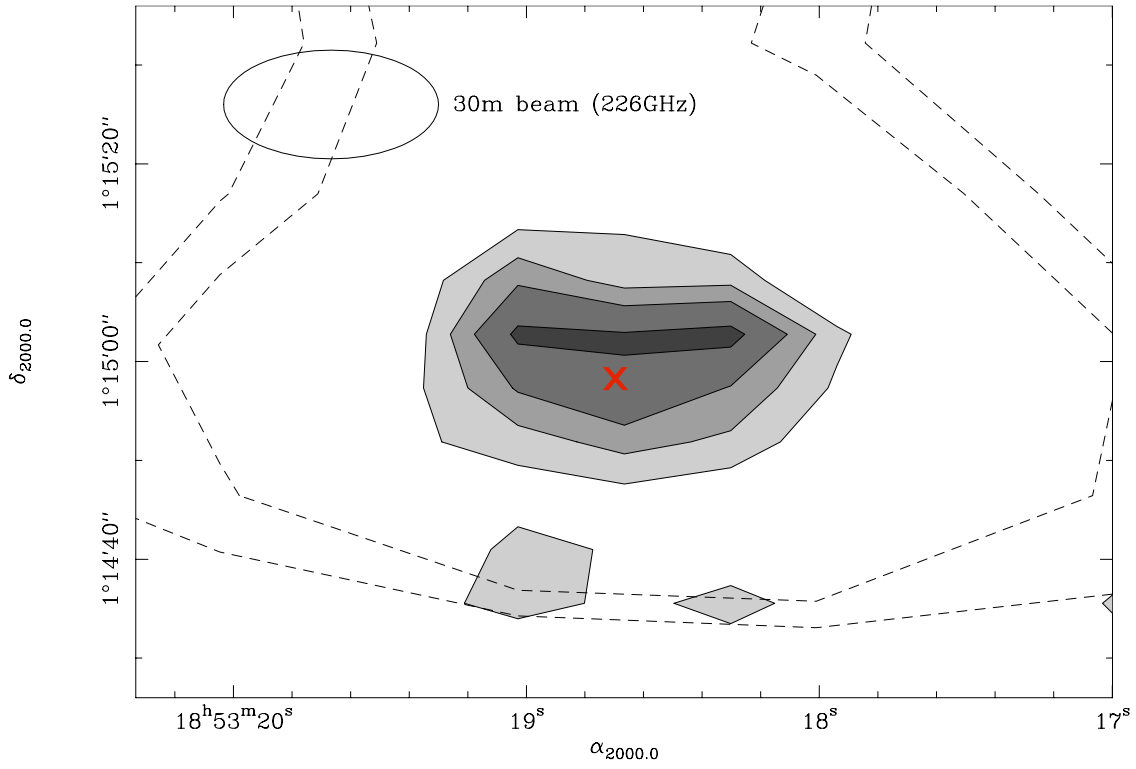


FIGURE 5.3 – Carte des transitions $3_{1,2}$–$2_{2,1}$ (trait continu) et $1_{1,0}$–$1_{1,1}$ (pointillés) de HDO observées avec le télescope de 30 m de l'IRAM en direction de la région HII G34 à 226 GHz et 81 GHz respectivement. Les niveaux de contour des observations (en T_A^*) correspondent à 226 GHz à 2, 4, 6 et 9 K.km s^{-1} et à 81 GHz à 2 et 3 K.km s^{-1}. La croix rouge indique la position pointée par Herschel/HIFI.

5.2.3 Données CSO

J'ai également réalisé en septembre 2011 des observations de la transition fondamentale $1_{0,1}$–$0_{0,0}$ à 465 GHz avec le CSO en direction des sources PRISMAS. Cette transition ne montre pas de composante en absorption dans G34, contrairement à la transition fondamentale à 894 GHz. Le *rms* est de 304 mK pour une résolution spectrale de 0.078 km s^{-1}. Le continuum SSB est estimé à environ 2.4 K en $T_{\rm mb}$. Une raie d'intensité ∼0.4 K est visible à proximité de la raie de HDO à ∼ 65–66 km s^{-1}. Il pourrait s'agir de deux transitions de $HCOOCH_3$ à 462.135 et 462.136 GHz émises dans la bande image. Une modélisation ETL avec la densité de colonne (2.7×10^{16} cm^{-2}) et la température d'excitation (160 K) déterminées par Mookerjea et al. (2007) semble en effet compatible avec l'intensité observée de la raie.

5.3 Modélisation et résultats

5.3.1 La structure de la source G34

Les profils en température et en densité de la source ont été déterminés par le groupe de Bordeaux impliqué dans le programme WISH. Ils ont utilisé le code de transfert radiatif à 2 dimensions de Whitney-Robitaille (Whitney et al. 2003; Robitaille et al. 2006, 2007). La structure physique consiste en une enveloppe sphérique sans disque, ni cavité et imite donc un modèle 1D. La densité décroît exponentiellement avec le rayon suivant la relation :

$$n(r) = n_0 \left(\frac{r}{r_0}\right)^{-p}, \tag{5.1}$$

avec le paramètre p supposé égal à 1.5. Des opacités de la poussière avec des grains recouverts de fins manteaux de glace (Ossenkopf & Henning 1994) ont été prises en compte dans la modélisation. Les profils en température et en densité ont alors été contraints en comparant la distribution d'énergie spectrale modélisée avec les flux du continuum submillimétrique existants dont ceux obtenus avec Herschel. A $r_0 = 10^4$ UA, la densité n_0 est de 1.88 10^6 cm^{-3}. Les profils en densité et en température sont représentés en Figure 5.4. Les températures de la poussière et du gaz sont supposées égales.

Afin de reproduire le continuum observé à 465 GHz et à 894 GHz, nous avons utilisé, pour la modélisation de l'eau deutérée avec le code de transfert radiatif RATRAN, le coefficient d'absorption massique suivant :

$$\kappa = \kappa_0 \left(\frac{\nu}{\nu_0}\right)^{\beta}, \tag{5.2}$$

avec $\nu_0 = 1 \times 10^{12}$ Hz, $\kappa_0 = 12$ cm^{-2}/g$_{\rm dust}$ et $\beta = 2.1$. On notera que le modèle d'Ossenkopf & Henning (1994) avec des grains couverts de fins manteaux de glace en 10^5 ans s'ajuste quand même relativement bien. A 465 GHz, le continuum est parfaitement reproduit tandis qu'à 894 GHz, il est en accord à 10% près.

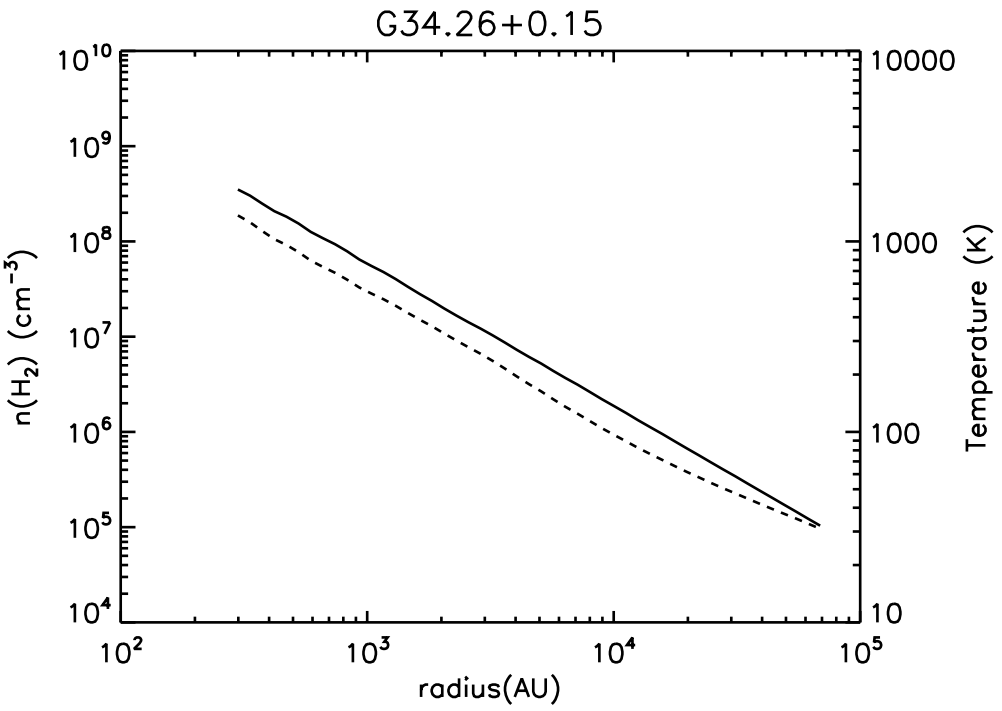


Figure 5.4 – Profils en densité (en trait plein) et en température (en pointillé) de la région HII ultra-compacte G34.

5.3.2 Contraintes du profil en vitesse et du paramètre b-doppler

La contrainte des paramètres de profil en vitesse et de l'élargissement dû à la turbulence (paramètre b-doppler) est relativement complexe. La raie fondamentale de HDO observée avec HIFI montre un profil inverse P-Cygni suggérant un mouvement d'effondrement dans l'enveloppe. Un profil de chute libre devrait donc être pris en compte pour la vitesse radiale. Un modèle sans effondrement avec une couche d'absorption non reliée à l'enveloppe est exclu, car dans le cas d'une enveloppe statique, une raie en absorption est produite à la vitesse v_{LSR} de la source (58 km s^{-1}), empêchant la reproduction de la composante en émission observée. La masse M nécessaire à la détermination de la vitesse de chute libre $v = \sqrt{2GM/r}$ est plus difficile à contraindre que pour les proto-étoiles de faible masse. En effet, le paramètre b-doppler *db* est plus important dans ce type de sources (quelques km s^{-1} pour les proto-étoiles massives contre quelques dizièmes de km s^{-1} pour les proto-étoiles de faible masse) et va donc intervenir de manière non négligeable dans la modélisation des profils de raie. Pour les proto-étoiles de faible masse, le paramètre b-doppler était estimé d'après la reproduction des composantes en absorption uniquement car il était négligeable devant la vitesse d'effondrement pour les composantes en émission. Les largeurs des raies en émission permettaient alors de contraindre la masse M. Pour les sources massives, le paramètre *db* n'est plus négligeable pour les raies en émission. Il faut donc déterminer simultanément la masse M et le paramètre *db*. Cela est d'autant plus difficile que les profils varient aussi avec les abondances.

a) Cas de T_j = 100 K

Dans un premier temps, j'ai défini plusieurs grilles de modèles avec différentes abondances internes ($T > 100$ K) et externes ($T < 100$ K) pour différentes valeurs *db* et M. Le modèle avec $M = 60$ M$_\odot$ et $db = 1$ km s^{-1} semble acceptable pour reproduire les profils. Mais il apparaît que les intensités des raies de faible excitation (894, 465 et 509 GHz) et des raies de plus grande excitation (226 et 242 GHz) ne peuvent pas être reproduites simultanément. Quand les raies excitées sont reproduites, les prédictions des intensités des raies de faible excitation sont trop importantes par rapport aux observations (cf Fig. 5.6). Le choix des paramètres M et *db* peut évidemment avoir une influence sur les intensités des raies, mais cela ne paraît pas suffisant pour modifier cette tendance. Ce désaccord pourrait peut-être s'expliquer par la présence de deux ou plusieurs cœurs avec des abondances variables comme suggérée par Mookerjea et al. (2007). Une autre solution plus simple qui permettrait de diminuer l'intensité des raies de faible excitation et/ou augmenter celle des raies excitées serait de jouer sur la température du saut en abondance T_j. Avec une température T_j plus élevée, l'émission des raies peu excitées de HDO va en effet être plus faible (cf Figs. 5.8, 5.10, 5.12 et 5.14). Cette modification de la température de saut ne signifie pas forcément que la température de sublimation de l'eau dépasse les 100 K, mais pourrait plutôt indiquer une détermination incorrecte du profil en température, ce qui semble cohérent avec le fait qu'aucune trace de chauffage interne n'a été mise en évidence dans cette source (Watt & Mundy 1999; Mookerjea et al. 2007). En effet, le code de transfert radiatif de Whitney-Robitaille utilisé pour estimer le profil en température requiert en entrée une température stellaire centrale et ne permet donc pas de supposer un chauffage par une source externe. Nous verrons par la suite que les paramètres M et *db* déterminées pour $T_j = 100$ K ne peuvent pas être extrapolés aux modèles avec des températures de sauts en abondance plus élevées. Il faudra donc, pour chaque température de saut T_j, rechercher de nouveaux paramètres compatibles avec les profils de raie. Pour chaque température T_j, la méthode suivante a été appliquée. Une première grille de modèles est lancée pour estimer les abondances. Les paramètres M et *db* sont alors ajustés sur le meilleur modèle. Si les profils apparaissent relativement différents, une nouvelle grille de modèles est lancée avec ces nouveaux paramètres et ainsi de suite jusqu'à obtenir des profils relativement en accord avec les observations. Certains modèles permettent de reproduire l'absorption observée à 894 GHz. On n'ajoutera donc pas de couche d'absorption à la structure. Cela ne signifie pas qu'elle n'existe pas, mais ajouter une couche d'absorption nécessiterait de complexifier encore l'étude en ajoutant des paramètres supplémentaires. S'il y a vraiment une couche d'absorption extérieure à la structure, l'abondance externe déterminée sera alors plus faible.

b) Cas de T_j = 125 K

Pour $T_j = 125$ K, les paramètres $M = 60$ M$_\odot$ et $db = 1$ km s^{-1} ne permettent pas de reproduire les profils gaussiens des raies à 82, 226 et 242 GHz. En fait, une masse supérieure à 30 M$_\odot$ produit toujours des profils non gaussiens pour ces raies. Un modèle

avec $M = 20$ $M_\odot$ est alors considéré. La vitesse est limitée à 3 $km\,s^{-1}$ dans les parties externes afin que l'absorption soit centrée à la vitesse de 61 $km\,s^{-1}$. Le paramètre b-doppler ne peut pas être fixe dans ce cas. Il doit être supérieur à 2 $km\,s^{-1}$ pour reproduire les profils des raies excitées et inférieur à 2 $km\,s^{-1}$ pour reproduire la composante en absorption à 894 GHz. Un saut du paramètre b-doppler est alors considéré avec $db = 1.4$ $km\,s^{-1}$ dans la partie froide et $db = 2.4$ $km\,s^{-1}$ dans la partie chaude. Pour tenter de reproduire les profils, différentes lois de puissance ont également été considérées, mais n'améliorent pas considérablement les profils alors que le nombre de paramètres à ajuster devient plus grand. Le saut est donc préféré puisque seule la température du saut du paramètre *db* doit être ajustée. A 200 K, la raie en absorption est bien reproduite mais pas les raies excitées. A l'inverse, à 100 K, les raies à 226 et 242 GHz sont bien reproduites mais pas la raie à 894 GHz. Un compromis est alors choisi avec $T = 150$ K. La variation du paramètre *db* avec le rayon a déjà été mis en évidence dans des sources massives (Caselli & Myers 1995; Herpin et al. 2012). Mais ici le comportement est différent car le paramètre b-doppler augmente dans les régions chaudes alors que, dans les études précédentes, il augmente vers l'extérieur comme prédit par le scénario d'effondrement monolitique de McKee & Tan (2003) (cf Sect. 1.1.2).

c) Cas de $T_j = 150$ K

Afin de reproduire les profils de raie pour un saut d'abondance à $T_j = 150$ K, le profil en vitesse est similaire à celui utilisé à $T_j = 125$ K. Le paramètre M est donc fixé à 20 $M_\odot$ et la vitesse est limitée à 3 $km\,s^{-1}$ à l'extérieur. Le paramètre b-doppler présente ici aussi un saut en abondance à $T = 150$ K avec une valeur de 1.4 en dessous de cette température et 2.0 au-dessus.

d) Cas de $T_j = 175$ K

Les paramètres utilisés pour $T_j = 150$ K semblent adaptés dans ce cas-ci également. On les conserve donc tels quels.

e) Cas de $T_j = 200$ K

Pour une température de saut d'abondance $T_j = 200$ K, on garde également les paramètres utilisés pour le cas de $T_j = 150$ K.

Les différents profils de la vitesse d'effondrement et du paramètre b-doppler utilisés pour les différentes températures de saut en abondance T_j : 100, 125, 150, 175 et 200 K sont représentés en Figure 5.5. Il est possible que d'autres valeurs pour le profil en vitesse et le paramètre b-doppler permettent de reproduire aussi bien les profils de raie. Les choix faits ici constituent une base pour l'étude d'autres espèces dont celle de l'eau. La modélisation des profils de raies d'autres molécules, notamment celles de faible excitation qui tracent plutôt l'enveloppe, permettra sûrement d'affiner la structure de la vitesse d'effondrement et du paramètre b-doppler.

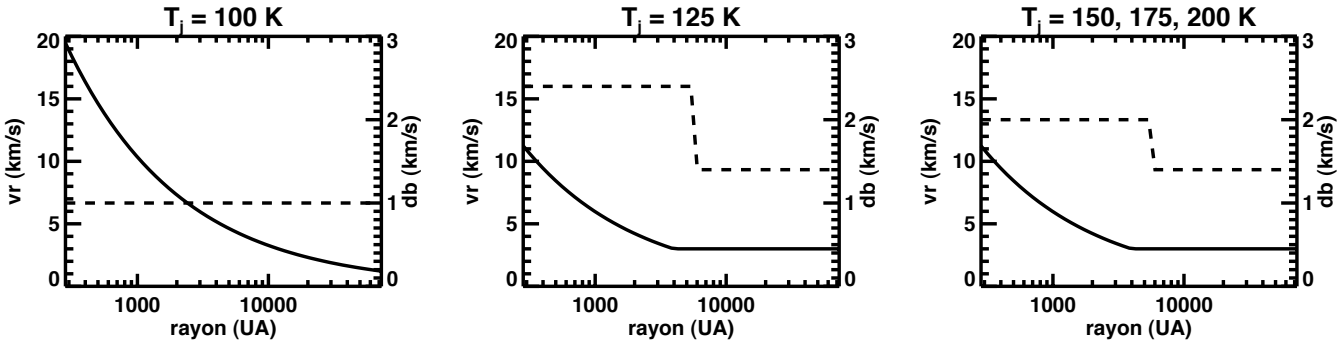


Figure 5.5 – Représentation en fonction du rayon des profils de vitesse d'effondrement (en trait plein) et du paramètre b-doppler (en pointillés) utilisés pour modéliser les raies de HDO dans la source G34 avec différentes températures de saut en abondance T_j = 100, 125, 150, 175 et 200 K.

5.3.3 Influence du décalage entre observations pointées et pic d'émission du HDO

La carte de la transition de HDO à 226 GHz (cf Fig. 5.3) montre un pic en émission décalé d'environ 5″ en déclinaison par rapport aux coordonnées des observations pointées. L'erreur de pointage doit être d'environ quelques secondes d'arc. Il est donc difficile de dire si le décalage est réel ou non. Pour les observations à lobe relativement étroit ($\sim 10''$), cela peut néanmoins avoir une influence sur la modélisation. En effet, l'intensité prédite sera moins importante si l'on suppose un décalage du pointage des observations de quelques secondes d'arc par rapport au pic de l'émission. Je discute ici la différence de résultats selon l'hypothèse ou non d'un décalage entre le pic en émission et le pointage des observations.

Dans l'hypothèse d'un décalage de 5″, le coefficient d'absorption massique doit être modifié afin de reproduire le continuum observé. Les modèles d'Ossenkopf & Henning (1994) avec des grains couverts de fins manteaux de glace coagulés en 10^6 ans ou d'épais manteaux de glace coagulés en 10^5 ans sont en accord avec les observations. Les paramètres M et db déterminés précédemment pour reproduire les profils sans décalage sont conservés. L'hypothèse d'un décalage de 5″ a ici un impact sur la détermination de l'abondance interne. En effet, les raies excitées à 226 et 242 GHz qui tracent essentiellement la partie interne du cœur où l'eau s'évapore des grains sont observées dans un lobe d'une dizaine de secondes d'arc et sont donc sensibles à la prise en compte d'un décalage de quelques secondes d'arc. L'abondance interne est donc de manière générale environ deux fois plus élevée qu'en l'absence de décalage. L'abondance externe n'est pas modifiée puisqu'elle trace l'enveloppe étendue. Malgré la différence d'abondance interne, les profils de raie obtenus avec les meilleurs ajustements ne sont pas très différents à l'exception de la raie à 80 GHz. Du fait de l'augmentation d'abondance interne, cette transition devient plus intense qu'en l'absence de décalage. Alors qu'elle n'était jusque là pas très bien reproduite par les modèles sans décalage (cf Figs. 5.6, 5.8, 5.10, 5.12 et 5.14), elle semble beaucoup plus en accord si l'on suppose un décalage entre le pic en émission de HDO et le pointage des observations (cf Figs. 5.7, 5.9, 5.11, 5.13 et 5.15), que celui-ci soit réel ou qu'il résulte d'erreurs observationnelles.

5.3.4 Influence de la température de saut sur la détermination des abondances

Les abondances internes et externes des meilleurs modèles obtenus avec la minimisation de χ^2 n° 2 sont présentées en Table 5.2 pour les différentes températures de saut d'abondance et en supposant ou non un décalage de 5″ entre le pointage des observations et le pic d'émission de l'eau deutérée. Les paramètres α sont d'environ 2. Les profils de raies obtenus pour chacun des modèles sont représentés en Figures 5.6, 5.7, 5.8, 5.9, 5.10, 5.11, 5.12, 5.13, 5.14 et 5.15. La référence à chacune des figures est précisée dans la Table 5.2. L'abondance externe est d'environ 2–3 $\times$ 10^{-11} tandis que l'abondance interne est comprise entre 4 $\times$ 10^{-8} et 2 $\times$ 10^{-7} selon la température de saut et la présence d'un décalage ou non entre le pointage des observations et le pic en émission de HDO. A T_j = 100 K, les raies de faible excitation sont mal reproduites, on peut donc exclure les abondances déterminées dans ce cas-là. Au-dessus de 100 K, la température de saut n'est pas contrainte car les différents modèles montrent des paramètres α proches les uns des autres, ne permettant pas de discriminer une température plus que l'autre.

Table 5.2 – Détermination des abondances internes et externes de HDO selon la température de saut T_j et en faisant l'hypothèse ou non d'un décalage entre observations pointées et pic d'émission du HDO.

	Sans décalage				Avec décalage de 5″			
T_j (K)	$X_{\rm in}$	$X_{\rm out}$	α	Figure	$X_{\rm in}$	$X_{\rm out}$	α	Figure
100	2×10^{-8}	8×10^{-12}	2.4	5.6	4×10^{-8}	8×10^{-12}	2.5	5.7
125	4×10^{-8}	2×10^{-11}	1.8	5.8	1×10^{-7}	2×10^{-11}	1.9	5.9
150	6×10^{-8}	2×10^{-11}	2.0	5.10	1.4×10^{-7}	2×10^{-11}	2.0	5.11
175	7×10^{-8}	2×10^{-11}	1.9	5.12	1.4×10^{-7}	3×10^{-11}	1.9	5.13
200	9×10^{-8}	3×10^{-11}	2.0	5.14	2×10^{-7}	3×10^{-11}	1.9	5.15

On peut noter sur les différentes figures que la composante en émission modélisée à 894 GHz apparaît légèrement supérieure aux observations. En choisissant une abondance externe inférieure à environ 1 $\times$ 10^{-11}, l'intensité prédite est plus en accord avec les observations sans modification majeure des profils des autres raies mais l'absorption de la transition à 894 GHz n'est plus reproduite, nécessitant l'ajout d'une couche d'absorption en avant-plan. La densité de colonne de HDO nécessaire à cette couche d'absorption n'est pas facilement estimable puisqu'elle dépend de l'abondance externe choisie qui produit une absorption plus ou moins intense. Le désaccord sur l'émission de la raie à 894 GHz pourrait aussi s'expliquer par le choix du profil en vitesse et du paramètre *db*.

En cherchant à modéliser avec RATRAN les profils d'une dizaine de transitions de HDO observées avec HIFI, IRAM-30m, SEST (*Swedish-ESO 15m Submillimeter Telescope*) et CSO, Comito et al. (2010) avaient suggéré que pour la source massive SgrB2(M), il y aurait deux sauts en abondance l'un à 100 K et l'autre à 200 K, avec une abondance externe de 1.3 $\times$ 10^{-11}, une abondance entre 100 et 200 K de 1.5 $\times$ 10^{-9} et une abondance au-dessus de 200 K de 3.5 $\times$ 10^{-9}. Pour voir si l'hypothèse de deux sauts était concevable pour G34, j'ai lancé

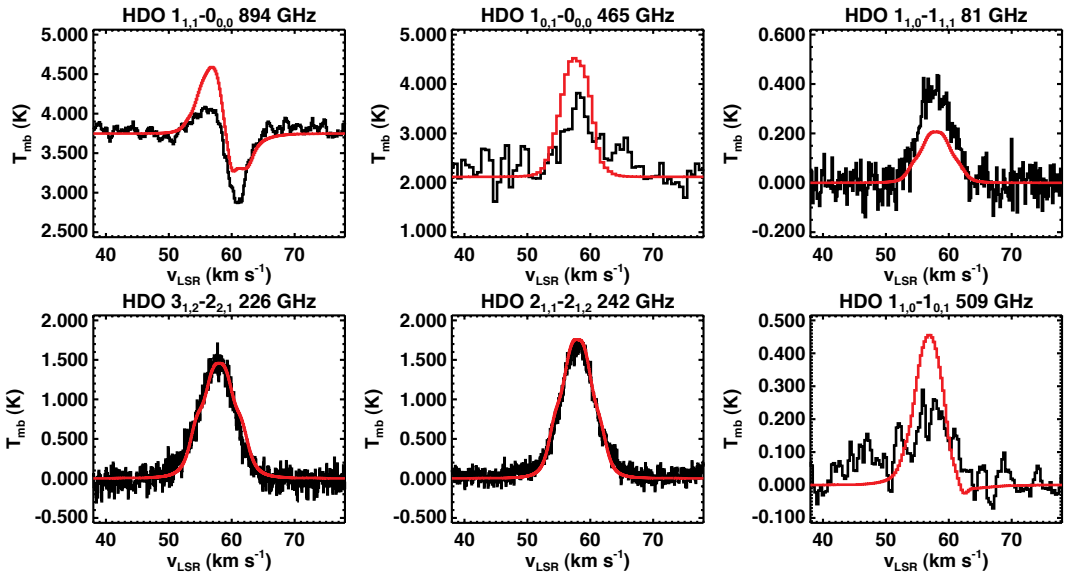


Figure 5.6 – En *noir* : les raies de HDO observées avec HIFI, IRAM et CSO en direction de la région HII G34. En *rouge* : meilleure modélisation pour une température du saut en abondance $T_j = 100$ K. L'abondance interne est de 2×10^{-8} et l'abondance externe de 8×10^{-12}. Le profil en vitesse et le paramètre b-doppler utilisés sont représentés en Figure 5.5. Aucun décalage n'est supposé entre le pic en émission de HDO et le pointage des observations.

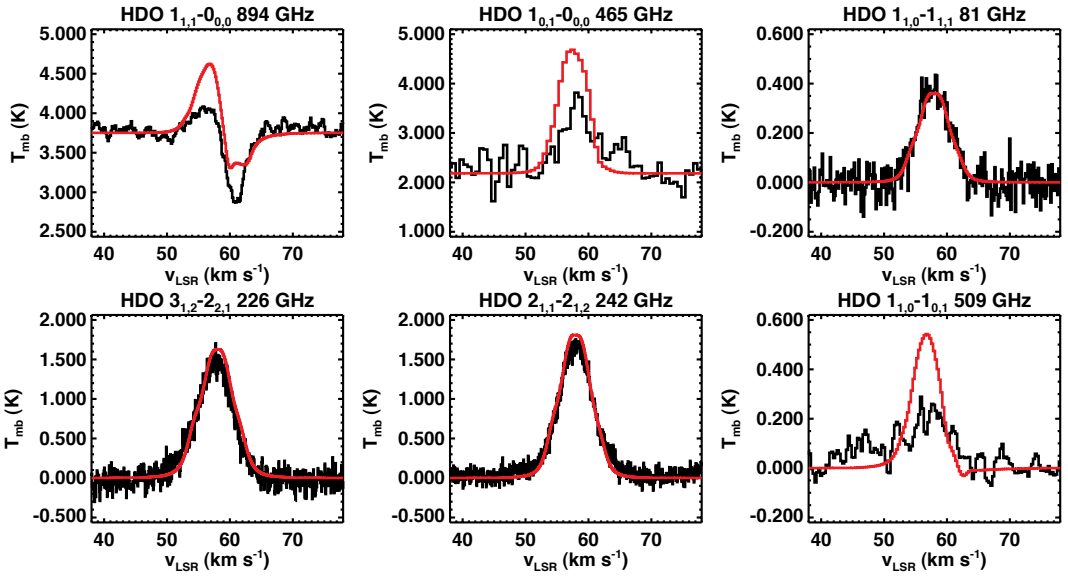


Figure 5.7 – En *noir* : les raies de HDO observées avec HIFI, IRAM et CSO en direction de la région HII G34. En *rouge* : meilleure modélisation pour une température du saut en abondance $T_j = 100$ K. L'abondance interne est de 4×10^{-8} et l'abondance externe de 8×10^{-12}. Le profil en vitesse et le paramètre b-doppler utilisés sont représentés en Figure 5.5. Un décalage de $5''$ est supposé entre le pic en émission de HDO et le pointage des observations.

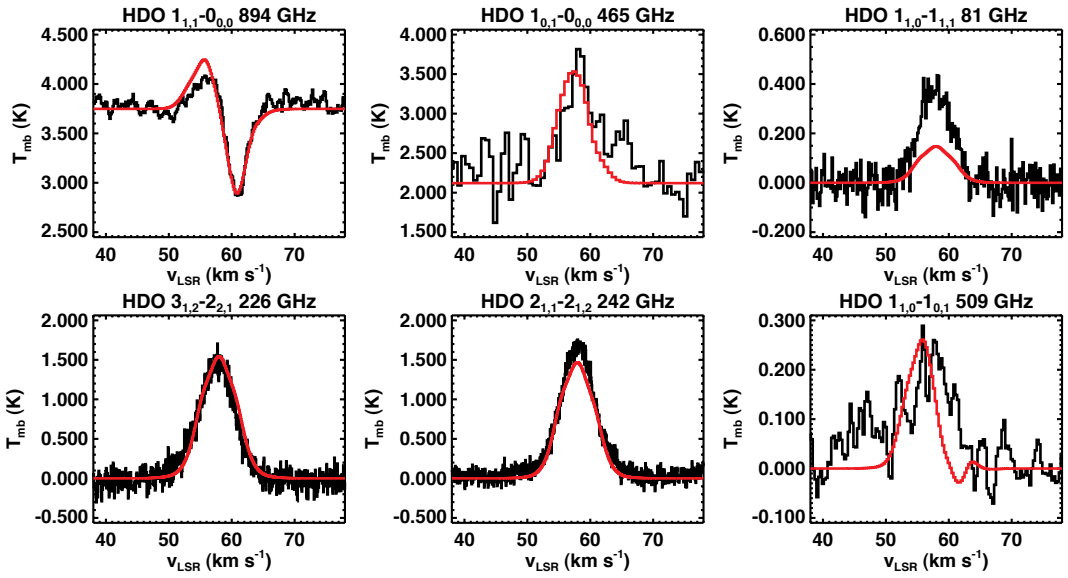


Figure 5.8 – En *noir* : les raies de HDO observées avec HIFI, IRAM et CSO en direction de la région HII G34. En *rouge* : meilleure modélisation pour une température du saut en abondance $T_j = 125$ K. L'abondance interne est de 4×10^{-8} et l'abondance externe de 2×10^{-11}. Le profil en vitesse et le paramètre b-doppler utilisés sont représentés en Figure 5.5. Aucun décalage n'est supposé entre le pic en émission de HDO et le pointage des observations.

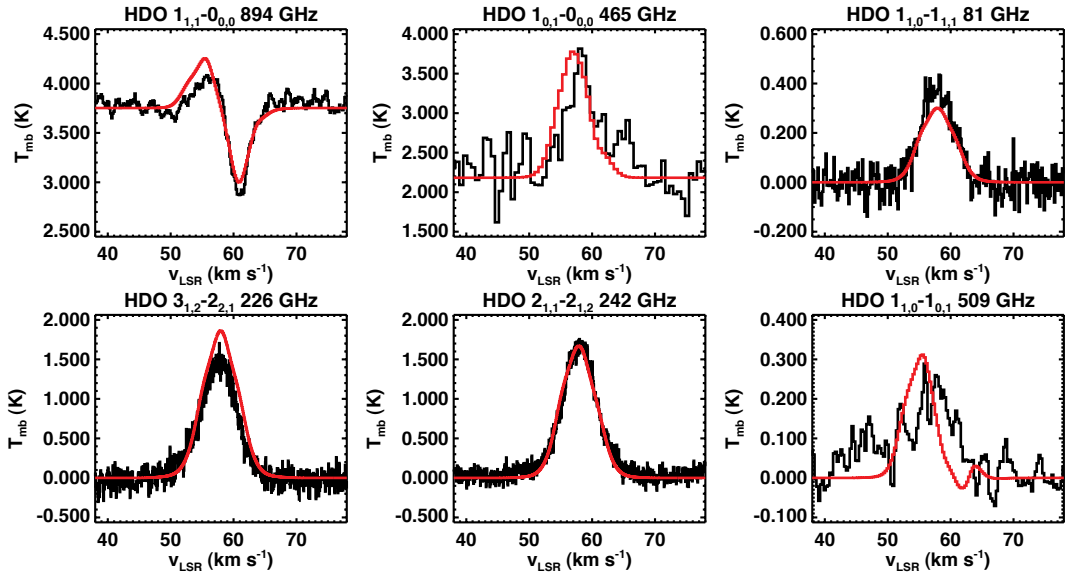


Figure 5.9 – En *noir* : les raies de HDO observées avec HIFI, IRAM et CSO en direction de la région HII G34. En *rouge* : meilleure modélisation pour une température du saut en abondance $T_j = 125$ K. L'abondance interne est de 1×10^{-7} et l'abondance externe de 2×10^{-11}. Le profil en vitesse et le paramètre b-doppler utilisés sont représentés en Figure 5.5. Un décalage de $5''$ est supposé entre le pic en émission de HDO et le pointage des observations.

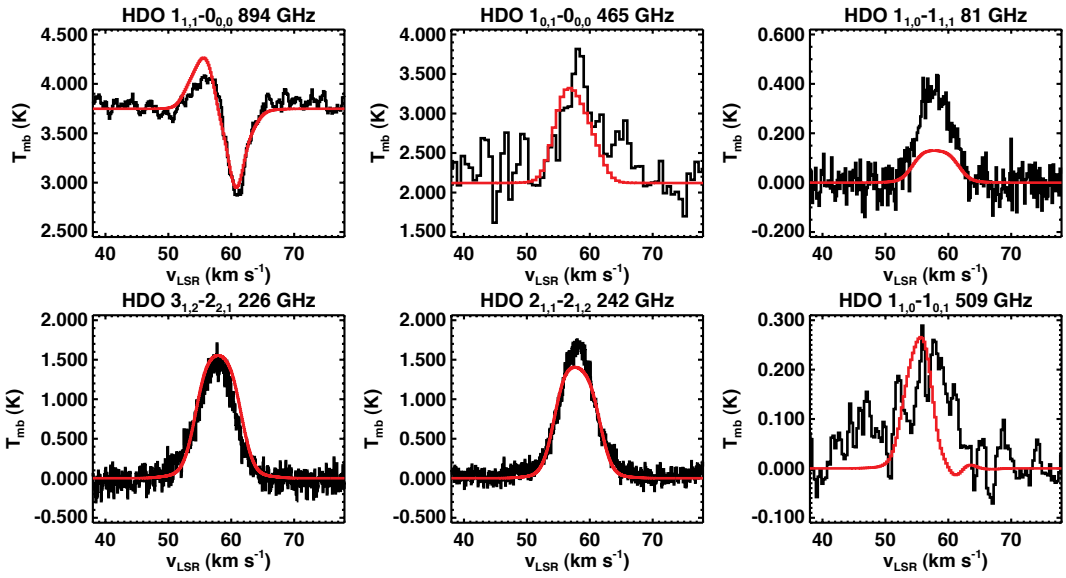


FIGURE 5.10 – En *noir* : les raies de HDO observées avec HIFI, IRAM et CSO en direction de la région HII G34. En *rouge* : meilleure modélisation pour une température du saut en abondance $T_j = 150$ K. L'abondance interne est de 6×10^{-8} et l'abondance externe de 2×10^{-11}. Le profil en vitesse et le paramètre b-doppler utilisés sont représentés en Figure 5.5. Aucun décalage n'est supposé entre le pic en émission de HDO et le pointage des observations.

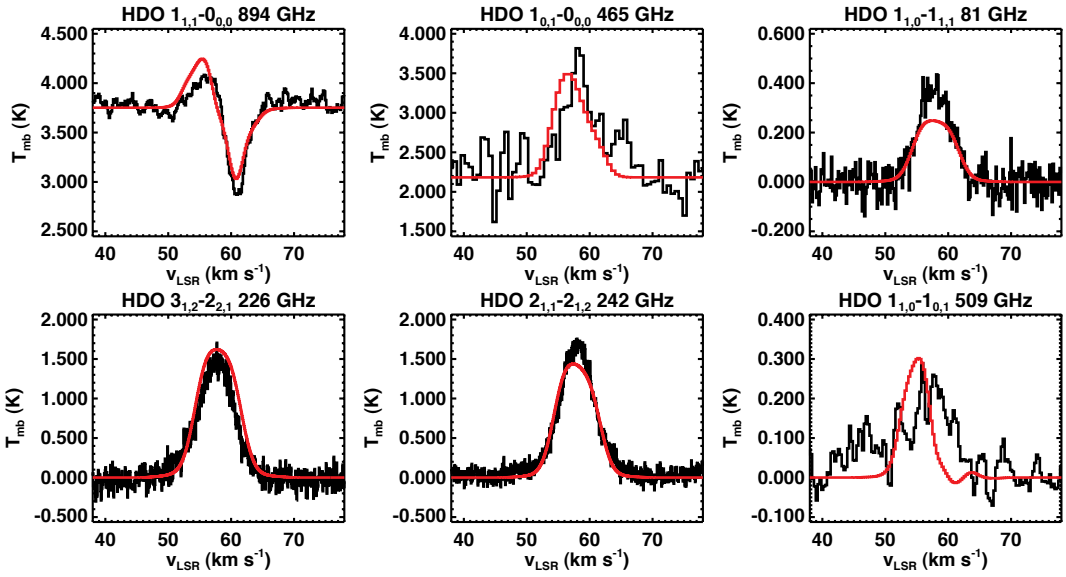


FIGURE 5.11 – En *noir* : les raies de HDO observées avec HIFI, IRAM et CSO en direction de la région HII G34. En *rouge* : meilleure modélisation pour une température du saut en abondance $T_j = 150$ K. L'abondance interne est de 1.4×10^{-7} et l'abondance externe de 2×10^{-11}. Le profil en vitesse et le paramètre b-doppler utilisés sont représentés en Figure 5.5. Un décalage de $5''$ est supposé entre le pic en émission de HDO et le pointage des observations.

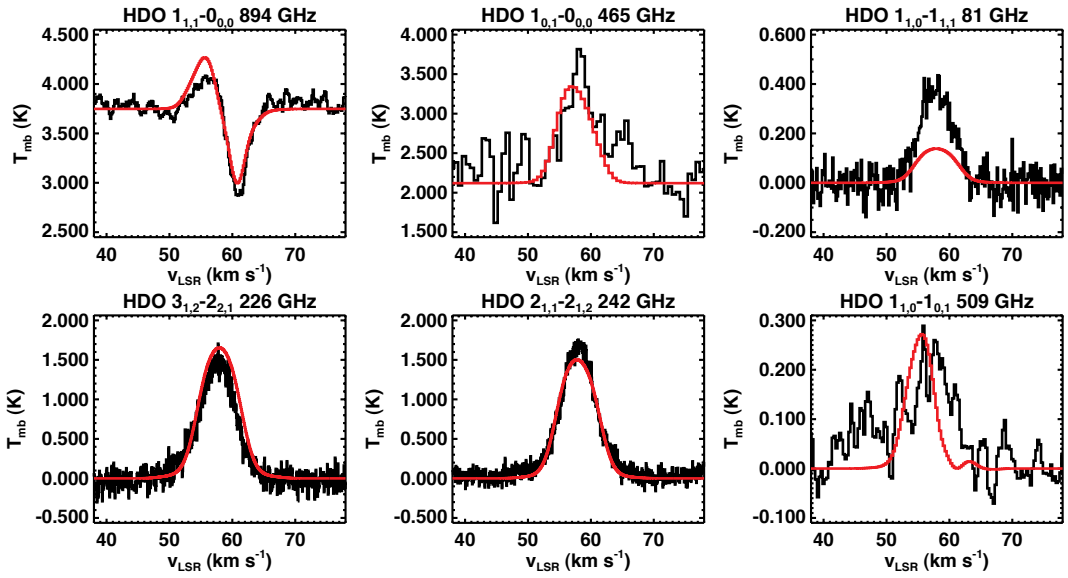


Figure 5.12 – En *noir* : les raies de HDO observées avec HIFI, IRAM et CSO en direction de la région HII G34. En *rouge* : meilleure modélisation pour une température du saut en abondance $T_j = 175$ K. L'abondance interne est de 7×10^{-8} et l'abondance externe de 2×10^{-11}. Le profil en vitesse et le paramètre b-doppler utilisés sont représentés en Figure 5.5. Aucun décalage n'est supposé entre le pic en émission de HDO et le pointage des observations.

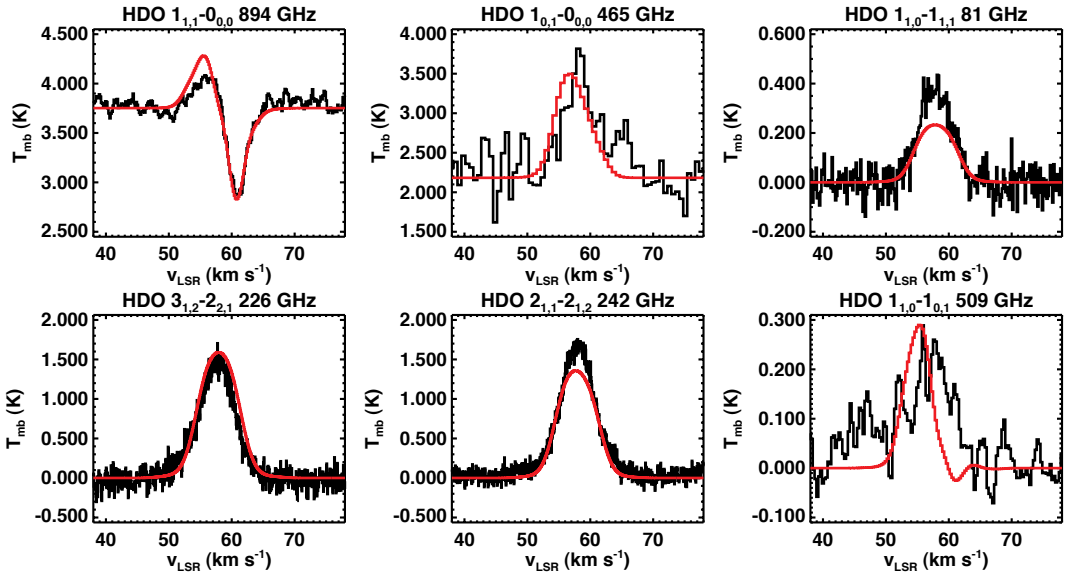


Figure 5.13 – En *noir* : les raies de HDO observées avec HIFI, IRAM et CSO en direction de la région HII G34. En *rouge* : meilleure modélisation pour une température du saut en abondance $T_j = 175$ K. L'abondance interne est de 1.4×10^{-7} et l'abondance externe de 3×10^{-11}. Le profil en vitesse et le paramètre b-doppler utilisés sont représentés en Figure 5.5. Un décalage de $5''$ est supposé entre le pic en émission de HDO et le pointage des observations.

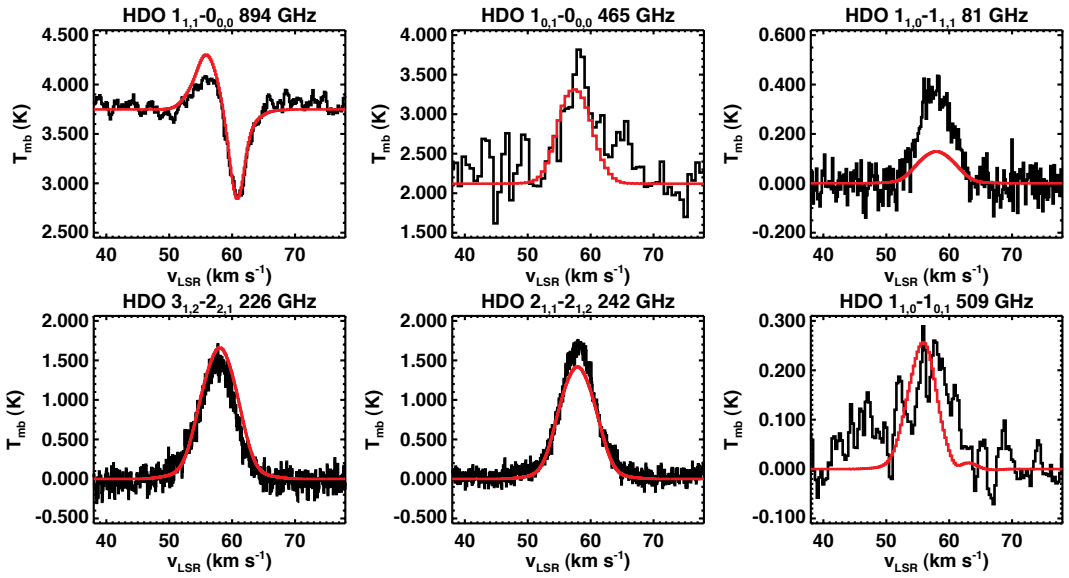


FIGURE 5.14 – En *noir* : les raies de HDO observées avec HIFI, IRAM et CSO en direction de la région HII G34. En *rouge* : meilleure modélisation pour une température du saut en abondance $T_j = 200$ K. L'abondance interne est de 9×10^{-8} et l'abondance externe de 3×10^{-11}. Le profil en vitesse et le paramètre b-doppler utilisés sont représentés en Figure 5.5. Aucun décalage n'est supposé entre le pic en émission de HDO et le pointage des observations.

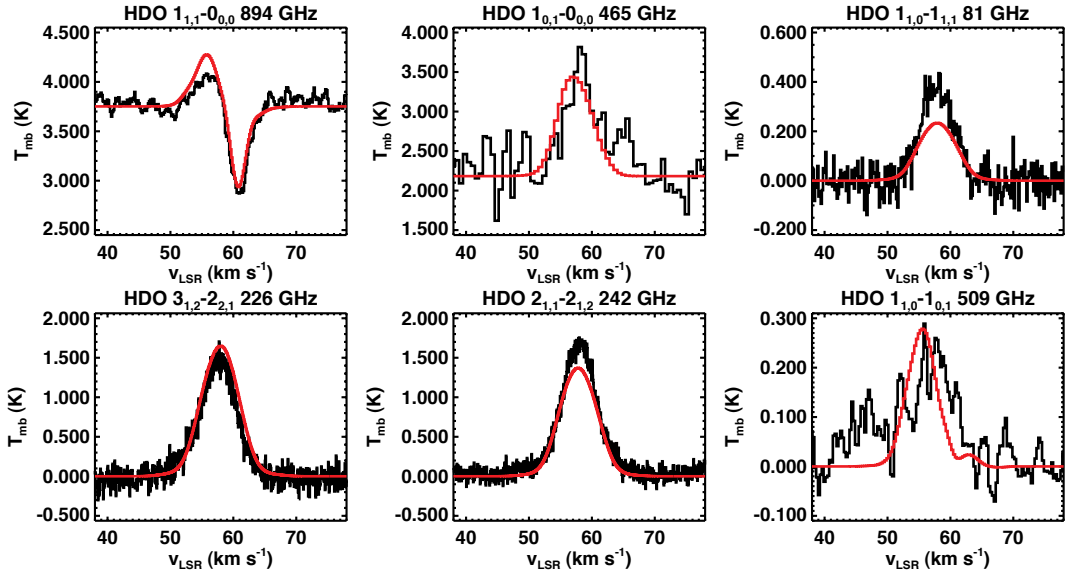


FIGURE 5.15 – En *noir* : les raies de HDO observées avec HIFI, IRAM et CSO en direction de la région HII G34. En *rouge* : meilleure modélisation pour une température du saut en abondance $T_j = 200$ K. L'abondance interne est de 2×10^{-7} et l'abondance externe de 3×10^{-11}. Le profil en vitesse et le paramètre b-doppler utilisés sont représentés en Figure 5.5. Un décalage de $5''$ est supposé entre le pic en émission de HDO et le pointage des observations.

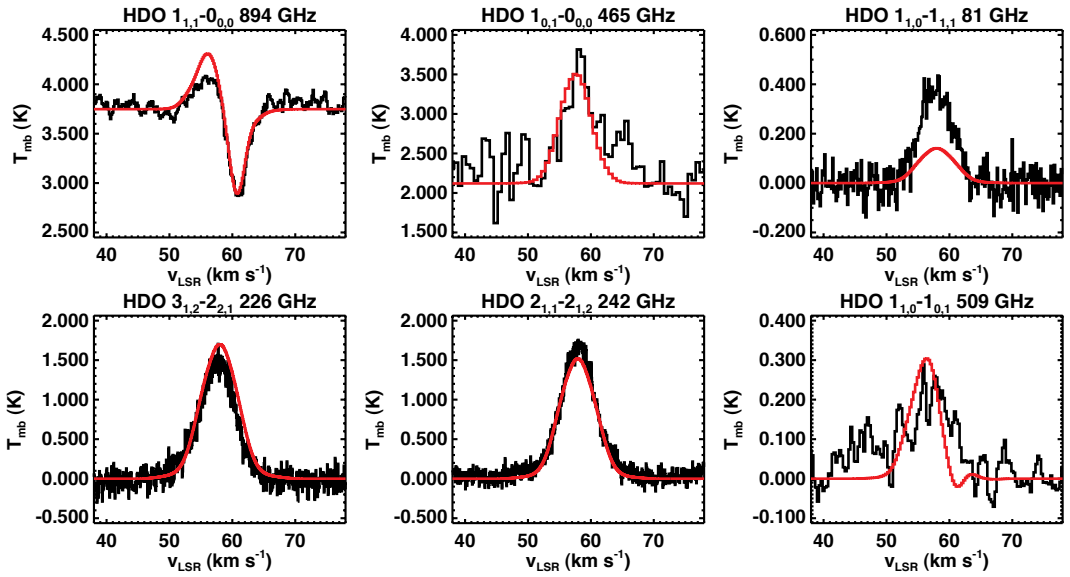


Figure 5.16 – En *noir* : les raies de HDO observées avec HIFI, IRAM et CSO en direction de la région HII G34. En *rouge* : meilleure modélisation pour un profil d'abondance présentant deux sauts à $T_{j1} = 100$ K et $T_{j2} = 200$ K. L'abondance au-dessus de 200 K est de 9×10^{-8}, entre 100 K et 200 K de 1×10^{-9} et au-dessous de 100 K de 2×10^{-11}. Le profil en vitesse et le paramètre b-doppler utilisés correspondent à ceux utilisés pour les cas $T_j = 150$, 175 et 200 K (cf Fig. 5.5). Aucun décalage n'est supposé entre le pic en émission de HDO et le pointage des observations.

une grille de modèles avec différentes abondances en-dessous de 100 K ($X_{\rm out}$), entre 100 et 200 K ($X_{\rm mid}$) et au-dessus de 200 K ($X_{\rm in}$). Les profils de vitesse et de paramètre b-doppler utilisés sont ceux contraints pour les cas précédents $T_j = 150$, 175 et 200 K (cf Fig. 5.5). Le meilleur modèle est obtenu pour $X_{\rm in} = 9 \times 10^{-8}$, $X_{\rm mid} = 1 \times 10^{-9}$ et $X_{\rm out} = 2 \times 10^{-11}$ avec un paramètre α égal à 1.9. Comme on peut le voir en Figure 5.16, les profils ne sont pas très différents de ceux obtenus précédemment. Le fait d'ajouter un saut en abondance ne permet pas une meilleure modélisation des profils de raie observés, ce qui se traduit par ailleurs par une valeur du paramètre α similaire à ceux des autres modèles sans décalage avec $T_j > 100$ K (cf Table 5.2).

5.4 Discussion et perspectives

5.4.1 Discussion des résultats et perspectives pour le rapport HDO/H_2O

Jacq et al. (1990) avaient déjà étudié l'eau deutérée dans plusieurs sources massives dont G34. A partir d'observations de plusieurs transitions de HDO avec le télescope de 30 m de l'IRAM (144, 226, 242 et 255 GHz), ils avaient réalisé une analyse ETL par diagramme rotationnel permettant d'estimer la densité de colonne et la température d'excitation de HDO dans ces sources. Ces quatre raies étant de forte excitation, elles sont en effet supposées être émises principalement par leurs *hot cores* et non par l'enveloppe plus froide qui les entoure.

Dans G34, la densité de colonne de HDO obtenue est de $\sim 2.7 \times 10^{15}$ cm^{-2} pour un lobe de 30″ tandis que la température est d'environ 212 K. En utilisant des observations de $H_2{}^{18}O$ à 203 GHz avec le télescope de 12 m de Kitt Peak (Jacq et al. 1988), ils concluaient alors sur un rapport HDO/H_2O entre 4×10^{-4} et 1.2×10^{-3}. En calculant la densité de colonne de HDO contenue dans le *hot core* de G34 d'après les différents modèles de la Table 5.2 (sans décalage) et en la ramenant à une taille angulaire de 30″, on obtient N(HDO) $\sim 7 \times 10^{15}$ cm^{-2}, soit du même ordre de grandeur que la densité de colonne déterminée par Jacq et al. (1990) à un facteur 3 près. La densité de colonne de HDO a également été estimée par Gensheimer et al. (1996). A partir du flux de la transition de HDO à 144 GHz observée avec l'IRAM-30 m, ils trouvent N(HDO) $= 1.4 \times 10^{15}$ cm^{-2} dans 12″. C'est relativement peu comparativement à l'estimation de Jacq et al. (1990) ($\sim 1.6 \times 10^{16}$ cm^{-2} pour 12″) et à la nôtre ($\sim 4.3 \times 10^{16}$ cm^{-2} pour 12″). L'estimation de Gensheimer et al. (1996) est sûrement peu fiable puisqu'elle ne se base sur le flux que d'une seule raie. Avec une densité de colonne plus faible, Gensheimer et al. (1996) obtiennent par conséquent un rapport HDO/H_2O de 1.1 $\times 10^{-4}$, inférieur à celui de Jacq et al. (1990).

Les raies HDO à 144 et 255 GHz observées avec l'IRAM par Jacq et al. (1990) ont une intensité en $T_{\rm mb}$ de 0.4 et 0.6 K pour un *rms* de 0.03 et 0.08 K respectivement. On notera néanmoins que Gensheimer et al. (1996) trouvent une intensité de raie à 144 GHz de 0.54 K pour un *rms* de 0.06 K avec le même télescope. Pour vérifier les abondances déterminées précédemment, j'ai modélisé ces deux raies à partir des modèles de la Table 5.2 pour lesquels la température du saut en abondance est supérieure ou égale à 125 K. A 144 GHz, les intensités prédites varient entre 0.23 et 0.5 K et s'accordent donc avec les intensités observées. Pour la raie à 255 GHz, elles sont comprises entre 0.85 et 1.2 K, ce qui paraît un peu élevé par rapport à l'observation de Jacq et al. (1990). Pour cette raie, on peut soit suggérer un problème de calibration à cette fréquence, soit supposer une erreur de pointage qui réduirait considérablement l'intensité de la raie étant donné la petite taille du lobe à cette fréquence (9.6″). L'incertitude de pointage est estimée par Jacq et al. (1990) à 5″. De nouvelles données HIFI de HDO à 491, 600, 849 et 920 GHz dans plusieurs sources PRISMAS dont G34 ont également été observées suite à l'acceptation d'une proposition de temps ouvert. En raison de la présence de *standing waves*, les données doivent être réduites prudemment. Elles pourront peut-être apporter des contraintes à cette étude.

Le groupe WISH est en charge de l'estimation des abondances de l'eau dans cette source. Aucune estimation n'est disponible pour le moment. La détermination du rapport HDO/H_2O est nécessaire pour confirmer ou non les estimations de Jacq et al. (1990) basées sur l'étude d'une seule raie de $H_2{}^{18}O$ qui plus est apparaît contaminée de manière non négligeable par une transition d'éther diméthylique (CH_3OCH_3).

5.4.2 Discussion des abondances de HDO

Avec des abondances internes de HDO comprises entre 2×10^{-8} et 2×10^{-7} selon les modèles, G34 semble similaire aux proto-étoiles de faible masse. Parmi les proto-étoiles de faible masse étudiées, IRAS 16293 et L1448-mm présentent les abondances internes les plus importantes avec une valeur de 1.8×10^{-7} et 4×10^{-7} respectivement tandis qu'IRAS 4A a

la plus faible avec une valeur de 7.5×10^{-9}. L'abondance externe de HDO de G34 est d'environ 2×10^{-11}, soit une valeur sensiblement similaire à celle d'IRAS 4A ($\sim 1.2 \times 10^{-11}$), la proto-étoile de faible masse pour laquelle l'abondance externe est la plus faible. G34 ne semble pas montrer de réelles différences d'abondance d'eau deutérée avec les proto-étoiles de faible masse, mais l'eau pourrait, par exemple, être plus abondante dans les régions HII et mener à des différences du rapport HDO/H_2O. Dans l'attente des résultats du groupe WISH, nous ne pouvons pas dire grand chose là-dessus pour le moment. L'abondance de l'eau deutérée a également été estimée dans le *hot core* de la proto-étoile de masse intermédiaire NGC 7129 FIRS 2, où elle est d'environ $4 \times 10^{-8} - 1 \times 10^{-7}$ (Fuente et al. 2012), confortant l'idée que la masse n'influe apparemment pas sur l'abondance en eau deutérée.

