Conditions initiales de la formation des étoiles massives : Astrochimie de la protoétoile CygX-N63

Sarah Fechtenbaum

▶ **To cite this version:**

Sarah Fechtenbaum. Conditions initiales de la formation des étoiles massives : Astrochimie de la protoétoile CygX-N63. Astrophysique [astro-ph]. Université de Bordeaux, 2015. Français. NNT : 2015BORD0204 . tel-01266876

HAL Id: tel-01266876

https://theses.hal.science/tel-01266876

Submitted on 3 Feb 2016

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 BORDEAUX

Thèse présentée pour obtenir le grade de
Docteur de l'Université de Bordeaux

❧

Ecole Doctorale des Sciences Physiques et de l'Ingénieur
Spécialité Astrophysique, Plasmas, Nucléaire

PAR : **SARAH FECHTENBAUM**

Conditions initiales de la formation des étoiles massives : Astrochimie de la protoétoile CygX-N63

Soutenue le : 5 novembre 2015

Sous la direction de SYLVAIN BONTEMPS, Directeur de recherche

MEMBRES DU JURY:

Président : Fabrice HERPIN, Astronome, Université de Bordeaux

Rapporteur : Emmanuel CAUX, Directeur de recherche, Université Paul Sabatier

Rapporteur : Maryvonne GERIN, Directrice de recherche, Observatoire de Paris

Examinateur : Arnaud BELLOCHE, Chargé de recherche, Max-Planck-Institut

Examinatrice : Nathalie BROUILLET, Astronome adjointe, Université de Bordeaux

Examinatrice : Timea CSENGERI, Chargée de recherche, Max-Planck-Institut

Examinatrice : Frédérique MOTTE, Directrice de recherche, Université Joseph Fourier

Remerciements

Quand j'ai découvert les livres, j'ai voulu être bibliothécaire, et quand j'ai découvert les livres de science-fiction, j'ai voulu être astronaute. J'ai appris plus tard que les astronautes devaient se contenter du voisinage de la Terre. Je voulais explorer l'univers dans son ensemble (rien que ça !), le métier d'astronome était donc fait pour moi. Tous les sujets m'intéressaient, alors, plutôt qu'un thème, j'ai choisi une personne, mon directeur, Sylvain Bontemps. Il étudiait la naissance des étoiles massives et en parlait avec passion et détermination. La première fois que je l'ai vu, il m'a noyée sous les explications détaillées du fonctionnement de l'interféromètre du Plateau de Bure (était-ce un test ?). Malgré cela, j'ai tout de suite su que j'allais aimer travailler avec lui. Merci, Sylvain, pour ta confiance, la liberté que tu m'as laissée dans ce travail et ton soutien dans les moments les plus difficiles.

Une thèse, c'est l'exploration profonde d'un sujet. Heureusement, on chemine rarement seul. Cette exploration a été jalonnée de rencontres, dont certaines ont été déterminantes. Je voudrais remercier Arnaud Belloche, d'abord pour son manuscrit de thèse (ma bible), pour les discussions que nous avons eues, qui m'ont à chaque fois fait considérablement progresser dans ma réflexion et ma compréhension, et pour les corrections très attentives du manuscrit. J'ai également rencontré Timea Csengeri au Max-Planck-Institut für Radioastronomie de Bonn. Merci, Timea, pour ton aide, ton soutien permanent et tous ces bons souvenirs que je garderai de Bonn grâce à toi. Merci aussi à toute l'équipe du LAB et à mes collègues doctorants, qui ont constitué une petite famille bienveillante pendant trois ans. En particulier, merci à Odile, Annick et Cécile, tout simplement indispensables.

Je remercie également les autres membres du jury, Nathalie Brouillet, Fabrice Herpin et Frédérique Motte, et mes deux rapporteurs, Emmanuel Caux et Maryvonne Gerin. Merci, Nathalie, pour ton implication dans la médiation des sciences. Grâce à toi, j'ai commencé à me constituer un réseau qui va continuer à me servir, j'en suis sûre. Fabrice, merci pour tes très bons cours de M2 et pour ta franchise inaltérable. Merci, Emmanuel, de m'avoir initiée à CASSIS et aidée efficacement tout au long de ma thèse.

Une thèse, c'est aussi l'exploration profonde de soi-même. Notre motivation est testée régulièrement, les questions existentielles nous chatouillent sans cesse. En cela, la famille et les amis influent énormément sur le déroulement de la thèse. Je remercie mes parents, qui ont toujours nourri ma curiosité et m'ont persuadée dès mon plus jeune âge que je pouvais faire exactement le métier que je voulais. Grâce à eux, le monde n'est que possibilités infinies. Merci à mes grand-parents et particulièrement à ma grand-mère, à qui j'ai dû expliquer l'ensemble de l'astrophysique et de la physique avec des mots simples (sacré challenge !). Merci à mes oncles et tantes et à Vincent et Nat', pour leur soutien et leur intérêt. Vincent, promis, dès que j'ai terminé, je m'attaque à la construction du téléporteur. Merci à ma sœur, Lou. Grâce à toi, et à Alexy, j'ai découvert une autre partie de l'univers, une partie que je ne peux pas voir avec un télescope (mais tout le monde sait que l'essentiel est invisible pour les yeux). Merci, Martine, de m'avoir supportée et nourrie pendant la rédaction. Sans toi, j'aurais mangé des pâtes pendant trois mois et mon manuscrit en aurait sans aucun doute souffert ! Merci, Xavier, mon mii, mon amour. Merci pour ta relecture pleine d'humour et d'amour. Il me tarde de connaître la suite de notre histoire ensemble, il y a tellement de bonnes choses à venir !

Merci à mes amis de longue date, Marion et Alex, Nono, Max, Vincent et Adela. Je sais que je peux compter sur vous quoi qu'il arrive. Je crois que c'est la meilleure définition

de l'amitié. Merci Vince, je n'aurais pas souhaité un autre co-bureau ! On était très souvent en balade durant ces trois ans, mais cela rendait encore meilleurs les moments passés ensemble. Je garde précieusement notre Roommate Agreement (je t'enverrai des Bjorgs vanille au Texas).

Merci aux amis rencontrés pendant la thèse, Marion la rousse, Julien, Alexandre et Fabien. Marion, je ne suis pas près d'oublier notre magnifique journée de l'école doctorale (la meilleure sans aucun doute). Et toutes ces soirées entre doctorants n'auraient pas eu le même goût sans toi, Alexandre ! Julien, merci pour toutes les soirées ciné et papotages, essentielles pour bien vivre une thèse (et désolée pour la crêpe aux lardons). Fabien, merci infiniment d'avoir trouvé les mots justes pour m'encourager à continuer quand les temps étaient difficiles.

Merci, Caleb, pour ton amour et ta compréhension qui ne nécessitent aucun mot.

Aujourd'hui, je vais continuer d'explorer l'univers, mais d'une autre façon. Le chemin est toujours le même. La recherche de sens, la curiosité et la passion sont mes guides. J'en sais maintenant un peu plus sur les étoiles et beaucoup plus sur moi-même.

Les gens ont des étoiles qui ne sont pas les mêmes. Pour les uns, qui voyagent, les étoiles sont des guides. Pour d'autres, elles ne sont rien que de petites lumières. Pour d'autres, qui sont savants, elles sont des problèmes. Pour mon businessman elles étaient de l'or. Mais toutes ces étoiles-là se taisent. Toi, tu auras des étoiles comme personne n'en a...

Le Petit Prince, Antoine de Saint-Exupéry

RÉSUMÉ

La naissance des étoiles massives est aujourd'hui encore mal comprise. En particulier, les conditions initiales de leur formation restent largement inconnues. Pour éclairer cette question, nous avons réalisé un relevé spectral complet non biaisé avec le télescope 30 m de l'IRAM vers la protoétoile massive CygX-N63 (M $\sim$ 58 $M_\odot$ et L $\sim$ 340 $L_\odot$). Nous avons mis en évidence une complexité moléculaire significative avec plus de 40 espèces. L'ion CF^+ est observé pour la première fois dans une protoétoile. Une possible première détection de l'espèce prébiotique CH_2NH dans une protoétoile est aussi proposée, ainsi qu'une première détection de $DOCO^+$. Cette étude spectroscopique, accompagnée d'observations interférométriques avec le Plateau de Bure, permet de séparer la contribution des différentes régions : enveloppe froide, région tiède, région de type hot core et flot bipolaire. L'enveloppe est constituée d'une grande quantité de gaz froid peu évolué, offrant un potentiel important pour la compréhension des phases précoces de la formation stellaire massive et compatible avec un scénario d'effondrement monolithique. La modélisation chimique montre que la chimie de ce gaz est encore hors équilibre, malgré sa haute densité, et confirme la jeunesse de la protoétoile avec un âge chimique de seulement $\sim$ 1000 ans. N63 est un précurseur de hot core plutôt qu'un hot corino massif. Il serait donc possible de distinguer, grâce à des diagnostics chimiques évolutifs, les précurseurs d'étoiles massives des protoétoiles de masse faible ou intermédiaire.

Mots-clés
Astrochimie
Formation stellaire
Etoiles massives
Relevé spectral non biaisé

Unité de recherche
Laboratoire d'Astrophysique de Bordeaux
UMR5804, 2 rue de l'Observatoire, BP89, 33171, Floirac cedex

ABSTRACT

High-mass star formation is still poorly understood. In particular the initial conditions of their formation are unknown. To explore this question, a complete unbiased spectral survey was conducted with the IRAM 30 m telescope toward the massive protostar CygX-N63 (M $\sim$ 58 $M_\odot$ and L $\sim$ 340 $L_\odot$). A significant molecular complexity is found, with more than 40 species. The ion CF^+ is observed for the first time in a protostar. A possible first detection of the prebiotic species CH_2NH in a protostar and a first detection of $DOCO^+$ are proposed. This spectroscopic study, along with Plateau de Bure interferometric observations, allows us to separate the contribution of different regions : cold envelope, lukewarm region, hot core-like region and outflow. The envelope contains large amounts of cold and young gas, which gives us the opportunity to better understand the early phases of massive star formation. The chemical modeling shows that the chemistry is still out of equilibrium, despite its high density, and confirms the youth of the protostar with a chemical age of $\sim$ 1000 years. N63 is a hot core precursor rather than a massive hot corino. The use of chemical diagnostics of the evolution would then allow to distinguish massive star precursors from low-mass or intermediate-mass protostars.

Key words
Astrochemistry
Massive star formation
Unbiased spectral survey

TABLE DES MATIÈRES

Résumé v

Abstract vii

1 Introduction 1
- 1.1 Comprendre la naissance des étoiles . . . 2
- 1.2 La question des étoiles massives . . . 4

2 Formation des étoiles 7
- 2.1 Le milieu interstellaire . . . 7
  - 2.1.1 Les nuages moléculaires . . . 7
  - 2.1.2 Les grains . . . 9
  - 2.1.3 La phase gazeuse . . . 10
  - 2.1.4 Chauffage et refroidissement des nuages . . . 11
- 2.2 La formation des étoiles . . . 12
  - 2.2.1 Les conditions initiales de la formation stellaire . . . 12
  - 2.2.2 Les échelles de temps . . . 17
  - 2.2.3 Les grandes lignes de la formation . . . 18
  - 2.2.4 Structure d'une protoétoile . . . 23
- 2.3 La formation des étoiles de masse élevée . . . 25
  - 2.3.1 Les problèmes posés par la formation d'étoiles massives . . . 27
  - 2.3.2 Scénarios possibles . . . 27
- 2.4 Astrochimie de la formation stellaire . . . 30
  - 2.4.1 Les codes astrochimiques . . . 31
  - 2.4.2 La chimie des différentes familles de molécules . . . 32

3 Outils observationnels 41
- 3.1 S'affranchir de l'atmosphère . . . 41
- 3.2 Télescopes à réflecteur unique . . . 42
  - 3.2.1 La détection hétérodyne . . . 44
  - 3.2.2 Températures d'antenne . . . 45
  - 3.2.3 Calibration . . . 48
  - 3.2.4 Le télescope de 30 m du Pico Veleta . . . 49
- 3.3 L'interférométrie . . . 50
  - 3.3.1 Principes généraux . . . 51

3.3.2 L'interféromètre NOEMA . . . 54
3.3.3 Calibration et déconvolution . . . 55
3.4 Transfert radiatif et spectroscopie . . . 55
3.4.1 Eléments de transfert radiatif . . . 55
3.4.2 Spectroscopie rotationnelle . . . 59
3.4.3 Excitation radiative et collisionnelle . . . 61
3.4.4 Détermination de la densité de colonne . . . 62
3.5 Le logiciel CASSIS . . . 66
3.5.1 Analyse de spectres . . . 66
3.5.2 Identification des raies . . . 67
3.5.3 Diagrammes de population . . . 68
3.5.4 Modélisation ETL . . . 69

4 Fragmentation et recherche de disques autour des protoétoiles massives du Cygne 71
4.1 Les cœurs massifs du Cygne-X . . . 72
4.2 Observations au Plateau de Bure . . . 73
4.2.1 Des fragments individuels super Jeans . . . 73
4.2.2 Mise en évidence d'une rotation différentielle . . . 75
4.2.3 Disques ou pseudo-disques ? . . . 84
4.3 Comparaison chimique . . . 84
4.4 N53-MM2 : un cœur préstellaire ? . . . 87
4.5 CygX-N63 : la protoétoile idéale . . . 88

5 Composition et structure chimique d'une classe 0 massive : CygX-N63 93
5.1 Relevé spectral non biaisé avec le télescope de 30 m . . . 94
5.1.1 Observations . . . 94
5.1.2 Vue d'ensemble du relevé spectral . . . 96
5.2 Structure spatiale de l'émission moléculaire d'une proto-étoile massive . . . 98
5.2.1 Analyse des profils spectraux . . . 99
5.2.2 Diagrammes de population . . . 101
5.2.3 Modélisation ETL des COMs . . . 104
5.2.4 Relation entre largeur de raie et vitesse LSR . . . 105
5.2.5 Relation entre largeur de raie et température d'excitation . . . 106
5.3 Détermination de la taille d'émission . . . 108
5.3.1 Relation entre largeur de raie et taille d'émission . . . 108
5.3.2 Modélisation ETL de l'émission moléculaire . . . 112
5.4 Conclusions sur la décomposition spatiale . . . 116
5.5 Détermination des abondances . . . 116
5.6 Première détection de CF^+ vers une protoétoile massive . . . 122

6 CygX-N63 : Lien astrochimique entre nuages sombres et hot cores ? 127
6.1 Comparaison avec des sources de référence . . . 128
6.1.1 Les sources de référence . . . 129
6.1.2 Comparaison de la composition chimique . . . 130
6.1.3 Comparaison des abondances . . . 132
6.1.4 Discussion sur l'évolution des proportions d'éléments . . . 134
6.1.5 N63 parmi les sources massives . . . 136
6.2 Etude du gaz originel de l'enveloppe froide . . . 141
6.2.1 Composition . . . 141
6.2.2 Taux de déplétion . . . 142
6.2.3 Deutération . . . 143
6.2.4 Modélisation 0D du gaz originel avec Nautilus . . . 144
6.3 Etude de la naissance d'un hot core . . . 147
6.3.1 Modélisation 1D des COMs . . . 149
6.3.2 Formation asymétrique d'un hot core ? . . . 151

7 Conclusions et perspectives 153
7.1 Conclusions . . . 153
7.1.1 Utiliser la chimie comme diagnostic pour contraindre le scénario de formation des étoiles massives . . . 153
7.1.2 Progresser sur l'origine astrochimique des composés moléculaires, en particulier dans les hot cores . . . 155
7.1.3 Rechercher de nouveaux diagnostics d'état évolutif pour les étoiles massives . . . 156
7.2 Perspectives . . . 156

Annexes 159

A Détections et détections potentielles d'espèces rares 159
A.1 Les ions . . . 159
A.1.1 Le dioxyde de carbone hydrogéné et deutéré $DOCO^+$ . . . 159
A.1.2 Le formaldéhyde protoné H_2COH^+ . . . 160
A.1.3 Le cyanide d'hydrogène protoné $HCNH^+$ . . . 161
A.2 Les COMs . . . 164
A.2.1 Le propanal et le propynal . . . 164
A.2.2 Le méthanethiol CH_3SH . . . 164
A.2.3 Le méthanol deutéré CH_3OD . . . 166
A.3 Les molécules prébiotiques . . . 167
A.3.1 Le méthanimine CH_2NH . . . 169
A.3.2 Le formamide NH_2CHO . . . 170

A.3.3 Le nitrure de phosphore PN 174

B Diagrammes de population **177**

C Rapports isotopiques **191**

D Raies observées au 30 m **193**

E Raies observées au PdBI **197**

F Liste des publications **199**

F.1 Unbiased spectral survey of CygX-N63 : pre-hot core chemistry and pristine gas for high-mass star formation 200

F.2 First detection of CF^+ towards a high-mass protostar 219

F.3 First unbiased spectral survey of a young and single massive protostar : CygX-N63 226

Bibliographie **231**

CHAPITRE 1

INTRODUCTION

En juillet 1999, dans la région de Saxe-Anhalt en Allemagne, des fouilleurs clandestins mettent à jour un curieux disque de bronze d'environ deux kilos et d'une trentaine de centimètres de diamètre. Il est daté d'environ 1600 av. J.-C. Des plaques d'or y sont incrustées et leur forme évoque la Lune et la constellation des Pléiades. Plusieurs historiens de l'astronomie l'ont étudié [Schlosser, 2004]. Il pourrait s'agir d'une représentation du ciel vu depuis cette région vallonée d'Allemagne, il y a 3600 ans. Une sorte d'aide-mémoire contenant plusieurs informations astronomiques essentielles pour l'agriculture de l'époque. Le disque de Nebra est l'une des plus anciennes représentations du ciel connues à ce jour.

FIGURE 1.1 – **Gauche** : Photographie du disque de Nebra (Wikipedia). La constellation des Pléïades est entourée en mauve. **Droite** : La constellation des Pléïades vue par le télescope Samuel Oschin de l'observatoire du Mont Palomar (Crédit : NASA, ESA, AURA/Caltech).

Aujourd'hui encore, l'astronomie est à l'avant-garde de notre compréhension de l'univers. La découverte de la matière noire, de l'expansion de l'univers ou encore de l'asymétrie matière/antimatière, questionnent sans cesse la physique. La question de nos origines traverse tous les domaines de l'astronomie : de la cosmologie, qui recherche les origines de l'univers, jusqu'à l'astrochimie, qui étudie les molécules dans l'espace, dont celles permettant l'apparition de la vie.

1.1 Comprendre la naissance des étoiles

La physique des étoiles s'inscrit dans cette quête de la compréhension de l'univers et de nos origines. Le Soleil, l'étoile la plus proche de nous, a une influence décisive sur le climat terrestre et sur la vie. D'autre part, la plupart des éléments chimiques ont été créés dans les étoiles. En effet, le Big Bang a formé essentiellement de l'hydrogène et de l'hélium. Les éléments comme l'oxygène, l'azote et le carbone peuvent être fabriqués par des étoiles de type solaire. Les étoiles plus massives produisent durant leur vie les éléments plus lourds jusqu'au fer, ainsi que les éléments au delà du fer lors de leur mort en supernova. En dehors de l'hydrogène, l'ensemble de ce qui nous constitue a donc été produit au cœur des étoiles. Enfin, l'essentiel de notre compréhension de l'univers provient de la lumière, principalement émise par les étoiles. Les autres sources d'information sont rares : les météorites tombées sur Terre, les rayons cosmiques ou encore les échantillons rapportés de l'espace. Cette lumière illumine les nuages de gaz et de poussière, éclaire les planètes extrasolaires et dessine les galaxies. Il est donc crucial de comprendre les étoiles pour comprendre l'univers.

Les plus vieux catalogues d'étoiles connus à ce jour remontent à 1500-1100 av. J.-C. Le Soleil est également déjà étudié à cette époque, les taches solaires sont par exemple déjà décrites en Chine vers 800 av. J.-C. A la fin du XVI^{e} siècle, le philosophe Giordano Bruno a l'intuition que les étoiles sont des soleils, mais l'idée met encore longtemps à s'imposer. Jusqu'à la fin du XIX^{e} siècle, l'ensemble de l'univers connu ne consiste encore qu'en un unique système solaire entouré d'étoiles éternelles.

FIGURE 1.2 – La nébuleuse de la tête de cheval vue en lumière visible (gauche) (ESO) et en proche infrarouge (droite) (ESA/Hubble).

Dans les années 1830, le philosophe Auguste Comte déclare dans son *Cours de philosophie positive* que « Les astres sont ainsi, de tous les êtres naturels, ceux que nous pouvons connaître sous les rapports les moins variés. Nous concevons la possibilité de déterminer leurs formes, leur distance et leurs mouvements tandis que nous ne saurions jamais étudier par aucun moyen leur composition chimique... ». Seulement quelques années après la mort de Comte, deux sa-

vants allemands, Robet Bunsen et Gustav Kirchhoff, comprennent que les raies observées par Fraunhofer dans le spectre du Soleil révèlent sa composition chimique. La spectroscopie est depuis lors un outil essentiel de l'astronomie.

Près d'un siècle plus tard, dans les années 1920, les astrophysiciens débattent férocement de la source d'énergie des étoiles, jusqu'à ce que Arthur Eddington propose la fusion de l'hydrogène comme mécanisme principal de production d'énergie. Cette théorie explique les propriétés basiques des étoiles. Les étoiles ne sont donc pas éternelles, elles naissent, évoluent et meurent, à l'épuisement de leur carburant. En particulier, des étoiles très lumineuses brûlent leur carburant si rapidement que leur durée de vie est courte en comparaison de la durée de vie de notre galaxie. En d'autres termes, cela signifie que ces étoiles sont nées il y a très peu de temps et que d'autres doivent être en train de naître. Il doit donc être possible d'étudier l'origine des étoiles grâce à des observations directes.

Mais notre compréhension de l'origine des étoiles fut retardée par un autre fait. Comme nous le verrons en détail au chapitre suivant, la naissance des étoiles a lieu au sein de nuages de gaz et de poussière denses et froids, qui apparaissent sombres en lumière visible, la partie de la lumière observable par l'œil humain (voir figure 1.2). Or, pendant très longtemps, l'étude des étoiles fut limitée au spectre visible. En 1800, William Herschel découvre une lumière invisible, le rayonnement infrarouge, en deçà du rouge (voir figure 1.3). Pour les astronomes, le rayonnement infrarouge s'étend par convention d'une longueur d'onde de 0,75 μm à 200 μm. De 200 μm à 1 mm s'étend le domaine submillimétrique. Le développement des radars permet ensuite l'exploration des ondes radio, entre 1 mm et $\sim$ 30 km de longueur d'onde.

Dans les années 1930, Karl Gute Jansky découvre par hasard un "bruit radio" coïncidant avec le centre de la Voie Lactée, qui se révèle être la source de rayonnement radio la plus puissante du ciel. Jansky devient le père de la radioastronomie, c'est-à-dire la science qui étudie le rayonnement électromagnétique émis par les sources astronomiques à des longueurs d'onde comprises entre quelques MHz et 2 THz. Ces nouvelles fenêtres d'observation permettent des détections impossibles par d'autres moyens. C'est le cas par exemple du gaz d'hydrogène, froid et diffus. L'hydrogène est observable seulement grâce à son émission à 21 cm, due à la structure hyperfine du niveau fondamental. C'est également le cas pour le gaz dense et froid, tracé par les transitions rotationnelles du monoxyde de carbone. Les nuages sombres en lumière visible sont à présent observables en lumière radio et infrarouge, comme la nébuleuse de la tête de cheval de la figure 1.2. L'étude de la naissance des étoiles va alors pouvoir commencer, avec la découverte des précurseurs d'étoiles : les protoétoiles.

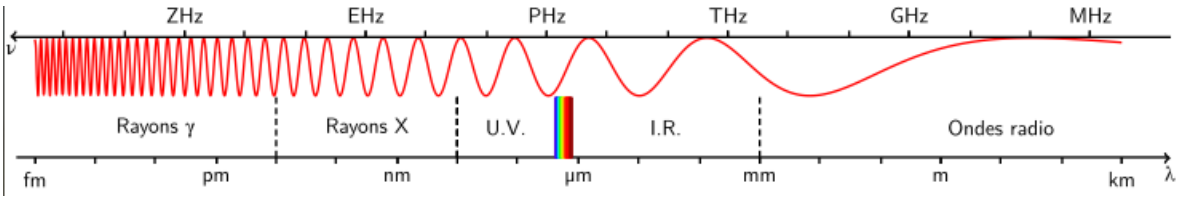


FIGURE 1.3 – Domaines du spectre électromagnétique. Le spectre visible est situé entre l'ultraviolet et l'infrarouge, symbolisé par la zone couleur arc-en-ciel (Wikipedia Commons, Benjamin Abel).

1.2 La question des étoiles massives

Une étoile est dite massive lorsque sa masse est supérieure à 8 $M_\odot$. Ce sont les étoiles de type spectral O, B0 ou B1 dans la classification de Morgan-Keenan. Bien que rares en comparaison des étoiles de faible masse, les étoiles massives jouent un rôle fondamental dans les galaxies. Leur mort en supernova produit une grande quantité d'éléments lourds, au delà du fer, qui sont alors disséminés dans la galaxie. Ces éléments lourds sont des agents de refroidissement du gaz interstellaire, encourageant la formation de la future génération d'étoiles. La luminosité des étoiles massives est 1000 à 100 000 fois supérieure à celle du Soleil. Leur rayonnement est capable d'ioniser l'hydrogène, et, avec les vents stellaires, façonne les nuages environnants et régule la formation stellaire. Ces phénomènes peuvent en effet aider la formation d'étoiles en comprimant la matière interstellaire tandis que l'ionisation et le chauffage générés peuvent l'éroder et par conséquent diminuer la formation stellaire. Enfin, les premières générations d'étoiles étaient probablement très massives. La question de leur formation est donc intimement reliée aux débuts de l'univers.

La naissance des étoiles massives est encore mal connue aujourd'hui pour plusieurs raisons. Les protoétoiles massives sont difficiles à observer, malgré leur luminosité importante. Elles naissent en effet cachées au sein de nuages sombres. D'autre part, elles sont rares et donc pour la plupart lointaines, à plus de 2 kpc du Soleil, rendant les observations difficiles. Elles naissent le plus souvent en amas, compliquant les observations du fait de la superposition d'objets à différents stades d'évolution. Enfin, les astronomes s'y intéressent depuis moins longtemps que les étoiles de faible masse. En conséquence, de nombreuses incertitudes subsistent concernant leur naissance : Leur formation se fait-elle de façon monolithique ? Quelle est la rétroaction du fort rayonnement de ces objets sur leur processus de formation ? Quel est le rôle du champ magnétique ? Comment se forment les disques autour de tels objets ? Quelles sont les conditions initiales de leur formation ?

Une fois encore, la spectroscopie peut nous permettre de progresser sur ces questions. Son développement a donné naissance à une nouvelle branche de l'astronomie : l'astrochimie, c'est-à-dire l'étude de la chimie des objets astronomiques. Cet outil puissant peut nous permettre

de contraindre le scénario de formation des étoiles massives en retraçant l'histoire des conditions physiques et en fournissant des diagnostics de l'état d'évolution de la protoétoile. Depuis quelques années seulement, des codes chimiques toujours plus complets, incluant la chimie sur les grains (voir partie 2.1.2 pour une définition), sont maintenant couplés à des simulations numériques précises des propriétés physiques, à l'échelle de quelques unités astronomiques. Les conditions physiques influent de manière évidente sur la chimie, mais cette dernière peut également exercer une rétroaction sur les conditions physiques (refroidissement, fraction d'espèces ionisées...). Ces outils sont déjà utilisés avec succès pour la formation des étoiles de faible masse et commencent à présent à être étendus à la formation des étoiles massives.

L'observation des précurseurs d'étoiles massives débute seulement. Toute une nouvelle chimie est donc à découvrir, faisant le lien entre la chimie des nuages sombres et celles des protoétoiles massives.

Dans ce contexte, l'objectif de cette thèse est de révéler les conditions initiales de la formation des étoiles massives par l'analyse spectroscopique détaillée d'un véritable précurseur d'étoile massive : CygX-N63. Cet objectif se décline en plusieurs axes :

- Utiliser la chimie comme diagnostic pour contraindre le scénario de formation des étoiles massives.
- Progresser sur l'origine astrochimique des composés moléculaires, en particulier dans les hot cores.
- Découvrir de nouveaux diagnostics d'état évolutif pour les étoiles massives.

Le premier chapitre présente les grandes lignes de la formation des étoiles et expose les spécificités de la formation des étoiles massives. Dans un second chapitre sont présentées les techniques d'observation, de spectroscopie et de modélisation utilisées dans ce travail. Les observations de cœurs massifs menées avec l'interféromètre du Plateau de Bure sont présentées au chapitre 4. Le chapitre 5 est consacré à la structure spatiale de la chimie de la protoétoile CygX-N63. Le chapitre 6 présente l'étude détaillée du gaz originel de l'enveloppe de cette protoétoile ainsi qu'une comparaison avec des objets de référence.

CHAPITRE 2

FORMATION DES ÉTOILES

2.1 Le milieu interstellaire

Les étoiles sont parmi les éléments les plus visibles du ciel nocturne, mais d'autres objets le composent. Par une nuit claire et avec une paire de jumelles, on peut par exemple observer la nébuleuse d'Orion. Les astronomes du XVIII^{e} siècle appelaient "nébuleuse" tout objet à l'apparence diffuse. Ce n'est qu'au milieu du XIX^{e} siècle qu'ils commenceront à analyser le spectre de ces objets, leur permettant de distinguer les galaxies des nuages de gaz et de poussière. Seuls ces derniers garderont l'appellation de nébuleuse.

Les nébuleuses représentent les parties les plus denses de ce que l'on appelle le milieu interstellaire, littéralement ce qui se situe entre les étoiles. Le milieu interstellaire (abrégé par la suite MIS) est composé de 99 % de gaz et de 1 % de poussière. Ce gaz peut être sous forme ionique, atomique ou moléculaire selon les régions. L'hydrogène est le premier constituant du MIS, représentant 91 % des atomes, suivi par l'hélium, 9 %, les autres atomes représentant moins de 0,1 %. La densité du MIS est extrêmement faible comparée aux standards terrestres, allant de 10^{-4} particules par cm^3 dans les régions chaudes et diffuses à 10^6 - 10^7 particules par cm^3 dans les régions denses et froides. En comparaison, l'air terrestre a une densité de 10^{19} particules par cm^3.

Les régions où le gaz et la poussière coexistent peuvent être divisées en deux catégories : les nuages diffus et les nuages moléculaires. Dans les nuages diffus, la densité est suffisamment basse pour que la lumière des étoiles y pénètre facilement. Le rayonnement des étoiles chaudes peut alors ioniser le carbone, le soufre, le fer, etc. Les rayons cosmiques ionisent une petite partie, 0,01 %, de l'hydrogène. Le reste est moléculaire. Une variété limitée de molécules est présente (CO, CH, CN, CH^+, etc.) mais la plupart des éléments sont sous forme atomique [Williams, 2005]. Les nuages moléculaires constituent le lieu de naissance des étoiles, ils nous intéressent donc tout particulièrement.

2.1.1 Les nuages moléculaires

Les observations et la théorie montrent que la formation stellaire a lieu dans les régions les plus denses et les plus froides du MIS, les nuages moléculaires, où l'énergie gravitationnelle est du même ordre de grandeur que la somme des énergies thermique, turbulente et magnétique, en valeur absolue. Ces nuages ont une masse typique de l'ordre de 10^3-10^6 $M_\odot$, un rayon de

quelques parsecs [1], une température de 10-30 K et un champ magnétique de l'ordre de quelques 10^{-5} G [P. H. Bodenheimer, 2011].

Ces nuages présentent des structures à toutes les échelles, créées par une turbulence supersonique, qui les fragmente en feuillets denses, filaments, clumps et cœurs [Padoan and Nordlund, 2002] (voir la région du Cygne par exemple à la figure 4.2). La nomenclature suivante sera utilisée dans l'ensemble de cette thèse pour décrire les structures des nuages moléculaires : les *clumps* sont des structures plus denses que les régions environnantes ($\sim$ 1 pc, 10^3-10^4 cm^{-3}). Au sein des *clumps* se trouvent les cœurs denses, de densité encore plus élevée, de l'ordre de 10^4-10^5 cm^{-3}. La masse d'un cœur dense est typiquement de quelques masses solaires dans une taille de 0,1 pc, à une température autour de 10 K. Au sein de ces cœurs, l'effondrement gravitationnel peut alors déclencher la formation d'étoiles à partir de fragments, qui sont des précurseurs individuels d'étoiles. Les protoétoiles apparaissent d'abord sous la forme de sources infrarouges enfouies. Cette vision de la turbulence créant les structures et de la gravité formant ensuite les étoiles au sein de ces structures est connue sous le nom de théorie gravoturbulente.

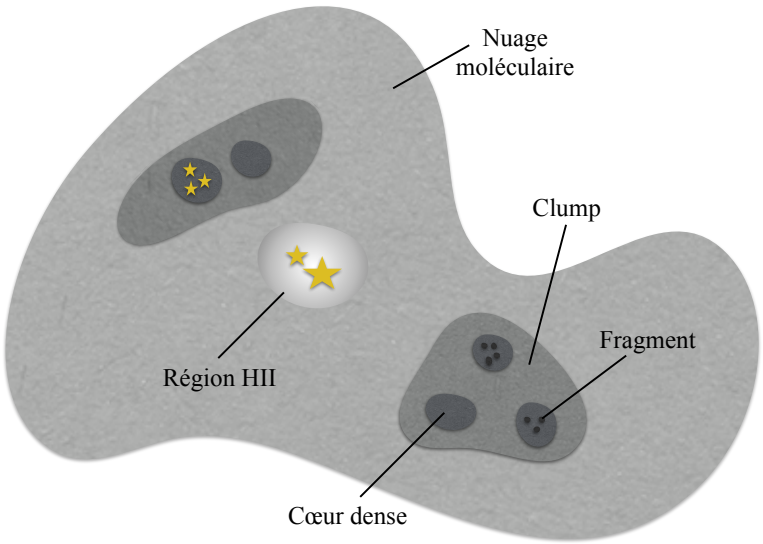


FIGURE 2.1 – Schéma des structures dans un nuage moléculaire et nomenclature utilisée.

Dans les clumps et les cœurs, la densité est suffisante (10^3-10^5 cm^{-3}) pour protéger l'intérieur du nuage du rayonnement des étoiles environnantes et permettre la présence d'hydrogène moléculaire. La molécule de dihydrogène peut en effet être détruite par des photons d'énergie supérieure à 11 eV. Le dihydrogène représente près de $\sim$ 63% de la masse des nuages, l'hélium $\sim$ 36% et la poussière, les autres molécules et atomes se partagent le 1% restant.