Plusieurs sources massives ont déjà fait l'objet d'une étude de la structure d'abondance de HDO. Il y a notamment la région de SgrB2(M) (Comito et al. 2010). Cette source montre une abondance externe de HDO de 1.3×10^{-11} et une abondance variant entre 1.5×10^{-9} et 3.5×10^{-9} au-dessus de 100 K. L'abondance externe est semblable à celle de G34. Son abondance interne est, par contre, beaucoup plus faible. Trois autres sources massives ont également été étudiées par van der Tak et al. (2006) : W33A, AFGL 2591 et NGC 7538 IRS1. A partir d'observations IRAM et JCMT des transitions de HDO à 81, 226, 242 et 465 GHz, leurs abondances internes de HDO sont estimées à environ 1–2 $\times 10^{-7}$, soit du même ordre de grandeur que G34. Les abondances externes sont, par contre, beaucoup plus élevées, entre 4×10^{-9} et 2×10^{-8}. Les résultats sont néanmoins à prendre avec précaution pour AFGL 2591, puisque sa distance a été réestimée récemment. Elle est maintenant de 3.3 kpc contre ~ 1.5 kpc auparavant (Rygl et al. 2012). La structure physique et l'analyse sont donc probablement à revoir. Quant à W33A, elle fait partie des sources PRISMAS. Une nouvelle analyse incluant les données HIFI et notamment la transition fondamentale à 894 GHz, sera donc réalisée et permettra de confirmer ou non les résultats de van der Tak et al. (2006). L'étude de l'eau deutérée dans les autres sources du programme PRISMAS permettra, par ailleurs, d'augmenter l'échantillon de proto-étoiles massives étudiées et de savoir si ces sources ont des abondances similaires et si elles différent ou non de manière générale des proto-étoiles de faible masse.

Chapitre 6

Conclusion et perspectives

Dans ce travail de thèse, j'ai étudié l'eau deutérée dans trois objets proto-stellaires de faible masse (IRAS 16293, IRAS 4A et IRAS 4B) ainsi que dans une région de formation stellaire massive (G34). L'utilisation du code de transfert radiatif 1D hors-ETL RATRAN a permis d'estimer l'abondance de l'eau semi-lourde contenue dans la partie chaude de l'enveloppe, le *hot core/corino*, où les molécules d'eau désorbent des grains (T > 100 K), ainsi que dans la partie externe plus froide de l'enveloppe (T < 100 K). La Table 6.1 résume les abondances de HDO déterminées dans ces quatre sources ainsi que dans des sources supplémentaires ayant fait l'objet d'autres études. Les abondances d'eau deutérée ne montrent pas de corrélation avec la masse de l'objet.

Table 6.1 – Abondances de HDO déterminées dans différents objets proto-stellaires

Source	Abondance interne	Abondance externe	Ref.(1)
Proto-étoiles de faible masse			
IRAS 16293-2422	$1.4 – 2.4 \times 10^{-7}$	$5.5 – 10.6 \times 10^{-11}$	a,b
NGC 1333 IRAS 4A	$4.5 – 11 \times 10^{-9}$	$8 – 16 \times 10^{-12}$	a
NGC 1333 IRAS 4B	$\leq 6 \times 10^{-8}$	$1.0 – 2.0 \times 10^{-10}$	a
NGC 1333 IRAS 2A	$6.6 – 10 \times 10^{-8}$	$9 – 180 \times 10^{-11}$	c
L1448-mm	4×10^{-7}	–	d
Proto-étoiles de masse intermédiaire			
NGC 7129 FIRS 2	$0.4 – 1 \times 10^{-7}$	–	e
Proto-étoiles massives			
G34.26+0.15	$4 – 20 \times 10^{-8}$	$2 – 3 \times 10^{-11}$	a
SgrB2(M)	$1.5 – 3.5 \times 10^{-9}$	1.3×10^{-11}	f
W33A	2×10^{-7}	1×10^{-8}	g
AFGL 2591	1×10^{-7}	4×10^{-9}	g
NGC 7538 IRS1	1×10^{-7}	2×10^{-8}	g

(1) Références : a) Thèse ; b) Coutens et al. (2012) ; c) Liu et al. (2011) ; d) Codella et al. (2010) ; e) Fuente et al. (2012) ; f) Comito et al. (2010) ; g) van der Tak et al. (2006)

L'eau deutérée dans la proto-étoile de type solaire IRAS 16293 avait été précédemment étudiée par Stark et al. (2004) et Parise et al. (2005). L'analyse réalisée dans cette thèse a permis de mieux contraindre les abondances, d'une part grâce aux nombreuses raies prises en compte dans la modélisation (16 raies) couvrant une large gamme en énergie (E_{up} = 22 – 168 K) et d'autre part grâce à une modélisation basée sur le profil des raies et non pas sur leur flux intégré uniquement. C'est la première étude basée sur un aussi grand nombre de

transitions d'eau semi-lourde et elle a été rendue possible grâce au relevé spectral non biaisé réalisé avec l'instrument HIFI de l'Observatoire Spatial Herschel sur une très large gamme spectrale (480–1900 GHz) dans le cadre du programme CHESS. Neuf raies de HDO ont en effet été détectées avec HIFI, trois autres raies fournissant une limite supérieure. Quatre autres transitions observables depuis le sol ont complété ce jeu de données. Cette étude a aussi bénéficié de l'apport des nouveaux coefficients de collision de HDO calculés avec ortho et para–H_2 grâce à une collaboration avec l'équipe de Grenoble (Faure et al. 2011; Wiesenfeld et al. 2011), coefficients plus proches de la réalité que ceux calculés avec He (Green 1989).

La modélisation des profils de raie plutôt que celle de leurs flux intégrés permet de mieux contraindre les abondances, les profils en vitesse et le paramètre b-doppler. Une telle modélisation semble d'ailleurs nécessaire au regard des profils particuliers que présentent les transitions fondamentales $1_{1,1}$–$0_{0,0}$ et $1_{0,1}$–$0_{0,0}$ observées respectivement à 894 et 465 GHz avec l'instrument HIFI et le télescope JCMT. Dans le cas des proto-étoiles de faible masse, elles montrent en effet une composante en absorption profonde et étroite superposée à une composante en émission plus large. Pour IRAS 4A et IRAS 4B, elles montrent même une composante supplémentaire très large traçant les flots moléculaires. En raison de la sensibilité de l'instrument HIFI, le profil de la raie à 894 GHz apparaît très peu bruité et permet donc de contraindre précisément l'abondance externe de HDO. En effet, l'étude de Parise et al. (2005) dans IRAS 16293 basée sur cinq transitions observables depuis le sol ne pouvait conclure que sur une limite supérieure de l'abondance externe, tandis que, dans NGC 1333 IRAS 2A, Liu et al. (2011) obtiennent une incertitude très large sur l'abondance externe (un facteur 20 entre la valeur inférieure et la valeur supérieure de $X_{\rm out}$ à 3σ) que l'on peut comparer avec celles déterminées pour IRAS 16293, IRAS 4A et IRAS 4B dans cette thèse (environ un facteur 2 ; cf Table 6.1). Cette transition est, de plus, très contraignante pour déterminer les profils en vitesse et le paramètre b-doppler. Pour les proto-étoiles de faible masse, le paramètre b-doppler est déterminé à partir de l'élargissement de la composante en absorption tandis que la masse utilisée dans le profil de vitesse de chute libre est estimée à partir des largeurs des raies en émission. Pour les proto-étoiles massives avec une enveloppe en effondrement comme G34, la détermination de ces deux quantités devient plus complexe car le paramètre b-doppler n'est plus négligeable devant la vitesse d'effondrement. Enfin la modélisation des profils de raie a permis de montrer qu'il n'était pas possible, pour les proto-étoiles de faible masse, de reproduire les absorptions sans ajout d'une couche d'absorption en avant-plan avec une abondance de HDO plus élevée que celle dans l'enveloppe froide de la proto-étoile. Cette couche d'absorption riche en eau pourrait s'être formée par photo-désorption en bordure du nuage moléculaire entourant la proto-étoile, comme le prédit le modèle d'Hollenbach et al. (2009). Une autre hypothèse pourrait être que le temps de collage à la surface des grains est trop long en-dessous d'une certaine densité par rapport à l'âge de la proto-étoile. Pour les sources massives, la question de la présence de cette couche d'absorption est encore ouverte. Le cas de G34 reste ambigu car certains modèles permettent de reproduire la composante en absorption sans ajout de cette couche externe. De plus, aucune absorption n'est observée, peut-être en raison du bruit, sur les données CSO à 465 GHz. L'étude des autres sources du programme PRISMAS permettra peut-être de trancher.

L'analyse de l'eau deutérée a pour but principal de contraindre les abondances de HDO

afin de déterminer le rapport HDO/H_2O de ces objets, d'une part pour le comparer à celui observé dans les comètes et d'autre part pour contraindre les mécanismes de formation de l'eau. Nous avons utilisé au Chapitre 3 les données $H_2{}^{18}O$ contenues dans le relevé spectral HIFI pour estimer les abondances de H_2O d'IRAS 16293 par une méthode similaire à celle de HDO. Les données $H_2{}^{16}O$ n'ont pas été utilisées car elles sont polluées par l'émission des flots moléculaires. Cela explique, par ailleurs, la divergence entre les résultats obtenus ici et ceux de Ceccarelli et al. (2000a) basés sur des observations ISO/LWS de raies de $H_2{}^{16}O$. Le rapport HDO/H_2O obtenu pour IRAS 16293 est d'environ 1.8% dans le *hot corino*, de 0.5% dans l'enveloppe externe plus froide et d'environ 4.8% dans la couche d'absorption. Le fractionnement de l'eau en deutérium observé dans cette proto-étoile est donc beaucoup plus élevé que celui observé dans les comètes et les océans terrestres ($\sim 1.5 \times 10^{-4}$), suggérant une modification du rapport HDO/H_2O entre l'étape de Classe 0 et la formation des comètes et des planètes (cf Fig. 6.1). Pour s'en assurer, il faut néanmoins déterminer le rapport HDO/H_2O dans un plus grand échantillon de proto-étoiles. Des estimations des rapports HDO/H_2O seront bientôt disponibles pour IRAS 4A et IRAS 4B avec les observations prochaines de transitions de $H_2{}^{18}O$ avec HIFI dans ces sources. La détermination des rapports HDO/H_2O est également utile pour contraindre les mécanismes de formation de l'eau dans ces régions, comme nous avons pu le voir avec l'étude d'IRAS 16293. La similarité des rapports HDO/H_2O dans le *hot corino* où les molécules d'eau sont libérées en phase gazeuse et dans la couche d'absorption suggère que l'eau se formerait avant l'effondrement du nuage gravitationnel, contrairement à des molécules comme le méthanol et le formaldéhyde qui se formeraient suite à la déplétion du CO sur les grains pendant l'effondrement. Ceci est d'ailleurs confirmé par plusieurs modèles chimiques (Cazaux et al. 2011, Taquet et al. 2012). L'eau lourde a également été analysée dans IRAS 16293. Le rapport D_2O/HDO apparaît plus faible dans le *hot corino* ($\sim 0.4\%$) que dans la couche d'absorption ($\sim 11\%$), suggérant peut-être une modification de la chimie en présence de disques. L'étude de l'eau en direction de la source massive G34 par le groupe WISH permettra de confirmer ou non le rapport HDO/H_2O estimé dans son *hot core* par Jacq et al. (1990), ainsi que de le déterminer pour la première fois dans son enveloppe externe plus froide. Les autres proto-étoiles massives du programme PRISMAS feront également l'objet d'une analyse en HDO et H_2O (analyse à laquelle je participerai), afin de savoir si la chimie de l'eau dans ces sources est comparable à celle des proto-étoiles de faible masse, l'abondance en eau deutérée de G34 ne semblant pas très différente de celle des proto-étoiles de type solaire.

La détermination de la structure physique des proto-étoiles est relativement incertaine dans les parties internes de l'enveloppe ($\lesssim 100$ UA). Des observations interférométriques sont nécessaires pour affiner la détermination des abondances internes obtenues par ce travail. Jusqu'à présent, toutes les estimations des abondances d'eau et d'eau deutérée à partir de données interférométriques (Jørgensen & van Dishoeck 2010a; Codella et al. 2010; Persson et al. 2012) ne sont basées que sur la mesure de l'émission d'une seule raie, ce qui n'est pas suffisant pour contraindre les conditions d'excitation et peut donc mener à des résultats incertains. Le futur de ce type d'études consistera à déterminer le rapport HDO/H_2O à partir d'une analyse interférométrique multi-transitions. L'interféromètre ALMA situé à plus de 5000 m d'altitude dans le désert d'Atacama au Chili apparaît être l'instrument idéal pour cela. Composé de 50 antennes de 12 m de diamètre et 12 antennes de 7 m, il permettra d'atteindre des résolutions angulaires de l'ordre de $0.1''$ et donc de sonder clairement les *hot corinos* dans

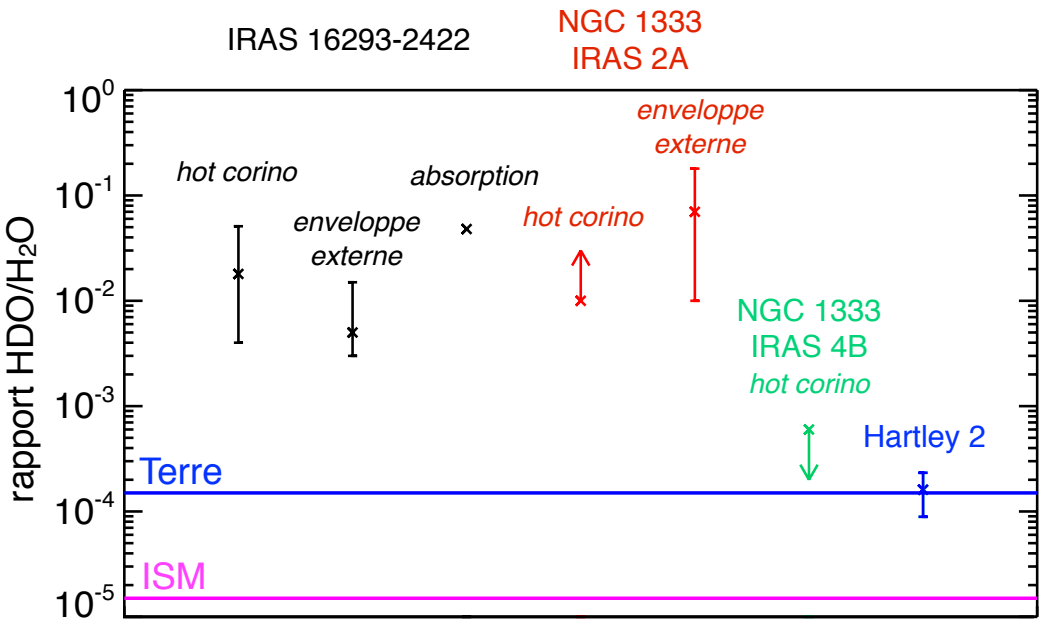


FIGURE 6.1 – Comparaison des rapports d'abondance HDO/H_2O en phase gazeuse de la proto-étoile IRAS 16293 (en noir) étudiée dans cette thèse, de la proto-étoile NGC 1333 IRAS 2A (en rouge) étudiée par Liu et al. (2011), du *hot corino* de NGC 1333 IRAS 4B (en vert) étudié par interférométrie par Jørgensen & van Dishoeck (2010a) et de la comète Hartley 2 (en bleu) étudiée par Hartogh et al. (2011). Le trait horizontal bleu indique le rapport D/H des océans terrestres (Lecuyer et al. 1998). Le trait magenta représente le rapport D/H du milieu interstellaire local.

lesquels naîtront les futures comètes et planètes. Dix bandes spectrales comprises entre 31 et 950 GHz (cf Table 6.2) seront observables. Actuellement, les capacités interférométriques d'ALMA sont de 32 antennes de 12 m et 9 antennes de 7 m pour des observations des bandes 3, 6, 7 et 9 uniquement. La Table 6.2 liste les différentes transitions de HDO, $H_2{}^{18}O$, $H_2{}^{17}O$, D_2O et $HD^{18}O$ potentiellement observables avec ALMA, confirmant donc qu'une estimation des rapports HDO/H_2O et D_2O/HDO à partir de l'observation de plusieurs transitions est possible avec cet instrument. La détermination du fractionnement de l'eau en deutérium à des échelles spatiales relativement petites (inférieures à la taille des *hot corinos*) permettra alors de comprendre précisément la chimie de l'eau au cœur des proto-étoiles de type solaire (présence de disques, chocs, etc) et éventuellement de découvrir les mécanismes qui mèneront au rapport HDO/H_2O observé dans les comètes et les océans terrestres. L'interférométrie avec ALMA devrait donc apporter la rigueur nécessaire à la détermination des abondances de HDO et H_2O dans les *hot corinos* et les probables structures qui les composent (disques, proto-planètes), tout comme le satellite Herschel et son instrument HIFI ont fourni un apport important à l'estimation des abondances dans l'enveloppe plus froide et étendue des proto-étoiles, à travers l'observation à haute résolution spectrale de la transition fondamentale $1_{1,1}$–$0_{0,0}$ à 894 GHz notamment. A plus long terme, le télescope CCAT (*Cornell Caltech*

TABLE 6.2 – Bandes spectrales ALMA et transitions des isotopes de l'eau observables dans ces bandes. Les transitions en rouge indiquent les formes para et les transitions en bleu indiquent les formes ortho.

Bande	Gamme spectrale (GHz)	Isotopes de l'eau observables dans ces bandes									
		HDO		D_2O		$H_2{}^{18}O$		$H_2{}^{17}O$		$HD^{18}O$	
		ν(GHz)	E_{up}(K)	ν(GHz)	E_{up}(K)	ν(GHz)	E_{up}(K)	ν(GHz)	E_{up}(K)	ν(GHz)	E_{up}(K)
1	31.3 – 45										
2	67 – 90	81	47								
		70	441								
3	84 – 116										
4	125 – 163	144	319								
		139	444								
5	163 – 211	207	226			203	204	194	204		
6	211 – 275	242	95								
		266	158								
		226	168								
		255	437								
7	275 – 373	335	335	317	33	322	468	324	469		
		311	437								
8	385 – 500	465	22	468	52	391	322	386	323	462	22
		491	66	404	71	489	430	470	431		
		482	168	459	129						
		480	335								
9	602 – 720			607	29						
10	787 – 950	894	43	898	61			945	453	883	42
		919	66	851	101						
		849	84	948	106						
		797	263								
		827	263								
		913	425								

Atacama Telescope) de 25 m de diamètre permettra également de compléter ce type d'étude. Il couvrira une large gamme spectrale entre 200 et 2200 μm (136 – 1500 GHz) dans laquelle se trouvent de nombreuses transitions de HDO et $H_2{}^{18}O$. La résolution angulaire sera notamment de 3.4″ à 894 GHz. L'interféromètre NOEMA (*NOrthern Extended Millimeter Array*) permettra aussi d'observer, dans l'hémisphère Nord, les différents isotopes de l'eau à des résolutions spatiales comparables à celles d'ALMA.

En plus de l'analyse par interférométrie des *hot corinos*, l'étude de sources à des stades intermédiaires (Classe I, Classe II et Classe III) pourra être entreprise pour comprendre

l'évolution du rapport HDO/H_2O durant la formation stellaire. Là aussi, l'utilisation d'interféromètres à haute sensibilité tel que ALMA est requise pour espérer détecter des transitions de HDO et $H_2{}^{18}O$ dans ces objets relativement peu brillants. Enfin, l'estimation des fractionnements en deutérium de molécules autres que l'eau (HCN, H_2CO, CH_3OH, ...) dans des sources à différents stades d'évolution pourrait apporter une information complémentaire et ainsi permettre de comprendre l'origine des espèces présentes dans les comètes.

Annexe A

Etude des hydrocarbures dans la proto-étoile de faible masse IRAS 16293-2422

Sommaire

A.1 Etude des hydrocarbures dans le relevé spectral TIMASSS 147
A.1.1 Hydrocarbures détectés dans le relevé spectral TIMASSS 147
A.1.2 Diagrammes rotationnels 150
A.2 Etude interférométrique du propyne (CH_3CCH) avec ATCA 154
A.3 Cartographie des hydrocarbures avec le télescope de l'IRAM-30m . 156
A.3.1 Présentation des cartes 156
A.3.2 Interprétation des cartes 157

En plus de l'étude de l'eau deutérée présentée dans cette thèse, je me suis également intéressée à une autre thématique : la chimie des hydrocarbures dans la proto-étoile de type solaire IRAS 16293. Nous avons vu en Section 1.2.2 que IRAS 16293 présente une chimie riche en molécules organiques complexes ($HCOOCH_3$, CH_3OCH_3, etc) caractéristiques des *hot corinos* et qui contraste avec la chimie *WCCC* riche en longues chaînes carbonées et mise en évidence dans deux proto-étoiles de faible masse IRAS 04368+2557 et IRAS 15398-3359 (cf Sect. 1.2.3.2). Bien qu'aucune émission de longs hydrocarbures telles que C_5H, C_6H et C_6H_2 typiques des sources *WCCC* n'ait été détectée dans IRAS 16293, de plus petits hydrocarbures sont néanmoins observés dans le relevé spectral TIMASSS. Pour mieux comprendre l'origine de ces deux types de chimie, il apparaît important d'étudier l'émission des hydrocarbures présents dans une source telle qu'IRAS 16293 pour une meilleure comparaison de la chimie des sources avec *hot corinos* et des sources *WCCC*.

A.1 Etude des hydrocarbures dans le relevé spectral TIMASSS

A.1.1 Hydrocarbures détectés dans le relevé spectral TIMASSS

Le relevé spectral TIMASSS (cf Sect. 2.2.3.1) a permis de détecter de nombreuses transitions d'hydrocarbures listées en Table A.1.

TABLE A.1: Paramètres des transitions des différents hydrocarbures observés dans la source IRAS 16293-2422.[(1)]

Molécule	Fréquence (MHz)	Transitions	v_{LSR} (km s^{-1})	$FWHM$ (km s^{-1})	T_A^* (K)	rms (mK)	$\int T_A^* dv$ (K.km s^{-1})	$E_{\rm up}$ (K)	$A_{\rm ij}$ (s^{-1})	Télescope
CCH	87284.16	1 1.5 1 - 0 0.5 1	4.00	1.77	0.170	6	0.320	4	$2.6\ 10^{-7}$	IRAM
CCH	87316.93	1 1.5 2 - 0 0.5 1	3.81	2.17	0.593	6	1.372	4	$1.5\ 10^{-6}$	IRAM
CCH	87328.62	1 1.5 1 - 0 0.5 0	3.86	2.00	0.429	6	0.918	4	$1.3\ 10^{-6}$	IRAM
CCH	87402.00	1 0.5 1 - 0 0.5 1	3.81	2.05	0.462	6	1.012	4	$1.3\ 10^{-6}$	IRAM
CCH	87407.16	1 0.5 0 - 0 0.5 1	3.82	1.84	0.285	6	0.560	4	$1.5\ 10^{-6}$	IRAM
CCH	87446.51	1 0.5 1 - 0 0.5 0	3.90	1.67	0.163	6	0.291	4	$2.6\ 10^{-7}$	IRAM
CCH	174634.91	2 2.5 2 - 1 1.5 2	3.93	1.99	0.128	12	0.273	13	$1.0\ 10^{-6}$	IRAM
CCH	174663.22	2 2.5 3 - 1 1.5 2	3.82	2.27	0.804	12	1.951	13	$1.5\ 10^{-5}$	IRAM
CCH	174667.68	2 2.5 2 - 1 1.5 1	3.84	2.23	0.630	12	1.497	13	$1.4\ 10^{-5}$	IRAM
CCH	174721.78	2 1.5 2 - 1 0.5 1	3.78	2.26	0.532	12	1.282	13	$1.2\ 10^{-5}$	IRAM
CCH	174728.07	2 1.5 1 - 1 0.5 0	3.72	2.24	0.259	12	0.619	13	$8.2\ 10^{-6}$	IRAM
CCH	174733.24	2 1.5 1 - 1 0.5 1	3.95	4.22	0.187	12	0.843	13	$5.1\ 10^{-6}$	IRAM
CCH	174806.88	2 1.5 2 - 1 1.5 2	3.68	1.94	0.232	12	0.481	13	$2.7\ 10^{-6}$	IRAM
CCH	262004.26	3 3.5 4 - 2 2.5 3	3.99	2.50	0.558	7	1.494	25	$5.3\ 10^{-5}$	IRAM
CCH	262006.48	3 3.5 3 - 2 2.5 2	1.50	2.50	0.599	7	1.588	25	$5.3\ 10^{-5}$	IRAM
CCH	262064.99	3 2.5 3 - 2 1.5 2	4.00	3.00	0.381	7	1.216	25	$4.9\ 10^{-5}$	IRAM
CCH	262067.47	3 2.5 2 - 2 1.5 1	1.50	3.00	0.336	7	1.073	25	$4.9\ 10^{-5}$	IRAM
CCH	262078.93	3 2.5 2 - 2 1.5 2	3.60	2.44	0.050	7	0.131	25	$6.0\ 10^{-6}$	IRAM
CCH	262208.67	3 2.5 3 - 2 2.5 3	3.30	3.56	0.057	7	0.218	25	$4.0\ 10^{-6}$	IRAM
CCH	349337.74	4 4.5 5 - 3 3.5 4	3.50	2.50	0.053	9	0.140	42	$1.3\ 10^{-4}$	JCMT
CCH	349339.07	4 4.5 4 - 3 3.5 3	3.00	2.50	0.654	9	1.741	42	$1.3\ 10^{-4}$	JCMT
CCH	349399.34	4 3.5 4 - 3 2.5 3	3.50	2.49	0.371	9	0.988	42	$1.3\ 10^{-4}$	JCMT
CCH	349400.69	4 3.5 3 - 3 2.5 2	2.50	2.50	0.215	9	0.572	42	$1.3\ 10^{-4}$	JCMT
c-C_3H	91494.35	2 0.5 2 3 3 - 1 0.5 1 2 2	4.07	1.74	0.038	5	0.071	4	$1.6\ 10^{-5}$	IRAM
c-C_3H	91497.61	2 0.5 2 3 2 - 1 0.5 1 2 1	4.59	1.55	0.026	5	0.042	4	$1.4\ 10^{-5}$	IRAM
c-C_3H	91699.47	2 0.5 2 2 2 - 1 0.5 1 1 1	4.16	1.38	0.023	5	0.034	4	$1.4\ 10^{-5}$	IRAM
c-C_3H	132993.98	3 0.5 3 4 4 - 2 0.5 2 3 3	4.20	1.34	0.046	7	0.066	11	$6.1\ 10^{-5}$	IRAM
c-C_3H	132994.68	3 0.5 3 4 3 - 2 0.5 2 3 2	4.34	1.33	0.045	7	0.064	11	$5.7\ 10^{-5}$	IRAM
c-C_3H	133187.72	3 0.5 3 3 3 - 2 0.5 2 2 2	4.60	1.89	0.043	10	0.086	11	$5.7\ 10^{-5}$	IRAM
c-C_3H	172463.36	4 0.5 4 5 5 - 3 0.5 3 4 4	4.17	2.61	0.065	12	0.180	19	$1.4\ 10^{-4}$	IRAM
c-C_3H	172463.72	4 0.5 4 5 4 - 3 0.5 3 4 3	4.78	2.61	0.065	12	0.179	19	$1.4\ 10^{-4}$	IRAM
l-C_3H	98011.61	4 0.5 0 5 5 - 4 -1.5 0 4 4	4.33	0.84	0.043	5	0.038	13	$6.1\ 10^{-5}$	IRAM
l-C_3H	103372.48	5 -1.5 0 5 5 - 3 0.5 0 4 4	5.10	2.12	0.011	5	0.025	33	$6.5\ 10^{-5}$	IRAM
l-C_3H	112194.33	5 -0.5 1 5 4 - 4 -0.5 1 4 3	3.63	1.99	0.020	8	0.042	55	$9.0\ 10^{-5}$	IRAM
l-C_3H	141635.79	6 -1.5 0 0 7 - 5 0.5 0 6 6	2.90	2.72	0.039	11	0.113	25	$1.9\ 10^{-4}$	IRAM
l-C_3H	163491.04	7 0.5 0 8 8 - 6 -1.5 0 7 7	3.34	1.85	0.021	10	0.042	33	$3.0\ 10^{-4}$	IRAM
l-C_3H	207279.41	9 0.5 0 10 10 - 8 -1.5 0 9 9	4.36	3.59	0.024	4	0.092	52	$6.2\ 10^{-4}$	IRAM
o-c-C_3H_2	82966.20	3 1 2 0 - 3 0 3 0	4.17	2.00	0.181	5	0.386	14	$1.1\ 10^{-5}$	IRAM
o-c-C_3H_2	85338.89	2 1 2 0 - 1 0 1 0	4.20	1.98	0.627	6	1.320	4	$2.6\ 10^{-5}$	IRAM
o-c-C_3H_2	85656.43	4 3 2 0 - 4 2 3 0	4.30	2.31	0.076	6	0.187	27	$1.7\ 10^{-5}$	IRAM
o-c-C_3H_2	145089.60	3 2 1 0 - 2 2 1 0	4.08	1.65	0.564	10	0.993	14	$7.4\ 10^{-5}$	IRAM
o-c-C_3H_2	150851.91	4 1 4 0 - 3 0 3 0	4.39	1.89	0.962	10	1.941	17	$1.8\ 10^{-4}$	IRAM
o-c-C_3H_2	151039.17	6 3 4 0 - 6 2 5 0	4.59	1.84	0.052	10	0.102	53	$6.9\ 10^{-5}$	IRAM
o-c-C_3H_2	151343.87	5 1 4 0 - 5 0 5 0	4.19	3.26	0.073	11	0.253	33	$4.4\ 10^{-5}$	IRAM
o-c-C_3H_2	216278.76	3 3 0 0 - 2 2 1 0	4.37	2.99	0.180	11	0.573	17	$2.8\ 10^{-4}$	IRAM
o-c-C_3H_2	217940.05	5 1 4 0 - 4 2 3 0	4.12	2.50	0.222	9	0.591	33	$4.4\ 10^{-4}$	IRAM
o-c-C_3H_2	227169.13	4 3 2 0 - 3 2 1 0	4.29	3.46	0.176	12	0.649	27	$3.4\ 10^{-4}$	IRAM
o-c-C_3H_2	244222.13	3 2 1 0 - 2 1 2 0	4.51	3.13	0.087	9	0.291	16	$6.5\ 10^{-5}$	IRAM
o-c-C_3H_2	249054.37	5 2 3 0 - 4 3 2 0	3.56	3.48	0.056	10	0.208	39	$4.6\ 10^{-4}$	IRAM
o-c-C_3H_2	251527.30	6 2 5 0 - 5 1 4 0	3.93	3.10	0.154	10	0.508	45	$7.4\ 10^{-4}$	IRAM
o-c-C_3H_2	265759.44	4 4 1 0 - 3 3 0 0	3.88	3.19	0.122	14	0.415	30	$8.0\ 10^{-4}$	IRAM

Molécule	Fréquence (MHz)	Transitions	v_{LSR} (km s^{-1})	$FWHM$ (km s^{-1})	T_A^* (K)	rms (mK)	$\int T_A^* dv$ (K.km s^{-1})	$E_{\rm up}$ (K)	$A_{\rm ij}$ (s^{-1})	Télescope
o-c-C_3H_2	349263.98	5 5 0 0 - 4 4 1 0	3.70	3.20	0.112	9	0.382	47	$1.8\ 10^{-3}$	JCMT
p-c-C_3H_2	80723.17	4 2 2 0 - 4 1 3 0	3.89	2.01	0.042	9	0.090	29	$1.5\ 10^{-5}$	IRAM
p-c-C_3H_2	82093.56	2 0 2 0 - 1 1 1 0	4.29	1.77	0.292	6	0.551	6	$2.1\ 10^{-5}$	IRAM
p-c-C_3H_2	84727.70	3 2 2 0 - 3 1 3 0	4.33	2.06	0.074	6	0.162	16	$1.1\ 10^{-5}$	IRAM
p-c-C_3H_2	150436.55	2 2 0 0 - 1 1 1 0	4.21	1.44	0.187	11	0.286	10	$5.9\ 10^{-5}$	IRAM
p-c-C_3H_2	150820.67	4 0 4 0 - 3 1 3 0	4.37	1.62	0.406	10	0.703	19	$1.8\ 10^{-4}$	IRAM
p-c-C_3H_2	155518.30	3 2 2 0 - 2 1 1 0	4.29	1.67	0.275	10	0.488	16	$1.2\ 10^{-4}$	IRAM
p-c-C_3H_2	204788.93	4 2 2 0 - 3 3 1 0	4.30	2.00	0.079	10	0.169	29	$1.4\ 10^{-4}$	IRAM
p-c-C_3H_2	218160.44	5 2 4 0 - 4 1 3 0	3.62	2.21	0.124	9	0.292	35	$4.4\ 10^{-4}$	IRAM
p-c-C_3H_2	251508.69	6 1 5 0 - 5 2 4 0	3.94	2.65	0.060	10	0.169	47	$7.4\ 10^{-4}$	IRAM
l-C_3H_2	82395.09	4 1 4 - 3 1 3	4.20	1.94	0.025	5	0.052	23	$4.6\ 10^{-5}$	IRAM
l-C_3H_2	103952.93	5 0 5 - 4 0 4	4.55	2.63	0.022	5	0.061	15	$1.0\ 10^{-4}$	IRAM
l-C_3H_2	164777.55	8 1 8 - 7 1 7	3.74	2.03	0.039	10	0.084	49	$4.1\ 10^{-4}$	IRAM
l-C_3H_2	167854.23	8 1 7 - 7 1 6	4.43	3.15	0.042	15	0.142	50	$4.3\ 10^{-4}$	IRAM
l-C_3H_2	247134.87	12 1 12 - 11 1 11	3.36	3.56	0.022	6	0.085	90	$1.4\ 10^{-3}$	IRAM
E-CH_3CCH	85450.73	5 2 0 - 4 2 0	3.62	2.78	0.051	6	0.150	41	$1.6\ 10^{-6}$	IRAM
E-CH_3CCH	85455.62	5 1 0 - 4 1 0	3.53	2.36	0.136	6	0.341	20	$1.8\ 10^{-6}$	IRAM
E-CH_3CCH	85457.27	5 0 0 - 4 0 0	3.63	2.28	0.176	6	0.428	12	$1.9\ 10^{-6}$	IRAM
E-CH_3CCH	102540.14	6 2 0 - 5 2 0	3.92	2.68	0.086	5	0.245	46	$3.0\ 10^{-6}$	IRAM
E-CH_3CCH	102546.02	6 1 0 - 5 1 0	3.84	2.45	0.196	5	0.510	24	$3.3\ 10^{-6}$	IRAM
E-CH_3CCH	102547.98	6 0 0 - 5 0 0	3.94	2.46	0.233	5	0.610	17	$3.4\ 10^{-6}$	IRAM
E-CH_3CCH	136717.56	8 2 0 - 7 2 0	3.84	3.24	0.106	10	0.365	58	$7.6\ 10^{-6}$	IRAM
E-CH_3CCH	136725.40	8 1 0 - 7 1 0	3.77	2.84	0.226	10	0.683	37	$8.0\ 10^{-6}$	IRAM
E-CH_3CCH	136728.01	8 0 0 - 7 0 0	3.79	3.02	0.262	10	0.841	30	$8.1\ 10^{-6}$	IRAM
E-CH_3CCH	153805.46	9 2 0 - 8 2 0	3.51	2.33	0.110	11	0.272	66	$1.1\ 10^{-5}$	IRAM
E-CH_3CCH	153814.27	9 1 0 - 8 1 0	3.69	2.66	0.213	11	0.604	44	$1.2\ 10^{-5}$	IRAM
E-CH_3CCH	153817.21	9 0 0 - 8 0 0	3.73	3.04	0.251	11	0.814	37	$1.2\ 10^{-5}$	IRAM
E-CH_3CCH	170892.72	10 2 0 - 9 2 0	3.98	3.23	0.129	11	0.445	74	$1.5\ 10^{-5}$	IRAM
E-CH_3CCH	170902.52	10 1 0 - 9 1 0	3.75	3.25	0.235	11	0.814	52	$1.6\ 10^{-5}$	IRAM
E-CH_3CCH	170905.78	10 0 0 - 9 0 0	3.95	3.19	0.300	11	1.019	45	$1.6\ 10^{-5}$	IRAM
E-CH_3CCH	205065.02	12 2 0 - 11 2 0	3.41	4.73	0.093	8	0.469	93	$2.7\ 10^{-5}$	IRAM
E-CH_3CCH	205076.78	12 1 0 - 11 1 0	3.55	4.54	0.138	8	0.666	71	$2.8\ 10^{-5}$	IRAM
E-CH_3CCH	205080.66	12 0 0 - 11 0 0	3.58	3.91	0.149	8	0.619	64	$2.8\ 10^{-5}$	IRAM
E-CH_3CCH	222150.01	13 2 0 - 12 2 0	3.43	3.51	0.095	8	0.357	104	$3.5\ 10^{-5}$	IRAM
E-CH_3CCH	222162.73	13 1 0 - 12 1 0	3.18	3.85	0.117	8	0.479	82	$3.6\ 10^{-5}$	IRAM
E-CH_3CCH	222166.97	13 0 0 - 12 0 0	3.29	3.17	0.150	8	0.508	75	$3.6\ 10^{-5}$	IRAM
E-CH_3CCH	239247.73	14 1 0 - 13 1 0	3.16	3.76	0.090	10	0.361	93	$4.5\ 10^{-5}$	IRAM
E-CH_3CCH	239252.30	14 0 0 - 13 0 0	3.18	3.34	0.099	10	0.353	86	$4.5\ 10^{-5}$	IRAM
E-CH_3CCH	256317.07	15 2 0 - 14 2 0	4.24	5.07	0.065	10	0.349	127	$5.4\ 10^{-5}$	IRAM
E-CH_3CCH	256331.74	15 1 0 - 14 1 0	3.94	4.68	0.111	10	0.554	106	$5.5\ 10^{-5}$	IRAM
E-CH_3CCH	256336.63	15 0 0 - 14 0 0	3.73	4.12	0.143	10	0.627	98	$5.5\ 10^{-5}$	IRAM
E-CH_3CCH	273399.05	16 2 0 - 15 2 0	2.87	3.54	0.058	9	0.218	140	$6.6\ 10^{-5}$	IRAM
A-CH_3CCH	102530.35	6 3 0 - 5 3 0	3.97	3.93	0.040	5	0.169	12	$2.5\ 10^{-6}$	IRAM
A-CH_3CCH	136704.50	8 3 0 - 7 3 0	3.80	3.87	0.086	10	0.355	25	$7.0\ 10^{-6}$	IRAM
A-CH_3CCH	153790.77	9 3 0 - 8 3 0	3.65	2.63	0.077	11	0.215	32	$1.0\ 10^{-5}$	IRAM
A-CH_3CCH	170876.41	10 3 0 - 9 3 0	3.66	3.97	0.123	11	0.520	40	$1.5\ 10^{-5}$	IRAM
A-CH_3CCH	205045.40	12 3 0 - 11 3 0	4.06	4.00	0.082	8	0.348	59	$2.6\ 10^{-5}$	IRAM
A-CH_3CCH	222128.81	13 3 0 - 12 3 0	3.38	4.32	0.081	8	0.374	70	$3.4\ 10^{-5}$	IRAM
A-CH_3CCH	256292.63	15 3 0 - 14 3 0	2.98	4.54	0.067	10	0.325	93	$5.3\ 10^{-5}$	IRAM
A-CH_3CCH	273372.99	16 3 0 - 15 3 0	4.06	3.98	0.082	9	0.346	107	$6.5\ 10^{-5}$	IRAM
C_4H	85634.00	9 9.5 9 - 8 8.5 8	3.95	1.66	0.065	6	0.114	21	$2.6\ 10^{-6}$	IRAM
C_4H	85634.02	9 9.5 10 - 8 8.5 9	4.02	1.69	0.063	6	0.114	21	$2.6\ 10^{-6}$	IRAM
C_4H	85672.58	9 8.5 8 - 8 7.5 7	4.00	1.91	0.056	6	0.114	21	$2.6\ 10^{-6}$	IRAM

Molécule	Fréquence (MHz)	Transitions	v_{LSR} (km s^{-1})	$FWHM$ (km s^{-1})	T_A^* (K)	rms (mK)	$\int T_A^* dv$ (K.km s^{-1})	$E_{\rm up}$ (K)	$A_{\rm ij}$ (s^{-1})	Télescope
C_4H	85672.58	9 8.5 9 - 8 7.5 8	4.00	1.91	0.056	6	0.114	21	$2.6\ 10^{-6}$	IRAM
C_4H	95150.39	10 10.5 10 - 9 9.5 9	3.90	0.99	0.077	5	0.082	25	$3.6\ 10^{-6}$	IRAM
C_4H	95150.40	10 10.5 11 - 9 9.5 10	3.93	1.00	0.077	5	0.082	25	$3.6\ 10^{-6}$	IRAM
C_4H	95188.95	10 9.5 9 - 9 8.5 8	3.98	1.61	0.058	5	0.100	25	$3.6\ 10^{-6}$	IRAM
C_4H	95188.95	10 9.5 10 - 9 8.5 9	3.99	1.61	0.058	5	0.099	25	$3.6\ 10^{-6}$	IRAM
C_4H	104666.56	11 11.5 11 - 10 10.5 10	4.09	1.37	0.048	8	0.069	30	$4.8\ 10^{-6}$	IRAM
C_4H	104666.57	11 11.5 12 - 10 10.5 11	4.11	1.43	0.049	8	0.075	30	$4.8\ 10^{-6}$	IRAM
C_4H	104705.11	11 10.5 10 - 10 9.5 9	3.99	1.59	0.044	8	0.074	30	$4.8\ 10^{-6}$	IRAM
C_4H	104705.11	11 10.5 11 - 10 9.5 10	3.99	1.57	0.044	8	0.074	30	$4.8\ 10^{-6}$	IRAM
l-C_4H_2	80718.83	9 1 8 - 8 1 7	4.57	3.57	0.025	9	0.095	33	$4.8\ 10^{-5}$	IRAM
l-C_4H_2	97833.63	11 1 11 - 10 1 10	5.27	2.24	0.015	6	0.037	42	$8.7\ 10^{-5}$	IRAM
l-C_4H_2	98655.09	11 1 10 - 10 1 9	4.64	2.11	0.015	5	0.033	42	$8.9\ 10^{-5}$	IRAM
l-C_4H_2	107622.95	12 1 11 - 11 1 10	3.15	1.82	0.023	5	0.045	47	$1.2\ 10^{-4}$	IRAM
l-C_4H_2	133963.12	15 0 15 - 14 0 14	3.34	1.52	0.022	10	0.036	51	$2.3\ 10^{-4}$	IRAM
l-C_4H_2	143492.17	16 1 15 - 15 1 14	3.88	2.59	0.020	11	0.055	72	$2.8\ 10^{-4}$	IRAM
l-C_4H_2	151189.68	17 1 17 - 16 1 16	3.42	1.19	0.042	10	0.054	79	$3.3\ 10^{-4}$	IRAM

(1) Les transitions indiquées en rouge ont été cartographiées avec l'IRAM (cf Sect. A.3). Mêmes celles dont le signal est insuffisant pour tracer une carte, mais ayant fiat l'objet d'une tentative, sont listées.

Les chaînes carbonées observées dans IRAS 16293 sont CCH, c-C_3H, l-C_3H, c-C_3H_2, l-C_3H_2, CH_3CCH, C_4H et l-C_4H_2, c et l désignant les formes cycliques et linéaires respectivement. Le logiciel CASSIS a été utilisé pour ajuster des gaussiennes sur les raies détectées. Seules les raies a priori non contaminées par d'autres molécules (catalogues JPL et CDMS) ont été considérées. La Table A.1 indique les paramètres d'ajustements qui ont été directement effectués sur les données en T_A^*. Les facteurs de *beam efficiency* sont indiqués dans Caux et al. (2011). Les tailles des lobes d'observation IRAM-30m varient entre 31.4″ et 9.3″ entre 80 et 270 GHz respectivement tandis qu'à 360 GHz, la taille du lobe du JCMT est de 14.0″.

A.1.2 Diagrammes rotationnels

Le relevé spectral TIMASSS étant non-biaisé, les transitions détectées s'étalent sur une large gamme d'énergie $E_{\rm up}$, ce qui permet de réaliser les diagrammes rotationnels (cf Sect. 2.3.2) de ces différentes molécules. Après conversion en $T_{\rm mb}$ des flux de la Table A.1, j'ai donc pu tracer les diagrammes rotationnels des hydrocarbures avec CASSIS. Ces derniers sont présentés en Figures A.1, A.2 et A.3. La séparation des formes ortho et para de c-C_3H_2 a été prise en compte afin de déterminer le rapport ortho/para de c-C_3H_2. Les densités de colonne et températures d'excitation obtenues sans correction de dilution sont résumées en Table A.2. Plusieurs hydrocarbures tels que C_2H, c-C_3H, C_4H et c-C_3H_2 montrent des températures d'excitation très basses ($\sim$ 12–14 K), traduisant une origine dans l'enveloppe froide de la proto-étoile, voire même du nuage moléculaire environnant. Les molécules linéaires l-C_3H, l-C_3H_2 et l-C_3H_4 présentent des températures d'excitation un peu plus élevées ($\sim$ 35–40 K), bien que plus incertaines du fait des faibles intensités des raies, qui pourrait indiquer une origine dans un gaz un peu plus chaud. D'ailleurs, si l'on considère une taille de source inférieure à la taille du lobe du télescope, le diagramme rotationnel de l-C_4H_2 apparaît plus approprié pour les différentes transitions à l'exception de celle à 80.7 GHz ($E_{\rm up}$ = 33 K ; cf Fig. A.2). Il peut sembler de même pour l-C_3H_2. Pour l-C_3H, il n'y a pas de changement

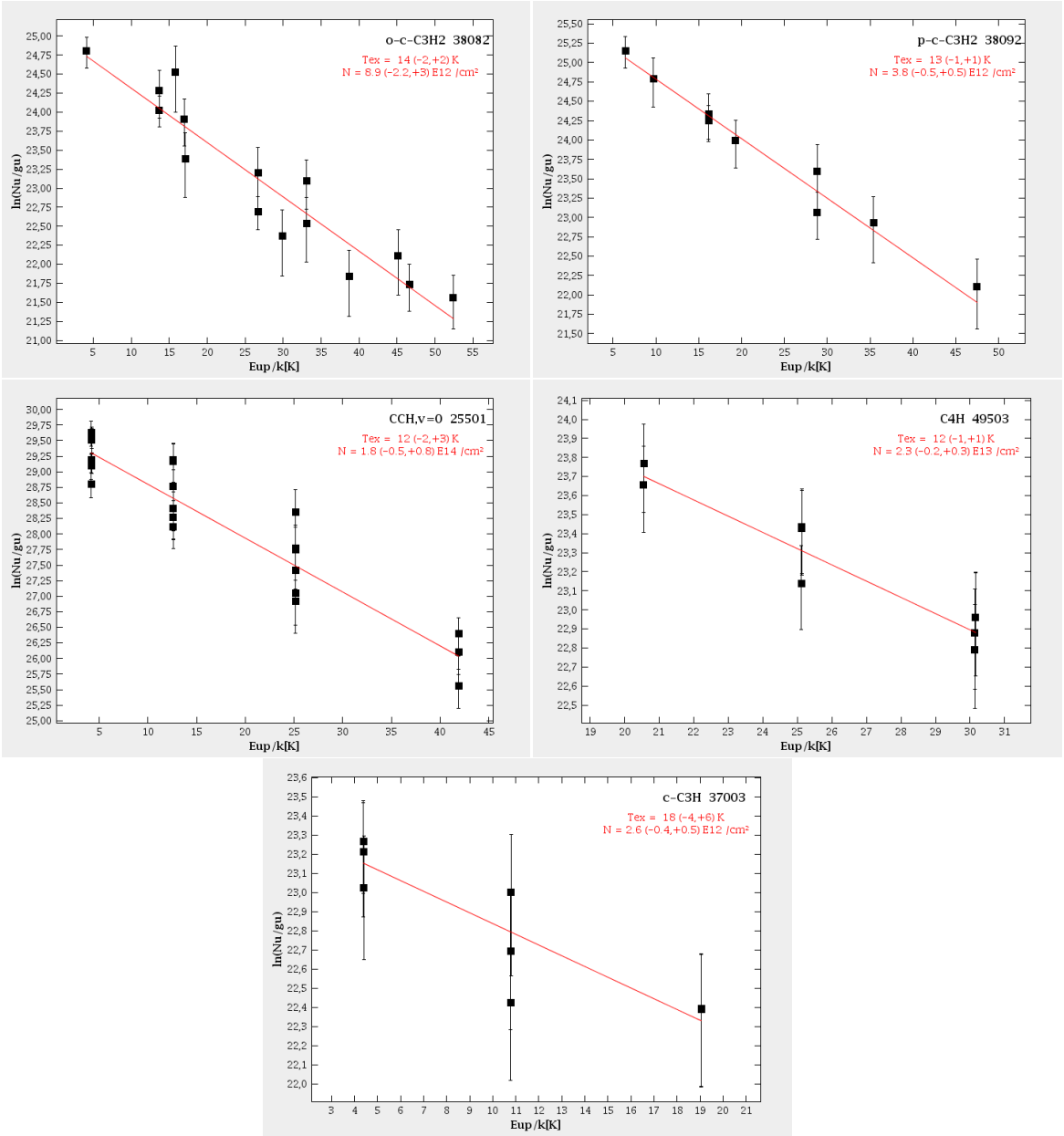


Figure A.1 – Diagrammes rotationnels des espèces ortho–c-C_3H_2, para–c-C_3H_2, CCH, C_4H et c-C_3H détectées dans le relevé spectral TIMASSS sans correction de dilution.

marquant. Pour le propyne, il apparaît très clairement, par contre, que son émission provient d'une région plus chaude, puisque son diagramme rotationnel basé sur un très grand nombre de raies indique une température d'excitation d'environ 53 K. En considérant une taille de source de 10″, le diagramme rotationnel présente une cassure ne permettant de déterminer des températures d'excitation et des densités de colonne uniques. Les deux ajustements linéaires mis en évidence, l'un à faible $E_{\rm up}$ ($T_{ex} \sim 30$ K) et l'autre à haut $E_{\rm up}$ ($T_{ex} \sim 65$ K), pourraient signifier que le propyne est émis par différentes composantes de la source, l'une étant plus

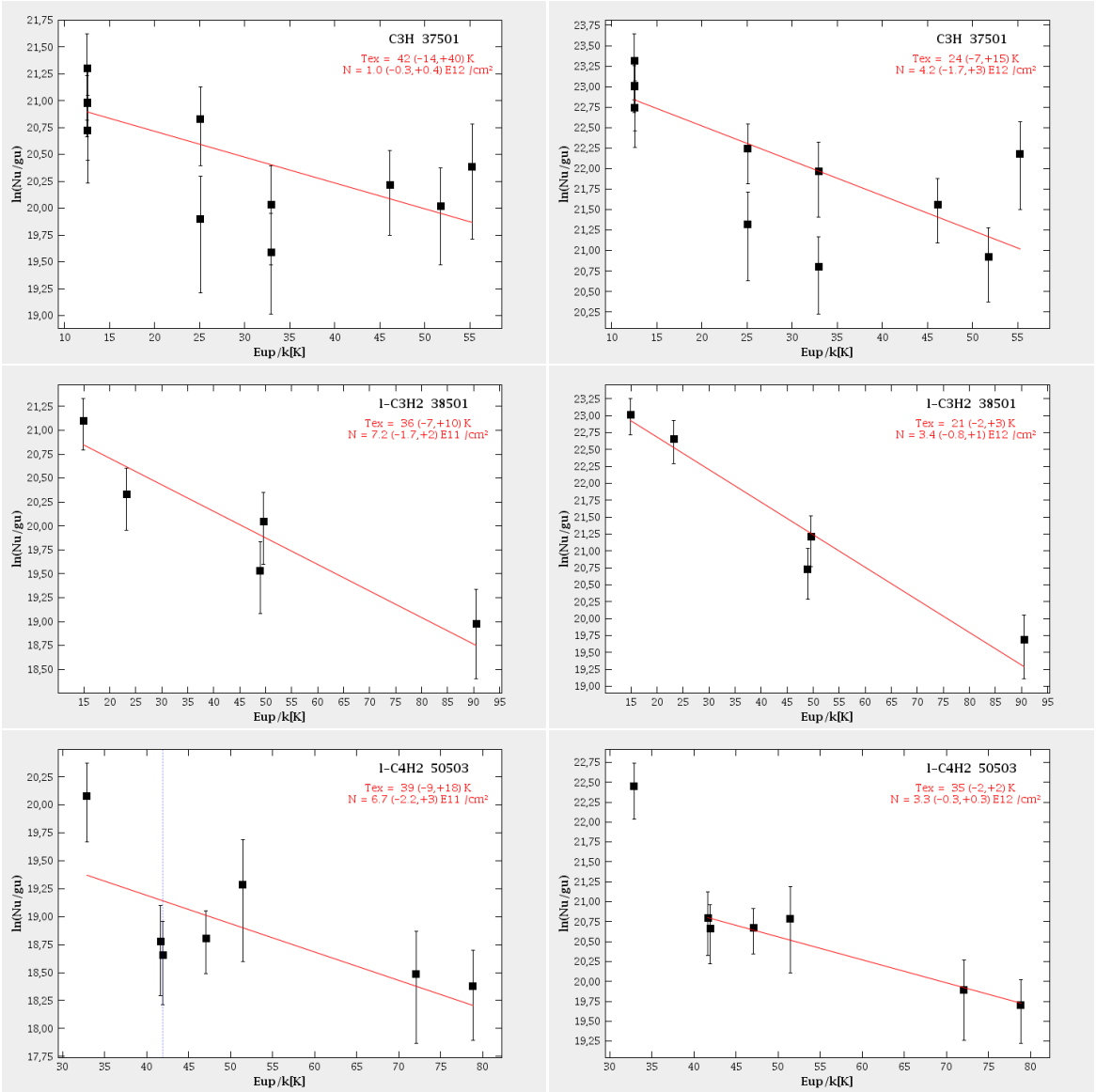


FIGURE A.2 – Diagrammes rotationnels de l-C_3H (en haut), l-C_3H_2 (au centre) et l-C_4H_2 (en bas) sans correction de dilution (à gauche) et en supposant une taille de source de 10″ (à droite).

chaude que l'autre. Cette espèce fait l'objet d'une séparation A ($K = 3n$ avec $n = 0, 1, 2, ...$) et E ($K \neq 3n$). A l'équilibre thermodynamique, le rapport E/A est de 1 au-dessus de 30 K et diminue à plus basse température. Si l'on réalise un diagramme rotationnel de ces deux formes séparément, la densité de colonne est d'environ 1.7×10^{14} cm^{-2} pour la forme E et d'environ 3.5×10^{13} cm^{-2} pour la forme A. L'estimation pour A-CH_3CCH reste néanmoins incertaine du fait du plus faible nombre de raies détectées qui ne forment d'ailleurs pas une ligne bien droite contrairement à son homologue E. De plus, l'estimation de la température d'excitation est plus élevée ($\sim$ 85 K) que celle de la forme E ($\sim$ 51 K), rendant la comparaison

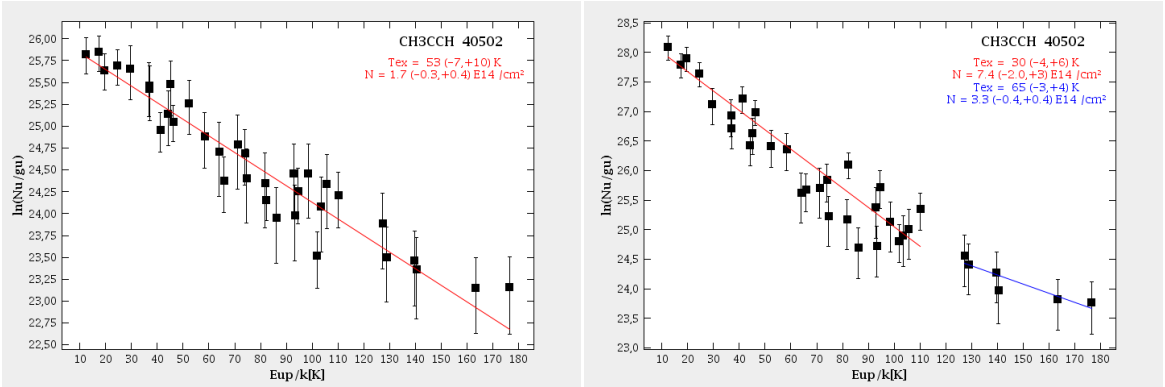


Figure A.3 – Diagrammes rotationnels de CH_3CCH sans correction de dilution (à gauche) et en supposant une taille de source de 10″ (à droite).

entre les densités de colonne moins évidente. Le rapport E/A est trop élevé par rapport à la limite supérieure de 1 à l'équilibre thermodynamique, ce qui est difficilement explicable et n'a jamais été mis en évidence dans d'autres sources. Le diagramme rotationnel de cette espèce est donc uniquement présenté sans séparation A/E pour une meilleure estimation de la densité de colonne de CH_3CCH. Le rapport c-C_3H_2/l-C_3H_2 obtenu (en sommant les densités de colonne des formes para et ortho de c-C_3H_2) est de 17.6 (– 6.7, +11.9) et s'accorde avec le rapport moyen de 20 observé dans les nuages sombres et diffus (Turner et al. 2000). Le rapport ortho/para de c-C_3H_2 est, quant à lui, de 2.3 (–0.8, +1.3), compatible avec la valeur à l'équilibre thermodynamique à haute température (3) et très proche des différentes valeurs mesurées entre 1.4 et 3.0 dans différents cœurs du nuage TMC-1 (Morisawa et al. 2006). Le rapport c-C_3H/l-C_3H obtenu est de 2.6 (–1.0, +1.8) à comparer avec les valeurs moyennes de 2.7 dans les nuages translucides et 4.6 dans les nuages sombres (Turner et al. 2000) et de 1.9 dans la nébuleuse de la Tête de Cheval (Teyssier et al. 2004).

Table A.2 – Températures d'excitation et densités de colonne obtenues avec les diagrammes rotationnels sans correction de dilution. Les incertitudes sont notées entre parenthèses.