Ce sont pourtant les molécules qui nous intéressent dans ce travail, pour plusieurs raisons. Tout d'abord, il est très difficile d'observer H_2 et He car les conditions d'excitation nécessaires ne sont presque jamais réunies, sauf dans des chocs. En effet, la plus basse transition de H_2 relie

1. 1 parsec = 3,085678$\times 10^{16}$m.

le niveau J = 2, situé à 512 K au dessus du fondamental, au niveau J = 0. D'autres molécules, à l'état de traces, sont alors observées à leur place. La molécule CO est par exemple un bon traceur des *clumps*, tandis que NH_3 trace des régions plus denses comme les cœurs. Le rapport d'abondance de CO sur H_2 vaut environ 10^{-4} dans les nuages moléculaires denses. Il est alors possible d'avoir une estimation de l'abondance de H_2 à partir de celle de CO.

La spectroscopie à haute résolution spectrale nous transmet de multiples informations sur la cinématique de l'objet étudié : mouvements d'effondrement, éjections de matière, rotation... L'observation de la largeur des raies nous renseigne par exemple sur le mouvement du gaz. A 10 K, l'élargissement thermique attendu est de l'ordre de 0,2 km s^{-1} (en moyenne, cette valeur dépend bien sûr de la masse de la molécule considérée), ce qui correspond également à l'ordre de grandeur de la vitesse du son. Pourtant, dans les *clumps*, les largeurs de raies valent plutôt 2-3 km s^{-1}, ce qui est hautement supersonique. C'est une indication que le gaz subit des mouvements à grande échelle, dont l'origine est encore débattue.

Les molécules sont également intéressantes en elles-mêmes car une partie d'entre elles sera conservée dans le disque proto-planétaire et à terme, dans les planètes. L'un des buts de l'astrochimie est d'évaluer la complexité chimique atteinte dans le milieu interstellaire, en particulier la formation de molécules prébiotiques, c'est-à-dire pouvant conduire à la formation de la vie. De très nombreuses molécules complexes ont été découvertes dans les régions denses de formation d'étoile.

2.1.2 Les grains

La poussière est composée de particules solides, appelées grains, contenant de l'ordre d'un milliard d'atomes. Leur taille varie du nanomètre au micron [Williams, 2005]. Les grains sont capables d'absorber le rayonnement dans l'UV et le visible et de le réémettre sous forme d'un spectre de corps noir modifié. Les grains se forment dans les atmosphères des étoiles en fin de vie, pendant les phases de géante rouge et de nébuleuse planétaire, durant lesquelles des coquilles de gaz en expansion sont éjectées par l'étoile mourante [Ryden, 2015].

Dans les nuages moléculaires, denses et froids, les atomes et molécules de la phase gazeuse se collent à la surface des grains avec une efficacité variable selon les espèces, formant des manteaux de glace. Ce processus est appelé adsorption (*freeze-out*). D'un point de vue du gaz, on parle aussi de déplétion, qui est un terme plus général signifiant la réduction de l'abondance d'un élément en phase gazeuse par rapport à l'abondance solaire $(X/H)_\odot$, qui fait figure de référence. Cette déplétion est supposée être due à l'adsorption des espèces sur les grains. Les molécules azotées comme NH_3 ou N_2H^+ semblent y être moins sensibles que les autres. Leur observation permet alors de tracer les régions les plus denses, où la formation d'étoiles se produit. Formellement, la déplétion s'exprime comme [Jenkins, 2009] :

$$[X_{gaz}/H] = \log\{N(X)/N(H)\} - \log(X/H)_\odot \tag{2.1}$$

avec N(X) la densité de colonne de l'espèce X.

Un grain idéal est sphérique et formé d'un cœur entouré d'un manteau de glace. En réalité, les grains peuvent être de forme allongée ou bien irrégulière. Le cœur se compose principalement de silicates (contenant principalement du SiO_4 ainsi que des ions Mg et/ou Fe) et de matériaux carbonés [Draine, 2003]. Le manteau de glace contient les molécules adsorbées venant du milieu interstellaire. Il s'agit principalement de H_2O, CO et CO_2. D'autres espèces comme CH_3OH, CH_4, H_2CO et NH_3 sont aussi observées en quantités variables [Garrod et al., 2008].

Une espèce adsorbée sur un grain peut se déplacer à sa surface, on parle de diffusion. Elle peut alors réagir avec d'autres espèces présentes sur le grain. Ce dernier joue alors le rôle de catalyseur et rend possible des réactions qui seraient autrement impossible en phase gazeuse, où la rencontre entre deux molécules est peu probable. L'exemple le plus important est H_2. Aucune voie de formation efficace en phase gazeuse n'étant connue, H_2 est supposé se former exclusivement sur les grains. Un autre exemple est le CO_2, qui est souvent la seconde molécule la plus abondante après l'eau sur les grains. Or, elle est extrêmement rare en phase gazeuse. Elle est donc probablement formée directement à la surface des grains. D'autre part, en absorbant une partie du rayonnement, ce qui réduit alors la photodissociation des molécules, la poussière peut permettre le développement d'une chimie plus complexe à la surface du grain. Enfin, la poussière est un important agent de refroidissement, affectant la formation stellaire.

Lorsqu'une étoile se forme, elle chauffe son environnement. Si la densité est suffisante, au delà de 3.10^4 cm^{-3} [Palmeirim et al., 2013], les grains et le gaz sont couplés et la température des grains et celle du gaz sont globalement identiques. Le chauffage des grains peut alors provoquer le retour de certaines espèces en phase gazeuse. On parle alors de désorption thermique. Selon les molécules et la composition des glaces, la température de désorption diffère. Pour le CO, elle est par exemple de l'ordre de 20 K, tandis que pour l'eau et le méthanol, elle est d'environ 110 K [Garrod et al., 2008]. Les rayons cosmiques peuvent aussi provoquer la désorption, ainsi que des réactions chimiques exothermiques ou des collisions entre grains. Les protoétoiles produisent des flots de matière, générant des chocs avec la matière environnante. Ces chocs provoquent des collisions entre grains qui libèrent les molécules des manteaux. Ces différents modes de désorption sont dits non thermiques.

2.1.3 La phase gazeuse

Dans la phase gazeuse du milieu interstellaire, les collisions simples entre atomes permettent rarement de former une molécule car le temps d'interaction est court en comparaison du temps nécessaire pour évacuer l'énergie générée par la réaction, soit sous forme de rayonnement soit par collision avec un troisième corps [Williams, 2005]. A la pression atmosphérique, les collisions impliquent très souvent un troisième corps mais aux densités interstellaires, c'est très rare.

Les réactions sont souvent des réactions d'échange du type :

$$\mathrm{A} + \mathrm{BC} \rightarrow \mathrm{AB} + \mathrm{C}$$

De telles réactions sont bien plus efficaces si l'un des deux partenaires est ionisé. En réalité, les réactions d'échanges entre atomes neutres et H_2 ne se produisent pas aux basses températures du milieu interstellaire. La chimie débute alors grâce aux rayons cosmiques, qui sont une source importante d'ionisation pour l'hydrogène et l'hélium moléculaire. L'ion moléculaire H_2^+ réagit alors rapidement avec un autre H_2 par :

$$\mathrm{H_2^+} + \mathrm{H_2} \rightarrow \mathrm{H_3^+} + \mathrm{H}$$

H_3^+ peut alors facilement transmettre un proton à une autre espèce. La chimie de l'oxygène peut alors commencer ainsi :

$$\mathrm{O} + \mathrm{H_3^+} \rightarrow \mathrm{OH^+} + \mathrm{H_2}$$

$$\mathrm{OH^+} + \mathrm{H_2} \rightarrow \mathrm{H_2O^+} + \mathrm{H}$$

$$\mathrm{H_2O^+} + \mathrm{H_2} \rightarrow \mathrm{H_3O^+} + \mathrm{H}$$

Cette dernière réaction est suivie par la recombinaison dissociative :

$$\mathrm{H_3O^+} + \mathrm{e^-} \rightarrow \mathrm{OH} + \mathrm{H_2}$$

ou

$$\mathrm{H_3O^+} + \mathrm{e^-} \rightarrow \mathrm{H_2O} + \mathrm{H}$$

L'essentiel de la chimie interstellaire de la phase gazeuse peut alors être résumée ainsi. Si un ion peut réagir avec H_2, il le fera, H_2 étant surabondant. Lorsqu'un ion est saturé d'hydrogène, le plus probable est qu'il se recombine de façon dissociative sous l'action des électrons. Le même type de série de réactions est à l'œuvre pour les molécules carbonées et azotées.

2.1.4 Chauffage et refroidissement des nuages

Les principaux processus capables de chauffer un nuage sont les suivants : la photodissociation de H_2 par les photons interstellaires, la photoionisation des atomes de carbone par le rayonnement interstellaire, l'ionisation de H et H_2 par les rayons cosmiques de faible énergie (principalement des protons) et la production d'électrons libérés des grains par les photons UV interstellaires. Dans ces processus, l'énergie excédentaire, au dessus du seuil d'ionisation ou de dissociation, apportée par le photon ou la particule, sert à chauffer le gaz environnant. Aux densités supérieures à 10^3 cm^{-3}, le chauffage par les rayons cosmiques domine.

Le refroidissement est dominé par deux processus : l'excitation collisionnelle des atomes, molécules et ions par les électrons, H ou H_2, suivie d'une désexcitation et de l'échappement

du photon, et le refroidissement des grains. Ces deux processus sont proportionnels au carré de la densité. Pour l'excitation collisionnelle, les principaux contributeurs sont C^+ à basse densité et C, O et CO à haute densité. Le refroidissement des grains implique la collision inélastique de molécules avec les grains. Le grain est alors chauffé et rayonne l'excédent d'énergie en infrarouge. Tant que le nuage n'est pas trop dense ($\rho < 10^{-13}$ g cm^{-3}), le rayonnement peut s'échapper et le nuage se refroidit.

2.2 La formation des étoiles

La plupart des étapes de la vie des étoiles sont aujourd'hui assez bien connues, mais la théorie de la naissance des étoiles ne fait pas encore l'unanimité. Cela s'explique d'une part par la complexité des processus physiques impliqués et d'autre part par le fait que les étoiles naissent profondément enfouies dans des nuages de poussière, les rendant invisibles dans le domaine optique. D'importants progrès observationnels ont été réalisés ces dernières années dans les domaines infrarouge et millimétrique, faisant progresser nos connaissances. Nous savons aujourd'hui quels processus physiques sont impliqués dans la formation stellaire : l'hydrodynamique de la matière en effondrement gravitationnel, le champ magnétique, la chimie moléculaire, le transfert radiatif, la physique des grains de poussière, les ondes de chocs, etc. Il reste à savoir comment les assembler dans une théorie de formation stellaire efficace. Dans cette partie, nous verrons quelles sont les conditions requises pour que la formation stellaire ait lieu. Les grandes lignes de la formation des étoiles de faible masse seront ensuite présentées.

2.2.1 Les conditions initiales de la formation stellaire

La naissance d'une étoile commence avec l'effondrement d'un cœur de gaz et de poussière. Nous allons voir dans un premier temps comment estimer de façon théorique, avec différents degrés de raffinement, la masse minimale que doit avoir un cœur pour s'effondrer. Dans un second temps, nous verrons quels sont les facteurs qui peuvent jouer un rôle dans la formation des étoiles.

La masse de Jeans

La façon la plus simple d'aborder le problème est de considérer un nuage de densité homogène, sans structure. Deux forces opposées sont présentes au sein de ce nuage : la force de gravitation qui tend à contracter le nuage et la pression thermique, qui tend à le dissiper. Sir James Jeans a défini en 1902 la masse minimale que doit avoir une portion de ce nuage à la température T et à la densité ρ pour que l'effondrement commence : la valeur absolue de l'énergie gravitationnelle doit être supérieure à la somme des énergies thermique, rotationnelle,

turbulente et magnétique [P. H. Bodenheimer, 2011] :

$$|\mathrm{E_{grav}}| > \mathrm{E_{th}} + \mathrm{E_{rot}} + \mathrm{E_{turb}} + \mathrm{E_{mag}} \tag{2.2}$$

Dans son calcul original, Jeans n'a considéré que les énergies thermique et gravitationnelle. Pour un nuage sphérique de densité uniforme, l'énergie gravitationnelle s'exprime comme :

$$\mathrm{E_{grav}} = -\frac{3}{5}\frac{\mathrm{GM^2}}{\mathrm{R}} \tag{2.3}$$

L'énergie totale pour un gaz parfait isotherme à la température T vaut :

$$\mathrm{E_{th}} = \frac{3}{2}\frac{\mathrm{k_B TM}}{\mu \mathrm{m_u}} \tag{2.4}$$

avec $\mathrm{k_B}$ la constante de Boltzmann [2], $\mathrm{m_u}$ l'unité de masse atomique et μ le poids moléculaire moyen en unité de masse atomique. Le rayon de Jeans correspond alors au rayon pour lequel la valeur absolue de l'énergie gravitationnelle est égale à l'énergie thermique :

$$\mathrm{R_J} = \frac{2}{5}\frac{\mathrm{GM}}{\mathrm{k_B T}}\mu \mathrm{m_u} \tag{2.5}$$

Pour un nuage de masse et de température données, son rayon doit être plus petit que $\mathrm{R_J}$ pour s'effondrer. Il est alors possible de définir la masse de Jeans comme la masse à partir de laquelle le nuage devient instable, en introduisant la densité $\rho = 3\mathrm{M}/4\pi\mathrm{R}^3$:

$$\mathrm{M_J} = \left(\frac{3}{4\pi\rho}\right)^{1/2}\left(\frac{5\mathrm{k_B T}}{2\mathrm{G}\mu\mathrm{m_u}}\right)^{3/2} \tag{2.6}$$

Cette relation indique qu'une température plus basse favorise l'effondrement gravitationnel. La température observée dans les *clumps* est effectivement très basse, autour de 10 K. On peut également noter que la masse de Jeans varie comme $\rho^{-1/2}$, ce qui signifie qu'à mesure que le nuage se contracte, ρ augmente et donc $\mathrm{M_J}$ diminue. Le nuage va alors se diviser en fragments, qui vont à leur tour se diviser, etc. Il y a donc toute une hiérarchie d'effondrements, depuis les grandes masses vers les petites. D'autre part, les observations montrent qu'il y a environ équipartition entre énergie gravitationnelle, magnétique et turbulente. La turbulence et le champ magnétique jouent donc un rôle dans la formation stellaire.

La masse Viriel

Une fois que l'équilibre par rapport à la gravité a été discuté, on peut étudier comment l'instabilité gravitationnelle se développe à l'aide du théorème du Viriel, proposé par Rudolf Clausius en 1870. L'équation de Jeans décrit les conditions locales nécessaires à un effondre-

2. $\mathrm{k_B}$ = 1,3806488 $\times$ 10^{-23} J $\mathrm{K^{-1}}$ = 1,3806488 $\times$ 10^{-16} erg $\mathrm{K^{-1}}$

ment, tandis que le théorème du Viriel donne des conditions sur l'équilibre global d'un système auto-gravitant. Ce théorème relie l'énergie cinétique $\mathrm{E_c}$ et potentielle $\mathrm{E_p}$ de l'ensemble des particules constituant le nuage, en interaction gravitationnelle les unes avec les autres. C'est une conséquence simple du principe fondamental de la dynamique. Dans le cas particulier d'un nuage de gaz parfait, isolé, sphérique et en équilibre, ce théorème s'écrit :

$$\langle \mathrm{E_c} \rangle = -\frac{1}{2} \langle \mathrm{E_p} \rangle \tag{2.7}$$

La moitié de l'énergie potentielle gravitationnelle est transformée en énergie cinétique des particules, et en l'absence de réactions nucléaires, l'autre moitié est rayonnée par l'objet. En supposant que le nuage est une sphère de densité uniforme et de masse M, on peut alors en déduire la masse Viriel :

$$\mathrm{M_{vir}} = \frac{5\sigma_\mathrm{x}^2 \mathrm{R}}{\mathrm{G}} \tag{2.8}$$

où σ_x est la dispersion de vitesse selon la dimension x, reliée à la dispersion de vitesse tridimensionnelle par $\sigma^2 = \sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2$ (on considère ici que la dispersion de vitesse est isotrope), R le rayon du nuage et G la constante gravitationnelle [3]. Un nuage ayant une masse égale à $\mathrm{M_{vir}}$ est en équilibre viriel mais pas nécessairement à l'équilibre hydrostatique, à cause de l'hypothèse de densité uniforme. Si, par contre, sa masse est supérieure à $\mathrm{M_{vir}}$, le nuage n'est pas à l'équilibre mais en effondrement.

La sphère de Bonnor-Ebert

Pour affiner encore l'estimation de la masse nécessaire à l'effondrement, on peut maintenant ajouter une pression externe à notre objet, qui prend alors le nom de sphère de Bonnor-Ebert. Cette sphère est définie de façon théorique comme une structure isotherme en équilibre dans laquelle la gravité et la pression extérieure sont équilibrées par un gradient de pression interne. Il est alors possible de définir une masse critique $\mathrm{M_{crit}}$ au delà de laquelle le cœur s'effondre (Bonnor [1956] et Ebert [1955]) :

$$\mathrm{M_{crit}} = 1,18 \, \frac{\mathrm{c_s^4}}{\mathrm{P_{crit}^{1/2}\, G^{3/2}}} = 1,82 \, \left(\frac{\mathrm{n}}{10^4 \ \mathrm{cm^{-3}}} \right)^{-1/2} \left(\frac{\mathrm{T}}{10 \ \mathrm{K}} \right)^{3/2} \mathrm{M_\odot} \tag{2.9}$$

avec n la densité moyenne de particules, $\mathrm{c_s}$ la vitesse du son (voir équ. 2.10) dans le milieu et $\mathrm{P_{crit}}$ la pression extérieure critique (voir P. H. Bodenheimer [2011] pour plus de détails). Les valeurs données dans la partie droite de l'équation correspondent aux valeurs typiques observées dans les cœurs. Dans ces conditions, un cœur de plus de 1,82 $\mathrm{M_\odot}$ est instable et s'effondre. Le cas limite pour un rayon tendant vers l'infini est appelé sphère singulière isotherme. Elle possède une densité centrale infinie, un profil de densité de la forme $\rho \propto \mathrm{r^{-2}}$ et est en équilibre instable.

3. G = (6,67384 $\pm$ 0,00080)$\times$ 10^{-11} $\mathrm{m^3\ kg^{-1}\ s^{-2}}$

La turbulence et la rotation

Les mouvements turbulents sont fondamentaux dans les nuages moléculaires. La turbulence est probablement générée par des mouvements à très grande échelle, puis se transmet à des échelles de plus en plus petites dans ce que l'on appelle une cascade turbulente, jusqu'à atteindre une échelle suffisamment petite à laquelle la turbulence se dissipe sous forme de chaleur. L'origine exacte de la turbulence est incertaine. Différentes théories proposent les causes suivantes : les collisions de flots de gaz interstellaire, les instabilités magnéto-rotationnelles dans les disques galactiques, les instabilités générées après le passage d'ondes spirales dans la galaxie ou encore l'effet des supernovae. La turbulence observée dans les nuages moléculaires est supersonique, c'est-à-dire que sa vitesse est supérieure à la vitesse du son dans le milieu, c_s :

$$c_s = (k_B T/\mu m_u)^{1/2} \tag{2.10}$$

On peut définir de la même façon que pour la masse de Jeans thermique une masse de Jeans turbulente en ne conservant que l'énergie turbulente dans l'équation 2.2 :

$$M_{turb} = \frac{5\sigma_x^2 R}{2G} \tag{2.11}$$

Dans le cas des cœurs de faible masse, les effets thermiques dominent, tandis que la turbulence peut être importante pour les cœurs de masse élevée. Des chocs générés par la turbulence peuvent causer l'effondrement de certains cœurs. D'autre part, les nuages moléculaires et les cœurs sont le plus souvent en rotation, comme le montre l'observation de gradients de vitesse, avec des vitesses angulaires de l'ordre de 10^{-13}-10^{-14} rad s^{-1} pour les cœurs. Cependant, la rotation ne semble pas être assez importante pour contribuer de façon significative au soutien des nuages face à l'effondrement gravitationnel [P. H. Bodenheimer, 2011].

Le champ magnétique

Le rapport critique masse sur flux magnétique [4] Φ permet d'évaluer l'importance du champ magnétique. Il peut être défini comme [P. H. Bodenheimer, 2011] :

$$\left(\frac{M}{\Phi}\right)_{crit} = \frac{0,17}{\sqrt{G}} \tag{2.12}$$

Si le rapport $\left(\frac{M}{\Phi}\right)$ / $\left(\frac{M}{\Phi}\right)_{crit}$ est plus grand que 1, le nuage est dit supercritique et peut se contracter, tandis qu'un rapport inférieur à 1 indique que le champ magnétique empêche l'effondrement, le nuage est alors dit sous-critique. Les cœurs de faible masse sont supposés être sous-critiques. Dans ce cas, les particules ionisées sont soutenues par les champs magnétiques

4. Si l'on définit une boucle fermée traversée par un champ magnétique B, le flux magnétique est défini comme $\Phi = \int_s \vec{B}.\vec{n}\,dA$ où s est la surface définie par le fil et $\vec{n}$ la normale à la surface.

et transmettent ce support aux particules neutres via les collisions. Si les collisions ne sont plus suffisamment fréquentes, la matière neutre va diffuser lentement à travers la matière ionisée, c'est la diffusion ambipolaire. Le nuage va alors perdre de son support, ce qui peut déclencher l'effondrement si aucun autre support n'est présent. Toutefois, de nombreux cœurs observés sont supercritiques. Dans ce cas, la diffusion ambipolaire se produit également, mais ne contrôle pas l'effondrement du cœur.

Les phénomènes de rétroaction

Des événements externes peuvent aider ou empêcher la formation stellaire. Des cœurs avec des masses inférieures à la masse de Jeans peuvent être comprimés jusqu'à l'effondrement par une onde de choc générée par une supernova ou une collision entre nuages. Les fusions entre galaxies et le passage des bras spiraux peuvent aussi induire de telles compressions. Les collisions entre nuages, généralement supersoniques, peuvent également comprimer le milieu interstellaire et générer de la formation stellaire.

Pour qu'un choc puisse effectivement générer l'effondrement de cœurs, il faut que le temps d'effondrement gravitationnel (voir partie 2.2.2) soit inférieur au temps de destruction du nuage par les instabilités créées par le choc. Les simulations numériques montrent que le temps de destruction vaut [Nittmann et al., 1982] :

$$t_{dest} \approx \frac{3R}{v_s(\rho_0/\rho_c)^{1/2}} \tag{2.13}$$

où ρ_c est la densité initiale du nuage, R son rayon et ρ_0 la densité à l'extérieur du nuage. v_s est la vitesse de propagation du choc à l'extérieur du nuage. Ce temps de destruction correspond à environ 3 fois le temps de propagation du choc à travers le nuage, de l'ordre de 10^5 ans.

A plus petite échelle, les régions HII [5], c'est-à-dire des régions où l'hydrogène est ionisé par des étoiles massives, de type B3 ou plus, sont également capables d'aider à la formation d'étoiles. Ces régions s'étendent à des vitesses supersoniques. Une coquille de gaz et de poussière comprimés se forme alors, dans laquelle des étoiles peuvent se former (figure 2.2, partie droite). Lorsqu'elles interagissent avec un nuage préexistant, les régions HII façonnent les nuages moléculaires, formant des globules cométaires, avec une tête dense contenant les étoiles nouvellement formées, une queue cométaire pointant à l'opposé de l'étoile ionisante [Schneider et al., 2012] et des piliers, comme le montre la partie gauche de la figure 2.2. Ces structures peuvent fournir des conditions favorables à la formation stellaire. Les étoiles déjà nées, en particulier les étoiles massives, influent donc sur les futures générations d'étoiles.

Toutefois, cette influence n'est pas seulement positive. Les régions HII, en évacuant le gaz de certaines régions, peuvent aussi diminuer le taux de formation stellaire. De façon générale, l'efficacité de formation stellaire est étonnamment basse. Seuls quelques pourcents du gaz disponible dans les nuages moléculaires forment des étoiles [P. H. Bodenheimer, 2011]. La rétro-

5. HI est la notation utilisée pour l'hydrogène atomique, HII signifie hydrogène ionisé.

action exercée par les étoiles pourrait être l'un des facteurs clés expliquant cette faible efficacité, avec la turbulence et le champ magnétique, facteurs qui peuvent retarder la formation stellaire (par exemple Federrath [2015]).

FIGURE 2.2 – **Gauche :** Les piliers de la création, dans la nébuleuse de l'Aigle, illustrent les structures formées par le rayonnement d'étoiles ionisantes (NASA, ESA, and the Hubble Heritage Team, STScI/AURA). **Droite :** Une région HII en expansion, appelée RCW79, vue par Spitzer, générant la naissance d'étoiles. (E. Churchwell, Univ. Wisconsin-Madison et al., JPL-Caltech, NASA).

2.2.2 Les échelles de temps

Les échelles de temps sont importantes pour évaluer quels sont les processus dominants lors des différentes phases de la formation stellaire.

Le **temps de chute libre** t_{ff} est le temps que mettrait à s'effondrer un nuage initialement sphérique, de température nulle et donc de pression nulle, avec une masse finie et une densité initiale constante ρ_0 [P. H. Bodenheimer, 2011] :

$$t_{ff} = \left(\frac{3\pi}{32G\rho_0}\right)^{1/2} \approx 10^5 \text{ans} \left(\frac{n_{H_2}}{10^5 \text{cm}^{-3}}\right)^{-1/2} \tag{2.14}$$

Le **temps de Kelvin-Helmholtz** t_{KH} donne le temps que met un objet de masse M en équilibre hydrostatique à se contracter de l'infini jusqu'à un rayon R, pour une luminosité moyenne interne L_{int} :

$$t_{KH} \approx \frac{GM^2}{RL_{int}} \tag{2.15}$$

Le temps de Kelvin-Helmholtz correspond aussi au temps mis par un objet pour atteindre l'équilibre thermique entre l'énergie libérée par la contraction gravitationnelle et l'énergie rayonnée, d'après le théorème du Viriel. Pour un cœur de 0,5 $M_\odot$ de rayon 3 $R_\odot$ et L_{int} = 1 $L_\odot$, ce temps vaut environ 3.10^6 ans.

Le **temps d'accrétion** vaut $t_{acc} = M_{coeur}/\dot{M}$, avec $\dot{M}$ le taux d'accrétion. Les valeurs standards de taux d'accrétion calculées par [Adams et al., 1987] sont de l'ordre de 2×10^{-6}-10^{-5} $M_\odot$ an^{-1}. L'observation d'un grand nombre d'objets stellaires jeunes donne une valeur plus élevée, autour de 3×10^{-5} $M_\odot$ an^{-1} (Bontemps et al. [1996], Henriksen et al. [1997]). Le temps d'accrétion vaut environ 2.10^5 ans pour un cœur de 0,5 $M_\odot$. Si $t_{acc} \ll t_{KH}$, ce qui est usuel, le cœur est comprimé de façon adiabatique, peu de rayonnement peut d'échapper et $L \approx L_{int}$.

Le **temps de diffusion radiative** t_{diff} représente le temps mis par les photons à être diffusés sur une distance Δr dans un milieu d'opacité moyenne κ_R :

$$t_{diff} \approx \frac{3\kappa_r \rho (\Delta r)^2}{c} \tag{2.16}$$

Pendant l'effondrement adiabatique, $t_{diff} > t_{ff}$. Le rayonnement n'a pas le temps de s'échapper. Dans la phase d'accrétion, par contre, comme $t_{diff} \ll t_{acc}$, l'essentiel du rayonnement peut être évacué.

2.2.3 Les grandes lignes de la formation

Contrairement aux étoiles de la séquence principale, les objets jeunes émettent un spectre étendu entre les rayons X et l'IR lointain. L'ensemble de la distribution spectrale d'énergie (SED, *Spectral Energy Distribution*) doit être considéré pour étudier la luminosité et l'état évolutif de ces objets. Historiquement, les objets jeunes ont alors été séparés en 3 catégories évolutives suivant leur SED : I, II et III. La catégorie des classes 0 a été ajoutée par la suite lorsque des sources, usuellement rangées parmi les classes I, ne possédant pas d'émission en dessous de 10 μm mais une forte émission submillimétrique ont été découvertes [André, 1995]. Pour quantifier la différence entre les classes I, II et III, l'indice spectral en infrarouge est utilisé. Il est défini comme : $\alpha_{IR} = -\mathrm{d}\log(\nu F_\nu)/\mathrm{d}\log\nu$ avec F_ν la densité de flux. Il correspond à la pente de la SED entre 2,2 μm et 10-25 μm. Les classes sont illustrées par la figure 2.3 et sont caractérisées ainsi :

- Classe 0 : La SED des classes 0 présente un maximum dans le submillimétrique et l'infrarouge lointain. La SED est alors dominée par l'émission de la poussière froide.
- Classe I : La SED est beaucoup plus large qu'un simple corps noir et $\alpha_{IR} \geqslant 0$. Le disque d'accrétion est optiquement épais.
- Classe II : La SED est également large et $-1,5 \leqslant \alpha_{IR} \leqslant 0$. L'objet devient observable dans le domaine visible.
- Classe III : La SED est pratiquement celle d'un corps noir à T = 4000 K et $\alpha_{IR} \leqslant -1,5$.

Ces catégories correspondent à différents états évolutifs, traversés par les étoiles avant l'amorce des réactions de fusion de l'hydrogène qui signe leur naissance. Il s'agit de la phase préstellaire, proto-stellaire et pré-séquence principale.

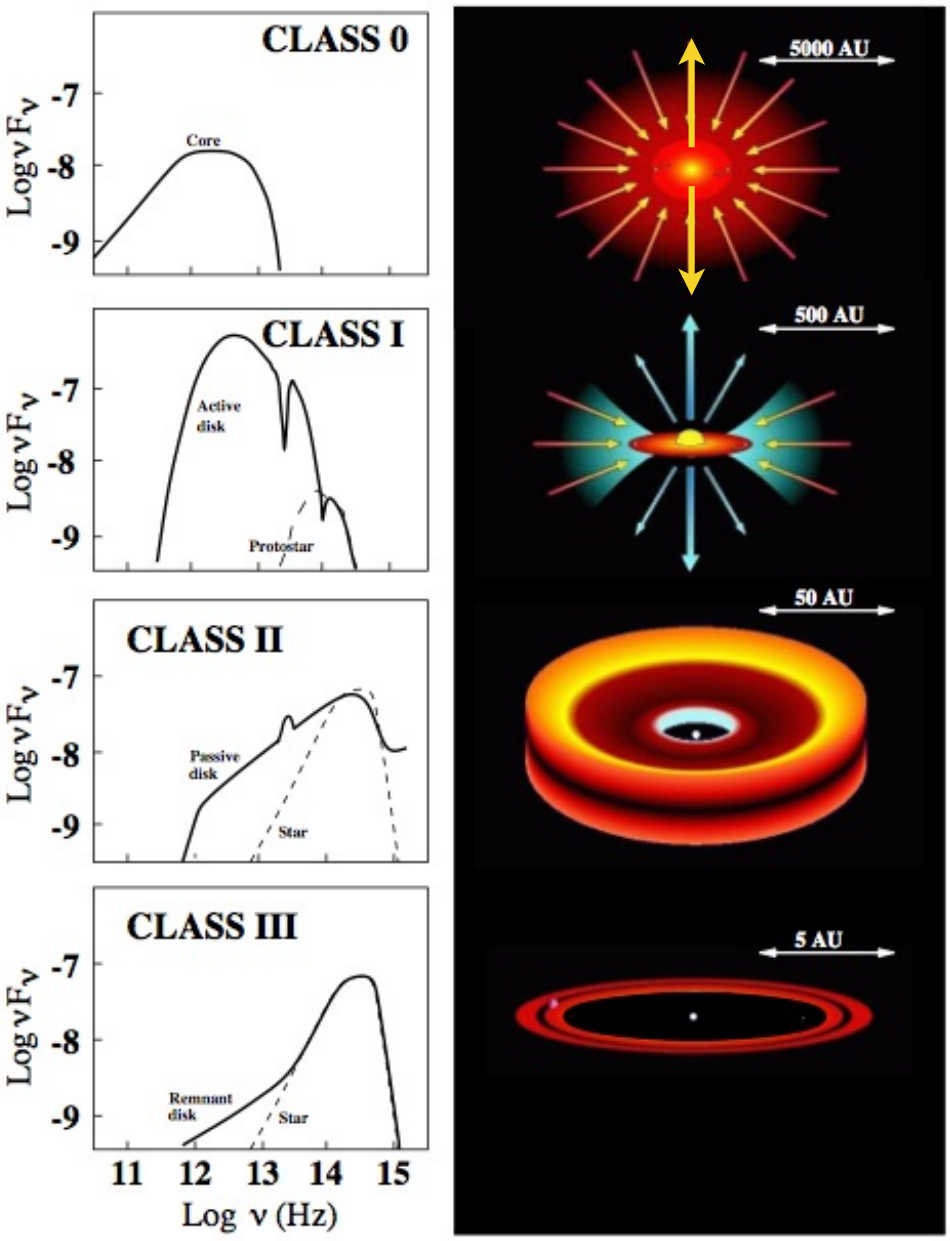


FIGURE 2.3 – Schématisation des différentes étapes de la naissance d'une étoile de faible masse (à droite) et la distribution spectrale d'énergie correspondante (à gauche). Adapté de Isella [2006].

La phase préstellaire

Tout commence par la contraction gravitationnelle de surdensités au sein des nuages moléculaires, lorsque le champ magnétique, la turbulence et la rotation deviennent localement insuffisantes pour contrebalancer la gravité, comme nous l'avons vu à la partie 2.2.1. Ces surdensités sont appelées cœurs préstellaires. Les cœurs ont une masse de une à quelques masses solaires dans un rayon de 0,05 à 0,1 parsec.

Les calculs de stabilité face à la gravitation nous ont montré que dans les conditions ordinaires observées dans les nuages moléculaires, les cœurs d'environ 1 $M_\odot$ sont susceptibles de

s'effondrer. Si l'on considère une densité initialement uniforme, au bout de 1,5 t_{ff}, la densité centrale a augmenté de plusieurs ordres de grandeur, mais la masse impliquée au centre est très petite, seulement 10^{-3} de la masse totale. Les régions externes qui contiennent l'essentiel de la masse, s'effondrent lentement en comparaison avec les régions centrales. Les observations montrent que le profil de densité est relativement plat initialement. L'effondrement fait petit à petit tendre la distribution de densité vers un profil en $\rho \propto r^{-2}$ dans les parties externes, comme présenté sur la figure 2.4. La vitesse d'effondrement typique est de l'ordre de 0,1-0,5 km s^{-1} pour une température de 10 K.