Espèces	Température d'excitation (K)	Densité de colonne (cm^{-2})
CH_3CCH	53 (–7, +10)	1.7 (–0.3, +0.4) × 10^{14}
C_2H	12 (–2, +3)	1.8 (–0.5, +0.8) × 10^{14}
o-c-C_3H_2	14 (–2, +2)	8.9 (–2.2, +3.0) × 10^{12}
p-c-C_3H_2	13 (–1, +1)	3.8 (–0.5, +0.5) × 10^{12}
l-C_3H	42 (–14, +40)	1.0 (–0.3, +0.4) × 10^{12}
c-C_3H	18 (–4, +6)	2.6 (–0.4, +0.5) × 10^{12}
l-C_3H_2	36 (–7, +10)	7.2 (–1.7, +2.0) × 10^{11}
C_4H	12 (–1, +1)	2.3 (–0.2, +0.3) × 10^{13}
l-C_4H_2	39 (–9, +18)	6.7 (–2.2, +3.0) × 10^{11}

A.2 Etude interférométrique du propyne (CH_3CCH) avec ATCA

Comme nous l'avons vu précédemment, le propyne montre une température d'excitation élevée par comparaison avec les autres hydrocarbures et qui pourrait suggérer une émission dans les parties internes chaudes de l'enveloppe. Afin de répondre à cette question, des observations ont été menées avec l'interféromètre ATCA (*Australia Telescope Compact Array*, cf Fig. 2.2) en configuration H214 le 8 juillet 2011. Bien que cet interféromètre soit constitué de six antennes de 22 m, seulement cinq de ses antennes sont dotées d'un récepteur à 3 mm couvrant la bande spectrale 83–105 GHz. La planète Uranus a été utilisée comme calibrateur de flux primaire. La calibration de phase et d'amplitude a été réalisée en observant la source 1622-297 tandis que la calibration de bande passante a été effectuée sur la source 1921-293. Le CABB (*Compact Array Broadband Backend*) permettait d'observer simultanément deux bandes de 2 GHz (situées à moins de 6 GHz l'une de l'autre) divisées en 32 canaux de 64 MHz et avec la possibilité de zoomer dans un canal de chacune des bandes à une résolution de 32 kHz (2048 canaux dans 64 MHz). Plusieurs transitions de CH_3CCH listées en Table A.3 ont donc été observées à 85.5 GHz avec une résolution spectrale de 32 kHz. A cette fréquence, la taille du lobe primaire est de $32.9''$. La résolution spatiale est de $2.1\times1.8''$. Des transitions "bonus" de CCH ont été observées simultanément dans la bande image à 87.3 GHz (cf Table A.3). Les cartes ont été centrées sur la composante B d'IRAS 16293 ($\alpha_{2000} = 16^h\ 32^m\ 22\overset{s}{.}6$, $\delta_{2000} = -\ 24^\circ\ 28'\ 33''$).

Table A.3 – Transitions ciblées avec l'interféromètre ATCA.

Espèce	Transitions	Fréquence (GHz)	E_{up} (K)	A_{ij} (s^{-1})
CH_3CCH	5_3 - 4_3	85.44260	77	1.3×10^{-6}
CH_3CCH	5_2 - 4_2	85.45073	41	1.6×10^{-6}
CH_3CCH	5_1 - 4_1	85.45562	20	1.8×10^{-6}
CH_3CCH	5_0 - 4_0	85.45727	12	1.9×10^{-6}
CCH	2_1 - 1_1	87.28410	4	2.6×10^{-7}
CCH	2_2 - 1_1	87.31689	4	1.5×10^{-6}
CCH	2_1 - 1_0	87.32858	4	1.3×10^{-6}

Le logiciel MIRIAD (*Multichannel Image Reconstruction, Image Analysis and Display* Sault et al. 1995) a été utilisé pour calibrer les données et tracer les cartes. La carte du continuum obtenue à 85.5 GHz est représentée en Figure A.4. Elle révèle clairement les deux composantes A et B. Le *rms* est de ~ 3 mJy beam^{-1}. Les deux composantes peuvent être ajustées par des gaussiennes : la composante B présente une intensité intégrée de 0.17 Jy et un pic en émission à 0.15 Jy beam^{-1}, tandis que la composante A présente une intensité intégrée de 0.05 Jy et un pic en émission à 0.04 Jy beam^{-1}.

Aucune raie de CH_3CCH ou CCH n'est, par contre, détectée sur les données à haute

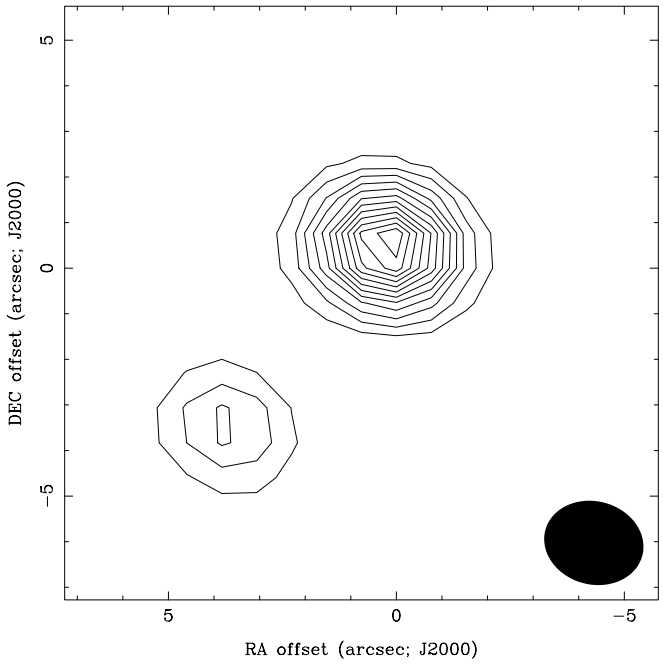


Figure A.4 – Carte du continuum obtenue à 3 mm avec l'interféromètre ATCA. Le pic des observations est de 0.13 Jy beam^{-1}. Les contours correspondent à 0.01, 0.02, 0.03, 0.04, ..., 0.11, 0.12 Jy beam^{-1}. La taille du lobe ($2.2\times1.8''$) est représenté en bas à droite.

résolution spectrale. Le *rms* est de 9 mJy beam^{-1} à 85.5 GHz et de 7 mJy beam^{-1} à 87.3 GHz. Pourtant si les raies de CH_3CCH étaient émises dans une source de petite taille telle que le *hot corino*, nous devrions être capables de les détecter. En effet, si l'on convertit en Jy les intensités des transitions de CH_3CCH observées (en K) avec l'IRAM selon la relation suivante (uniquement valable pour le télescope de l'IRAM) dans le cas d'une source ponctuelle :

$$\frac{S}{T_A^*} = 3.906\ \frac{F_{\rm eff}}{A_{\rm eff}}\ ({\rm Jy/K}), \tag{A.1}$$

on obtient des intensités entre 0.13 et 1.08 Jy selon les transitions qui devraient être détectables. Cela signifie donc que le propyne est émis dans une région relativement étendue. La ligne de base minimale de la configuration H214 est de 82 m. La taille angulaire maximale (cf Equation 2.3) pour observer des structures est donc d'environ $5.3''$. En supposant que le propyne est bien émis dans une région chaude comme le suggèrent les diagrammes rotationnels, il pourrait être formé sur les grains puis être libéré en phase gazeuse à une température inférieure à $\sim$ 45 K ($\theta = 5.3''$). Le propyne pourrait donc avoir une température de sublimation plus faible que celle de l'eau ($\sim$ 100 K) et plus en accord avec celle du méthane ($\sim$ 25 K). On ne peut évidemment pas exclure que le propyne soit uniquement formé en phase gazeuse. Le CCH est, de manière moins surprenante, probablement émis dans une région très étendue, étant donné les faibles énergies $E_{\rm up}$ des transitions observées (4 K). Nous verrons dans la section suivante que cette hypothèse est correcte.

A.3 Cartographie des hydrocarbures avec le télescope de l'IRAM-30m

A.3.1 Présentation des cartes

Nous avons vu précédemment avec les diagrammes rotationnels que la plupart des hydrocarbures présentaient des températures d'excitation faibles, d'une dizaine de K. Pour savoir d'où vient l'émission de ces hydrocarbures (enveloppe froide et/ou nuage moléculaire), j'ai réalisé des cartes fin juin 2011 avec le télescope de 30 m de l'IRAM. Les différentes transitions observées sont indiquées en rouge en Table A.1. Des transitions "bonus" de H_2CO (150.498 GHz), HNCO (153.865 GHz), HCS^+ (87.348 GHz) et NO (150.546 GHz) ont été observées simultanément. Les coordonnées de la position centrale des cartes sont $\alpha_{2000} = 16^h\ 32^m\ 22\overset{s}{.}7$, $\delta_{2000} = -\ 24°\ 28'\ 34''$. Plusieurs cartes de CCH, c-C_3H_2 et CH_3CCH ont pu être tracées en intégrant sur les vitesses (cf Figs. A.9 à A.19). Les raies de C_4H ne sont, par contre, pas assez intenses pour une carte. Pour étudier la structure en vitesse du nuage moléculaire, les cartes des transitions les plus brillantes ont été représentées en fonction de la vitesse en Figures A.5, A.6, A.7 et A.8. Pour situer les différentes sources dans le complexe, des triangles indiquent leurs positions sur les cartes intégrées en vitesse des différentes transitions (cf Fig. A.9). La Table A.4 résume également leurs coordonnées. En plus de la proto-étoile IRAS 16293 et du cœur pré-stellaire 16293E, des positions appelées E1, E2, W1, W2 et HE2 sont associées à des pics en émission de SiO (Hirano et al. 2001) et/ou H_2CO (Castets et al. 2001) indiquant probablement des intéractions entre les flots et le nuage moléculaire. Deux positions différentes sont indiquées pour le cœur pré-stellaire : celle du pic du continuum et celle du pic de DCO^+ (Lis et al. 2002a). Les cartes de H_2CO intégrée en vitesse ainsi qu'en fonction des canaux de vitesse sont également représentées en Figures A.20 et A.21 respectivement.

Table A.4 – Coordonnées des différentes composantes du complexe d'IRAS 16293.[(1)]

Composante	α_{2000}	δ_{2000}
IRAS 16293-2422 A	$16^h\ 32^m\ 22\overset{s}{.}85$	$-24°\ 28'\ 35.5''$
IRAS 16293-2422 B	$16^h\ 32^m\ 22\overset{s}{.}6$	$-24°\ 28'\ 33''$
16293E (continuum)	$16^h\ 32^m\ 29\overset{s}{.}3$	$-24°\ 29'\ 10''$
16293E (pic DCO^+)	$16^h\ 32^m\ 28\overset{s}{.}62$	$-24°\ 29'\ 2.7''$
E1	$16^h\ 32^m\ 26\overset{s}{.}2$	$-24°\ 28'\ 33''$
E2	$16^h\ 32^m\ 29\overset{s}{.}2$	$-24°\ 27'\ 43''$
HE2	$16^h\ 32^m\ 27\overset{s}{.}7$	$-\ 24°\ 29'\ 43''$
W1	$16^h\ 32^m\ 21\overset{s}{.}1$	$-24°\ 28'\ 23''$
W2	$16^h\ 32^m\ 21\overset{s}{.}1$	$-24°\ 27'\ 33''$

(1) Les notations des différentes composantes sont celles définies dans Castets et al. (2001).

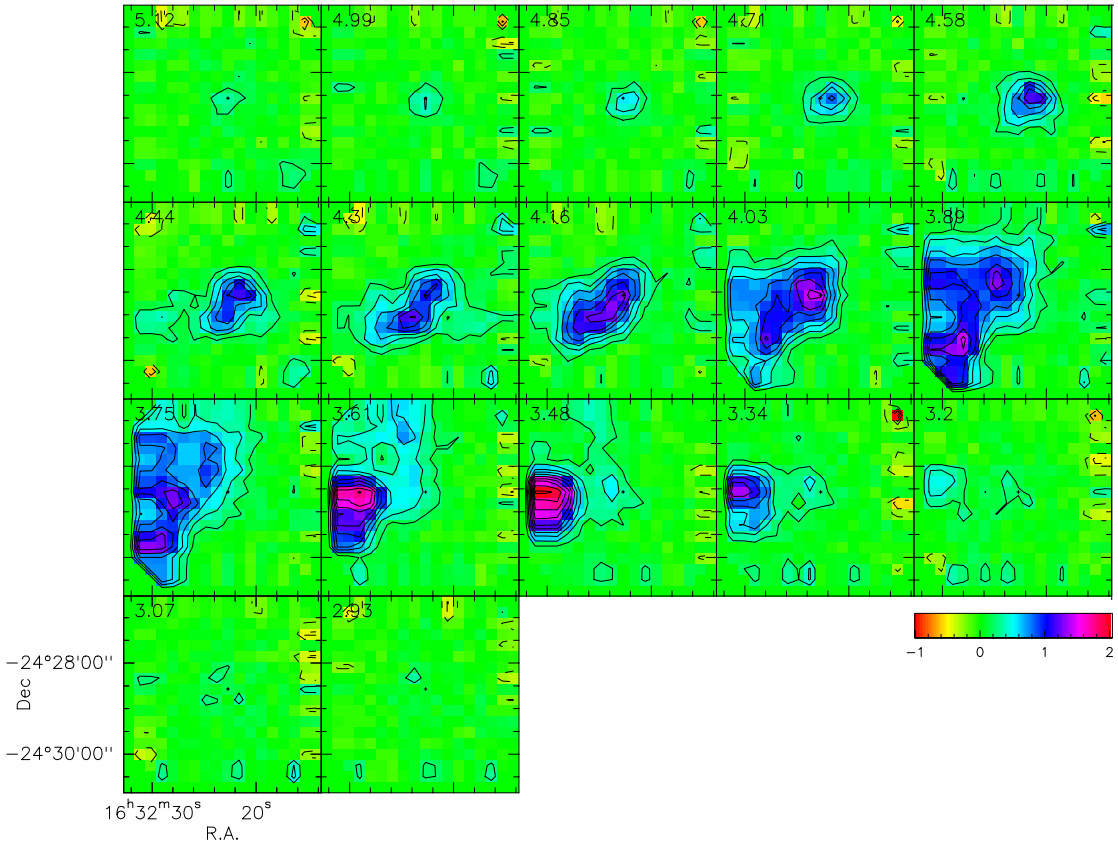


Figure A.5 – Carte de la transition de ortho–c-C_3H_2 à 85.339 GHz en fonction des canaux de vitesse obtenue avec le télescope de l'IRAM.

A.3.2 Interprétation des cartes

La molécule de c-C_3H_2 (cf Fig. A.5) montre une émission étendue et complexe avec plusieurs pics en émission à différentes vitesses. Entre 4.5 et 5.2 km s^{-1}, elle est uniquement émise par la proto-étoile IRAS 16293. En-dessous de 4.5 km s^{-1}, l'émission, encore visible à la position de la proto-étoile, s'étend comme le long d'un flot jusqu'à atteindre entre 3.7 et 3.9 km s^{-1} la position HE2 mise en évidence par Castets et al. (2001) à travers un pic en émission de formaldéhyde (H_2CO). En-dessous de 3.6 km s^{-1}, l'émission semble associée avec le cœur pré-stellaire 16293E mais pique de manière plus intense au Nord de l'objet, suggérant que l'émission entourerait plutôt le cœur dense. Le CCH (cf Figs. A.6 et A.7) présente un comportement similaire à c-C_3H_2. La proto-étoile IRAS 16293 est visible entre 2.9 et 4.7 km s^{-1}. Comme pour c-C_3H_2, la molécule de CCH montre une émission qui s'étend jusqu'à la position HE2. On voit clairement, entre 3.7 et 3.9 km s^{-1}, que l'émission encercle le cœur pré-stellaire 16293E. Entre 3.5 et 3.7 km s^{-1}, l'émission pique au Sud du cœur tandis qu'entre 3.2 et 3.5 km s^{-1}, elle pique au Nord. La carte du propyne (CH_3CCH ; cf Fig. A.8) est plus bruitée que les autres. On aperçoit néanmoins de l'émission venant de la proto-étoile entre 2.9 et 4.7 km s^{-1}, une extension de l'émission en-dessous de 4.2 km s^{-1} et une émission

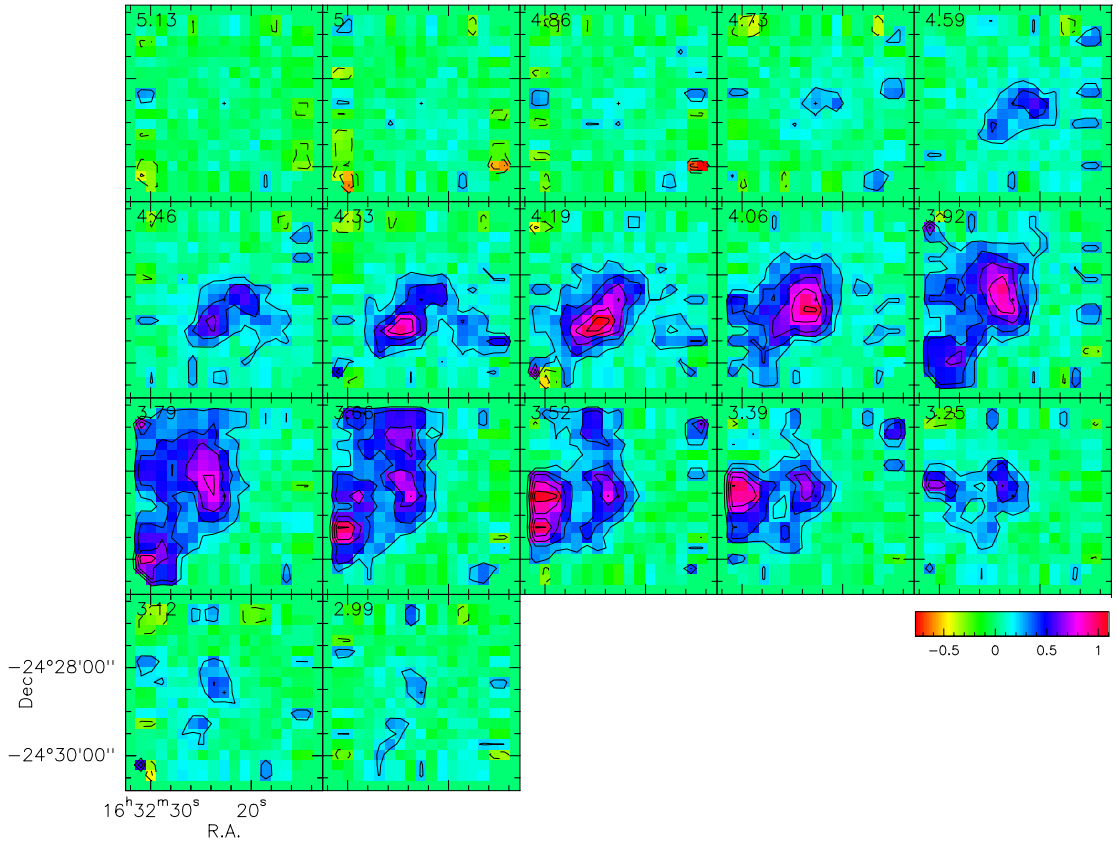


Figure A.6 – Carte de la transition de CCH à 87.402 GHz en fonction des canaux de vitesse obtenue avec le télescope de l'IRAM.

en position HE2 à 3.7 et 3.9 km s^{-1} comme pour les deux autres hydrocarbures. Le cœur pré-stellaire ne semble pas émettre en CH_3CCH si ce n'est peut-être à 3.2 km s^{-1}. L'émission, bien que bruitée, semble légérement plus piquée sur la proto-étoile que pour c-C_3H_2 et CCH. C'est d'ailleurs ce que montrent les cartes intégrées en vitesse (cf Figs. A.15, A.16, A.17, A.18 et A.19), ce qui est plutôt cohérent avec les résultats des diagrammes rotationnels.

La position HE2 observée pour la première fois en H_2CO par Castets et al. (2001) est uniquement visible à des vitesses comprises entre 0 et 3.6 km s^{-1} pour H_2CO (cf Fig. A.21). Pour les hydrocarbures, la vitesse de l'émission de cette composante est, par contre, d'environ 3.7–3.9 km s^{-1}, bien plus proche de la vitesse du nuage moléculaire. Cela pourrait s'expliquer par une compression du gaz du nuage moléculaire (riche en hydrocarbures) provoquée par l'intéraction avec un flot issu de la proto-étoile IRAS 16293. L'émission en CCH et c-C_3H_2 proche du cœur pré-stellaire semble aussi faire partie du nuage ambient et être compressée par des flots. Ce scénario est d'ailleurs en accord avec l'hypothèse de Lis et al. (2002a) à propos d'un probable rôle des jets sur la deutération du cœur pré-stellaire 16293E. Selon eux, le pic en DCO^+ serait formé par une partie de nuage moléculaire qui serait poussée puis compressée par un flot. La vitesse du choc ne serait alors pas suffisante pour détruire les

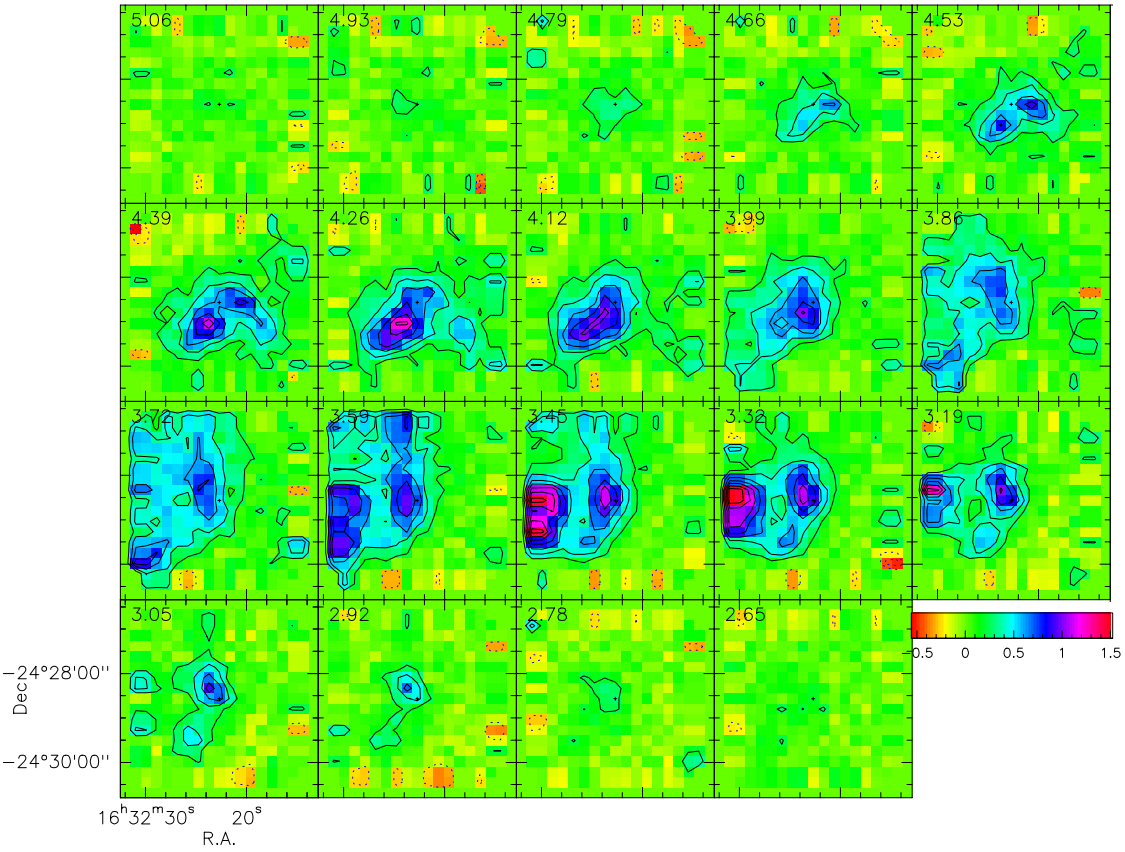


Figure A.7 – Carte de la transition de CCH à 87.317 GHz en fonction des canaux de vitesse obtenue avec le télescope de l'IRAM.

grains. Le gaz dense compressé par le choc se serait alors suffisamment refroidi pour permettre une augmentation de la deutération à cet endroit. Pour les hydrocarbures, les jets à l'origine de la composante E1 et HE2 pourraient aboutir à une compression du nuage moléculaire menant alors à une émission plus importante en CCH et c-C_3H_2, sous l'hypothèse que ces flots soient bien émis par la proto-étoile IRAS 16293.

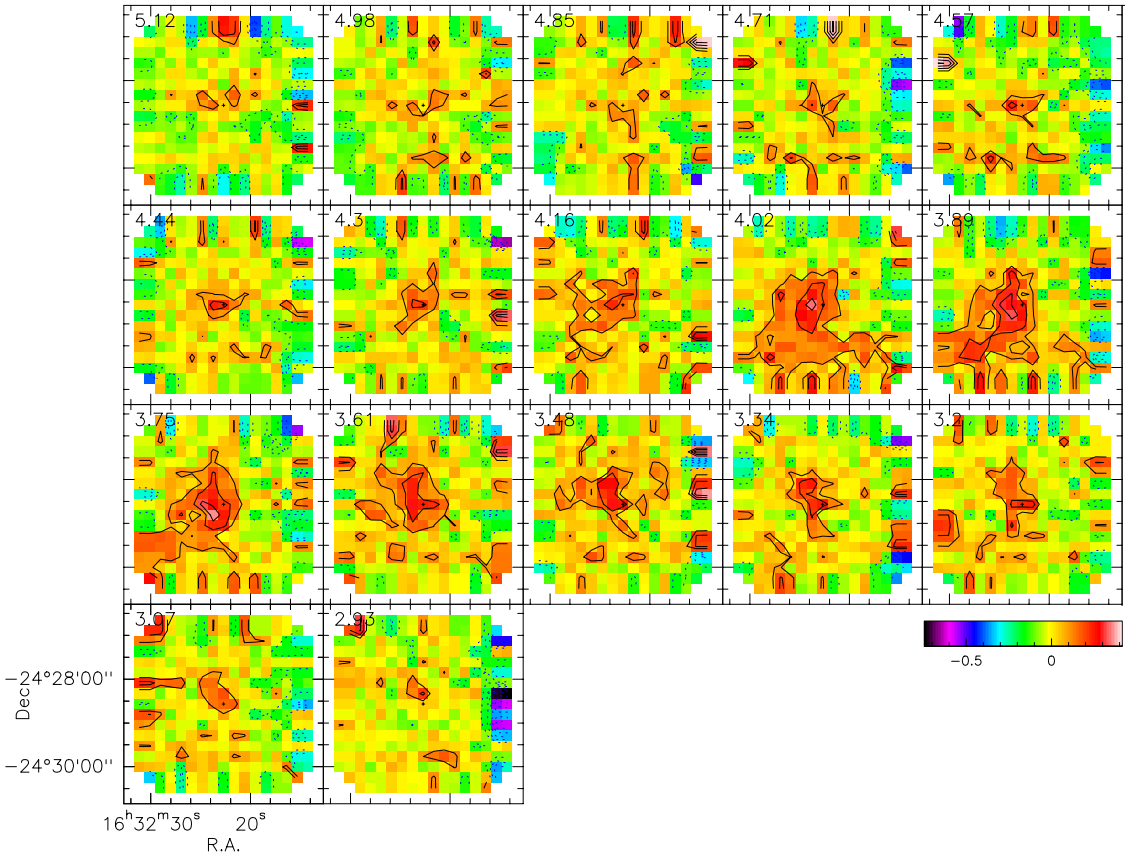


Figure A.8 – Carte de la transition de CH_3CCH à 85.457 GHz en fonction des canaux de vitesse obtenue avec le télescope de l'IRAM.

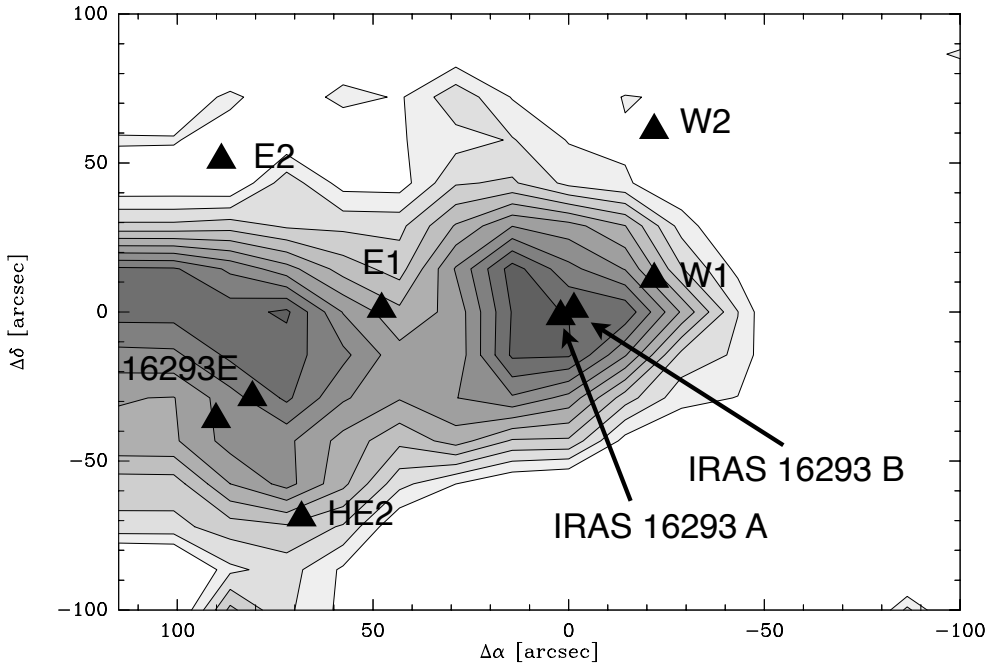


Figure A.9 – Carte intégrée en vitesse de la transition de ortho–c-C_3H_2 à 85.339 GHz obtenue avec le télescope de l'IRAM. Les contours représentent 0.3, 0.4, ... 1.2 K.km s^{-1}. Le *rms* est de 0.15 K.

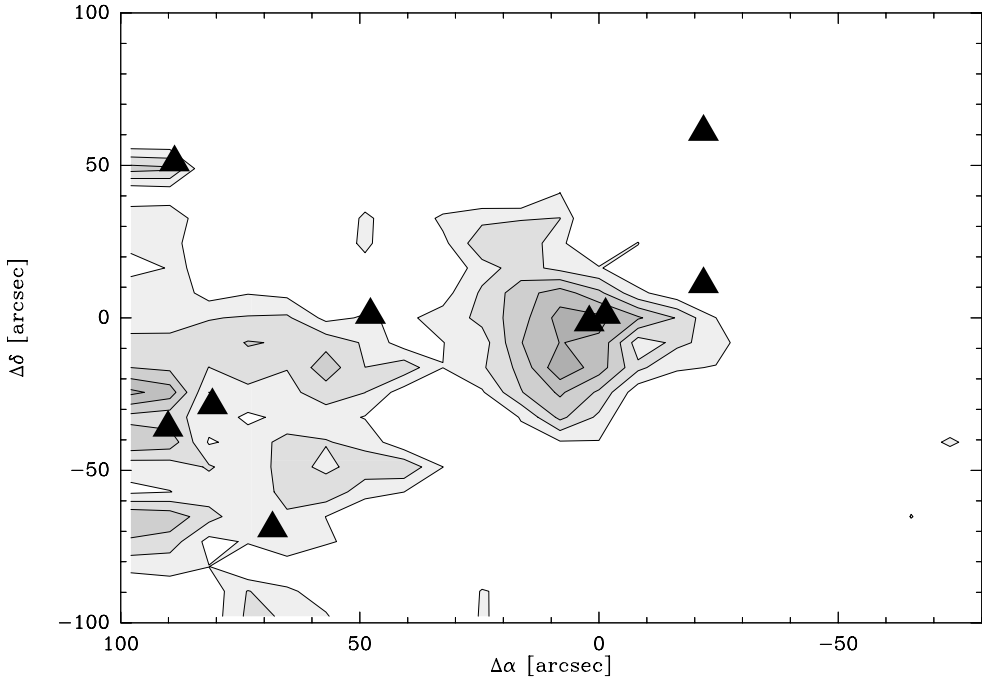


Figure A.10 – Carte intégrée en vitesse de la transition de ortho–c-C_3H_2 à 150.852 GHz obtenue avec le télescope de l'IRAM. Les contours représentent 0.5, 0.7, ... 1.3 K.km s^{-1}. Le *rms* est de 0.33 K.

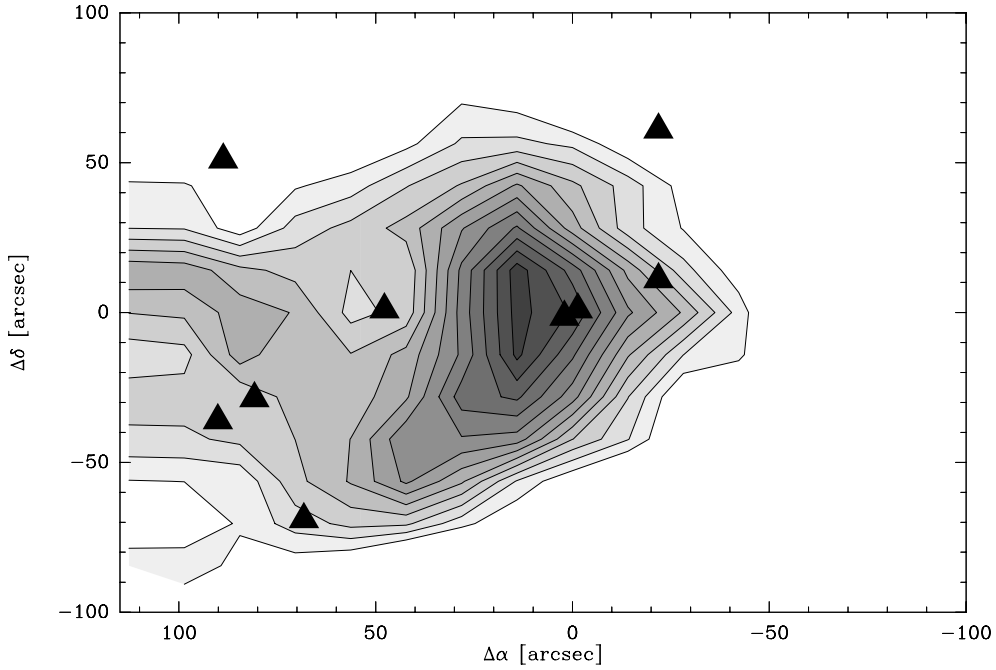


Figure A.11 – Carte intégrée en vitesse de la transition de CCH à 87.317 GHz obtenue avec le télescope de l'IRAM. Les contours représentent 0.4, 0.5, ... 1.5 K.km s^{-1}. Le *rms* est de 0.2 K.

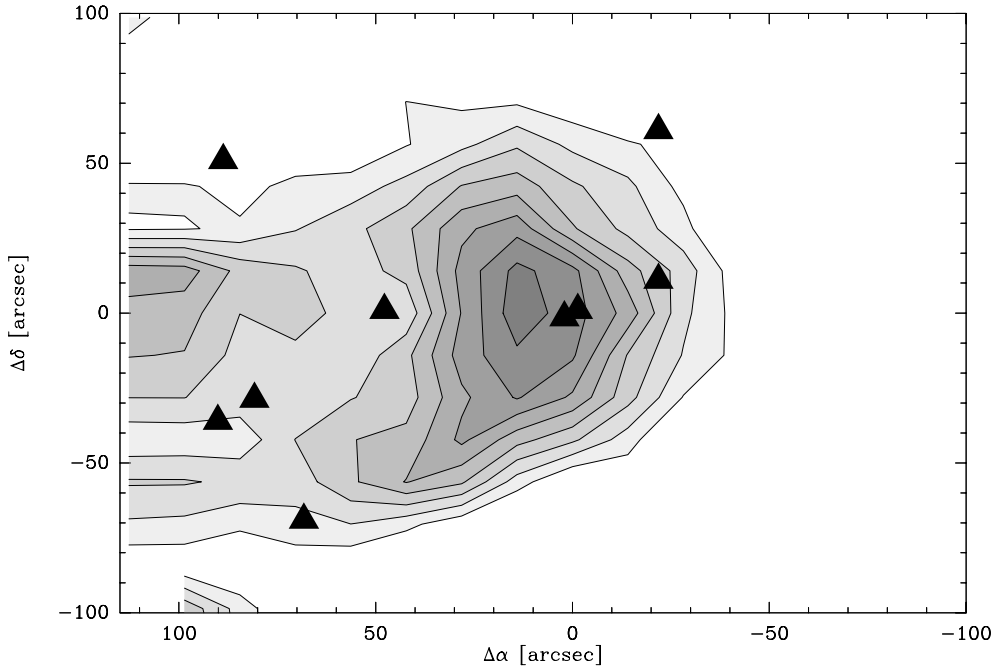


Figure A.12 – Carte intégrée en vitesse de la transition de CCH à 87.329 GHz obtenue avec le télescope de l'IRAM. Les contours représentent 0.3, 0.4, ... 1.0 K.km s^{-1}. Le *rms* est de 0.2 K.

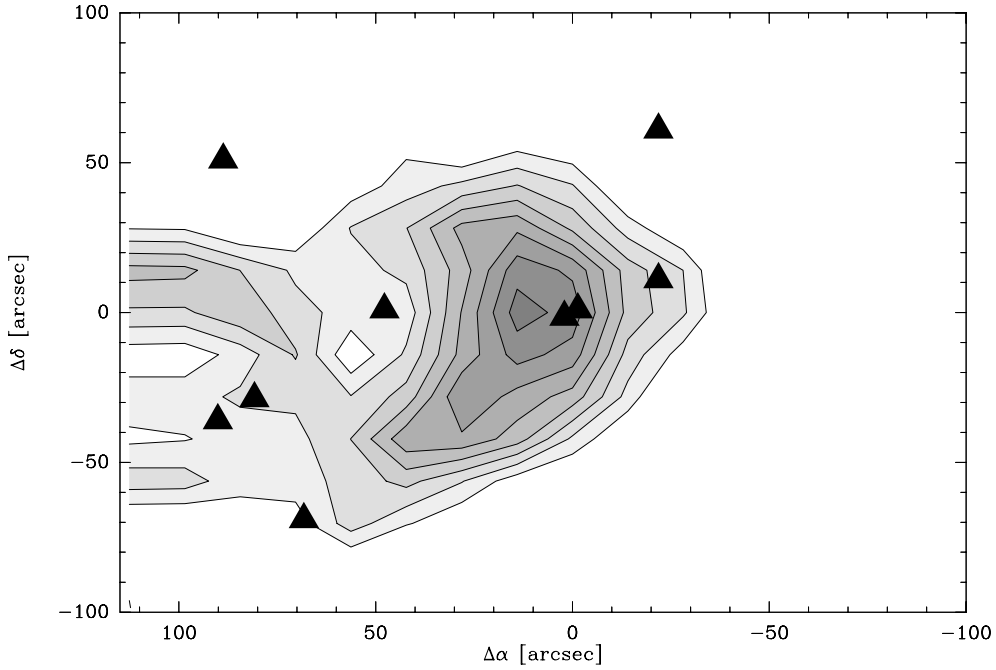


Figure A.13 – Carte intégrée en vitesse de la transition de CCH à 87.402 GHz obtenue avec le télescope de l'IRAM. Les contours représentent 0.4, 0.5, ... 1.1 K.km s^{-1}. Le *rms* est de 0.2 K.

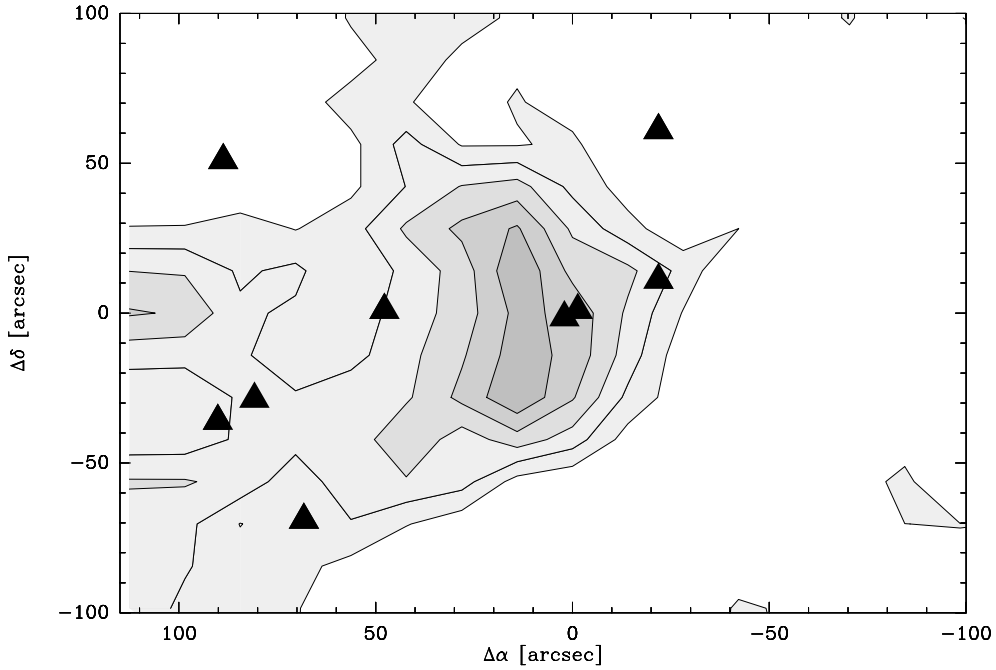


Figure A.14 – Carte intégrée en vitesse de la transition de CCH à 87.407 GHz obtenue avec le télescope de l'IRAM. Les contours représentent 0.3, 0.4, ... 0.7 K.km s^{-1}. Le *rms* est de 0.2 K.

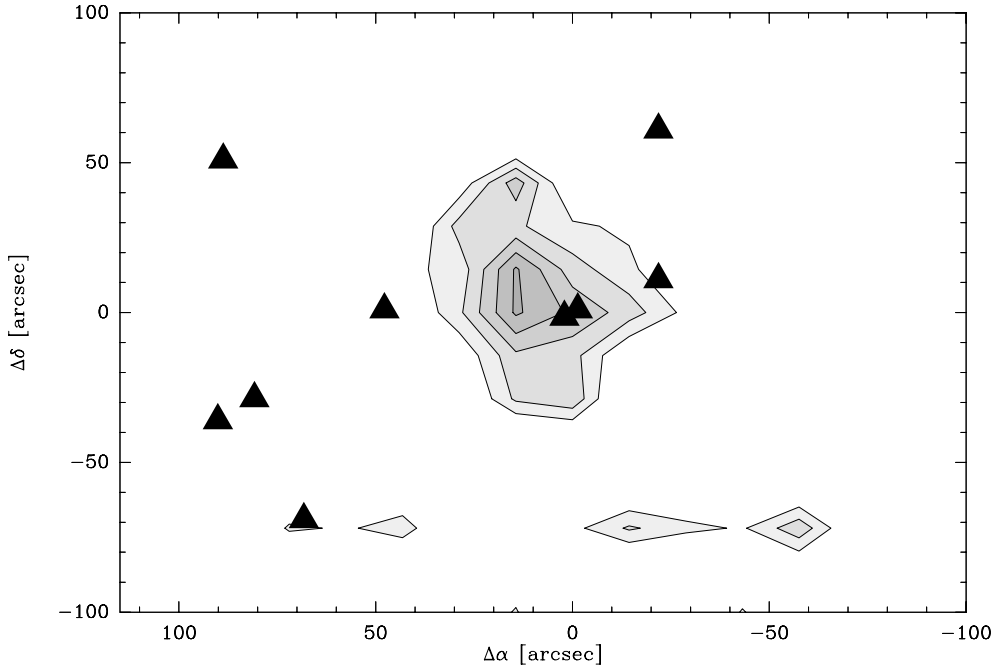


Figure A.15 – Carte intégrée en vitesse de la transition de CH_3CCH à 85.456 GHz obtenue avec le télescope de l'IRAM. Les contours représentent 0.2, 0.25, ... 0.4 K.km s^{-1}. Le *rms* est de 0.18 K.

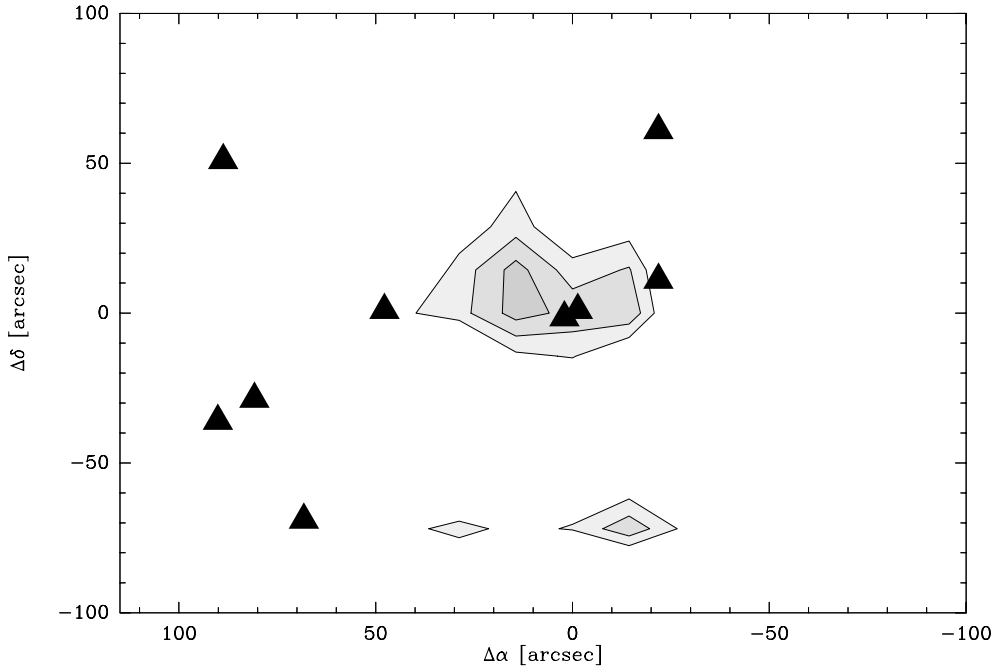


Figure A.16 – Carte intégrée en vitesse de la transition de CH_3CCH à 85.457 GHz obtenue avec le télescope de l'IRAM. Les contours représentent 0.3, 0.4 et 0.5 K.km s^{-1}. Le *rms* est de 0.18 K.

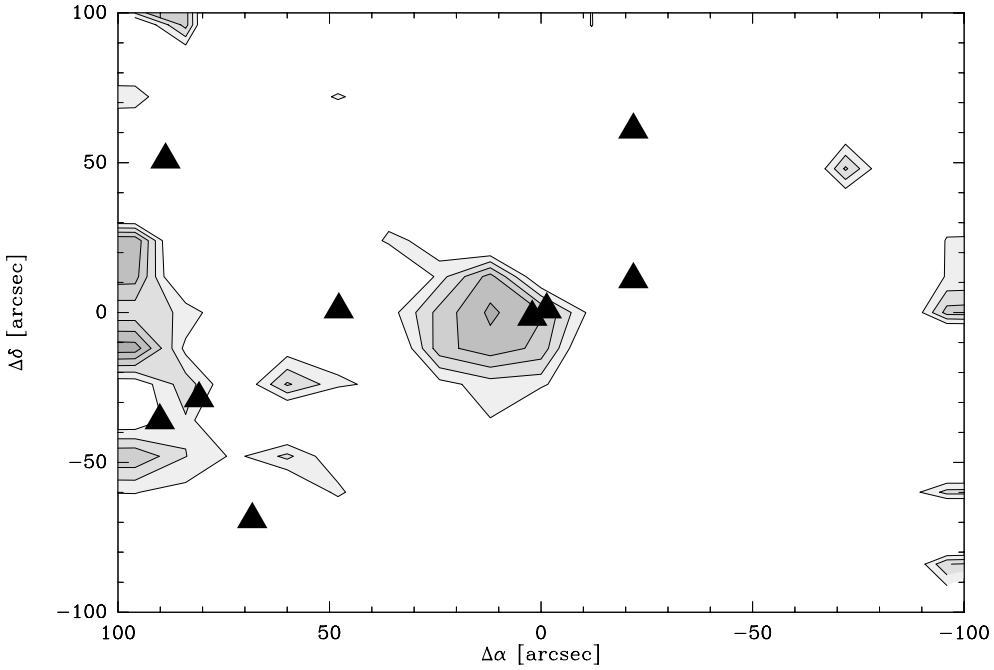


Figure A.17 – Carte intégrée en vitesse de la transition de CH_3CCH à 102.546 GHz obtenue avec le télescope de l'IRAM. Les contours représentent 0.2, 0.25, ... 0.4 K.km s^{-1}. Le *rms* est de 0.22 K.

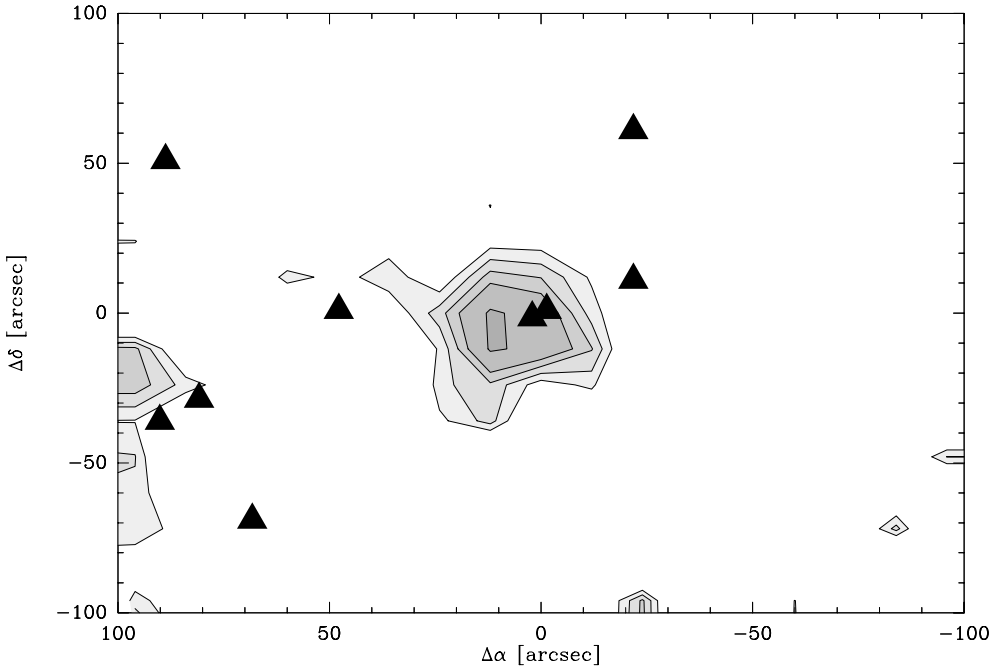


Figure A.18 – Carte intégrée en vitesse de la transition de CH_3CCH à 102.548 GHz obtenue avec le télescope de l'IRAM. Les contours représentent 0.25, 0.3, ... 0.45 K.km s^{-1}. Le *rms* est de 0.22 K.

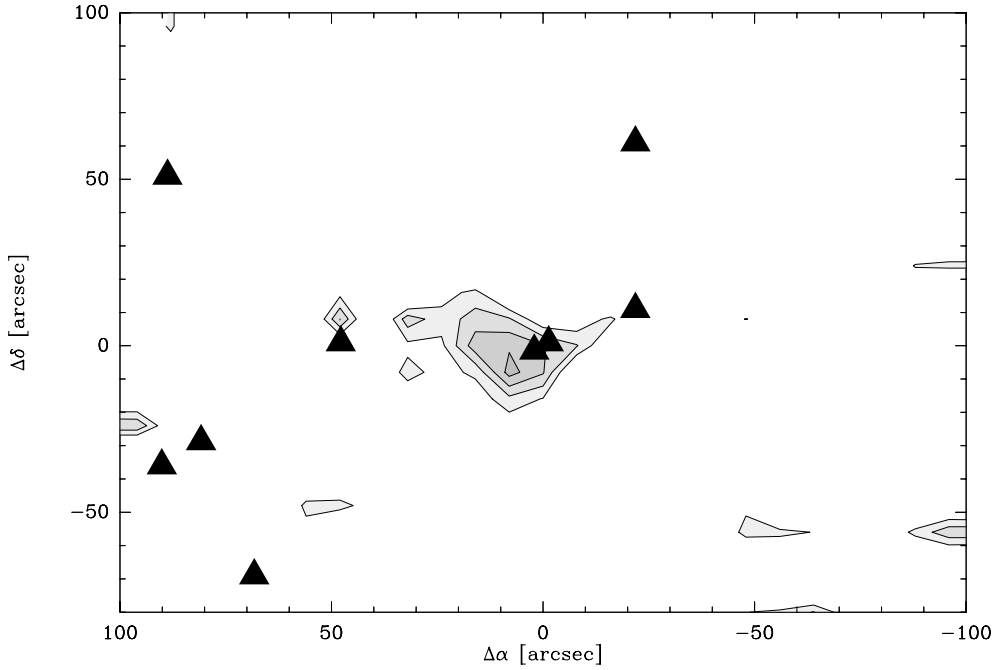


Figure A.19 – Carte intégrée en vitesse de la transition de CH_3CCH à 153.817 GHz obtenue avec le télescope de l'IRAM. Les contours représentent 0.3, 0.4, 0.5 et 0.6 K.km s^{-1}. Le *rms* est de 0.18 K.

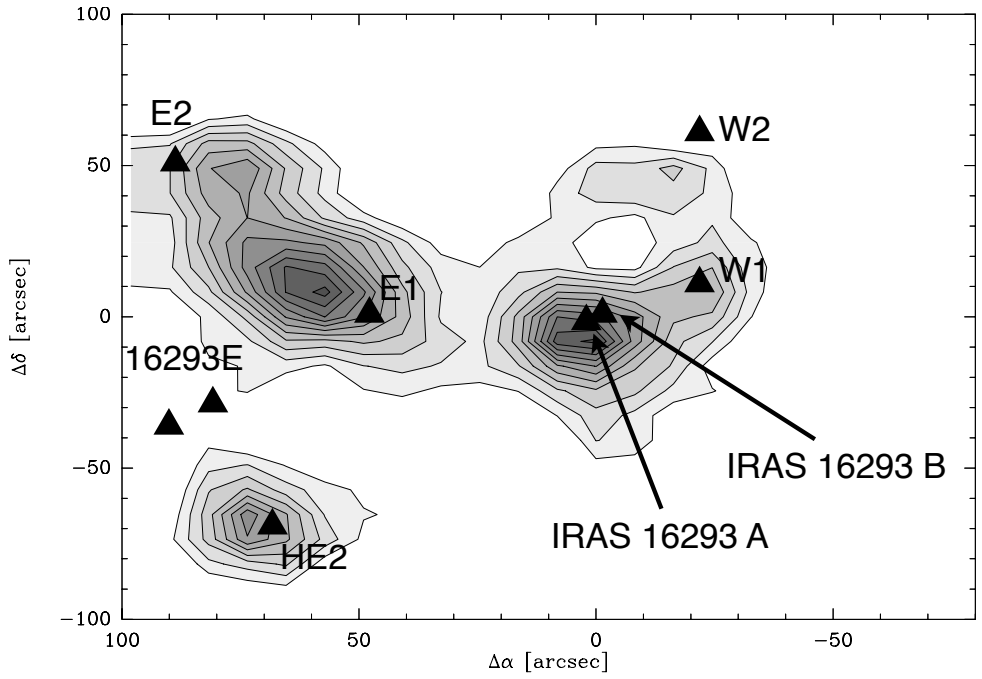


Figure A.20 – Carte intégrée en vitesse de la transition de H_2CO à 150.498 GHz obtenue avec le télescope de l'IRAM. Les contours représentent 3, 4, 5, ... 13 K.km s^{-1}. Le *rms* est de 0.4 K.

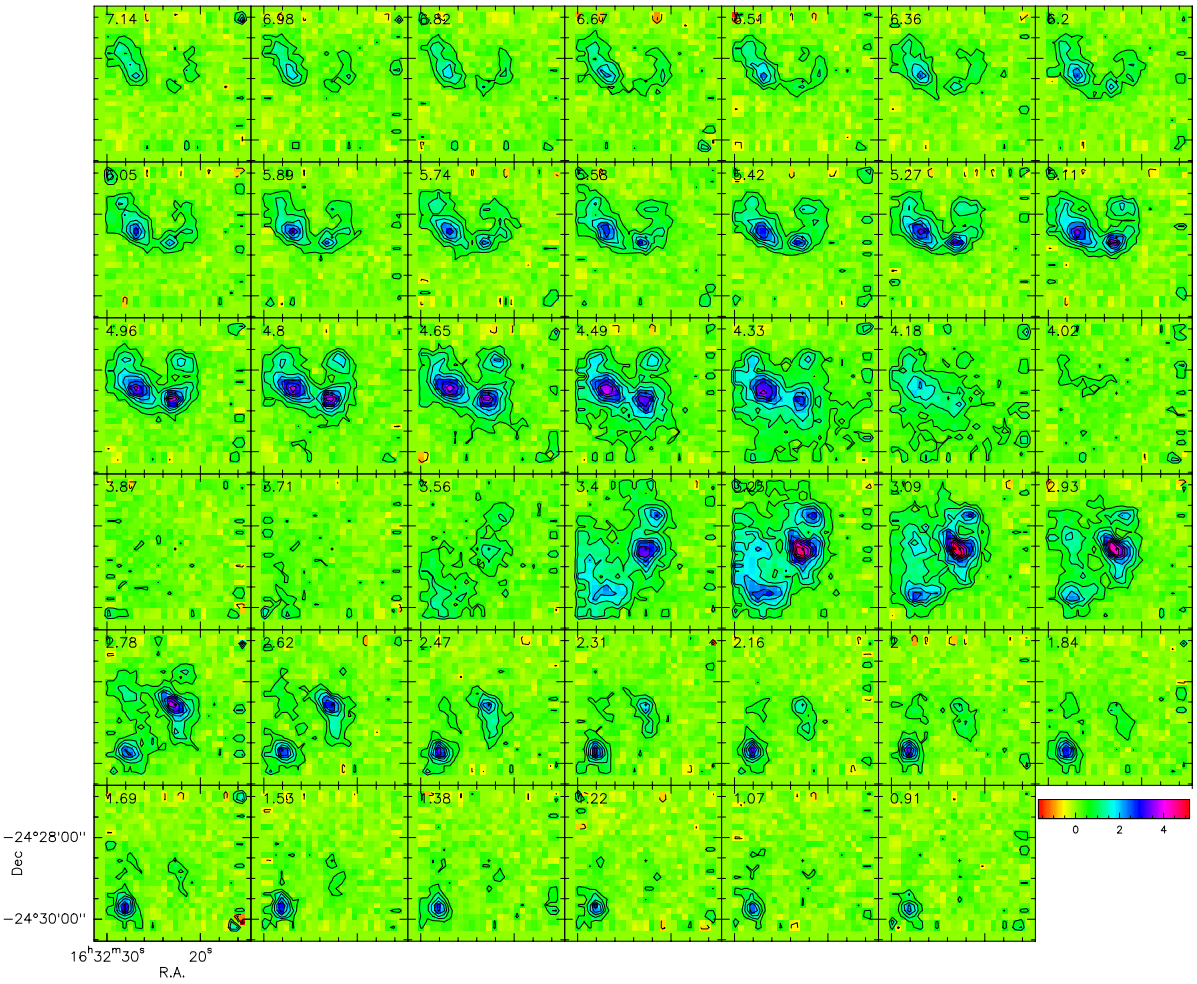


Figure A.21 – Carte de la transition de H_2CO à 150.498 GHz en fonction des canaux de vitesse obtenue avec le télescope de l'IRAM.