Il est aussi possible de considérer une sphère isotherme avec une distribution de densité dès le départ de la forme $\rho \propto r^{-2}$. Dans ce cas, l'état final est le même mais le déroulement de l'effondrement est différent. L'équilibre initial est instable et l'effondrement peut être déclenché par une petite perturbation. L'effondrement commence alors dans les parties centrales et se propage vers l'extérieur (*inside-out collapse*). Lors de cet effondrement, l'énergie gravitationnelle est convertie en énergie thermique, augmentant la pression interne et chauffant le cœur. Cette énergie est évacuée sous forme de rayonnement, ce qui diminue de nouveau la pression et permet à l'effondrement gravitationnel de se poursuivre. L'effondrement est alors dit isotherme et le cœur reste à une température d'environ 10 K.

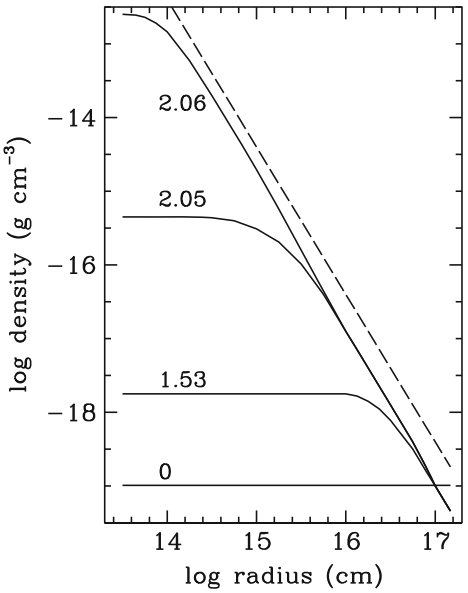


FIGURE 2.4 – Courbes de la densité en fonction du rayon pour différents temps, exprimés en unités de temps de chute libre, durant l'effondrement d'une sphère isotherme en partant d'une densité uniforme (la courbe la plus basse). La courbe en pointillés indique un profil en r^{-2}. (Courbe tirée de P. H. Bodenheimer [2011], d'après Larson [1969])

A mesure que l'effondrement se poursuit, la densité centrale dépasse les 3.10^{10} cm^{-3} [Larson, 1969] et les régions centrales deviennent alors optiquement épaisses. Le rayonnement ne peut plus s'échapper librement. Le gaz central est chauffé et l'approximation isotherme ne tient plus. L'effondrement devient adiabatique. Alors que la température augmente, la pression finit

par contrebalancer la gravité et l'effondrement ralentit. Une petite partie de la masse centrale ($\sim$ 0,01 $M_\odot$) approche de l'équilibre hydrostatique. Cette région est appelée premier cœur de Larson. Sa température vaut au départ environ 200 K et sa densité est de l'ordre de 5.10^{12} cm^{-2} [Bate, 1998]. A l'extérieur du cœur, la vitesse d'effondrement devient supersonique par rapport au cœur lentement comprimé et une onde de choc se forme à la frontière du cœur, à quelques ua du centre.

Le premier cœur continue de se comprimer, jusqu'à atteindre une température de 1600 K à laquelle H_2 commence à être dissocié. La dissociation de H_2 est largement endothermique et va alors consommer l'essentiel de l'énergie gravitationnelle, qui n'est alors presque plus disponible pour le chauffage. L'effondrement reprend alors et les vitesses se rapprochent de la chute libre. La densité augmente de nouveau de plusieurs ordres de grandeur, jusqu'à ce que H_2 soit quasiment intégralement dissocié au centre, à une température de 8000 K.

La pression augmente à nouveau au centre et l'équilibre s'établit une nouvelle fois lorsque la température atteint 20 000 K, formant le second cœur de Larson. Ce cœur stellaire a alors un rayon de quelques rayons solaires et contient environ 10^{-3} $M_\odot$. L'essentiel de la masse est encore située dans les régions externes isothermes à des densités 17 ordres de grandeur plus basses qu'au centre. La formation du cœur stellaire détermine le début de la phase protostellaire.

La phase protostellaire

La matière en effondrement à l'extérieur du cœur forme une fois encore un choc à sa frontière. Le cœur va alors amasser de la matière petit à petit, c'est le phénomène d'accrétion. La température du cœur est alors suffisamment élevée pour que l'hydrogène commence à être lentement ionisé. La principale source d'énergie de la protoétoile est alors l'énergie cinétique d'effondrement de la matière de l'enveloppe sur le cœur, c'est-à-dire de la matière contenue à l'extérieur du cœur stellaire. Juste après le choc, cette énergie est presque entièrement convertie en rayonnement. La contraction gravitationnelle du cœur est une seconde source d'énergie. La luminosité totale s'exprime alors comme :

$$\mathrm{L_{tot}} = \mathrm{L_{acc}} + \mathrm{L_{int}} \tag{2.17}$$

Dans le cas des protoétoiles de faible masse, la luminosité d'accrétion domine largement. Ce rayonnement est alors absorbé par l'enveloppe de gaz froid et de poussière puis réémis en infrarouge, rendant la protoétoile observable dans ce domaine de fréquence. Cette période d'accrétion dure quelques 10^5 ans pour les étoiles de faible masse.

Comme nous l'avons vu précédemment, la rotation ne contribue pas de façon importante au soutien des nuages face à la gravité. La rotation d'un nuage est mesurée par son moment cinétique J, qui vaut $\frac{2}{5}\mathrm{Mr^2\Omega}$ pour une sphère uniforme de masse M, de rayon r et de vitesse angulaire Ω. Le moment cinétique spécifique $\mathrm{j} = \mathrm{J/M}$ est aussi souvent utilisé. Si l'on considère seulement l'effet de la gravité, le moment cinétique d'un nuage en effondrement doit se conserver

car la force de gravité est une force centrale. Le rayon du nuage diminuant, la vitesse angulaire du nuage doit donc augmenter, de même qu'un patineur en rotation sur lui-même voit sa vitesse de rotation augmenter lorsqu'il rapproche ses bras de son corps. Mais un rapide calcul montre que même si la rotation initiale du nuage est faible, l'augmentation du moment cinétique est considérable et incompatible avec les observations. Pour évacuer le moment cinétique, un cœur peut se fragmenter en plusieurs morceaux, transformant une grande partie du moment cinétique en mouvement orbital. L'autre possibilité est de former un disque d'accrétion qui contiendra l'essentiel du moment cinétique. D'autre part, du moment cinétique peut être évacué lorsque la protoétoile forme des éjections de matière (aussi appelées flot bipolaire) le long de son axe de rotation (voir partie 2.2.4) ou bien par freinage magnétique.

A ce stade, la protoétoile est aussi appelée protoétoile de **classe 0**. Cette classe est définie de façon observationnelle par les critères suivants (Andre et al. [1993], Andre et al. [2000]) : preuve de l'existence de l'embryon protostellaire (émission compacte en centimétrique, éjections de matière ou source de chauffage interne) ; présence d'une enveloppe de gaz et de poussière observée en continuum millimétrique, piquée au centre mais étendue ; fraction importante de la luminosité bolométrique [6] émise dans le domaine submillimétrique ($L_{submm}/L_{bol} \gg 0,5\%$ où L_{submm} est mesurée à partir de 350 μm). Cette dernière condition revient à avoir une masse d'enveloppe supérieure à la masse de l'embryon stellaire. Les objets de classe 0 évoluent sur des échelles de temps de l'ordre de 10^4-10^5 ans.

Lorsque la masse de l'embryon stellaire dépasse celle de l'enveloppe, la protoétoile devient alors une protoétoile de **classe I**. Sa luminosité n'est plus dominée par l'enveloppe mais par l'objet lui-même. De tels objets sont détectables dans le proche infrarouge à 2 μm. On les appelle aussi sources infrarouges enfouies. L'enveloppe est alors plus ténue et le flot bipolaire moins puissant et moins collimaté.

La phase pré-séquence principale

Lorsque la protoétoile a consommé l'essentiel de son enveloppe et accrète seulement à partir du disque, elle est appelée protoétoile de **classe II**, ou encore étoile T Tauri classique. Ce sont des objets âgés de quelques millions d'années, encore entourées d'un disque responsable d'un excès d'émission infrarouge. Des protoplanètes peuvent être déjà présentes dans le disque. Les objets de **classe III** seraient eux plus âgés, jusqu'à 10^7 ans, et seulement entourés d'un disque de débris et éventuellement de planètes. L'excès infrarouge est alors très faible. Ces derniers objets sont également appelés étoiles T Tauri à raies faibles (*Weak-lines T Tauri stars*). Une protoétoile devient une étoile lorsqu'elle commence la fusion de l'hydrogène. Elle entre alors dans la séquence principale.

6. La luminosité bolométrique est définie comme $L_{bol} = 4\pi D^2 \int F_\nu d\nu$ avec F_ν la densité de flux et D la distance à la source.

2.2.4 Structure d'une protoétoile

Une protoétoile de classe 0, comme celle étudiée pendant cette thèse, peut être schématisée ainsi : un cœur stellaire, entouré d'un disque d'accrétion, générant un flot bipolaire et enfoui dans une enveloppe de gaz et de poussière (voir figure 2.5). Une grande partie de cette thèse a été consacrée à identifier l'origine spatiale des molécules dans la protoétoile. Voyons quelles sont les caractéristiques de ces différentes parties.

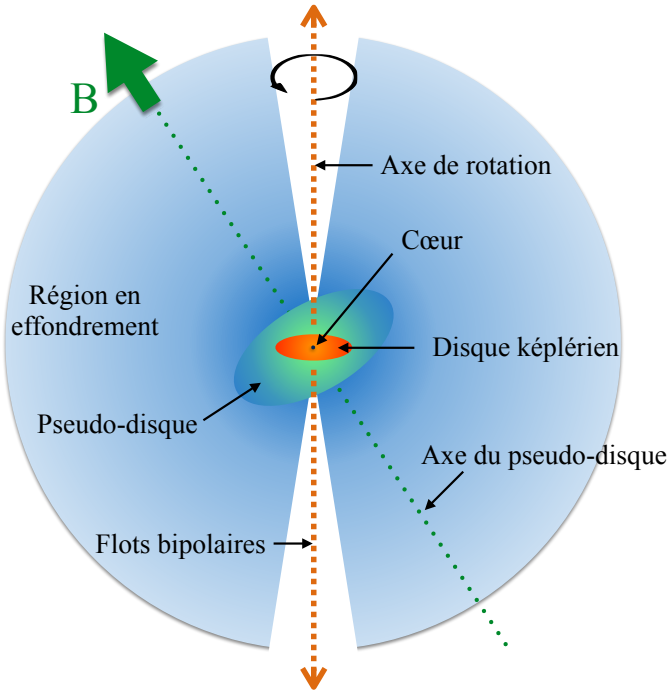


FIGURE 2.5 – Schéma d'une protoétoile possédant un disque képlérien, c'est-à-dire soutenu par la rotation, et un pseudo-disque. Typiquement, pour des protoétoiles de faible masse, les tailles de ces régions sont 10 000 ua pour la région d'effondrement, 2000 ua pour le pseudo-disque et quelques centaines d'ua pour le disque képlérien. Schéma largement inspiré de [Davidson et al., 2011].

Hot cores et hot corinos

Le cœur chaud (*hot core* par la suite) est une région chaude (∼100-200 K), compacte (< 0,1 pc) et dense (> 10^6 cm^{-3}) [Garay and Lizano, 1999] générée par la protoétoile. Ce chauffage permet la sublimation des manteaux de glace des grains de poussière, libérant de nombreuses molécules qui vont générer une chimie complexe, contenant de nombreuses molécules organiques complexes (plus de 6 atomes par convention [Herbst and van Dishoeck, 2009]) (voir partie 2.4). Les hot corinos sont supposés être les équivalents des hot cores pour les objets de faible masse.

Disques et pseudo-disques

Un disque se forme sous l'effet combiné de la gravité et de la rotation. Si l'on considère que

seule la gravité agit sur la matière de l'enveloppe, il est possible de définir un rayon centrifuge R_{ct} pour les particules situées dans le plan de l'équateur, pour lesquelles la force centrifuge équilibre la force de gravité (initialement formulé par Ulrich [1976]) :

$$R_{ct} = \frac{j^2}{GM} = \frac{\Omega^2 r^4}{GM} \tag{2.18}$$

avec j le moment cinétique spécifique, r le rayon initial auquel est situé la particule et Ω sa vitesse angulaire initiale uniforme. La plupart des modèles d'effondrement prédisent qu'un tel rayon centrifuge augmente avec le temps à mesure que la matière possédant un fort moment cinétique se rapproche du centre, mais la dépendance de R_{ct} au temps ou à la masse centrale varie d'un modèle à l'autre selon la distribution initiale de masse et de moment cinétique.

Considérons à présent une particule située à la surface de l'enveloppe, hors du plan de l'équateur. Son moment cinétique est plus faible que celui des particules du plan équatorial, mais s'il est tout de même suffisamment important, la particule ne tombe pas directement vers le cœur. Elle tourne autour du cœur tout en se rapprochant à la fois du cœur et du plan de l'équateur, qu'elle finit par atteindre. Là elle entre en collision avec les particules ayant une trajectoire similaire dans l'autre hémisphère. Un disque se forme alors. Le disque est de première importance pour la protoétoile car l'accrétion de matière se fait par son biais.

Les pseudo-disques sont des structures apparaissant lorsque le champ magnétique est suffisamment important pour jouer un rôle dans la dynamique des cœurs. Dans ce cas, le champ magnétique engendre la formation d'un cœur aplati de quelques milliers d'UA pour les étoiles de faible masse, avec un axe de symétrie parallèle à la direction du champ magnétique. Le pseudo-disque est la partie interne de la région en effondrement et est lui-même en effondrement. La figure 2.5 présente la structure d'une protoétoile possédant un disque képlérien et un pseudo-disque. Les axes des deux disques ne sont pas nécessairement identiques, même si le freinage exercé par le champ magnétique tend à les aligner [Davidson et al., 2011].

Flots bipolaires

Les sources de classe 0, I et II sont presque toutes associées à des flots bipolaires, qu'elles soient de très faible masse ou de masse élevée. Il s'agit de flots de gaz et de poussière, plus ou moins collimatés, provenant de la région des pôles de la protoétoile. La source d'énergie des flots est l'énergie potentielle gravitationnelle libérée par la matière en accrétion. Les flots emportent environ 10% de l'énergie, tandis que le reste est évacué sous forme de rayonnement [Reipurth and Bally, 2001].

Les flots sont importants pour la protoétoile dans la mesure où ils éjectent une partie de l'enveloppe de la protoétoile (jusqu'à 30% de la masse) et peuvent mettre fin, avec la pression de radiation de l'étoile, à l'effondrement de la matière vers le cœur. Ils déterminent l'efficacité de formation stellaire, contribuent à maintenir la turbulence dans le nuage moléculaire et permettent de retirer du moment cinétique du disque. La vitesse typique des flots bipolaires est de

20 km s^{-1} et ils peuvent s'étendre sur des régions de 0,1 à plusieurs pc [P. H. Bodenheimer, 2011]. Ils sont couramment observés grâce à l'émission du monoxyde de carbone CO ou du monoxyde de silicium SiO, qui sont tous deux libérés des manteaux de glaces par les chocs.

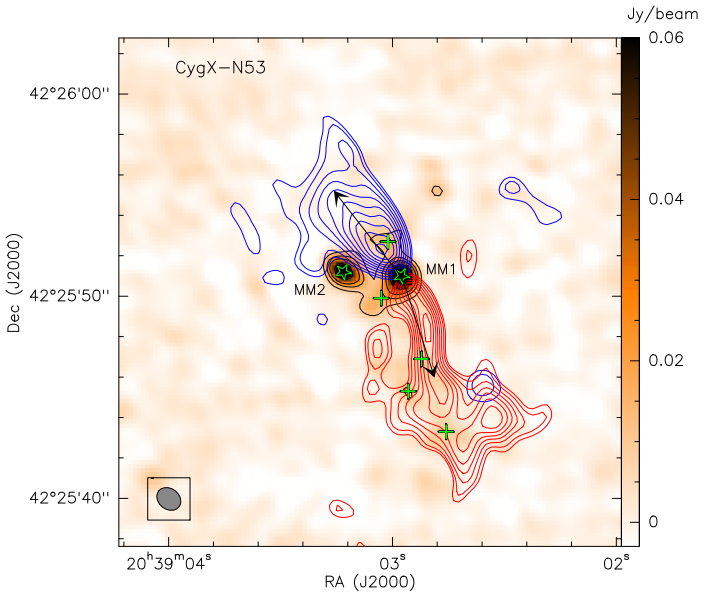


FIGURE 2.6 – Observation Plateau de Bure de CygX-N53 MM1 et MM2. L'émission du continuum est en dégradé de brun, tandis que l'émission du CO est en contours bleus pour la partie du spectre ayant des vitesses inférieures à la vitesse de la source (le flot vient vers nous) et en contours rouges pour la partie du spectre ayant des vitesses supérieures à la vitesse de la source (le flot s'éloigne de nous). Tiré de [Duarte-Cabral et al., 2013]. L'objet MM1 présente des flots bipolaires, alors que MM2 n'en possède pas. Les coordonnées sont la déclinaison (Dec) et l'ascension droite (RA) dans le système J2000, c'est-à-dire ayant pour référence le 1^{er} janvier 2000.

2.3 La formation des étoiles de masse élevée

De nombreux principes s'appliquent à la fois à la formation d'étoiles de faible masse et de masse élevée, de plus de quelques masses solaires, mais la formation stellaire massive présente un certain nombre de particularités. Le temps d'accrétion de l'enveloppe est par exemple plus long que le temps de contraction gravitationnelle, de telle sorte que le cœur peut atteindre la séquence principale tout en continuant d'accréter de la matière. La pression de rayonnement peut également surpasser la gravité.

La formation d'étoiles massives nécessite que les cœurs aient une densité de surface Σ plus élevée que pour les étoiles de faible masse. Dans les conditions typiques observées dans les cœurs, Σ est de l'ordre de 10^{-2} g cm^{-2} dans les cœurs de faible masse et de l'ordre de 10^{-1}-1 g cm^{-2} dans les cœurs de masse élevée. De telles conditions existent dans certaines régions des nuages moléculaires appelées **nuages sombres en infrarouge** (IRDCs, *Infrared dark clouds*).

Ces régions sont suffisamment denses pour avoir plusieurs magnitudes d'extinction [7] dans l'infrarouge, autour de 10 μm [P. H. Bodenheimer, 2011]. Au sein de ces IRDCs, les cœurs que l'on pense être à l'origine des étoiles massives, appelés cœurs denses massifs (MDCs, *massive dense cores*), ont les caractéristiques typiques suivantes : une masse de quelques centaines à quelques milliers de $M_\odot$, une densité moyenne de 10^6 cm^{-3}, une taille entre 0,1 et 0,5 pc et une température autour de 20 K.

Lorsque ces cœurs évoluent et prennent le nom d'objets protostellaires de masse élevée (HMPOs, *high-mass protostellar objects*), leur température moyenne augmente légèrement, ainsi que la largeur des raies observées (quelques km s^{-1}). Ils montrent alors une émission interne en IR moyen et accrètent activement. Ces régions sont alors très souvent associées à des masers de l'eau, de formaldéhyde H_2CO, d'hydroxyle OH ou de méthanol CH_3OH. Ces deux derniers masers sont spécifiques à la formation d'étoiles massives. Les masers de l'eau peuvent être pompés de façon collisionnelle et pourraient tracer le gaz choqué par les éjections de matière [Elitzur et al., 1989], tandis que les autres peuvent être pompés de façon radiative, ayant pour origine probable une forte source IR lointain. Menten [1991] a suggéré de classer les masers du méthanol en deux classes. Les masers de classe I coïncident avec la position de la source et sont probablement pompés de façon collisionnelle, tandis que les masers de classe II sont décalés de 0,1 à 1 pc par rapport à la source et pourraient être générés par les chocs d'ejections de matière.

La présence d'éjections de matière dans les protoétoiles de masse élevée, comme dans celles de faible masse, suggère la présence de disque, bien que leur existence n'ait pas été encore parfaitement démontrée de façon observationnelle. Dans la plupart des cas, un gradient de vitesse a été détecté perpendiculairement à la direction de l'outflow (par exemple Fallscheer et al. [2009]), mais la structure en vitesse n'est généralement pas compatible avec un disque képlérien, c'est-à-dire soutenu par la rotation.

Une fois que le cœur a accrété suffisamment de matière, il commence à ioniser son environnement, tout en poursuivant l'accrétion. L'émission *free-free*, ou Bremsstrahlung thermique, est alors générée lors des collisions coulombiennes entre les électrons libres du plasma et les ions. Cette émission est observée aux longueurs d'onde centimétriques. La région HII est d'abord appelée hypercompacte lorsqu'elle ne concerne qu'une petite région (< 0,01 pc). Lorsque l'essentiel de l'accrétion se fait via le disque, augmentant le taux d'accrétion, le flux ionisant de la protoétoile augmente alors et la région HII est dite ultracompacte (< 0,1 pc), avec une densité d'électrons plus faible. Une protoétoile ou un amas de protoétoiles est capable de former une bulle de gaz ionisé de pression et de température élevée (typiquement 8000 K) dans le nuage moléculaire environnant, lui faisant perdre de la masse.

7. L'extinction A_λ est définie comme la diminution de luminosité due à l'absorption et à la diffusion des photons par la poussière. Si la source a un flux initial I_0 alors le flux reçu I s'écrit : $I(\lambda) = I_0(\lambda)10^{-A_\lambda/2,5}$ [Lequeux et al., 2003].

2.3.1 Les problèmes posés par la formation d'étoiles massives

Premièrement, nous avons vu l'expression de la masse de Jeans (cf équ. 2.6) qui indique la masse au delà de laquelle un cœur devient instable gravitationnellement et s'effondre. Cette masse est proportionnelle à $\rho^{-1/2}$ et à $T^{3/2}$. Pour une température typique observée dans les régions de formation stellaire de 15-20 K et des densités de l'ordre de 10^{-17} g cm^{-3}, la masse de Jeans vaut seulement quelques masses solaires. Pour parvenir à former des étoiles massives, il faut donc augmenter la masse de Jeans, au moins sur une courte période.

Deuxièmement, lorsque la protoétoile atteint une masse de 10-15 $M_\odot$, la pression de radiation générée par la protoétoile et exercée sur la poussière, qui transfère sa quantité de mouvement au gaz, est si forte qu'elle peut stopper l'effondrement (voir par exemple Yorke and Kruegel [1977]). Si l'on considère une géométrie sphérique, la valeur critique pour laquelle la pression de radiation équilibre la force de gravité peut s'exprimer comme :

$$L_\star/M_\star = 4\pi cG/\bar{\kappa} = 1600\ L_\odot/M_\odot \tag{2.19}$$

où $\bar{\kappa}$ est l'opacité moyenne sur l'ensemble des fréquences [P. H. Bodenheimer, 2011]. Dans les conditions typiques observées, les étoiles de plus de 15 $M_\odot$ atteignant la séquence principale sont capables de stopper leur accrétion. Pour être plus proche de la réalité, on peut considérer que l'accrétion ne se fait pas de façon sphérique mais par le biais de disques ou de toroïdes. L'accrétion peut alors durer plus longtemps car le disque ou le toroïde peut protéger le gaz en effondrement du rayonnement de l'étoile, permettant la formation théorique d'étoiles de $\sim$40 $M_\odot$ [Yorke and Sonnhalter, 2002]. Le problème persiste malgré tout, puisque des étoiles de plusieurs centaines de masses solaires sont observées. Crowther et al. [2010] ont par exemple mis en évidence 4 étoiles ayant des masses comprises entre 165 et 320 $M_\odot$, même si ces valeurs restent très débattues. Il faut donc envisager d'autres solutions pour expliquer ces observations.

2.3.2 Scénarios possibles

Deux approches sont possibles pour expliquer la formation des étoiles massives : adapter les scénarios existant pour la formation d'étoiles de faible masse, ou imaginer de nouveaux processus. Dans le premier cas, les modèles incluent une turbulence importante, d'autres considèrent l'effet de certaines instabilités ou encore des flots bipolaires.

L'effondrement monolithique [McKee and Tan, 2002, McKee and Tan, 2003]

Ce scénario est l'extension du scénario de formation d'étoiles de faible masse pour les étoiles massives. Dans ce cas, l'évolution du cœur est quasi-statique et suppose une turbulence supersonique à l'intérieur des cœurs, permettant de soutenir le cœur face à la gravité. Cette micro-turbulence augmente en effet la masse de Jeans effective et permet au cœur d'être stable et d'évoluer lentement vers un effondrement monolithique. Dans ce modèle, des taux d'accré-

tion jusqu'à 10^{-3} $M_\odot$ an^{-1} sont obtenus, permettant de passer outre la pression de radiation. Selon ce scénario, la distribution de masse initiale des cœurs doit être semblable à celle des étoiles, ce qui est largement en accord avec les observations. Cependant, il est prédit l'existence de cœurs massifs préstellaires, qui n'ont à ce jour pas été observés (par exemple Motte et al. [2007]). Enfin, la micro-turbulence à l'échelle des cœurs ne semble pas être suffisante et son origine est incertaine [Csengeri et al., 2011a].

Pour résoudre le problème de la rétroaction du fort rayonnement de la protoétoile, plusieurs effets pourraient intervenir. Des simulations 3D incluant rayonnement et hydrodynamique, menées par Krumholz et al. [2009], ont montré que la pression de radiation pourrait ne pas stopper l'accrétion. Ils ont considéré un nuage de gaz de 100 $M_\odot$ dans 0,1 pc avec un profil en densité en $r^{-1,5}$ et en rotation solide lente, comme les cœurs de faible masse. A trois dimensions, les instabilités gravitationnelles et de Rayleigh-Taylor deviennent importantes et pourraient canaliser le gaz vers la protoétoile via des disques non axisymétriques (plusieurs protoétoiles peuvent se former) et des filaments qui s'auto-écranteraient du rayonnement de l'étoile. Le rayonnement pourrait alors s'échapper par des bulles de gaz optiquement minces. Grâce à ces processus, des étoiles d'une quarantaine de $M_\odot$ pourraient se former.

Toutefois, les simulations de Krumholz et al. [2009] ne prennent pas en compte l'influence des flots bipolaires, qui est pourtant très grande. Les simulations de Kuiper et al. [2015] partent des mêmes conditions initiales mais incluent les flots. Ces derniers réduisent dans un premier temps le taux d'accrétion sur le disque et donc sur l'étoile. Mais plus tard dans l'évolution, les cavités formées par les flots pourraient renforcer l'effet *flashlight*, exploré en détail par Yorke and Sonnhalter [2002]. Cet effet est dû à la forte opacité du disque d'accrétion massif, qui réduit fortement la pression de radiation dans le plan du disque et permet à l'accrétion de continuer. Les cavités creusées par les flots, de faible densité et de faible opacité, accentueraient cette anisotropie. Cela permettrait au gaz du disque d'être accrété plus longtemps sur l'étoile, augmentant finalement la masse de l'étoile.

Une deuxième famille de scénarios invoque l'existence de processus spécifiques aux étoiles de masse élevée, dans un cadre beaucoup plus dynamique.

La coalescence

Les étoiles massives sont presque toujours observées au sein d'amas. Les quelques étoiles massives isolées observées pourraient s'être échappées de leur amas. Une solution simple pour former des étoiles massives est alors la coalescence d'étoiles de faible masse au sein d'un amas. Bonnell et al. [1998] ont proposé un modèle dans lequel les collisions entre étoiles ou protoétoiles deviennent importantes dans les parties les plus denses de l'amas. Or, ce scénario requiert des densités stellaires importantes, de l'ordre de 10^6 étoiles pc^{-3}, deux ordres de grandeur plus élevées que les plus grandes densités observées. Ce processus ne pourrait donc intervenir que

dans les amas très riches.

L'accrétion compétitive [Bonnell et al., 1997, 2001, Bonnell and Bate, 2006]

Dans ce scénario, la formation stellaire est contrôlée par l'effondrement global de toute une région de plusieurs milliers de $M_\odot$. Des fragments individuels de faible masse se forment puis entrent en compétition pour l'accrétion du gaz restant. Les étoiles massives se formeraient alors au centre de l'amas, là où le puits de potentiel gravitationnel est le plus profond, tandis que les étoiles des parties externes resteraient de faible masse. Les étoiles massives sont en effet observées le plus souvent dans des amas, et plus particulièrement au centre des amas, même s'il n'est pas sûr que leur formation ait lieu à cet endroit. Ce scénario est capable de reproduire la fonction de masse initiale des étoiles (IMF, *initial mass function*), explique la répartition des étoiles dans les amas et les propriétés binaires des étoiles de faible et de forte masse [Bonnell and Bate, 2006].

La convergence de flots ou filaments

En restant compatible avec le scénario de l'accrétion compétitive, une nouvelle image de la formation stellaire se dessine depuis quelques années. Les nuages et les cœurs sont instables et évoluent rapidement. Le potentiel gravitationnel important du nuage, associé à la turbulence à grande échelle et aux mouvements dans la galaxie, engendre la formation de flots de matière à grande échelle et à basse vitesse (quelques km s^{-1}), qui convergent vers le centre du nuage. Les étoiles massives pourraient alors se former au sein de ces structures denses formées par la rencontre des flots. Les observations de Csengeri et al. [2011a] dans la région du Cygne ont montré que les MDCs ne sont en effet pas en équilibre et que leur dynamique est gouvernée par ces flots de matière. Dans un second temps, Csengeri et al. [2011b] ont mis en évidence des chocs basse vitesse tracés par l'émission de CH_3CN et associés à des **flots convergents à petite échelle** (inférieure au parsec).

Les observations du satellite *Herschel* ont montré que les structures filamentaires sont extrêmement courantes dans les nuages moléculaires et sont importantes dans les processus de formation stellaire. En étudiant la région Vela C, Hill et al. [2011] ont suggéré que des filaments massifs, appelés *ridges*, instables gravitationnellement, pourraient être les sites préférentiels de la formation stellaire massive (voir aussi Nguyen Luong et al. [2011]). De plus, dans la nébuleuse de la Rosette, l'intersection des filaments semble coïncider avec la formation d'amas [Schneider et al., 2012]. L'observation de la région la plus dense et massive du Cygne, le ridge ou filament DR21, qui héberge des protoétoiles massives [Bontemps et al., 2010], semble confirmer cette vision de filaments ou sous-filaments dans lesquels la matière serait transportée jusqu'au ridge [Hennemann et al., 2012]. Les figures 2.7 et 2.8 illustrent cette vision filamentaire des nuages moléculaires, engendrant la formation d'étoiles de faible masse dans les zones de surdensité des filaments et d'étoiles massives à l'intersection de filaments.

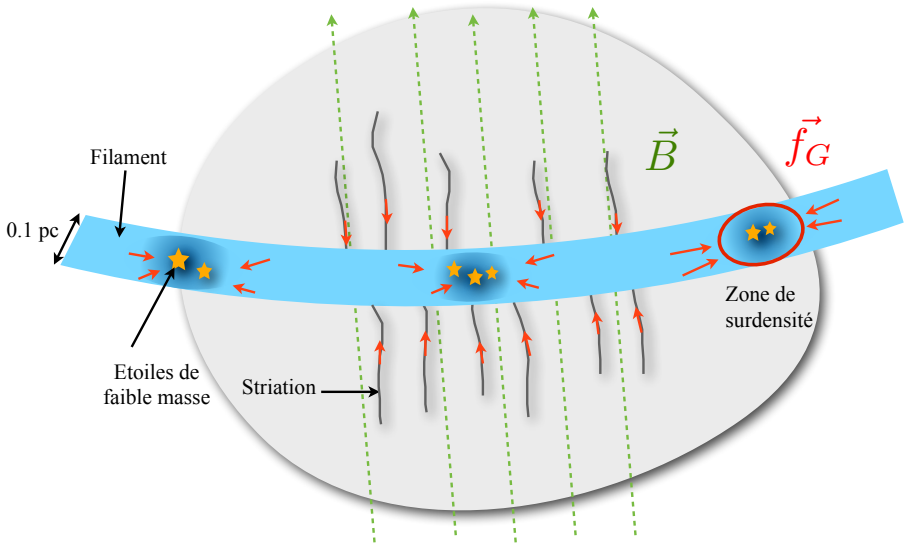


FIGURE 2.7 – Structure des nuages moléculaires en filaments, nourris par des striations, fins filaments peu denses et alignés sur le champ magnétique (Palmeirim et al. [2013], Louvet et al. [2014]). Les étoiles de faible masse et de masse intermédiaire se forment dans les régions de surdensité. Les flèches rouges indiquent le mouvement de la matière.

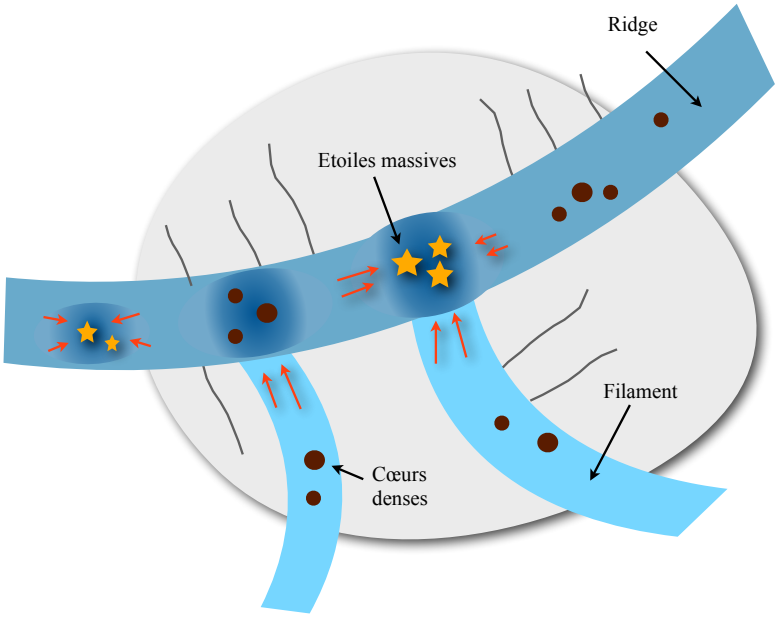


FIGURE 2.8 – Structure des nuages moléculaires en filaments, alimentant les ridges. La formation d'étoiles massives a alors lieu à l'intersection des filaments.