Publications

Publications reliées à la thèse

1. **A. Coutens**, C. Vastel, E. Caux, C. Ceccarelli, S. Bottinelli, L. Wiesenfeld, A. Faure, Y. Scribano & C. Kahane (2012), *A study of deuterated water in the low-mass protostar IRAS 16293-2422*, A&A 539, A132 (article joint en annexe)
2. H. S. P. Müller, **A. Coutens**, A. Walters, J.-U. Grabow & S. Schlemmer (2011), *Rotational spectroscopy, dipole moment and ^{14}N nuclear hyperfine structure of iso-propyl cyanide*, JMolSpec 267, 100–107
3. E. Caux, C. Kahane, A. Castets, **A. Coutens**, C. Ceccarelli et al. (2011), *TIMASSS : the IRAS 16293-2422 millimeter and sumillimeter spectral survey. I Observations, calibration and analysis of the line kinematics*, A&A 532, A23+ (article joint en annexe)
4. C. Vastel, C. Ceccarelli, E. Caux, **A. Coutens**, J. Cernicharo et al. (2010), *Ortho-to-para ratio of interstellar heavy water*, A&A 521, L16+ (article joint en annexe)

Autres publications

1. C. M. Persson, M. De Luca, B. Mookerjea, A. O. H. Olofsson, J. H. Black et al. (2012), *Nitrogen hydrides in interstellar gas. II. Analysis of Herschel/HIFI observations towards W49N and G10.6-0.4 (W31C)*, A&A 543, A145
2. M. De Luca, H. Gupta, D. Neufeld, M. Gerin, D. Teyssier et al. (2012), *Herschel/HIFI Discovery of HCl^+ in the Interstellar Medium.* ApJL 751, L37
3. D. C. Lis, J. C. Pearson, D. A. Neufeld, P. Schilke, H. S. P. Müller et al. (2010), *Herschel/HIFI discovery of interstellar chloronium (H_2Cl^+)*, A&A 521, L9+
4. D. A. Neufeld, J. R. Goicoechea, P. Sonnentrucker, J. H. Black et al. (2010) *Herschel/HIFI observations of interstellar OH^+ and H_2O^+ towards W49N : a probe of diffuse clouds with a small molecular fraction*, A&A 521, L10+
5. P. Sonnentrucker, D. A. Neufeld, T. G. Phillips, M. Gerin, D. C. Lis et al. (2010), *Detection of hydrogen fluoride absorption in diffuse molecular clouds with Herschel/HIFI : an ubiquitous tracer of molecular gas*, A&A 521, L12+
6. B. Mookerjea, T. Giesen, J. Stutzki, J. Cernicharo, J. R. Goicoechea et al. (2010), *Excitation and abundance of C_3 in star forming cores. Herschel/HIFI observations of the sight-lines to W31C and W49N*, A&A 521, L13+
7. E. Falgarone, B. Godard, J. Cernicharo, M. De Luca, M. Gerin et al. (2010), *CH^+ (1–0) and $^{13}CH^+$ (1–0) absorption lines in the direction of massive star-forming regions*, A&A 521, L15+

8. M. Gerin, M. De Luca, J. R. Goicoechea, E. Herbst, E. Falgarone et al. (2010), *Interstellar CH absorption in the diffuse interstellar medium along the sight-lines to G10.6-0.4 (W31C), W49N, and W51*, A&A 521, L16+
9. C. Ceccarelli, A. Bacmann, A. Boogert, E. Caux , C. Dominik et al. (2010), *Herschel spectral surveys of star-forming regions. Overview of the 555-636 GHz range*, A&A 521, L22+
10. D. C. Lis, T. G. Phillips, P. F. Goldsmith, D. A. Neufeld, E. Herbst et al. (2010), *Herschel/HIFI measurements of the ortho/para ratio in water towards Sagittarius B2(M) and W31C*, A&A 521, L26+
11. M. Emprechtinger, D. C. Lis, T. Bell, T. G. Phillips, P. Schilke et al. (2010), *The distribution of water in the high-mass star-forming region NGC 6334I*, A&A 521, L28+,
12. M. Kama, C. Dominik, S. Maret, F. van der Tak, E. Caux et al. (2010), *The methanol lines and hot core of OMC2-FIR4, an intermediate-mass protostar, with Herschel/HIFI*, A&A 521, L39
13. A. Bacmann, E. Caux, P. Hily-Blant, B. Parise, L. Pagani et al. (2010), *First detection of ND in the solar-mass protostar IRAS16293-2422*, A&A 521, L42+
14. M. H. D. van der Wiel, F. F. S. van der Tak, D. C. Lis, T. Bell et al. (2010), *Herschel/HIFI observations of spectrally resolved methylidyne signatures toward the high-mass star-forming core NGC 6334I*, A&A 521, L43+
15. C. M. Persson, J. H. Black, J. Cernicharo, J. R. Goicoechea, G. E. Hassel et al. (2010) *Nitrogen hydrides in interstellar gas. Herschel/HIFI observations towards G10.6-0.4 (W31C).* A&A 521, L45+
16. P. Hily-Blant, S. Maret, A. Bacmann, S. Bottinelli, B. Parise et al. (2010), *Nitrogen hydrides in the cold envelope of IRAS 16293-2422*, A&A 521, L52+
17. D. A. Neufeld, P. Sonnentrucker, T. G. Phillips, D. C. Lis, M. de Luca et al. (2010), *Strong absorption by interstellar hydrogen fluoride : Herschel/HIFI observations of the sight-line to G10.6-0.4 (W31C)*, A&A 518, L108+
18. M. Gerin, M. de Luca, J. Black, J. R. Goicoechea, E. Herbst et al. (2010), *Interstellar OH^+, H_2O^+ and H_3O^+ along the sight-line to G10.6-0.4*, A&A 518, L110+
19. V. Ossenkopf, H. S. P. Müller, D. C. Lis, P. Schilke, T. A. Bell et al. (2010), *Detection of interstellar oxidaniumyl : Abundant H_2O^+ towards the star-forming regions DR21, Sgr B2, and NGC6334*, A&A 518, L111+
20. C. Codella, B. Lefloch, C. Ceccarelli, J. Cernicharo, E. Caux et al. (2010), *The CHESS spectral survey of star forming regions : Peering into the protostellar shock L1157-B1. I. Shock chemical complexity*, A&A 518, L112+
21. B. Lefloch, S. Cabrit, C. Codella, G. Melnick, J. Cernicharo et al. (2010), *The CHESS spectral survey of star forming regions : Peering into the protostellar shock L1157-B1. II. Shock dynamics*, A&A 518, L113+

A&A 539, A132 (2012)
DOI: 10.1051/0004-6361/201117627
© ESO 2012

Astronomy & Astrophysics

A study of deuterated water in the low-mass protostar IRAS 16293-2422⋆

A. Coutens[1,2], C. Vastel[1,2], E. Caux[1,2], C. Ceccarelli[3], S. Bottinelli[1,2], L. Wiesenfeld[3], A. Faure[3], Y. Scribano[4], and C. Kahane[3]

[1] Université de Toulouse, UPS-OMP, IRAP, Toulouse, France
e-mail: audrey.coutens@irap.omp.eu
[2] CNRS, IRAP, 9 Av. Colonel Roche, BP 44346, 31028 Toulouse Cedex 4, France
[3] Institut de Planétologie et d'Astrophysique de Grenoble (IPAG), UMR 5274, UJF-Grenoble 1/CNRS, 38041 Grenoble, France
[4] Laboratoire Interdisciplinaire Carnot de Bourgogne, UMR 5209-CNRS, 9 Av. Alain Savary, BP 47870, 21078 Dijon Cedex, France

Received 4 July 2011 / Accepted 6 January 2012

ABSTRACT

Context. Water is a primordial species in the emergence of life, and comets may have brought a large fraction to Earth to form the oceans. To understand the evolution of water from the first stages of star formation to the formation of planets and comets, the HDO/H_2O ratio is a powerful diagnostic.

Aims. Our aim is to determine precisely the abundance distribution of HDO towards the low-mass protostar IRAS 16293-2422 and learn more about the water formation mechanisms by determining the HDO/H_2O abundance ratio.

Methods. A spectral survey of the source IRAS 16293-2422 was carried out in the framework of the CHESS (Chemical *Herschel* Surveys of Star forming regions) *Herschel* key program with the HIFI (Heterodyne Instrument for the Far-Infrared) instrument, allowing detection of numerous HDO lines. Other transitions have been observed previously with ground-based telescopes. The spherical Monte Carlo radiative transfer code RATRAN was used to reproduce the observed line profiles of HDO by assuming an abundance jump. To determine the H_2O abundance throughout the envelope, a similar study was made of the $H_2^{18}O$ observed lines, as the H_2O main isotope lines are contaminated by the outflows.

Results. It is the first time that so many HDO and $H_2^{18}O$ transitions have been detected towards the same source with high spectral resolution. We derive an inner HDO abundance ($T \geq 100$ K) of about 1.7×10^{-7} and an outer HDO abundance ($T < 100$ K) of about 8×10^{-11}. To reproduce the HDO absorption lines observed at 894 and 465 GHz, it is necessary to add an absorbing layer in front of the envelope. It may correspond to a water-rich layer created by the photodesorption of the ices at the edges of the molecular cloud. At a 3σ uncertainty, the HDO/H_2O ratio is 1.4–5.8% in the hot corino, whereas it is 0.2–2.2% in the outer envelope. It is estimated at ∼4.8% in the added absorbing layer.

Conclusions. Although it is clearly higher than the cosmic D/H abundance, the HDO/H_2O ratio remains lower than the D/H ratio derived for other deuterated molecules observed in the same source. The similarity of the ratios derived in the hot corino and in the added absorbing layer suggests that water formed before the gravitational collapse of the protostar, contrary to formaldehyde and methanol, which formed later once the CO molecules had depleted on the grains.

Key words. astrochemistry – ISM: individual objects: IRAS 16293-2422 – ISM: molecules – ISM: abundances

1. Introduction

Water is one of the most important molecules in the solar system and beyond, but an unresolved question remains of how water has evolved from cold prestellar cores to protoplanetary disks and consequently oceans for the Earth's specific, but probably not isolated, case. In addition to being a primordial ingredient in the emergence of life, this molecule plays an essential role in the process of star formation through the cooling of warm gas. It also controls the chemistry for many species, either in the gas phase or on the grain surfaces. In cold dense cores, the gas-phase water abundance is low, less than about 10^{-8} (see for example Bergin & Snell 2002; Caselli et al. 2010), while it can reach much higher values in the outflowing gas of the low-mass protostars environments (∼10^{-5}–10^{-4}; Liseau et al. 1996; Lefloch et al. 2010; Kristensen et al. 2010) before the solar-type protoplanetary systems are formed.

In standard gas-phase chemistry, H_2O forms through ion-molecule reactions that leads to H_3O^+, which can dissociatively recombine to form H_2O (e.g., Bates 1986; Rodgers & Charnley 2002), or through the highly endothermic reaction O + H_2 → OH + H, followed by the reaction of OH with H_2 (Wagner & Graff 1987; Hollenbach & McKee 1989; Atkinson et al. 2004). The former process is typical of diffuse cloud conditions, whereas the latter only works in regions with high temperatures, such as shocks or hot cores. It has been realized for around 30 years that, in cold and dense regions, H_2O is formed much more efficiently on the grains through a series of reactions involving O and H accreted from the gas (e.g., Tielens & Hagen 1982; Jones & Williams 1984; Mokrane et al. 2009; Dulieu et al. 2010; Cuppen et al. 2010). Near protostars, the grain temperature rises above ∼100 K, leading to a fast H_2O ice desorption (Ceccarelli et al. 1996; Fraser et al. 2001) that increases the H_2O gas-phase abundance in the inner part of the envelope called hot core/corino for a high-mass/low-mass protostar (Melnick et al. 2000; Ceccarelli et al. 1999, 2000a).

Deuterated water is likely to form with a similar chemistry to that of water. Theoretically, the HDO/H_2O ratio should be high if

⋆ Based on *Herschel*/HIFI observations. *Herschel* is an ESA space observatory with science instruments provided by European-led Principal Investigator consortia and with important participation from NASA.

water has been formed at low temperature, i.e. on cold grain surfaces, and low if it is a product of the photodissociation region or shock chemistry. Indeed, this is caused by the zero-point energy difference in the vibrational potential (Solomon & Woolf 1973). As the deuterated species have higher reduced mass than their undeuterated counterparts, the zero-point energy of the deuterated species is lower (the difference in energy between H_2O and HDO is 886 K; Hewitt et al. 2005). Consequently, the enrichment of deuterated water with respect to its main isotopologue takes place at low temperature. The deuteration fraction observed in high-mass hot cores is typically HDO/$H_2O \leq 10^{-3}$ (Jacq et al. 1990; Gensheimer et al. 1996; Helmich et al. 1996), although higher values ($\sim 10^{-2}$) have recently been found for Orion (Persson et al. 2007; Bergin et al. 2010). This ratio has also been estimated in the inner envelope of low-mass protostars such as IRAS 16293-2422 (Parise et al. 2005) at about 3%, NGC 1333-IRAS4B (Jørgensen & van Dishoeck 2010) with an upper limit of 0.06%, and NGC 1333-IRAS2A (Liu et al. 2011) with a lower limit of 1%. Deuterated water has also been sought in ices towards several protostars, and has allowed Dartois et al. (2003) and Parise et al. (2003) to obtain upper limits of solid HDO/H_2O from 0.5% to 2%.

It is important to know the HDO/H_2O ratio throughout the protostar envelope in order to determine how this ratio is preserved after the dispersion of the envelope, when a protoplanetary disk is left over, from which asteroids, comets, and planets may form. Obviously, this ratio is needed in order to evaluate the contribution of comets for transferring water in Earth's oceans (Morbidelli et al. 2000; Raymond et al. 2004; Villanueva et al. 2009), directly associated with the emergence of life. It seems therefore crucial to determine how similar the observed HDO/H_2O ratios in protostellar environments are to those observed in comets and in ocean water on Earth (~0.02%, e.g., Bockelée-Morvan et al. 1998; Lecuyer et al. 1998). Recently, Hartogh et al. (2011) have reported a D/H ratio in the Jupiter family comet 103P/Hartley2, originating in the Kuiper belt, of 0.016, suggesting that some of Earth's water comes from the same comet family.

IRAS 16293-2422 (hereafter IRAS 16293) is a solar-type protostar situated in the LDN 1689N cloud in Ophiuchus at a distance of 120 pc (Knude & Hog 1998; Loinard et al. 2008). It is constituted of two cores IRAS 16293A and IRAS 16293B separated by ~5″, and the source IRAS 16293A itself could be a binary system (Wootten 1989). Several outflows have also been detected in this source (Castets et al. 2001; Stark et al. 2004; Chandler et al. 2005; Yeh et al. 2008). This Class 0 protostar is the first source where a hot corino has been discovered (Ceccarelli et al. 2000b; Cazaux et al. 2003; Bottinelli et al. 2004). It is also a well-studied case thanks to its high deuterium fractionation. For example, the abundance of doubly deuterated formaldehyde has been estimated between 3 and 16% of the main isotopologue abundance (Ceccarelli et al. 1998, 2001). Methanol also shows a high deuterium fractionation: about 30 ± 20% for CH_2DOH, 6 ± 5% for CHD_2OH, and ~1.4% for CD_3OH (Parise et al. 2004). More recently, Demyk et al. (2010) have determined a methyl formate deuterium fractionation of ~15%, and Bacmann et al. (2010) have concluded that there is a ND/NH ratio between 30% and 100%. Singly deuterated water in IRAS 16293 has been studied with ground-based telescopes by Stark et al. (2004) and Parise et al. (2005). The former find a constant abundance of 3×10^{-10} throughout the envelope with the JCMT observation of the HDO $1_{0,1}-0_{0,0}$ fundamental line at 465 GHz alone, whereas the latter obtain an inner abundance (where $T \geq 100$ K) $X_{\rm in} = 1 \times 10^{-7}$ and an outer abundance $X_{\rm out} \leq 1 \times 10^{-9}$ using four transitions observed with the IRAM[1]-30 m telescope, as well as a JCMT[2] observation at 465 GHz. Using the water abundances determined from ISO/LWS[3] observations, which suffer from both a high beam-dilution and very low spectral resolution (Ceccarelli et al. 2000a), Parise et al. (2005) estimated a deuteration ratio HDO/H_2O of about 3% in the hot corino and lower than 0.2% in the outer envelope. Thanks to the spectral survey carried out with *Herschel*/HIFI towards IRAS 16293 in the framework of the CHESS key program (Ceccarelli et al. 2010), numerous HDO and $H_2^{18}O$ transitions have been observed at high spectral resolution, allowing an accurate determination of the HDO/H_2O ratio in this source. Heavy water (D_2O) has also been detected in IRAS 16293 with the $1_{1,1}-0_{0,0}$ fundamental ortho transition at 607 GHz with *Herschel*/HIFI (Vastel et al. 2010) and the $1_{1,0}-1_{0,1}$ fundamental para transition at 317 GHz with JCMT (Butner et al. 2007). From both transitions, Vastel et al. (2010) estimated a D_2O abundance of about 2×10^{-11} in the colder envelope.

The main goal of this paper is to determine the abundance of HDO throughout the protostar envelope, using new HDO collisional coefficients with H_2 computed by Faure et al. (2012) and Wiesenfeld et al. (2011), and combining the *Herschel*/HIFI, JCMT and IRAM data in this source. In Sect. 2, we present the observations and in Sect. 3, the modeling of the HDO and $H_2^{18}O$ emission distribution in the source using the radiative transfer code RATRAN (Hogerheijde & van der Tak 2000). In Sect. 4, we discuss the derived water deuterium fractionation, and conclude in Sect. 5.

2. Observations

In total, thirteen HDO transitions have been detected towards the solar-type protostar IRAS 16293, nine with the *Herschel* HIFI instrument, three with the IRAM-30 m, and one with the JCMT. Three other transitions observed with HIFI, although not detected, have been used to derive upper limits. In addition, fifteen transitions of $H_2^{18}O$ have been observed with HIFI. The ortho-$H_2^{18}O$ $1_{1,0}-1_{0,1}$ fundamental line is clearly detected, four other transitions are tentatively detected, and ten others were not detected but their upper limits give constraints on the water abundance. Numerous $H_2^{16}O$ lines have been detected but not used since contaminated by the outflows. The ortho-$H_2^{17}O$ $1_{1,0}-1_{0,1}$ fundamental line has also been detected.

2.1. HIFI data

In the framework of the guaranteed time key program CHESS (Ceccarelli et al. 2010), we observed the low-mass protostar IRAS 16293 with the HIFI instrument (de Graauw et al. 2010) onboard the *Herschel* Space Observatory (Pilbratt et al. 2010). A full spectral coverage was performed in the frequency ranges [480–1142 GHz] (HIFI bands 1 to 5), [1481–1510 GHz] (HIFI band 6a), and [1573–1798 GHz] (HIFI bands 6b and 7a). The observations were obtained in March 2010 and February 2011, using the HIFI Spectral Scan Double Beam Switch (DBS) fast-chop mode with optimization of the continuum. Twelve HDO lines and fifteen $H_2^{18}O$ lines have been observed in these bands. Table 1 lists, for all transitions, the observed parameters. The HIFI Wide Band Spectrometer (WBS) was used, providing a spectral resolution of 1.1 MHz (0.69 km s^{-1} at 490 GHz

[1] Institut de RadioAstronomie Millimétrique.
[2] *James Clerk Maxwell* Telescope.
[3] Infrared Space Observatory/Long Wavelength Spectrometer.

and 0.18 km s^{-1} at 1800 GHz) over an instantaneous bandwidth of 4 × 1 GHz. The targeted coordinates were α_{2000} = 16^{h}32^{m}22^s.75, δ_{2000} = −24°28′34.2″, a position at equal distance of IRAS 16293 A and B, to measure the emission of both components. The DBS reference positions were situated approximately 3′ east and west of the source. The forward efficiency is about 0.96 at all frequencies. The main beam efficiencies used are shown in Table 1 and are the recommended values from Roelfsema et al. (2012).

The data were processed using the standard HIFI pipeline up to frequency and amplitude calibrations (level 2) with the ESA-supported package HIPE 5.1 (Ott 2010) for all the bands except band 3a, processed with the package HIPE 5.2. In the selected observing mode, all lines were observed at least four times (if they are on a receiver band edge), but generally eight times (four in LSB and four in USB) for each polarization. To produce the final spectra, all observations were exported to the GILDAS/CLASS[4] software. Using this package, the H and V polarizations at the line frequencies were averaged, weighting them by the observed noise for each spectra. We verified, for all spectra, that no emission from other species was present in the image band. HIFI operates as a double sideband (DSB) receiver, and the gains for the upper and lower sidebands are not necessarily equal. From the in-orbit performances of the instrument (Roelfsema et al. 2012), a sideband ratio of unity is assumed for the HDO transition seen in absorption against the continuum (band 3b). The observed continuum is therefore divided by two to obtain the SSB (single sideband) continuum. The relative calibration budget error of the HIFI instrument is presented in Table 7 of Roelfsema et al. (2012). Considering all the upper limits and estimated errors, we assumed an overall calibration uncertainty of 15% for each line.

2.2. IRAM data

The IRAS 16293 Millimeter And Submillimeter Spectral Survey (TIMASSS; Caux et al. 2011) was performed between 2004 and 2007 at the IRAM-30 m telescope in the frequency range 80–280 GHz and at the JCMT-15 m telescope in the frequency range 328–368 GHz. The observations were centered on the IRAS 16293 B source at α_{2000} = 16^{h}32^{m}22^s.6, δ_{2000} = −24°28′33″. In this survey, four HDO lines were detected, but only three of them (80.578, 225.897, and 241.561 GHz) have been used in this paper, as the fourth transition at 266.161 GHz lies in a part of the survey where the calibration uncertainty is very high (Caux et al. 2011). The spectral resolution is 0.31 MHz (∼1.2 km s^{-1}) at 81 GHz and 1 MHz (∼1.3 km s^{-1}) at 226 GHz and 242 GHz.

2.3. JCMT data

The HDO $1_{0,1}$−$0_{0,0}$ fundamental transition at 464.924 GHz was previously observed by Stark et al. (2004) on the IRAS 16293 A source (α_{2000} = 16^{h}32^{m}22^s.85, δ_{2000} = −24°28′35.5″) and by Parise et al. (2005) on the IRAS 16293 B source. The JCMT beam at this frequency is about 11″. Despite the different pointings, the profiles and the intensities of the line obtained are similar. This line shows both a wide emission and a narrow deep absorption (see Fig. 3). The observations are not optimized for an accurate continuum determination. However, the continuum level is a crucial parameter in the following modeling. We see thereafter that we can estimate it at about 1 K thanks to the modeling and the dust emissivity model we chose. It consequently means that the narrow self-absorption completely absorbs the continuum.

[4] http://www.iram.fr/IRAMFR/GILDAS/

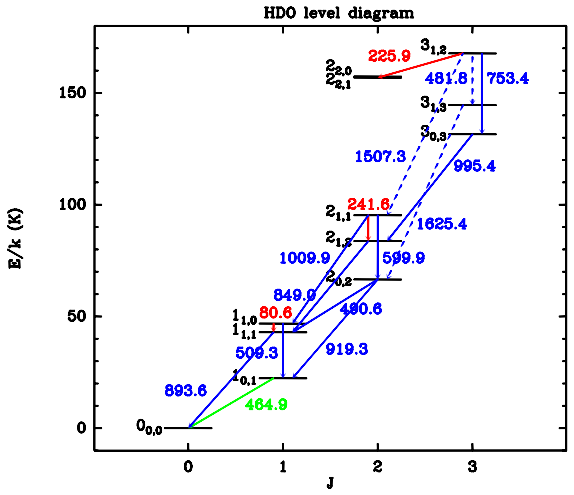


Fig. 1. Energy level diagram of the HDO lines. In red, IRAM-30 m observations; in green, JCMT observation; in blue, HIFI observations. The solid arrows show the detected transitions and the dashed arrows the undetected transitions. The frequencies are written in GHz.

The antenna temperatures of the observations were converted to the T_{mb} scale, using the values of the main beam (B_{eff}) and forward efficiencies (F_{eff}) given in Table 1 with the usual relation:

$$T_{mb} = T_A^* \times \frac{F_{eff}}{B_{eff}}. \quad (1)$$

Table 1 and the energy level diagram in Fig. 1 summarize the HDO, $H_2^{18}O$ and $H_2^{17}O$ transitions observed towards IRAS 16293 with their flux or upper limit. The 3σ upper limits on the integrated line intensity are derived following the relation

$$3\sigma\ (\mathrm{K\,km\,s^{-1}}) = 3 \times \mathrm{rms} \times \sqrt{2 \times \mathrm{d}v \times FWHM} \quad (2)$$

with rms (root mean square) in K, dv, the channel width, in km s^{-1} and FWHM (full width at half maximum) in km s^{-1}. We assume $FWHM$ = 5 km s^{-1}, which is the average emission linewidth. The FWHM given in Table 1 was determined with the CASSIS[5] software by fitting the detected lines with a Gaussian.

Using the available spectroscopic databases JPL (Pickett et al. 1998) and CDMS (Müller et al. 2001, 2005), we carefully checked that none of our lines are contaminated by other species.

3. Modeling and results

3.1. Modeling

The spherical Monte Carlo 1D radiative transfer code RATRAN (Hogerheijde & van der Tak 2000), which takes radiative pumping by continuum emission from dust into account, has been employed to compute the intensity of the molecular lines and the dust continuum. An input model describing the molecular H_2 density, gas temperature, and velocity field profiles is required, in order to define the spherical region into many radial cells. The code applies a Monte Carlo method to iteratively converge on the mean radiation field, J_ν. Level populations of HDO,

[5] CASSIS (http://cassis.cesr.fr) has been developed by IRAP-UPS/CNRS.

Table 1. Parameters for the observed HDO, $H_2^{18}O$, $H_2^{17}O$, and $HD^{18}O$ lines[1] .

Species	Frequency (GHz)	$J_{Ka,Kc}$	E_{up}/k (K)	A_{ij} (s^{-1})	Telescope	Beam size (″)	F_{eff}	B_{eff}	rms[2] (mK)	$\int T_{mb}dv$ (K km s^{-1})	*FWHM* (km s^{-1})	Ref.[3]
HDO	481.7795	$3_{1,2}-3_{1,3}$	168	4.74×10^{-5}	HIFI 1a	44.0	0.96	0.76	15	≤0.12		a
HDO	490.5966	$2_{0,2}-1_{1,1}$	66	5.25×10^{-4}	HIFI 1a	43.9	0.96	0.76	9	0.60	4.9	a
HDO	509.2924	$1_{1,0}-1_{0,1}$	47	2.32×10^{-3}	HIFI 1a	42.3	0.96	0.76	9	1.08	5.8	a
HDO	599.9267	$2_{1,1}-2_{0,2}$	95	3.45×10^{-3}	HIFI 1b	35.9	0.96	0.75	9	0.83	4.9	a
HDO	753.4112	$3_{1,2}-3_{0,3}$	168	5.90×10^{-3}	HIFI 2b	28.6	0.96	0.75	22	0.27	4.3	a
HDO	848.9618	$2_{1,2}-1_{1,1}$	84	9.27×10^{-4}	HIFI 3a	25.4	0.96	0.75	20	0.54	5.3	a
HDO	893.6387	$1_{1,1}-0_{0,0}$	43	8.35×10^{-3}	HIFI 3b	24.1	0.96	0.74	18	0.40	5.2	a
HDO	919.3109	$2_{0,2}-1_{0,1}$	66	1.56×10^{-3}	HIFI 3b	23.4	0.96	0.74	25	0.93	5.8	a
HDO	995.4115	$3_{0,3}-2_{1,2}$	131	7.04×10^{-3}	HIFI 4a	21.7	0.96	0.74	32	1.10	7.0	a
HDO	1009.9447	$2_{1,1}-1_{1,0}$	95	1.56×10^{-3}	HIFI 4a	21.0	0.96	0.74	29	0.38	6.5	a
HDO	1507.2610	$3_{1,2}-2_{1,1}$	168	6.58×10^{-3}	HIFI 6a	14.1	0.96	0.72	257	≤2.04		a
HDO	1625.4081	$3_{1,3}-2_{0,2}$	144	4.49×10^{-2}	HIFI 6b	13.0	0.96	0.71	238	≤1.89		a
HDO	80.5783	$1_{1,0}-1_{1,1}$	47	1.32×10^{-6}	IRAM-30 m	31.2	0.95	0.78	14	0.54	6.0	b,d
HDO	225.8967	$3_{1,2}-2_{2,1}$	168	1.32×10^{-5}	IRAM-30 m	11.1	0.91	0.54	34	2.15	7.4	b,d
HDO	241.5616	$2_{1,1}-2_{1,2}$	95	1.19×10^{-5}	IRAM-30 m	10.4	0.91	0.51	23	2.27	6.8	b
HDO	464.9245	$1_{0,1}-0_{0,0}$	22	1.69×10^{-4}	JCMT	10.8	–	0.5[5]	63	5.50	5.9	c
p-$H_2^{18}O$	745.3202	$2_{1,1}-2_{0,2}$	136	6.83×10^{-3}	HIFI 2b	28.4	0.96	0.75	18	0.34	5.2	a
p-$H_2^{18}O$	970.2720	$4_{2,2}-3_{3,1}$	452	6.71×10^{-4}	HIFI 4a	21.9	0.96	0.74	31	≤0.23		a
p-$H_2^{18}O$	994.6751	$2_{0,2}-1_{1,1}$	101	6.02×10^{-3}	HIFI 4a	21.3	0.96	0.74	35	0.81	7.0	a
p-$H_2^{18}O$	1101.6983	$1_{1,1}-0_{0,0}$	53	1.79×10^{-2}	HIFI 4b	19.2	0.96	0.74	44	0.63	5.3	a
p-$H_2^{18}O$	1188.8631	$4_{2,2}-4_{1,3}$	452	2.73×10^{-2}	HIFI 5a	17.8	0.96	0.64	125	≤0.92		a
p-$H_2^{18}O$	1199.0056	$2_{2,0}-2_{1,1}$	194	1.76×10^{-2}	HIFI 5a	17.7	0.96	0.64	90	≤0.66		a
p-$H_2^{18}O$	1605.9625	$4_{1,3}-4_{0,4}$	395	3.71×10^{-2}	HIFI 6b	13.2	0.96	0.71	339	≤2.49		a
o-$H_2^{18}O$	489.0543	$4_{2,3}-3_{3,0}$	430[4]	6.89×10^{-5}	HIFI 1a	43.4	0.96	0.76	14	≤0.10		a
o-$H_2^{18}O$	547.6764	$1_{1,0}-1_{0,1}$	60[4]	3.29×10^{-3}	HIFI 1a	38.7	0.96	0.75	8	0.98	7.0	a
o-$H_2^{18}O$	1095.6274	$3_{1,2}-3_{0,3}$	249[4]	1.62×10^{-2}	HIFI 4b	19.4	0.96	0.74	49	0.38	3.0	a
o-$H_2^{18}O$	1136.7036	$3_{2,1}-3_{1,2}$	303[4]	2.15×10^{-2}	HIFI 5a	18.7	0.96	0.64	103	≤0.76		a
o-$H_2^{18}O$	1181.3940	$3_{1,2}-2_{2,1}$	249[4]	2.89×10^{-3}	HIFI 5a	17.9	0.96	0.64	108	≤0.79		a
o-$H_2^{18}O$	1633.4836	$2_{2,1}-2_{1,2}$	192[4]	2.91×10^{-2}	HIFI 6b	13.0	0.96	0.71	264	≤1.94		a
o-$H_2^{18}O$	1655.8676	$2_{1,2}-1_{0,1}$	114[4]	5.46×10^{-2}	HIFI 6b	12.8	0.96	0.71	226	≤1.66		a
o-$H_2^{18}O$	1719.2502	$3_{0,3}-2_{1,2}$	196[4]	5.12×10^{-2}	HIFI 7a	12.3	0.96	0.71	277	≤2.04		a
p-$H_2^{17}O$	1107.1669	$1_{1,1}-0_{0,0}$	53	1.81×10^{-2}	HIFI 4b	19.1	0.96	0.74	47	≤0.34		a
o-$H_2^{17}O$	552.0210	$1_{1,0}-1_{0,1}$	61[4]	3.37×10^{-3}	HIFI 1a	38.4	0.96	0.75	11	0.58	7.1	a
$HD^{18}O$	883.1894	$1_{1,1}-0_{0,0}$	42	7.96×10^{-3}	HIFI 3b	24.0	0.96	0.75	22	≤0.16		a

Notes. [(1)] The frequencies, the upper state energies (E_{up}), and the Einstein coefficients (A_{ij}) of HDO and $H_2^{18}O$ come from the spectroscopic catalog JPL (Pickett et al. 1998). The ortho/para separation of $H_2^{18}O$ was carried out in the CASSIS database. [(2)] The rms is computed for a spectral resolution of 0.7 km s^{-1} for the HDO transitions and 0.6 km s^{-1} for the $H_2^{18}O$, $H_2^{17}O$, and $HD^{18}O$ transitions. [(3)] References: a) this work; b) Caux et al. (2011); c) Stark et al. (2004); d) Parise et al. (2005). [(4)] The o-$H_2^{18}O$ and o-$H_2^{17}O$ upper energy levels quoted in the table assume that the fundamental $1_{1,0}-1_{0,1}$ level lies at 34 K and not at 0 K. [(5)] This value corresponds to the ratio between the beam efficiency and the forward efficiency.

$H_2^{18}O$, $H_2^{17}O$, and $HD^{18}O$ can then be calculated, once J_ν is determined for every cell. These level populations are required to map the emission distribution throughout the cloud.

The source structure used in the modeling was determined by Crimier et al. (2010) with a radius extending from 22 AU to 6100 AU (see Fig. 2); however, the structure in the hot corino region ($T \geq 100$ K) may be uncertain since disks probably exist in the inner part of the protostellar envelopes. Nevertheless, since the disk characteristics are unknown, we keep the structure as it is. The radial velocity $v_r = \sqrt{2GM/r}$ (where M is the stellar mass, G the gravitational constant and r the radius) is calculated for a stellar mass of 1 $M_\odot$. For a higher mass (~2 $M_\odot$), the line widths become too broad to reproduce the line profiles. Moreover, the value of 1 $M_\odot$ agrees with the mass of the core A, while the mass of the core B is at most about 0.1 $M_\odot$ (Ceccarelli et al. 2000a; Bottinelli et al. 2004; Caux et al. 2011). For a radius greater than 1280 AU, the envelope is considered as static (the velocity is fixed at 0). This radius corresponds to a change in the slope of the density profile, marking the transition of the collapsing/static envelope (Shu 1977), and its value has been determined by Crimier et al. (2010). To reproduce the widths of the absorption lines, the turbulence Doppler b-parameter (equal to $0.6 \times FWHM$) is fixed at 0.3 km s^{-1}. If a lower (respectively higher) value is adopted, the modeled absorption lines become too narrow (respectively too broad) compared with the observations. As source A is more massive than source B, we considered that the structure is centered on core A. According to interferometric data of the HDO $3_{1,2}-2_{2,1}$ line at 226 GHz, deuterated water is mainly emitted by core A (Jørgensen et al. 2011). Therefore,

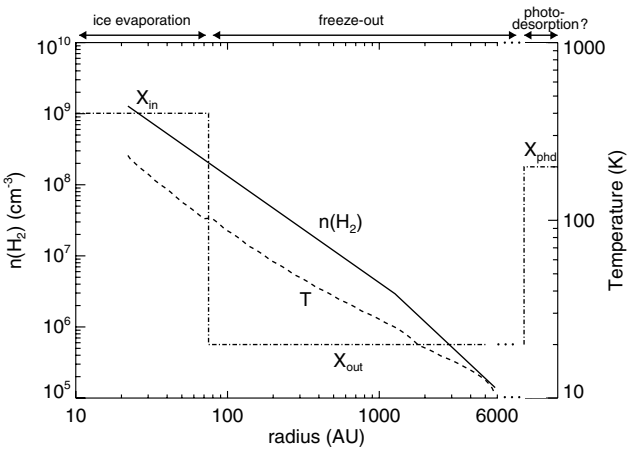


Fig. 2. H_2 density (solid line) and gas temperature (dashed line) structure of IRAS 16293 determined by Crimier et al. (2010). The expected abundance profile of water is added (dashed-dotted line) on an arbitrary Y-scale. In the colder envelope ($T < 100$ K), the water molecules are trapped on the grain mantles, whereas in the inner part of the envelope, they are released in gas phase by thermal heating, leading to an enhancement of the abundance. In the outer part of the molecular cloud ($A_V \sim 1$–4), the water abundance can also increase by photodesorption mechanisms. A freeze-out timescale much longer than the protostellar lifetime can also lead to an enhanced abundance when the density is low ($\sim 10^4$ cm^{-3}).

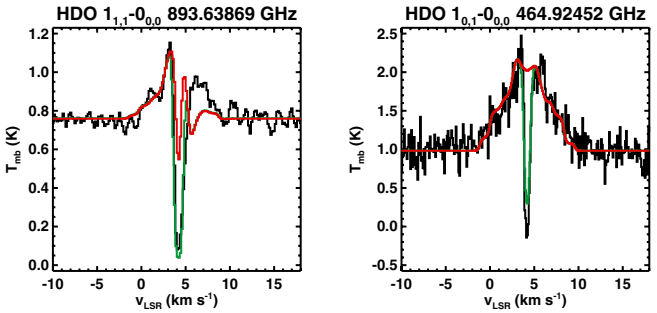


Fig. 3. In black: HDO $1_{1,1}-0_{0,0}$ and $1_{1,0}-0_{0,0}$ absorption lines observed at 894 GHz with HIFI and at 465 GHz with JCMT, respectively. In red: HDO modeling without adding the absorbing layer. In green: HDO modeling when adding an absorbing layer with a HDO column density of $\sim 2.3 \times 10^{13}$ cm^{-2}. The continuum for both the 894 GHz and 465 GHz lines refers to SSB data.

the assumption of a 1D modeling centered on source A seems quite reasonable. Because the IRAM observations were pointed on the IRAS 16293 B source and not on core A and the beam is quite small ($\sim 11''$) at 226 and 242 GHz, we carefully convolved the resulting map with the telescope beam profile centered on core B to get the model spectra.

To fit the continuum observed with HIFI from band 1 to band 4, the dust opacity as function of the frequency has to be constrained by a power-law emissivity model:

$$\kappa = \kappa_0 \left(\frac{\nu}{\nu_0}\right)^{\beta} \quad (3)$$

with $\beta = 1.8$, $\kappa_0 = 15$ cm^2/g$_{\rm dust}$, and $\nu_0 = 10^{12}$ Hz, which has been used as input in the RATRAN modeling. Using this emissivity model and the source structure described above, the continuum of the HDO $1_{0,1}-0_{0,0}$ fundamental line at 465 GHz is predicted at ~ 1 K. The continuum determination at this frequency is essential for the modeling because this line shows a deep and narrow self-absorption. The modeled continuum is shown in Figs. 3 and 4 for the two HDO absorption lines, whereas it has been subtracted for all the lines that only present emission. The profiles obtained are resampled at the spectral resolution of the observations. Smoothing was applied on some observations when the line is undetected or weakly detected (see Figs. 4 and 10). For the determination of the best-fit parameters by χ^2 minimization (see Sect. 3.3), the spectra are also resampled to a same spectral resolution for all the lines (0.7 km s^{-1} for HDO and 0.6 km s^{-1} for $H_2^{18}O$, $H_2^{17}O$, and $HD^{18}O$, which correspond to the lowest spectral resolution of the HIFI data).

Previous studies (e.g. van Kempen et al. 2008) have shown that in protostellar envelopes, the dust can become optically thick, preventing water emission from deep in the envelope to escape. The dust continuum could therefore hide the higher frequencies HDO and $H_2^{18}O$ lines coming from the hot corino, depending on the source structure and the dust emissivity model chosen. In fact, we notice here that the dust optical depth is always lower than 1 for all the frequencies lower than 1500 GHz. For the transitions quoted in Table 1 with frequencies higher than 1500 GHz, the dust opacity only exceeds 1 for temperatures well over 100 K. Consequently, in the case of IRAS 16293, the dust opacity should not hide the higher frequencies HDO and $H_2^{18}O$ lines as the dust opacity only becomes thick in the very deep part of the inner envelope.

3.2. HDO collisional rate coefficients

The HDO collisional rates used in this study have recently been computed by Faure et al. (2012) for para-H_2($J_2 = 0, 2$) and ortho-H_2 ($J_2 = 1$) in the temperature range 5–300 K, and for all the transitions with an upper energy level less than 444 K. The methodology used by Faure et al. (2012) is described in detail in Scribano et al. (2010) and Wiesenfeld et al. (2011). These authors present detailed comparisons between the three water-hydrogen isotopologues H_2O-H_2, HDO-H_2, and D_2O-H_2. Significant differences were observed in the cross sections and rates and were attributed to symmetry, kinematics, and intramolecular (monomer) geometry effects. Moreover, in the case of HDO, rate coefficients with H_2 were found to be significantly larger, by up to three orders of magnitude, than the (scaled) H_2O-He rate coefficients of Green (1989), which are currently employed in astronomical models (see Fig. 2 of Faure et al. 2012). A significant impact of the new HDO rate coefficients is thus expected in the determination of interstellar HDO abundances, as examined in Sect. 3.3. In the following, we assume that the ortho-to-para ratio of H_2 is at local thermodynamic equilibrium (LTE) in each cell of the envelope. The collisional rates for para-H_2 were also summed and averaged by assuming a thermal distribution of $J_2 = 0, 2$.

3.3. Determination of the HDO abundance

In a first step, we ran a grid of models with one abundance jump at 100 K, in the so-called hot corino (Ceccarelli et al. 1996, 2000b). The abundance of water is expected to be higher in the hot corino than in the colder envelope, since the water molecules contained in the icy grain mantles are released in gas phase, when the temperature is higher than the sublimation temperature of water, ~ 100 K (Fraser et al. 2001). Thereafter, the inner abundance ($T \geq 100$ K) will be designated by $X_{\rm in}$ and the outer abundance ($T < 100$ K) by $X_{\rm out}$. Both are free parameters and their

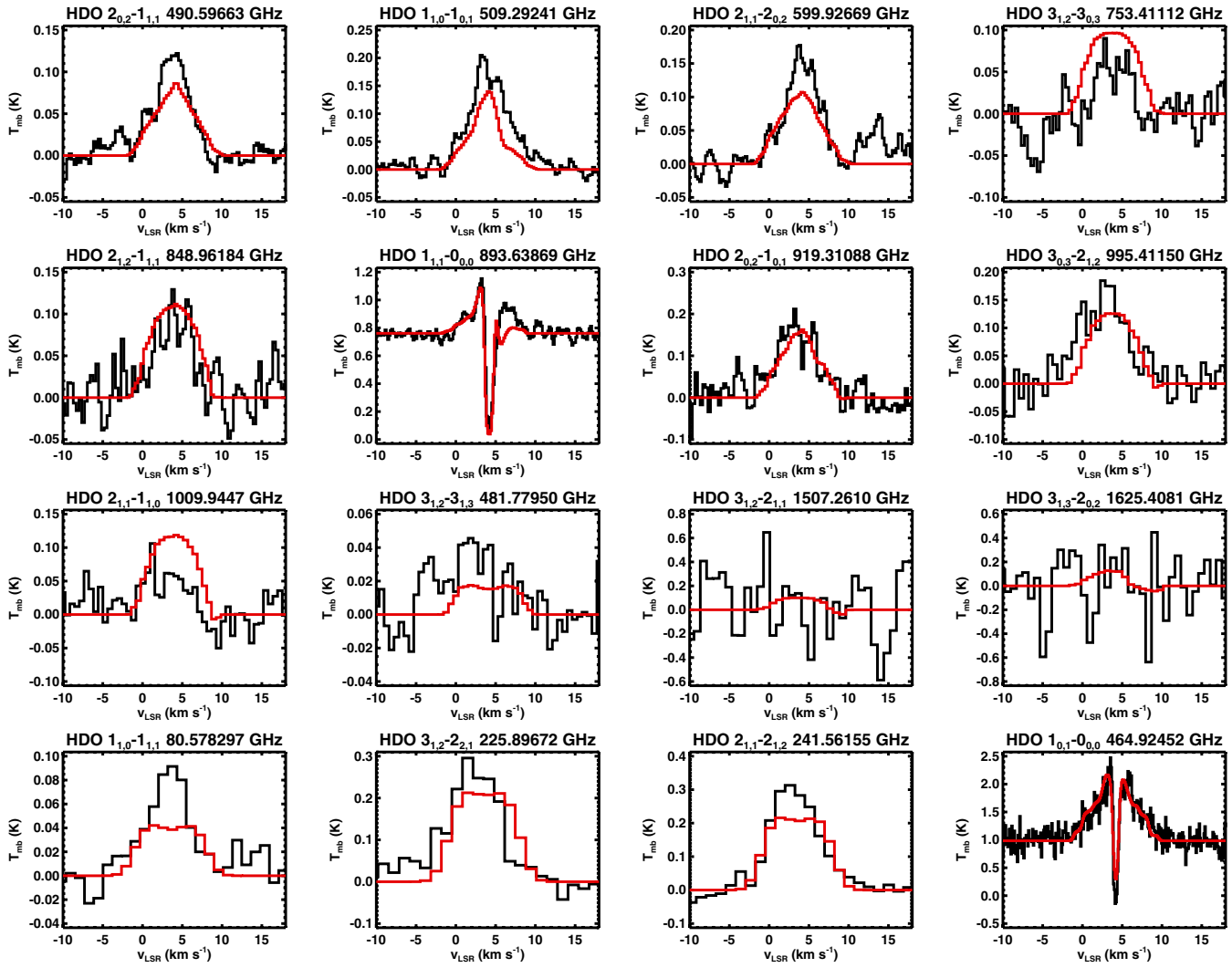


Fig. 4. In black: HDO lines observed with HIFI, IRAM, and JCMT. In red: best-fit model obtained when adding an absorbing layer with an HDO column density of $\sim 2.3 \times 10^{13}$ cm^{-2} to the structure (see details in text). The best-fit inner abundance is 1.7×10^{-7} and the best-fit outer abundance is 8×10^{-11}. The continuum shown for both the 894 GHz and 465 GHz lines, refers to SSB data.

best-fit values are determined by a χ^2 minimization. To take the line profile into account, the χ^2 is computed from the observed and modeled spectra resampled at a same spectral resolution (0.7 km s^{-1} for HDO and 0.6 km s^{-1} for $H_2^{18}O$) according to the following formalism:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{n_{\rm chan}} \frac{(T_{{\rm obs},ij} - T_{{\rm mod},ij})^2}{{\rm rms}_i^2 + (Cal_i \times T_{{\rm obs},ij})^2} \quad (4)$$

with N the number of lines i, $n_{\rm chan}$ the number of channels j for each line, $T_{{\rm obs},ij}$ and $T_{{\rm mod},ij}$ the intensity observed and predicted by the model respectively in channel j of the line i, ${\rm rms}_i$ the rms at the 0.7 km s^{-1} (or 0.6 km s^{-1}) spectral resolution (given in Table 1), and Cal_i the calibration uncertainty. We assumed an overall calibration uncertainty of 15% for each detected line.

The best-fit result for this grid of models gives an inner abundance $X_{\rm in} = 1.9 \times 10^{-7}$ and an outer abundance $X_{\rm out} = 5 \times 10^{-11}$ with a reduced χ^2 of 3.2. However this model (as well as the other models of this grid) predicts absorption lines that are weaker than observed (see Fig. 3). To correctly reproduce the depth of the absorption in the 465 and 894 GHz lines, while not introducing extra emission in the remaining ones, it is necessary to add an absorbing layer in front of the IRAS 16293 envelope. We notice that the results mainly depend on the HDO column density of the layer, and they are insensitive to the density (for densities lower than $\sim 10^5$ cm^{-3}) and to the temperature (for temperatures lower than $\sim$30 K). The HDO column density of the layer must be about 2.3×10^{13} cm^{-2}. To understand from where the HDO absorptions arise, we can consider two different options.

– First, the source structure should be extended to a higher outer radius to include the whole molecular cloud. If the absorbing layer comes from the surrounding gas of the molecular cloud harboring IRAS 16293 and if we assume that the HDO abundance remains constant as in the outer envelope, this would imply a surrounding H_2 column density of about 2.9×10^{23} cm^{-2}. But this value is considerably too high for a molecular cloud. The $N(H_2)$ column density of the ρ Oph cloud has been estimated at $\sim 1.5 \times 10^{22}$ cm^{-2} by van Dishoeck et al. (1995) and at $\gtrsim 5 \times 10^{22}$ cm^{-2} by Caux et al. (1999). Adding a molecular cloud with these characteristics to the structure determined by Crimier et al. (2010) does not allow deep absorption lines to be modeled. This hypothesis is therefore insufficient to explain the deep HDO absorption lines.

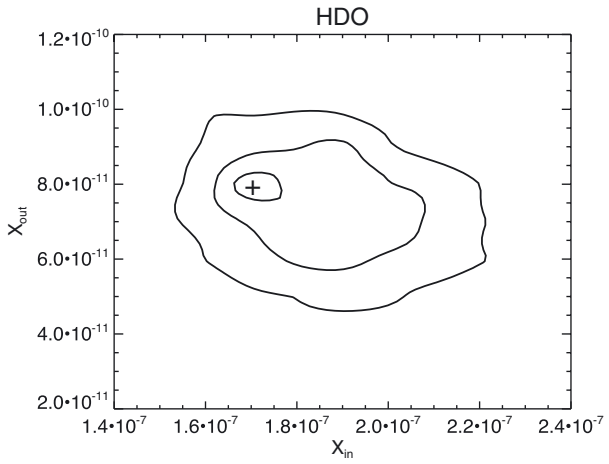


Fig. 5. χ^2 contours at 1σ, 2σ, and 3σ obtained when adding an absorbing layer with a HDO column density of 2.3×10^{13} cm^{-2} to the structure. The results are obtained with the collisional coefficients with ortho and para-H_2 determined by Faure et al. (2012). The best-fit model is represented by the symbol "+". The reduced χ^2 is about 2.4.

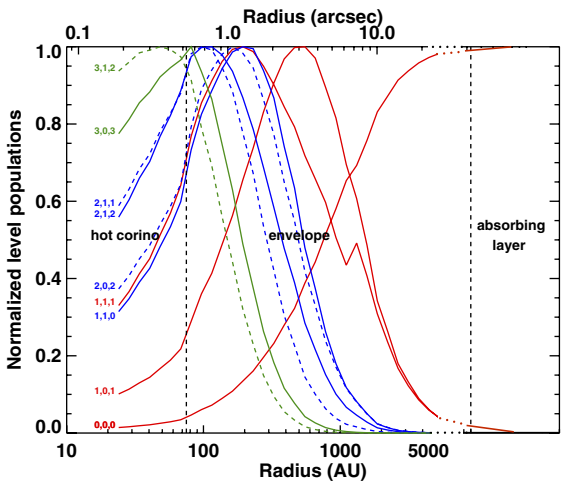


Fig. 6. Normalized level populations of HDO computed by RATRAN, as a function of the radius of the protostar envelope. To avoid confusion, the population of levels $2_{0,2}$, $2_{1,1}$, and $3_{1,2}$ are indicated by dashed lines. The HDO $1_{1,1}$ level population jump visible at ~1300 AU is an artifact due to the change of the velocity field at the interface between the infalling envelope and the static envelope.

– Consequently, the only way to explain the absorption lines consists in assuming a drop abundance structure. Such a structure in the low-mass protostars has already been inferred for several molecules like CO and H_2CO (Schöier et al. 2004; Jørgensen et al. 2004, 2005). The raising of the abundance in the outermost regions of the envelope is explained by a longer depletion timescale than the lifetime of the protostars (~10^4–10^5 years) for H_2 densities lower than ~10^4–10^5 cm^{-3} (e.g., Caselli et al. 1999; Jørgensen et al. 2004). On the other hand, Hollenbach et al. (2009) have shown that, at the edge of molecular clouds, the icy mantles are photodesorbed by the UV photons, giving rise to an extended layer with a higher water abundance for a visual extinction A_V ~ 1–4 mag (for G_0 = 1). Assuming an A_V of ~1–4 mag and the relation $N(H_2)/A_V = 9.4\times10^{20}$ cm^{-2} mag^{-1} (Frerking et al. 1982), the abundance of HDO in this water-rich layer created by the photodesorption of the ices should be about 6×10^{-9}–2.4×10^{-8}. We see thereafter, when analyzing the $H_2^{18}O$ lines, that this hypothesis is nicely consistent with the theoretical predictions by Hollenbach et al. (2009). For water, both effects may play a role.

As the absorption of the two fundamental lines is reproduced with this outer component (see Fig. 3), we ran a second grid of models adding this absorbing layer. The best-fit is obtained for $X_{in} = 1.7\times10^{-7}$ and $X_{out} = 8\times10^{-11}$ with a χ^2_{red} of 2.4. With the current parameters, a simultaneous fit of all the HIFI, IRAM, and JCMT data is presented in Fig. 4. The contours of χ^2 at 1σ, 2σ, and 3σ, which respectively represent a confidence of 68.26%, 95.44%, and 99.73% of enclosing the true values of X_{in} and X_{out}, are shown in Fig. 5, computed with the method of Lampton et al. (1976). The contours at 1σ, 2σ, and 3σ correspond respectively to $\chi^2 = \chi^2_{min}+2.3$, $\chi^2 = \chi^2_{min}+6.17$, and $\chi^2 = \chi^2_{min}+11.8$ when the number of adjustable parameters is two (here X_{in} and X_{out}). The confidence intervals of X_{in} and X_{out} at 3σ are 1.53×10^{-7}–2.21×10^{-7} and 4.6×10^{-11}–1.0×10^{-10}, respectively.

In the hot corino, most of the HDO lines are optically thick, except the 81, 226, 242, and 482 GHz transitions that show an opacity $\lesssim$1. Since the emission from most of the HDO lines originates both in the hot corino and the outer envelope, the use of a simple rotational-diagram analysis to estimate the total column density of HDO is not appropriate. Figure 6 represents the normalized populations of some levels (up to $3_{1,2}$) as a function of the distance from the center of the protostar, computed by RATRAN through the equation of statistical equilibrium. These level populations are then used to determine the emission distribution of deuterated water by using a ray-tracing method. This figure also shows that the absorbing layer is mainly constrained by the ground state transitions as $1_{1,1}$–$0_{0,0}$, and $1_{0,1}$–$0_{0,0}$.

The 81 GHz $1_{1,0}$–$1_{1,1}$ transition observed at IRAM-30 m is not reproduced well by the best-fit model. The disagreement could be due to a blending effect at this frequency. Nevertheless, it is ruled out for the species included in the JPL and CDMS databases. Calibration could also be questioned at this frequency. But it seems rejected since the profile obtained with the best-fit model differs from the observing profile. Another explanation could come from the assumption of spherical symmetry. Interferometric data of the HDO $3_{1,2}$–$2_{2,1}$ transition show that, in addition to the main emission coming from the source A, a weaker component of HDO is emitted at about 6″ from core A (see Fig. 20 in Jørgensen et al. 2011). The beam size of the IRAM-30 m telescope at 81 GHz encompasses this component and could explain the lack of predicted flux as well as the different line profile. This hypothesis seems consistent with the lower frequency HIFI lines (491, 509, and 600 GHz) for which the best-fit model misses flux.

The derived abundances for HDO agrees with the 3σ upper limit (0.16 K km s^{-1}) of the $HD^{18}O$ $1_{1,1}$–$0_{0,0}$ transition observed in our spectra at 883 GHz. Assuming an $HD^{16}O/HD^{18}O$ ratio of 500 (Wilson & Rood 1994), value at the galactocentric distance of IRAS 16293, the modeling predicts an integrated intensity of 0.15 K km s^{-1}.

To obtain consistent profiles of the model compared with the observations, the LSR velocity, V_{LSR}, is about 4.2 km s^{-1} for the HIFI and JCMT lines, whereas it is about 3.6 km s^{-1} for the three IRAM lines. This discrepancy of the velocity in the modeling could be explained by the origin of the emission of the lines. The 4.2 km s^{-1} velocity component could represent the velocity of the envelope. For example, the velocity of the absorption lines of the fundamental transitions of D_2O tracing the cold envelope

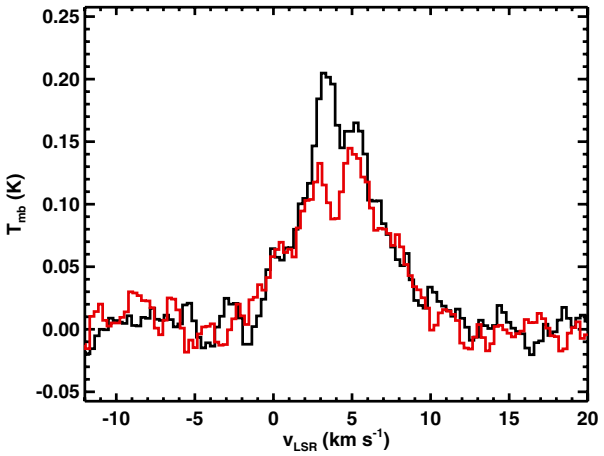


Fig. 7. Comparison of the profiles of the HDO (in black) and $H_2^{18}O$ (in red) $1_{1,0}-1_{0,1}$ transitions at 509 and 548 GHz, respectively.

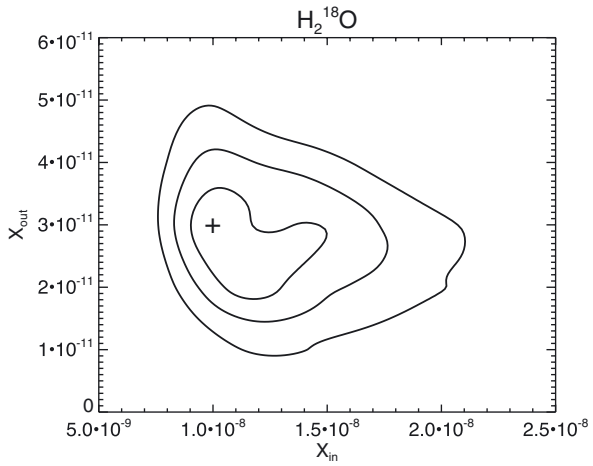


Fig. 8. χ^2 contours at 1σ, 2σ, and 3σ obtained for $H_2^{18}O$. The best-fit model is represented by the symbol "+". The reduced χ^2 is about 1.9.

of IRAS 16293 and detected by JCMT (Butner et al. 2007) and by HIFI (Vastel et al. 2010) is 4.15 and 4.33 km s^{-1}, respectively. Even if some HIFI lines trace both the inner part and the outer part of the envelope, the velocity of the outer envelope should dominate because of a smaller line widening in the outer envelope. In contrast, the flux of IRAM lines at 226 and 242 GHz only trace the hot corino (see Figs. 1 and 6). Their velocity (~3.6 km s^{-1}) is lower, in agreement with the velocity of the core A (V_{LSR} ~ 3.9 km s^{-1}).

As previous studies regarding HDO used the collisional coefficients computed by Green (1989), we have run a grid of models with these rates for a comparison. The simultaneous best-fit of all the transitions using these rates is obtained for an inner abundance $X_{in} = 2.0 \times 10^{-7}$ and an outer abundance $X_{out} = 1 \times 10^{-11}$. The inner abundance is similar to what we found above with the collisional coefficients determined by Faure et al. (2012). However, the outer abundance is a factor of 8 lower. The χ^2 also gives a higher value ($\chi^2_{red} = 2.8$), therefore showing that the observations are better reproduced with rates with H_2 than with He.