2.4 Astrochimie de la formation stellaire

L'astrochimie est un outil très puissant pour l'étude de la formation stellaire. Les conditions physiques régnant dans une protoétoile évoluent de façon importante au cours du temps et certaines espèces sont particulièrement sensibles à ces variations, nous fournissant des diagnostics

évolutifs. La chimie peut également nous permettre de sonder la structure spatiale de la protoétoile, les conditions physiques rencontrées dans l'enveloppe, au centre ou bien dans les régions de chocs générés par le flot bipolaire étant très différentes. D'autre part, de nombreuses molécules complexes, dont certaines prébiotiques, se forment dans les régions de formation stellaire. Enfin, la chimie peut avoir une influence sur l'évolution de la protoétoile, par le refroidissement via les raies moléculaires et l'évolution du taux d'ionisation, qui détermine la force du couplage avec le champ magnétique.

L'astrochimie de la formation stellaire implique des processus complexes, comme la déplétion des espèces. Durant la phase préstellaire, froide et dense, les molécules neutres comme le CO ou le CS sont adsorbées à la surface des grains. Les composants principaux des glaces sont alors H_2O, CO et CO_2. Le méthanol CH_3OH, le méthane CH_4, le formaldéhyde H_2CO et l'ammoniac NH_3 sont aussi observés en quantités variables [Garrod et al., 2008]. Parallèlement, l'adsorption de CO, qui est le principal destructeur de nombreuses molécules, aide à maintenir l'abondance de molécules comme N_2H^+ en phase gazeuse. Durant la phase protostellaire, lorsqu'un hot core ou un hot corino se développe, la sublimation des manteaux de glace des grains libère en phase gazeuse de nombreuses espèces et génère une chimie extrêmement riche. Une grande partie des molécules connues dans le milieu interstellaire a d'abord été détectée dans les hot cores.

2.4.1 Les codes astrochimiques

Les codes modélisant les réactions chimiques se sont énormément améliorés ces dernières années. Ils prennent maintenant en compte les réactions à la surface des grains (par exemple Charnley et al. [2001]), la deutération des espèces [Wakelam et al., 2014] et commencent à être couplés à des codes hydrodynamiques (par exemple Motoyama et al. [2015]), voire RMHD (*radiation-magnetohydrodynamic*, incluant le rayonnement et le champ magnétique) [Hincelin et al., 2013].

Durant cette thèse, nous avons utilisé le code de chimie Nautilus [Hersant et al., 2009]. Il est basé sur le code de Hasegawa and Herbst [1993] et est écrit en Fortran 90. Il prend en compte les réactions en phase gazeuse ainsi que sur les grains. Sa fonction est de résoudre les équations différentielles régissant la densité des espèces chimiques en fonction du temps, dans lesquelles n_i est la densité en phase gazeuse et $n_{s,i}$ est celle sur les grains [Hincelin, 2012] :

$$\frac{dn_i(t)}{dt} = \sum_l \sum_j [k_{lj} n_l(t) n_j(t)] - n_i(t) \sum_j [k_{ij} n_j(t)] - k_{acc,i} n_i(t) n_d + (k_{evap,i} + k_{crd,i}) n_{s,i}(t) \tag{2.20}$$

et

$$\frac{dn_{s,i}(t)}{dt} = \sum_l \sum_j [k_{lj} n_{s,l}(t) n_{s,j}(t)] - n_{s,i}(t) \sum_j [k_{ij} n_{s,j}(t)] + k_{acc,i} n_i(t) n_d - (k_{evap,i} + k_{crd,i}) n_{s,i}(t) \tag{2.21}$$

Les termes de droite de l'équation 2.20 représentent dans l'ordre : la formation de l'espèce i en phase gazeuse, la destruction en phase gazeuse, la perte par adsorption à la surface des grains et le gain par désorption de la surface. Les termes de l'équation 2.21 ont la même signification, la différence de signe pour les deux derniers termes venant du fait que le terme d'adsorption est devenu un gain et le terme de désorption une perte. k_{ij} est la constante de vitesse de la réaction entre les espèces i et j, $k_{acc,i}$ est le taux d'accrétion de l'espèce i sur la surface des grains tandis que $k_{evap,i}$ et $k_{crd,i}$ sont les taux de désorption thermique et non thermique (*cosmic ray induced*, induite par les rayons cosmiques) de l'espèce i.

Nautilus utilise un réseau chimique contenant 504 espèces (atomes, ions, radicaux et molécules) en phase gazeuse, 198 espèces sur les grains et 8625 réactions chimiques. En phase gazeuse, il s'agit des réactions bimoléculaires, des dissociations et des ionisations induites par les rayons cosmiques et les UV. Nautilus prend également en compte les interactions gaz-grains : l'adsorption, la désorption thermique et non thermique. Sur les grains, les réactions considérées sont les réactions par diffusion et les dissociations par les UV et les rayons cosmiques. Des améliorations sont régulièrement apportées, comme par exemple le mécanisme de Eley-Rideal, qui considère les réactions directes d'un atome ou d'une molécule venant de la phase gazeuse avec des espèces adsorbées sur les grains [Ruaud et al., 2015].

TABLE 2.1 – Abondances solaires des éléments utilisés dans les modélisations avec Nautilus [Hincelin et al., 2011]

Elément	Abondance	Elément	Abondance
He	0.09	N	6.2(-5)
C	1.7(-4)	O	1.4-3.3(-4)
S	8(-8)	Si	8(-9)
Fe	3(-9)	Na	2(-9)
Mg	7(-9)	Cl	1(-9)
P	2(-10)		

2.4.2 La chimie des différentes familles de molécules

Les molécules organiques complexes

Les molécules organiques complexes (COMs, *complex organic molecules*) comprennent par convention plus de 6 atomes [Herbst and van Dishoeck, 2009]. Ces molécules sont particulièrement intéressantes pour leur relation potentielle avec les origines de la vie sur Terre. Elles sont typiquement trouvées en abondance dans les hot cores et les hot corinos et peuvent être utilisées comme marqueurs de cette phase évolutive.

Les premières études considéraient que la plupart des COMs, comme par exemple le diméthyléther CH_3OCH_3, étaient formées dans le gaz chaud par des réactions ion-molécule impliquant entre autres le méthanol et le formaldéhyde puis par recombinaison électronique des ions

protonés (par exemple Charnley [1995]). Quelques années plus tard, l'efficacité de ces réactions de recombinaison a été sérieusement mise en doute [Geppert et al., 2006]. Pour cette raison, les réactions à la surface des grains pourraient bien être dominantes dans la formation de certaines COMs comme le formiate de méthyle CH_3OCHO (*methylformate*). Ces molécules complexes sont également observées dans les hot corinos, ce qui renforce l'idée de la production à la surface des grains. En effet, les échelles de temps de formation en phase gazeuse sont plus grandes que le temps de transit du gaz en effondrement dans ces sources. Garrod and Herbst [2006] ont montré que les radicaux [8] de surface OH, HCO, CH_3 et CH_3O peuvent produire le formiate de méthyle, le diméthyléther et l'acide formique HCOOH.

Garrod et al. [2008] ont ensuite largement étendu le réseau de réactions chimiques à la surface des grains. Un modèle physique à deux phases est utilisé, comprenant un effondrement suivi d'un chauffage par le hot core. La photodissociation des constituants des glaces par le champ UV produit par les rayons cosmiques, typiquement la suppression d'un atome d'hydrogène, produit des radicaux. Cette première génération de radicaux devient mobile et réactive lorsque la température des grains augmente durant la phase de chauffage par la protoétoile. Des molécules plus complexes sont alors formées. La photodissociation de ces nouvelles molécules génère alors une seconde génération de radicaux qui sont capables de former de nombreuses espèces qui n'avaient pas de voies de formation connues en phase gazeuse. Lorsque la température atteint 30 à 50 K, les radicaux légers deviennent mobiles en premier tandis que les radicaux de seconde génération, plus lourds, ne deviennent mobiles qu'à partir de 50 à 100 K. En conséquence, les espèces les plus complexes se forment d'autant plus que la source se réchauffe lentement. Les espèces sont ensuite relâchées graduellement en phase gazeuse, selon la température et l'énergie de liaison de chaque molécule. Le formaldéhyde, qui se forme tôt durant la phase de chauffage, est désorbé vers 40 K, augmentant l'abondance en phase gazeuse de molécules comme H_2O, CH_3OH et HCOOH. Le méthanol, quant à lui, est désorbé vers 110 K, ayant une énergie de liaison plus importante.

Ces dernières années, des COMs ont été détectées dans des enveloppes froides (Öberg et al. [2010] et Jaber et al. [2014]) et dans des cœurs préstellaires (par exemple Bacmann et al. [2012]). Les mécanismes détaillés précédemment ne fonctionnent qu'à des températures supérieures à 30 K, températures qui ne sont pas atteintes dans les cœurs préstellaires. Vasyunin and Herbst [2013] ont alors proposé un nouveau scénario de formation. Ils sont partis de l'hypothèse que les COMs dans les régions froides sont formées par des réactions ion-molécule et neutre-neutre en phase gazeuse à partir de précurseurs plus simples comme le formaldéhyde ou le méthanol. Ces précurseurs sont formés à la surface des grains, comme précédemment, mais sont ensuite éjectés en phase gazeuse par désorption réactive. L'efficacité d'une telle désorption étant mal connue, ils ont testé différentes valeurs et trouvé le meilleur accord pour 10%. Ce nouveau schéma permet de reproduire les abondances d'une partie des COMs. Un autre processus pourrait permettre de désorber des espèces. Il s'agit de désorptions provoquées par les

8. Un radical est une espèce qui possède un ou plusieurs électrons non appariés sur sa couche externe.

photons UV lointain, ces derniers étant produits par l'interaction entre les rayons cosmiques et les molécules de H_2. Ce processus mettrait en phase gazeuse une toute petite partie de l'eau et peut-être aussi de méthanol et d'éthylène C_2H_4. Ces molécules réagiraient alors en phase gazeuse pour produire certaines COMs comme l'acétaldéhyde CH_3CHO ou le cétène (*ketene*) H_2CCO [Vastel et al., 2014].

La chimie du carbone

De nombreuses molécules à chaîne carbonée ont été détectées dans le milieu interstellaire. Ce sont des molécules de la forme C_nH, C_nH_m, C_nN, C_nO et $HC_{2n+1}N$. Dans les cœurs froids sans étoile en contraction gravitationnelle, les molécules à chaîne carbonée comme CCS sont formées efficacement par hydrogénation de C et C^+, qui ont été produits lors de la phase diffuse, par photodissociation et photoionisation. Ces processus sont particulièrement lents [Tielens, 2013]. D'autre part, les atomes de carbone sont convertis très efficacement en CO au centre du cœur, en environ 10^6 ans dans les nuages sombres. L'essentiel du carbone est alors rapidement converti en CO. Cette molécule, la plus abondante après H_2, est particulièrement stable.

A mesure de l'évolution du cœur, la production de chaînes carbonées devient alors moins efficace. Elles sont de plus principalement détruites par des réactions avec He^+, H^+ et H_3^+. Pour cette raison, les chaînes carbonées seraient limitées aux parties externes du cœur où la photodissociation/ionisation continue de produire C et C^+ [Suzuki et al., 1992]. .

Toutefois, plus récemment, des chaînes carbonées ont été observées dans les régions chaudes autour de certaines protoétoiles comme L1527 [Sakai et al., 2008b]. Ces auteurs ont alors proposé un nouveau type de chimie pour produire ces molécules, appelée *warm carbon-chain chemistry* (WCCC), dans laquelle la température, supérieure à 30 K, est suffisante pour libérer CH_4 de la surface des grains. Ce dernier réagit alors avec C^+ pour produire des ions précurseurs comme $C_2H_3^+$ et $C_2H_2^+$ [Sakai et al., 2009], qui vont former les chaînes carbonées les plus petites par recombinaison dissociative. La raison pour laquelle certaines protoétoiles ont des chaînes carbonées abondantes et d'autres non n'est pas claire. Des durées différentes de la phase d'effondrement, laissant le temps ou non au carbone d'être converti en CO, pourrait être une explication [Sakai et al., 2008b].

La chimie de l'oxygène

La chimie de l'oxygène commence par des réactions d'échange de charge entre H^+ et O ou par la réaction entre H_3^+ et O, donnant H_2 et OH^+. Les ions formés réagissent alors avec H_2 pour former des ions plus complexes qui sont ensuite dissociés pour produire OH et H_2O. La figure 2.9 présente les réactions clés de la chimie de l'oxygène et du carbone.

La déplétion de l'oxygène sur les grains serait faible ($\sim 25\%$; Greenberg and Pirronello [1991]). L'essentiel de l'oxygène se trouve alors probablement en phase gazeuse sous la forme de CO, O_2, O, H_2O et OH [Poglitsch et al., 1996]. La question de savoir laquelle de ces molécules est le principal réservoir d'oxygène est encore débattue. Les modèles prédisent que les

réservoirs en phase gazeuse sont O_2 et CO. Pourtant, des observations montrent que O_2 est de l'ordre de 5×10^{-8} par rapport à H_2 dans le nuage ρOph [Larsson et al., 2007], bien plus faible que les abondances prédites. Considérer l'adsorption sur les grains n'est pas suffisante pour expliquer cette faible abondance.

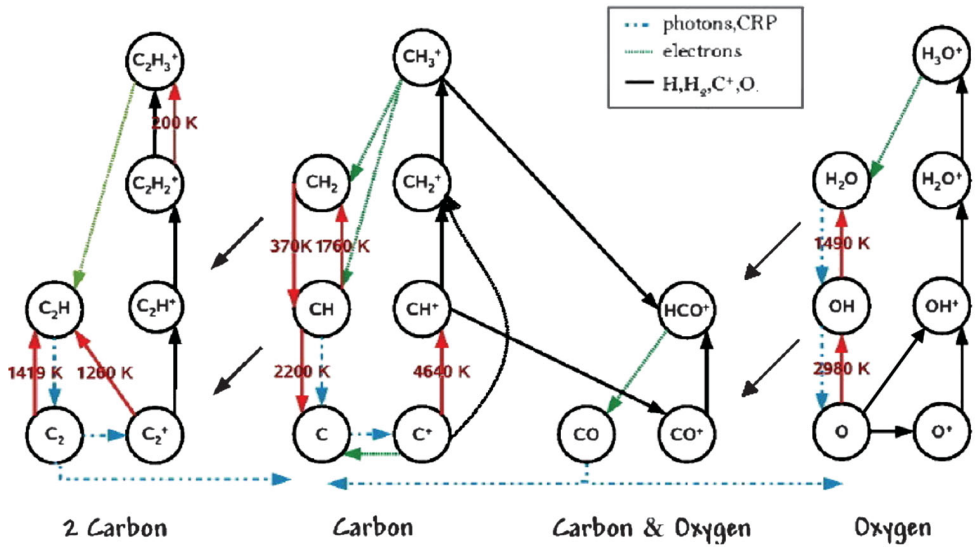


FIGURE 2.9 – Réactions clés de la chimie du carbone et de l'oxygène. Le code couleur indique les réactions avec H_2, C^+, H et H^+ (noir), les réactions impliquant des photons UV ou des rayons cosmiques (bleu), les recombinaisons électroniques (vert). Les barrières de réactions sont indiquées en rouge. Tiré de Godard et al. [2009].

La chimie de l'azote

Dans le milieu interstellaire, un réservoir important d'azote est supposé être N_2. Or, N_2 n'ayant pas de transition rotationnelle ou vibrationnelle observable, son abondance reste mal connue. Néanmois, Maret et al. [2006] ont pu montrer que seule une petite fraction de l'azote est moléculaire, l'essentiel étant sous forme atomique. Jenkins [2009] a montré que l'azote ne montre pas de déplétion plus importante lorsque la densité augmente.

La chimie de l'azote débute par la réaction entre N et CH pour former CN, ou avec OH pour former NO [Tielens, 2013]. Les produits de ces réactions réagissent alors avec N pour former N_2, qui est une molécule très stable. N_2 peut alors réagir avec H_3^+ pour former N_2H^+, qui est une espèce azotée particulièrement étudiée. La principale voie de destruction de N_2H^+ est la réaction $N_2H^+ + CO \rightarrow HCO^+ + N_2$. Une diminution de l'abondance de CO a alors pour conséquence directe une augmentation de l'abondance de N_2H^+. Les travaux de Vasyunina et al. [2012] ont porté sur l'abondance de N_2H^+ vers des IRDCs, en comparaison avec des cœurs sans étoiles de faible masse et des HMPOs. Dans certains de ces IRDCs, la température atteint 15-25 K, tandis que la température dans les HMPOs dépasse les 30 K. A 10 K, N_2 est partiellement gelé sur les grains. Une petite partie est en phase gazeuse et permet la formation de N_2H^+. Les

HMPOs, par contre, sont suffisamment chauds pour maintenir une abondance importante de N_2 en phase gazeuse, mais le CO, également présent en phase gazeuse, détruit alors N_2H^+. La meilleure température pour observer N_2H^+ abondant est 25 K, comme dans les IRDCs, de telle sorte que l'essentiel du CO soit encore sur les grains mais que N_2 soit en phase gazeuse.

Des molécules complexes azotées, comme CH_3CN (*methyl cyanide*) ou CH_3CH_2CN (*ethyl cyanide*), sont observées dans les hot cores et hot corinos [Fuente et al., 2005]. Les abondances mesurées sont incompatibles avec une formation en phase gazeuse, les échelles de temps pour les former étant supérieures au temps de transit du gaz dans les hot corinos (quelques centaines d'années). Caselli et al. [1993] ont alors suggéré que des espèces azotées saturées (riches en hydrogène), comme CH_3CH_2CN, pourrait se former à la surface des grains, au moins dans les hot corinos. Elles seraient ensuite relâchées en phase gazeuse puis réagiraient pour former les autres molécules azotées. La figure 2.10 présente les premières étapes de la chimie de l'azote en phase gazeuse.

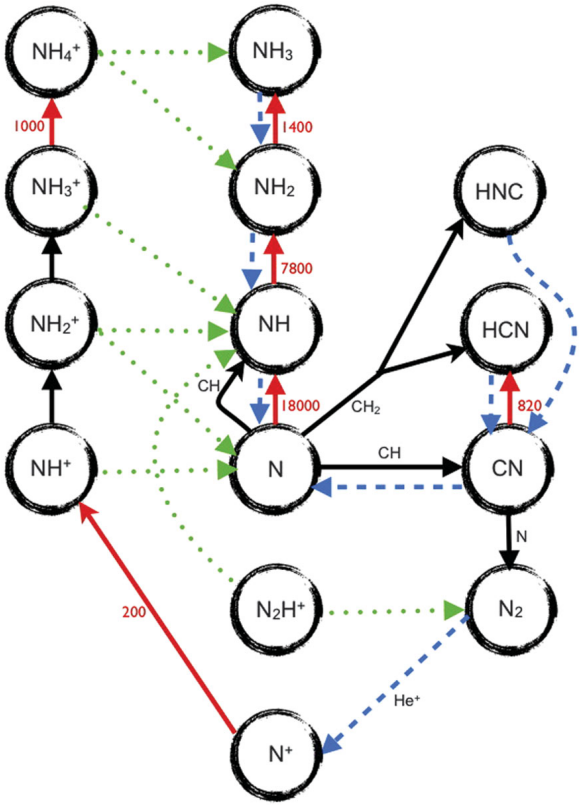


FIGURE 2.10 – Premières étapes chimiques de la chimie de l'azote en phase gazeuse. Le code couleur indique les réactions avec H_2, C^+, H et H^+ (noir), les réactions impliquant des photos UV ou des rayons cosmiques (bleu), les recombinaisons électroniques (vert). Les barrières de réactions sont indiquées en rouge. Tiré de Tielens [2013].

La chimie du soufre

Les molécules soufrées sont également particulièrement abondantes dans les hot cores et hot corinos. La chimie du soufre est pourtant encore relativement mal connue. Les expériences

de laboratoire visant à mesurer les taux de réactions impliquant des molécules soufrées sont en effet difficiles à effectuer. Les taux sont donc encore très incertains. Une autre difficulté est que, contrairement aux autres éléments, la déplétion des espèces soufrées ne semblent pas montrer de relation avec la densité du milieu. En effet, pour les autres éléments, plus la densité du milieu est importante, plus l'abondance des éléments diminue, ce qui est attribué à l'adsorption des molécules sur les grains. Plus récemment, Jenkins [2009] a suggéré que cette apparente déplétion pourrait être en réalité un biais observationnel, ce qui résoudrait le mystère du soufre interstellaire [Wakelam et al., 2011]. L'abondance atomique du soufre semble en effet être constante, autour de $1,5 \times 10^{-5}$. Or, utiliser cette valeur dans les modèles chimiques conduit à surestimer de plusieurs ordres de grandeur les abondances en phase gazeuse de SO, SO_2 et CS [Ruffle et al., 1999]. Pour cette raison, la quantité de soufre est habituellement réduite de deux ordres de grandeur pour parvenir à reproduire les abondances observées.

Une autre difficulté avec la chimie du soufre est qu'on ne connaît pas la forme prise par le soufre sur les grains. Van der Tak et al. [2003] proposent que OCS soit le principal réservoir de soufre sur les grains. Wakelam et al. [2004] proposent quant à eux que le soufre soit sous la forme de polymères ou d'agrégats qui se convertiraient rapidement en soufre atomique une fois en phase gazeuse. Ce soufre est alors transformé en SO puis en SO_2. Ces deux molécules sont en effet habituellement associées aux chocs générés par les flots bipolaires, capables d'arracher les manteaux de glaces des grains (*sputtering*).

La chimie du soufre, malgré ces incertitudes, est intéressante car elle évolue rapidement dans le gaz chaud. L'abondance des espèces soufrées augmente de façon importante avec la température. La chimie du soufre est pour cette raison souvent considérée comme une horloge chimique de la formation stellaire [Wakelam et al., 2004]. Herpin et al. [2009] ont utilisé les rapports entre OCS, H_2S, SO, SO_2 et CS dans les parties externes et froides pour estimer l'âge de cœurs denses massifs.

La chimie du deutérium

Dans certaines conditions, un (ou plusieurs) atome d'hydrogène au sein d'une molécule peut être remplacé par un atome de deutérium. Les observations ont montré que le rapport D/H est généralement bien supérieur au rapport cosmique [9], valant $1{,}5 \times 10^{-5}$ [Tielens, 2013]. Cette deutération augmentée reflète la stabilité légèrement plus élevée des espèces deutérées par rapport aux espèces hydrogénées [Tielens, 2013]. HD est le principal réservoir de deutérium dans les nuages moléculaires. L'une des principales réactions initiant la deutération est :

$$H_3^+ + HD \leftrightarrow H_2D^+ + H_2 + \Delta E \tag{2.22}$$

L'exothermicité de la réaction est de 232 K. Cette réaction a lieu de gauche à droite et est

9. L'abondance cosmique d'un élément est l'abondance moyenne de cet élément dans le milieu interstellaire, généralement mesurée par l'observation de raies en absorption vues sur un spectre d'étoiles de fond, et corrigée de la déplétion.

très rapide à basse température, augmentant le rapport H_2D^+/ H_3^+ bien au delà du rapport de référence. Les réactions qui sont responsables de la deutération des espèces en général sont de la forme :

$$XH^+ + HD \leftrightarrow XD^+ + H_2 + \Delta E \tag{2.23}$$

Les conditions de haute densité et de basse température favorisent cette deutération. Lorsque le CO et les autres espèces de la phase gazeuse sont déplétés sur les grains, le transfert de H et D ne fonctionne plus et, à la place, H_2D^+ réagit avec HD pour former HD_2^+ et même D_3^+. Ces espèces sont alors les cations dominants. La figure 2.11 présente les réactions en phase gazeuse menant à la deutération des espèces.

Si la température dépasse les 30 K, la deutération via H_2D^+ devient très inefficace [Herbst et al., 1987]. Or, des isotopologues deutérés du méthanol et du formaldéhyde ont été détectés dans des hot cores et hot corinos où la température dépasse les 100 K [Fuente et al., 2005]. Dans ces circonstances, la deutération a lieu à la surface des grains. Les atomes de deutérium et d'hydrogène réagissent avec les molécules complexes sur les grains et forment des isotopologues normaux et deutérés. Nagaoka et al. [2005] ont montré expérimentalement que la réaction clé pour la deutération sur les grains est la substitution H-D sur le méthanol. Les composants deutérés sont ensuite relâchés en phase gazeuse lorsque la température augmente.

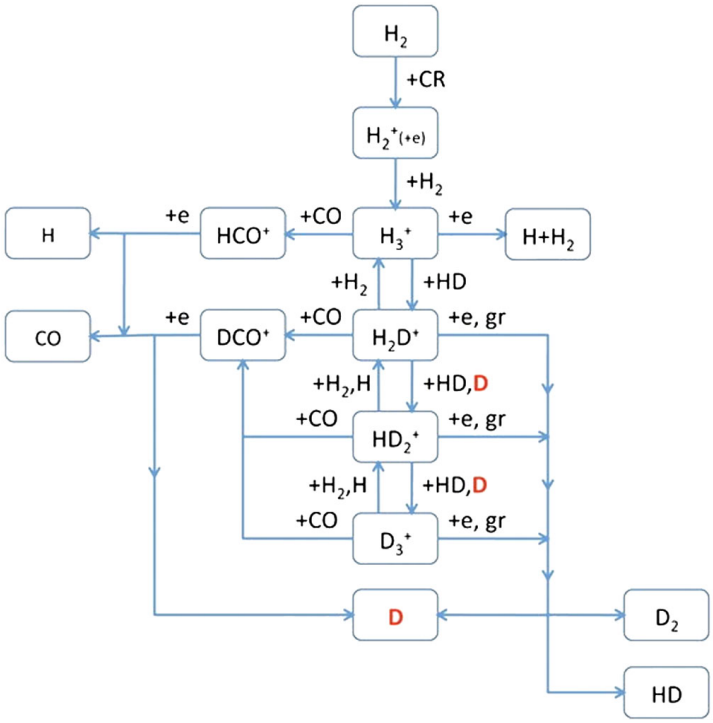


FIGURE 2.11 – Réactions en phase gazeuse impliquant H_3^+ menant à la deutération des molécules. Les rayons cosmiques ionisent H_2, formant H_2^+ qui réagit avec H_2 pour former de l'hydrogène moléculaire protoné. Tiré de Taquet et al. [2012].

CHAPITRE 3

OUTILS OBSERVATIONNELS

3.1 S'affranchir de l'atmosphère

L'atmosphère terrestre absorbe et diffuse une large partie du rayonnement nous parvenant, protégeant la vie des rayonnements dangereux comme les UV. La figure 3.1 représente l'opacité de l'atmosphère en pourcentage en fonction de la longueur d'onde. Une opacité de 100% signifie que le rayonnement est totalement absorbé. L'absorption du rayonnement, dominant dans l'infrarouge, est due aux molécules de l'atmosphère : principalement H_2O et O_2. Les transitions de l'eau les plus connues sont situées à 22.2 et 183 GHz. Dans le cas du dioxygène, les raies sont serrées et forment des bandes près de 60 GHz ainsi qu'une raie unique à 119 GHz. Au delà de 300 GHz, N_2 et CO_2 contribuent également à absorber du rayonnement.

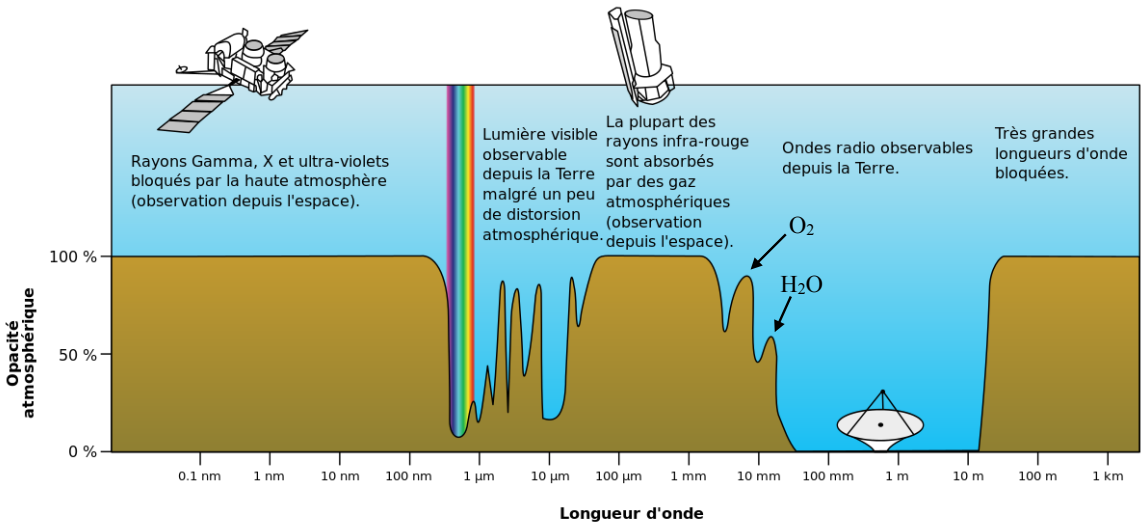


FIGURE 3.1 – Opacité de l'atmosphère en fonction de la longueur d'onde (adapté de Wikipedia). Les régions brunes représentent la proportion de rayonnement absorbé.

L'atmosphère représente donc une gêne pour les télescopes terrestres, qui, selon la plage de fréquence observée, peuvent ne pas recevoir l'intégralité du rayonnement de la source. L'atmosphère est largement transparente au rayonnement radio entre $\lambda \sim 20$ mm ($\nu \sim$15 GHz) et 30 m ($\nu \sim$10 MHz) et partiellement transparente jusqu'à 0,2 mm (1,5 THz), rendant possible l'observation depuis le sol. Par contre, l'atmosphère absorbe le rayonnement infrarouge, ce qui a encouragé l'envoi de nombreux satellites d'observation infrarouge, permettant de s'affranchir

de cette contrainte. Les régions de formation stellaire émettent la majorité de leur lumière entre l'IR lointain (50 μm - 5 mm) et le submillimétrique. Il est possible de les observer depuis le sol, mais les observations spatiales sont irremplaçables.

Le premier télescope spatial à effectuer une carte complète du ciel en infrarouge fut IRAS (*Infrared Astronomical Satellite*) qui a fonctionné durant l'année 1983. Il réalisa sa cartographie dans les bandes à 12, 25, 60 et 100 microns. Plusieurs centaines de milliers de sources furent répertoriées, la plupart étant nouvelles. Le second satellite infrarouge fut ISO (*Infrared Space Observatory*). Lancé en 1995 par l'ESA [1], il observa pendant 3 ans dans l'infrarouge moyen et lointain (entre 2 et 200 microns). Orion et Rho-Ophiuchus, deux nuages moléculaires connus pour leur activité de formation stellaire, furent observés pour la première fois en détail. Le satellite Spitzer, lancé en 2003, fait partie du programme des Grands Observatoires de la NASA [2]. Il a épuisé sa réserve d'hélium liquide permettant de refroidir ses instruments, mais devrait fonctionner jusque vers 2020. Ses observations se font dans le même domaine que ISO mais avec des instruments plus perfectionnés. Cela lui a permis d'observer des proto-étoiles extrêmement jeunes, comme L1014 [Young et al., 2004] ou encore des galaxies à sursaut de formation d'étoiles (*starburst galaxies*) comme M82. Enfin, le satellite Herschel, conçu par l'ESA, a été un outil majeur dans la compréhension de la formation stellaire. Il a été lancé en 2009 et a fonctionné jusqu'en 2013. Avec un diamètre de 3,5 m, c'est le plus gros télescope envoyé dans l'espace. Ses trois instruments sont PACS [3], une caméra d'imagerie et un spectromètre couvrant deux bandes 55 à 210 microns ; SPIRE [4], également une caméra d'imagerie et un spectromètre comprenant trois bandes centrées à 250, 350 et 500 microns ; et HIFI [5], un détecteur hétérodyne (voir partie 3.2.1) opérant dans les bandes 157-212 et 240-625 microns.

Un autre moyen de s'affranchir d'une partie de l'atmosphère consiste à placer des télescopes en altitude dans des régions très sèches, comme l'interféromètre ALMA (*Atacama Large Millimeter Array*) dans le désert d'Atacama au Chili, ou sur le mont Mauna Kea à Hawaii, ou encore à bord de ballons ou d'avions volant à haute altitude. C'est le cas de SOFIA (*Stratospheric Observatory for Infrared Astronomy*), projet conjoint de la NASA et du DLR [6], qui emporte un télescope de 2,5 m de diamètre à bord d'un Boeing 747.

3.2 Télescopes à réflecteur unique

Un radiotélescope classique se compose d'un réflecteur principal, d'un réflecteur secondaire, d'un cornet et d'un récepteur, représentés sur la figure 3.2. La tâche principale du réflecteur est de convertir l'onde plane incidente en une onde sphérique, qui est renvoyée sur le

1. ESA : *European Space Agency*
2. NASA : *National Aeronautics and Space Administration*
3. PACS : *Photodetecting Array Camera and Spectrometer*
4. SPIRE : *Spectral and Photometric Imaging Receiver*
5. HIFI :*Heterodyne Instrument for the Far Infrared*
6. DLR : *Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt*

réflecteur secondaire puis collectée par le cornet relié au récepteur placé dans le plan focal du télescope. Le réflecteur principal peut être parabolique, comme celui du télescope de 30 m de l'IRAM, ou sphérique, comme celui du télescope d'Arecibo. Les signaux en radioastronomie étant faibles, il convient d'avoir un réflecteur principal le plus grand possible.

Pour caractériser une antenne, il faut connaître sa réponse directionnelle, ou **lobe** $\mathscr{P}$, encore appelé diagramme d'antenne, qui correspond au diagramme de diffraction d'un front d'onde plan incident par le réflecteur principal (voir figure 3.2). Cela revient à calculer la transformée de Fourier de la distribution du champ électrique reçu par l'antenne, puis à en prendre le carré du module. Le lobe peut être décomposé en un lobe principal (*main beam*) et des lobes secondaires (*side lobes*) :

$$\mathscr{P} = \mathscr{P}_{\rm mb} + \mathscr{P}_{\rm sl} \tag{3.1}$$

L'angle solide de l'antenne est définie par :

$$\Omega_{\rm A} = \iint_{4\pi} \mathscr{P}_{\rm n}(\theta,\phi){\rm d}\Omega \tag{3.2}$$

où $\mathscr{P}_{\rm n}$ est le lobe normalisé :

$$\mathscr{P}_{\rm n}(\theta,\phi) = \frac{\mathscr{P}(\theta,\phi)}{\mathscr{P}_{\rm max}} \tag{3.3}$$

De même, l'angle solide du lobe principal, *main beam solid angle*, est défini par :

$$\Omega_{\rm A} = \iint_{\rm mb} \mathscr{P}_{\rm n}(\theta,\phi){\rm d}\Omega \tag{3.4}$$

Si F est la fonction normalisée décrivant le diagramme d'antenne et si l'on considère un lobe principal gaussien, la largeur à mi-hauteur du lobe du télescope HPBW (*Half Power Beam Width*) (voir figure 3.2) est définie par :

$$\mathrm{F(HPBW)} = \frac{1}{2} \tag{3.5}$$

La résolution angulaire du télescope, soit sa capacité à voir de petits détails, est directement reliée à la largeur à mi hauteur par :

$$\mathrm{HPBW} = \mathrm{k}\frac{\lambda}{\mathrm{D}} \tag{3.6}$$

où λ est la longueur d'onde et D le diamètre du télescope et k varie entre 1 et 1,4 selon l'apodisation. Pour avoir une bonne résolution, il faut donc que le diamètre du télescope soit grand devant la longueur d'onde. Observer dans le domaine radio, aux longueurs d'onde plus grandes que dans le visible, oblige donc à construire de grands télescopes. Les antennes des radiotélescopes ont des dimensions variant de quelques mètres à quelques centaines de mètres.