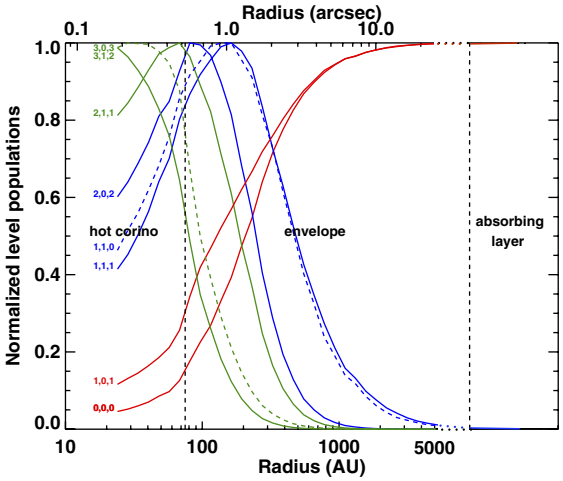


Fig. 9. Normalized level populations of $H_2^{18}O$ computed by RATRAN, as a function of the radius of the protostar envelope. To avoid confusion, the population of levels $1_{1,0}$ and $3_{0,3}$ are indicated by dashed lines.

3.4. Determination of the water abundance

To determine the H_2O abundance throughout the envelope, we used all the $H_2^{18}O$ transitions in the HIFI range (see Table 1). The only transition observable in the TIMASSS spectral survey is contaminated by the CH_3OCH_3 species at 203.4 GHz. The profiles of the observed $H_2^{16}O$ lines suggest, by the presence of wings, that the lines are contaminated by the outflows. Unlike the $H_2^{16}O$ lines that show a width $\gtrsim$10 km s^{-1}, the $H_2^{18}O$ line widths are similar to the HDO lines (see Fig. 7, ~5 km s^{-1}) and no wings are seen in the $H_2^{18}O$ detected transitions (see Fig. 10). Consequently, the outflow does not probably contribute to a large extent to the emission of the $H_2^{18}O$ lines.

We used the H_2O collisional coefficients determined by Faure et al. (2007) and assumed a $H_2^{16}O/H_2^{18}O$ ratio equal to 500 (Wilson & Rood 1994), as well as a $H_2^{18}O$ ortho/para ratio of 3. As for HDO, in a first step, we ran a grid of models for different inner and outer abundances without adding the absorbing layer. The best-fit parameters of the χ^2 minimization are $X_{in}(H_2^{18}O) = 1 \times 10^{-8}$ and $X_{out}(H_2^{18}O) = 3 \times 10^{-11}$ and the reduced χ^2 is about 1.9. The inner abundance of water is therefore 5×10^{-6}, whereas the outer abundance is 1.5×10^{-8}. Figure 8 shows the χ^2 contours at 1σ, 2σ, and 3σ. A calibration uncertainty of 15% has been assumed for the 548 GHz transition and the tentatively detected ones (1096, 1102, 994, and 745 GHz). At 3σ, the outer abundance of $H_2^{18}O$ varies between 9×10^{-12} and 4.9×10^{-11}, whereas the inner abundance is in the interval 7.6×10^{-9}–2.1×10^{-8}. Using the best-fit values found for X_{in} and X_{out}, it is necessary, in order to reproduce the weak absorption of the $1_{1,0}-1_{0,1}$ line at 548 GHz, to add an absorbing layer with a $H_2^{18}O$ column density of about 1×10^{12} cm^{-2}. For higher column densities, the models predict absorptions that are too deep for the ortho and para fundamental transitions (see Fig. 9). For a visual extinction A_V ~ 1–4 mag, the H_2O abundance in the photodesorption layer is 1.3–5.3×10^{-7}. This value is in very good agreement with the values predicted in photodesorption layers by the model of Hollenbach et al. (2009), about 1.5–3×10^{-7}. The model predictions with this absorbing layer are shown in Fig. 10. We cannot rule out a remnant contribution of the outflows in view of the profile of 548 GHz line, but this outflow contribution to the bulk of the emission is very likely negligible for the other transitions.

In the hot corino, among the o-$H_2^{18}O$ transitions, only the 489 and 1181 GHz lines are optically thin, whereas among the p-$H_2^{18}O$ transitions, only the 970, 1189, and 1606 GHz lines show an opacity lower than 1. The emission of most of the

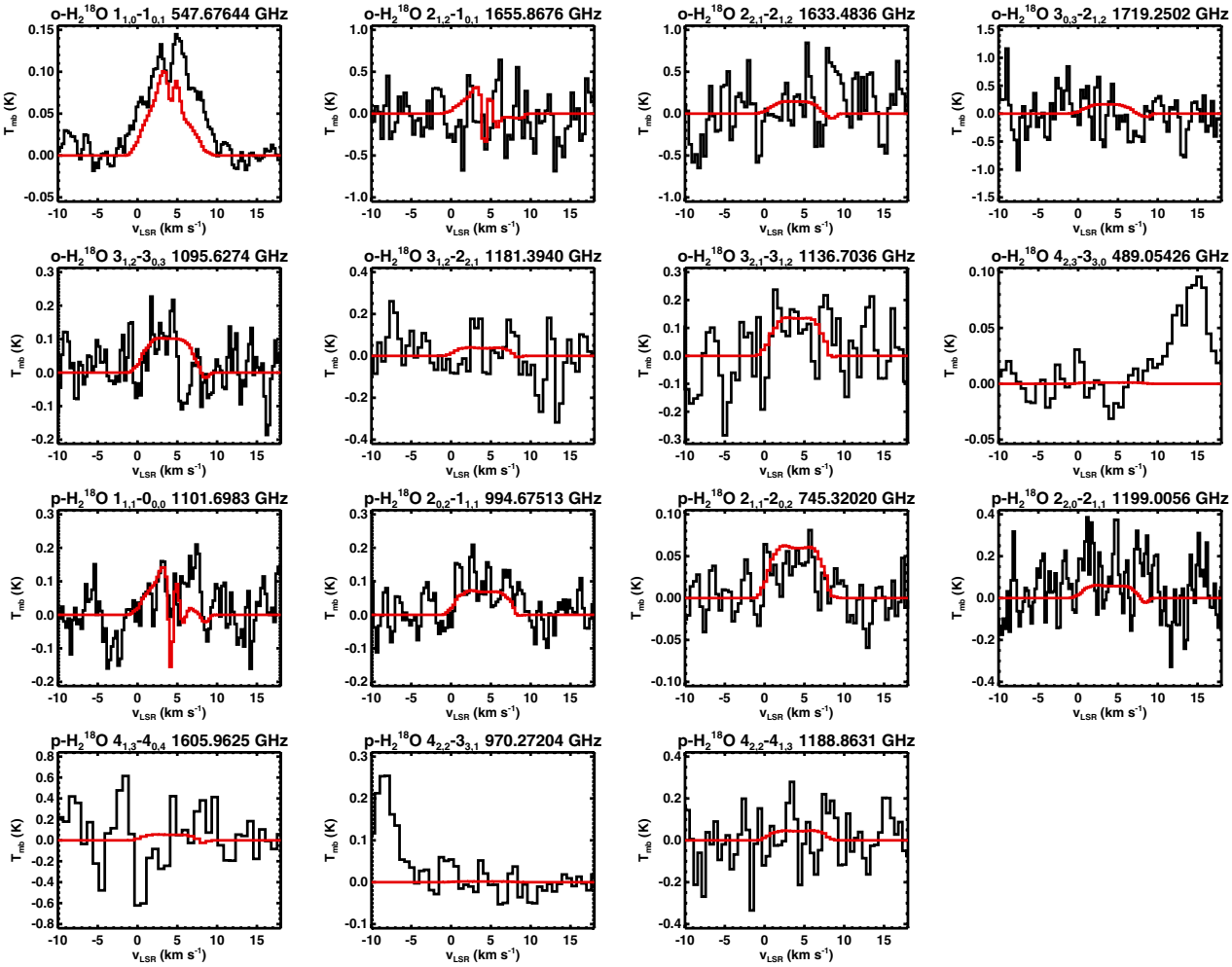


Fig. 10. In black: $H_2^{18}O$ lines observed with HIFI. In red: best-fit model obtained when adding an absorbing layer with a $H_2^{18}O$ column density of 1×10^{12} cm^{-2}. The inner abundance is 1×10^{-8} and the outer abundance is 3×10^{-11}. The detected line at a velocity of 15 km s^{-1} in the panel of the 489 GHz transition is CH_3OH at 489.0368 GHz. Also, the line observed at a velocity of -10 km s^{-1} in the panel of the 970 GHz transition is p-H_2O at 970.3152 GHz.

transitions comes from both the hot corino and the outer envelope (see Fig. 9). Similarly to HDO, a rotational diagram analysis therefore cannot be considered for $H_2^{18}O$.

The ortho-$H_2^{17}O$ $1_{1,0}-1_{0,1}$ transition at 552 GHz has also been detected. To check the validity of the results, we ran a model similar to what has been done for $H_2^{18}O$, assuming a ratio $^{18}O/^{17}O$ of 4 (Wouterloot et al. 2008). Figure 11 shows the predicted models for the 552 GHz line, as well as the para-$H_2^{17}O$ $1_{1,1}-0_{0,0}$ fundamental line undetected at 1107 GHz for the best-fit of $H_2^{18}O$, i.e. for an inner $H_2^{17}O$ abundance of 2.5×10^{-9} and an outer $H_2^{17}O$ abundance of 7.5×10^{-12}. A prediction with twice the inner abundance, situated in the 3σ contour of $H_2^{18}O$, is also presented (Fig. 11). We see that the $H_2^{17}O$ predictions agrees with the $H_2^{18}O$ results, confirming the water abundances derived.

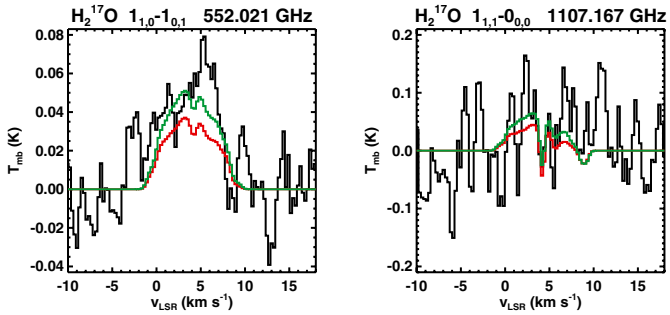


Fig. 11. In black: fundamental $H_2^{17}O$ lines observed with HIFI. In red: model obtained with an inner $H_2^{17}O$ abundance of 2.5×10^{-9}, an outer $H_2^{17}O$ abundance of 7.5×10^{-12}, and an $H_2^{17}O$ column density in the absorbing layer of 2.5×10^{11} cm^{-2}. In green: model obtained with an inner $H_2^{17}O$ abundance of 5.0×10^{-9}, an outer $H_2^{17}O$ abundance of 7.5×10^{-12}, and an $H_2^{17}O$ column density in the absorbing layer of 2.5×10^{11} cm^{-2}.

4. Discussion

The study of HDO in the deeply embedded low-mass protostar IRAS 16293 had already been undertaken by Stark et al. (2004), then by Parise et al. (2005), leading to different results. Stark et al. (2004) used a constant [HDO]/[H_2] abundance of 3×10^{-10} throughout the envelope to fit the $1_{0,1}-0_{0,0}$ transition at 465 GHz best, resulting in an HDO/H_2O ratio in the warm inner envelope of a few times 10^{-4}. However, their best-fit cannot reproduce the deep absorption feature. Also, unlike our study, they do not succeed in reproducing the line width without introducing an outflow contribution; however, the model obtained with the outflow component fails to match simultaneously the line width and the

Table 2. HDO/H_2O ratio.

	Hot corino		Outer envelope		Photodesorption layer
	Best-fit	3σ	Best-fit	3σ	$A_V \sim$ 1–4 mag
HDO	1.7×10^{-7}	$1.5–2.2 \times 10^{-7}$	8×10^{-11}	$4.6–10.0 \times 10^{-11}$	$\sim 0.6–2.4 \times 10^{-8}$
H_2O	5×10^{-6}	$3.8–10.5 \times 10^{-6}$	1.5×10^{-8}	$4.5–24.5 \times 10^{-9}$	$\sim 1.3–5.3 \times 10^{-7}$
HDO/H_2O	3.4%	1.4–5.8%	0.5%	0.2–2.2%	~4.8%[a]

Notes. [(a)] This ratio remains valid if the absorbing layer is not due to the photodesorption, but is the result of a freeze-out timescale longer than the protostellar age at low densities.

peak intensity. This could be explained by their source structure and the assumption of a constant abundance throughout the envelope. The dust temperature is restricted to a range from 12 K to 115 K. A structure with a lower inner radius (consequently an higher temperature) and an abundance rising in the inner part of the envelope may allow the line to become broader and reproduce the observation. Moreover, the peak intensities predicted by their model for the lines at 226 and 241 GHz (0.001 K and 0.006 K, respectively) are clearly lower than what we observe here (0.30 and 0.32 K, respectively). Afterwards, the results obtained by Stark et al. (2004) have been questioned by the study of Parise et al. (2005). Using IRAM and JCMT observations, they have found an enhancement of the abundance of HDO in the hot corino ($X_{in} \sim 1 \times 10^{-7}$) with respect to the outer envelope ($X_{out} \leq 1 \times 10^{-9}$), in agreement with our results using both the collisional coefficients with He by Green (1989) and with ortho and para-H_2 by Faure et al. (2012) (see Sect. 3.3). However, their results did not take the line profiles into account, specifically the deep absorption of the ground state transitions, and only allowed a rather high upper limit of the outer abundance to be derived.

Parise et al. (2005) conclude there is a jump in the HDO/H_2O ratio in the inner part of the envelope, using the H_2O abundance determined by Ceccarelli et al. (2000a). Nevertheless, our results on the water abundance are quite different. Using $H_2^{16}O$ data from ISO/LWS, highly diluted in a beam width of about 80″, Ceccarelli et al. (2000a) obtained an outer abundance of 5×10^{-7}, while we found an outer abundance lower than 3.5×10^{-8}. However, their derived inner abundance of $\sim 3 \times 10^{-6}$ is not so very different from our value, $X_{in}(H_2O)$ $\sim 5 \times 10^{-6}$. The disagreement on determining the outer abundance can easily be explained by the fact that Ceccarelli et al. (2000a) used $H_2^{16}O$ data, contaminated by the outflows that must be added in the modeling. The gas temperature was computed by assuming the water abundance derived by the ISO observations. However, since the gas is practically thermally coupled with the dust, the impact in the gas temperature is certainly negligible. The largest difference between the gas and dust temperature is less than 10% (Crimier et al. 2010). The discrepancy on the water abundance therefore results in a different deuteration ratio in the outer envelope. Considering the 3σ uncertainty, the enhancement of the water deuterium fractionation in the hot corino cannot be confirmed in our study, in contrast to what was concluded in Parise et al. (2005). Table 2 summarizes the HDO/H_2O ratio determined by our analysis in the inner and outer envelope, as well as an estimation of this ratio in the absorbing layer. With a 3σ uncertainty, the water fractionation could be similar throughout the cloud with a HDO/H_2O ratio between 1.4% and 5.8% in the inner part and between 0.2% and 2.2% in the outer part. Also the HDO/H_2O ratio obtained here is in agreement with the upper limits of solid HDO/H_2O (from 0.5% to 2%) determined by observations of OH and OD stretch bands in four low-mass protostars (Dartois et al. 2003; Parise et al. 2003).

A consequential result of this paper is the similarity of the HDO/H_2O ratio derived in the hot corino (~1.4–5.8%) and in the added outer absorbing layer (~4.8%). Indeed, the ratio is within the same order of magnitude, although the densities of these two regions are considerably different. The density in the hot corino is a few times 10^8 cm^{-3}. In the absorbing layer, it is about 10^3–10^5 cm^{-3}. Consequently, water shows a different behavior from other molecules such as methanol and formaldehyde, that need CO ices to be formed. In particular, Bacmann et al. (2003, 2007) show that the deuteration of H_2CO and CH_3OH increases with the CO depletion in starless dense cores, increasing itself with the H_2 density (Bacmann et al. 2002). The H_2CO and CH_3OH deuteration is therefore sensitive to the density of the medium in which they form. In contrast, the HDO/H_2O ratio does not show any difference for different H_2 densities. This would therefore mean that water has formed before the collapse of the protostar and that the HDO/H_2O ratio has been preserved during the gravitational collapse. The deuteration fractionation of water would therefore remain similar, both in the inner region of the protostar, where the density has strongly increased, and in the outer region that has not been affected by the collapse. Another argument emphasizes this hypothesis. To obtain such high deuteration ratios of HDCO/H_2CO (~15%; Loinard et al. 2001) and CH_2DOH/CH_3OH (~30%; Parise et al. 2004) in IRAS 16293 compared with HDO/H_2O ~ 3%, the density at which the molecules form should be higher for the H_2CO and CH_3OH formation than for water formation. The collapse should already have started to allow the CO molecules to freeze-out and form formaldehyde and methanol at the grain surface. On the contrary, water would form at low densities in the early stages of the star formation before the protostellar collapse, as suggested by Dartois et al. (2003) and Parise et al. (2003). This is also consistent with the fact that H_2O ices appear at relatively low extinction in the direction of the Taurus cloud (e.g. Jones & Williams 1984). Recently, similar conclusions have been mentioned in Cazaux et al. (2011). Using a grain surface chemistry model, they show that the deuteration of formaldehyde is sensitive to the gas D/H ratio as the cloud undergoes gravitational collapse, while the HDO/H_2O ratio is constant as the cloud collapses and is set during the formation of ices in the translucent cloud.

The HDO/H_2O ratio in the low-mass protostar IRAS 16293 is close to what is found in the low-mass protostar NGC 1333-IRAS2A, as determined by Liu et al. (2011): higher than 1% in the hot corino and between 0.9% and 18% at 3σ. However, this ratio of a few percent does not seem typical of all the Class 0 protostars since an upper limit of 6×10^{-4} has been determined in the inner part of the envelope of the low-mass protostar NGC 1333-IRAS4B (Jørgensen & van Dishoeck 2010). The determination of the water deuterium fractionation in a larger sample of Class 0 protostars would allow us to know, from a statistical point of view, whether the HDO/H_2O ratio is

rather about 10^{-4}–10^{-3} as observed in the NGC 1333-IRAS4B protostar, in comets ($\sim 3 \times 10^{-4}$; e.g. Bockelée-Morvan et al. 1998) and in the Earth's oceans ($\sim 1.5 \times 10^{-4}$; Lecuyer et al. 1998) or rather about a few percent, like the young stellar objects NGC 1333-IRAS2A and IRAS 16293. With a value of about 10^{-4} in the protostellar phase, the fractionation ratio could be conserved throughout the different stages of the star formation until the formation of the the solar-system objects. Higher values in the protostellar phase invoke mechanisms in the gas phase and/or on the grain surfaces to explain the decrease in the deuterium fractionation for water from the protostar formation to the comets and solar system formation. The determination of the HDO/H_2O ratio in a larger sample would allow us to understand whether the deuteration of water in protostars is somewhat similar to the solar system value and whether the environment or the conditions for the prestellar core phase play a role.

Finally, we can estimate for the first time the D_2O/H_2O ratio in a low-mass protostar. According to the results of Vastel et al. (2010), the column density of D_2O in the cold envelope ($T < 30$ K) is $1.65 \pm 1.41 \times 10^{12}$ cm^{-2} at a 3σ uncertainty. If we consider that the absorption of the two D_2O fundamental lines can be both due to the cold envelope ($T < 30$ K), as well as to the absorbing layer, the D_2O/H_2O ratio is on average about 10^{-3} and in the interval 1.1×10^{-4}–3.75×10^{-3} at 3σ. As for the D_2O/HDO ratio, it is about 6% and between 0.8% and 11.6% at 3σ. The HDO/H_2O and D_2O/H_2O ratio follow the statistical distribution (even considering the 3σ uncertainty) as determined in Butner et al. (2007):

$$\left(\frac{D_2O}{HDO}\right)_{grain} \geq \frac{1}{4}\left(\frac{HDO}{H_2O}\right)_{grain}. \quad (5)$$

These estimations of deuteration ratios in a low-mass protostar will certainly provide better constraints on the gas-grain chemistry models. Indeed, HDO is trapped on the grain surfaces before the thermal desorption due to the heating from the accreting protostar or before its photodesorption at the edges of the molecular cloud.

5. Conclusion

This study is the first one to use such a large number of lines to model deuterated water. Thanks to the numerous HDO transitions observed with *Herschel*/HIFI and four other lines observed with ground-based telescopes, we have succeeded in accurately determining the abundance of HDO throughout the envelope of the protostar and particularly the outer abundance that Parise et al. (2005) could not constrain. To estimate the abundances, new collisional coefficients computed with ortho and para-H_2 by Faure et al. (2012) and for a wide range of temperatures were used. The best-fit inner abundance X_{in}(HDO) is about 1.7×10^{-7}, whereas the best-fit outer abundance X_{out}(HDO) is about 8×10^{-11}. To model the deep HDO absorption lines, it has been necessary to add an outer absorbing layer with an HDO column density of 2.3×10^{13} cm^{-2}. In addition, detections of several $H_2^{18}O$ transitions, as well as small upper limits on other transitions, have allowed us to constrain both the inner and outer water abundances. Assuming a standard isotopic ratio $H_2^{18}O/H_2^{16}O = 500$, the inner abundance of water is about 5×10^{-6} and the outer abundance about 1.5×10^{-8}. The water column density in the added absorbing layer is about 5×10^{14} cm^{-2}. If we consider that this absorbing layer is created by the photodesorption of the ices at an A_V of ~1–4 mag, the water abundance is about 1.3–5.3×10^{-7} nicely consistent with the values predicted by Hollenbach et al. (2009). The deuterium fractionation of water is therefore about 1.4–5.8% in the hot corino, 0.2–2.2% in the colder envelope, and 4.8% in the added absorbing layer. The 3σ uncertainties determined in both the inner and the outer part of the envelope are small due to both the well constrained HDO and $H_2^{18}O$ abundances (see Table 2). These results do not permit any conclusion on an enhancement of the fractionation ratio in the inner envelope with respect to the outer envelope. The similar ratios derived in the hot corino and in the absorbing layer suggest that water forms before the gravitational collapse of the protostar, unlike formaldehyde and methanol, which form later after the CO molecules have depleted on the grains. In the cold envelope ($T < 30$ K), the D_2O/HDO ratio is estimated with a value of 6%. The HDO/H_2O ratios found here are clearly higher than those observed in comets (~0.02%). The water deuterium fractionation ratio has to be estimated in more low-mass protostars to determine if IRAS 16293 is an exception among the Class 0 sources or a typical protostar that could lead to the formation of a planetary system similar to our Solar System. In the latter case, processes should be at work to reprocess the water deuteration ratio before the cometary formation stage.

The strong constraints obtained here emphasize the necessity to observe several lines in a broad frequency and energy range, as done with the HIFI spectral survey, to precisely estimate the water deuterium fractionation. In particular, the HDO $1_{1,1}$–$0_{0,0}$ fundamental line at 894 GHz is a key line in the modeling because it shows emission both from the hot corino and the outer part of the envelope. In addition, both this transition and the $1_{0,1}$–$0_{0,0}$ transition at 465 GHz present a deep absorption probing the absorbing layer. The HDO $3_{1,2}$–$2_{2,1}$ and $2_{1,1}$–$2_{1,2}$ transitions observed at 226 and 242 GHz, respectively, with the IRAM-30 m telescope also bring useful information as they entirely probe the hot corino. These transitions, as well as several $H_2^{18}O$ transitions, lie in the ALMA[6] spectral range that will hopefully allow the HDO/H_2O ratio to be studied and constrained in many low-mass protostars with very high spatial resolution.

Acknowledgements. HIFI was designed and built by a consortium of institutes and university departments from across Europe, Canada, and the United States under the leadership of SRON Netherlands Institute for Space Research, Groningen, The Netherlands, with major contributions from Germany, France and the US Consortium members are: Canada: CSA, U. Waterloo; France: CESR, LAB, LERMA, IRAM; Germany: KOSMA, MPIfR, MPS; Ireland, NUI Maynooth; Italy: ASI, IFSI-INAF, Osservatorio Astrofisico di Arcetri-INAF; The Netherlands: SRON, TUD; Poland: CAMK, CBK; Spain: Observatorio Astronómico Nacional (IGN), Centro de Astrobiología (CSIC-INTA). Sweden: Chalmers University of Technology – MC2, RSS & GARD; Onsala Space Observatory; Swedish National Space Board, Stockholm University – Stockholm Observatory; Switzerland: ETH Zurich, FHNW; USA: Caltech, JPL, NHSC. We thank many funding agencies for financial support. L.W. thanks the COST "Chemical Cosmos" program, as well as the CNRS national program "Physique et Chimie du Milieu Interstellaire" for partial support. The collision coefficients calculations presented in this paper were performed at the Service Commun de Calcul Intensif de l'Observatoire de Grenoble (SCCI).

References

Atkinson, R., Baulch, D. L., Cox, R. A., et al. 2004, Atmos. Chem. Phys., 4, 1461
Bacmann, A., Lefloch, B., Ceccarelli, C., et al. 2002, A&A, 389, L6
Bacmann, A., Lefloch, B., Ceccarelli, C., et al. 2003, ApJ, 585, L55
Bacmann, A., Lefloch, B., Parise, B., Ceccarelli, C., & Steinacker, J. 2007, in Molecules in Space and Laboratory
Bacmann, A., Caux, E., Hily-Blant, P., et al. 2010, A&A, 521, L42
Bates, D. R. 1986, ApJ, 306, L45
Bergin, E. A., & Snell, R. L. 2002, ApJ, 581, L105
Bergin, E. A., Phillips, T. G., Comito, C., et al. 2010, A&A, 521, L20
Bockelée-Morvan, D., Gautier, D., Lis, D. C., et al. 1998, Icarus, 133, 147

[6] Atacama Large Millimeter Array.

Bottinelli, S., Ceccarelli, C., Neri, R., et al. 2004, ApJ, 617, L69
Butner, H. M., Charnley, S. B., Ceccarelli, C., et al. 2007, ApJ, 659, L137
Caselli, P., Walmsley, C. M., Tafalla, M., Dore, L., & Myers, P. C. 1999, ApJ, 523, L165
Caselli, P., Keto, E., Pagani, L., et al. 2010, A&A, 521, L29
Castets, A., Ceccarelli, C., Loinard, L., Caux, E., & Lefloch, B. 2001, A&A, 375, 40
Caux, E., Ceccarelli, C., Castets, A., et al. 1999, A&A, 347, L1
Caux, E., Kahane, C., Castets, A., et al. 2011, A&A, 532, A23
Cazaux, S., Tielens, A. G. G. M., Ceccarelli, C., et al. 2003, ApJ, 593, L51
Cazaux, S., Caselli, P., & Spaans, M. 2011, ApJ, 741, L34
Ceccarelli, C., Hollenbach, D. J., & Tielens, A. G. G. M. 1996, ApJ, 471, 400
Ceccarelli, C., Castets, A., Loinard, L., Caux, E., & Tielens, A. G. G. M. 1998, A&A, 338, L43
Ceccarelli, C., Caux, E., Loinard, L., et al. 1999, A&A, 342, L21
Ceccarelli, C., Castets, A., Caux, E., et al. 2000a, A&A, 355, 1129
Ceccarelli, C., Loinard, L., Castets, A., Tielens, A. G. G. M., & Caux, E. 2000b, A&A, 357, L9
Ceccarelli, C., Loinard, L., Castets, A., et al. 2001, A&A, 372, 998
Ceccarelli, C., Bacmann, A., Boogert, A., et al. 2010, A&A, 521, L22
Chandler, C. J., Brogan, C. L., Shirley, Y. L., & Loinard, L. 2005, ApJ, 632, 371
Crimier, N., Ceccarelli, C., Maret, S., et al. 2010, A&A, 519, A65
Cuppen, H. M., Ioppolo, S., Romanzin, C., & Linnartz, H. 2010, Phys. Chem. Chem. Phys. (Incorporating Faraday Transactions), 12, 12077
Dartois, E., Thi, W.-F., Geballe, T. R., et al. 2003, A&A, 399, 1009
de Graauw, T., Helmich, F. P., Phillips, T. G., et al. 2010, A&A, 518, L6
Demyk, K., Bottinelli, S., Caux, E., et al. 2010, A&A, 517, A17
Dulieu, F., Amiaud, L., Congiu, E., et al. 2010, A&A, 512, A30
Faure, A., Crimier, N., Ceccarelli, C., et al. 2007, A&A, 472, 1029
Faure, A., Wiesenfeld, L., Scribano, Y., & Ceccarelli, C. 2012, MNRAS, 420, 699
Fraser, H. J., Collings, M. P., McCoustra, M. R. S., & Williams, D. A. 2001, MNRAS, 327, 1165
Frerking, M. A., Langer, W. D., & Wilson, R. W. 1982, ApJ, 262, 590
Gensheimer, P. D., Mauersberger, R., & Wilson, T. L. 1996, A&A, 314, 281
Green, S. 1989, ApJS, 70, 813
Hartogh, P., Lis, D. C., Bockelée-Morvan, D., et al. 2011, Nature, 478, 218
Helmich, F. P., van Dishoeck, E. F., & Jansen, D. J. 1996, A&A, 313, 657
Hewitt, A. J., Doss, N., Zobov, N. F., Polyansky, O. L., & Tennyson, J. 2005, MNRAS, 356, 1123
Hogerheijde, M. R., & van der Tak, F. F. S. 2000, A&A, 362, 697
Hollenbach, D., & McKee, C. F. 1989, ApJ, 342, 306
Hollenbach, D., Kaufman, M. J., Bergin, E. A., & Melnick, G. J. 2009, ApJ, 690, 1497
Jacq, T., Walmsley, C. M., Henkel, C., et al. 1990, A&A, 228, 447
Jones, A. P., & Williams, D. A. 1984, MNRAS, 209, 955
Jørgensen, J. K., & van Dishoeck, E. F. 2010, ApJ, 725, L172
Jørgensen, J. K., Schöier, F. L., & van Dishoeck, E. F. 2004, A&A, 416, 603
Jørgensen, J. K., Schöier, F. L., & van Dishoeck, E. F. 2005, A&A, 437, 501
Jørgensen, J. K., Bourke, T. L., Nguyn Lu'O'Ng, Q., & Takakuwa, S. 2011, A&A, 534, A100
Knude, J., & Hog, E. 1998, A&A, 338, 897
Kristensen, L. E., Visser, R., van Dishoeck, E. F., et al. 2010, A&A, 521, L30
Lampton, M., Margon, B., & Bowyer, S. 1976, ApJ, 208, 177
Lecuyer, C., Gillet, P., & Robert, F. 1998, Chem. Geol., 145, 249
Lefloch, B., Cabrit, S., Codella, C., et al. 2010, A&A, 518, L113
Liseau, R., Ceccarelli, C., Larsson, B., et al. 1996, A&A, 315, L181
Liu, F., Parise, B., Kristensen, L., et al. 2011, A&A, 527, A19
Loinard, L., Castets, A., Ceccarelli, C., Caux, E., & Tielens, A. G. G. M. 2001, ApJ, 552, L163
Loinard, L., Torres, R. M., Mioduszewski, A. J., & Rodríguez, L. F. 2008, ApJ, 675, L29
Melnick, G. J., Ashby, M. L. N., Plume, R., et al. 2000, ApJ, 539, L87
Mokrane, H., Chaabouni, H., Accolla, M., et al. 2009, ApJ, 705, L195
Morbidelli, A., Chambers, J., Lunine, J. I., et al. 2000, Meteor. Planet. Sci., 35, 1309
Müller, H. S. P., Thorwirth, S., Roth, D. A., & Winnewisser, G. 2001, A&A, 370, L49
Müller, H. S. P., Schlöder, F., Stutzki, J., & Winnewisser, G. 2005, J. Mol. Struct., 742, 215
Ott, S. 2010, in Astronomical Data Analysis Software and Systems XIX, ASP Conf. Ser., 434, 139
Parise, B., Simon, T., Caux, E., et al. 2003, A&A, 410, 897
Parise, B., Castets, A., Herbst, E., et al. 2004, A&A, 416, 159
Parise, B., Caux, E., Castets, A., et al. 2005, A&A, 431, 547
Persson, C. M., Olofsson, A. O. H., Koning, N., et al. 2007, A&A, 476, 807
Pickett, H. M., Poynter, R. L., Cohen, E. A., et al. 1998, J. Quant. Spec. Radiat. Transf., 60, 883
Pilbratt, G. L., Riedinger, J. R., Passvogel, T., et al. 2010, A&A, 518, L1
Raymond, S. N., Quinn, T., & Lunine, J. I. 2004, Icarus, 168, 1
Rodgers, S. D., & Charnley, S. B. 2002, Planet. Space Sci., 50, 1125
Roelfsema, P. R., Helmich, F. P., Teyssier, D., et al. 2012, A&A, 537, A17
Schöier, F. L., Jørgensen, J. K., van Dishoeck, E. F., & Blake, G. A. 2004, A&A, 418, 185
Scribano, Y., Faure, A., & Wiesenfeld, L. 2010, J. Chem. Phys., 133, 231105
Shu, F. H. 1977, ApJ, 214, 488
Solomon, P. M., & Woolf, N. J. 1973, ApJ, 180, L89
Stark, R., Sandell, G., Beck, S. C., et al. 2004, ApJ, 608, 341
Tielens, A. G. G. M., & Hagen, W. 1982, A&A, 114, 245
van Dishoeck, E. F., Blake, G. A., Jansen, D. J., & Groesbeck, T. D. 1995, ApJ, 447, 760
van Kempen, T. A., Doty, S. D., van Dishoeck, E. F., Hogerheijde, M. R., & Jørgensen, J. K. 2008, A&A, 487, 975
Vastel, C., Ceccarelli, C., Caux, E., et al. 2010, A&A, 521, L31
Villanueva, G. L., Mumma, M. J., Bonev, B. P., et al. 2009, ApJ, 690, L5
Wagner, A. F., & Graff, M. M. 1987, ApJ, 317, 423
Wiesenfeld, L., Scribano, Y., & Faure, A. 2011, Phys. Chem. Chem. Phys. (Incorporating Faraday Transactions), 13, 8230
Wilson, T. L., & Rood, R. 1994, ARA&A, 32, 191
Wootten, A. 1989, ApJ, 337, 858
Wouterloot, J. G. A., Henkel, C., Brand, J., & Davis, G. R. 2008, A&A, 487, 237
Yeh, S. C. C., Hirano, N., Bourke, T. L., et al. 2008, ApJ, 675, 454

A&A 532, A23 (2011)
DOI: 10.1051/0004-6361/201015399
© ESO 2011

Astronomy & Astrophysics

TIMASSS: the IRAS 16293-2422 millimeter and submillimeter spectral survey⋆,⋆⋆,⋆⋆⋆

I. Observations, calibration, and analysis of the line kinematics

E. Caux[1,2], C. Kahane[3], A. Castets[4,5,3], A. Coutens[1,2], C. Ceccarelli[3], A. Bacmann[4,5,3], S. Bisschop[6,7], S. Bottinelli[1,2], C. Comito[8], F. P. Helmich[9], B. Lefloch[3], B. Parise[8], P. Schilke[8,10], A. G. G. M. Tielens[6,9,11], E. van Dishoeck[6,12], C. Vastel[1,2], V. Wakelam[4,5], and A. Walters[1,2]

[1] Université de Toulouse, UPS-OMP, IRAP, Toulouse, France
e-mail: caux@cesr.fr
[2] CNRS, IRAP, 9 Av. colonel Roche, BP 44346, 31028 Toulouse Cedex 4, France
[3] Laboratoire d'Astrophysique de Grenoble, UMR 5571-CNRS, Université Joseph Fourier, Grenoble, France
[4] Université de Bordeaux, Laboratoire d'Astrophysique de Bordeaux, 33000 Bordeaux, France
[5] CNRS/INSU, UMR 5804, BP 89, 33271 Floirac Cedex, France
[6] Leiden Observatory, Leiden University, PO Box 9513, 2300 RA Leiden, The Netherlands
[7] Center for Star and Planet Formation, University of Copenhagen, Oster Voldgade 5-7, 1350 Copenhagen, Denmark
[8] Max-Planck-Institut für Radioastronomie, Auf dem Hürgel 69, 53121 Bonn, Germany
[9] SRON Netherlands Institute for Space Research, PO Box 800, 9700 AV, Groningen, The Netherlands
[10] I. Physikalisches Institut, Universität zu Kföln, Zülpicher Str. 77, 50937 Köln, Germany
[11] Kapteyn Astronomical Institute, University of Groningen, PO box 800, 9700 AV Groningen, The Netherlands
[12] Max-Planck Institute für Extraterrestrische Physik, Giessenbachstr. 1, 85748 Garching, Germany

Received 15 July 2010 / Accepted 22 March 2011

ABSTRACT

Context. Unbiased spectral surveys are powerful tools to study the chemistry and the physics of star forming regions, because they can provide a complete census of the molecular content and the observed lines probe the physical structure of the source.
Aims. While unbiased surveys at the millimeter and sub-millimeter wavelengths observable from ground-based telescopes have previously been performed towards several high mass protostars, very little exists on low mass protostars, which are believed to resemble our own Sun's progenitor. To help fill up this gap in our understanding, we carried out a complete spectral survey of the bands at 3, 2, 1, and 0.9 mm towards the solar type protostar IRAS 16293-2422.
Methods. The observations covered a range of about 200 GHz and were obtained with the IRAM-30 m and JCMT-15 m telescopes during about 300 h of observations. Particular attention was devoted to the inter-calibration of the acquired spectra with previous observations. All the lines detected with more than 3σ confidence-interval certainty and free from obvious blending effects were fitted with Gaussians to estimate their basic kinematic properties.
Results. More than 4000 lines were detected (with $\sigma \geq 3$) and identified, yielding a line density of approximatively 20 lines per GHz, comparable to previous surveys in massive hot cores. The vast majority (about two-thirds) of the lines are weak and produced by complex organic molecules. The analysis of the profiles of more than 1000 lines belonging to 70 species firmly establishes the presence of two distinct velocity components associated with the two objects, A and B, forming the IRAS 16293-2422 binary system. In the source A, the line widths of several species increase with the upper level energy of the transition, a behavior compatible with gas infalling towards a $\sim$1 $M_{\odot}$ object. The source B, which does not show this effect, might have a much lower central mass of $\sim$0.1 $M_{\odot}$. The difference in the rest velocities of both objects is consistent with the hypothesis that the source B rotates around the source A.
Conclusions. This spectral survey, although obtained with single-dish telescopes at a low spatial resolution, allows us to separate the emission from two different components, thanks to the large number of lines detected. The data of the survey are public and can be retrieved on the TIMASSS web site⋆⋆⋆⋆.

Key words. stars: protostars – molecular data – line: identification – astrochemistry

1. Introduction

The chemical composition of the gas from which the star forms is well known to influence the process of the star formation and be, in turn, influenced by the process itself. The first obvious example is that the Jeans mass depends on the gas temperature, which, in turn, is set by the molecular line cooling accross a large

⋆ Based on observations with the IRAM-30 m telescope (IRAM is supported by INSU/CNRS (France), MPG (Germany) and IGN (Spain)), and with the JCMT-15 m telescope (operated by the Joint Astronomy Centre on behalf of the Particle Physics and Astronomy Research Council of the United Kingdom, the Netherlands Organisation of Scientific Research, and the National Research Council of Canada).
⋆⋆ Tables 2–4 are available in electronic form at http://www.aanda.org
⋆⋆⋆ Survey data is available at the CDS via anonymous ftp to cdsarc.u-strasbg.fr (130.79.128.5) or via http://cdsarc.u-strasbg.fr/viz-bin/qcat?J/A+A/532/A23
⋆⋆⋆⋆ http://www-laog.obs.ujf-grenoble.fr/heberges/timasss

range of densities and temperatures. The chemical composition of the gas is of paramount importance because the cooling is dominated by different species as a function of the gas temperature and density and the elemental abundance (Goldsmith 2001). A second classical example is the slow contraction of the prestellar cores, which is governed by ambipolar diffusion. Since only ions feel the magnetic field that counteracts the gravitational force, the chemical composition of the gas, which determines the ion abundance, is crucial. In addition to this, since the gas chemical composition is largely affected by the star formation process, its study in star forming regions is a powerful diagnostic tool to identify the various processes at work. Finally, the study of the chemical composition in regions forming solar-type stars is of particular importance, as it helps us to understand the formation history of our own Solar System. For example, the comparison of the chemical composition of comets with that of solar-type protostars or protoplanetary disks is used to help ascertain the origin of the former (Crovisier et al. 2004). The same applies to the studies of the molecular content of meteorites. In particular, the claim that the amino acids found in carbonaceous meteorites may have formed during the first phases of the life of the Solar System is based on the measured large deuteration in the meteoritic amino acids and in the protostellar environment (Pizzarello & Huang 2005). In this context, unbiased spectral surveys at millimeter and submillimeter wavelengths are particularly relevant as they allow us to detect heavy and large molecules, and, specifically, complex organic molecules. In summary, unbiased spectral surveys at the millimeter to submillimeter wavelengths are a powerful method to characterize the molecular content of astrophysical objects, and the only way to obtain a complete census of the chemical species.

There are at least two other aspects that make unbiased spectral surveys precious tools for studying the star formation process. First, in general they provide multiple lines from the same molecule, allowing multi-frequency analysis and modeling. Since different lines from transitions with different upper level energies and Einstein coefficients are excited at different temperatures and densities, they probe different regions in the line of sight. A careful analysis can, therefore, distinguish between the various physical components in the beam. If one also adds the kinematic information provided by the line profiles, the method can be so powerful that it can identify sub-structures along the line of sight, even if the spatial resolution of the observations is inadequate. In the present article, we provide an example of this capability of unbiased spectral surveys.

Given their powerful diagnostic ability, several unbiased spectral surveys in the millimeter and sub-millimeter bands accessible from ground have been obtained in the past in the direction of star forming regions. A complete list of these surveys can be found in Herbst & van Dishoeck (2009). By far the most targeted sources are hot cores, the regions of high-mass protostar formation, where the dust temperature exceeds the sublimation temperature of the water-ice grain mantles, ~100 K. The combined effect of the mantle sublimation and the high gas temperature triggers a singular and rich chemistry. At the same time, the relatively high densities ($\geq 10^7$ cm^{-3}) and temperatures ($\geq$100 K) are favorable for the excitation of several high lying transitions. The result is that extremely rich spectra are observed towards the hot cores. About a dozen hot cores have been targeted in different bands (Schilke et al. 1997; Helmich & van Dishoeck 1997; Hatchell et al. 1998; Schilke et al. 2001; Tercero et al. 2010). One of the most studied hot cores is the Orion-KL source. Spectral surveys covering almost all the bands accessible from the ground have been obtained, from about 80 to 900 GHz, detecting thousands of lines from hundreds of species and relative isotopologues (see for instance Schilke et al. 1997; Lee et al. 2001; Comito et al. 2005; Olofsson et al. 2007; Demyk et al. 2007; Carvajal et al. 2009; Margulès et al. 2009; Tercero et al. 2010, and references therein). In addition, the 500–2000 GHz range is observed with the HIFI spectrometer (de Graauw et al. 2010) on board the recently launched *Herschel*[1] satellite (Pilbratt et al. 2010), in the Key Program HEXOS[2]. Similarly, the 500–2000 GHz range is observed in other hot cores, as part of the Key Program CHESS[3] (*Chemical Herschel Surveys of Star forming regions*). Preliminary results of the surveys performed in these two *Herschel* Key Programs can be found in Bergin et al. (2010) and Ceccarelli et al. (2010), respectively.

Although being both less massive and less luminous, solar-type protostars also possess regions where the dust mantles sublimate, yielding similar properties as those of hot cores (see Ceccarelli 2007, and references therein). These regions have been baptized hot corinos, to highlight that they share similarities with hot cores but are not just scaled-down versions of them (see also Bottinelli et al. 2007). The interest in observing hot corinos, whose sizes are comparable to the Solar System sizes, is amplified by there being likely to resemble the Solar Nebula. In other words, their study corresponds to an archeological study of the ancestor of our Solar System.

So far, only one (partial) spectral survey has been obtained towards a solar-type protostar (Blake et al. 1994; van Dishoeck et al. 1995). The targeted source was IRAS 16293-2422 (hereinafter IRAS 16293), in the L1689N cloud (d = 120 pc, Loinard et al. 2008). This survey partially covered the two windows in the 200 GHz and 350 GHz bands accessible from the ground, and was obtained with the JCMT and CSO telescopes. The sensitivity achieved (~40 mK) allowed the detection of 265 lines from 24 species, namely the most abundant molecules CO, H_2CO, CH_3OH, SO, SO_2 etc. Later, more sensitive observations have demonstrated that the IRAS 16293 line spectrum is rich in complex organic molecules (Ceccarelli et al. 2000b; Cazaux et al. 2003), and doubly (Ceccarelli et al. 1998) and triply (Parise et al. 2004) deuterated molecules. Additional support for an unbiased spectral survey towards IRAS 16293 is provided by the *Herschel*/HIFI data in the 555–636 GHz range which shows that, while IRAS 16293 has much fewer lines than the 2×10^6 $L_\odot$ source NGC 6334I, the same number of species is detected in both sources (Ceccarelli et al. 2010).

Several studies have been carried out towards IRAS 16293, with both single dish telescopes and interferometers. The emerging overall picture is that IRAS 16293 is a protobinary system (Wootten 1989; Mundy et al. 1992) surrounded by an envelope of about 2 $M_\odot$ (Crimier et al. 2010). The structure of the envelope has been the target of several studies (Ceccarelli et al. 2000a; Schöier et al. 2002; Jørgensen et al. 2005). Crimier et al. (2010) concludes that the envelope density follows a r^{-2} power law at distances larger than about 1300 AU and $r^{-3/2}$ innerwards. The grain mantles are predicted to sublimate at a distance of 75 AU, where the density is equal to 2×10^8 cm^{-3}. The envelope extends from about 25 AU to about 6000 AU from the center. Inside the envelope, the two sources, A (south-east) and B (north-west), of the binary system are separated by about 4″ (separation being measured from interferometer observations at

[1] *Herschel* is an ESA space observatory with science instruments provided by European-led principal Investigator consortia and with important participation from NASA.

[2] http://www.submm.caltech.edu/hexos/

[3] http://www-laog.obs.ujf-grenoble.fr/heberges/chess/

a spatial resolution of about 1″), which is equivalent to a linear distance of 480 AU. The source B is brighter than the source A in the millimeter continuum and in several "cold envelope" molecular lines, whereas the source A seems to be brighter in several hot-corino-like molecular lines (Kuan et al. 2004; Bottinelli et al. 2004; Chandler et al. 2005). Finally, Chandler et al. (2005) have claimed that source A might be a multiple system and the observations of Pech et al. (2010) suggest that A is itself a binary system of 0.5 $M_{\odot}$ and 1.5 $M_{\odot}$, respectively.

Despite its relatively complex structure at arcsec scales, IRAS 16293 remains the brightest and most appropriate source to carry out a detailed study of the gas chemical composition in the first phases of the formation of a solar-type star. As discussed above, the best way for that is to obtain unbiased spectral surveys, that are as sensitive as possible. In this paper, we present the results of the most sensitive unbiased spectral survey of the bands between 80 and 366 GHz observable from ground-based telescopes obtained so far in the direction of IRAS 16293. This study is part of a more general project to also observe the 500–2000 GHz frequency range with the spectrometer HIFI on board the *Herschel* satellite, in the context of the *Herschel* Key Program CHESS[4] (Ceccarelli et al. 2010).

2. Observations

The observations were obtained at the IRAM-30 m (frequency range 80–280 GHz) and JCMT-15 m (frequency range 328–366 GHz) telescopes during the period between January 2004 and August 2006. Overall, the observations required a total of about 300 h (~200 h at IRAM and ~100 h at JCMT) of observing time. The beam of the survey varied between 9″ and 33″, depending on the telescope used and the frequency, and the spectral resolution ranged between 0.3 and 1.25 MHz, corresponding to velocity resolutions between 0.51 and 2.25 km s^{-1}. The achieved rms varied between 4 and 14 mK in 1.5 km s^{-1} bins. The observations were centered on the B (north-west) component at $\alpha(2000.0) = 16^{h}32^{m}22.6^{m}$, $\delta(2000.0) = -24°28'33'$. The A and B components, separated by 4″, are both inside the beam of our observations at all frequencies. However, at the highest frequencies observed with the IRAM 30 m telescope (i.e. the 1 mm band), the attenuation of emission from source A is not negligible as we discuss in Sect. 5. All observations were performed in DBS (Double-Beam-Switch) observing mode, with a 90″ throw. The pointing and focus were checked every two hours on planets or on continuum radio sources (1741-038 or 1730-130). Table 1 summarizes the observed bands and the details of the observations. Because of the different weather conditions during the different runs, the system temperatures widely varied. However, during the data processing, scans with too high system temperatures were removed before averaging.

2.1. IRAM observations

The following three bands were almost fully covered by observations at the IRAM-30 m telescope: 3 mm band (80–115.5 GHz), 2 mm band (129–177.5 GHz), and 1 mm band (198–281.5 GHz).

In all IRAM-30 m observations, two frequency ranges were observed simultaneously, with two SIS receivers with orthogonal polarizations for each frequency range, in the following configuration: 3 mm receivers (A100 & B100) in parallel with 1 mm receivers (A230 & B230), and 2 mm receivers (C150 & D150) in parallel with 1 mm receivers (C270 & D270). Because of the limitation (at the time of the observations) of the IRAM-30 m backend capabilities in terms of instantaneous frequency bandwidth and spectral resolution, we chose the largest possible spectral bandwidth to cover the IRAM-30 m bands in the smallest observing time. For simultaneous observations in the 3 mm and 1 mm bands, the VESPA autocorrelator was split into four parts, two of them covering the whole IF band of the A&B100 receivers (0.5 GHz) with 320 kHz spectral resolution and the two others covering half of the IF band of the A&B230 receivers (1 GHz) with 1250 kHz spectral resolution. The second half of the IF band of the A&B230 receivers was covered with the 1 MHz filter banks (FB). For simultaneous observations in the 2 mm and upper 1 mm bands, the VESPA autocorrelator was split into four parts, two of them covering half of the IF band of the C&D150 receivers (0.5 GHz) with 320 kHz sampling and the two others covering half of the IF band of the C&D270 receivers (1 GHz) with 1250 kHz sampling. The second half of the IF band of the C&D150 receivers was covered with the 1 MHz FB.

The configuration for observations in the 2 mm band resulted in different spectral resolutions for each half of the IF band of the receivers (320 kHz ~ 0.65 km s^{-1} and 1 MHz ~ 2 km s^{-1}). Therefore, we shifted the tuning frequency of the receivers by only 0.5 GHz from one tuning to the next one to cover the entire 2 mm band at the highest and at the lowest spectral resolution, respectively. As a consequence, two different datasets were obtained, one at high resolution (generally used for studying brighter lines), and one at low resolution (for the faint lines).

2.2. JCMT observations

The JCMT-15 m observations covered the 328 to 366 GHz frequency range. They were obtained with a 345 GHz SIS receiver RxB3 used in dual-channel single-sideband (SSB) mode. Each polarization of the receiver was connected to a unit of the ACSIS autocorrelator providing a bandwidth of 0.5 GHz for a spectral resolution of 625 kHz. At 345 GHz, this yields a velocity resolution of about 0.5 km s^{-1}.

3. Calibration

3.1. Method

At the IRAM-30 m telescope, the calibration was performed with a cold and a warm absorbers, and the atmospheric opacity was obtained using the ATM program (Cernicharo 1985, IRAM internal report). At the JCMT-15 m, line strengths were calibrated via the chopper wheel method (Kutner & Ulich 1981).

Our spectral survey does not allow us to estimate the calibration uncertainties from line observation redundancy: each spectral range was observed only once and there is only negligible frequency overlap between adjacent spectra. From our simultaneous observations with two receivers in the 1 mm range, we may estimate the receiver contribution, but to derive the total calibration uncertainties of the survey, we performed a detailed comparison between our own and previous observations. As our comparisons rely only on observations obtained with the same telescopes towards the same position (namely source B), no bias is caused by the different source dilution in the beams and our results are unaffected by the underestimate of source A contribution at high frequency. The comparison includes virtually all the published data towards IRAS 16293 obtained with the IRAM-30 m and the JCMT-15 m telescopes, as well as unpublished data obtained with the IRAM-30 m telescope. The list of the

[4] http://www-laog.obs.ujf-grenoble.fr/heberges/chess/

Table 1. Parameters of the observations at IRAM-30 m and JCMT-15 m telescopes.

Telescope	Frequency (GHz)	Resolution (MHz)	Resolution (km s^{-1})	Backend[1]	rms[2] (mK)	T_{sys} (K)	HPBW (arcsec)	Beam efficiency	σ_{cal}[3] (%)	N_{cal}[4] lines	P_{cal}[5] (%)
IRAM	80–115.5	0.32	0.81–1.17	VESPA	4–8	90–400	30–21	0.80–0.78	11	28	15
IRAM	129–177	0.32	0.53–0.72	VESPA	5–14	200–1000	19–14	0.76–0.69	17	22	12
IRAM		1.0	1.65–2.25	1 MHz FB					10[(6)]	84[(6)]	95[(6)]
IRAM	197–265	1.0	1.13–1.52	1 MHz FB	7–13	180–1200	12–9	0.65–0.51	17	36	10
IRAM		1.25	1.41–1.90	VESPA							
IRAM	265–280	1.25	1.34–1.41	VESPA	9–17	470–4200	9	0.51–0.47			
JCMT	328–366	0.625	0.51–0.57	ACSIS	4–9	90–400	14	0.56–0.53	18	26	25

Notes. [(1)] In the 2 mm band, each frequency setting is observed twice, i.e. once at each of the two spectral resolutions (0.32 and 1 MHz), while in the 197–265 GHz band, each frequency setting is observed only one time, at a slightly different spectral resolution (1 or 1.25 MHz), [(2)] rms is given in 1.5 km s^{-1} bins, [(3)] σ_{Cal} is the calibration uncertainty, [(4)] N_{cal} is the number of compared lines for calibration purposes, [(5)] P_{cal} is the percentage of compared spectra for calibration purposes, [(6)] these values refer to the "internal" comparison between VESPA and 1 MHz FB spectra simultaneously observed; the other ones refer to "external" comparisons with published or previously obtained observations.

articles used for this comparison is the following: *a) IRAM-30 m bands:* Ceccarelli et al. (1998), Loinard et al. (2000), Cazaux et al. (2003), Wakelam et al. (2004), Parise et al. (2002), and Parise et al. (2005b); *b) JCMT-15 m band:* Blake et al. (1994), van Dishoeck et al. (1995), Loinard et al. (2000), Schöier et al. (2002), and Parise et al. (2004). Table 1 reports the percentage of the survey spectra that could be cross-checked and calibrated against previously published data for each band. In addition, we cross-checked the calibration in the 2 mm band by comparing the data obtained with 1 MHz and 320 kHz resolution. Finally, we estimated the calibration uncertainty produced by the receivers by comparing lines in the 1 mm band observed with the two receivers A230 and B230.

To quantify the differences, we obtained Gaussian fits of the lines and compared their characteristics (integrated intensity, peak intensity, and full width at half maximum *FWHM*), with the previously published values. The comparison was performed in the main beam brightness scale (T_{mb}) based on the T_A^*/T_{mb} beam efficiency factors given in Table1. This method provides two types of check: i) the average uncertainty for each band; and ii) possible specific calibration problems on single settings.

3.2. Calibration uncertainties

With the method described above to quantify the calibration uncertainty in the survey, we obtained the following results.

FWHM: In all the frequency ranges, except 1mm, the agreement between the survey and the published *FWHM* values is within 15–20% and no systematic trend is observed. In contrast, in the 1 mm band the *FWHM* of the survey lines appears to be systematically broader by ≃1 km s^{-1} than the published values. This is likely due to the relatively poorer spectral resolution of our survey in this range (0.8 to 1.9 km s^{-1}) compared to the linewidths (on average ≃4–5 km s^{-1}).

Integrated and peak intensity: The comparison of the integrated and peak intensity of the lines of the survey with published values yields the same results, when the difference due to the spectral resolution described above is taken into account. In addition, since the derivation of the integrated intensities does not depend on the line shape, we choose to quantify the calibration uncertainties by comparing the integrated line intensities.

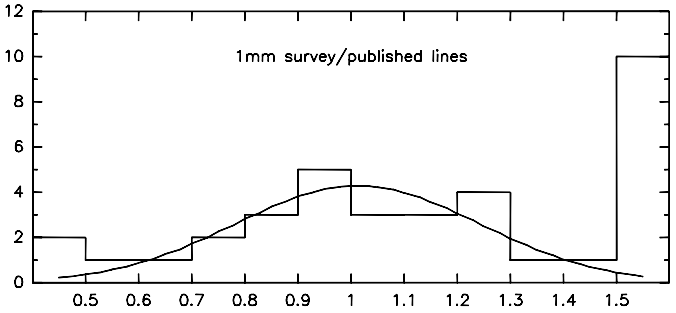


Fig. 1. Distribution of integrated intensity ratios of this survey's 1 mm lines compared to published observations obtained with the IRAM 30 m telescope. The curve is a Gaussian fit to the histogram ruling out the "anomalous" ratios (≤0.5 or ≥1.5). It can be noticed that the 12 "anomalous" ratios correspond to only 7 "anomalous spectra" among the 165 spectra observed in the 1 mm range.

Derived uncertainties: We can derive an estimate of the calibration uncertainty from the distribution of the integrated intensity ratios. Figure 1 shows the result for the 1 mm band. If one excludes the two extremes at ≤0.5 and ≥1.5, which correspond to spectra with "anomalous intensity", the ratio distribution can be fitted by a Gaussian with a mean value of R, very close to one and a standard deviation σ_{ratio}. On the basis of the assumption that the relative uncertainties in the published intensities, σ_{pub}, and on the survey line intensities, σ_{cal}, are independent variables, the error propagation formula implies that:

$$\sigma^2_{ratio} = R^2(\sigma^2_{cal} + \sigma^2_{pub}). \quad (1)$$

Most publications report calibration uncertainties of 15% (or do not report any estimate). Except in the 3 mm frequency range, where our comparisons suggest that the calibration uncertainty is probably somewhat smaller than 15%, we obtain consistent uncertainties assuming either that $\sigma_{pub} = 15\%$ for all the frequency ranges or that our observations are representative of average observation conditions in each frequency range, i.e., $\sigma_{pub} = \sigma_{cal}$ and thus $\sigma^2_{cal} \simeq \sigma^2_{ratio}/2$. Table 1 reports the resulting calibration uncertainties for each observed band.

We note that at 2 mm, the "external" comparisons with published spectra, which include all uncertainty factors, lead to higher values than "internal" comparisons between the VESPA and 1 MHz FB simultaneous observations, which take into account only the contribution of the backends. Similarly, at 1 mm, a comparison of the line intensities observed simultaneously with

the two receivers A230 and B230 shows that the receivers' contribution to the calibration uncertainties is approximately 10%, whereas the total calibration uncertainty is 17%.