Une autre qualité essentielle d'un télescope est sa **sensibilité**. Elle dépend de la surface de l'antenne, de la qualité de ses récepteurs et du site d'observation. Elle peut varier avec la

fréquence observée.

Pour obtenir une bonne efficacité, la surface du réflecteur ne doit pas comporter d'irrégularités d'une taille supérieure à environ un dixième de la longueur d'onde. Observer en radio est alors plus simple que dans le domaine visible, la surface n'a pas à être pleine, elle peut être constituée d'un grillage aux mailles d'autant plus grandes que la longueur d'onde observée est grande.

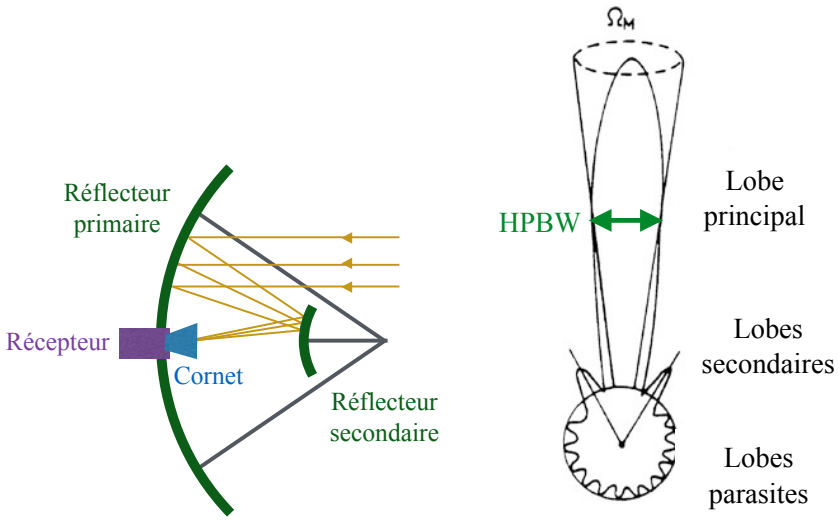


FIGURE 3.2 – **Gauche :** Schéma d'un radiotélescope de type Cassegrain. **Droite :** Diagramme polaire de puissance d'une antenne, montrant le lobe principal et les lobes secondaires (adapté de Wilson et al. [2013]).

3.2.1 La détection hétérodyne

Le récepteur comprend deux parties : le *front-end* avec généralement un pré-amplificateur, l'oscillateur local et un mélangeur, puis le *back-end* avec d'autres amplificateurs et les spectromètres. Les détecteurs sont des diodes qui requièrent une puissance minimale pour fonctionner, il est donc nécessaire d'amplifier les signaux. Or, les signaux en radioastronomie sont si faibles qu'il faut les amplifier d'un facteur de l'ordre de 10^8-10^9. Tout composant électronique laisse échapper une minuscule partie de la puissance reçue, puissance qui peut alors repasser par les composants précédents et être à nouveau amplifiée, donnant naissance à un effet Larsen désastreux. Une solution à ce problème est la détection hétérodyne. Le signal source, de fréquence ν_{S}, est alors mélangé, juste après une première amplification, à un signal de référence, appelé oscillateur local, de fréquence ν_{OL}. Cela permet de découpler le signal de sortie du signal d'entrée, évitant l'effet Larsen. Une fréquence intermédiaire ν_{FI} est obtenue par battement hétérodyne, beaucoup plus basse que la fréquence reçue (quelques GHz) et donc plus facile à amplifier, les composants électroniques étant plus stables à basse fréquence. En sortie, deux bandes de

fréquence sont observées :

$$\nu_{\mathrm{FI}} = |\nu_{\mathrm{S}} - \nu_{\mathrm{OL}}| \tag{3.7}$$

C'est cette fréquence intermédiaire qui est envoyée vers les spectromètres du *back-end* qui peuvent alors analyser le signal. Au premier ordre, le signal de sortie est :

$$\nu_{\mathrm{S}} = \nu_{\mathrm{USB}} = \nu_{\mathrm{OL}} + \nu_{\mathrm{FI}} \qquad \text{et} \qquad \nu_{\mathrm{S}'} = \nu_{\mathrm{LSB}} = \nu_{\mathrm{OL}} - \nu_{\mathrm{FI}} \tag{3.8}$$

où ν_{USB} est la bande latérale supérieure (*upper side band*) et ν_{LSB} la bande latérale inférieure (*lower side band*), représentées sur la figure 3.3. On peut choisir d'analyser les deux bandes, on travaille alors en mode *dual-sideband* ou d'en filtrer une des deux, en mode *single-sideband*.

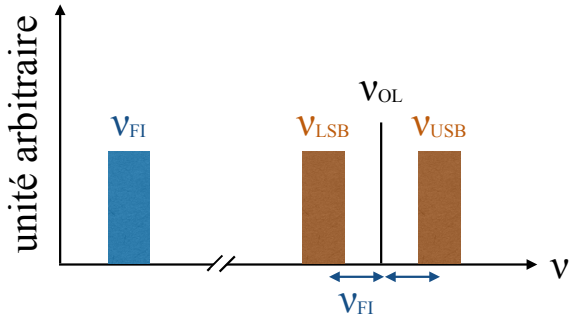


FIGURE 3.3 – Illustration de la détection hétérodyne.

En réalité, le mélangeur produit des harmoniques d'ordre plus élevé et d'intensité plus faible. Ces harmoniques ne sont pas toujours parfaitement filtrées et peuvent produire des raies fantômes. Concrètement, une raie forte dans l'une des deux bandes peut faire apparaître une raie symétrique par rapport à ν_{OL}, mais plus faible, dans l'autre bande. Pour identifier ces raies fantômes, une méthode consiste à observer à la fréquence ν_{OL} puis à la fréquence $\nu_{OL} + \delta\nu$. Dans notre cas, nous avons choisi $\delta\nu = 20$ MHz, ce qui est faible en comparaison des 8 GHz de bande observée. En effet, la position de la raie fantôme dépend de la fréquence ν_{OL}, contrairement aux véritables raies. La superposition des deux observations fait donc apparaître les raies fantômes décalées de 20 MHz, les rendant facilement identifiables.

3.2.2 Températures d'antenne

Le flux d'énergie d'une onde électromagnétique est donné par le vecteur de Poynting $\overrightarrow{S}$:

$$\overrightarrow{S} = \frac{\mathrm{c}}{4\pi} \overrightarrow{E} \times \overrightarrow{H} \tag{3.9}$$

avec c la vitesse de la lumière, $\overrightarrow{E}$ le champ électrique et $\overrightarrow{H}$ le champ magnétique et dans le système d'unité CGS [7]. Ce flux d'énergie s'exprime en erg cm^{-2} ou en W m^{-2} (1 erg = 1 g

7. CGS : centimètre, gramme, seconde.

$cm^2\ s^{-2} = 10^{-7}$ J) et représente la quantité d'énergie incidente par unité de surface et de temps. En radioastronomie, une grandeur importante est la **densité de flux** S_ν qui est le flux par unité de fréquence, en W m^{-2} Hz^{-1}. Comme ces densités de flux sont généralement très petites, on utilise comme unité le Jansky :

$$1\mathrm{Jy} = 10^{-26}\mathrm{W\ m^{-2}Hz^{-1}} = 10^{-23}\mathrm{erg\ s^{-1}\ Hz^{-1}\ cm^{-2}} \tag{3.10}$$

Le télescope intercepte une partie de cette densité de flux. La **densité de puissance** P_ν ou puissance monochromatique reçue par le télescope et exprimée en W Hz^{-1}, est donnée par le produit de la densité de flux par l'aire effective du télescope A_{eff} :

$$P_\nu = A_{\mathrm{eff}}\, S_\nu \tag{3.11}$$

L'aire effective correspond à la véritable surface collectrice, c'est-à-dire à l'aire géométrique du réflecteur principal diminuée de la surface du réflecteur secondaire lorsqu'il gêne l'observation et des montants le soutenant. En intégrant sur toutes les directions de polarisation et sur toute la bande passante, on obtient la puissance reçue totale :

$$P = \frac{1}{2} A_{\mathrm{eff}}\, S_\nu\, \Delta_\nu \tag{3.12}$$

où Δ_ν est la bande passante du récepteur.

Dans la réalité, on ne mesure pas directement une puissance reçue, mais plutôt une **température d'antenne**. Pour comprendre ce concept, imaginons que l'antenne est reliée à une résistance et que l'ensemble est isolé du reste du monde. La puissance reçue par l'antenne est transmise à la résistance et peut être assimilée à un bruit thermique. On peut donc définir une température d'antenne correspondant à cette puissance, valable dans le cas de l'approximation de Rayleigh-Jeans ($h\nu \ll kT$) :

$$P = k_B T_A \Delta_\nu \tag{3.13}$$

avec k_B la constante de Boltzmann. Cette relation est appelée loi de Nyquist. En égalisant 3.12 et 3.13, on obtient alors :

$$S_\nu = \frac{2k_B}{A_{\mathrm{eff}}} T_A \tag{3.14}$$

La température d'antenne est la grandeur mesurée par le télescope, elle dépend de la densité de flux de la source, mais n'est pas indépendante des caractéristiques du télescope et de l'observation. Plusieurs corrections sont à effectuer pour obtenir une valeur comparable entre différents télescopes. Il faut tout d'abord corriger de l'atténuation atmosphérique :

$$T'_A = T_A e^{\tau_\nu} \tag{3.15}$$

où T'_A est la température d'antenne corrigée des pertes atmosphériques et τ_ν la profondeur

optique, qui indique quelle fraction d'intensité traverse une colonne de gaz (voir section 3.4 pour une définition détaillée). Cette correction est faite automatiquement pendant l'observation.

D'autre part, plusieurs grandeurs définissent l'efficacité d'un télescope, variant entre 0 et 1. L'efficacité vers l'avant $\eta_{\rm eff}$ (*forward efficiency*) est donnée comme le rapport entre la puissance détectée venant de l'hémisphère avant et la puissance totale, tandis que l'efficacité du lobe principal $\eta_{\rm mb}$ (*main beam efficiency*) est définie comme la proportion de la puissance captée dans le lobe principal :

$$\eta_{\rm eff} = {\rm F_{eff}} = \frac{\Omega_{2\pi}}{\Omega_{\rm A}} \qquad \text{et} \qquad \eta_{\rm mb} = {\rm B_{eff}} = \frac{\Omega_{\rm mb}}{\Omega_{\rm A}} \tag{3.16}$$

Il est alors possible de corriger $\rm T'_A$ de l'efficacité vers l'avant $\rm F_{eff}$ et de l'efficacité du lobe principal :

$$\rm T^*_A = \frac{T'_A}{F_{eff}} \tag{3.17}$$

De même, pour l'efficacité du lobe principal :

$$\rm T_{mb} = \frac{T'_A}{B_{eff}} = \frac{F_{eff}}{B_{eff}} T^*_A \tag{3.18}$$

Cette **température *main beam*** $\rm T_{mb}$ est alors indépendante du télescope. En pratique, pour le télescope de 30 m de l'IRAM, les données sont en $\rm T'_A$ et les efficacités $\rm F_{eff}$ et $\rm B_{eff}$ sont données sur le site internet de l'IRAM pour différentes fréquences (voir tableau 3.4). J'ai alors réalisé une interpolation de ces valeurs tous les 1 GHz pour l'appliquer à l'ensemble de mon spectre.

Freq	HPBW	Feff	Beff	Aeff	S/TA*	Date
GHz	arcsec	%	%	%	Jy/K	
86	29	95	81	63	5.9	4.4.2009
115			78			predicted
145	16	93	74	57	6.4	4.4.2009
210	11	94	63	49	7.5	29.3.2009
230			60			
260	9	88	53	41	8.4	29.3.2009
330						
340	7.5	81	35	29	10.9	24.11.2009

FIGURE 3.4 – Les efficacités mesurées au télescope de 30 m avec le récepteur EMIR en 2009. Les colonnes indiquent dans l'ordre : la fréquence, la largeur à mi-hauteur du lobe du télescope HPBW, l'efficacité vers l'avant $\rm F_{eff}$, l'efficacité du lobe principal $\rm B_{eff}$, l'efficacité d'ouverture $\rm A_{eff}$ définie comme le rapport entre l'aire effective de l'antenne et l'aire géométrique, la sensibilité pour une source ponctuelle (*point source sensitivity*) $\rm S/T^*_A$ et la date de mesure. Source : http://www.iram.es/IRAMES/mainWiki/Iram30mEfficiencies

3.2.3 Calibration

Toute observation est entachée de bruit, dû au continuum, à l'environnement et au télescope. La calibration consiste à déterminer ces contributions pour pouvoir les retirer des observations. D'autre part, le télescope reçoit un champ électromagnétique et restitue un comptage au niveau des *back-ends*. La calibration permet de convertir ce comptage en grandeur physique.

Pour un détecteur parfaitement linéaire, le comptage de sortie obtenu en pointant vers la source est proportionnel aux températures :

$$\mathrm{C_{sou}} = \chi[\mathrm{T_{rec}} + \mathrm{F_{eff}} \mathrm{e}^{-\tau_\nu} \mathrm{T_{sou}} + \mathrm{T_{sky}}] \tag{3.19}$$

avec $\mathrm{T_{rec}}$ la contribution de bruit du récepteur, $\mathrm{F_{eff}} \mathrm{e}^{-\tau_\nu} \mathrm{T_s}$ le signal de la source après propagation dans l'atmosphère, χ la facteur de gain à déterminer et $\mathrm{T_{sky}}$ la contribution de bruit de l'atmosphère $\mathrm{T_{atm}}$ et du sol $\mathrm{T_{gr}}$:

$$\mathrm{T_{sky}} = \mathrm{F_{eff}}(1 - \mathrm{e}^{-\tau_\nu})\mathrm{T_{atm}} + (1 - \mathrm{F_{eff}})\mathrm{T_{gr}} \tag{3.20}$$

Au télescope de 30 m, $\mathrm{T_{atm}}$ et $\mathrm{T_{gr}}$ sont de l'ordre de 290 K, $\mathrm{T_{rec}}$ vaut 50-70 K entre 100 et 350 GHz, tandis que $\mathrm{T_{sky}}$ varie entre 30 et 100 K entre 100 et 230 GHz.

Toujours pour le télescope de 30 m, la méthode de calibration "Chopper Wheel" est utilisée. Elle consiste à mesurer 4 fois le comptage dans différentes circonstances. La première mesure est effectuée sur une charge chaude (le *chopper*), à température ambiante, la seconde sur une charge froide, de l'azote liquide, la troisième sur le ciel vide et la quatrième sur la source. Les différents comptages valent respectivement :

$$\mathrm{C_{hot}} = \chi[\mathrm{T_{rec}} + \mathrm{T_{hot}}] \tag{3.21}$$

$$\mathrm{C_{cold}} = \chi[\mathrm{T_{rec}} + \mathrm{T_{cold}}] \tag{3.22}$$

$$\mathrm{C_{atm}} = \chi[\mathrm{T_{rec}} + \mathrm{T_{sky}}] \tag{3.23}$$

$\mathrm{T_{cold}}$ et $\mathrm{T_{hot}}$ sont mesurées tandis que $\mathrm{T_{sky}}$ est calculée à l'aide d'un modèle d'atmosphère faisant varier la quantité de vapeur d'eau dans l'air, ce qui est le facteur le plus déterminant dans la qualité des observations. Pour obtenir une relation entre les comptages et $\mathrm{T_{sou}}$, il faut effectuer des différences :

$$\Delta\mathrm{C_{sig}} = \mathrm{C_{sou}} - \mathrm{C_{atm}} = \chi \mathrm{F_{eff}} \mathrm{e}^{-\tau_\nu} \mathrm{T_{sou}} \tag{3.24}$$

$$\Delta\mathrm{C_{cal}} = \mathrm{C_{hot}} - \mathrm{C_{atm}} = \chi[\mathrm{T_{hot}} - \mathrm{T_{sky}}] \tag{3.25}$$

On peut alors exprimer $\mathrm{T_{sou}}$ comme :

$$\mathrm{T_{sou}} = \mathrm{T_{cal}} \frac{\Delta\mathrm{C_{sig}}}{\Delta\mathrm{C_{cal}}} \tag{3.26}$$

avec

$$\mathrm{T_{cal}} = [\mathrm{T_{hot}} - \mathrm{T_{sky}}]\frac{\mathrm{e}^{\tau_\nu}}{\mathrm{F_{eff}}} \tag{3.27}$$

La température système $\mathrm{T_{sys}}$ décrit le bruit total de l'observation. Le bruit résiduel $\Delta\mathrm{T}$ est donné par la formule du radiomètre :

$$\Delta\mathrm{T} = \frac{\mathrm{K\ T_{sys}}}{\sqrt{\Delta\nu\ \mathrm{t}}} \tag{3.28}$$

avec K un facteur dépendant du mode d'observation (voir partie 3.2.4), $\Delta\nu$ la résolution spectrale et t le temps d'intégration.

3.2.4 Le télescope de 30 m du Pico Veleta

Le télescope de 30 m est constitué d'une unique antenne de 30 m de diamètre observant dans le domaine millimétrique (30-300 GHz) et submillimétrique (au delà de 300 GHz), plus précisément à 3, 2, 1 et 0.8 mm. C'est l'un des deux instruments conçus et gérés par l'IRAM (Institut de Radioastronomie Millimétrique), fondé en 1979 par le CNRS et la MPG (Max-Planck Gesellschaft). L'IGN (Instituto Geográfico Nacional) a rejoint l'IRAM en 1990. Le télescope de 30 m est situé dans la Sierra Nevada, en Espagne, près du Pico Veleta, à 2850 m d'altitude. Ce télescope a permis de découvrir une vingtaine de molécules interstellaires.

FIGURE 3.5 – Le télescope de 30 m de l'IRAM. Crédit : Nicolas Billot.

Lors de nos observations, nous avons utilisé essentiellement le récepteur EMIR (*Eight MIxer Receiver*). Il permet d'observer simultanément sur une bande de 16 GHz de large dans chaque polarisation linéaire, centrée sur une fréquence au choix dans les bandes à 3, 2, 1 et 0,8 mm (respectivement 83-117, 124-184, 202-274 et 277-350 GHz, voir figure 3.6). Les observations

peuvent se faire en mode *dual-sideband*, comme expliqué dans la section 3.2.1. Les deux bandes sont sous-divisées en deux parties, comme le montre la figure 3.7.

Le *back-end* utilisé est le *Fast Fourier Transform Spectrometer* (FTS). Il consiste en une série de 24 modules FTS, fonctionnant à une résolution spectrale de 200 ou 50 kHz.

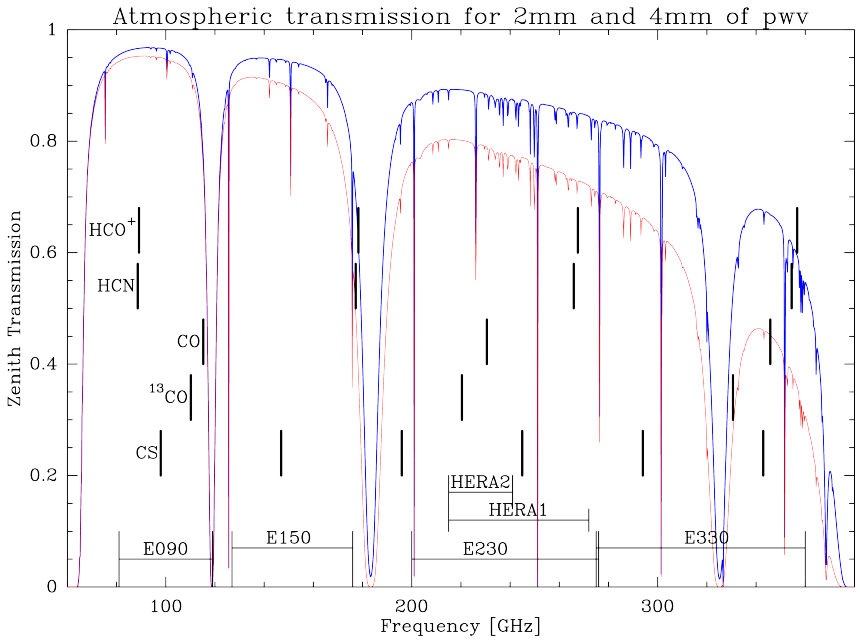


FIGURE 3.6 – Transmission atmosphérique modélisée pour 2 mm et 4 mm de vapeur d'eau. Les bandes d'EMIR sont notées E090, E150, E230 et E330, donnant approximativement la fréquence centrale de la bande.

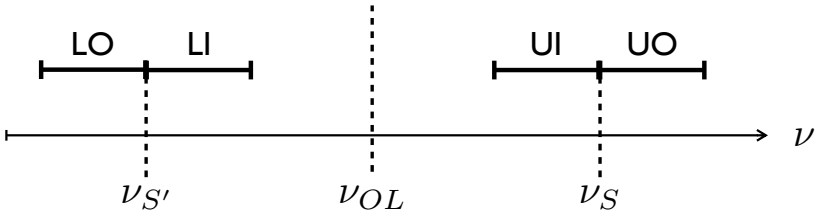


FIGURE 3.7 – Chaque setting est divisé en bande latérale inférieure et supérieure, chacune divisée en 2 parties : LO, *lower outer*, et LI, *lower inner* pour la bande inférieure et UO, *upper outer*, et UI, *upper inner*, pour la bande supérieure.

3.3 L'interférométrie

L'interférométrie astronomique se base sur les célèbres expériences d'Albert Michelson à la fin du XIX^{e} siècle. Avec son collègue Edward Morley, il souhaitait mesurer le mouvement de la Terre dans l'éther, le milieu hypothétique dans lequel la lumière était supposée voyager. Dans

les années 1920, avec Francis Pease, il effectua la première mesure du diamètre d'étoiles autres que le Soleil, en l'occurrence Bételgeuse, avec un interféromètre installé sur le Mont Wilson en Californie. Ces techniques sont toujours utilisées aujourd'hui. Dans le domaine radio, plusieurs interféromètres sont en fonctionnement, entre autres, le VLA (*Very Large Array*) qui observe entre 0.6 et 410 cm avec 27 antennes de 25 m de diamètre, ALMA (*Atacama Large Millimeter Array*) avec à terme 66 antennes de 7 et 12 m, observant dans toutes les fenêtres atmosphériques entre 31 et 950 GHz et NOEMA, décrit au paragraphe 3.3.2.

L'interférométrie astronomique donne accès à des observations à très haute résolution angulaire et son prix est bien inférieur à celui d'une antenne unique de même résolution. Le principe de l'interférométrie et le traitement du signal nécessaire à cette technique sont brièvement décrits dans cette partie.

3.3.1 Principes généraux

Considérons deux antennes identiques A_1 et A_2 situées aux positions $\overrightarrow{x_1}$ et $\overrightarrow{x_2}$ (voir schéma de gauche sur la figure 3.8). La distance $\overrightarrow{B} = \overrightarrow{x_2} - \overrightarrow{x_1}$ les séparant est appelée ligne de base. Les deux antennes sont pointées vers une même source ponctuelle et monochromatique de fréquence ν. La direction de la source est donnée par le vecteur $\hat{s}$. La source est suffisamment distante pour que le front d'onde incident soit plan [Lawson, 1999]. Aux positions $\overrightarrow{x_1}$ et $\overrightarrow{x_2}$, le champ monochromatique s'exprime comme :

$$\begin{aligned} \phi_1 &\sim e^{-ik\hat{s}.\overrightarrow{x_1}} e^{-i\omega t} \\ \phi_2 &\sim e^{-ik\hat{s}.\overrightarrow{x_2}} e^{-i\omega t} = e^{-ik\hat{s}.\overrightarrow{x_1}} e^{-ik\hat{s}.\overrightarrow{B}} e^{-i\omega t} \end{aligned}$$

avec $\overrightarrow{k}$ le vecteur d'onde, avec $k = \omega/c$ et $\omega = 2\pi\nu$. En choisissant une normalisation appropriée, on peut éliminer le terme commun $e^{-ik\hat{s}.\overrightarrow{x_1}}$, d'où :

$$\begin{aligned} \phi_1 &\sim e^{-i\omega t} \\ \phi_2 &\sim e^{-ik\hat{s}.\overrightarrow{B}} e^{-i\omega t} \end{aligned}$$

Il est alors évident que la différence de phase entre les deux antennes dépend de la géométrie de la situation, en particulier du vecteur ligne de base $\overrightarrow{B}$. Après collecte par les deux antennes, les champs se propagent sur les distances différentes d_1 et d_2 jusqu'à un détecteur, ajoutant une différence de phase :

$$\begin{aligned} \phi_1 &\sim e^{ikd_1} e^{-i\omega t} \\ \phi_2 &\sim e^{ikd_2} e^{-ik\hat{s}.\overrightarrow{B}} e^{-i\omega t} \end{aligned}$$

Si on combine alors les champs, le champ net obtenu est :

$$\phi_{\text{net}} = \phi_1 + \phi_2 \sim \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}(\mathrm{e}^{\mathrm{ikd}_1} + \mathrm{e}^{\mathrm{ikd}_2}\mathrm{e}^{-\mathrm{ik}\hat{\mathrm{s}}.\overrightarrow{B}})$$

La puissance reçue est alors proportionnelle à la moyenne temporelle de ce champ :

$$\mathrm{P} \propto \phi^*_{\text{net}}\phi_{\text{net}} = 2(1 + \cos \mathrm{k}(\hat{\mathrm{s}}.\overrightarrow{B} + \mathrm{d}_1 - \mathrm{d}_2))$$

En définissant A comme l'aire effective des antennes et F le flux reçu de la source, la puissance détectée est donnée par :

$$\mathrm{P} = 2\mathrm{AF}(1 + \cos \mathrm{k}(\hat{\mathrm{s}}.\overrightarrow{B} + \mathrm{d}_1 - \mathrm{d}_2))$$
$$\mathrm{P} = 2\mathrm{AF}(1 + \cos \mathrm{kD})$$

Dans l'espace de la différence de chemin $\mathrm{D} = \hat{\mathrm{s}}.\overrightarrow{B} + \mathrm{d}_1 - \mathrm{d}_2$, P varie entre zéro et 2AF avec une période λ. Des franges d'interférences sont alors observées. Dans la réalité les antennes possèdent une bande passante, la figure d'interférence est alors modulée par un sinus cardinal (voir Lawson [1999] pour une dérivation de la puissance reçue dans ce cas).

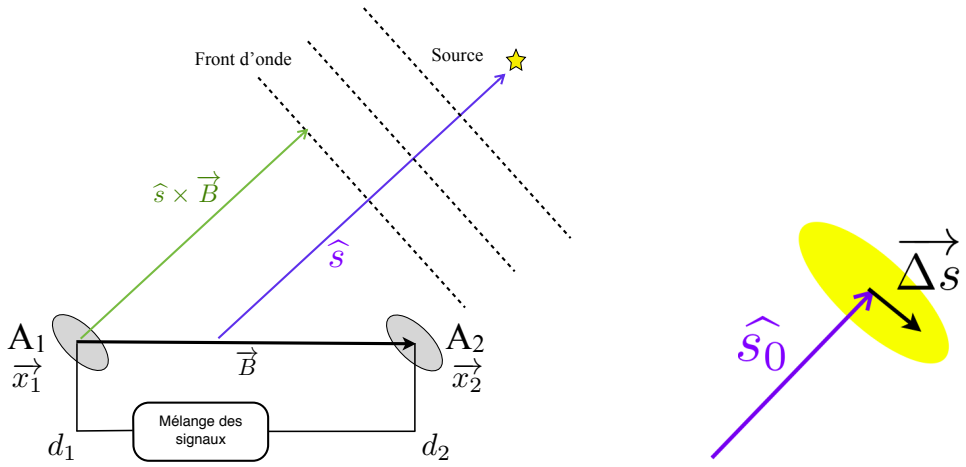


FIGURE 3.8 – **Gauche :** Représentation schématique d'un interféromètre à deux antennes observant une source ponctuelle. $\hat{\mathrm{s}}$ est le vecteur unitaire pointant vers la source et **B** le vecteur ligne de base. **Droite :** Schéma d'une source étendue. $\hat{\mathrm{s}_0}$ est maintenant utilisé pour définir la position du centre de la source et le vecteur Δs pour définir la position du point observé.

Prenons à présent le cas d'une source étendue, dont la direction est indiquée par $\hat{\mathrm{s}_0}$ (voir schéma de droite de la figure 3.8). Il est habituel de faire en sorte que la différence $\mathrm{d}_2 - \mathrm{d}_1$ soit égale à $\hat{\mathrm{s}_0}.\overrightarrow{B}$ de telle sorte que les franges d'interférences présentent un maximum au centre de la source. $\hat{\mathrm{s}_0}$ est alors appelé référence de phase. Nous pouvons à présent regarder quelle sera la réponse de l'interféromètre à un point source à la position $\hat{\mathrm{s}}$ légèrement décalée par rapport à

$\widehat{\mathrm{s_0}}$:

$$\widehat{\mathrm{s}} = \widehat{\mathrm{s_0}} + \overrightarrow{\Delta s}$$

Si le rayonnement provenant des différentes parties de la source est incohérent, la puissance détectée correspond à la somme des puissances pour chaque point de la source :

$$\mathrm{P}(\widehat{s_0}, \overrightarrow{B}) = \int \mathrm{d}\Omega\ \mathrm{A}(\overrightarrow{\Delta s})\ \mathrm{F}(\overrightarrow{\Delta s})\ (1 + \cos \mathrm{k}(\overrightarrow{\Delta s}.\overrightarrow{B}))$$

Introduisons un léger retard δ entre les deux bras, la puissance détectée devient alors :

$$\mathrm{P}(\widehat{s_0}, \overrightarrow{B}, \delta) = \int \mathrm{d}\Omega\ \mathrm{A}(\overrightarrow{\Delta s})\ \mathrm{F}(\overrightarrow{\Delta s})\ (1 + \cos \mathrm{k}(\overrightarrow{\Delta s}.\overrightarrow{B} + \delta))$$

En développant à l'aide de la formule cos(a+b) = (cos a . cos b) - (sin a . sin b), on obtient :

$$\mathrm{P}(\widehat{s_0}, \overrightarrow{B}, \delta) = \mathrm{P_0} + \mathrm{Re}(\mathrm{V}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathrm{k}\delta})$$

avec

$$\mathrm{V}(\mathrm{k}, \overrightarrow{B}) = \int \mathrm{d}\Omega\ \mathrm{A}(\overrightarrow{\Delta s})\ \mathrm{F}(\overrightarrow{\Delta s})\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathrm{k}\overrightarrow{\Delta s}.\overrightarrow{B}} \tag{3.29}$$

et $\mathrm{P_0}$ est défini comme :

$$\mathrm{P_0} = \int \mathrm{d}\Omega\ \mathrm{A}(\overrightarrow{\Delta s})\ \mathrm{F}(\overrightarrow{\Delta s}) \tag{3.30}$$

Cette formulation permet de faire apparaître V, qui est la visibilité complexe. La visibilité reflète la puissance émise par la source modulée par les franges d'interférence. Si la source est petite par rapport au champ de vision du télescope, on peut considérer que $\overrightarrow{\Delta s}$ est à peu près perpendiculaire à $\widehat{s_0}$ et le définir en termes d'angles $\overrightarrow{\Delta s} \simeq (\alpha, \beta, 0)$. La visibilité devient alors :

$$\mathrm{V}(\mathrm{k}, \overrightarrow{B}) = \int \mathrm{d}\alpha\mathrm{d}\beta\mathrm{A}(\alpha, \beta)\mathrm{F}(\alpha, \beta)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathrm{k}(\alpha\mathrm{B_x} + \beta\mathrm{B_y})} \tag{3.31}$$

On définit ensuite les fréquences spatiales :

$$\mathrm{u} = \frac{\mathrm{kB_x}}{2\pi} = \frac{\mathrm{B_x}}{\lambda} \qquad \mathrm{v} = \frac{\mathrm{kB_y}}{2\pi} = \frac{\mathrm{B_y}}{\lambda} \tag{3.32}$$

Ces deux coordonnées définissent le plan (u,v). V apparaît alors explicitement comme la transformée de Fourier (TF) spatiale à deux dimensions de la fonction $A(\alpha, \beta)F(\alpha, \beta)$:

$$\mathrm{V}(\mathrm{u}, \mathrm{v}) = \int \mathrm{d}\alpha\mathrm{d}\beta\mathrm{A}(\alpha, \beta)\mathrm{F}(\alpha, \beta)\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\pi(\alpha\mathrm{u} + \beta\mathrm{v})} \tag{3.33}$$

La visibilité est ce qui est mesuré par l'interféromètre. Il faut alors faire la transformée de Fourier inverse pour retrouver la fonction source $F(\alpha, \beta)$. En pratique, le nombre de lignes de base et donc le nombre de mesures de la visibilité étant discrets, c'est une transformée de fourier discrète qu'il faut réaliser pour obtenir la distribution de brillance *sale* $F_d(\alpha, \beta)$. Il faut

alors encore effectuer une déconvolution par la réponse impulsionnelle (*point spread function*) pour obtenir la distribution de brillance *propre* $F(\alpha, \beta)$.

3.3.2 L'interféromètre NOEMA

L'interféromètre NOEMA (*NOrthern Extended Millimeter Array*), anciennement Plateau de Bure (abrégé PdBI par la suite), est le deuxième instrument de l'IRAM. Il comprend actuellement 7 antennes de 15 m de diamètre (12 antennes sont prévues au total pour 2019), que l'on peut déplacer les unes par rapport aux autres. Pour des observations à une longueur d'onde de 1.3 mm, la résolution angulaire typique pour les configurations étendues est de 0.5" [8]. Ces performances placent la France parmi les pays leaders en interférométrie millimétrique.

Les images obtenues grâce aux 6 antennes du PdBI sont combinées 2 à 2, ce qui représente 15 lignes de base. Plus le nombre de lignes de base est grand, meilleur sera la couverture du plan UV et la reconstruction de l'image. Le PdBI utilise également la rotation de la Terre pour améliorer cette couverture. La source est alors observée selon différents angles, ce qui a pour effet de faire varier la longueur des lignes de base vues de la source. Toute l'information obtenue est alors combinée.

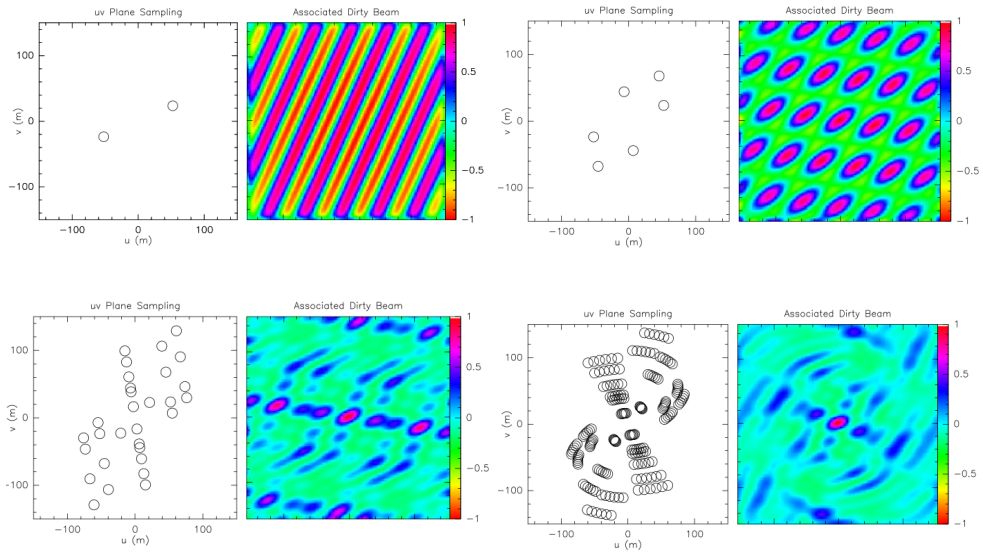


FIGURE 3.9 – Sur chaque figure sont présentés à gauche le plan (u,v) repérant la position des antennes et à droite le diagramme de diffraction. En haut à gauche seules 2 antennes sont utilisées, on remarque que les zones où le flux reçu est important sont très nombreuses et couvrent tout le plan. En haut à droite 3 antennes dans différentes configurations sont utilisées, les lobes secondaires sont alors réduits. Les deux figures du bas comprennent 6 antennes et celle de droite utilise la rotation de la Terre pour réduire encore les lobes secondaires. On voit apparaître le lobe principal au centre, recevant le maximum de flux.

8. 1" = 1/3600 °

3.3.3 Calibration et déconvolution

Plusieurs quasars, qui sont des sources brillantes et ponctuelles, sont observés toutes les 20 minutes au cours de l'observation pour calibrer la phase. Une étoile évoluée sert de calibrateur pour le flux.

La deuxième étape du traitement des données consiste à créer les tables UV à partir des données brutes. Ces tables regroupent l'ensemble des visibilités pour chaque source observée, mises sous forme de carte par une transformée de Fourier.

Dans un troisième temps, il faut effectuer une déconvolution, par la méthode itérative dite de *clean*. Le programme repère les maxima d'intensité I_{max}, qui correspondent à des sources, et range γ I_{max} dans la liste des "composantes propres", où γ est un facteur multiplicatif inférieur à 1. Ces composantes convoluées au lobe sale sont retirées de la carte, appelée carte résiduelle. Ce processus est répété pour toutes les composantes de la carte jusqu'à ce que l'on estime qu'il n'y a plus d'information à extraire. Les composantes sont finalement convoluées avec le lobe propre gaussien et la carte résiduelle est ajoutée. Il est possible d'ajuster les paramètres du programme pour améliorer le résultat, en favorisant par exemple les longues lignes de base, c'est-à-dire en leur donnant plus de poids dans l'image finale : c'est la pondération robuste. La résolution est alors augmentée mais la sensibilité aux sources étendues est diminuée par rapport à la pondération dite normale.

3.4 Transfert radiatif et spectroscopie

En astrophysique, les objets d'étude sont presque toujours trop lointains pour pouvoir tester leurs propriétés *in situ*. Le principal moyen d'obtenir de l'information sur ces objets est d'étudier le rayonnement qu'ils émettent ou qu'ils transmettent. Nous étudierons dans une première partie comment les propriétés physiques de l'objet influent sur ce rayonnement et comment ce rayonnement est transmis depuis l'objet jusqu'à nous. Cette étude est appelée transfert radiatif. Nous développerons dans cette partie les concepts essentiels à la compréhension de mon travail. Dans une seconde partie, nous verrons comment les molécules peuvent émettre de la lumière. Pour plus de détails, le lecteur peut se référer par exemple à Wilson et al. [2013], Mangum and Shirley [2015] ou à Belloche [2002]. Enfin, nous verrons comment, à l'aide de diagrammes de population, il est possible de déterminer la densité de colonne des molécules, grandeur fondamentale dans ce travail.

3.4.1 Eléments de transfert radiatif

Le rayonnement émis par la source peut être caractérisé par une grandeur appelée intensité spécifique ou **brillance** I_ν, définie par :

$$dP = I_\nu \cos\theta \, d\Omega \, d\sigma \, d\nu \tag{3.34}$$

avec dP la puissance infinitésimale en W, $\mathrm{d}\sigma$ la surface infinitésimale en m^2, $\mathrm{d}\nu$ la bande de fréquence infinitésimale et θ l'angle entre la normale à $\mathrm{d}\sigma$ et la direction de $\mathrm{d}\Omega$. La brillance I_ν s'exprime en W m^{-2} Hz^{-1} sr^{-1}. L'indice ν rappelle que la grandeur dépend de la fréquence ν.

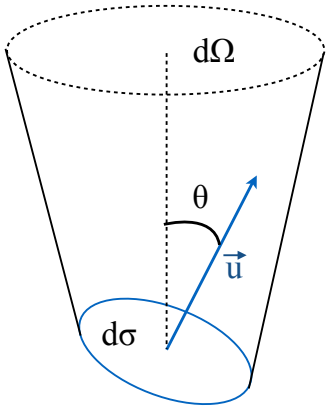


FIGURE 3.10 – Schéma illustrant la définition de la brillance. La surface dσ représente un élément de surface élémentaire sur la source. Le vecteur **u** est perpendiculaire à cette surface. dΩ est l'angle solide élémentaire définissant le récepteur et la ligne pointillée représente la ligne de visée.

La densité de flux totale est obtenue en intégrant (3.34) sur l'angle solide total Ω_s défini par la source :

$$\mathrm{S}_\nu = \int_{\Omega_\mathrm{s}} \mathrm{I}_\nu \cos\theta \, \mathrm{d}\Omega \tag{3.35}$$

Ce flux est mesuré en W m^{-2} Hz^{-1}, ou en Jy avec l'équivalence 1 Jy$= 10^{-26}$ W m^{-2} Hz^{-1}. Le flux S_ν évolue en $1/\mathrm{r}^2$ avec r la distance nous séparant de la source, contrairement à la brillance I_ν qui n'en dépend pas.

La brillance peut être modifiée si du rayonnement est absorbé ou émis. L'équation de transfert résume ces deux possibilités :

$$\frac{\mathrm{dI}_\nu}{\mathrm{ds}} = -\kappa_\nu \, \mathrm{I}_\nu + \epsilon_\nu \tag{3.36}$$

avec ds la distance infinitésimale parcourue le long de la ligne de visée. κ_ν est le coefficient d'absorption linéique, homogène à l'inverse d'une longueur, souvent exprimé en cm^{-1} et ϵ_ν est l'émissivité en $\mathrm{erg\ s^{-1}\ cm^{-3}\ Hz^{-1}\ sr^{-1}}$.

Dans certaines conditions, cette équation peut se simplifier. Si le rayonnement est à l'équilibre avec le milieu environnant, la brillance prend la forme d'une fonction de Planck, qui dépend seulement de la température thermodynamique du milieu. On parle alors d'**équilibre thermodynamique local** (ETL). Dans ce cas :

$$\frac{\mathrm{dI}_\nu}{\mathrm{ds}} = 0, \qquad \mathrm{I}_\nu = \mathrm{B}_\nu(\mathrm{T}) = \epsilon_\nu/\kappa_\nu \tag{3.37}$$

et

$$\mathrm{B}_\nu(\mathrm{T}) = \frac{2\mathrm{h}\nu^3}{\mathrm{c}^2}\frac{1}{\mathrm{e}^{\mathrm{h}\nu/\mathrm{kT}} - 1} \tag{3.38}$$

La fonction de Planck décrit le rayonnement de corps noir. La **température de brillance** $\mathrm{T_b}$ est alors définie comme la température du rayonnement de corps noir qui aurait la même brillance $\mathrm{I}_\nu = \mathrm{B}_\nu(\mathrm{T_b})$. Cette définition est particulièrement utile dans le cas de l'**approximation de Rayleigh-Jeans**, c'est-à-dire $\mathrm{h}\nu \ll \mathrm{kT}$, valable en particulier pour l'étude des sources cosmiques à des longueurs d'onde centimétriques et au delà. La fonction de Planck s'écrit alors :

$$\mathrm{B}_\nu(\mathrm{T}) = \frac{2\mathrm{k}\nu^2}{\mathrm{c}^2}\mathrm{T} \tag{3.39}$$

et la température de brillance est alors directement proportionnelle à l'intensité spécifique : $\mathrm{I}_\nu = \mathrm{B}_\nu(\mathrm{T_b}) = \frac{2\mathrm{k}\nu^2}{\mathrm{c}^2}\mathrm{T_b}$. Cette approximation n'est pas tout à fait valide dans le domaine millimétrique aux basses températures. On définit alors la **température de rayonnement effective** J_ν $(\mathrm{T_b})$ par :

$$\mathrm{J}_\nu(\mathrm{T_b}) = \frac{\mathrm{c}^2}{2\mathrm{k}\nu^2}\mathrm{B}_\nu(\mathrm{T_b}) \tag{3.40}$$

qui n'est égale à la température de brillance que dans le cas où l'approximation de Rayleigh-Jeans est valable.

A la place du chemin ds, les physiciens ont l'habitude d'utiliser une autre grandeur la **profondeur optique** $\mathrm{d}\tau_\nu$, définie par :

$$\mathrm{d}\tau_\nu = -\kappa_\nu \mathrm{ds} \tag{3.41}$$

avec la convention de signe représentée sur le schéma 3.11. La profondeur optique est sans dimension et traduit la fraction de rayonnement absorbée le long du trajet ds. En remplaçant $\kappa_\nu \mathrm{ds}$ par $\mathrm{d}\tau_\nu$ dans l'équation 3.36, on obtient :

$$\frac{\mathrm{dI}_\nu}{\mathrm{d}\tau_\nu} = \mathrm{I}_\nu - \mathrm{B}_\nu(\mathrm{T}) \tag{3.42}$$

La solution à cette équation pour un milieu isotherme, c'est-à-dire pour T ne dépendant pas de τ et valant $\mathrm{T_{ex}}$, s'écrit :

$$\mathrm{I}_\nu(\mathrm{s}) = \mathrm{I}_\nu(0)\mathrm{e}^{-\tau_\nu(\mathrm{s})} + \mathrm{B}_\nu(\mathrm{T_{ex}})(1 - \mathrm{e}^{-\tau_\nu(\mathrm{s})}) \tag{3.43}$$

Si $\tau_\nu \gg 1$, on dit que le milieu est **optiquement épais**. Dans ce cas : $\mathrm{I}_\nu = \mathrm{B}_\nu(\mathrm{T_{ex}})$, la fonction source est directement visible et on peut accéder à la température d'excitation du milieu, qui, dans le cas de l'ETL, est égale à la température cinétique. Dans le cas optiquement épais, on ne voit qu'une certaine épaisseur de source, pour laquelle $\tau_\nu \sim 1$. Les régions plus internes sont masquées.

A l'inverse, si τ_ν tend vers zéro, la transmission est parfaite et le milieu est **optiquement mince**. On obtient alors $\mathrm{I}_\nu(\mathrm{s}) = \mathrm{I}_\nu(0) + \tau_\nu \mathrm{B}_\nu(\mathrm{T})$. Si l'on considère que l'émission située en

arrière-plan de la source $I_\nu(0)$ est négligeable par rapport à l'émission de la source elle-même, alors $I_\nu(s) \simeq \tau_\nu B_\nu(T)$. L'intensité est alors reliée dans ce cas à la fois à la fonction source et à la quantité de matière émettrice le long de la ligne de visée. L'observateur peut alors avoir une idée de la quantité de matière présente sur la ligne de visée.

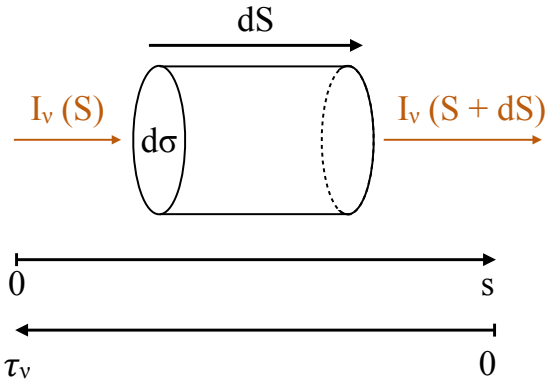


FIGURE 3.11 – Schéma des conventions utilisées pour définir la profondeur optique.

En pratique, l'émission observée vers une source est la somme de l'émission moléculaire et de l'émission de l'arrière-plan. Pour s'affranchir de cette dernière, il suffit d'observer une position dans le ciel où l'on est sûr de n'observer que l'émission d'arrière-plan. La différence entre l'émission de la source et l'émission d'arrière-plan s'écrit alors :

$$\Delta I_\nu = I_\nu - I_\nu(0) \tag{3.44}$$

$$\Delta I_\nu = I_\nu(0) e^{-\tau_\nu(s)} + B_\nu(T_{ex})(1 - e^{-\tau_\nu(s)}) - I_\nu(0) \tag{3.45}$$

$$\Delta I_\nu = [B_\nu(T_{ex}) - B_\nu(T_{bg})][1 - e^{-\tau_\nu(s)}] \tag{3.46}$$

avec $I_\nu(0) = B_\nu(T_{bg})$

En utilisant la température de rayonnement effective (3.40) et la température de rayonnement définie de façon similaire par :

$$T_R = \frac{c^2}{2k\nu^2} \Delta I_\nu \tag{3.47}$$

il est possible de réécrire l'équation 3.46 comme :

$$T_R = f[J_\nu(T_{ex}) - J_\nu(T_{bg})][1 - e^{-\tau_\nu(s)}] \tag{3.48}$$

où le facteur f (*filling factor*) a été ajouté pour tenir compte de la dilution dans le lobe.

3.4.2 Spectroscopie rotationnelle

Dès les années 1930, les premières transitions d'espèces diatomiques comme par exemple CN, CH^+ ou CH, furent observées dans le domaine visible. La première molécule détectée dans le domaine radio fut OH dans les années 60 [Weinreb et al., 1963]. Pendant plusieurs années, les astronomes supposèrent que seules des molécules diatomiques se forment dans le milieu interstellaire, jusqu'à la première détection de NH_3, puis de H_2O et H_2CO. Le monoxide de carbone, CO, fut découvert au milieu des années 70. En 2015, plus de 190 molécules ont été détectées dans l'espace. Voyons par quels mécanismes les molécules émettent du rayonnement et quels sont les principes de la spectroscopie rotationnelle.

Les transitions moléculaires peuvent être rangées dans trois catégories différentes, selon leur énergie [Wilson et al., 2013] :

- Les transitions électroniques, avec des énergies typiques de quelques eV. Ces transitions se trouvent dans le domaine visible ou UV.
- Les transitions vibrationnelles causées par des oscillations de la position des noyaux au sein des molécules, avec des énergies typiques comprises entre 0,1 et 0,01 eV, dans le domaine infrarouge.
- Les transitions rotationnelles causées par la rotation des molécules, avec des énergies de l'ordre de 10^{-3} eV, dans le domaine centimétrique et millimétrique.

Si une molécule possède un moment dipolaire permanent ou induit, c'est-à-dire si le barycentre des charges positives ne coïncide pas avec celui des charges négatives, les transitions rotationnelles sont alors autorisées, avec la règle $\Delta J = \pm 1$. C'est le cas de molécules comme CO, HCN ou CS, qui possèdent des transitions rotationnelles dans le domaine millimétrique et submillimétrique. Les molécules homonucléaires comme H_2, N_2 ou O_2 n'ont pas de moment dipolaire électrique permanent. Toutefois, H_2 possède des transitions quadrupolaires, très faibles mais osbervables. Les transitions dipolaires magnétiques de O_2 sont responsables de l'absorption atmosphérique.

Les transitions rotationnelles, observables par le télescope de 30 m, sont celles qui vont nous intéresser dans le cadre de cette thèse. Les molécules en phase gazeuse sont libres de tourner par rapport à des axes orthogonaux fixes centrés sur le centre de masse de la molécule. J est le nombre quantique de rotation. Chaque molécule a trois moments d'inertie, un par axe : I_A, I_B, I_C, avec par convention $I_C = I_{max}$.

La distribution de ces niveaux d'énergie pour une molécule est déterminée par sa symétrie. Les molécules sont regroupées par type de symétrie :

- Les **rotors sphériques** ont leur trois moments égaux : $I_A = I_B = I_C$. Il s'agit par exemple de CH_4.
- Les **molécules linéaires** sont caractérisées par $I_A \ll I_B = I_C$, ce qui est le cas pour CO, HCN, OCS, SiO et N_2H^+. On considère souvent que $I_A = 0$. Les transitions rotation-

nelles sont alors caractérisées par le seul nombre quantique J = I_B = I_C.

- Les **rotors symétriques** ont deux moments d'inertie égaux. On les divise en oblates si $I_A = I_B < I_C$ et prolates si $I_A < I_B = I_C$ (voir figure 3.12). Dans ce cas, deux nombres quantiques sont nécessaires : J pour le moment angulaire total et K pour le moment angulaire différent des autres. L'ammoniac NH_3 est un exemple de molécule oblate, comme CH_3CN et CH_3CCH.
- Les **rotors asymétriques** ont leur trois moments d'inertie différents. H_2O en fait partie, ainsi que la plupart des grandes molécules, comme par exemple H_2CO.

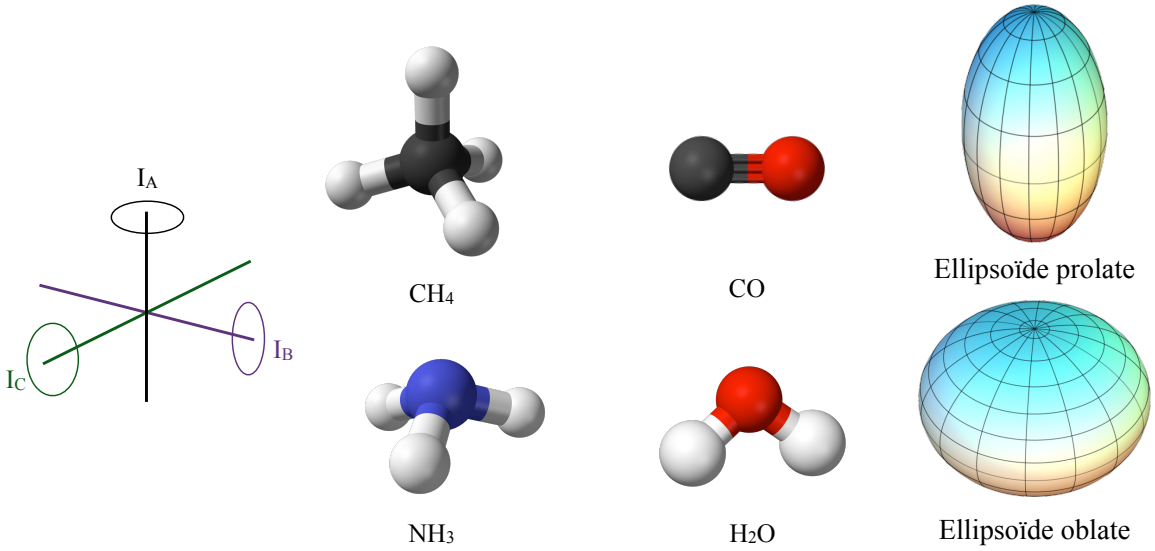


FIGURE 3.12 – **Gauche et centre :** Représentation des axes de rotation et exemples de rotor sphérique : CH_4, de molécule linéaire : CO, de rotor symétrique : NH_3 et de rotor asymétrique : H_2O. **Droite :** Un ellipsoïde est obtenu par rotation d'une ellipse autour de l'un de ses axes. Dans le cas d'un ellisoïde prolate, en forme de ballon de rugby (en haut), l'axe de rotation et l'axe principal sont confondus, contrairement à l'ellipsoïde oblate, en forme de sphère aplatie (en bas).

Les énergies rotationnelles sont calculées de façon théorique en considérant les molécules comme des rotors rigides, puis en ajoutant des termes supplémentaires tenant compte de la distorsion centrifuge, de la structure fine, hyperfine et du couplage de Coriolis. Certains spectres rotationnels sont particulièrement simples. C'est le cas du spectre des molécules diatomiques, les niveaux d'énergie étant régulièrement espacés.

Les spectres rotationnels peuvent être modifiés par différents effets. L'un d'entre eux est appelé **structure hyperfine**. Le moment dipolaire magnétique ou le moment quadrupolaire électrique des noyaux peuvent interagir avec les électrons ou d'autres noyaux. Ce phénomène a pour conséquence de lever la dégénérescence des niveaux d'énergie. Les raies sont alors divisées en de multiples composantes, plus ou moins éloignées les unes des autres. Par exemple, ^{14}N a un spin égal à 1 et donc possède un moment quadrupolaire non nul. Des molécules comme

HCN, HNC et HC_3N auront donc une structure hyperfine, dépendant de la position de ^{14}N dans la molécule. L'effet sera ainsi, par exemple, moins important pour HNC que pour HCN. En général, l'effet est de l'ordre de quelques MHz et diminue avec l'augmentation de J. Pour des noyaux avec un moment dipolaire magnétique comme ^{13}C ou ^{17}O, l'effet est plus faible mais détectable.

3.4.3 Excitation radiative et collisionnelle

La répartition des molécules dans les différents niveaux d'énergie rotationnelle est déterminée par plusieurs processus :

- L'émission spontanée, caractérisée par le coefficient A_{ij}
- L'absorption et l'émission stimulée, caractérisées par B_{ij}
- L'excitation et la désexcitation collisionnelles, caractérisées par la densité de molécules qui peuvent entrer en collision n_{coll} et par C_{ij}.

L'indice ij se réfère à une transition entre le niveau i et j. Pour simplifier, on peut considérer seulement deux niveaux d'énergie : le niveau u (*upper*) et le niveau l (*lower*), comme représenté sur le schéma 3.13. Dans ce cas, la probabilité que la molécule se désexcite spontanément vers l'état l en émettant un photon d'énergie ν_{ul} vaut A_{ul} [s^{-1}]. Inversement, la probabilité qu'une molécule dans l'état l absorbe un photon d'énergie ν_{ul} pour passer dans l'état u est proportionnelle à $R_{lu} = n_l B_{lu} \bar{I} = n_l B_{lu} \int_0^\infty \bar{I}_\nu \Phi_{lu}(\nu) d\nu$. n_l est la densité dans l'état l, $\Phi_{lu}(\nu)$ est le profil de raie et $\bar{I}_\nu$ est l'intégrale de la brillance I_ν sur l'ensemble de la source : $\bar{I}_\nu \equiv \frac{1}{4\pi} \int I_\nu d\Omega$. Dans le cas de l'émission stimulée, un photon incident provoque une désexcitation radiative avec la probabilité $n_u B_{ul} \bar{I}$.

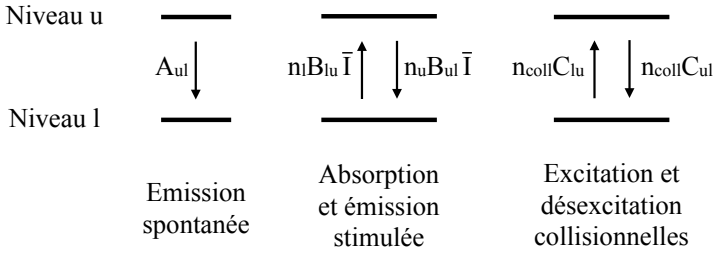


FIGURE 3.13 – Schéma des processus radiatifs et collisionnels, avec $\bar{I} = \int_0^\infty \bar{I}_\nu \Phi_{lu}(\nu) d\nu$

Lorsque le milieu est en équilibre thermodynamique, les différentes populations suivent une distribution de Boltzmann :

$$\frac{n_u}{n_l} \equiv \frac{g_u}{g_l} \exp\left(-\frac{h\nu_{ul}}{k_B T_k}\right) \tag{3.49}$$

avec n_u et n_l les densités de molécules dans les états u et l et g_u, g_l les dégénérescences des niveaux u et l. Pour les transitions rotationnelles des molécules, la dégénérescence d'un niveau d'énergie est donnée par le produit des dégénérescences rotationnelles, g_J et g_K par la dégénérescence de spin g_I : $g_u \equiv g_J g_K g_I$. La dégénérescence g_J est due à la projection du moment

angulaire sur l'axe de quantification spatiale z et vaut $g_J = 2J_u + 1$. La dégénérescence K est associée au nombre quantique K dans les molécules rotors symétriques et asymétriques. Elle est générée par la projection du moment angulaire total sur l'axe de la molécule. g_K vaut 1 pour $K = 0$ et pour tous les rotors asymétriques et les molécules linéaires et vaut 2 pour $K \neq 0$ dans les rotors symétriques [Mangum and Shirley, 2015].

Les coefficients A_{ul}, B_{ul} et B_{lu} sont appelés coefficients d'Einstein et ne dépendent que des propriétés quantiques de la molécule. Ils sont reliés par les relations [Mangum and Shirley, 2015] :

$$g_l B_{lu} = g_u B_{ul} \qquad \text{et} \qquad A_{ul} = \frac{2h\nu_{ul}^3}{c^2} B_{ul} \tag{3.50}$$

Les coefficients C_{ul} et C_{lu} sont également reliés :

$$g_l C_{lu} = g_u C_{ul} \exp\left(-\frac{h\nu_{ul}}{kT_k}\right) \tag{3.51}$$

Dans l'équation 3.49, T_k est la **température cinétique** du milieu, reflétant l'agitation thermique des particules. Lorsque le milieu n'est pas à l'ETL, on définit la **température d'excitation** T_{ex} comme définissant la répartition des populations sous une forme similaire à la distribution de Boltzmann :

$$\frac{n_u}{n_l} = \frac{g_u}{g_l} \exp\left(-\frac{h\nu_{ul}}{kT_{ex}}\right) \tag{3.52}$$

En pratique, T_{ex} est la température mesurée lors de l'étude des transitions moléculaires à l'aide de diagrammes de population (voir partie 3.4.4). S'il est possible d'établir que le milieu est à l'ETL, alors T_{ex} est égale à T_k.

Une transition est dite thermalisée lorsque l'ETL est établi, celui-ci étant gouverné au premier ordre par la densité du milieu [Belloche, 2002]. La densité critique, n_{crit}, différente pour chaque transition, est définie comme la densité minimale nécessaire à l'établissement de l'ETL :

$$n_{crit} = \frac{A_{ul}}{\gamma_{ul}} \tag{3.53}$$

où γ_{ul} est directement relié à la densité de collisionneurs : $C_{ul} = n_{H_2}\gamma_{ul}$. A des densités supérieures à la densité critique, l'intensité de la raie n'est plus directement reliée à la densité car les termes collisionnels l'emportent sur les termes radiatifs dans l'équation d'équilibre statistique. Les populations suivent alors une distribution de Boltzmann.

3.4.4 Détermination de la densité de colonne

Lorsque l'on étudie les molécules dans l'espace, une des principales grandeurs d'intérêt est le nombre de molécules par unité de surface le long de la ligne de visée, appelé **densité de colonne** [Mangum and Shirley, 2015]. On peut la mesurer en estimant le nombre de molécules

dans le niveau d'énergie *up* intégré sur une profondeur ds :

$$\mathrm{N_u} = \int \mathrm{n_u ds} \tag{3.54}$$

En partant de la définition de la profondeur optique (3.41) et en utilisant la définition du coefficient d'absorption κ_ν donnée par Mangum and Shirley [2015] :

$$\kappa_\nu = \frac{\mathrm{c}^2}{8\pi\nu^2}\frac{\mathrm{g_u}}{\mathrm{g_l}}\mathrm{n_l A_{ul}}\left(1 - \frac{\mathrm{g_l n_u}}{\mathrm{g_u n_l}}\right)\phi_\nu \tag{3.55}$$

on obtient :

$$\begin{aligned}
& \tau_\nu = \frac{\mathrm{c}^2}{8\pi\nu^2}\frac{\mathrm{g_u}}{\mathrm{g_l}}\mathrm{A_{ul}}\phi_\nu \int \mathrm{ds'} \mathrm{n_l(s')}\left(1 - \frac{\mathrm{g_l n_u(s')}}{\mathrm{g_u n_l(s')}}\right) \\
\Leftrightarrow \quad & \tau_\nu = \frac{\mathrm{c}^2}{8\pi\nu^2}\frac{\mathrm{g_u}}{\mathrm{g_l}}\mathrm{A_{ul}}\phi_\nu \mathrm{N_l}\left(1 - \frac{\mathrm{g_l N_u}}{\mathrm{g_u N_l}}\right) \\
\Leftrightarrow \quad & \tau_\nu = \frac{\mathrm{c}^2}{8\pi\nu^2}\mathrm{A_{ul}}\phi_\nu \left(\frac{\mathrm{g_u}}{\mathrm{g_l}}\mathrm{N_l} - \mathrm{N_u}\right) \\
\Leftrightarrow \quad & \tau_\nu = \frac{\mathrm{c}^2}{8\pi\nu^2}\mathrm{A_{ul}}\phi_\nu \mathrm{N_u}\left(\frac{\mathrm{g_u N_l}}{\mathrm{g_l N_u}} - 1\right)
\end{aligned}$$

En utilisant l'équation 3.49, l'équation devient :

$$\tau_\nu = \frac{\mathrm{c}^2}{8\pi\nu^2}\mathrm{A_{ul}}\phi_\nu \mathrm{N_u}\left[\exp\left(\frac{\mathrm{h}\nu_{\mathrm{ul}}}{\mathrm{kT_k}}\right) - 1\right] \tag{3.56}$$

Puis en intégrant sur le profil de la raie, tel que $\int \phi_\nu \mathrm{d}\nu = 1$:

$$\int \tau_\nu \mathrm{d}\nu = \frac{\mathrm{c}^2}{8\pi\nu^2}\mathrm{A_{ul}}\left[\exp\left(\frac{\mathrm{h}\nu_{\mathrm{ul}}}{\mathrm{kT_k}}\right) - 1\right]\mathrm{N_u} \tag{3.57}$$

Soit :

$$\mathrm{N_u} = \frac{8\pi\nu^2}{\mathrm{c}^2\mathrm{A_{ul}}}\left[\exp\left(\frac{\mathrm{h}\nu_{\mathrm{ul}}}{\mathrm{kT_k}}\right) - 1\right]^{-1}\int \tau_\nu \mathrm{d}\nu \tag{3.58}$$

Cette dernière équation nous donne le nombre de molécules dans l'état d'énergie u, mais nous sommes intéressés par $\mathrm{N_{tot}}$, la population totale dans l'ensemble des niveaux d'énergie. En supposant que le système est à l'équilibre défini par la température d'excitation $\mathrm{T_{ex}}$, il est alors possible de relier $\mathrm{N_u}$ et $\mathrm{N_{tot}}$:

$$\frac{\mathrm{N_{tot}}}{\mathrm{N_u}} = \frac{\mathrm{Q_{rot}}}{\mathrm{g_u}}\exp\left(\frac{\mathrm{E_u}}{\mathrm{kT_{ex}}}\right) \tag{3.59}$$

où g_u est la dégénérescence du niveau u et Q_{rot} est la fonction de partition rotationnelle, qui s'exprime comme :

$$Q_{rot} = \sum_i g_i \exp\left(-\frac{E_i}{kT}\right) \tag{3.60}$$

Soit :

$$N_{tot} = \frac{Q_{rot}}{g_u}\frac{8\pi\nu^2}{c^2 A_{ul}}\exp\left(\frac{E_u}{kT_{ex}}\right)\left[\exp\left(\frac{h\nu_{ul}}{kT_{ex}}\right)-1\right]^{-1}\int \tau_\nu d\nu \tag{3.61}$$

Dans le cas optiquement mince ($\tau \ll 1$) et avec l'approximation $h\nu \ll kT$, l'équation 3.48 se simplifie en :

$$T_R = f[J_\nu(T_{ex}) - J_\nu(T_{bg})]\tau_\nu(s) \tag{3.62}$$

et l'équation de la densité de colonne 3.61 se transforme en :

$$N_{tot} = \frac{Q_{rot}}{g_u}\frac{8\pi\nu^2}{c^2 A_{ul}}\exp\left(\frac{E_u}{kT_{ex}}\right)\left[\exp\left(\frac{h\nu_{ul}}{kT_{ex}}\right)-1\right]^{-1}\int \frac{T_R d\nu}{f[J_\nu(T_{ex}) - J_\nu(T_{bg})]} \tag{3.63}$$

E Le terme $J_\nu(T_{ex}) - J_\nu(T_{bg})$ varie peu avec la fréquence sur la largeur d'une raie, on peut donc le sortir de l'intégrale. D'autre part, le terme entre crochets se simplifie grâce au développement limité $e^{h\nu/kT} \sim 1 + \frac{h\nu}{kT}$ pour $h\nu \ll kT$:

$$N_{tot} = \frac{Q_{rot}}{g_u}\frac{8\pi\nu^2}{c^2 A_{ul}}\exp\left(\frac{E_u}{kT_{ex}}\right)\left[\frac{kT_{ex}}{h\nu_{ul}}\right]\frac{1}{[J_\nu(T_{ex}) - J_\nu(T_{bg})]}\int \frac{T_R d\nu}{f} \tag{3.64}$$

Si le rayonnement d'arrière-plan est négligeable, le terme $J_\nu(T_{bg})$ disparaît. Cette relation nous donne donc accès à la densité de colonne totale d'une molécule par une simple intégration sur le profil de raie.