Finally, the full list of lines used for the calibration comparison is reported in the on line material, in Table 2 for a comparison between the survey lines and previous observations obtained with the same telescopes and in Table 3 for a comparison between the survey lines observed simultaneously with VESPA and the 1 MHz filter bank at the IRAM-30 m telescope.

4. Data release

The data are made publicly available on the TIMASSS web site[5]. The site provides the files with the IRAM-30 m and JCMT-15 m data in CLASS format[6]. The intensities are in $T_A{}^*$. On the basis of the discussion of the previous section, the potential user is highly recommended to verify the calibration uncertainty in the data that she/he wants to use by looking at Tables 2 and 3. We emphasize that we did not apply any "rescaling" factor to the survey data because the difference may be caused by an incorrect calibration of the published rather than the survey data. Only a very careful scientific analysis can assess what is the most likely explanation. It is, therefore, the user's responsibility to verify that the data are correctly used, based on the information provided at the web site.

5. Results

5.1. Overall survey

Figure 2 shows the full survey in the four bands and the richness of the IRAS 16293 line spectrum. About 20 lines per GHz on average have been detected with a signal-to-noise ratio S/N higher than three in the 220 GHz frequency range covered by the survey. The line density seems to increase slightly with frequency: there are 17 lines/GHz in the 3 mm band, 19 and 23 lines/GHz in the 2 mm and 1 mm ranges respectively, and as many as 26 lines/GHz in the 0.9 mm range.

To quantify more rigorously the lines and species detected in the survey, we made Gaussian fits and line identification using the CASSIS[7] package. The spectroscopic data come from the CDMS and JPL databases (Müller et al. 2001, 2005; Pickett et al. 1998, and references quoted on the databases to data producers for each species). In a few cases (ortho and para H_2CO for instance), a specific database with each form separated has been used (see the CASSIS[7] web site). For the D-bearing isotopologues of methanol, only the lines reported by Parise et al. (2002, 2004) are included in this paper.

Hereinafter we only consider lines identified according to the following criteria: i) lines belonging to species included in the JPL and CDMS databases or to the D-bearing isotopologues of methanol, ii) lines detected with a certainty of more than 3σ in the integrated line intensity, iii) unblended lines, and iv) lines with upper level energies E_{up} lower than 250 K. This last condition only limits the number of methanol lines in this analysis, since lines of other molecules with E_{up} higher than 250 K are in any case too weak to be detected by our survey. When applying these criteria, we end up with ~1000 lines listed in Table 4. In the table, we report the line identification together with the result of the Gaussian fit of each line (see also Sect. 5.3).

Figure 3 shows the line densities, which are limited to the lines satisfying the above criteria, in each of the four survey frequency ranges, for various signal-to-noise ratios. In the 3 mm and 2 mm ranges, these densities are a factor of between two and three smaller than the estimates of the total densities including blended lines. This effect is even stronger in the 1 mm and 0.9 mm ranges, where the lack of weak lines ($3 \leqslant S/N < 10$) is particularly striking in Fig. 3. This is a bias due to our selection criterion of non-blended lines, as these frequency ranges are rich in lines from large molecules, which emit many weak lines, so that our unblended line criterion filters out a large fraction of these lines of moderate S/N. In contrast, the 2 mm range, which benefits from a better spectral resolution compared to the 3 mm and 1 mm ranges, is less affected by this selection effect.

Most of the lines retained in the 1 mm and 0.9 mm ranges and a large fraction (≃2/3) of the lines retained in the 3 mm and 2 mm ranges have a high S/N (⩾10). The density of lines with such high S/N is relatively constant in frequency and equal to ≃4−5 GHz.

When comparing with the line density quoted at the beginning of the section, namely about 20 lines per GHz, obtained considering lines with $S/N \geq 3$ but no other filter, clearly the introduction of the other criteria, unblended lines and, to a lesser degree, identified lines and $E_{up} \leq 250$ K, severely underestimates the line content.

The line intensity spans more than three orders of magnitude, from 10 mK to 24 K. The number of lines showing an integrated intensity higher than a given threshold is given in Fig. 4. For integrated intensity ranging between 1 and 30 K km s^{-1}, the distribution roughly follows a power law of slope –0.9. The power law breaks down in the high and low end of the distribution. This slope is identical to those observed by Schilke et al. (2001), White et al. (2003), and Comito et al. (2005), in their submillimeter surveys of Orion-KL. As found by these surveys, this slope does not provide a good fit for the brightest and the weakest lines.

5.2. Detected lines and species

Table 5 lists the species detected and identified in the survey, (see below).

In the framework of a survey analysis restricted to the four line criteria mentioned above, 69 different molecules (including ions) have been detected. They correspond to 32 distinct chemical species and include 37 rare isotopologues. They are listed in Table 5 which gives the number of lines detected for each species, the range of upper level energy of the lines and observational quantities. Among the ~1000 lines in Table 5, about half belong to only three species: CH_3HCO, $HCOOCH_3$, and CH_3OH.

Most of the 4000 lines detected in our survey belong to species already identified in this source (see Table 5), among which a few molecules display extremely rich spectra, including many weak and/or blended lines that are not included in the present study. Although we anticipate the presence of unidentified lines, their assignment will require a careful analysis and even probably modeling of these spectra. The $E_{up} \leq 250$ K selection criterion used in this work also prevent us from identifying any vibrationally excited lines. We postpone these considerations to a future article.

[5] http://www-laog.obs.ujf-grenoble.fr/heberges/timasss

[6] http://www.iram.fr/IRAMFR/GILDAS

[7] CASSIS has been developed by IRAP-UPS/CNRS, see http://cassis.cesr.fr.

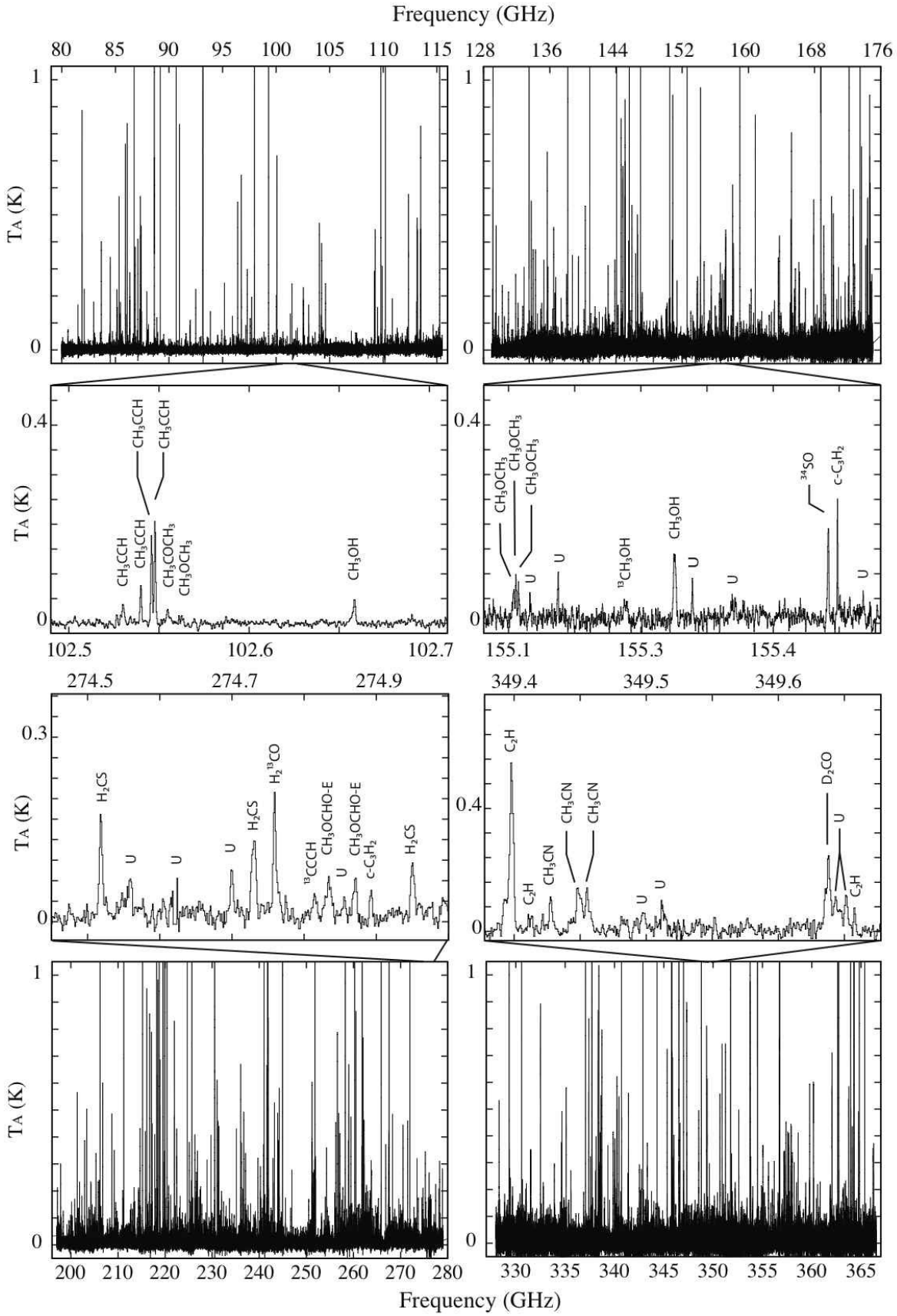


Fig. 2. The IRAS 16293 spectra in the four bands of the survey. *Upper panels*: IRAM-30 m 3 mm and 2 mm bands. *Lower panels*: IRAM-30 m 1 mm and JCMT-15 m 0.9 mm bands. The *middle panels* are zoomed views of sample frequency ranges in the four bands respectively. These panels include lines identification based on the publicly available spectral databases (see text for details).

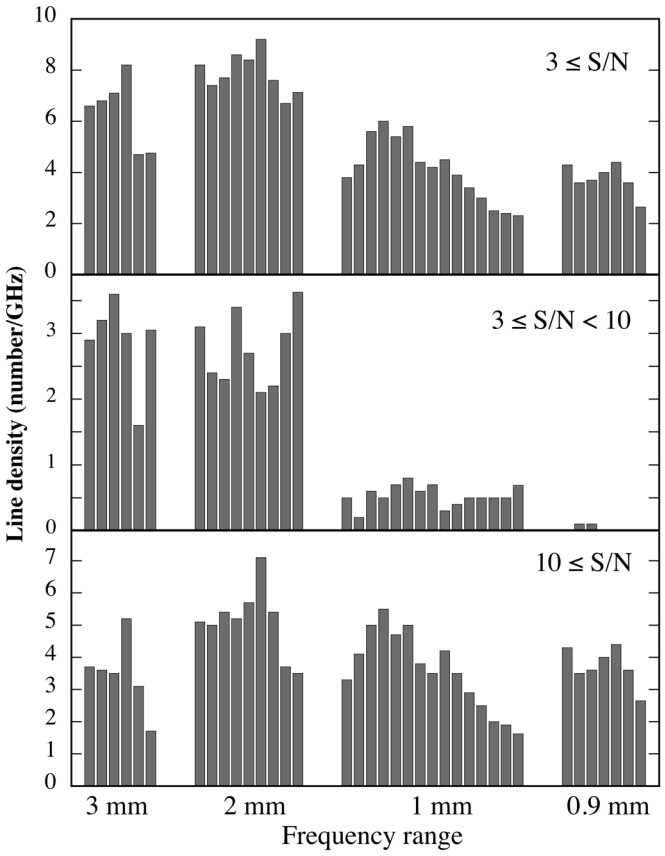


Fig. 3. Distribution of the density (averaged over 10 GHz intervals) of identified lines (see text) in each of the four frequency ranges. The *upper panel* corresponds to lines with $S/N \leqslant 3$, the *central panel* is restricted to lines with $3 \leqslant S/N < 10$ and the *lower panel* corresponds to lines with $S/N \geqslant 10$.

Table 5 also lists the sum of the line flux in each species. For species displaying rich and complex spectra and/or numerous lines with upper energy levels ≥250 K, this value is a lower limit because of the numerous weak and blended lines that are not included in the present analysis.

As noted by the previous studies (Blake et al. 1994; van Dishoeck et al. 1995), the millimeter and submillimeter spectrum of IRAS 16293 is dominated by simple O-rich species such as CO, SO, H_2CO, SO_2, and CH_3OH (the three first families alone constitute more than two-thirds of the total flux). In the frequency range covered by our survey, the total flux emitted in the CO main and isotopic lines is about 800 K km s^{-1}, ∼30% smaller than the flux emitted in the SO, H_2CO, SO_2, and CH_3OH lines together (∼1100 K km s^{-1}). Thus, CO is not the major cooling agent in this frequency range. In addition, our survey detects thousands of weaker lines from heavier and more complex molecules that had not been found in the previous surveys. The zoomed figures of Fig. 2 illustrate the situation, with several lines from CH_3CCH, CH_3CN, $HCOOCH_3$ etc. To roughly estimate the contribution of this "grass" of lines to the total cooling of the gas (in this range of frequencies), we consider a line density of about 15 lines per GHz (see above) and a line integrated intensity of ∼0.3 K km s^{-1}. This gives approximatively an integrated line intensity of 900 K km s^{-1}, which is comparable to the contribution of CO and its isotopologues.

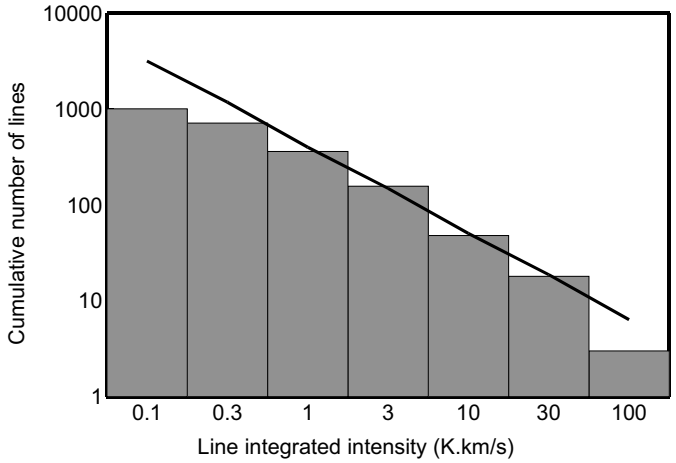


Fig. 4. Number of lines showing an integrated intensity larger than a given threshold. The solid line shows the single index power-law best fit to the distribution.

5.3. Line parameters

A Gaussian fit was performed for each of the lines of Table 4. The parameters of the fit (integrated intensity, line width *FWHM*, and rest velocity v_{LSR}) are reported in the same table. The uncertainties in the integrated line intensity are based on the spectra noise and the calibration uncertainties reported in Table 1. We verified that even when the line profile differs from a simple Gaussian (for example in self-absorbed lines, or lines with broad wings) the Gaussian fit area is very close to the true integrated line intensity and, therefore, reliable. The uncertainties in the line width *FWHM* and rest velocity v_{LSR} take into account the statistical errors (from the fit) and the uncertainty due to the limited spectral resolution, which indeed dominates the error. The cases where the line profiles are clearly not Gaussian are marked in Table 4. The average $\langle FWHM \rangle$ and $\langle v_{LSR} \rangle$ for each species and isotopologues are reported in Table 5, except for those that show severe blending caused by unresolved or partially resolved hyperfine structure (CH_3CN, HNCO, NH_2D, NS).

In the following, we analyze the information derived from the Gaussian *FWHM* and v_{LSR} of the lines.

Figure 5 shows the *FWHM* versus v_{LSR} for each species. In the plots, we have regrouped the isotopologues of the same species and, in a few cases, species with a small number of lines. In these cases, we verified that the species have similar *FWHM* and v_{LSR} to avoid introducing artificial trends in the plot. Figure 5 shows a remarkable and unexpected behavior: *the FWHM and v_{LSR} distributions are not the same but, in contrast depend on the species*.

On the basis of the different *FWHM* and v_{LSR} distributions, four types of "kinematical behaviors"t can be identified:

1. Type I (first row of Fig. 5): $\langle v_{LSR} \rangle \sim 4.0$ km s^{-1} and $\langle FWHM \rangle \sim 2.5$ km s^{-1}. The lines show very little dispersion in terms of both rest velocities and line widths. Small carbon chains and rings, and "small molecules" belong to this group.
2. Type II (second row): $\langle v_{LSR} \rangle \sim 3.7$ km s^{-1} with very little dispersion, *FWHM* from ∼2 km s^{-1} to ∼8 km s^{-1}. All species in this group are S- or N-bearing molecules. We note that HCO^+ and C_3H_2 (in the first row) have properties which are in-between type I and type II.

Table 5. Detected species ordered by decreasing fluxes of the main isotopologue.

TAG [1]	Species [3]	Nb[2] lines	E_{up} (K) min–max	$\langle V_{LSR}\rangle$ (km s^{-1})	$\langle FWHM\rangle$ (km s^{-1})	$\int T_{mb}dv$ (K km s^{-1})	TAG [1]	Species [3]	Nb[2] lines	E_{up} (K) min–max	$\langle V_{LSR}\rangle$ (km s^{-1})	$\langle FWHM\rangle$ (km s^{-1})	$\int T_{mb}dv$ (K km s^{-1})
28503	[aa] CO	3	5.5–33.2	5.93 ± 0.71	9.47 ± 1.77	605.8	41001	[bb] CH_3CN	>30	20.4–21.2			58.6
29501	[ab] ^{13}CO	3	5.3–31.7	3.94 ± 0.36	4.13 ± 1.16	116.0	46509	[bc] H_2CS	26	9.9–143.4	3.61 ± 0.35	4.53 ± 1.34	51.2
30502	[ac] $C^{18}O$	3	5.3–31.6	3.72 ± 0.18	2.90 ± 0.61	67.6	47505	[bd] $H_2^{13}CS$	4	22.5–97.1	4.09 ± 0.79	4.61 ± 2.29	2.9
29006	[ad] $C^{17}O$	3	5.4–32.4	3.84 ± 0.35	3.75 ± 0.66	25.5	47504	[be] HDCS	5	8.9–30.9	3.77 ± 0.12	2.81 ± 0.88	0.8
48501	[ae] SO	20	9.2–87.5	3.98 ± 0.20	4.18 ± 0.55	339.5	60503	[bf] OCS	12	16.3–134.8	3.13 ± 0.33	5.12 ± 0.77	38.6
50501	[af] ^{34}SO	13	15.6–86.1	3.81 ± 0.27	4.87 ± 0.84	28.0	62505	[bg] $OC^{34}S$	9	15.9–157.2	2.51 ± 0.26	3.98 ± 0.65	7.8
30591	[ag] o-H_2CO	10	6.8–143.3	3.45 ± 0.58	4.09 ± 0.58	163.3	61502	[bg] $O^{13}CS$	10	20.9–147.2	2.58 ± 0.51	4.49 ± 1.25	5.6
30581	[ag] p-H_2CO	7	10.5–99.7	3.67 ± 0.12	3.92 ± 0.65	93.6	60003	[bh] $HCOOCH_3$	182	17.9–145.0	2.52 ± 0.32	2.71 ± 0.77	51.6
31501	[ah] HDCO	10	17.6–102.6	3.39 ± 0.58	3.99 ± 1.06	26.7	44505	[bi] SiO	6	6.2–75.0	4.40 ± 0.46	5.57 ± 0.78	49.7
31503	[ak] $H_2^{13}CO$	12	10.2–157.5	2.96 ± 0.38	2.86 ± 1.29	12.7	27002	[bj] HNC	3	4.3–43.5	3.80 ± 0.56	2.81 ± 1.08	32.1
32592	[aj] o-D_2CO	6	16.8–81.2	3.51 ± 0.61	3.80 ± 0.84	11.7	28508	[bk] DNC	2	11.0–22.0	4.31 ± 0.02	2.47 ± 1.19	4.9
32582	[aj] p-D_2CO	8	5.3–99.5	3.38 ± 0.72	2.76 ± 1.24	5.5	28005	[as] $HN^{13}C$	4	4.2–41.8	3.74 ± 0.61	3.44 ± 1.76	4.8
32503	[ak] $H_2C^{18}O$	4	20.0–63.4	2.71 ± 0.16	2.67 ± 1.21	1.9	51501	[bl] HC_3N	17	19.6–203.0	3.53 ± 0.44	4.67 ± 1.97	35.4
64502	[al] SO_2	82	7.7–248.5	3.74 ± 0.32	5.30 ± 1.22	238.3	52005	[bm] DC_3N	6	22.3–77.0	4.29 ± 0.23	2.61 ± 0.41	1.0
66002	[am] $^{34}SO_2$	5	7.6–69.7	3.33 ± 0.72	4.20 ± 1.71	1.6	34502	[bn] H_2S	2	27.9–84.0	3.55 ± 0.52	4.90 ± 0.08	25.2
32504	[an] CH_3OH	99	7.0–233.6	3.42 ± 0.42	5.91 ± 1.35	217.6	35001	[bo] HDS	2	11.7–34.7	3.05 ± 0.55	2.41 ± 2.09	0.7
33502	[ao] $^{13}CH_3OH$	9	6.8–94.6	2.93 ± 0.47	3.92 ± 1.63	2.8	38082	[bp] o-c-C_3H_2	14	4.1–48.3	4.10 ± 0.27	2.73 ± 0.70	14.5
	[ap] CH_2DOH	12	4.5–40.8	2.74 ± 0.64	5.89 ± 0.91	6.4	38092	[bp] p-c-C_3H_2	9	6.4–47.5	4.27 ± 0.26	2.57 ± 1.29	4.5
	[ap] CHD_2OH	7	4.2–53.5	3.70 ± 0.88	4.76 ± 1.58	2.6	39003	[bq] c-C_3HD	5	17.4–25.34	4.44 ± 0.31	1.91 ± 0.88	1.5
	[ap] CH_3OD	4	6.0–26.8	2.55 ± 0.84	3.96 ± 1.29	2.3	46008	[br] CH_3OCH_3	82	11.1–169.8	2.53 ± 0.29	2.27 ± 0.69	18.8
	[aq] CD_3OH	3	12.2–42.0	2.43 ± 0.21	2.03 ± 0.49	0.5	40502	[bs] CH_3CCH	26	12.3–176.6	3.62 ± 0.32	3.03 ± 0.58	17.4
29507	[ar] HCO^+	3	4.3–42.8	3.29 ± 0.16	2.87 ± 1.39	144.2	41502	[bt] CH_2DCCH	4	16.3–38.1	4.34 ± 0.31	1.93 ± 0.40	0.2
30504	[ar] $H^{13}CO^+$	4	4.2–41.6	3.94 ± 0.46	2.43 ± 0.44	31.5	25501	[bu] CCH	13	4.2–25.1	3.83 ± 0.09	2.08 ± 0.20	14.7
30510	[as] DCO^+	3	10.4–51.9	4.19 ± 0.29	2.34 ± 0.83	14.3	26501	[bv] CCD	4	10.4–10.3	4.32 ± 0.52	2.54 ± 0.86	0.8
31506	[at] $HC^{18}O^+$	3	4.1–24.5	4.04 ± 0.37	2.15 ± 0.51	1.6	43002	[bw] HNCO	>8	10.5–143.5			13.8
31508	[ar] $D^{13}CO^+$	2	10.2–20.4	4.52 ± 0.16	2.34 ± 1.36	0.6	26504	[bx] CN	7	5.4–5.4	4.45 ± 0.10	1.82 ± 0.16	8.5
30505	[au] $HC^{17}O^+$	1	12.5–12.5	3.94 ± 0.22	4.03 ± 0.71	0.4	45506	[by] HCS^+	5	6.1–73.7	3.72 ± 0.20	3.32 ± 0.70	5.1
44501	[av] CS	4	7.0–65.8	3.70 ± 0.12	3.56 ± 0.43	126.5	42501	[bz] H_2CCO	13	9.7–66.9	3.00 ± 0.26	2.58 ± 0.44	4.8
46501	[av] $C^{34}S$	4	6.9–64.8	3.63 ± 0.16	3.60 ± 0.68	21.1	18501	[ca] NH_2D	>3	16.6–182.8			4.7
45501	[av] ^{13}CS	4	6.7–46.6	3.69 ± 0.22	4.06 ± 0.96	9.0	30008	[cb] NO	7	7.2–36.1	4.02 ± 0.12	2.25 ± 1.42	3.7
45502	[av] $C^{33}S$	4	7.0–65.3	3.68 ± 0.66	5.05 ± 1.67	7.2	56007	[cc] C_2S	12	15.4–53.8	4.10 ± 0.17	2.12 ± 0.62	2.6
27501	[aw] HCN	3	4.2–42.5	3.57 ± 0.78	7.06 ± 2.12	97.5	45013	[cd] PN	>3	13.5–63.1			2.1
28002	[ax] $H^{13}CN$	5	4.1–41.4	3.77 ± 0.26	4.05 ± 1.85	17.1	19002	[ce] HDO	1	95.2–95.2	2.87 ± 0.21	6.13 ± 0.58	2.1
28509	[ay] DCN	3	10.4–52.1	3.63 ± 0.46	4.09 ± 0.55	11.3	46010	[cf] NS	>6	9.9–17.8			1.3
28003	[az] $HC^{15}N$	4	4.1–41.3	3.60 ± 0.33	5.52 ± 1.47	6.4	49503	[cg] C_4H	6	20.5–30.2	4.00 ± 0.08	1.58 ± 0.28	0.7
44003	[ba] CH_3CHO	192	13.8–194.5	2.79 ± 0.39	2.68 ± 1.00	70.0	37003	[ch] c-C_3H	3	4.39–10.8	4.42 ± 0.22	1.79 ± 0.10	0.3

Notes. [(1)] In the CDMS as in the JPL catalog, the species are associated to a five digit number, called TAG; the first two digits correspond to their molecular weight in atomic mass units, and the third digit is a 5 in the CDMS catalog, and a 0 in the JPL catalog. Our identification of the ortho and para forms of H_2CO, D_2CO and c-C_3H_2 relies on the VASTEL Spectroscopic database (`http://www.astro.caltech.edu/~vastel/CHIPPENDALES`) so that these species are associated with specific TAG. The deuterated isotopologues of methanol, not yet included in the CDMS and JPL databases, do not have a TAG. Our identification of their lines is based on the data given in Parise et al. (2002) and Parise et al. (2004) and references therein. [(2)] For most N-bearing species, due to unresolved hyperfine structure, this number is a lower limit corresponding to groups of blended lines. [(3)] For each species, the spectroscopic references given here are the most recent cited in the CDMS and JPL databases. All of them should be read as reference and references therein: [(aa)] Winnewisser et al. (1997); [(ab)] Cazzoli et al. (2004); [(ac)] Klapper et al. (2001); [(ad)] Klapper et al. (2003); [(ae)] Bogey et al. (1997); [(af)] Klaus et al. (1996); [(ag)] Müller et al. (2000d); [(ah)] Bocquet et al. (1999); [(ai)] Müller et al. (2000c); [(aj)] Lohilahti & Horneman (2004); [(ak)] Müller et al. (2000b); [(al)] Müller et al. (2000a); [(am)] Belov et al. (1998); [(an)] Müller et al. (2004); [(ao)] Xu & Lovas (1997); [(ap)] Parise et al. (2002); [(aq)] Parise et al. (2004); [(ar)] Lattanzi et al. (2007); [(as)] van der Tak et al. (2009); [(at)] Schmid-Burgk et al. (2004); [(au)] Dore et al. (2001); [(av)] Kim & Yamamoto (2003); [(aw)] Thorwirth et al. (2003); [(ax)] Cazzoli & Puzzarini (2005); [(ay)] Brünken et al. (2004); [(az)] Cazzoli et al. (2005); [(ba)] Kleiner et al. (1996); [(bb)] Müller et al. (2009); [(bc)] Clouthier et al. (1994); [(bd)] Brown et al. (1987); [(be)] Minowa et al. (1997); [(bf)] Golubiatnikov et al. (2005); [(bg)] Lovas & Suenram (1987); [(bh)] Maeda et al. (2008); [(bi)] Cho & Saito (1998); [(bj)] Thorwirth et al. (2000a); [(bk)] Brünken et al. (2006); [(bl)] Thorwirth et al. (2000b); [(bm)] Spahn et al. (2008); [(bn)] Belov (1995); [(bo)] Camy-Peyret et al. (1985); [(bp)] Mollaaghababa et al. (1993); [(bq)] Bogey et al. (1987); [(br)] Neustock et al. (1990); [(bs)] Cazzoli & Puzzarini (2008); [(bt)] Leguennec et al. (1993); [(bu)] Padovani et al. (2009); [(bv)] Bogey et al. (1985); [(bw)] Lapinov et al. (2007); [(bx)] Klisch et al. (1995); [(by)] Margulès et al. (2003); [(bz)] Guarnieri & Huckauf (2003); [(ca)] Fusina et al. (1988); [(cb)] Meerts & Dymanus (1972); [(cc)] Lovas et al. (1992); [(cd)] Cazzoli et al. (2006); [(ce)] Johns (1985); [(cf)] Lovas & Suenram (1982); [(cg)] Chen et al. (1995); [(ch)] Yamamoto & Saito (1994).

3. Type III (third row): $\langle v_{LSR}\rangle \sim 2.5$–$3.0$ km s^{-1}, $\langle FWHM\rangle \leq 4.0$ km s^{-1}. Four complex organic molecules display this behavior.
4. Type IV (fourth row): v_{LSR} and *FWHM* have mixed behaviors, with characteristics belonging to the two last groups. CH_3OH lines have v_{LSR} and *FWHM* ranging from 2 to 9 km s^{-1}; H_2CO and CH_3CCH lines have moderate *FWHM* (4–5 km s^{-1}) and v_{LSR} ranging from 2.5 to 4 km s^{-1}; lines from the rare isotopes of OCS have $v_{LSR} \sim 2.5$ km s^{-1} and $FWHM \leq 4$ km s^{-1}.

We note that the FWHM averaged over each of the four frequency bands of the survey is similar, between 2 and 5 km s^{-1}, there being a slight increase in the 1 mm band caused by the poorer spectral resolution. We verified that none of the four kinematical behaviors are produced by this instrumental effect. Table 6 summarizes the situation. To more clearly understand the

Table 6. Distribution of the detected species in four kinematical types.

Type (Source)	v_{LSR} (km s^{-1})	*FWHM* (km s^{-1})	E_{up} (K)	*FWHM* behavior	Species
Type I (Envelope)	~4	≤2.5	0–50	constant	CN, NO, C_2S, C_2H, C_3H, C_4H, HCO^+, C_3H_2
Type II (Source A)	~3.7	2–8	0–250	increases	HCN, HC_3N, HNC, SO, SO_2, CS, HCS^+, H_2CS
Type III (Source B)	2.5–3	≤ 4	0–200	constant	CH_3CHO, $HCOOCH_3$, CH_3OCH_3, H_2CCO
Type IV (mixed)	2.5–4	2–8	0–250	increases	CH_3OH, H_2CO, CH_3CCH, OCS

Notes. First column reports the associated component (see Sect. 6), second, third and fourth columns report the typical velocities, *FWHM* and upper level energy E_{up} ranges of the detected lines. Fifth column describes the behavior of *FWHM* with increasing E_{up} and last column lists the species belonging to each type.

physical meaning of the plots in Fig. 5 (and the four identified types), we plotted in Fig. 6 the values of the *FWHM* as function of the upper level energy E_{up} of the transition. The species were grouped as in Fig. 5; it is striking that the distinction between the four types defined by the (*FWHM*, v_{LSR}) distribution is also visible in this plot.

Type I species have lines with E_{up} lower than 50 K. We note that this is not an observational bias: except for a few very light molecules, such as C_2H, the species associated with type I have high energy transitions in the survey frequency range, but the line intensities decrease abruptly when E_{up} becomes higher than 50 K. In contrast, type II, III, and IV species have lines with E_{up} up to 200 K but different behaviors. For type II species, the *FWHM* increases with E_{up}, whereas for type III and IV the *FWHM* is constant and does not depend on E_{up}. In contrast, analogous plots of v_{LSR} versus E_{up} indicate that the lines' velocity does not depend on E_{up} in any species. A related effect was discovered by Schöier et al. (2002), who noted a correlation between the linewidths and the excitation temperatures derived by Blake et al. (1994) and van Dishoeck et al. (1995). These properties are used to give a physical meaning to the four types in Sect. 6. Finally, we note that when detected, the deuterated species show the same behavior as the main isotopomers, except the D-isotopomers of type III species that have too weak lines to be detected in our survey.

6. Discussion

6.1. Comparison with previous surveys

When compared to the previous survey toward IRAS 16293 (Blake et al. 1994; van Dishoeck et al. 1995), the present one not only enlarges the covered frequency range (~200 GHz versus ~40 GHz) but also the number of detected species, thanks to the higher sensitivity (~10 mK versus ~40 mK). The average line density of the previous unbiased survey of IRAS 16293 was 7 lines per GHz, which should be compared with 20 lines per GHz for the present one. Several species detected in our survey were not detected in the previous one: complex organic molecules ($HCOOCH_3$, $HCOOCH_3$ and CH_3OCH_3), carbon chains and rings (C_2S, C_4H, c-C_3H), N-bearing species (NO, PN, NS), and several D-bearing molecules.

Towards hot cores, numerous surveys have been performed. They have covered the whole range of frequencies reachable from the ground, from the 3 mm range observed with IRAM, SEST, NRAO, or JCMT to the submillimeter windows observable with the CSO and JCMT (MacDonald et al. 1996; Schilke et al. 1997; Helmich & van Dishoeck 1997; Nummelin et al. 1998; Thompson & MacDonald 1999; Kim et al. 2000; Nummelin et al. 2000; Lee et al. 2001; Schilke et al. 2001; White et al. 2003; Comito et al. 2005; Kim et al. 2006; Belloche et al. 2007; Olofsson et al. 2007; Tercero et al. 2010). The line densities usually range from 10 to 20 lines per GHz, i.e. have value comparable to the present survey. SgrB2 appears as a noticeable exception, displaying significantly higher line densities, as high as 100 lines per GHz in the 3 mm range observed with IRAM (Belloche et al. 2007) or 40 lines per GHz in the 1 mm range observed with SEST (Nummelin et al. 1998, 2000). Interestingly, the slope of –0.9 that we observe for the cumulative number of lines versus flux threshold is identical to the slopes observed by Schilke et al. (2001), White et al. (2003), and Comito et al. (2005) in their submillimeter surveys of Orion-KL.

In conclusion, our survey in terms of molecular content has a richness comparable to that of hot cores and confirms that the high abundance of deuterated isotopologues, which are easily detected for a number of species, is a distinctive characteristic of low mass protostars.

6.2. Kinematical types and associated components

As mentioned in the Introduction, IRAS 16293 is formed by a proto-binary system surrounded by an infalling envelope. In addition, multiple outflows originate in the system (e.g. Castets et al. 2001). Before attempting to interpret the observations of Sect. 5.3 and, specifically, the meaning of the four kinematical types of Table 6, based on the line rest velocities and widths, we review what is known so far about the envelope and the proto-binary system.

6.2.1. Envelope

The envelope extends for 6000–7000 AU in radius, equivalent to about 100″ in diameter, and is relatively massive (~2 $M_\odot$) (Crimier et al. 2010). At the border of the envelope, the dust temperature is ~13 K and the density is ~10^5 cm^{-3}. The dust temperature reaches 100 K at a radius 75–86 AU, where the density is (2–3) × 10^8 cm^{-3}, creating the region called hot corino. The rest velocity of the cold envelope has been measured in several studies and is ~3.9 km s^{-1} (Mizuno et al. 1990; Bottinelli et al. 2004; Takakuwa et al. 2007). Molecules probing the cold envelope have ~2 km s^{-1} line widths.

6.2.2. Proto-binary system

Several interferometric studies have been carried out in the past to characterize the nature of the two sources, A (south-east) and B (north-west), forming the binary system (Kuan et al. 2004; Bottinelli et al. 2004; Chandler et al. 2005; Bisschop et al. 2008; see also references in Table 7). Some species are associated only or predominantly with one of the two sources A and B, and others are observed in both sources. All studies

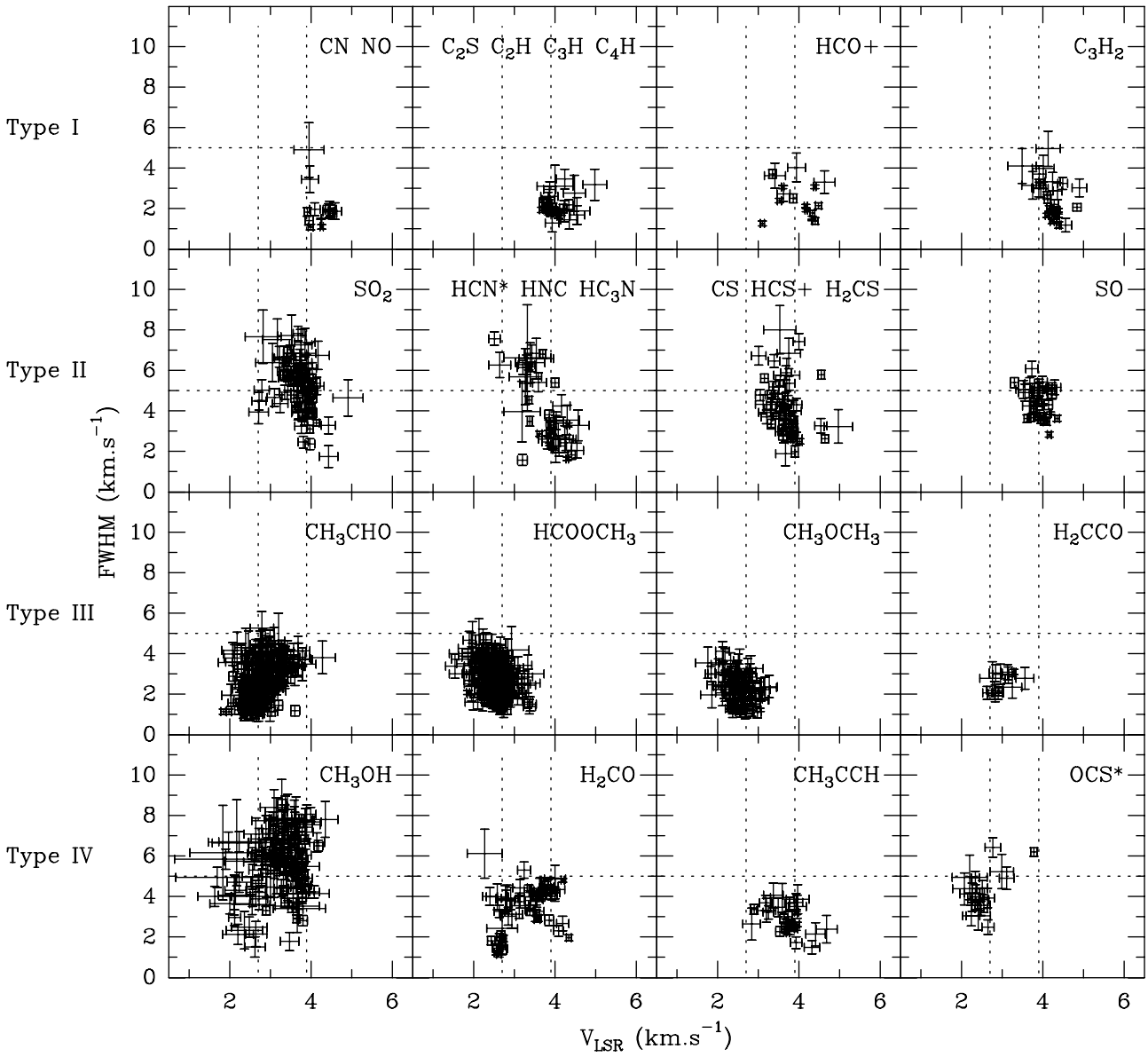


Fig. 5. Plots of the rest velocity $v_{\rm LSR}$ versus the *FWHM*, derived from the Gaussian fits of the lines (Table 4). All the detected species and the relevant isotopologues of Table 5 are plotted, except those in which the lines have obviously non-Gaussian profiles (see text). In particular, the labels HCN* and OCS* mean that the main isotopologues of these species are not included, because of their non-Gaussian profiles. The one-σ error bars include fit and spectral resolution uncertainties. The vertical lines at $v_{\rm LSR} = 2.7$ and 3.9 km s^{-1} correspond to the velocity of the components B and A, respectively (see Sect. 6). The horizontal line at 5 km s^{-1} corresponds approximatively to the average of the line *FWHM* range.

agree in measuring broader lines towards A (~8 km s^{-1}) than B (~3 km s^{-1}). However, the rest velocity of the molecular emission in the two objects is more uncertain: there is some evidence that the two objects have different rest velocities (higher in source A than in source B), but this difference might also be due to absorption by the envelope according to Chandler et al. (2005) or self-absorption in optically thick lines from source B according to Bottinelli et al. (2004); Kuan et al. (2004) also report velocities that are somewhat higher in source A than source B, with a dispersion larger than 2.5 km s^{-1} in the values for all species. According to Bisschop et al. (2008), both sources A and B show emission at velocities between 1.5 and 2.5 km s^{-1}; Huang et al. (2005) mention two velocity components at 1.5 and 4.5 km s^{-1} for source A and show emission from B peaking at ~2 km s^{-1}. We note that all these studies use moderate spectral resolutions (~1 km s^{-1}), deal with a small number of lines (often only one) for each species and, in some cases, suffer from poor S/N for the weakest lines.

Table 7 summarizes, for each of the species classified according to their kinematical type in Table 6, the results of interferometric observations towards the three components of IRAS 16293 (sources A and B and the envelope).

6.2.3. Interpretation of the kinematical types

On the basis of published interferometric observations, each species is assigned to one or two of the three components (source A, B, and the envelope). For example, CN displays type I kinematical characteristics ($v_{\rm LSR} \sim 4$ km s^{-1} and $FWHM \sim 2$ km s^{-1}) and has only found to be associated with the envelope and was not detected in any of the two sources A and B.

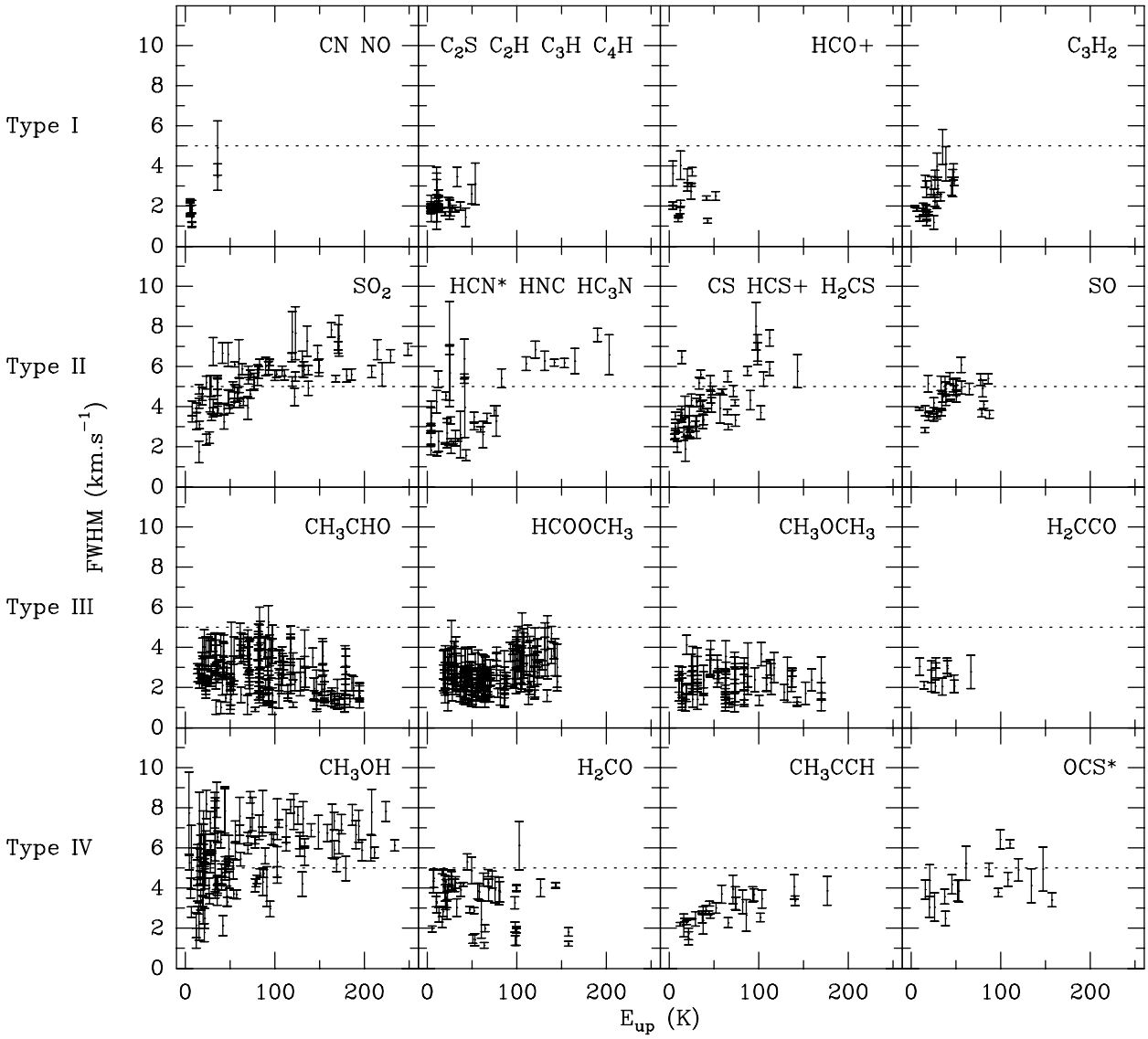


Fig. 6. Plots of the linewidth, *FWHM*, versus the energy of the upper level of the transition, E_{up}. The species are grouped as in Fig. 5. All the detected species and the relevant isotopologues of Table 5 are plotted, except those in which the lines obviously have non-Gaussian profiles (see text). In particular, the labels HCN* and OCS* mean that the main isotopologues of these species are not included, because of their non-Gaussian profiles. The one-σ error bars include fit and spectral resolution uncertainties. The horizontal line at 5 km s^{-1} corresponds approximatively to the average of the line *FWHM* range.

In contrast, CH_3CHO has the characteristics of the type III behavior (v_{LSR} = 2.5–3 km s^{-1} and $FWHM \leq 4$ km s^{-1}) and has only been detected in the direction of source B. Some species of Table 6 (C_2H, C_3H, C_4H, C_2S, NO, HNC, HCS^+, and CS) have not been observed with interferometers, to the best of our knowledge, so are not reported in Table 7. The correspondence between the four types of Table 6 and the interferometric observations presented in Table 7 suggests that the species belonging to the same kinematical type are associated with a spatially different source: envelope (type I), source A (type II), source B (type III), and a mix of the three previous components (type IV). We note that the distribution of molecules in four kinematical types is not an artifact or a bias caused by the survey pointing, which detects more emission from source B than source A at higher frequencies. Even excluding all lines observed at IRAM-30 m or JCMT-15 m telescopes with a HPBW larger than 14″, i.e. all lines with frequencies higher than 200 GHz, the v_{LSR} versus *FWHM* plots and the *FWHM* versus E_{up} plots show the same behavior.

1. Type I corresponds to molecules abundant in the cold envelope of IRAS 16293. We cannot exclude that these species also emit in the densest parts of sources A and B but that this emission is strongly absorbed by the gas in the envelope. NO, which shows two broad and relatively bright lines with E_{up} = 36 K, bright narrow lines with E_{up} = 7 K and barely detected lines with E_{up} = 19 K (not included in this paper), might be an example of this situation, which deserves a detailed excitation study to come. The 343.8 GHz line associated with source B was identified by Kuan et al. (2004) as the C_3H_2 $23_{13,10}$–$23_{12,11}$ transition(E_{low} = 790 K) but the CH_3CHO $18_{2,17}$–$17_{2,16}$ transition (with E_{up} = 166 K) seems a more reasonable identification.
2. Type II identifies molecules prevalently associated with source A. A few exceptions, for which emission from source B is mentioned in the literature, deserve some attention. The identification by Huang et al. (2005) of a line to $SO_2(v_2 = 1)$ associated with source B is also questionable given the very high upper energy level (E_{low} = 1800 K) of the transition, as

Table 7. Correspondence between kinematical types and spatial distributions derived from interferometric observations.

Type	Source A	Source B	Envelope	Refs.
Type I		(C_3H_2)	CN	B2004
	HCN	(HCN)		T2007
	HCN			H2005
	HC_3N			C2005
	SO	(SO)		C2005
Type II	SO			H2005
	SO_2			C2005
	SO_2	(SO_2)		H2005
	H_2CS	(H_2CS)		H2005
				K2004
		CH_3CHO		B2008
		CH_3OCH_3		C2005
	(CH_3OCH_3)	CH_3OCH_3		H2005
		H_2CCO		K2004
Type III	(H_2CCO)	H_2CCO		B2008
		$HCOOCH_3$		R2006
	$HCOOCH_3$	($HCOOCH_3$)		B2004
	$HCOOCH_3$	$HCOOCH_3$		K2004
	$HCOOCH_3$			C2005
	CH_3OH			C2005
	CH_3OH	CH_3OH		K2004
Type IV	H_2CO	H_2CO		S2004
	H_2CO	H_2CO		C2005
	OCS	OCS		H2005

Notes. The first column reports the kinematical type of the species according to the definition given in Table 6. Columns 2–4 report where the species has been detected: source A, B and envelope respectively. The species in parenthesis means that weaker emission has also been observed in the relevant component or that they are questionable identifications (see text). Last column reports the interferometric observations references; B2004: Bottinelli et al. (2004); B2008: Bisschop et al. (2008); C2005: Chandler et al. (2005); H2005: Huang et al. (2005); K2004: Kuan et al. (2004); R2006: Remijan & Hollis (2006); S2004: Schöier et al. (2004); T2007: Takakuwa et al. (2007).

is the attribution by Huang et al. (2005) of H_2CS emission to source B, as no map is shown for this species. Finally, SO emission is rather extended and associated with both sources A and B (Chandler et al. 2005). It is possible that part of the line broadening is due to wings associated with the outflow, whereas the bulk of the emission is associated with the cold envelope (which would instead make SO a species of type I). In addition, without detailed excitation models to be presented in subsequent studies, it is not possible to exclude that, for some type II species, the cold envelope contributes to the emission observed at low E_{up} and small *FWHM*.

3. Type III species have lines that are prevalently emitted by source B. $HCOOCH_3$, which has been observed in both source A and B appears as a notable exception. Excitation modeling of this species will be discussed in detail in a subsequent paper. Several qualitative arguments may already explain why no lines with type II characteristics are present in this study: (i) as the lines emitted by the source A are much broader than the lines emitted by the source B, whose lines display a higher percentage of blending with nearby lines excluding them from this study; (ii) in our large beam observations, emission from sources A and B are superposed; the narrow lines emitted from the source B appear "on top of the" broad lines emitted by the source A and are, thus, more easily detected; (iii) this second effect is enhanced by the pointing towards the source B.
4. Type IV species are a mixed bag. The species are present in both sources A and B and, sometimes, even in the envelope. Depending on the intensity contribution, the lines can have a low or high v_{LSR} and *FWHM*. Therefore, type IV species are not associated with any specific component.

Using the kinematic properties of the lines, we were able to identify general trends depending on whether the emission of the species originates in source A or B, although both sources are included in our single dish observations. Despite the kinematic differences being small, for example a difference in the v_{LSR} of not more than 1.5 km s^{-1}, we were able to draw a general picture thanks to the large number of detected lines.

6.3. The dynamics of sources A and B

Identified where the emission from the various species originates helps us to clarify the nature of sources A and B. As noted in several previous works, A and B have apparently different chemical compositions: source B is brighter in complex organic molecules, while source A is brighter in simpler S- and N-bearing molecules (see Table 7). Furthermore, the *FWHM* of the lines arising in source A are broader than in source B.

Our analysis established two additional properties that had previously not been recognized (see discussion in Sect. 6.1): i) the two sources have different velocities (v_{LSR}) and ii) in the source A, the *FWHM* of the lines increases with increasing upper level energy (Fig. 6) whereas it remains constant in the source B.

For the linewidth behavior, a related effect, the increase in *FWHM* with the excitation temperature, had already been observed by Schöier et al. (2002), but this represents a less direct probe of the gas kinematics, as it relied on modeling assumptions to derive the excitation temperatures. The increase in the line *FWHM* with increasing excitation has been interpreted in two ways: either it is caused by infalling gas onto the accreting protostellar object (Ceccarelli et al. 2003), or shocks caused by jet/wind interaction with the inner dense envelope (Schöier et al. 2002; Jørgensen et al. 2002). The two interpretations predict different molecular emission distributions. However, the existing maps do not allow us to distinguish these interpretations. In addition, to reliably differentiate between these two interpretations we would need to perform a detailed modeling of the source that is beyond the scope of this paper. At this stage, it can simply be said that the interpretation of the infalling gas (Ceccarelli et al. 2000b) would lead to reasonable estimates of source A and B central masses: for optically thin emission, the free-fall velocity may be estimated from the linewidth, assuming that the *FWHM* includes quadratically a turbulent width δ_{th} and the free-fall broadening; its analytic expression yields the following expression of the core mass, where the widths are expressed in km s^{-1} and the radius r in AU.

$$M(M_\odot) = 1.4 \times 10^{-4}(FWHM^2 - \delta_{th}^2)r. \quad (2)$$

Assuming that the turbulent width in the A and B core external layers is close to that of the envelope static gas, we derive $\delta_{th} \sim 2$ km s^{-1} from the type I species linewidths. According to the interferometric observations of type II and type III species reported in Table 7, both sources show a radius of ~1.5″ (i.e. 180 AU at a distance of 120 pc). For core A, typical *FWHM* larger than ~6 km s^{-1} lead to a central mass of at least 0.8 $M_\odot$, whereas for core B, where the *FWHM* is smaller than ~3 km s^{-1}, the central mass cannot exceed 0.1 $M_\odot$. This assumes that the

linewidths are due to collapsing envelopes rather than rotating disks. If they were, in contrast, due to rotating disks, one would have to take into account the (unknown) inclination angle. The available interferometer observations, which are barely able to spatially resolve the core A only (Bottinelli et al. 2004), do not allow us to distinguish between these two possibilities. In the following, we restrict the discussion to the infalling envelopes, for simplicity, but our conclusions are also largely applicable to the disk case.

The difference between the $v_{\rm LSR}$ of both sources can be interpreted in the following way: the source B rotates around its companion, source A; for a distance of 480 AU between cores A and B, and a core A mass of 0.8 $M_\odot$, the rotation velocity of core B is 1.2 km s^{-1}. The observed difference between A and B velocities ($v_{\rm LSR}$ of 3.9 and 2.7 km s^{-1} respectively) is thus perfectly consistent with this picture. Bottinelli et al. (2004) already discussed this possibility but did not have enough evidence to state that it was more likely than another hypothesis where the line kinematical properties reflect opacity effects. The large number of lines and species observed in our survey allows us to investigate the source dynamics.

7. Conclusions

We have presented an unbiased spectral survey of the 3, 2, 1, and 0.9 mm bands accessible from ground towards the class 0 source IRAS 16293. We used the IRAM-30 m and JCMT-15 m telescopes, performing about 300 h of observations. This is the most sensitive survey ever published in these bands towards a solar-type protostar.

The data have been released for public use in two CLASS files, which can be retrieved on the TIMASSS web site[8]. The site also contains two accompanying files (reported in the on line material) providing information about the calibration of the single receiver settings, obtained by comparing the survey lines with previously obtained observations.

The line density, ~20 lines/GHz, appears to be as high as in comparable surveys obtained towards high mass protostars (with the exception of SgrB2). More than one thousand unblended lines with $S/N \geq 3$ and upper energy levels lower than 250 K have been identified by comparing with the JPL and CDMS catalogs. They correspond to 32 chemically distinct species, a chemical richness comparable to those of hot cores. The identification of 37 additional rare isotopologues and, specifically, numerous D-bearing molecules confirm that IRAS 16293 has a remarkably high abundance of deuterated species. The 3 mm – 0.9 mm spectra are dominated by relatively simple molecules (CO, SO, H_2CO, SO_2, and CH_3OH). However, the numerous weaker lines emitted by larger molecules account to at least as much as the CO integrated line intensities.

The analysis of the profiles of this large set of identified lines, and specifically the central velocities and widths, provides clues to help us identify where each emission predominantly originates: cold envelope (narrow lines at $V_{\rm LSR} \simeq 3.9$ km s^{-1}), source A (broader lines at $V_{\rm LSR} \simeq 3.9$ km s^{-1}), and source B (narrow lines at $V_{\rm LSR} \simeq 2.7$ km s^{-1}). Furthermore, in source A, the line widths increase with the upper energy level of the transition. If this behavior is interpreted as being caused by gas infalling towards a central object, the core A mass is ~1 $M_\odot$ and the smaller line widths observed towards source B set an upper limit to the mass of this source, ≤0.1 $M_\odot$. The observed difference in the $V_{\rm LSR}$, ~1.2 km s^{-1}), is consistent with the source B rotating around the more massive source A. From a chemical point of view, the source B shows predominant emission from O-bearing complex molecules whereas N- and S-bearing molecules are strong emitters in the source A. To derive reliable estimates of the corresponding chemical abundances, it will be necessary to carry out careful radiative transfer modeling, which we intend to present in future articles.

[8] http://www-laog.obs.ujf-grenoble.fr/heberges/timasss/

Acknowledgements. We are deeply thankful to the IRAM staff and the successive TACs, and particularly to Clemens Thum, for his help in preparing and programming the observations at the IRAM-30 m telescope. We gracefully thank the JCMT staff, particularly Remo Tilanus and Jim Hogh, who were always able to quickly resolve problems. We thank Laurent Pagani for fruitful discussions about calibration problems. We are very thankful to the molecular databases JPL and CDMS, which were largely used for the work presented here as to the spectroscopic groups providing the data. This work has been supported by l'Agence Nationale pour la Recherche (ANR), France (contracts ANR-08-BLAN-022) and by the Ministère de la Recherche Scientifique et Université J. Fourier de Grenoble, France (PPF WAGOS). Finally, we warmly thanks the referee, Dr, J. Cernicharo, and the editor, Dr. M. Walmsley, who contributed to improve a lot this paper with numerous helpful comments.