Néanmoins, une seule transition ne permet pas de mesurer T_{ex}. On utilise donc un ajustement global sur un ensemble de transitions en traçant $\ln(N_u/g_u)$ en fonction de E_u/k sous la forme d'un **diagramme de population** [Goldsmith and Langer, 1999] :

$$\ln\frac{N_u}{g_u} = \ln N_{tot} - \ln Q(T_{ex}) - \frac{E_u}{kT_{ex}} \quad \text{avec} \quad N_u = W \times \frac{8\pi k\nu^2}{hc^3 A_{ul}} \times C_\tau \tag{3.65}$$

où W représente l'aire intégrée de la raie et C_τ le facteur de correction de la profondeur optique $C_\tau = \tau/(1 - e^{-\tau})$. La figure 3.14 donne des exemples de diagrammes de population. Les diagrammes de population sont utiles pour déterminer si l'émission est optiquement mince ou non et pour vérifier que les populations sont bien à l'ETL. Si c'est le cas, le diagramme prend la forme d'une droite et la pente donne alors accès à la température d'excitation T_{ex} et l'ordonnée à l'origine à la densité de colonne totale N_{tot}.

En résumé, pour utiliser un diagramme de population, l'ETL doit être établi, le rayonnement d'arrière-plan doit être négligeable et les raies doivent être optiquement minces. Si elles ne le

sont pas, il convient de corriger la relation par C_τ.

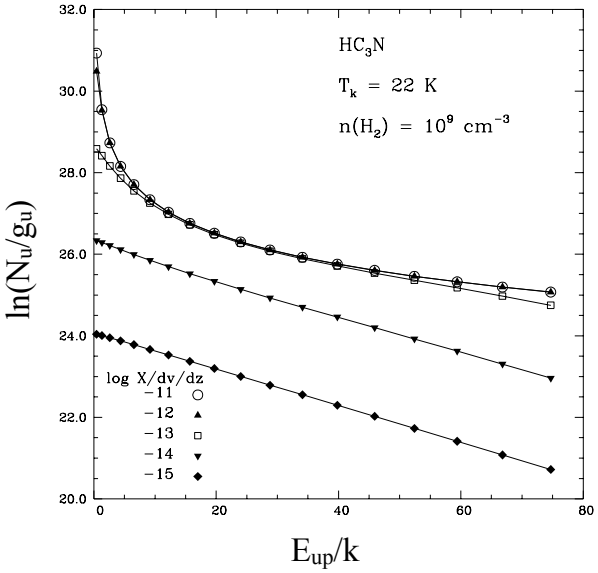


FIGURE 3.14 – Figure adaptée de Goldsmith and Langer [1999], présentant le diagramme de population de HC_3N pour différentes abondances fractionnelles par unité de gradient de vitesse, indiquées par log X/dv/dz. Cette grandeur donne la profondeur optique du milieu. Les courbes les plus hautes ont l'abondance fractionnelle la plus élevée. Lorsqu'une transition devient optiquement épaisse, N_u/g_u ne peut plus augmenter, même si l'on continue d'augmenter l'abondance fractionnelle. L'opacité est maximale pour les points situées autour de E_{up}/k = 20 K, qui sont donc "bloqués" tandis que les transitions de plus haute et de plus basse E_{up} ont une opacité plus faible, N_u/g_u peut alors encore augmenter avec l'abondance fractionnelle, ce qui déforme la droite.

Lorsque les diagrammes de population indiquent des températures particulièrement basses, inférieures à 10 K, il convient de quantifier l'influence de l'émission d'arrière-plan, incluant le rayonnement de fond cosmologique et l'émission continuum de la source. Nous avons vu que la solution de l'équation de transfert (équation 3.46) peut se simplifier dans le cas optiquement mince :

$$\Delta I_\nu = \tau_\nu [B_\nu(T_{ex}) - B_\nu(T_{BG})] \tag{3.66}$$

avec $B_\nu(T_{BG})$ l'émission d'arrière plan (*background emission*). Si celle-ci prend la forme d'une fonction de Planck, la relation se transforme alors en :

$$\Delta I_\nu = \tau_\nu \left(\frac{h\nu/k}{e^{h\nu/kT} - 1} - \frac{h\nu/k}{e^{h\nu/kT_{BG}} - 1} \right) \tag{3.67}$$

En introduisant l'expression de τ (équation 3.56), on obtient :

$$\tau I_\nu^{source} = \frac{c^2}{8\pi\nu^2} A_{ul} \Phi_\nu N_u \frac{h\nu}{k} \tag{3.68}$$

et

$$\tau I_\nu^{BG} = \frac{c^2}{8\pi\nu^2} A_{ul} \Phi_\nu N_u \left(\frac{e^{h\nu/kT} - 1}{e^{h\nu/kT_{BG}} - 1} \right) \frac{h\nu}{k} \tag{3.69}$$

Or, tracer un diagramme de population revient à tracer N_u / g_u en fonction de E_{up}/k, comme l'indique l'équation 3.65. L'erreur sur I_ν se répercute alors directement sur N_u, c'est-à-dire sur l'ordonnée des points du diagramme de population. On peut estimer l'erreur x commise avec la relation :

$$\frac{x}{100} = \frac{I_\nu^{source} - I_\nu^{BG}}{I_\nu^{source}} = 1 - \frac{I_\nu^{BG}}{I_\nu^{source}} \tag{3.70}$$

Soit :

$$\frac{x}{100} = \frac{e^{h\nu/kT} - 1}{e^{h\nu/kT_{BG}} - 1} \tag{3.71}$$

Cette erreur est de l'ordre de 13% pour une température d'excitation de 10 K, avec un rayonnement de fond cosmologique à 2,73 K et à une fréquence de 100 GHz, mais elle atteint 33% si la température d'excitation vaut 5 K. Plus la fréquence est élevée, plus l'erreur est faible. A 350 GHz, l'erreur est inférieure à 1% pour 10 K et un rayonnement de fond de 2,73 K.

3.5 Le logiciel CASSIS

L'analyse de spectres de molécules a constitué une grande partie du travail de cette thèse. Je me suis appuyée pour cela sur le logiciel CASSIS [9], développé par l'IRAP [10]. Ce logiciel dispose de plusieurs outils d'analyse. Je présente dans cette partie ceux dont je me suis servie durant ma thèse.

3.5.1 Analyse de spectres

Premièrement, CASSIS permet de visualiser et de naviguer facilement dans un ou plusieurs spectres. Il est possible d'afficher la position des raies d'une molécule, pour les gammes voulues de fréquence, d'énergie des niveaux E_{up} et de probabilité A_{ij}. CASSIS utilise pour cela les bases de données spectroscopiques en ligne CDMS [11], JPL [12], ainsi que des entrées ajoutées par C. Vastel, concernant par exemple les versions ortho et para d'une même molécule. Il est également possible d'afficher l'ensemble des transitions moléculaires d'un des catalogues, de plusieurs catalogues simultanément, ou d'un catalogue créé par l'utilisateur.

Un outil simple permet de réaliser des opérations sur les spectres : soustraction, addition, division, multiplication par une constante, changement de v_{LSR} [13], passage de T_A à T_{mb}, etc. Les efficacités du télescope utilisé pour les observations sont prises en compte par un fichier

9. Voir http ://cassis.irap.omp.eu/
10. Institut de Recherche en Astrophysique et Planétologie, http ://www.irap.omp.eu/
11. Voir http ://www.astro.uni-koeln.de/cgi-bin/cdmssearch
12. http ://spec.jpl.nasa.gov/
13. La vitesse v_{LSR} est la vitesse de l'objet par rapport au référentiel local au repos (*local standard of rest*), suivant le mouvement moyen de la matière dans la Voie Lactée au voisinage du Soleil.

donnant le rapport B_{eff}/F_{eff} pour toute la plage de fréquence observable. Pour le télescope de 30 m, ces valeurs étaient données tous les 5 GHz. J'ai réalisé une interpolation des valeurs données par l'IRAM pour avoir des valeurs tous les 1 GHz.

3.5.2 Identification des raies

Un deuxième outil permet d'accélérer l'identification des raies, en affichant la position des raies attendues sur l'ensemble du spectre. La figure 3.15 illustre le fonctionnement de cet outil.

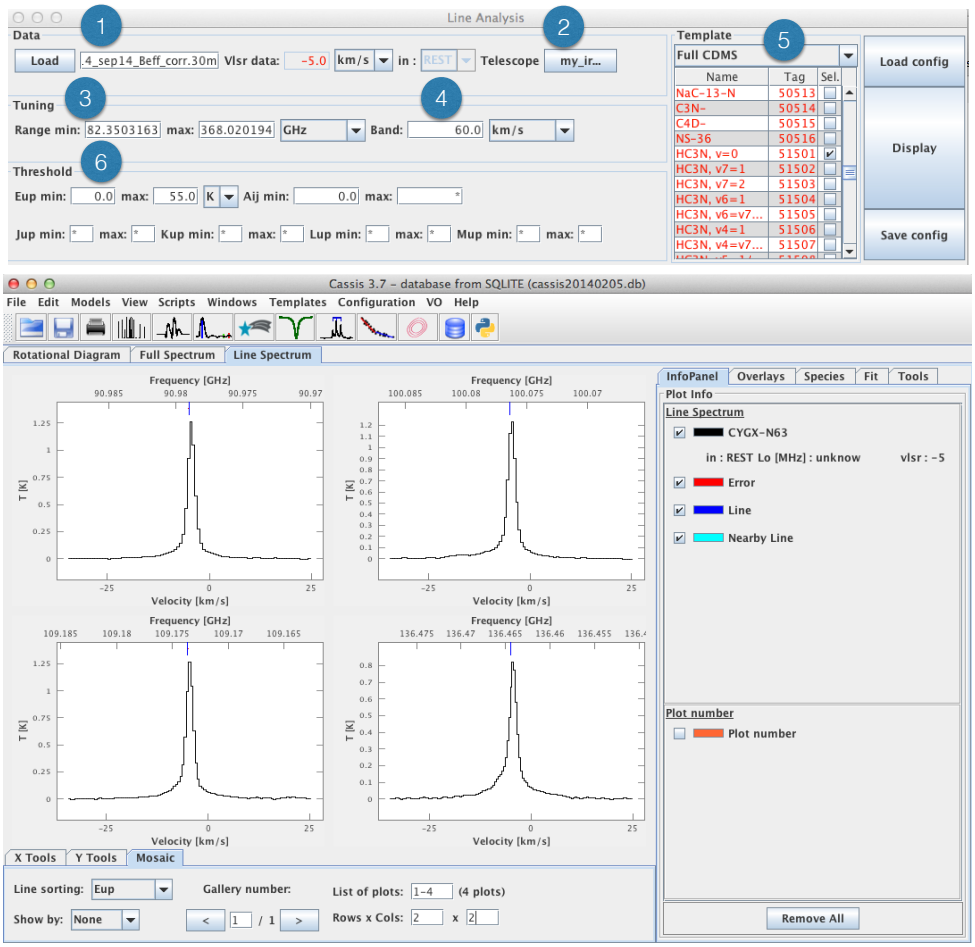


FIGURE 3.15 – Mode identification des raies de CASSIS. **Haut :** L'utilisateur charge son spectre (1), sélectionne le télescope (2), peut choisir de n'observer qu'une partie du spectre (3), sélectionne la largeur de la fenêtre encadrant les raies (4). Ensuite, il sélectionne la ou les molécules voulues dans un des catalogues (5) puis peut définir des seuils pour E_{up}, A_{ij} ou les nombres quantiques J, K, L et M (6). **Bas :** CASSIS affiche les raies demandées. Elles peuvent être rangées par fréquence, E_{up} ou A_{ij} croissants ou décroissants.

Ma technique d'analyse est la suivante. Pour les molécules aux transitions abondantes, comme les molécules organiques complexes, je définis l'énergie du niveau supérieur E_{up} entre 0 et 50 K, voire moins si les raies sont vraiment très nombreuses. CASSIS affiche alors tous les emplacements potentiels des raies. J'ordonne les raies par A_{ij} croissant, qui représente la

probabilité de transition entre le niveau i et le niveau j. Les dernières raies sont alors généralement noyées dans le bruit. J'augmente alors A_{ij}^{min} progressivement, jusqu'à ce qu'il n'y ait plus que des raies visibles. Je réalise alors un ajustement de la ligne de base autour de chaque raie (sur des fenêtres généralement de 60 à 100 km/s de large) et un ajustement gaussien sur chaque raie (avec une ou plusieurs gaussiennes selon les cas). Tous les paramètres des raies et des ajustements sont alors enregistrés dans un fichier. Je recommence alors le processus pour E_{up} entre 50 et 100 K. Si les molécules présentent peu de transitions, je règle E_{up}^{max} à une très grande valeur et je range les raies par E_{up} décroissant. Je diminue alors E_{up}^{max} puis j'ajuste A_{ij} pour n'afficher que les raies visibles.

Une fois les molécules usuelles identifiées dans le spectre, CASSIS permet la création de son propre catalogue répertoriant l'ensemble des transitions de ces molécules. Je peux alors afficher l'ensemble du spectre accompagné des emplacements des raies déjà identifiées. Je parcours le spectre dans son ensemble pour repérer les raies non encore identifiées. Pour chaque raie inconnue, je vérifie qu'elle n'est pas une raie fantôme provenant de la bande complémentaire, mal rejetée. Je cherche ensuite en affichant l'ensemble des catalogues quelle pourrait être la molécule la plus probable : celle ayant une vitesse V_{LSR} compatible avec celle de la source (-4,5 $\pm$ 2 km/s), avec une énergie de transition raisonnable pour ma source (inférieure à 800 K), une probabilité non négligeable (A_{ij} supérieure à 10^{-8}). Une fois la ou les molécules candidates retenues selon ces critères, je recherche les autres transitions dans l'ensemble du spectre, selon la méthode exposée ci-dessus. Si toutes les transitions de E_{up} inférieure ou égale et de probabilité A_{ij} supérieure ou égale sont observées, la détection est confirmée. Il peut arriver qu'une raie ne soit pas détectée alors que toutes les autres le sont lorsque le bruit est particulièrement élevé à cet endroit du spectre. Ce cas est la seule exception acceptée. Si une ou plusieurs raies manquent sans explication, la détection est mise en doute ou infirmée. Nous verrons au chapitre 6 que dans le cas de la protoétoile étudiée, le pourcentage de raies mélangées est particulièrement faible. Ces raies ont alors été simplement exclues de l'analyse.

3.5.3 Diagrammes de population

Le logiciel CASSIS permet de tracer des diagrammes de population suivant la relation 3.65. Concrètement, lors de l'identification des raies, l'utilisateur réalise un ajustement (gaussien, lorentzien, fonction de Voigt ou sinus cardinal), à une ou plusieurs composantes, sur chacune des raies de la molécule. Il dispose au choix de deux algorithmes de minimisation : celui d'amoeba (méthode de Nelder-Mead) ou celui de Levenberg-Marquardt (méthode des moindres carrés). Si nécessaire, un ajustement de la ligne de base peut être réalisé. Les paramètres de l'ajustement, dont l'aire intégrée de la raie, sont stockés dans un fichier, qui est ensuite lisible par l'outil diagramme de population de CASSIS.

La taille de la source est donnée par l'utilisateur, permettant de corriger de la dilution dans le lobe. CASSIS dispose de sa propre bibliothèque de fonctions de partition et peut alors tracer

le diagramme de population de la molécule étudiée. Les raies sont supposées être optiquement minces. L'utilisateur réalise une sélection des points à considérer et CASSIS effectue un ajustement linéaire. La température d'excitation et la densité de colonne sont alors calculées et affichées.

3.5.4 Modélisation ETL

Lorsque la température d'excitation et la densité de colonne ne sont pas bien contraints par le diagramme de population, j'ai choisi de modéliser directement les raies. CASSIS dispose d'un script Jython qui permet d'ajuster un ensemble de paramètres pour créer un spectre synthétique le plus proche possible du spectre réel. L'ETL est supposé être établi. Les paramètres ajustables sont la densité de colonne, la température d'excitation, la largeur de raie, la taille de source et la vitesse LSR (*local standard of rest*) de la source. En pratique, seuls les deux premiers paramètres sont laissés libres dans une gamme fixée. Le nombre de valeurs à prendre dans la gamme est choisi par l'utilisateur et ces valeurs sont régulièrement espacées.

Pour mesurer l'écart entre le spectre synthétique et le spectre réel, CASSIS calcule alors la valeur de χ^2 selon la formule suivante :

$$\chi_i^2 = \sum_{\mathrm{j=1}}^{\mathrm{N}} \frac{(\mathrm{I_{obs,j}} - \mathrm{I_{model,j}})^2}{\mathrm{rms_i^2} + \mathrm{cal_i^2}(\mathrm{I_{obs,j}} - \mathrm{I_{cont,j}})^2} \tag{3.72}$$

où $\mathrm{I_{obs}}$ et $\mathrm{I_{model}}$ sont respectivement les intensités observées et modélisées. La somme sur j correspond à une somme sur le nombre de points des spectres. $\mathrm{rms_i}$ est la valeur du bruit dans le spectre i, mesurée à la main en réalisant un ajustement polynomial de la ligne de base autour de chaque raie. $\mathrm{I_{cont}}$ est l'intensité du continuum, nulle dans notre cas, car le continuum est soustrait des spectres avant l'analyse. cal_i est l'incertitude de calibration sur le spectre i, typiquement une valeur fixe selon la bande observée : 10% à 3mm, 15% à 2mm et 20% à 1mm. N est le nombre total de points du spectre i.

Le χ^2 réduit est ensuite calculé :

$$\chi_{\mathrm{red}}^2 = \frac{1}{\mathrm{N_{spectra}}} \sum_{\mathrm{i=1}}^{\mathrm{N_{spectra}}} \frac{\chi_i^2}{\frac{\mathrm{N}}{\mathrm{N_{ind}}} - \mathrm{dof}} \tag{3.73}$$

avec $\mathrm{N_{spectra}}$ le nombre de spectres, $\mathrm{N_{ind}}$ le nombre de points indépendants et dof (*degrees of freedom*) le nombre de degrés de liberté.

CHAPITRE 4

FRAGMENTATION ET RECHERCHE DE DISQUES AUTOUR DES PROTOÉTOILES MASSIVES DU CYGNE

Les étoiles massives sont rares et leurs phases précoces de courte durée. Les précurseurs d'étoiles massives sont donc difficiles à observer. Des relevés systématiques à grande échelle ont été entrepris pour les identifier. Le satellite IRAS a réalisé en 1983 une cartographie quasi-complète du ciel dans les bandes infrarouges à 12, 25, 60 et 100 μm, révélant des protoétoiles massives plutôt évoluées, très lumineuses en infrarouge (par exemple Molinari et al. [2000] et Sridharan et al. [2005]). Toutefois, les protoétoiles de classe 0 les plus jeunes et les cœurs préstellaires sont moins brillants en IR et difficiles à repérer à grandes distances galactiques. Ces sources peuvent être par contre détectées via l'émission du continuum en infrarouge lointain et submillimétrique, ainsi que via des traceurs moléculaires de haute densité. Motte et al. [2007] ont alors choisi d'effectuer un nouveau relevé, dans la région du Cygne, utilisant l'émission de la poussière à 1,2 mm ainsi que l'émission de la raie de SiO (2-1) connue pour être un traceur d'éjection de matière. Ces auteurs ont alors pu montrer que les protoétoiles massives n'émettant pas en infrarouge existent effectivement et ont estimé de façon statistique la durée de vie des objets massifs de classe 0 à 3.10^4 ans, comparable à celle des objets de faible masse.

Les 6 cœurs denses les plus massifs de ce relevé ont été observés à haute résolution spatiale (1500 ua) par Bontemps et al. [2010], grâce à l'interféromètre du Plateau de Bure à 1 et 3 mm. Toutes les sources, sauf CygX-N63, sont sous-fragmentées. Au total, 23 fragments denses et compacts sont candidats à être des protoétoiles massives individuelles. A plus petite échelle, ces objets pourraient être à nouveau sous-fragmentés. Pour le vérifier, de nouvelles observations ont été effectuées avec le Plateau de Bure vers 5 de ces sources : CygX-N63, CygX-N53 MM1 et MM2, CygX-N3 MM1 et MM2, à une résolution spatiale de 540 ua.

D'autre part, seules quelques rares observations de disques autour de protoétoiles massives ont été publiées (Patel et al. [2005], Jiang et al. [2005], Kraus et al. [2010]). Ces détections et les caractéristiques potentielles de ces disques sont encore débattues. Les disques circumstellaires et l'accrétion sont des ingrédients essentiels pour la formation des étoiles de faible masse. Des preuves observationnelles claires sont nécessaires pour déterminer si les mêmes mécanismes sont en jeu pour la formation des étoiles massives. Ces observations à haute résolution angulaire ont donc pour second objectif la recherche de disque.

Enfin, l'objectif de cette thèse étant l'étude spectroscopique détaillée des phases précoces de la formation des étoiles massives, le travail présenté dans ce chapitre nous a permis de sélectionner la source la plus adaptée à notre étude : CygX-N63.

4.1 Les cœurs massifs du Cygne-X

Le nom Cygnus-X a d'abord été attribué à la source radio diffuse découverte dans la constellation du Cygne par Piddington and Minnett [1952] pour la distinguer d'une autre source radio bien connue, la radiogalaxie Cygnus-A. Ils identifièrent l'émission de Cygnus-X comme provenant de nuages de gaz ionisé. Le Cygne-X correspond en fait à l'émission radio due au gaz ionisé par les étoiles massives jeunes associées à un gigantesque nuage moléculaire, d'environ 200 pc de diamètre et contenant 5×10^6 $M_\odot$ [Schneider et al., 2006], ce qui en fait l'un des plus massifs de la galaxie. Ce complexe est situé à seulement 1,4 kpc de nous [Rygl et al., 2012]. Cette distance est faible à l'échelle de la galaxie, le centre galactique étant situé à 8 kpc de nous, à titre de comparaison. C'est l'une des régions de formation stellaire les plus riches de la galaxie. Elle contient au moins 800 régions HII distinctes, des étoiles Wolf-Rayet (un type d'étoiles massives évoluées) et environ 2600 étoiles de type O et B. L'association Cyg-OB2, au centre du complexe moléculaire, est l'une des associations OB les plus riches de la galaxie avec une centaine d'étoiles de type O. La figure 4.1 présente la position de la région du Cygne dans la galaxie ainsi que la position du Cygne-X au sein du Cygne. La figure 4.2 représente le Cygne-X vu par Herschel.

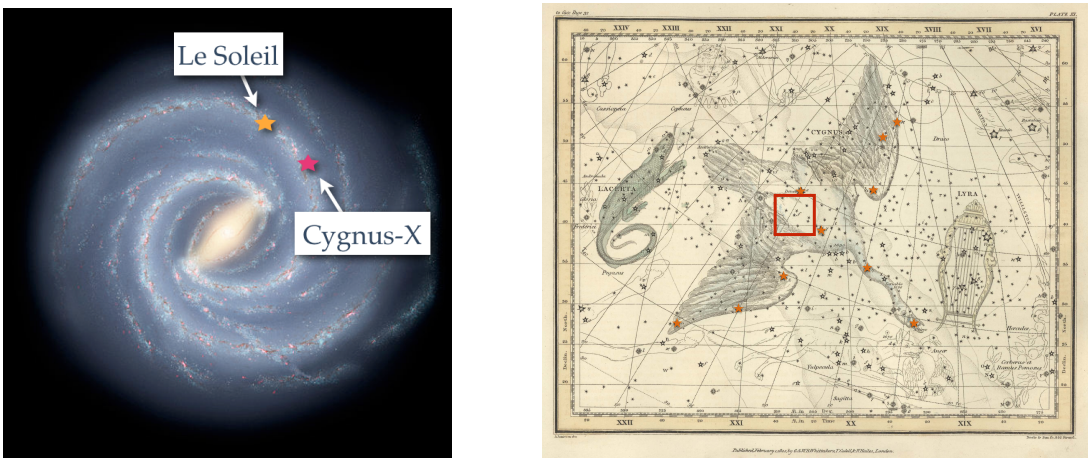


FIGURE 4.1 – Position approximative de la région du Cygne dans la galaxie (image adaptée de Wikipedia) et position du Cygne-X dans la région du Cygne sur une carte du ciel dessinée par Alexander Jamieson dans son atlas stellaire de 1822.

CygX-N53 fait partie du filament DR21, qui est la région la plus massive et dense de Cygnus-X (voir figure 4.2), à proximité de la source infrarouge lointain FIR3 [Chandler et al., 1993]. N53 contient deux fragments, contenant à eux deux 55% de la masse du cœur dense. A l'ouest, CygX-N3 est située près de DR17, qui est une région HII formée par deux amas

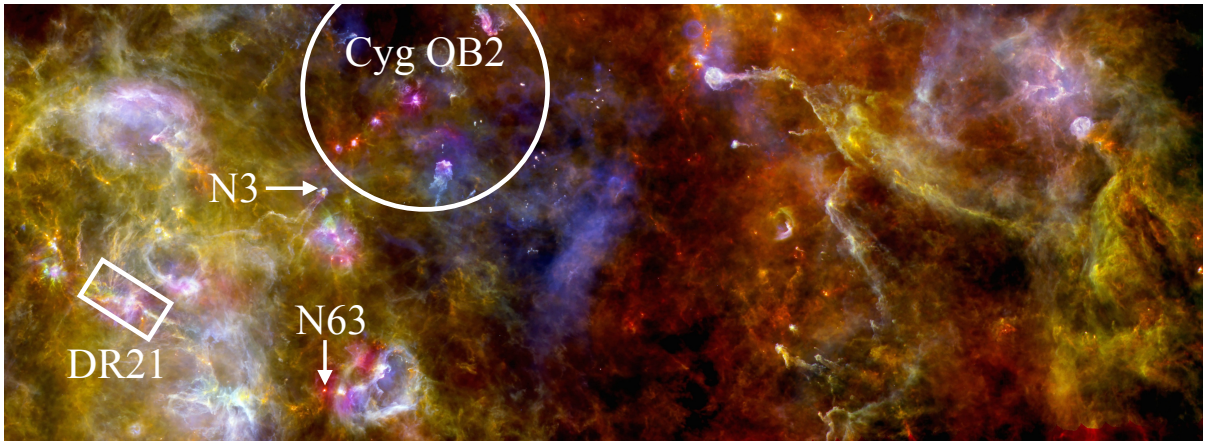


FIGURE 4.2 – La région du Cygne-X, figurant le complexe OB2, le filament DR21 et N63. Cette région a une taille de plusieurs centaines d'années-lumière. Différentes longueurs d'onde sont représentées : 70 μm (bleu), 160 μm (vert) et 250 μm (rouge). Le nuage apparaît comme extrêmement structuré et les filaments sont omniprésents [Source : ESA/PACS & SPIRE consortium, HOBYS key program].

d'étoiles OB. Ces amas donnent une forme de pilier au nuage contenant CygX-N3, celle-ci étant située à l'extrémité du pilier [Bontemps et al., 2010]. Cette source contient trois fragments alignés et régulièrement espacés, qui représentent 20% de la masse totale du cœur dense. Seuls les deux fragments les plus massifs, MM1 et MM2, seront étudiés. CygX-N63 est la source la plus isolée, au sud de DR21, dans le filament DR22-DR23 [Schneider et al., 2006] et est la seule dans un cœur dense qui ne soit pas fragmenté. Les fragments N3-MM1, N3-MM2, N53-MM1 et N63 possèdent des flots bipolaires [Duarte-Cabral et al., 2013, Csengeri et al., 2011a]. La carte 4.3 présente la position des différentes sources, ainsi que les observations à différentes résolutions.

4.2 Observations au Plateau de Bure

Nous avons utilisé l'interféromètre du Plateau de Bure pour observer l'émission de la poussière des fragments massifs du Cygne en configuration AB à 1,3 mm, pour atteindre une résolution de 540 ua (observations v060). Le tableau 4.1 présente les paramètres de ces observations. De plus, l'émission de 8 raies moléculaires a été observée à haute résolution spectrale (0,6 MHz) : ^{13}CS, CH_3CHO, deux raies de méthanol, CO, D_2CO, N_2D^+ et OCS. Nous avons également utilisé WIDEX pour couvrir une bande de 4 GHz et observer d'autres transitions moléculaires. Les paramètres des transitions sont détaillés dans le tableau 4.2. La taille du lobe à 230 GHz en configuration AB et pour une déclinaison de 41-42° vaut 0,46″×0,39″.

4.2.1 Des fragments individuels super Jeans

La figure 4.4 présente l'observation de l'émission de la poussière à 1,3 mm vers les 5 fragments présentés précédemment. A cette résolution de 540 ua, aucun fragment n'est sous-divisé.

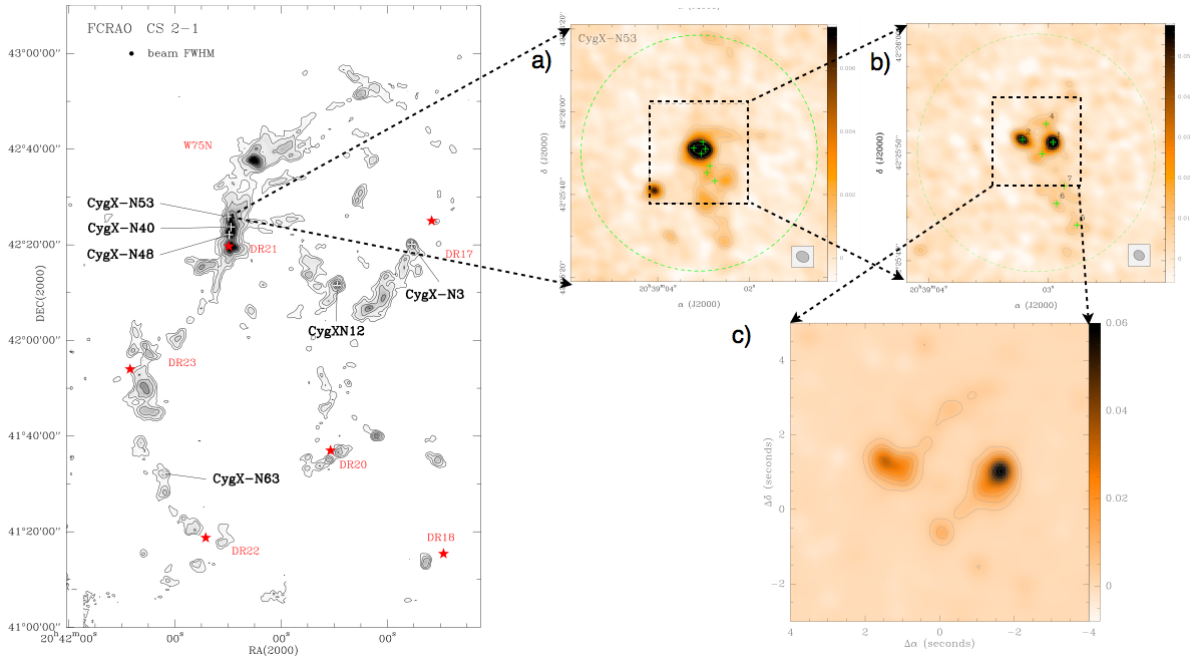


FIGURE 4.3 – Gauche : Carte de la partie nord du Cygne-X indiquant la position des 6 cœurs denses massifs étudiés par Bontemps et al. [2010]. Les contours montrent l'émission intégrée de CS (2-1) [Schneider et al., 2010]. Panel a : Carte du continuum de CygX-N53 à 3,5 mm obtenue avec le PdBI en configuration CD. Panel b : Carte du continuum à 1,3 mm en configuration CD. Panel c : Carte du continuum à 1,3 mm en configuration AB.

TABLE 4.1 – Paramètres des observations.

Source	Centre de phase (J2000)		Lobe synthétique
	R.A.	Dec.	[arcsec × arcsec]
CygX-N63	$20^{h}\ 40^{m}\ 05.2^{s}$	$41°\ 32'\ 12.0''$	0.54 × 0.45
CygX-N53	$20^{h}\ 39^{m}\ 03.1^{s}$	$42°\ 25'\ 50.0''$	0.49 × 0.45
CygX-N3	$20^{h}\ 35^{m}\ 34.1^{s}$	$42°\ 20'\ 05.0''$	0.53 × 0.48

L'observation de l'émission moléculaire, détaillée au chapitre 5 pour N63, est une confirmation supplémentaire que les cœurs sont monolithiques. Dans chaque source qui en possède, le flot bipolaire pointe également vers un unique fragment dans chaque cœur [Duarte-Cabral et al., 2013]. Les tailles des fragments sont de l'ordre de 1000 à 2000 ua, comparables à celles des fragments de faible masse.

La masse des fragments a été déterminée par Duarte-Cabral et al. [2013] en construisant la distribution spectrale d'énergie, utilisant l'émission entre 24 μm et 3,5 mm (voir la figure 4.5 pour le cas de N63). L'émission à 24 μm a été mesurée par Spitzer MIPS, l'émission à 70, 160, 250, 350 et 500 μm par les instruments du satellite Herschel PACS et SPIRE, l'émission à 1,2 mm par MAMBO et l'émission à 1,3 et 3,5 mm par le PdBI. L'extraction des flux s'est faite avec le code *getsources*, développé initialement pour les relevés en IR lointain de Herschel. Ce code permet de décomposer les images observées en images à différentes échelles spatiales,

TABLE 4.2 – Raies observées au PdBI à 1 mm. La transition de méthanol à 229,75 GHz sera notée transition 1 et la transition à 230,02 GHz transition 2.

TAG	Transition	Fréquence (MHz)	E_{up} (K)
Unités à haute résolution spectrale			
28508	DNC(3 - 2)	228910.48	21.97
32003	$CH_3OH(8_{-1,0} - 7_{0,0})$	229758.76	89.10
32504	CH_3OH $(3_{-2,0} - 4_{-1,0})$	230027.05	39.83
28001	CO(2 - 1)	230538.00	16.60
60001	OCS(19 - 18)	231060.98	110.90
45501	^{13}CS (5 - 4)	231221.00	33.29
30509	$N_2D^+(3 - 2)$	231321.83	22.20
32592	o-D_2CO $(4_{0,4} - 3_{0,3})$	231410.23	27.88
WIDEX			
60003	$CH_3OCHO(18_{5,13,2} - 17_{5,12,2})$	228628.88	118.79
60003	$CH_3OCHO(18_{5,13,0} - 17_{5,12,0})$	228651.40	118.78
60003	$CH_3OCHO(18_{3,15,2} - 17_{3,14,2})$	229405.02	110.74
60003	$CH_3OCHO(18_{3,15,0} - 17_{3,14,0})$	229420.34	110.73
32504	$CH_3OH(15_{4,0} - 16_{3,0})$	229589.06	374.44
32504	CH_3OH $(10_{2,0} - 9_{3,0})$	231281.11	165.35
33004	CH_2DOH $(11_{2,9,0} - 11_{1,10,0})$	228231.68	158.54
33004	$CH_2DOH(8_{2,7,0} - 7_{1,7,2})$	228436.59	93.31
46005	$HCOOH(10_{2,8} - 9_{2,7})$	228544.17	72.62

dans lesquelles il est alors plus facile de retirer les contributions du bruit et de l'arrière-plan (voir Men'shchikov et al. [2012] pour plus d'informations).