References

Belloche, A., Comito, C., Hieret, C., et al. 2007, in Molecules in Space and Laboratory
Belov, S. 1995, J. Mol. Spect., 173, 380
Belov, S. P., Tretyakov, M. Y., Kozin, I. N., et al. 1998, J. Mol. Spect., 191, 17
Bergin, E. A., Phillips, T. G., Comito, C., et al. 2010, A&A, 521, L20
Bisschop, S. E., Jørgensen, J. K., Bourke, T. L., Bottinelli, S., & van Dishoeck, E. F. 2008, A&A, 488, 959
Blake, G. A., van Dishoek, E. F., Jansen, D. J., Groesbeck, T. D., & Mundy, L. G. 1994, ApJ, 428, 680
Bogey, M., Demuynck, C., & Destombes, J. L. 1985, A&A, 144, L15
Bogey, M., Demuynck, C., Destombes, J. L., & Dubus, H. 1987, J. Mol. Spect., 122, 313
Bocquet, R., Demaison, J., Cosléou, J., et al. 1999, J. Mol. Spect., 195, 345
Bogey, M., Civiš, S., Delcroix, B., et al. 1997, J. Mol. Spect., 182, 85
Bottinelli, S., Ceccarelli, C., Neri, R., et al. 2004, ApJ, 617, L69
Bottinelli, S., Ceccarelli, C., Williams, J. P., & Lefloch, B. 2007, A&A, 463, 601
Brown, R. D., Godfrey, P. D., McNaughton, D., & Yamanouchi, K. 1987, Mol. Phys., 62, 1429
Brünken, S., Fuchs, U., Lewen, F., et al. 2004, J. Mol. Spect., 225, 152
Brünken, S., Müller, H. S. P., Thorwirth, S., Lewen, F., & Winnewisser, G. 2006, J. Mol. Struct., 780, 3
Butner, H. M., Charnley, S. B., Ceccarelli, C., et al. 2007, ApJ, 659, L137
Camy-Peyret, C., Flaud, J., Lechuga-Fossat, L., & Johns, J. W. C. 1985, J. Mol. Spect., 109, 300
Carvajal, M., Margulès, L., Tercero, B., et al. 2009, A&A, 500, 1109
Castets, A., Ceccarelli, C., Loinard, L., Caux, E., & Lefloch, B. 2001, A&A, 375, 40
Cazaux, S., Tielens, A. G. G. M., Ceccarelli, C., et al. 2003, ApJ, 593, L51
Cazzoli, G., & Puzzarini, C. 2005, J. Mol. Spect., 233, 280
Cazzoli, G., & Puzzarini, C. 2008, A&A, 487, 1197
Cazzoli, G., Puzzarini, C., & Lapinov, A. V. 2004, ApJ, 611, 615
Cazzoli, G., Puzzarini, C., & Gauss, J. 2005, ApJS, 159, 181
Cazzoli, G., Cludi, L., & Puzzarini, C. 2006, J. Mol. Struct., 780, 260
Ceccarelli, C. 2007, in Molecules in Space and Laboratory
Ceccarelli, C., Castets, A., Loinard, L., Caux, E., & Tielens, A. G. G. M. 1998, A&A, 338, L43
Ceccarelli, C., Castets, A., Caux, E., et al. 2000a, A&A, 355, 1129
Ceccarelli, C., Loinard, L., Castets, A., Tielens, A. G. G. M., & Caux, E. 2000b, A&A, 357, L9
Ceccarelli, C., Maret, S., Tielens, A. G. G. M., Castets, A., & Caux, E. 2003, A&A, 410, 587
Ceccarelli, C., Bacmann, A., Boogert, A., et al. 2010, A&A, 521, L22
Chandler, C. J., Brogan, C. L., Shirley, Y. L., & Loinard, L. 2005, ApJ, 632, 371
Chen, W., Novick, S. E., McCarthy, M. C., Gottlieb, C. A., & Thaddeus, P. 1995, J. Chem. Phys., 103, 7828
Cho, S., & Saito, S. 1998, ApJ, 496, L51
Clouthier, D. J., Huang, G., Adam, A. G., & Merer, A. J. 1994, J. Chem. Phys., 101, 7300
Comito, C., Schilke, P., Phillips, T. G., et al. 2005, ApJS, 156, 127
Crimier, N., Ceccarelli, C., Maret, S., et al. 2010, A&A, 519, A65

Crovisier, J., Biver, N., Bockelée-Morvan, D., et al. 2004, in Planetary Systems in the Universe, ed. A. Penny, IAU Symp., 202, 178
de Graauw, T., Helmich, F. P., Phillips, T. G., et al. 2010, A&A, 518, L6
Demyk, K., Mäder, H., Tercero, B., et al. 2007, A&A, 466, 255
Dore, L., Puzzarini, C., & Cazzoli, G. 2001, Can. J. Phys., 79, 359
Fusina, L., di Lonardo, G., Johns, J. W. C., & Halonen, L. 1988, J. Mol. Spect., 127, 240
Goldsmith, P. F. 2001, ApJ, 557, 736
Golubiatnikov, G. Y., Lapinov, A. V., Guarnieri, A., & Knöchel, R. 2005, J. Mol. Spect., 234, 190
Guarnieri, A., & Huckauf, A. 2003, Z. Naturforsch, 58, 275
Hatchell, J., Thompson, M. A., Millar, T. J., & MacDonald, G. H. 1998, A&AS, 133, 29
Helmich, F. P., & van Dishoeck, E. F. 1997, A&AS, 124, 205
Herbst, E., & van Dishoeck, E. F. 2009, ARA&A, 47, 427
Huang, H., Kuan, Y., Charnley, S. B., et al. 2005, Adv. Space Res., 36, 146
Johns, J. W. C. 1985, J. Opt. Soc. Am. B Opt. Phys., 2, 1340
Jørgensen, J. K., Schöier, F. L., & van Dishoeck, E. F. 2002, A&A, 389, 908
Jørgensen, J. K., Lahuis, F., Schöier, F. L., et al. 2005, ApJ, 631, L77
Kim, E., & Yamamoto, S. 2003, J. Mol. Spect., 219, 296
Kim, H., Cho, S., Chung, H., et al. 2000, ApJS, 131, 483
Kim, S., Kim, H., Lee, Y., et al. 2006, ApJS, 162, 161
Klapper, G., Lewen, F., Gendriesch, R., Belov, S. P., & Winnewisser, G. 2001, Zeitschrift Naturforschung Teil A, 56, 329
Klapper, G., Surin, L., Lewen, F., et al. 2003, ApJ, 582, 262
Klaus, T., Saleck, A. H., Belov, S. P., et al. 1996, J. Mol. Spect., 180, 197
Kleiner, I., Lovas, F. J., & Godefroid, M. 1996, J. Phys. Chem. Ref. Data, 25, 1113
Klisch, E., Klaus, T., Belov, S. P., Winnewisser, G., & Herbst, E. 1995, A&A, 304, L5
Kuan, Y., Huang, H., Charnley, S. B., et al. 2004, ApJ, 616, L27
Kutner, M. L., & Ulich, B. L. 1981, ApJ, 250, 341
Lapinov, A. V., Golubiatnikov, G. Y., Markov, V. N., & Guarnieri, A. 2007, Astron. Lett., 33, 121
Lattanzi, V., Walters, A., Drouin, B. J., & Pearson, J. C. 2007, ApJ, 662, 771
Lee, C. W., Cho, S., & Lee, S. 2001, ApJ, 551, 333
Leguennec, M., Demaison, J., Wlodarczak, G., & Marsden, C. J. 1993, J. Mol. Spect., 160, 471
Lohilahti, J., & Horneman, V. 2004, J. Mol. Spect., 228, 1
Loinard, L., Castets, A., Ceccarelli, C., et al. 2000, A&A, 359, 1169
Loinard, L., Torres, R. M., Mioduszewski, A. J., & Rodríguez, L. F. 2008, ApJ, 675, L29
Lovas, F. J., & Suenram, R. D. 1982, J. Mol. Spect., 93, 416
Lovas, F. J., & Suenram, R. D. 1987, J. Chem. Phys., 87, 2010
Lovas, F. J., Suenram, R. D., Ogata, T., & Yamamoto, S. 1992, ApJ, 399, 325
MacDonald, G. H., Gibb, A. G., Habing, R. J., & Millar, T. J. 1996, A&AS, 119, 333
Maeda, A., De Lucia, F. C., & Herbst, E. 2008, J. Mol. Spect., 251, 293
Margulès, L., Lewen, F., Winnewisser, G., Botschwina, P., & Müller, H. S. P. 2003, Phys. Chem. Chem. Phys. (Incorporating Faraday Transactions), 5, 2770
Margulès, L., Motiyenko, R., Demyk, K., et al. 2009, A&A, 493, 565
Meerts, W. L., & Dymanus, A. 1972, J. Mol. Spect., 44, 320
Minowa, H., Satake, M., Hirota, T., et al. 1997, ApJ, 491, L63
Mizuno, A., Fukui, Y., Iwata, T., Nozawa, S., & Takano, T. 1990, ApJ, 356, 184
Mollaaghababa, R., Gottlieb, C. A., Vrtilek, J. M., & Thaddeus, P. 1993, J. Chem. Phys., 99, 890
Müller, H. S. P., Farhoomand, J., Cohen, E. A., et al. 2000a, J. Mol. Spect., 201, 1
Müller, H. S. P., Gendriesch, R., Lewen, F., & Winnewisser, G. 2000b, Zeitschrift Naturforschung Teil A, 55, 486
Müller, H. S. P., Gendriesch, R., Margulès, L., et al. 2000c, Phys. Chem. Chem. Phys. (Incorporating Faraday Transactions), 2, 3401
Müller, H. S. P., Winnewisser, G., Demaison, J., Perrin, A., & Valentin, A. 2000d, J. Mol. Spect., 200, 143
Müller, H. S. P., Thorwirth, S., Roth, D. A., & Winnewisser, G. 2001, A&A, 370, L49
Müller, H. S. P., Menten, K. M., & Mäder, H. 2004, A&A, 428, 1019
Müller, H. S. P., Schlöder, F., Stutzki, J., & Winnewisser, G. 2005, J. Mol. Struct., 742, 215
Müller, H. S. P., Drouin, B. J., & Pearson, J. C. 2009, A&A, 506, 1487
Mundy, L. G., Wootten, A., Wilking, B. A., Blake, G. A., & Sargent, A. I. 1992, ApJ, 385, 306
Neustock, W., Guarnieri, A., & Demaison, G. 1990, Z. Naturforsch, 45, 702
Nummelin, A., Bergman, P., Hjalmarson, A., et al. 1998, ApJS, 117, 427
Nummelin, A., Bergman, P., Hjalmarson, Å., et al. 2000, ApJS, 128, 213
Olofsson, A. O. H., Persson, C. M., Koning, N., et al. 2007, A&A, 476, 791
Padovani, M., Walmsley, C. M., Tafalla, M., Galli, D., & Müller, H. S. P. 2009, A&A, 505, 1199
Parise, B., Ceccarelli, C., Tielens, A. G. G. M., et al. 2002, A&A, 393, L49
Parise, B., Castets, A., Herbst, E., et al. 2004, A&A, 416, 159
Parise, B., Caux, E., Castets, A., et al. 2005a, A&A, 431, 547
Parise, B., Ceccarelli, C., & Maret, S. 2005b, A&A, 441, 171
Pech, G., Loinard, L., Chandler, C. J., et al. 2010, ApJ, 712, 1403
Pickett, H. M., Poynter, I. R. L., Cohen, E. A., et al. 1998, J. Quant. Spect. Rad. Transf., 60, 883
Pilbratt, G. L., Riedinger, J. R., Passvogel, T., et al. 2010, A&A, 518, L1
Pizzarello, S., & Huang, Y. 2005, Geochim. Cosmochim. Acta, 69, 599
Remijan, A. J., & Hollis, J. M. 2006, ApJ, 640, 842
Schilke, P., Groesbeck, T. D., Blake, G. A., & Phillips, T. G. 1997, ApJS, 108, 301
Schilke, P., Benford, D. J., Hunter, T. R., Lis, D. C., & Phillips, T. G. 2001, ApJS, 132, 281
Schmid-Burgk, J., Muders, D., Müller, H. S. P., & Brupbacher-Gatehouse, B. 2004, A&A, 419, 949
Schöier, F. L., Jørgensen, J. K., van Dishoeck, E. F., & Blake, G. A. 2002, A&A, 390, 1001
Schöier, F. L., Jørgensen, J. K., van Dishoeck, E. F., & Blake, G. A. 2004, A&A, 418, 185
Spahn, H., Müller, H. S. P., Giesen, T. F., et al. 2008, Chem. Phys., 346, 132
Takakuwa, S., Ohashi, N., Bourke, T. L., et al. 2007, ApJ, 662, 431
Tercero, B., Cernicharo, J., Pardo, J. R., & Goicoechea, J. R. 2010, A&A, 517, A96
Thompson, M. A., & MacDonald, G. H. 1999, A&AS, 135, 531
Thorwirth, S., Müller, H. S. P., Lewen, F., Gendriesch, R., & Winnewisser, G. 2000a, A&A, 363, L37
Thorwirth, S., Müller, H. S. P., & Winnewisser, G. 2000b, J. Mol. Spect., 204, 133
Thorwirth, S., Müller, H. S. P., Lewen, F., et al. 2003, ApJ, 585, L163
van der Tak, F. F. S., Müller, H. S. P., Harding, M. E., & Gauss, J. 2009, A&A, 507, 347
van Dishoeck, E. F., Blake, G. A., Jansen, D. J., & Groesbeck, T. D. 1995, ApJ, 447, 760
Wakelam, V., Castets, A., Ceccarelli, C., et al. 2004, A&A, 413, 609
White, G. J., Araki, M., Greaves, J. S., Ohishi, M., & Higginbottom, N. S. 2003, A&A, 407, 589
Winnewisser, G., Belov, S. P., Klaus, T., & Schieder, R. 1997, J. Mol. Spect., 184, 468
Wootten, A. 1989, ApJ, 337, 858
Xu, L., & Lovas, F. J. 1997, J. Phys. Chem. Ref. Data, 26, 17
Yamamoto, S., & Saito, S. 1994, J. Chem. Phys., 101, 5484

Pages 15 to 41 are available in the electronic edition of the journal at http://www.aanda.org

A&A 521, L31 (2010)
DOI: 10.1051/0004-6361/201015101
© ESO 2010

Astronomy & Astrophysics
Special feature

Herschel/HIFI: first science highlights

LETTER TO THE EDITOR

Ortho-to-para ratio of interstellar heavy water⋆

C. Vastel[1,2], C. Ceccarelli[3,4,5], E. Caux[1,2], A. Coutens[1,2], J. Cernicharo[6], S. Bottinelli[1,2], K. Demyk[1,2], A. Faure[3], L. Wiesenfeld[3], Y. Scribano[7], A. Bacmann[3,4,5], P. Hily-Blant[3], S. Maret[3], A. Walters[1,2], E. A. Bergin[8], G. A. Blake[9], A. Castets[3,4,5], N. Crimier[3,6], C. Dominik[10,11], P. Encrenaz[12], M. Gérin[12], P. Hennebelle[12], C. Kahane[3], A. Klotz[1,2], G. Melnick[13], L. Pagani[12], B. Parise[14], P. Schilke[14,15], V. Wakelam[4,5], A. Baudry[4,5], T. Bell[9], M. Benedettini[16], A. Boogert[17], S. Cabrit[12], P. Caselli[18], C. Codella[19], C. Comito[14], E. Falgarone[12], A. Fuente[20], P. F. Goldsmith[21], F. Helmich[22], T. Henning[23], E. Herbst[24], T. Jacq[4,5], M. Kama[10], W. Langer[21], B. Lefloch[3], D. Lis[9], S. Lord[17], A. Lorenzani[19], D. Neufeld[25], B. Nisini[26], S. Pacheco[3], J. Pearson[21], T. Phillips[9], M. Salez[12], P. Saraceno[16], K. Schuster[27], X. Tielens[28], F. van der Tak[22,29], M. H. D. van der Wiel[22,29], S. Viti[30], F. Wyrowski[14], H. Yorke[21] P. Cais[4,5], J. M. Krieg[12], M. Olberg[22,31], and L. Ravera[1,2]

(Affiliations are available on page 5 of the online edition)

Received 28 May 2010 / Accepted 25 July 2010

ABSTRACT

Context. Despite the low elemental deuterium abundance in the Galaxy, enhanced molecular D/H ratios have been found in the environments of low-mass star-forming regions, and in particular the Class 0 protostar IRAS 16293-2422.

Aims. The CHESS (Chemical *HErschel* Surveys of Star forming regions) key program aims to study the molecular complexity of the interstellar medium. The high sensitivity and spectral resolution of the *Herschel*/HIFI instrument provide a unique opportunity to observe the fundamental $1_{1,1}-0_{0,0}$ transition of the ortho-D_2O molecule, which is inaccessible from the ground, and determine the ortho-to-para D_2O ratio.

Methods. We detected the fundamental transition of the ortho-D_2O molecule at 607.35 GHz towards IRAS 16293-2422. The line is seen in absorption with a line opacity of 0.62 ± 0.11 (1σ). From the previous ground-based observations of the fundamental $1_{1,0}-1_{0,1}$ transition of para-D_2O seen in absorption at 316.80 GHz, we estimate a line opacity of 0.26 ± 0.05 (1σ).

Results. We show that the observed absorption is caused by the cold gas in the envelope of the protostar. Using these new observations, we estimate for the first time the ortho-to-para D_2O ratio to be lower than 2.6 at a 3σ level of uncertainty, which should be compared with the thermal equilibrium value of 2:1.

Key words. astrochemistry – ISM: molecules – submillimeter: ISM – ISM: abundances – molecular processes – line: identification

1. Introduction

Among all molecules in interstellar space, water is special because of its dominant role in the cooling of warm gas and in the oxygen chemistry as well as for its role in the chemistry of the atmospheres of exoplanets and its potential connection with life. Water abundance in cold molecular gas is very low because it is frozen onto the interstellar grains and forms icy mantles around them. Although water can form theoretically by means of gaseous reactions that first form H_2O^+ and H_3O^+ (e.g. Rodgers & Charnley 2002), no observational evidence of this has yet been found. It is assumed that the major mechanism of water formation occurs on grain surfaces. One observable that helps us to discriminate between the various formation mechanisms is the abundance of single and double deuterated water relative to the normal isotopologue. Another potential discriminant is the ortho-to-para ratio (OPR), namely the ratio of water molecules with different nuclear spins. Since radiative and inelastic collisional transitions between the two ortho and para states are strongly forbidden, the OPR is set at the moment of the water formation and is changed by nuclear spin reactions exchange later on. This can occur in either the gas phase by reactions with ions in which actual nuclei change places, or on the grain surfaces by interaction with electron spins or, perhaps, even other nuclear spins (e.g. Le Bourlot 2000; Limbach et al. 2006). Although little is known about the spin exchange in the gas phase, it is usually assumed that this is a slow process and that the OPR is likely to retain information about the moment of its formation. Emprechtinger et al. (2010); Lis et al. (2010) report determinations of the water OPR in several environments based on new *Herschel* observations. The doubly deuterated isotopologue of water, D_2O, consists of two species, ortho and para with a nuclear spin statistic weight 2:1. To date, D_2O has only been detected towards the solar-type protostar IRAS 16293-2422 (hereafter IRAS 16293), by observing the fundamental transition of the para-D_2O transition at 316.8 GHz (see our Fig. 1 and Butner et al. 2007). The observed line profile (see Fig. 2) shows a component in emission with a deep absorption at the cloud velocity (~4 km s^{-1}). The emission component has been attributed to heavy water in the hot corino of this source where the grain ices are sublimated and released into the gas phase (Ceccarelli et al. 2000; Bottinelli et al. 2004), based on the detailed analysis of several HDO lines observed in IRAS 16293

⋆ *Herschel* is an ESA space observatory with science instruments provided by European-led principal Investigator consortia and with important participation from NASA.

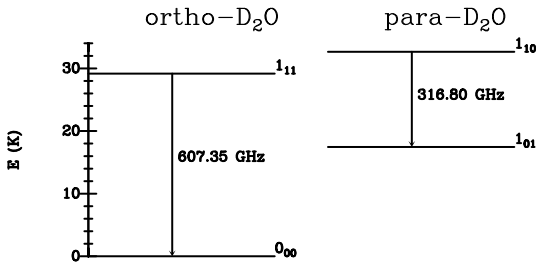


Fig. 1. Energy levels for the detected fundamental lines of D_2O.

(Parise et al. 2005). The absorption component, whose linewidth is 0.5 km s^{-1}, probably originates in the foreground gas (molecular cloud and cold envelope). Therefore, the absorption component provides a straightforward measure of the column density of para-D_2O in the cold gas surrounding IRAS 16293.

2. Observations and results

In the framework of the key program CHESS (Ceccarelli et al. 2010), we observed the solar type protostar IRAS 16293 with the HIFI instrument (de Graauw et al. 2010; Roelfsema et al. 2010) onboard the *Herschel* Space Observatory (Pillbrat et al. 2010). A full spectral coverage of band 1b between 554.5 and 636.5 GHz was performed on 2010 March 2, using the HIFI spectral scan double beam switch (DBS) mode with optimization of the continuum. The fundamental ortho-D_2O ($1_{1,1}$−$0_{0,0}$) transition lies in this frequency range, at 607.35 GHz (see Fig. 1). The HIFI wide band spectrometer (WBS) was used, providing a spectral resolution of 1.1 MHz (~0.55 km s^{-1} at 600 GHz) over an instantaneous bandwidth of 4 × 1 GHz. We note that the data are acquired at the Nyquist sampling, therefore, with 0.5 MHz steps. The targeted coordinates were α_{2000} = $16^h32^m22\overset{s}{.}75$, δ_{2000} = −24°28′34.2″. The beam size at 610 GHz is about 35″, the theoretical main beam (respectively forward) efficiency is 0.72 (resp. 0.96), and the DBS reference positions were situated approximately 3′ east and west of the source. The data were processed using the standard HIFI pipeline up to level 2 with the ESA-supported package HIPE 3.01 (Ott et al. 2010). The 1 GHz chunks are then exported as FITS files into CLASS/GILDAS format[1] for subsequent data reduction and analysis using generic spectral survey tools developed in CLASS by our group. When present, spurs were removed in each 1 GHz scan and a low order polynomial (≤2) baseline was fitted over line-free regions to correct residual bandpass effects. These polynomials were subtracted and used to determine an accurate continuum level by calculating their medians. Sideband deconvolution is computed with the minimisation algorithm of Comito & Schilke (2002) implemented into CLASS using the baseline-subtracted spectra and assuming side-band gain ratio to be unity for all tunings. Both polarisations were averaged to lower the noise in the final spectrum. The continuum values obtained are closely fitted by straight lines over the frequency range of the whole band. The single sideband continuum derived from the polynomial fit at the considered frequency was added to the spectra. Finally, the deconvolved data were analysed with CASSIS software[2]. Exact measurements of the main beam efficiency were not performed on planets at the time of our observations. However, we consider here absorption measurements, and are interested only in the relative depth of the absorption relative to the continuum level. We consequently present in the following the spectrum

[1] http://www.iram.fr/IRAMFR/GILDAS

[2] Developed by CESR-UPS/CNRS: http://cassis.cesr.fr

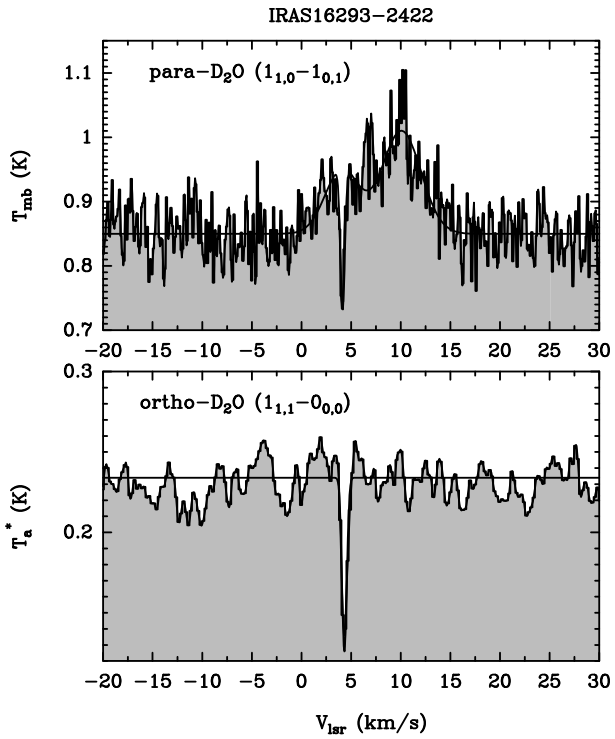


Fig. 2. Profile of the para-D_2O ($1_{1,0}$−$1_{0,1}$) line (histogram) observed at JCMT (*upper panel*), as well as the 3 component Gaussian fit (solid line) and ortho-D_2O ($1_{1,1}$−$1_{0,1}$) line observed with HIFI (*bottom panel*).

(Fig. 2) and parameters (Table 1) in T_a^* for the ortho-D_2O line. The bottom panel of Fig. 2 shows the resulting HIFI spectrum and its measured continuum level of (234 ± 19) mK (where the error includes the statistical error only). We note that the absolute accuracy of the calibration is not important when measuring absorption, since lines and continuum are affected the same way. Therefore, the main source of the uncertainty is the accuracy of the continuum. The achieved rms is about 12 mK in T_a^*, in the 0.5 MHz frequency bin. The fundamental ortho-D_2O transition at 607 349.449 MHz is clearly detected in absorption against the strong continuum, at the velocity of ~4 km s^{-1}. No other lines in the image sideband are expected at this velocity. The parameters of the line, obtained using CASSIS, which takes into account the ortho and para D_2O forms separately from the Cologne Database for Molecular Spectroscopy (Müller et al. 2005; Brünken et al. 2007), are reported in Table 1. In the same table, we report also the parameters of the para-D_2O ($1_{1,0}$−$1_{0,1}$) fundamental line previously observed at the JCMT, published by Butner et al. (2007), at a rest frequency of 316 799.81 MHz. The data were retrieved from the JCMT archive and reduced within CLASS. We performed a 3-component Gaussian fit with CASSIS and the resulting fit is reproduced in Fig. 2 on top of the data in main beam temperatures. The para-D_2O line in emission has an intensity of 0.10 ± 0.02 K in main beam temperature, and a linewidth of 4.01 ± 0.77 km s^{-1}. The bright line at a V_{lsr} of 10.1 km s^{-1} is likely due to CH_3OD (see Butner et al. 2007) with an intensity of (0.16 ± 0.01) K and a linewidth of (4.6 ± 0.5) km s^{-1}. The parameters for the resulting fit of the para-D_2O absorption line are quoted in Table 1.

3. Determination of the D_2O OPR

Crimier et al. (2010) used the JCMT SCUBA maps of IRAS 16293 at 450 μm and 850 μm (and other data) to

Table 1. Derived parameters of the ortho and para D_2O fundamental lines.

Species	Transition	Frequency GHz	Telescope	$\int T\,dv$ (mK km s^{-1})	$T_{abs} = T_C - T_L$ (mK)	ΔV (km s^{-1})	V_{LSR} (km s^{-1})	T_C (mK)	τ
ortho-D_2O	$1_{1,1}$–$0_{0,0}$	607.34945	*Herschel*	77 ± 17	108 ± 11	0.57 ± 0.09	4.33 ± 0.04	234 ± 19	0.62 ± 0.11
para-D_2O	$1_{1,0}$–$1_{0,1}$	316.79981	JCMT	120 ± 49	220 ± 30	0.55 ± 0.15	4.15 ± 0.04	850 ± 35	0.26 ± 0.05

Notes. Note that the parameters are in T_a^* for ortho-D_2O and T_{mb} for para-D_2O (see text).

reconstruct the structure of the IRAS 16293 envelope. From this work, one can compute the expected continuum in the HIFI beam at 607 GHz (o-D_2O line). Using their SED (Crimier et al. 2010, Fig. 1 panel d) and their Table 1, the IRAS 16293 flux is 270 ± 108 Jy at 450 μm, and the HIFI beam contains approximately 80% of the total source flux (Fig. 1, panel b). One can note that the SED steep slope ensures that the flux at 607 GHz is lower than that at 450 μm (~660 GHz) by about 30%, making the expected flux at 607 GHz be about $0.7 \times 0.8 \times (270 \pm 108)$ Jy i.e. (0.34 ± 0.14) K, using the HIFI Jy to K conversion factor (C. Kramer: Spatial response, contribution to the HIFI framework document), in perfect agreement with the observed continuum value (~0.33 K in main beam temperature). Most of the continuum, more than 70% (resp. 80%) of its peak emission at 316 GHz (resp. 607 GHz) is emitted from a region about 900 AU in radius (~15″ in diameter). The absorption of the continuum by heavy water is most likely due to the cold envelope surrounding IRAS 16293 as well as the parent cloud, much more extended than the continuum emitting region. We note that, as long as the sizes of the absorbing layer are larger than the sizes of the region emitting the continuum, the line-to-continuum ratio does not depend on the sizes of the telescope beam used for the observations. Therefore, we can compute the D_2O OPR directly from the line-to-continuum ratios of the JCMT and *Herschel* observations, with no further correction. We note also that the para-D_2O line has an emission component that Butner et al. (2007) attributed to the hot corino region, whereas here we consider an *absorption* component only. In contrast, the ortho-D_2O line reported here exhibits absorption only because the emission component is probably diluted in the 35″ HIFI beam, which is much larger than the 15″ JCMT beam at 316 GHz.

Adopting the density and temperature profiles of the envelope of IRAS 16293 (Crimier et al. 2010), the gas at a distance larger (in radius) than 900 AU has a temperature lower than 30 K and a density lower than about 5×10^6 cm^{-3} (see Fig. 3). Thus, given the temperature of the gas absorbing the D_2O lines, we consider only the first two levels of each D_2O form. We use computed collisional rates for the two fundamental deexcitation transitions of ortho and para-D_2O with para-H_2 in the 10−30 K range of 2.3×10^{-11} and 3.8×10^{-11} cm^3 s^{-1} respectively (Wiesenfeld et al., in prep.). At the low temperatures found in the cold envelope, it is likely that H_2 is mainly in its para form (Pagani et al. 2009; Troscompt et al. 2009). For the collisional rates given above, the critical densities of the ortho- and para- D_2O fundamental transitions are 1×10^8 and 2×10^7 cm^{-3} respectively, and the upper levels of the two transitions are only moderately subthermally populated for a density of 5×10^6 cm^{-3}. For a two-level system, the species column density can be computed as

$$N_{tot} = \frac{8\pi\nu^3}{A_{ul}c^3}\Delta V \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{\ln 2}}\tau \frac{Q(T_{ex})}{g_u}\frac{\exp(E_u/kT_{ex})}{[\exp(h\nu/kT_{ex})-1]}, \quad (1)$$

where A_{ul} is the Einstein coefficient (2.96×10^{-3} s^{-1} for the ortho transition and 6.3×10^{-4} s^{-1} for the para transition), E_u is the upper level energy (E_u/k = 15.2 K for the para transition and =29.2 K for the ortho transition), g_u is the upper statistical weight ($3 \times (2J+1)$ for the para transition, $6 \times (2J+1)$ for the ortho transitions), ν is the frequency (316.79981 GHz for the para transition and 607.349449 GHz for the ortho transition), ΔV is the linewidth (cm s^{-1}), and τ is the opacity at the line center. The parameter T_{ex} is the excitation temperature and $Q(T_{ex})$ its corresponding partition function. In the approximation of the escape probability formalism, T_{ex} is defined by the equation

$$T_{ex} = \frac{h\nu/k}{h\nu/kT_k + \ln(1 + A_{ul}\beta/C_{ul})}, \quad (2)$$

where $C_{ul} = \gamma_{ul} \times n_{collision}$, $n_{collision}$ being the density of the collision partner (in this case para-H_2) and γ_{ul} being the collisional rate in cm^3 s^{-1} (values given above). The β parameter represents the probability that a photon at some position in the cloud escapes the system. For a static, spherically symmetric, and homogeneous medium, Osterbrock & Ferland (2006) derive this parameter as a function of the optical depth τ in the direction of the observer (see their Appendix 2). The opacity at the line center is expressed as a function of the line depth ($T_{abs} = T_C - T_L$) and the continuum (T_C)

$$\tau = -\ln\left(1 - \frac{T_{abs}}{T_C - J_\nu(T_{ex}) + J_\nu(T_{cmb}))}\right), \quad (3)$$

where $J_\nu(T_{ex}) = (h\nu/k)/(\exp(h\nu/k) - 1)$ and T_{cmb} is the cosmic microwave background radiation temperature (2.73 K). In the limit of $\tau \gg 1$, $T_C - T_{abs} \sim J_\nu(T_{ex}) - J_\nu(T_{cmb})$, and $T_{ex} \sim 5$ K. Since the D_2O transitions are probably optically thin, we can reasonably assume that T_{ex} is lower than 5 K and $J_\nu(T_{ex}) - J_\nu(T_{cmb})$ is negligible.

As discussed above, we assume that the absorbing layer is much larger than the continuum emitting region. Owing to the uncertainty in the H_2 density (lower than 5×10^6 cm^{-3})

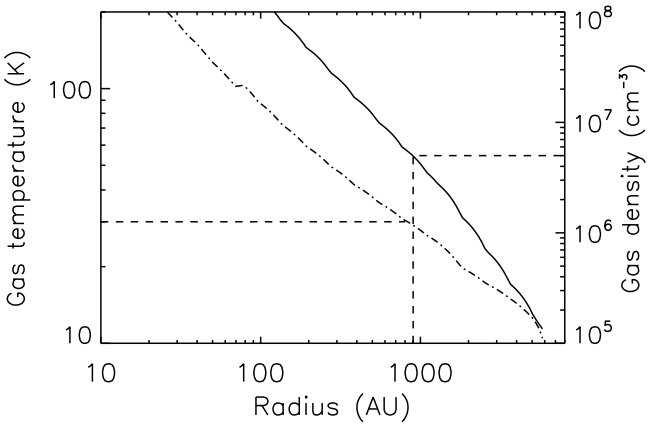


Fig. 3. Density profile (solid line) and gas temperature profile (dot-dashed) of the IRAS 16293 envelope, as computed by Crimier et al. (2010). Values at a radial distance of about 900 AU are also indicated (see text). A distance of 120 pc was used in this computation (Loinard et al. 2008).

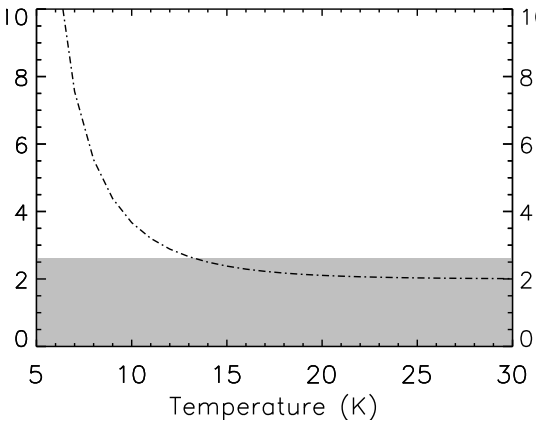


Fig. 4. Upper limit to the measured D_2O OPR (2.6, see text) as a grey box and the Boltzmann value (dotted-dashed line) as a function of temperature.

and the kinetic temperature (lower than 30 K), we applied the method described above to determine the column densities with $n_{H_2} = 10^6$ cm^{-3} and $T_{kin} \sim 20$ K. Table 1 lists the computation of the optical depths for both lines and their corresponding uncertainties. Since $\tau = -\ln(T_L/T_C)$, the uncertainty in the line optical depth is given by $\delta\tau = \exp(\tau) \times \delta(T_L/T_C)$. Our computation yields an OPR equal to 1.1 ± 0.4 with the corresponding column densities $N_{ortho} = (8.7 \pm 2.1) \times 10^{11}$ cm^{-2} and $N_{para} = (7.8 \pm 2.6) \times 10^{11}$ cm^{-2}. All errors here are 1σ. Both lines are optically thin and their T_{ex} are lower than 5 K. We note that decreasing the density and/or the kinetic temperature does not change the OPR by more than 10%. Therefore, the OPR is lower than 2.4 at a 3σ level of uncertainty (where we added the 3σ statistical error and the mentioned 10% to the 1.1 value). We assumed (see Sect. 2) that the relative gains to the lower and upper sidebands are equal. Since we do not have any information about the sideband ratio at the frequency of the D_2O line, we can only introduce a maximum uncertainty of 16%, corresponding to the overall calibration budget for band 1b. The resulting upper limit to the OPR is therefore increased to about 2.6. Figure 4 shows the measured OPR interval and the thermal equilibrium as a function of the gas temperature.

4. Conclusions

As discussed in Sect. 3, the gas absorbing the D_2O line is located more than 900 AU from the center and has a temperature that is lower than 30 K. The comparison between the upper value of the measured D_2O OPR and the thermal equilibrium value shows that they are consistent with a gas at a temperature of higher than about 15 K (at a 3σ level of confidence), and, therefore, with the assumed absorbing gas location. On the other hand, the D_2O gas may have formed in a previous phase, where the gas was colder, and, in this case, it means that it had the time to thermalise to the Boltzmann value. Unfortunately, given our poor knowledge of the mechanisms that can exchange the D_2O spins (see the Introduction), it is difficult here to infer the timescale for this change and, consequently, to provide a lower limit to the object age. On the other hand, the relatively large uncertainty in the OPR derived here does not allow either to exclude a non- thermal equilibrium situation. Higher signal-to-noise ratio observations will be needed to lower the uncertainty in the OPR value and derive a more robust result.

Using the density and temperature profiles of the envelope of IRAS 16293 by Crimier et al. (2010), the column density of the gas colder than 30 K is about 1×10^{23} cm^{-2}. Therefore, the D_2O abundance (with respect to H_2) is about 2×10^{-11}. An estimate of the water abundance profile will soon be available with the HIFI observations with a much higher spatial and spectral resolution than the one provided by the ISO observations (Ceccarelli et al. 2000). The D_2O molecules might form with one OPR, but then could freeze out on grain surfaces that could modify the ratio and then become desorbed. Owing to the high uncertainty in the H_2O abundance, we cannot at the time being completely exclude or confirm that formation can be described by grain surface chemistry. A modeling of the OPR evolution is beyond the scope of the present letter. With an improved calibration and better understanding of the instrumental effects, a more accurate determination of the D_2O OPR in this source and potentially other sources will be possible. ALMA may also hopefully yield an answer in the near future with the observation of cold D_2O with a higher spatial resolution.

To summarize, this Letter presents the first tentative estimate of the OPR for the D_2O molecule, demonstrating the outstanding capabilities of the HIFI instrument. The poor knowledge of the exchange mechanisms of the nuclear spins and the relatively large error in the derived OPR prevent us from drawing firm conclusions about the formation of heavy water at that time.

Acknowledgements. HIFI has been designed and built by a consortium of institutes and university departments from across Europe, Canada and the United States under the leadership of SRON Netherlands Institute for Space Research, Groningen, The Netherlands and with major contributions from Germany, France and the US. Consortium members are: Canada: CSA, U.Waterloo; France: CESR, LAB, LERMA, IRAM; Germany: KOSMA, MPIfR, MPS; Ireland, NUI Maynooth; Italy: ASI, IFSI-INAF, Osservatorio Astrofisico di Arcetri-INAF; Netherlands: SRON, TUD; Poland: CAMK, CBK; Spain: Observatorio Astronómico Nacional (IGN), Centro de Astrobiología (CSIC-INTA). Sweden: Chalmers University of Technology - MC2, RSS & GARD; Onsala Space Observatory; Swedish National Space Board, Stockholm University – Stockholm Observatory; Switzerland: ETH Zurich, FHNW; USA: Caltech, JPL, NHSC. We thank many funding agencies for financial support. We would like to acknowledge S. Charnley, T. Jenness, R. Redman, R. Tilanus and J. Wooterloot for their help in retrieving the para-D_2O data at JCMT.

References

Bottinelli, S., Ceccarelli, C., Neri, R., et al. 2004, ApJ, 617, L69
Brünken, S., Müller, H. S. P., Endres, C., et al. 2007, Phys. Chem. Chem. Phys., 9, 2103
Butner, H. M., Charnley, S. B., Ceccarelli, C., et al. 2007, ApJ, 659, L137
Ceccarelli, C., Castets, A., Caux, E., et al. 2000, A&A, 355, 1129
Ceccarelli, C., Bacmann, A., Boogert, A., et al. 2010, A&A, 521, L22
Comito, C., & Schilke, P. 2002, A&A, 395, 357
Crimier, N., Ceccarelli, C., Maret, S., et al. 2010, A&A, 519, A65
de Graauw, Th., Phillips, T. G., Stutzki, J., et al. 2010, A&A, 518, L6
Emprechtinger, M., Lis, D. C., Bell, T., et al. 2010, A&A, 521, L28
Le Bourlot, J. 2000, A&A, 360, 656
Limbach, H., Buntkowsky, G., Matthes, J., et al. 2006, Chem. Phys. Chem., 360, 551
Lis, D. C., Phillips, T. G., Goldsmith, P. F., et al. 2010, A&A, 521, L26
Loinard, L., Torres, R. M., Mioduszewski, A. J., & Rodríguez, L. F. 2008, ApJ, 675, L29
Müller, H. S. P., Schlöder, F., Stutzki, J., & Winnewisser, G. 2005, J. Mol. Struct., 742, 215
Osterbrock, D. E., & Ferland, G. J. 2006, Astrophysics of gaseous nebulae and active galactic nuclei, ed. D. E. Osterbrock, & G. J. Ferland (CA: University Science Books)
Pagani, L., Vastel, C., Hugo, E., et al. 2009, A&A, 494, 623
Parise, B., Caux, E., Castets, A., et al. 2005, A&A, 431, 547
Pillbrat, G. L., Riedinger, J. R., Passvogel, T., et al. 2010, A&A, 518, L1
Rodgers, S. D., & Charnley, S. B. 2002, Planet. Space Sci., 50, 1125
Roelfsema, P. R., Helmich, F. P., Teyssier, D., et al. 2010, A&A, submitted
Troscompt, N., Faure, A., Maret, S., et al. 2009, A&A, 506, 1243

[1] Centre d'Étude Spatiale des Rayonnements, Université Paul Sabatier, Toulouse, France
e-mail: vastel@cesr.fr
[2] CNRS/INSU, UMR 5187, Toulouse, France
[3] Laboratoire d'Astrophysique de Grenoble, UMR 5571-CNRS, Université Joseph Fourier, Grenoble, France
[4] Université de Bordeaux, Laboratoire d'Astrophysique de Bordeaux, Floirac, France
[5] CNRS/INSU, UMR 5804, Floirac Cedex, France
[6] Centro de Astrobiologìa, CSIC-INTA, Madrid, Spain
[7] Laboratoire Interdisciplinaire Carnot de Bourgogne, UMR 5209-CNRS, Dijon Cedex, France
[8] Department of Astronomy, University of Michigan, Ann Arbor, USA
[9] California Institute of Technology, Pasadena, USA
[10] Astronomical Institute Anton Pannekoek, University of Amsterdam, Amsterdam, The Netherlands
[11] Department of Astrophysics/IMAPP, Radboud University Nijmegen, Nijmegen, The Netherlands
[12] Laboratoire d'Études du Rayonnement et de la Matière en Astrophysique, UMR 8112 CNRS/INSU, OP, ENS, UPMC, UCP, Paris, France
[13] Harvard-Smithsonian Center for Astrophysics, Cambridge MA, USA
[14] Max-Planck-Institut für Radioastronomie, Bonn, Germany
[15] Physikalisches Institut, Universität zu Köln, Köln, Germany
[16] INAF - Istituto di Fisica dello Spazio Interplanetario, Roma, Italy
[17] Infared Processing and Analysis Center, Caltech, Pasadena, USA
[18] School of Physics and Astronomy, University of Leeds, Leeds, UK
[19] INAF Osservatorio Astrofisico di Arcetri, Florence, Italy
[20] IGN Observatorio Astronómico Nacional, Alcalá de Henares, Spain
[21] Jet Propulsion Laboratory, Caltech, Pasadena, CA 91109, USA
[22] SRON Netherlands Institute for Space Research, Groningen, The Netherlands
[23] Max-Planck-Institut für Astronomie, Heidelberg, Germany
[24] Ohio State University, Columbus, OH, USA
[25] Johns Hopkins University, Baltimore MD, USA
[26] INAF - Osservatorio Astronomico di Roma, Monte Porzio Catone, Italy
[27] Institut de RadioAstronomie Millimétrique, Grenoble, France
[28] Leiden Observatory, Leiden University, Leiden, The Netherlands
[29] Kapteyn Astronomical Institute, University of Groningen, The Netherlands
[30] Department of Physics and Astronomy, University College London, London, UK
[31] Chalmers University of Technology, Gøterborg, Sweden

Acronymes

ALMA	Atacama Large Millimeter Array
AOR	Astronomical Observation Requests
APEX	Atacama Pathfinder EXperiment
ATCA	Australia Telescope Compact Array
BIMA	Berkeley-Illinois-Maryland Association
CASSIS	Centre d'Analyse Scientifique de Spectres Infrarouges et Submillimétriques
CDMS	The Cologne Database for Molecular Spectroscopy
CHESS	Chemical HErschel Surveys of Star forming regions
CLASS	Continuum and Line Analysis Single-dish Software
CSO	Caltech Submillimeter Observatory
DBS	Double Beam Switching
DSB	Double SideBand
FWHM	Full Width at Half-Maximum
ETL	Equilibre Thermodynamique Local
HEB	Hot Electron Bolometer
HEXOS	Herschel/HIFI observations of EXtraOrdinary Sources
HIFI	Heterodyne Instrument for Far-Infrared
HIPE	Herschel Interactive Processing Environment
HRS	High Resolution Spectrometer
HSPOT	Herschel SPace Observations planning Tools
IRAM	Institut de Radio-Astronomie Millimétrique
IRAP	Institut de Recherche en Astrophysique et Planétologie
IRAS	Infrared Astronomical Satellite
ISO	InfraRed Space Observatory
JCMT	James Clerck Maxwell Telescope
JPL	Jet Propulsion Laboratory
LSB	Lower SideBand
LWS	Long Wavelength Spectrometer
MIRIAD	Multichannel Image Reconstruction, Image Analysis and Display
PACS	Photodetector Array Camera & Spectrometer
PRISMAS	PRobing InterStellar Molecules with Absorption line Studies
SIS	Supraconducteur - Isolant - Supraconducteur
SMA	SubMillimeter Array
SOFIA	Stratospheric Observatory for Infrared Astronomy
SPIRE	Spectral & Photometric Imaging REceiver
SSB	Single SideBand
SWAS	Submillimeter Wave Astronomy Satellite
TIMASSS	The IRAS16293-2422 Millimeter and Submillimeter Spectral Survey
USB	Upper SideBand

WBS	Wide Band Spectrometer
WCCC	Warm Carbon-Chain Chemistry
WISH	Water In Star-forming regions with Herschel

Table des figures

1.1 Les différentes étapes de la formation stellaire 3
1.2 Les quatre classes observationnelles du scénario de formation des étoiles de faible. 5
1.3 Scénario expliquant la différence de chimie entre sources *WCCC* et *hot corinos*. 11
1.4 Diagramme d'énergie potentielle des espèces H_2, HD et D_2. 13
1.5 Réseau chimique de l'ion H_3^+ et ses formes deutérées 15
1.6 Processus de fractionnement en phase gazeuse et à la surface des grains. . . . 15
1.7 Principales réactions en phase gazeuse et à la surface des grains menant à la formation de l'eau. 18
1.8 Variation du rapport ortho/para de l'eau à l'équilibre en fonction de la température. 19
1.9 Situation des deux principaux réservoirs de comètes : la ceinture de Kuiper et le nuage de Oort, par rapport au Système Solaire. 23
1.10 Rapports D/H dans le Système Solaire. 23
1.11 Le satellite Herschel. 25
1.12 Les cinq points de Lagrange du système Terre-Soleil. 25
1.13 Les trois instruments du satellite Herschel : HIFI, PACS et SPIRE. 25
1.14 Le spectromètre HIFI. 25
1.15 Schéma d'un récepteur hétérodyne. 27
1.16 Principe de la technique hétérodyne au niveau fréquentiel. 27
1.17 Opacité atmosphérique en fonction de la fréquence. 28
1.18 Position des sources PRISMAS dans le plan galactique. 30
1.19 Signature spectrale du ^{13}CO (1-0) et (2-1) de la région de formation d'étoiles W49N, émettant à environ 8 $km\,s^{-1}$, ainsi que des nuages moléculaires sur la ligne de visée. 31

2.1 Le radiotélescope de l'IRAM de 30 m de diamètre (Pico Veleta, Espagne). . . 34
2.2 L'interféromètre ATCA composé de 6 antennes de 22 m de diamètre (Narrabri, Australie). 34
2.3 Principe d'un radiotélescope. 36
2.4 Diagramme de rayonnement reçu par une antenne. 36
2.5 Exemples d'observations réalisées en direction de la région HII compacte W31C dans le cadre du programme PRISMAS qui illustrent l'intérêt d'observer à trois fréquences de l'Oscillateur Local différentes. 38
2.6 Continuum SSB de la proto-étoile IRAS 16293-2422 observé avec HIFI en fonction de la fréquence pour les polarisations H et V. 41
2.7 Isomères du C_3H_7CN : le cyanure d'*iso*-propyl et le cyanure de *n*-propyl. . . . 44

2.8 Distribution de la densité des raies identifiées dans chacune des 4 bandes spectrales du relevé spectral TIMASSS. 46
2.9 Graphes des largeurs à mi-hauteur $FWHM$ en fonction des vitesses au repos v_{LSR} déduits des ajustements gaussiens des raies du relevé spectral TIMASSS. 48
2.10 Graphes des largeurs à mi-hauteur $FWHM$ en fonction des énergies de niveau supérieur $E_{\rm up}$ des différentes transitions du relevé spectral TIMASSS. 49
2.11 Propagation de photons à travers un nuage. 51
2.12 Propagation de photons à travers un nuage couplé à une source de continuum située en arrière-plan. 52
2.13 Equilibre statistique entre deux niveaux de population. 54
2.14 Différence entre les méthodes de Monte-Carlo basée sur le point de vue des photons et sur le point de vue des cellules. 60
2.15 Vue schématique du code de transfert radiatif RATRAN. 62
2.16 Exemple de carte obtenue avec RATRAN entre $-5''$ et $+5''$ pour la transition fondamentale $1_{0,1} - 0_{0,0}$ de HDO à 465 GHz. 63
2.17 Profil de raie obtenu en convoluant la carte modélisée grâce au code de transfert radiatif RATRAN (en Fig. 2.16) avec le lobe du télescope JCMT à 465 GHz. 64

3.1 Image du nuage de ρ Oph situé à proximité de la constellation du Scorpion. . 66
3.2 Vue schématique de la proto-étoile IRAS 16293. 66
3.3 Diagramme des niveaux d'énergie des transitions de HDO observées en direction de la proto-étoile IRAS 16293. 69
3.4 Structure de la source IRAS 16293 déterminée par Crimier et al. (2010). . . . 72
3.5 Observations interférométriques de la transition HDO à 226 GHz en direction de la proto-étoile IRAS 16293. 72
3.6 Comparaison entre les coefficients de collision de HDO calculés par Green (1989) avec l'Hélium (et normalisés par rapport à H_2) et les nouveaux coefficients de collision déterminés par Faure et al. (2011) avec ortho et para–H_2. . 75
3.7 Rapport ortho/para de H_2 à l'équilibre thermodynamique local. 75
3.8 Différence de modélisation des absorptions des deux transitions fondamentales $1_{1,1}$–$0_{0,0}$ et $1_{1,0}$–$0_{0,0}$ de HDO observées dans la proto-étoile IRAS 16293 avec ou sans ajout d'une couche d'absorption. 79
3.9 Hypothèses sur les profils en abondance de HDO afin de reproduire les absorptions à 465 et 894 GHz. 79
3.10 Meilleure modélisation des raies de HDO dans la proto-étoile IRAS 16293. L'abondance interne est de 1.8×10^{-7} et l'abondance externe de 8×10^{-11}. . 80
3.11 Contours de χ^2 à 1σ, 2σ et 3σ de la molécule HDO dans la proto-étoile IRAS 16293. 81
3.12 Populations de niveaux de HDO normalisées calculées par RATRAN en fonction du rayon de l'enveloppe proto-stellaire. 81
3.13 Comparaison des profils des transitions $1_{1,0}$–$1_{0,1}$ de HDO, $H_2{}^{16}O$ et $H_2{}^{18}O$ à 509, 557 et 548 GHz, respectivement. 83
3.14 Contours de χ^2 à 1σ, 2σ et 3σ obtenus pour $H_2{}^{18}O$ avec les coefficients de collision avec ortho et para–H_2 determinés par Faure et al. (2007). 84

3.15 Contours de χ^2 à 1σ, 2σ et 3σ obtenus pour $H_2{}^{18}O$ avec les coefficients de collision avec ortho et para–H_2 determinés par Daniel et al. (2011). 85
3.16 Meilleure modélisation des raies de $H_2{}^{18}O$ dans la proto-étoile IRAS 16293. L'abondance interne est de 1×10^{-8} et l'abondance externe est de 3×10^{-11}. 86
3.17 Populations de niveaux de $H_2{}^{18}O$ normalisées calculées par RATRAN en fonction du rayon de l'enveloppe proto-stellaire. 87
3.18 Modélisation des raies de $H_2{}^{17}O$ dans la proto-étoile IRAS 16293. 87
3.19 Niveaux en énergie des transitions fondamentales de D_2O. 89
3.20 Observations de la transition fondamentale $1_{1,0}$–$1_{0,1}$ de para–D_2O obtenue avec le télescope JCMT et ajustée par une somme de 3 Gaussiennes et de la transition fondamentale $1_{1,1}$–$0_{0,0}$ de ortho–D_2O obtenue avec HIFI. 89
3.21 Rapport ortho/para de D_2O dans la proto-étoile IRAS 16293. 90
3.22 Contours de χ^2 à 1σ, 2σ et 3σ de la molécule D_2O. 91
3.23 Meilleure modélisation des raies de D_2O dans la proto-étoile IRAS 16293. L'abondance interne est de 7×10^{-10} et l'abondance externe est de 5×10^{-12}. 92
3.24 Corrélation entre le rapport D_2CO/H_2CO et la déplétion de CO (Bacmann et al. 2003). 95
3.25 Structure physico-chimique d'un disque proto-planétaire. 97
3.26 Distributions radiales de la densité, de la température et de la vitesse d'effondrement prédites par le modèle radiatif hydrodynamique à $t = -5.6 \times 10^2$ ans, $t = 4.3 \times 10^2$ ans et $t = 9.3 \times 10^4$ ans. 100
3.27 Distributions radiales des abondances de H_2O, HDO et D_2O obtenues avec le modèle chimique de Aikawa et al. (2012) en phase gazeuse et sur les grains à $t = -5.6 \times 10^2$ ans, $t = 4.3 \times 10^2$ ans et $t = 9.3 \times 10^4$ ans. 100

4.1 Carte SCUBA du continuum de la poussière à 850 μm dans NGC 1333 (Sandell & Knee 2001) 102
4.2 Carte de la transition 6–5 de CO en direction de la région NGC 1333. 106
4.3 Observations des transitions fondamentales de HDO montrant une composante en émission large traçant les flots moléculaires dans IRAS 4A et IRAS 4B . . 107
4.4 Profils en densité et en température des sources IRAS 4A et IRAS 4B déterminés par Kristensen et al. (2012). 108
4.5 Représentation des différentes positions possibles de la couche d'absorption par rapport à la source IRAS 4A et son flot moléculaire et impact sur l'absorption des raies fondamentales. 110
4.6 Différence de modélisation des absorptions des deux transitions fondamentales $1_{1,1}$–$0_{0,0}$ et $1_{1,0}$–$0_{0,0}$ de HDO observées dans la proto-étoile IRAS 4A avec ou sans ajout d'une couche d'absorption. 110
4.7 Contours de χ^2 à 1σ, 2σ et 3σ de la molécule HDO dans la proto-étoile IRAS 4A.111
4.8 Meilleure modélisation des raies de HDO dans la proto-étoile IRAS 4A. L'abondance interne est de 7.5×10^{-9} et l'abondance externe de 1.2×10^{-11}. 112
4.9 Différence de modélisation des absorptions des deux transitions fondamentales $1_{1,1}$–$0_{0,0}$ et $1_{1,0}$–$0_{0,0}$ de HDO observées dans la proto-étoile IRAS 4A avec ou sans ajout d'une couche d'absorption. 113

4.10 Meilleure modélisation des raies de HDO dans la proto-étoile IRAS 4B. L'abondance interne est de 2×10^{-8} et l'abondance externe de 1.4×10^{-10}. 113

4.11 Contours de χ^2 à 1σ, 2σ et 3σ de la molécule HDO dans la proto-étoile IRAS 4B.114

4.12 Comparaison des profils des larges composantes traçant les flots moléculaires de la transition 6–5 de CO observée avec APEX et de la transition $1_{1,1}$–$0_{0,0}$ de HDO observée avec HIFI. 115

4.13 Comparaison des abondances internes (en rouge) et externes (en noir) de HDO dans les proto-étoiles de faible masse IRAS 16293, IRAS 4A, IRAS 4B ainsi que NGC 1333 IRAS 2A étudiée par Liu et al. (2011) et L1448-mm étudiée par Codella et al. (2010). 118

4.14 Variation de l'abondance interne de HDO en fonction de la luminosité bolométrique des proto-étoiles de faible masse IRAS 16293, IRAS 4A, IRAS 4B ainsi que NGC 1333 IRAS 2A étudiée par Liu et al. (2011) et L1448-mm étudiée par Codella et al. (2010). 118

4.15 Comparaison des rapports d'abondances $X_{\rm in}/X_{\rm out}$ de HDO dans les proto-étoiles de faible masse IRAS 16293, IRAS 4A, IRAS 4B ainsi que NGC 1333 IRAS 2A étudiée par Liu et al. (2011). 119

5.1 Carte du continuum à 2 cm de la région G34 indiquant la position des sources A, B et C. 123

5.2 Image à 20.6 μm (infrarouge moyen) de la région G34 en échelle de gris indiquant la position des différentes sources A, B, C, D, E et F. 123

5.3 Carte des transitions $3_{1,2}$–$2_{2,1}$ et $1_{1,0}$–$1_{1,1}$ de HDO observées avec le télescope de 30 m de l'IRAM en direction de la région HII G34 à 226 GHz et 81 GHz respectivement. 125

5.4 Profils en densité et en température de la région HII G34. 127

5.5 Représentation en fonction du rayon des profils de vitesse d'effondrement et du paramètre b-doppler utilisés pour modéliser les raies de HDO dans la source G34 avec différentes températures de saut en abondance T_j = 100, 125, 150, 175 et 200 K. 130

5.6 Meilleure modélisation des raies de HDO dans la région HII G34 pour une température de saut en abondance T_j de 100 K et sans décalage entre pic en émission et pointage des observations. L'abondance interne est de 2×10^{-8} et l'abondance externe de 8×10^{-12}. 132

5.7 Meilleure modélisation des raies de HDO dans la région HII G34 pour une température de saut en abondance T_j de 100 K et avec un décalage de $5''$ entre pic en émission et pointage des observations. L'abondance interne est de 4×10^{-8} et l'abondance externe de 8×10^{-12}. 132

5.8 Meilleure modélisation des raies de HDO dans la région HII G34 pour une température de saut en abondance T_j de 125 K et sans décalage entre pic en émission et pointage des observations. L'abondance interne est de 4×10^{-8} et l'abondance externe de 2×10^{-11}. 133

5.9 Meilleure modélisation des raies de HDO dans la région HII G34 pour une température de saut en abondance T_j de 125 K et avec un décalage de 5″ entre pic en émission et pointage des observations. L'abondance interne est de 1 × 10^{-7} et l'abondance externe de 2 × 10^{-11}. 133

5.10 Meilleure modélisation des raies de HDO dans la région HII G34 pour une température de saut en abondance T_j de 150 K et sans décalage entre pic en émission et pointage des observations. L'abondance interne est de 6 × 10^{-8} et l'abondance externe de 2 × 10^{-11}. 134

5.11 Meilleure modélisation des raies de HDO dans la région HII G34 pour une température de saut en abondance T_j de 150 K et avec un décalage de 5″ entre pic en émission et pointage des observations. L'abondance interne est de 1.4 × 10^{-7} et l'abondance externe de 2 × 10^{-11}. 134

5.12 Meilleure modélisation des raies de HDO dans la région HII G34 pour une température de saut en abondance T_j de 175 K et sans décalage entre pic en émission et pointage des observations. L'abondance interne est de 7 × 10^{-8} et l'abondance externe de 2 × 10^{-11}. 135

5.13 Meilleure modélisation des raies de HDO dans la région HII G34 pour une température de saut en abondance T_j de 175 K et avec un décalage de 5″ entre pic en émission et pointage des observations. L'abondance interne est de 1.4 × 10^{-7} et l'abondance externe de 3 × 10^{-11}. 135

5.14 Meilleure modélisation des raies de HDO dans la région HII G34 pour une température de saut en abondance T_j de 200 K et sans décalage entre pic en émission et pointage des observations. L'abondance interne est de 9 × 10^{-8} et l'abondance externe de 3 × 10^{-11}. 136

5.15 Meilleure modélisation des raies de HDO dans la région HII G34 pour une température de saut en abondance T_j de 200 K et avec un décalage de 5″ entre pic en émission et pointage des observations. L'abondance interne est de 2 × 10^{-7} et l'abondance externe de 3 × 10^{-11}. 136

5.16 Meilleure modélisation des raies de HDO dans la région HII G34 pour un profil d'abondance présentant deux sauts à T_{j1} = 100 K et T_{j2} = 200 K et sans décalage entre pic en émission et pointage des observations. L'abondance au-dessus de 200 K est de 9 × 10^{-8}, entre 100 K et 200 K de 1 × 10^{-9} et au-dessous de 100 K de 2 × 10^{-11}. 137

6.1 Comparaison des rapports d'abondance HDO/H_2O en phase gazeuse de la proto-étoile IRAS 16293 étudiée dans cette thèse, de la proto-étoile NGC 1333 IRAS 2A étudiée par Liu et al. (2011), du *hot corino* de NGC 1333 IRAS 4B étudié par interférométrie par Jørgensen & van Dishoeck (2010a) et de la comète Hartley 2 étudiée par Hartogh et al. (2011). 144

A.1 Diagrammes rotationnels des espèces ortho–c-C_3H_2, para–c-C_3H_2, CCH, C_4H et c-C_3H détectées dans le relevé spectral TIMASSS sans correction de dilution. 151

A.2 Diagrammes rotationnels de l-C_3H, l-C_3H_2 et l-C_4H_2 sans correction de dilution et en supposant une taille de source de 10″. 152

A.3 Diagrammes rotationnels de CH_3CCH sans correction de dilution et en supposant une taille de source de $10''$. 153
A.4 Carte du continuum obtenue à 3 mm avec l'interféromètre ATCA. 155
A.5 Carte de la transition de ortho–c-C_3H_2 à 85.339 GHz en fonction des canaux de vitesse obtenue avec le télescope de l'IRAM. 157
A.6 Carte de la transition de CCH à 87.402 GHz en fonction des canaux de vitesse obtenue avec le télescope de l'IRAM. 158
A.7 Carte de la transition de CCH à 87.317 GHz en fonction des canaux de vitesse obtenue avec le télescope de l'IRAM. 159
A.8 Carte de la transition de CH_3CCH à 85.457 GHz en fonction des canaux de vitesse obtenue avec le télescope de l'IRAM. 160
A.9 Carte intégrée en vitesse de la transition de ortho–c-C_3H_2 à 85.339 GHz obtenue avec le télescope de l'IRAM. 161
A.10 Carte intégrée en vitesse de la transition de ortho–c-C_3H_2 à 150.852 GHz obtenue avec le télescope de l'IRAM. 161
A.11 Carte intégrée en vitesse de la transition de CCH à 87.317 GHz obtenue avec le télescope de l'IRAM. 162
A.12 Carte intégrée en vitesse de la transition de CCH à 87.329 GHz obtenue avec le télescope de l'IRAM. 162
A.13 Carte intégrée en vitesse de la transition de CCH à 87.402 GHz obtenue avec le télescope de l'IRAM. 163
A.14 Carte intégrée en vitesse de la transition de CCH à 87.407 GHz obtenue avec le télescope de l'IRAM. 163
A.15 Carte intégrée en vitesse de la transition de CH_3CCH à 85.456 GHz obtenue avec le télescope de l'IRAM. 164
A.16 Carte intégrée en vitesse de la transition de CH_3CCH à 85.457 GHz obtenue avec le télescope de l'IRAM. 164
A.17 Carte intégrée en vitesse de la transition de CH_3CCH à 102.546 GHz obtenue avec le télescope de l'IRAM. 165
A.18 Carte intégrée en vitesse de la transition de CH_3CCH à 102.548 GHz obtenue avec le télescope de l'IRAM. 165
A.19 Carte intégrée en vitesse de la transition de CH_3CCH à 153.817 GHz obtenue avec le télescope de l'IRAM. 166
A.20 Carte intégrée en vitesse de la transition de H_2CO à 150.498 GHz obtenue avec le télescope de l'IRAM. 166
A.21 Carte de la transition de H_2CO à 150.498 GHz en fonction des canaux de vitesse obtenue avec le télescope de l'IRAM. 167

Liste des tableaux

1.1 Liste des molécules deutérées détectées dans le milieu interstellaire. 16
1.2 Bandes spectrales de l'instrument HIFI 27

3.1 Paramètres des transitions de HDO, $H_2{}^{18}O$, $H_2{}^{17}O$ et D_2O observées en direction de la proto-étoile IRAS 16293. 68
3.2 Rapports HDO/H_2O obtenus dans la proto-étoile IRAS 16293 avec la méthode de minimisation du χ^2 n° 1 et présentés dans Coutens et al. (2012). 92
3.3 Rapports HDO/H_2O, D_2O/HDO et D_2O/H_2O obtenus dans la proto-étoile IRAS 16293 avec la méthode de minimisation du χ^2 n° 2. 92

4.1 Paramètres des transitions de HDO observées en direction des proto-étoiles NGC 1333 IRAS 4A et IRAS 4B. 105
4.2 Décomposition en différentes composantes des profils de raie de HDO dans les sources IRAS 4A et IRAS 4B. 105

5.1 Paramètres des transitions de HDO observées en direction de la région HII ultra-compacte G34. 124
5.2 Détermination des abondances internes et externes de HDO selon la température de saut T_j et en faisant l'hypothèse ou non d'un décalage entre observations pointées et pic d'émission du HDO. 131

6.1 Abondances de HDO déterminées dans différents objets proto-stellaires 141
6.2 Bandes spectrales ALMA et transitions des isotopes de l'eau observables dans ces bandes. 145

A.1 Paramètres des transitions des différents hydrocarbures observés dans la source IRAS 16293-2422. 148
A.2 Températures d'excitation et densités de colonne obtenues avec les diagrammes rotationnels sans correction de dilution. 153
A.3 Transitions ciblées avec l'interféromètre ATCA. 154
A.4 Coordonnées des différentes composantes du complexe d'IRAS 16293. 156

Bibliographie

1. Adams, F. C., Lada, C. J., & Shu, F. H. 1987, *Spectral evolution of young stellar objects*, ApJ, 312, 788

2. Aikawa, Y., Wakelam, V., Garrod, R. T., & Herbst, E. 2008, *Molecular Evolution and Star Formation : From Prestellar Cores to Protostellar Cores*, ApJ, 674, 984

3. Akeson, R. L. & Carlstrom, J. E. 1996, *Lifetimes of Ultracompact H II Regions : High-Resolution Methyl Cyanide Observations*, ApJ, 470, 528

4. André, P. 1994, *Observations of protostars and protostellar stages*, in The Cold Universe, ed. T. Montmerle, C. J. Lada, I. F. Mirabel, & J. Tran Thanh Van , 179

5. André, P. & Montmerle, T. 1994, *From T Tauri stars to protostars : Circumstellar material and young stellar objects in the rho Ophiuchi cloud*, ApJ, 420, 837

6. André, P., Ward-Thompson, D., & Barsony, M. 1993, *Submillimeter continuum observations of Rho Ophiuchi A - The candidate protostar VLA 1623 and prestellar clumps*, ApJ, 406, 122

7. Atkinson, R., Baulch, D. L., Cox, R. A., et al. 2004, *Evaluated kinetic and photochemical data for atmospheric chemistry : Volume I - gas phase reactions of O_x, HO_x, NO_x and SO_x species*, Atmospheric Chemistry & Physics, 4, 1461

8. Attard, M., Houde, M., Novak, G., et al. 2009, *Magnetic Fields and Infall Motions in NGC 1333 IRAS 4*, ApJ, 702, 1584

9. Avalos, M., Lizano, S., Franco-Hernández, R., Rodríguez, L. F., & Moran, J. M. 2009, *Hypercompact H II Regions : Resolved Images of G34.26+0.15 A and B*, ApJ, 690, 1084

10. Bacmann, A., Caux, E., Hily-Blant, P., et al. 2010, *First detection of ND in the solar-mass protostar IRAS16293-2422*, A&A, 521, L42+

11. Bacmann, A., Lefloch, B., Ceccarelli, C., et al. 2002, *The degree of CO depletion in pre-stellar cores*, A&A, 389, L6

12. Bacmann, A., Lefloch, B., Ceccarelli, C., et al. 2003, *CO Depletion and Deuterium Fractionation in Prestellar Cores*, ApJL, 585, L55

13. Bacmann, A., Lefloch, B., Parise, B., Ceccarelli, C., & Steinacker, J. 2007, *Methanol and deuterium fractionation in prestellar cores*, in Molecules in Space and Laboratory

14. Bates, D. R. 1986, *Products of dissociative recombination of polyatomic ions*, ApJL, 306, L45

15. Bell, T. A., Willacy, K., Phillips, T. G., Allen, M., & Lis, D. C. 2011, *The Influence of Deuteration and Turbulent Diffusion on the Observed D/H Ratio*, ApJ, 731, 48

16. Belloche, A., Comito, C., Hieret, C., et al. 2007, *The search for complex molecules in the ISM : a complete 3mm line survey of Sgr B2-N and -M*, in Molecules in Space and Laboratory

17. Belloche, A., Garrod, R. T., Müller, H. S. P., et al. 2009, *Increased complexity in interstellar chemistry : detection and chemical modeling of ethyl formate and n-propyl cyanide in Sagittarius B2(N)*, A&A, 499, 215

18. Belloche, A., Hennebelle, P., & André, P. 2006, *Strongly induced collapse in the Class 0 protostar NGC 1333 IRAS 4A*, A&A, 453, 145

19. Bergin, E. A., Phillips, T. G., Comito, C., et al. 2010, *Herschel observations of EXtra-Ordinary Sources (HEXOS) : The present and future of spectral surveys with Herschel/HIFI*, A&A, 521, L20+

20. Bergin, E. A. & Snell, R. L. 2002, *Sensitive Limits on the Water Abundance in Cold Low-Mass Molecular Cores*, ApJL, 581, L105

21. Bestenlehner, J. M., Vink, J. S., Gräfener, G., et al. 2011, *The VLT-FLAMES Tarantula Survey. III. A very massive star in apparent isolation from the massive cluster R136*, A&A, 530, L14

22. Bisschop, S. E., Jørgensen, J. K., Bourke, T. L., Bottinelli, S., & van Dishoeck, E. F. 2008, *An interferometric study of the low-mass protostar IRAS 16293-2422 : small scale organic chemistry*, A&A, 488, 959

23. Blake, G. A., Sandell, G., van Dishoeck, E. F., et al. 1995, *A molecular line study of NGC 1333/IRAS 4*, ApJ, 441, 689

24. Blake, G. A., van Dishoeck, E. F., Jansen, D. J., Groesbeck, T. D., & Mundy, L. G. 1994, *Molecular abundances and low-mass star formation. I : Si- and S-bearing species toward IRAS 16293-2422*, ApJ, 428, 680

25. Bockelée-Morvan, D., Gautier, D., Lis, D. C., et al. 1998, *Deuterated Water in Comet C/1996 B2 (Hyakutake) and Its Implications for the Origin of Comets*, Icarus, 133, 147

26. Bonev, B. P., Mumma, M. J., Villanueva, G. L., et al. 2007, *A Search for Variation in the H_2O Ortho-Para Ratio and Rotational Temperature in the Inner Coma of Comet C/2004 Q2 (Machholz)*, ApJL, 661, L97

27. Bonnell, I. A., Bate, M. R., Clarke, C. J., & Pringle, J. E. 1997, *Accretion and the stellar mass spectrum in small clusters*, MNRAS, 285, 201

28. Bonnell, I. A., Bate, M. R., Clarke, C. J., & Pringle, J. E. 2001, *Competitive accretion in embedded stellar clusters*, MNRAS, 323, 785

29. Bottinelli, S., Ceccarelli, C., Lefloch, B., et al. 2004a, *Complex Molecules in the Hot Core of the Low-Mass Protostar NGC 1333 IRAS 4A*, ApJ, 615, 354

30. Bottinelli, S., Ceccarelli, C., Neri, R., & Williams, J. P. 2005, *Interferometric Observations of the Hot Corinos IRAS16293-2422 and NGC1333-IRAS4A*, in Protostars and Planets V, 8640

31. Bottinelli, S., Ceccarelli, C., Neri, R., et al. 2004b, *Near-Arcsecond Resolution Observations of the Hot Corino of the Solar-Type Protostar IRAS 16293-2422*, ApJL, 617, L69

32. Bottinelli, S., Ceccarelli, C., Williams, J. P., & Lefloch, B. 2007, *Hot corinos in NGC 1333-IRAS4B and IRAS2A*, A&A, 463, 601

33. Butner, H. M., Charnley, S. B., Ceccarelli, C., et al. 2007, *Discovery of Interstellar Heavy Water*, ApJL, 659, L137

34. Campbell, M. F., Garland, C. A., Deutsch, L. K., et al. 2000, *Narrowband Mid-Infrared Images and Models of the H II Complex G34.3+0.2*, ApJ, 536, 816

35. Campbell, M. F., Harvey, P. M., Lester, D. F., & Clark, D. M. 2004, *High-Resolution Far-Infrared Observations and Models of the Star Formation Core of G34.3+0.2C*, ApJ, 600, 254

36. Carral, P. & Welch, W. J. 1992, *The molecular core in G34.3 + 0.2 - Millimeter interferometric observations of HCO^+, $H^{13}CN$, $HC^{15}N$, and SO*, ApJ, 385, 244

37. Caselli, P., Keto, E., Pagani, L., et al. 2010, *Water vapor toward starless cores : The Herschel view*, A&A, 521, L29+

38. Caselli, P. & Myers, P. C. 1995, *The Line Width–Size Relation in Massive Cloud Cores*, ApJ, 446, 665

39. Caselli, P., Walmsley, C. M., Tafalla, M., Dore, L., & Myers, P. C. 1999, *CO Depletion in the Starless Cloud Core L1544*, ApJL, 523, L165

40. Caselli, P., Walmsley, C. M., Zucconi, A., et al. 2002, *Molecular Ions in L1544. I. Kinematics*, ApJ, 565, 331

41. Castets, A., Ceccarelli, C., Loinard, L., Caux, E., & Lefloch, B. 2001, *Multiple shocks around the low-luminosity protostar IRAS 16293-2422*, A&A, 375, 40

42. Caux, E., Ceccarelli, C., Castets, A., et al. 1999, *Large atomic oxygen abundance towards the molecular cloud L1689N*, A&A, 347, L1

43. Caux, E., Kahane, C., Castets, A., et al. 2011, *TIMASSS : the IRAS 16293-2422 millimeter and submillimeter spectral survey. I. Observations, calibration, and analysis of the line kinematics*, A&A, 532, A23+

44. Cazaux, S., Caselli, P., & Spaans, M. 2011, *Interstellar Ices as Witnesses of Star Formation : Selective Deuteration of Water and Organic Molecules Unveiled*, ApJL, 741, L34

45. Cazaux, S., Tielens, A. G. G. M., Ceccarelli, C., et al. 2003, *The Hot Core around the Low-mass Protostar IRAS 16293-2422 : Scoundrels Rule !*, ApJL, 593, L51

46. Ceccarelli, C., Castets, A., Caux, E., et al. 2000a, *The structure of the collapsing envelope around the low-mass protostar IRAS 16293-2422*, A&A, 355, 1129

47. Ceccarelli, C., Castets, A., Loinard, L., Caux, E., & Tielens, A. G. G. M. 1998, *Detection of doubly deuterated formaldehyde towards the low-luminosity protostar IRAS 16293-2422*, A&A, 338, L43

48. Ceccarelli, C., Caux, E., Loinard, L., et al. 1999, *Water line emission in low-mass protostars*, A&A, 342, L21

49. Ceccarelli, C., Hollenbach, D. J., & Tielens, A. G. G. M. 1996, *Far-Infrared Line Emission from Collapsing Protostellar Envelopes*, ApJ, 471, 400

50. Ceccarelli, C., Loinard, L., Castets, A., Tielens, A. G. G. M., & Caux, E. 2000b, *The hot core of the solar-type protostar IRAS 16293-2422 : H_2CO emission*, A&A, 357, L9

51. Ceccarelli, C., Loinard, L., Castets, A., et al. 2001, *Extended D_2CO emission : The smoking gun of grain surface-chemistry*, A&A, 372, 998

52. Ceccarelli, C., Maret, S., Tielens, A. G. G. M., Castets, A., & Caux, E. 2003, *Theoretical H_2CO emission from protostellar envelopes*, A&A, 410, 587

53. Chandler, C. J., Brogan, C. L., Shirley, Y. L., & Loinard, L. 2005, *IRAS 16293-2422 : Proper Motions, Jet Precession, the Hot Core, and the Unambiguous Detection of Infall*, ApJ, 632, 371

54. Cheung, A. C., Rank, D. M., Townes, C. H., Thornton, D. D., & Welch, W. J. 1969, *Detection of Water in Interstellar Regions by its Microwave Radiation*, Nature, 221, 626

55. Choi, M., Kamazaki, T., Tatematsu, K., & Panis, J.-F. 2004, *Structure of the Dense Molecular Gas in the NGC 1333 IRAS 4 Region*, ApJ, 617, 1157

56. Choi, M., Panis, J.-F., & Evans, II, N. J. 1999, *Berkeley-Illinois-Maryland Association Survey of Protostellar Collapse Candidates in HCO^+ and HCN Lines*, ApJS, 122, 519

57. Choi, M., Tatematsu, K., & Kang, M. 2010, *Kinematics of the Ammonia Disk Around the Protostar NGC 1333 IRAS 4A2*, ApJL, 723, L34

58. Codella, C., Ceccarelli, C., Nisini, B., et al. 2010, *Heavy water around the L1448-mm protostar*, A&A, 522, L1+

59. Comito, C., Schilke, P., Rolffs, R., et al. 2010, *Herschel observations of deuterated water towards Sgr B2(M)*, A&A, 521, L38+

60. Coutens, A., Vastel, C., Caux, E., et al. 2012, *A study of deuterated water in the low-mass protostar IRAS 16293-2422*, A&A, 539, A132

61. Crimier, N., Ceccarelli, C., Maret, S., et al. 2010, *The solar type protostar IRAS16293-2422 : new constraints on the physical structure*, A&A, 519, A65+

62. Cuppen, H. M., Ioppolo, S., Romanzin, C., & Linnartz, H. 2010, *Water formation at low temperatures by surface O_2 hydrogenation II : the reaction network*, Physical Chemistry Chemical Physics (Incorporating Faraday Transactions), 12, 12077

63. Daniel, F., Dubernet, M.-L., & Grosjean, A. 2011, *Rotational excitation of 45 levels of ortho/para-H_2O by excited ortho/para-H_2 from 5 K to 1500 K : state-to-state, effective, and thermalized rate coefficients*, A&A, 536, A76

64. Dartois, E., Thi, W.-F., Geballe, T. R., et al. 2003, *Revisiting the solid HDO/H_2O abundances*, A&A, 399, 1009

65. De Buizer, J. M., Radomski, J. T., Telesco, C. M., & Piña, R. K. 2003, *A Search for Mid-Infrared Emission from Hot Molecular Core Candidates*, ApJ, 598, 1127

66. de Wit, W. J., Testi, L., Palla, F., & Zinnecker, H. 2005, *The origin of massive O-type field stars : II. Field O stars as runaways*, A&A, 437, 247

67. de Zeeuw, P. T., Hoogerwerf, R., de Bruijne, J. H. J., Brown, A. G. A., & Blaauw, A. 1999, *A HIPPARCOS Census of the Nearby OB Associations*, AJ, 117, 354

68. Demyk, K., Bottinelli, S., Caux, E., et al. 2010, *TIMASSS : the IRAS16293-2422 millimeter and submillimeter spectral survey : tentative detection of deuterated methyl formate ($DCOOCH_3$)*, A&A, 517, A17+

69. D'Hendecourt, L. B. & Jourdain de Muizon, M. 1989, *The discovery of interstellar carbon dioxide*, A&A, 223, L5

70. Di Francesco, J., Johnstone, D., Kirk, H., MacKenzie, T., & Ledwosinska, E. 2008, *The SCUBA Legacy Catalogues : Submillimeter-Continuum Objects Detected by SCUBA*, ApJS, 175, 277

71. Di Francesco, J., Myers, P. C., Wilner, D. J., Ohashi, N., & Mardones, D. 2001, *Infall, Outflow, Rotation, and Turbulent Motions of Dense Gas within NGC 1333 IRAS 4*, ApJ, 562, 770

72. Downes, D., Wilson, T. L., Bieging, J., & Wink, J. 1980, *H_{110}-alpha and H_2CO survey of galactic radio sources*, A&ASS, 40, 379

73. Dulieu, F., Amiaud, L., Congiu, E., et al. 2010, *Experimental evidence for water formation on interstellar dust grains by hydrogen and oxygen atoms*, A&A, 512, A30+

74. Eberhardt, P., Reber, M., Krankowsky, D., & Hodges, R. R. 1995, *The D/H and $^{18}O/^{16}O$ ratios in water from comet P/Halley.*, A&A, 302, 301

75. Faure, A., Crimier, N., Ceccarelli, C., et al. 2007, *Quasi-classical rate coefficient calculations for the rotational (de)excitation of H_2O by H_2*, A&A, 472, 1029

76. Faure, A., Valiron, P., Wernli, M., et al. 2005, *A full nine-dimensional potential-energy surface for hydrogen molecule-water collisions*, J. Chem. Phys., 122, 221102

77. Faure, A., Wiesenfeld, L., Scribano, Y., & Ceccarelli, C. 2011, *Rotational excitation of mono- and doubly-deuterated water by hydrogen molecules*, MNRAS, 2015

78. Flower, D. R., Pineau Des Forêts, G., & Walmsley, C. M. 2006, *The importance of the ortho:para H_2 ratio for the deuteration of molecules during pre-protostellar collapse*, A&A, 449, 621

79. Fraser, H. J., Collings, M. P., McCoustra, M. R. S., & Williams, D. A. 2001, *Thermal desorption of water ice in the interstellar medium*, MNRAS, 327, 1165

80. Frerking, M. A., Langer, W. D., & Wilson, R. W. 1982, *The relationship between carbon monoxide abundance and visual extinction in interstellar clouds*, ApJ, 262, 590

81. Froebrich, D. 2005, *Which Are the Youngest Protostars ? Determining Properties of Confirmed and Candidate Class 0 Sources by Broadband Photometry*, ApJS, 156, 169

82. Fuente, A., Caselli, P., McCoey, C., et al. 2012, *The abundance of $C^{18}O$ and HDO in the envelope and hot core of the intermediate mass protostar NGC 7129 FIRS 2*, A&A, 540, A75

83. Garay, G., Reid, M. J., & Moran, J. M. 1985, *Compact H II regions - Hydrogen recombination and OH maser lines*, ApJ, 289, 681

84. Garay, G., Rodriguez, L. F., & van Gorkom, J. H. 1986, *Rotating and expanding ultracompact H II regions*, ApJ, 309, 553

85. Gaume, R. A., Fey, A. L., & Claussen, M. J. 1994, *VLA recombination line observations of the cometary H II region G34.3+0.2 : Dynamics and physical properties*, ApJ, 432, 648

86. Gensheimer, P. D., Mauersberger, R., & Wilson, T. L. 1996, *Water in galactic hot cores.*, A&A, 314, 281

87. Goldsmith, P. F. & Langer, W. D. 1999, *Population Diagram Analysis of Molecular Line Emission*, ApJ, 517, 209

88. Green, S. 1989, *Collisional excitation of interstellar molecules - Deuterated water, HDO*, ApJS, 70, 813

89. Hartogh, P., Lis, D. C., Bockelée-Morvan, D., et al. 2011, *Ocean-like water in the Jupiter-family comet 103P/Hartley 2*, Nature, 478, 218

90. Haschick, A. D., Moran, J. M., Rodriguez, L. F., et al. 1980, *Observations of a compact H II region and water vapor maser sources in the vicinity of the Herbig-Haro objects 7-11*, ApJ, 237, 26

91. Hassel, G. E., Herbst, E., & Garrod, R. T. 2008, *Modeling the Lukewarm Corino Phase : Is L1527 unique ?*, ApJ, 681, 1385

92. Hatchell, J., Fuller, G. A., & Millar, T. J. 2001, *SiO in G34.26 : Outflows and shocks in a high mass star forming region*, A&A, 372, 281

93. Hatchell, J., Thompson, M. A., Millar, T. J., & MacDonald, G. H. 1998, *A survey of molecular line emission towards ultracompact HII regions*, A&ASS, 133, 29

94. Heaton, B. D., Little, L. T., & Bishop, I. S. 1989, *The "ultracompact hot core" of G34.3+0.15 - Arcsecond resolution ammonia observations*, A&A, 213, 148

95. Heaton, B. D., Little, L. T., Yamashita, T., et al. 1993, *The structure of G 34.3+0.2 deduced from multitransition molecular line observations of HCO^+*, A&A, 278, 238

96. Helmich, F. P., van Dishoeck, E. F., & Jansen, D. J. 1996, *The excitation and abundance of HDO toward W3(OH)/(H_2O).*, A&A, 313, 657

97. Henkel, C., Wilson, T. L., & Mauersberger, R. 1987, *A multilevel study of ammonia in star forming regions. II - G34.3 + 0.2, a new "hot core"*, A&A, 182, 137

98. Herbig, G. H. & Jones, B. F. 1983, *Proper motions of Herbig-Haro objects. III - HH-7 through -11, HH-12, and HH-32*, AJ, 88, 1040

99. Herbst, E. & Cuppen, H. M. 2006, *Interstellar Chemistry Special Feature : Monte Carlo studies of surface chemistry and nonthermal desorption involving interstellar grains*, Proceedings of the National Academy of Science, 103, 12257

100. Herbst, E. & van Dishoeck, E. F. 2009, *Complex Organic Interstellar Molecules*, ARAA, 47, 427

101. Herczeg, G. J., Karska, A., Bruderer, S., et al. 2012, *Water in star-forming regions with Herschel : highly excited molecular emission from the NGC 1333 IRAS 4B outflow*, A&A, 540, A84

102. Herpin, F., Chavarría, L., van der Tak, F., et al. 2012, *The massive protostar W43-MM1 as seen by Herschel-HIFI water spectra : high turbulence and accretion luminosity*, A&A, 542, A76

103. Hersant, F., Wakelam, V., Dutrey, A., Guilloteau, S., & Herbst, E. 2009, *Cold CO in circumstellar disks. On the effects of photodesorption and vertical mixing*, A&A, 493, L49

104. Hewitt, A. J., Doss, N., Zobov, N. F., Polyansky, O. L., & Tennyson, J. 2005, *Deuterated water : partition functions and equilibrium constants*, MNRAS, 356, 1123

105. Hirano, N., Mikami, H., Umemoto, T., Yamamoto, S., & Taniguchi, Y. 2001, *SiO Emission in the Multilobe Outflow Associated with IRAS 16293-2422*, ApJ, 547, 899

106. Hirota, T., Bushimata, T., Choi, Y. K., et al. 2008, *Astrometry of H_2O Masers in Nearby Star-Forming Regions with VERA. II. SVS13 in NGC1333*, PASJ, 60, 37

107. Hogerheijde, M. R. & van der Tak, F. F. S. 2000, *An accelerated Monte Carlo method to solve two-dimensional radiative transfer and molecular excitation. With applications to axisymmetric models of star formation*, A&A, 362, 697

108. Hollenbach, D., Kaufman, M. J., Bergin, E. A., & Melnick, G. J. 2009, *Water, O_2, and Ice in Molecular Clouds*, ApJ, 690, 1497

109. Hollenbach, D. & McKee, C. F. 1989, *Molecule formation and infrared emission in fast interstellar shocks. III - Results for J shocks in molecular clouds*, ApJ, 342, 306

110. Huang, H.-C., Kuan, Y.-J., Charnley, S. B., et al. 2005, *Organic molecules in the hot corinos and circumstellar disks of IRAS 16293-2422*, Advances in Space Research, 36, 146

111. Hutsemékers, D., Manfroid, J., Jehin, E., Zucconi, J.-M., & Arpigny, C. 2008, *The $^{16}OH/^{18}OH$ and OD/OH isotope ratios in comet C/2002 T7 (LINEAR)*, A&A, 490, L31

112. Ioppolo, S., Cuppen, H. M., Romanzin, C., van Dishoeck, E. F., & Linnartz, H. 2010, *Water formation at low temperatures by surface O_2 hydrogenation I : characterization of ice penetration*, Physical Chemistry Chemical Physics (Incorporating Faraday Transactions), 12, 12065

113. Ivezic, Z. & Elitzur, M. 1997, *Self-similarity and scaling behaviour of infrared emission from radiatively heated dust - I. Theory*, MNRAS, 287, 799

114. Jacq, T., Henkel, C., Walmsley, C. M., Jewell, P. R., & Baudry, A. 1988, *$H_2{}^{18}O$ in hot dense molecular cloud cores*, A&A, 199, L5

115. Jacq, T., Walmsley, C. M., Henkel, C., et al. 1990, *Deuterated water and ammonia in hot cores*, A&A, 228, 447

116. Janini, P. & Gibb, E. L. 2010, *A Search for HDO in Comet Ikeya-Zhang*, in Midwest Astrochemistry Meeting 2010, held 5-6 November at the University of Illinois at Urbana-Champaign., 5

117. Jefferts, K. B., Penzias, A. A., & Wilson, R. W. 1973, *Deuterium in the Orion Nebula*, ApJL, 179, L57

118. Jennings, R. E., Cameron, D. H. M., Cudlip, W., & Hirst, C. J. 1987, *IRAS observations of NGC1333*, MNRAS, 226, 461

119. Jones, A. P. & Williams, D. A. 1984, *The 3-micrometer ice band in Taurus - Implications for interstellar chemistry*, MNRAS, 209, 955

120. Jørgensen, J. K., Bourke, T. L., Myers, P. C., et al. 2007, *PROSAC : A Submillimeter Array Survey of Low-Mass Protostars. I. Overview of Program : Envelopes, Disks, Outflows, and Hot Cores*, ApJ, 659, 479

121. Jørgensen, J. K., Bourke, T. L., Myers, P. C., et al. 2005a, *Probing the Inner 200 AU of Low-Mass Protostars with the Submillimeter Array : Dust and Organic Molecules in NGC 1333 IRAS 2A*, ApJ, 632, 973

122. Jørgensen, J. K., Bourke, T. L., Nguyn Lu'O'Ng, Q., & Takakuwa, S. 2011, *Arcsecond resolution images of the chemical structure of the low-mass protostar IRAS 16293-2422. An overview of a large molecular line survey from the Submillimeter Array*, A&A, 534, A100+

123. Jørgensen, J. K., Schöier, F. L., & van Dishoeck, E. F. 2002, *Physical structure and CO abundance of low-mass protostellar envelopes*, A&A, 389, 908

124. Jørgensen, J. K., Schöier, F. L., & van Dishoeck, E. F. 2004, *Molecular inventories and chemical evolution of low-mass protostellar envelopes*, A&A, 416, 603

125. Jørgensen, J. K., Schöier, F. L., & van Dishoeck, E. F. 2005b, *H_2CO and CH_3OH abundances in the envelopes around low-mass protostars*, A&A, 437, 501

126. Jørgensen, J. K. & van Dishoeck, E. F. 2010a, *The HDO/H_2O Ratio in Gas in the Inner Regions of a Low-mass Protostar*, ApJL, 725, L172

127. Jørgensen, J. K. & van Dishoeck, E. F. 2010b, *Water Vapor in the Inner 25 AU of a Young Disk Around a Low-Mass Protostar*, ApJL, 710, L72

128. Jørgensen, J. K., van Dishoeck, E. F., Visser, R., et al. 2009, *PROSAC : a submillimeter array survey of low-mass protostars. II. The mass evolution of envelopes, disks, and stars from the Class 0 through I stages*, A&A, 507, 861

129. Kim, H.-D., Cho, S.-H., Chung, H.-S., et al. 2000, *A Spectral Line Survey of G34.3+0.15 at 3 Millimeters (84.7-115.6 GHZ) and 2 Millimeters (123.5-155.3 GHZ)*, ApJS, 131, 483

130. Kim, H.-D., Cho, S.-H., Lee, C.-W., & Burton, M. G. 2001, *A Spectral Line Survey of the Ultracompact HII Region G34.3+0.15. II : 155.3–165.3 GHz*, Journal of Korean Astronomical Society, 34, 167

131. Knude, J. & Hog, E. 1998, *Interstellar reddening from the HIPPARCOS and TYCHO catalogues. I. Distances to nearby molecular clouds and star forming regions*, A&A, 338, 897

132. Kristensen, L. E., van Dishoeck, E. F., Bergin, E. A., et al. 2012, *Water in star-forming regions with Herschel (WISH). II. Evolution of 557 GHz 1_{10}-1_{01} emission in low-mass protostars*, A&A, 542, A8

133. Kristensen, L. E., Visser, R., van Dishoeck, E. F., et al. 2010, *Water in low-mass star-forming regions with Herschel . HIFI spectroscopy of NGC 1333*, A&A, 521, L30+

134. Kuan, Y.-J., Huang, H.-C., Charnley, S. B., et al. 2004, *Organic Molecules in Low-Mass Protostellar Hot Cores : Submillimeter Imaging of IRAS 16293-2422*, ApJL, 616, L27

135. Kuchar, T. A. & Bania, T. M. 1994, *Kinematic distances of Galactic H II regions from H I absorption studies*, ApJ, 436, 117

136. Lampton, M., Margon, B., & Bowyer, S. 1976, *Parameter estimation in X-ray astronomy*, ApJ, 208, 177

137. Langer, W. D., Graedel, T. E., Frerking, M. A., & Armentrout, P. B. 1984, *Carbon and oxygen isotope fractionation in dense interstellar clouds*, ApJ, 277, 581

138. Larson, R. B. 1969, *Numerical calculations of the dynamics of collapsing proto-star*, MNRAS, 145, 271

139. Lay, O. P., Carlstrom, J. E., & Hills, R. E. 1995, *NGC 1333 IRAS 4 : Further Multiplicity Revealed with the CSO-JCMT Interferometer*, ApJL, 452, L73

140. Lecuyer, C., Gillet, P., & Robert, F. 1998, *The hydrogen isotope composition of sea water and the global water cycle.*, Chem. Geol., 145, 249

141. Lefloch, B., Cabrit, S., Codella, C., et al. 2010, *The CHESS spectral survey of star forming regions : Peering into the protostellar shock L1157-B1. II. Shock dynamics*, A&A, 518, L113+

142. Lefloch, B., Castets, A., Cernicharo, J., & Loinard, L. 1998, *Widespread SiO Emission in NGC 1333*, ApJL, 504, L109

143. Linsky, J. L., Draine, B. T., Moos, H. W., et al. 2006, *What Is the Total Deuterium Abundance in the Local Galactic Disk ?*, ApJ, 647, 1106

144. Lis, D. C., Gerin, M., Phillips, T. G., & Motte, F. 2002a, *The Role of Outflows and C Shocks in the Strong Deuteration of L1689N*, ApJ, 569, 322

145. Lis, D. C., Phillips, T. G., Goldsmith, P. F., et al. 2010, *Herschel/HIFI measurements of the ortho/para ratio in water towards Sagittarius B2(M) and W31C*, A&A, 521, L26

146. Lis, D. C., Roueff, E., Gerin, M., et al. 2002b, *Detection of Triply Deuterated Ammonia in the Barnard 1 Cloud*, ApJL, 571, L55

147. Liseau, R., Ceccarelli, C., Larsson, B., et al. 1996, *Thermal H_2O emission from the Herbig-Haro flow HH 54.*, A&A, 315, L181

148. Liu, F., Parise, B., Kristensen, L., et al. 2011, *Water deuterium fractionation in the low-mass protostar NGC1333-IRAS2A*, A&A, 527, A19+

149. Loinard, L., Castets, A., Ceccarelli, C., et al. 2000, *The enormous abundance of D_2CO in IRAS 16293-2422*, A&A, 359, 1169

150. Loinard, L., Torres, R. M., Mioduszewski, A. J., & Rodríguez, L. F. 2008, *A Preliminary VLBA Distance to the Core of Ophiuchus, with an Accuracy of 4%*, ApJL, 675, L29

151. Looney, L. W., Mundy, L. G., & Welch, W. J. 2000, *Unveiling the Circumstellar Envelope and Disk : A Subarcsecond Survey of Circumstellar Structures*, ApJ, 529, 477

152. MacDonald, G. H., Gibb, A. G., Habing, R. J., & Millar, T. J. 1996, *A 330-360 GHz spectral survey of G 34.3+0.15. I. Data and physical analysis.*, A&ASS, 119, 333

153. MacDonald, G. H., Habing, R. J., & Millar, T. J. 1995, *Structure and Chemistry in the Hot Molecular Core G34.3+0.15*, Ap&SS, 224, 177

154. Maret, S., Ceccarelli, C., Caux, E., Tielens, A. G. G. M., & Castets, A. 2002, *Water emission in NGC 1333-IRAS 4. The physical structure of the envelope*, A&A, 395, 573

155. Masunaga, H. & Inutsuka, S.-i. 2000, *A Radiation Hydrodynamic Model for Protostellar Collapse. II. The Second Collapse and the Birth of a Protostar*, ApJ, 531, 350

156. Masunaga, H., Miyama, S. M., & Inutsuka, S.-I. 1998, *A Radiation Hydrodynamic Model for Protostellar Collapse. I. The First Collapse*, ApJ, 495, 346

157. McKee, C. F. & Tan, J. C. 2003, *The Formation of Massive Stars from Turbulent Cores*, ApJ, 585, 850

158. Meier, R., Owen, T. C., Matthews, H. E., et al. 1998, *A Determination of the HDO/H2O Ratio in Comet C/1995 O1 (Hale-Bopp)*, Science, 279, 842

159. Menten, K. M., Walmsley, C. M., Henkel, C., & Wilson, T. L. 1988, *Methanol in the Orion region. I - Millimeter-wave observations. II - The 25 GHz masers revisited*, A&A, 198, 253

160. Minh, Y. C., Irvine, W. M., & Ziurys, L. M. 1989, *Detection of interstellar hydrogen sulfide in cold, dark clouds*, ApJL, 345, L63

161. Mizuno, A., Fukui, Y., Iwata, T., Nozawa, S., & Takano, T. 1990, *A remarkable multilobe molecular outflow - Rho Ophiuchi East, associated with IRAS 16293-2422*, ApJ, 356, 184

162. Mokrane, H., Chaabouni, H., Accolla, M., et al. 2009, *Experimental Evidence for Water Formation Via Ozone Hydrogenation on Dust Grains at 10 K*, ApJL, 705, L195

163. Mookerjea, B., Casper, E., Mundy, L. G., & Looney, L. W. 2007, *Kinematics and Chemistry of the Hot Molecular Core in G34.26+0.15 at High Resolution*, ApJ, 659, 447

164. Morbidelli, A., Chambers, J., Lunine, J. I., et al. 2000, *Source regions and time scales for the delivery of water to Earth*, Meteoritics and Planetary Science, 35, 1309

165. Morisawa, Y., Fushitani, M., Kato, Y., et al. 2006, *Correlation between Nuclear Spin Ratio of Cyclic C_3H_2 and Chemical Evolution in TMC-1 Cores*, ApJ, 642, 954

166. Müller, H. S. P., Coutens, A., Walters, A., Grabow, J.-U., & Schlemmer, S. 2011, *Rotational spectroscopy, dipole moment and ^{14}N nuclear hyperfine structure of iso-propyl cyanide*, Journal of Molecular Spectroscopy, 267, 100

167. Müller, H. S. P., Schlöder, F., Stutzki, J., & Winnewisser, G. 2005, *The Cologne Database for Molecular Spectroscopy, CDMS : a useful tool for astronomers and spectroscopists*, Journal of Molecular Structure, 742, 215

168. Müller, H. S. P., Thorwirth, S., Roth, D. A., & Winnewisser, G. 2001, *The Cologne Database for Molecular Spectroscopy, CDMS*, A&A, 370, L49

169. Öberg, K. I., Boogert, A. C. A., Pontoppidan, K. M., et al. 2008, *The c2d Spitzer Spectroscopic Survey of Ices around Low-Mass Young Stellar Objects. III. CH_4*, ApJ, 678, 1032

170. Öberg, K. I., Linnartz, H., Visser, R., & van Dishoeck, E. F. 2009a, *Photodesorption of Ices. II. H_2O and D_2O*, ApJ, 693, 1209

171. Öberg, K. I., van Dishoeck, E. F., & Linnartz, H. 2009b, *Photodesorption of ices I : CO, N_2, and CO_2*, A&A, 496, 281

172. Ossenkopf, V. & Henning, T. 1994, *Dust opacities for protostellar cores*, A&A, 291, 943

173. Osterbrock, D. E. 1974, *Astrophysics of gaseous nebulae*, Research supported by the Research Corp., Wisconsin Alumni Research Foundation, John Simon Guggenheim Memorial Foundation, Institute for Advanced Studies, and National Science Foundation. San Francisco, W. H. Freeman and Co., 1974. 263 p.

174. Ott, S. 2010, *The Herschel Data Processing System HIPE and Pipelines Up and Running Since the Start of the Mission*, in Astronomical Society of the Pacific Conference Series, Vol. 434, Astronomical Data Analysis Software and Systems XIX, 139

175. Pagani, L., Vastel, C., Hugo, E., et al. 2009, *Chemical modeling of L183 (L134N) : an estimate of the ortho/para H_2 ratio*, A&A, 494, 623

176. Parise, B., Castets, A., Herbst, E., et al. 2004, *First detection of triply-deuterated methanol*, A&A, 416, 159

177. Parise, B., Caux, E., Castets, A., et al. 2005, *HDO abundance in the envelope of the solar-type protostar IRAS 16293-2422*, A&A, 431, 547

178. Parise, B., Du, F., Liu, F.-C., et al. 2012, *Detection of OD towards the low-mass protostar IRAS 16293-2422*, A&A, 542, L5

179. Parise, B., Simon, T., Caux, E., et al. 2003, *Search for solid HDO in low-mass protostars*, A&A, 410, 897

180. Persson, C. M., Olofsson, A. O. H., Koning, N., et al. 2007, *A spectral line survey of Orion KL in the bands 486-492 and 541-577 GHz with the Odin satellite. II. Data analysis*, A&A, 476, 807

181. Persson, M. V., Jørgensen, J. K., & van Dishoeck, E. F. 2012, *Subarcsecond resolution observations of warm water toward three deeply embedded low-mass protostars*, A&A, 541, A39

182. Pettini, M., Zych, B. J., Murphy, M. T., Lewis, A., & Steidel, C. C. 2008, *Deuterium abundance in the most metal-poor damped Lyman alpha system : converging on $\Omega_{b,0}h^2$*, MNRAS, 391, 1499

183. Phillips, T. G. & Vastel, C. 2003, *Future Millimeter/Submillimeter Instrumentation and Science Opportunities : The Example of Deuterated Molecules*, in SFChem 2002 : Chemistry as a Diagnostic of Star Formation, ed. C. L. Curry & M. Fich, 3

184. Pickett, H. M. 1991, *The fitting and prediction of vibration-rotation spectra with spin interactions*, Journal of Molecular Spectroscopy, 148, 371

185. Pickett, H. M., Poynter, R. L., Cohen, E. A., et al. 1998, *Submillimeter, millimeter and microwave spectral line catalog.*, J. Quant. Spec. Radiat. Transf., 60, 883

186. Pineau des Forets, G. & Flower, D. 1996, *Non-thermal sputtering of grains and production of SiO in interstellar shocks*, in IAU Symposium, Vol. 178, Molecules in Astrophysics : Probes & Processes, ed. E. F. van Dishoeck, 113

187. Pontoppidan, K. M., van Dishoeck, E. F., & Dartois, E. 2004, *Mapping ices in protostellar environments on 1000 AU scales. Methanol-rich ice in the envelope of Serpens SMM 4*, A&A, 426, 925

188. Reid, M. J. & Ho, P. T. P. 1985, *G34.3 + 0.2 - A "cometary" H II region*, ApJL, 288, L17

189. Remijan, A. J. & Hollis, J. M. 2006, *IRAS 16293-2422 : Evidence for Infall onto a Counterrotating Protostellar Accretion Disk*, ApJ, 640, 842

190. Ridge, N. A., Schnee, S. L., Goodman, A. A., & Foster, J. B. 2006, *The COMPLETE Nature of the Warm Dust Shell in Perseus*, ApJ, 643, 932

191. Roberts, H., Herbst, E., & Millar, T. J. 2004, *The chemistry of multiply deuterated species in cold, dense interstellar cores*, A&A, 424, 905

192. Robitaille, T. P., Whitney, B. A., Indebetouw, R., & Wood, K. 2007, *Interpreting Spectral Energy Distributions from Young Stellar Objects. II. Fitting Observed SEDs Using a Large Grid of Precomputed Models*, ApJS, 169, 328

193. Robitaille, T. P., Whitney, B. A., Indebetouw, R., Wood, K., & Denzmore, P. 2006, *Interpreting Spectral Energy Distributions from Young Stellar Objects. I. A Grid of 200,000 YSO Model SEDs*, ApJS, 167, 256

194. Rodgers, S. D. & Charnley, S. B. 2002, *Multiply deuterated molecules and constraints on interstellar chemistry*, Planet. Space Sci., 50, 1125

195. Roelfsema, P. R., Helmich, F. P., Teyssier, D., et al. 2012, *In-orbit performance of Herschel-HIFI*, A&A, 537, A17

196. Rygl, K. L. J., Brunthaler, A., Sanna, A., et al. 2012, *Parallaxes and proper motions of interstellar masers toward the Cygnus X star-forming complex. I. Membership of the Cygnus X region*, A&A, 539, A79

197. Sakai, N., Sakai, T., Hirota, T., Burton, M., & Yamamoto, S. 2009, *Discovery of the Second Warm Carbon-Chain-Chemistry Source, IRAS15398 - 3359 in Lupus*, ApJ, 697, 769

198. Sakai, N., Sakai, T., Hirota, T., & Yamamoto, S. 2008, *Abundant Carbon-Chain Molecules toward the Low-Mass Protostar IRAS 04368+2557 in L1527*, ApJ, 672, 371

199. Sakai, N., Sakai, T., Hirota, T., & Yamamoto, S. 2010, *Distributions of Carbon-chain Molecules in L1527*, ApJ, 722, 1633

200. Sakai, N., Sakai, T., Osamura, Y., & Yamamoto, S. 2007, *Detection of C_6H^- toward the Low-Mass Protostar IRAS 04368+2557 in L1527*, ApJL, 667, L65

201. Sakai, N., Sakai, T., & Yamamoto, S. 2006, *Detection of $HCOOCH_3$ toward a Low-Mass Protostar, NGC 1333 IRAS 4B*, PASJ, 58, L15

202. Sandell, G., Aspin, C., Duncan, W. D., Russell, A. P. G., & Robson, E. I. 1991, *NGC 1333 IRAS 4 - A very young, low-luminosity binary system*, ApJL, 376, L17

203. Sandell, G. & Knee, L. B. G. 2001, *NGC 1333-Protostars, Dust Shells, and Triggered Star Formation*, ApJL, 546, L49

204. Sault, R. J., Teuben, P. J., & Wright, M. C. H. 1995, *A Retrospective View of MIRIAD*, in Astronomical Society of the Pacific Conference Series, Vol. 77, Astronomical Data Analysis Software and Systems IV, ed. R. A. Shaw, H. E. Payne, & J. J. E. Hayes, 433

205. Schöier, F. L., Jørgensen, J. K., van Dishoeck, E. F., & Blake, G. A. 2002, *Does IRAS 16293-2422 have a hot core ? Chemical inventory and abundance changes in its protostellar environment*, A&A, 390, 1001

206. Schöier, F. L., Jørgensen, J. K., van Dishoeck, E. F., & Blake, G. A. 2004, *On the origin of H_2CO abundance enhancements in low-mass protostars*, A&A, 418, 185

207. Schöier, F. L., van der Tak, F. F. S., van Dishoeck, E. F., & Black, J. H. 2005, *An atomic and molecular database for analysis of submillimetre line observations*, A&A, 432, 369

208. Scribano, Y., Faure, A., & Wiesenfeld, L. 2010, *Communication : Rotational excitation of interstellar heavy water by hydrogen molecules*, J. Chem. Phys., 133, 231105

209. Selier, R., Heydari-Malayeri, M., & Gouliermis, D. A. 2011, *An interesting candidate for isolated massive-star formation in the Small Magellanic Cloud*, A&A, 529, A40

210. Semenov, D., Hersant, F., Wakelam, V., et al. 2010, *Chemistry in disks. IV. Benchmarking gas-grain chemical models with surface reactions*, A&A, 522, A42

211. Sewilo, M., Churchwell, E., Kurtz, S., Goss, W. M., & Hofner, P. 2004, *Broad Radio Recombination Lines from Hypercompact H II Regions*, ApJ, 605, 285

212. Shalabiea, O. M. & Greenberg, J. M. 1994, *Two key processes in dust/gas chemical modelling : photoprocessing of grain mantles and explosive desorption.*, A&A, 290, 266

213. Shu, F. H. 1977, *Self-similar collapse of isothermal spheres and star formation*, ApJ, 214, 488

214. Sobolev, V. V. 1960, *Moving envelopes of stars*, Cambridge : Harvard University Press, 1960

215. Stark, R., Sandell, G., Beck, S. C., et al. 2004, *Probing the Early Stages of Low-Mass Star Formation in LDN 1689N : Dust and Water in IRAS 16293-2422A, B, and E*, ApJ, 608, 341

216. Takakuwa, S., Ohashi, N., Bourke, T. L., et al. 2007, *Arcsecond-Resolution Submillimeter HCN Imaging of the Binary Protostar IRAS 16293-2422*, ApJ, 662, 431

217. Teyssier, D., Fossé, D., Gerin, M., et al. 2004, *Carbon budget and carbon chemistry in Photon Dominated Regions*, A&A, 417, 135

218. Tielens, A. G. G. M. & Hagen, W. 1982, *Model calculations of the molecular composition of interstellar grain mantles*, A&A, 114, 245

219. Turner, B. E. 1990, *Detection of doubly deuterated interstellar formaldehyde (D_2CO) - an indicator of active grain surface chemistry*, ApJL, 362, L29

220. Turner, B. E. 1991, *A molecular line survey of Sagittarius B2 and Orion-KL from 70 to 115 GHz. II - Analysis of the data.*, ApJS, 76, 617

221. Turner, B. E., Balick, B., Cudaback, D. D., Heiles, C., & Boyle, R. J. 1974, *Fine structure in H II regions. II*, ApJ, 194, 279

222. Turner, B. E., Fourikis, N., Morris, M., Palmer, P., & Zuckerman, B. 1975, *Microwave detection of interstellar HDO*, ApJL, 198, L125

223. Turner, B. E., Herbst, E., & Terzieva, R. 2000, *The Physics and Chemistry of Small Translucent Molecular Clouds. XIII. The Basic Hydrocarbon Chemistry*, ApJS, 126, 427

224. Černis, K. 1990, *Interstellar extinction in the vicinity of the reflection nebula NGC 1333 in Perseus*, Ap&SS, 166, 315

225. Černis, K. 1993, *Interstellar extinction in the direction of the open cluster IC 348 and the Per OB2 association*, Baltic Astronomy, 2, 214

226. Černis, K. & Straižys, V. 2003, *Interstellar Extinction in the Direction of the Barnard 1 Dark Cloud in Perseus*, Baltic Astronomy, 12, 301

227. Valiron, P., Wernli, M., Faure, A., et al. 2008, *R12-calibrated H_2O-H_2 interaction : Full dimensional and vibrationally averaged potential energy surfaces*, J. Chem. Phys., 129, 134306

228. van Buren, D., Mac Low, M.-M., Wood, D. O. S., & Churchwell, E. 1990, *Cometary compact H II regions are stellar-wind bow shocks*, ApJ, 353, 570

229. van der Tak, F. F. S., Black, J. H., Schöier, F. L., Jansen, D. J., & van Dishoeck, E. F. 2007, *A computer program for fast non-LTE analysis of interstellar line spectra. With diagnostic plots to interpret observed line intensity ratios*, A&A, 468, 627

230. van der Tak, F. F. S., Schilke, P., Müller, H. S. P., et al. 2002, *Triply deuterated ammonia in NGC 1333*, A&A, 388, L53

231. van der Tak, F. F. S., Walmsley, C. M., Herpin, F., & Ceccarelli, C. 2006, *Water in the envelopes and disks around young high-mass stars*, A&A, 447, 1011

232. van Dishoeck, E. F. 2006, *Chemistry in low-mass protostellar and protoplanetary regions*, Proceedings of the National Academy of Science, 103, 12249

233. van Dishoeck, E. F. & Black, J. H. 1988, *The photodissociation and chemistry of interstellar CO*, ApJ, 334, 771

234. van Dishoeck, E. F., Blake, G. A., Jansen, D. J., & Groesbeck, T. D. 1995, *Molecular Abundances and Low-Mass Star Formation. II. Organic and Deuterated Species toward IRAS 16293-2422*, ApJ, 447, 760

235. van Dishoeck, E. F., Kristensen, L. E., Benz, A. O., et al. 2011, *Water in Star-forming Regions with the Herschel Space Observatory (WISH). I. Overview of Key Program and First Results*, PASP, 123, 138

236. van Kempen, T. A., Doty, S. D., van Dishoeck, E. F., Hogerheijde, M. R., & Jørgensen, J. K. 2008, *Modeling water emission from low-mass protostellar envelopes*, A&A, 487, 975

237. Vastel, C., Caselli, P., Ceccarelli, C., et al. 2006, *The Distribution of Ortho-H_2D^+ ($1_{1,0}$-$1_{1,1}$) in L1544 : Tracing the Deuteration Factory in Prestellar Cores*, ApJ, 645, 1198

238. Vastel, C., Caux, E., Ceccarelli, C., et al. 2000, *Large [O]/[CO] ratios in cold molecular clouds towards W 49N*, A&A, 357, 994

239. Vastel, C., Ceccarelli, C., Caux, E., et al. 2010, *Ortho-to-para ratio of interstellar heavy water*, A&A, 521, L31+

240. Vastel, C., Phillips, T. G., & Yoshida, H. 2004, *Detection of D_2H^+ in the Dense Interstellar Medium*, ApJL, 606, L127

241. Villanueva, G. L., Mumma, M. J., Bonev, B. P., et al. 2009, *A Sensitive Search for Deuterated Water in Comet 8p/Tuttle*, ApJL, 690, L5

242. Wagner, A. F. & Graff, M. M. 1987, *Oxygen chemistry of shocked interstellar clouds. I - Rate constants for thermal and nonthermal internal energy distributions*, ApJ, 317, 423

243. Walmsley, C. M., Flower, D. R., & Pineau des Forêts, G. 2004, *Complete depletion in prestellar cores*, A&A, 418, 1035

244. Wannier, P. G. 1980, *Nuclear abundances and evolution of the interstellar medium*, ARAA, 18, 399

245. Watanabe, N. & Kouchi, A. 2002, *Efficient Formation of Formaldehyde and Methanol by the Addition of Hydrogen Atoms to CO in H_2O-CO Ice at 10 K*, ApJL, 571, L173

246. Watson, D. M., Bohac, C. J., Hull, C., et al. 2007, *The development of a protoplanetary disk from its natal envelope*, Nature, 448, 1026

247. Watt, S. & Mundy, L. G. 1999, *Molecular Environments of Young Massive Stars : G34.26+0.15, G11.94-0.62, G33.92+0.11, and IRAS 18511+0146*, ApJS, 125, 143

248. Whitney, B. A., Wood, K., Bjorkman, J. E., & Cohen, M. 2003, *Two-dimensional Radiative Transfer in Protostellar Envelopes. II. An Evolutionary Sequence*, ApJ, 598, 1079

249. Wiesenfeld, L., Scribano, Y., & Faure, A. 2011, *Rotational quenching of monodeuterated water by hydrogen molecules*, Physical Chemistry Chemical Physics (Incorporating Faraday Transactions), 13, 8230

250. Wilson, R. W., Penzias, A. A., Jefferts, K. B., & Solomon, P. M. 1973, *Interstellar Deuterium : the Hyperfine Structure of DCN*, ApJL, 179, L107

251. Wilson, T. L. & Rood, R. 1994, *Abundances in the Interstellar Medium*, ARAA, 32, 191

252. Wood, D. O. S. & Churchwell, E. 1989, *The morphologies and physical properties of ultracompact H II regions*, ApJS, 69, 831

253. Wootten, A. 1989, *The Duplicity of IRAS 16293-2422 : A Protobinary Star ?*, ApJ, 337, 858

254. Wouterloot, J. G. A., Henkel, C., Brand, J., & Davis, G. R. 2008, *Galactic interstellar $^{18}O/^{17}O$ ratios - a radial gradient ?*, A&A, 487, 237

255. Yeh, S. C. C., Hirano, N., Bourke, T. L., et al. 2008, *The CO Molecular Outflows of IRAS 16293-2422 Probed by the Submillimeter Array*, ApJ, 675, 454

256. Yıldız, U. A., Kristensen, L. E., van Dishoeck, E. F., et al. 2012, *APEX-CHAMP$^+$ high-J CO observations of low-mass young stellar objects. III. NGC 1333 IRAS 4A/4B envelope, outflow, and ultraviolet heating*, A&A, 542, A86

257. Zinnecker, H. & Yorke, H. W. 2007, *Toward Understanding Massive Star Formation*, ARAA, 45, 481