Tous ces fragments sont massifs, avec des masses allant de 12 à 44 $M_\odot$. Toutes les sources, sauf N53-MM2, possèdent des flots bipolaires indiquant la présence d'une protoétoile centrale. La figure 4.6 présente une observation du flot de N63 par Duarte-Cabral et al. [2013]. Les propriétés de ces flots ainsi que la position de ces sources dans le diagramme M_{env} - L_{bol} [Duarte-Cabral et al., 2013] montrent que toutes ces sources, sauf N53-MM2, sont des sources massives de classe 0. Les masses de ces sources sont toutes *super Jeans*, c'est-à-dire supérieures aux masses de Jeans locales, qui vont de 0,5 à 1 $M_\odot$ [Bontemps et al., 2010]. Ces 6 fragments sont donc bien des précurseurs individuels d'étoiles massives, avec des masses *super Jeans*. Le tableau 4.3 regroupe leurs propriétés.

L'observation de N3 à cette résolution révèle un nouveau fragment de faible masse. N3 présente alors 5 cœurs alignés et régulièrement espacés d'environ 3500 ua. Cette disposition particulière suggère que ces fragments sont situés dans un filament ou un feuillet. Les vitesses de chacune des sources sont légèrement différentes les unes des autres, ce qui suggère qu'elles forment des puits de potentiel différents.

4.2.2 Mise en évidence d'une rotation différentielle

L'émission de la poussière de tous les fragments possédant un flot bipolaire présente un aplatissement perpendiculaire à la direction du flot (voir figure 4.4), suggérant la présence de

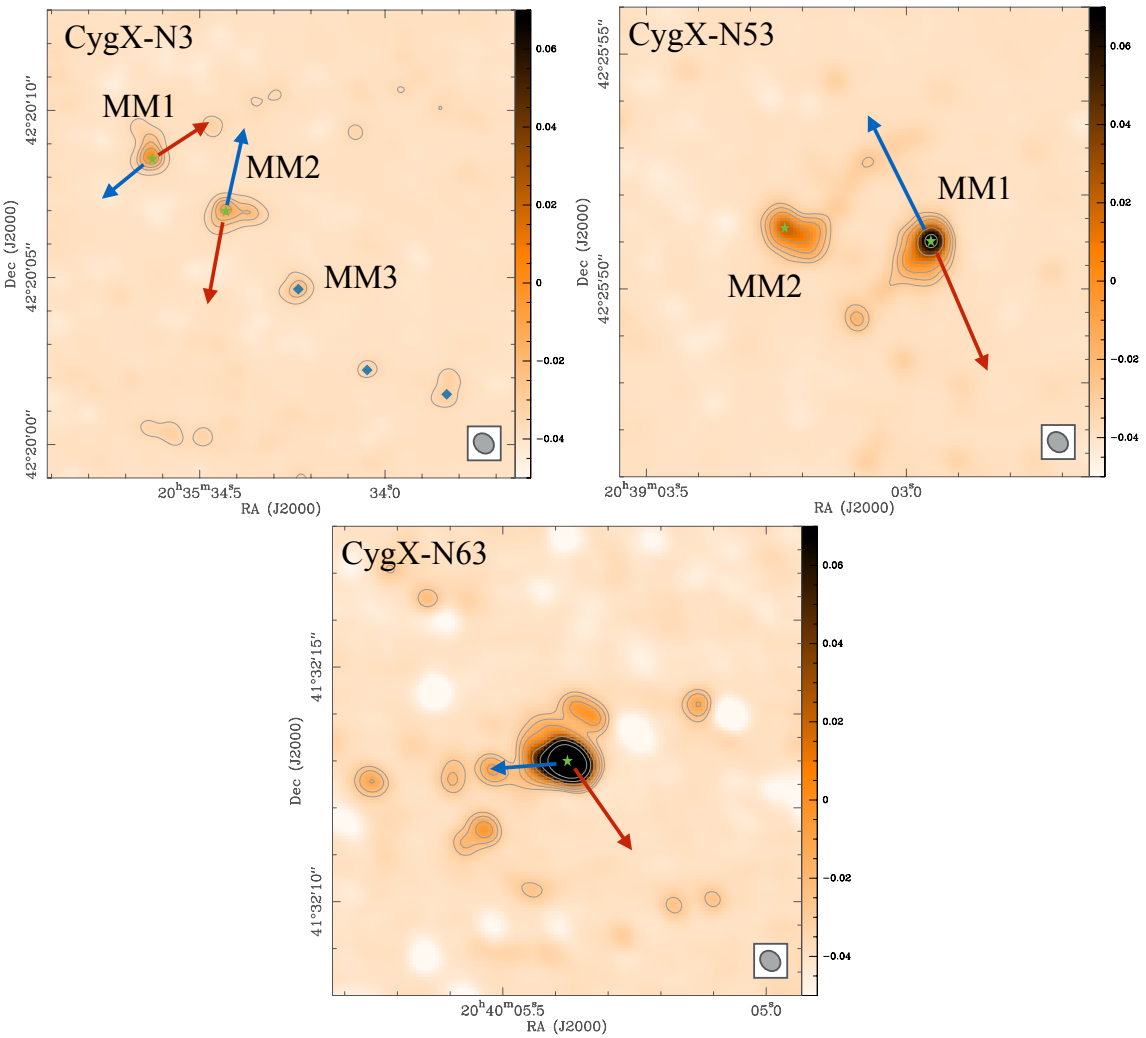


FIGURE 4.4 – Cartes de l'émission de la poussière à 1,3 mm. Les étoiles vertes figurent la position des 6 fragments massifs observés et les losanges bleus représentent les fragments de faible masse. L'échelle est linéaire pour le fond coloré, de -3 σ à 30 σ. Les contours sont logarithmiques : (1 σ seulement pour N3), 3 σ, 4,8 σ, 7,5 σ, 12 σ, 19 σ, 30 σ et 48 σ. L'unité de l'échelle de couleur est le Jy/lobe. Les flèches indiquent la direction des flots bipolaires et l'ellipse grise figure la taille du lobe synthétique.

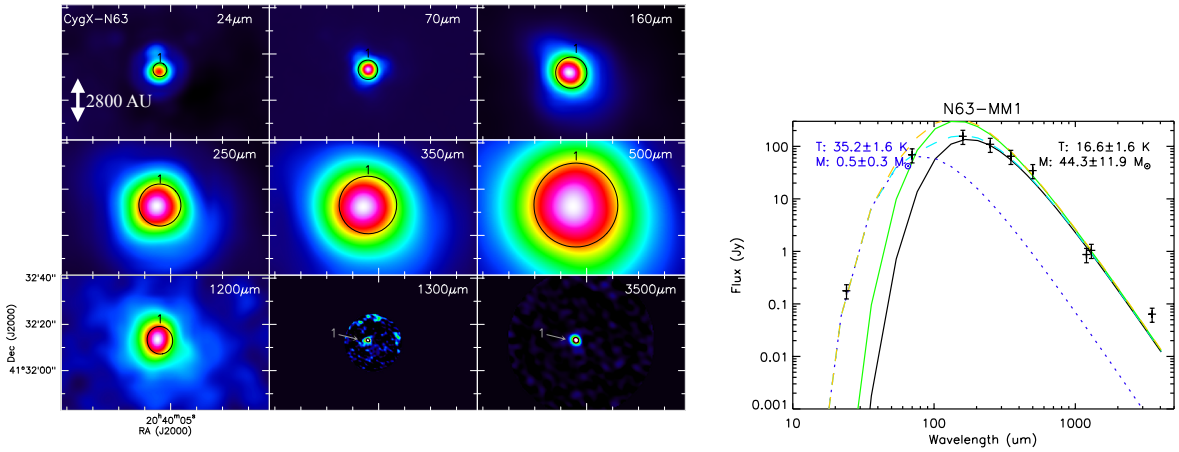


FIGURE 4.5 – Gauche : Résultat de l'extraction de source par *getsources* dans N63. Les cercles noirs correspondent aux régions intégrées pour déterminer le flux. Droite : SED de N63. La courbe **noire** est l'ajustement corps gris de la composante froide. La courbe **verte** montre l'ajustement corps gris avec des paramètres fixés d'après Bontemps et al. [2010]. Le meilleur ajustement de la SED de la composante chaude est tracé en **bleu pointillé**. La somme des composantes chaude et froide est tracé en tirets (**bleu clair** pour la somme des meilleurs ajustements pour les composantes froide et chaude et **jaune** pour la somme avec les paramètres fixes). Adapté de Duarte-Cabral et al. [2013].

TABLE 4.3 – Propriétés des fragments massifs. La FWHM (*Full Width at Half Maximum*) est une moyenne sur les raies de OCS, ^{13}CS et CH_3CHO à la position du pic de l'émission moléculaire. La masse de l'enveloppe, la luminosité et la force des flots sont tirés de Duarte-Cabral et al. [2013]. La taille correspond au diamètre.

Source	Taille (ua)	v_{pic} (km s^{-1})	FWHM (km s^{-1})	v_{rot} (km s^{-1})	M_{env} ($M_\odot$)	L_{bol} ($L_\odot$)	F_{co} / 10^{-5} ($M_\odot$ km s^{-1} ans^{-1})
N63	2300	-5.4 ± 0.4	3.6 ± 0.2	$\geqslant$ 1.6 ± 0.2	44.3 ± 11.9	339 ± 50	291
N53 MM1	2100	-5.4 ± 0.5	4.1 ± 0.2	$\geqslant$ 2.9 ± 0.2	34.2 ± 11.1	199 ± 70	412
N53 MM2	2100	-5.8 ± 0.5	1.9 ± 0.2	-	21.4 ± 6.1	144 ± 50	< 121
N3 MM1	1400	12.5 ± 0.4	-	-	12.5 ± 3.7	106 ±60	131
N3 MM2	1800	14.9 ± 0.4	-	-	13.8 ± 5.6	121 ± 50	72

disques ou de pseudo-disques. Cet aplatissement est moins marqué dans N63. Toutefois, il est visible dans l'émission de la plupart des raies observées (voir figure 4.7). L'intensité des raies est trop faible vers N3-MM1 pour pouvoir affirmer l'existence d'un aplatissement (figure 4.9).

Dans N53-MM1 et MM2, un aplatissement parallèle à l'axe des flots de MM1 est observé pour les raies de ^{13}CS, OCS, D_2CO, CH_3CHO et de façon plus complexe pour le méthanol (figure 4.8). La structure de l'émission de la poussière de ces deux fragments montre des extensions parallèles. Deux autres petits fragments sont également visibles au bout de ces extensions, situés symétriquement de part et d'autre des deux fragments principaux. Les simulations de fragments denses avec un champ magnétique faible ($\sim \mu$G) et une perturbation initiale faible suggèrent la formation de telles structures à 4 ou 5 cœurs [Hennebelle and Teyssier, 2008].

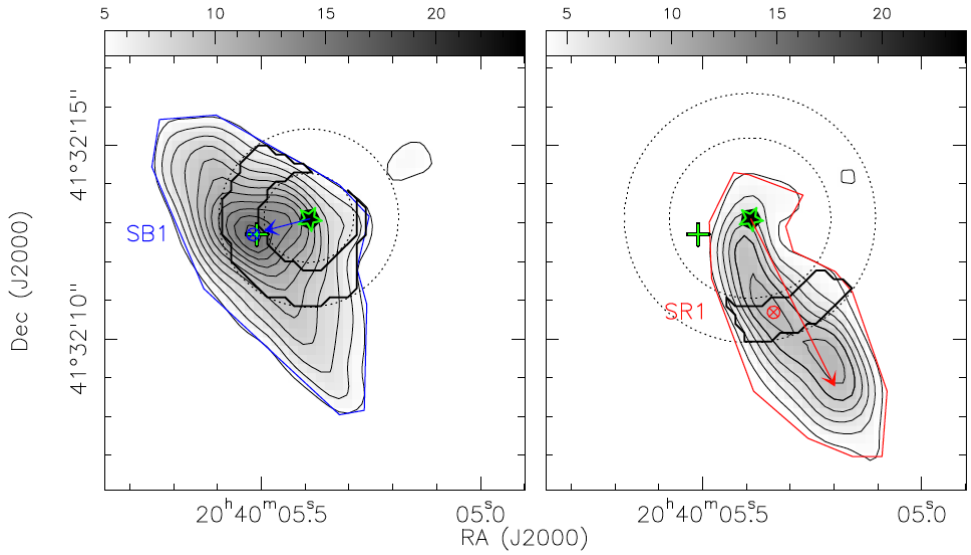


FIGURE 4.6 – Carte du flot bipolaire de N63 tracés par l'émission du CO 2 → 1, tirée de Duarte-Cabral et al. [2013].

Les figures 4.10 et 4.11 présentent les cartes de vitesse (moment d'ordre 1) des transitions pour N63 et N53-MM1, respectivement. Ces cartes font apparaître un gradient de vitesse quasiment perpendiculaire à l'axe des flots ($\sim$102° pour N53-MM1 et $\sim$ 81° pour N63 en considérant que l'axe principal du flot de N63 est donné par la composante décalée vers le rouge de la figure 4.6), suggérant une rotation. Ce gradient n'est pas résolu car sa largeur est au plus celle du lobe synthétique.

Une autre façon de visualiser la rotation est de tracer un diagramme de la vitesse en fonction de la position sur une ligne perpendiculaire à l'axe des flots. La figure 4.12 présente un tel diagramme pour ^{13}CS dans N63 et N53. La forme en S indique que la rotation est différentielle et non solide [Belloche et al., 2002]. En effet, une rotation solide aurait pour signature une augmentation constante de la vitesse avec le rayon. Le même comportement est observé pour les raies de OCS, D_2CO et CH_3CHO. Projetée sur le plan du ciel, la vitesse de rotation de l'enveloppe de N63 est en moyenne 1,6 km s^{-1} et celle de N53-MM1 2,9 km s^{-1} pour les raies de OCS, ^{13}CS, CH_3CHO et D_2CO, sur un diamètre d'environ 1500 ua. Ces valeurs sont des limites inférieures à cause des effets de projection.

Dans N63, le pic de l'émission moléculaire n'est pas au centre du gradient de vitesse. La différence de vitesse entre les deux positions extrêmes (points rouge et noir sur la figure 4.12) vaut 1,5 $\pm$ 0,3 km s^{-1} pour ^{13}CS, OCS et D_2CO et 1,7 $\pm$ 0,3 km s^{-1} pour CH_3CHO. La raie de méthanol à 40 K présente également une différence de vitesse, mais plus faible, de l'ordre de 1 km s^{-1}. La raie de méthanol à 89 K, qui trace également le départ du flot, ne présente pas de telle différence. Au niveau du pic d'émission, la vitesse de la raie vaut -5,0 km s^{-1}. Si l'on considère que cette raie de méthanol trace une région chaude interne dans N63 (voir chapitre suivant), on constate que cette région chaude n'est pas tout à fait le centre de rotation, à une vitesse de

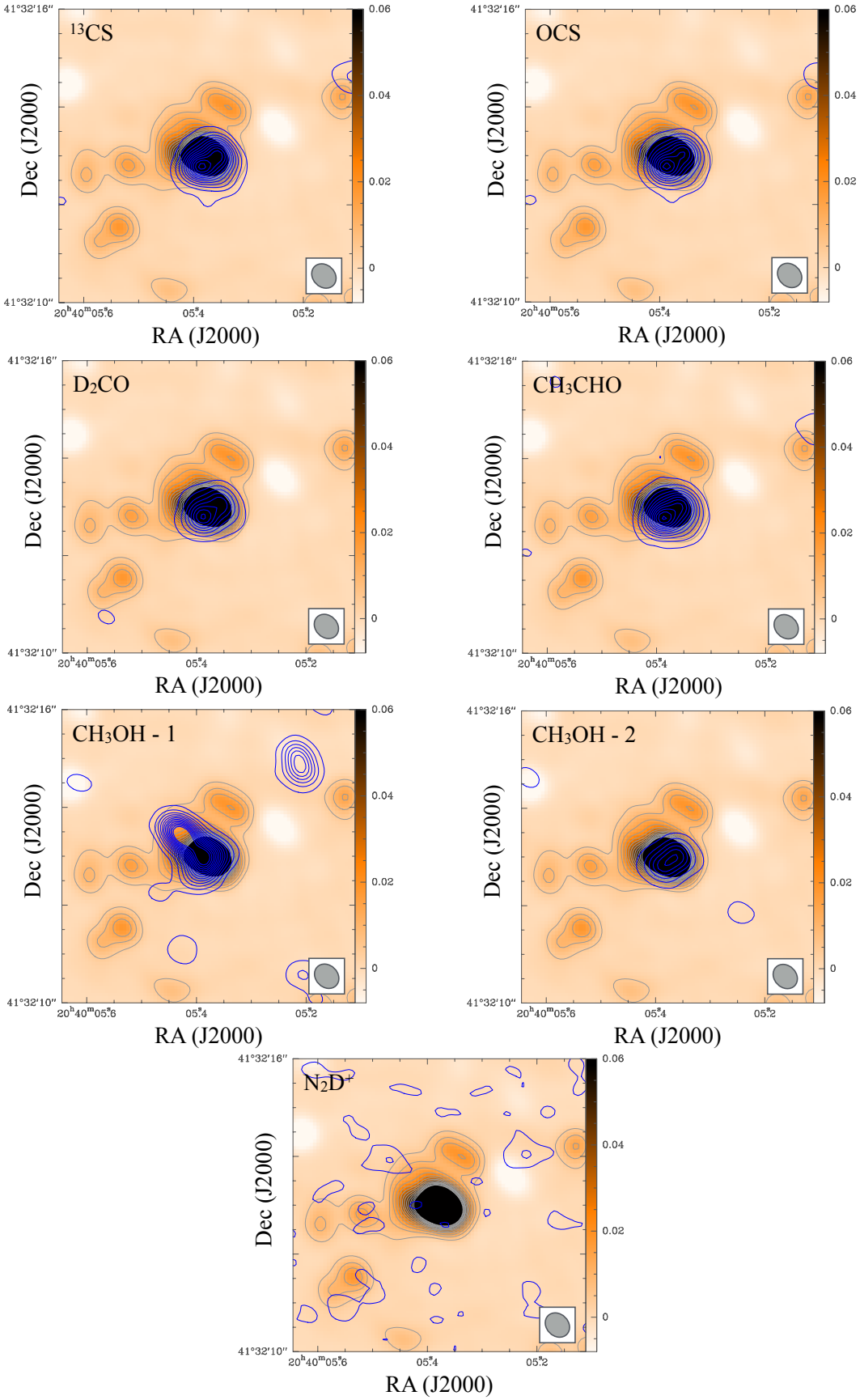


FIGURE 4.7 – Cartes de l'émission des raies de ^{13}CS, OCS, D_2CO, CH_3CHO, CH_3OH et N_2D^+ dans N63, en contours bleus. L'émission du continuum est représentée par le fond coloré, avec les mêmes conventions qu'à la figure 4.4. Les contours vont de 6 mJy/lobe à 130 mJy/lobe par pas de 10 mJy/lobe, sauf pour la carte de N_2D^+ dont le contour le plus bas est 3 mJy/lobe.

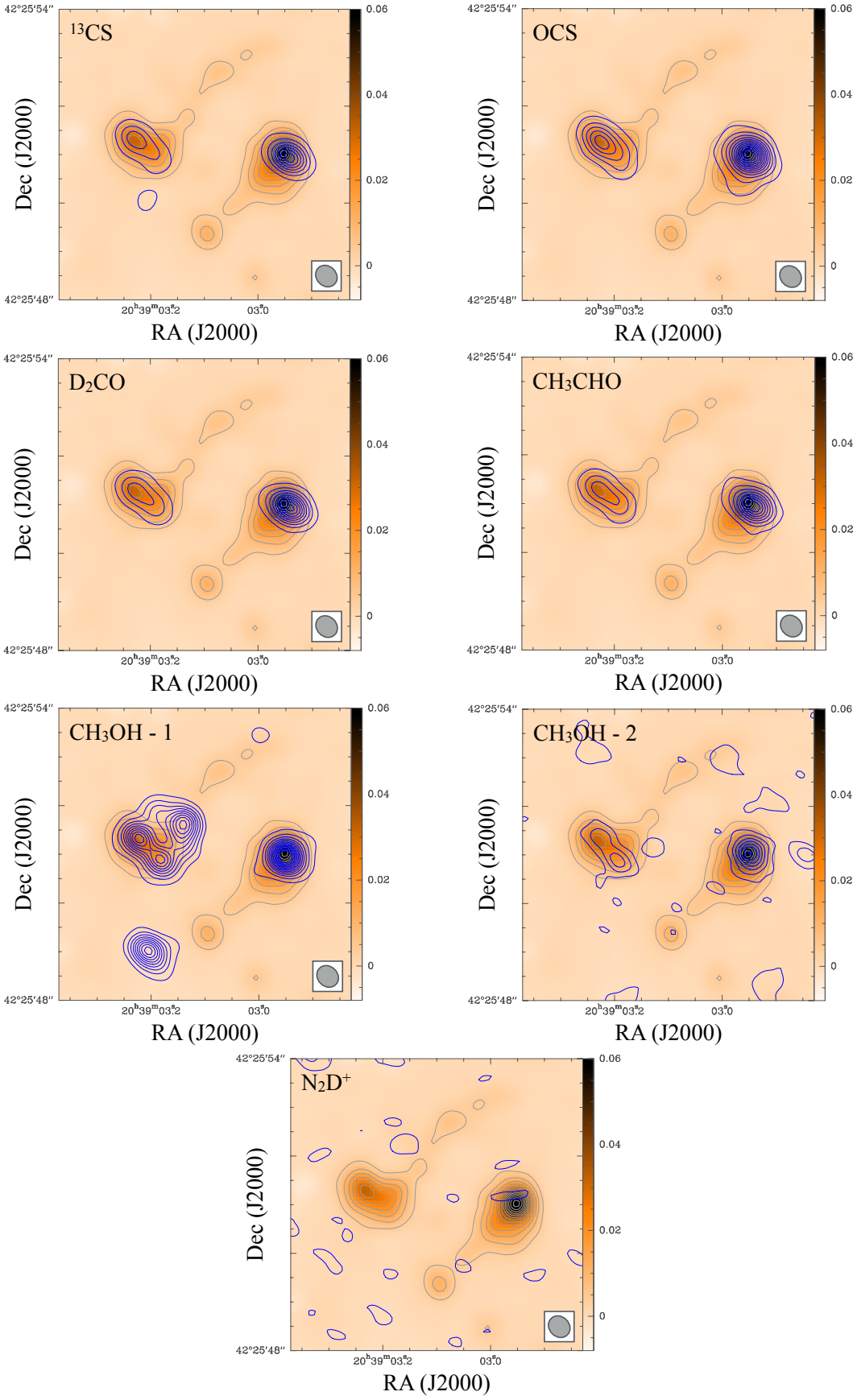


FIGURE 4.8 – Cartes de l'émission des raies de ^{13}CS, OCS, D_2CO, CH_3CHO, CH_3OH et N_2D^+ dans N53, en contours bleus. L'émission du continuum est représentée par le fond coloré, avec les mêmes conventions qu'à la figure 4.4. Les contours vont de 6 mJy/lobe à 130 mJy/lobe par pas de 10 mJy/lobe.

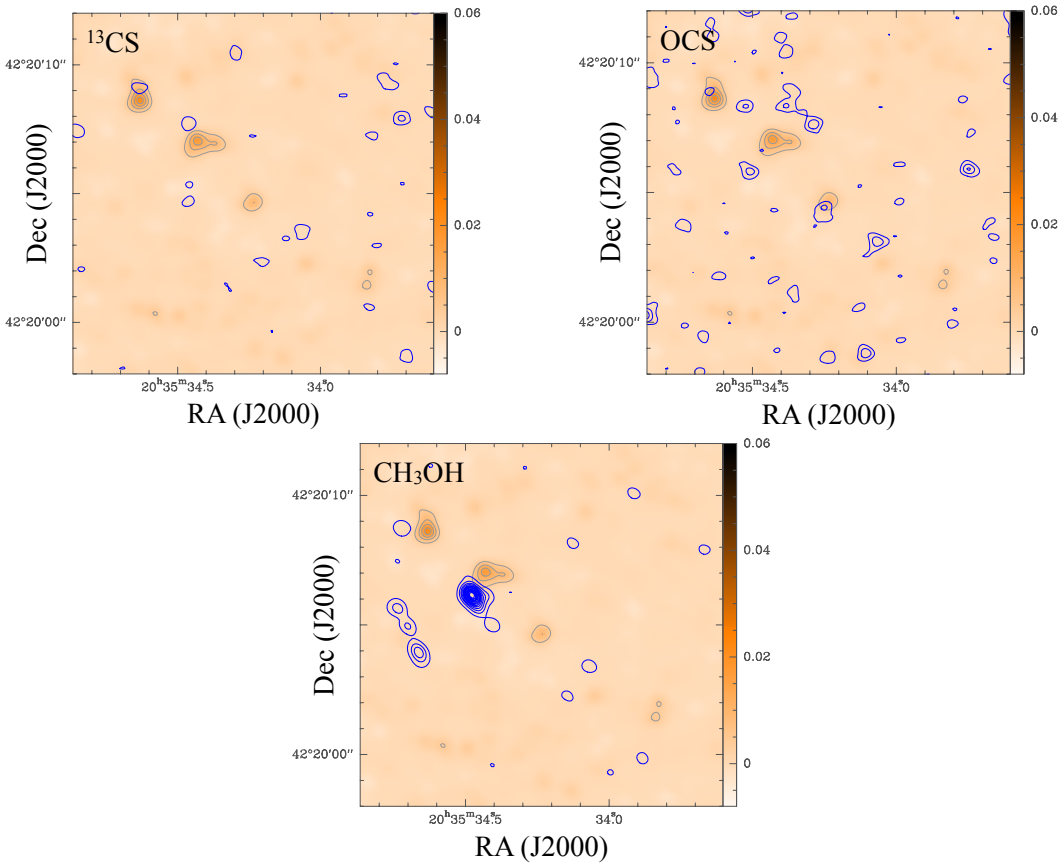


FIGURE 4.9 – Cartes de l'émission des raies de ^{13}CS, OCS et CH_3OH dans N3, en contours bleus. L'émission du continuum est représentée par le fond coloré, avec les mêmes conventions qu'à la figure 4.4. Les contours vont de 6 mJy/lobe à 130 mJy/lobe par pas de 10 mJy/lobe.

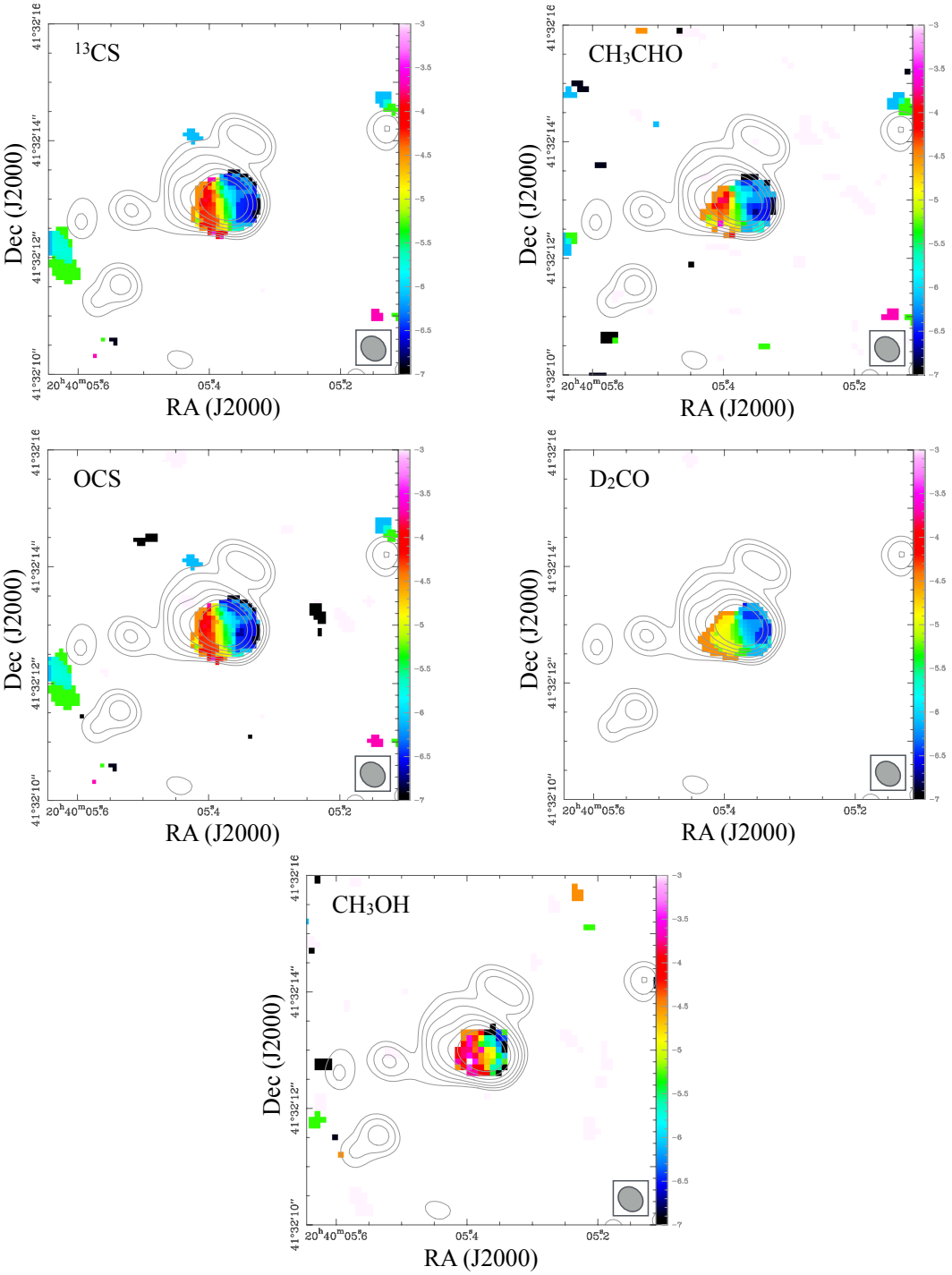


FIGURE 4.10 – Cartes de vitesse des raies de ^{13}CS, CH_3CHO, OCS, D_2CO et CH_3OH pour N63. L'ellipse grise figure le lobe synthétique du PdBI.

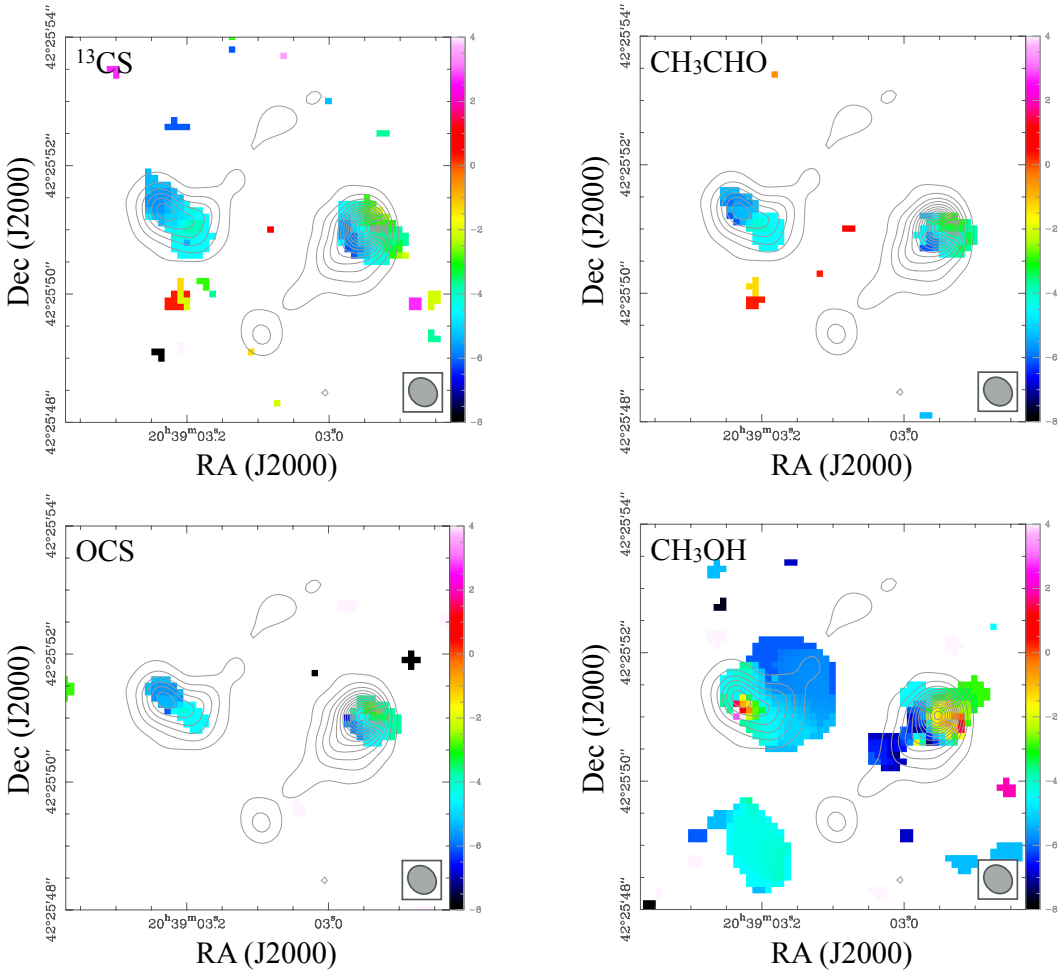


FIGURE 4.11 – Cartes de vitesse des raies de ^{13}CS, CH_3CHO, OCS et CH_3OH pour N53. L'ellipse grise figure le lobe synthétique du PdBI.

-5,3 km s^{-1}, comme suggéré par la figure 4.12. Toutefois, cet écart de 0,3 km s^{-1} correspond à l'erreur sur la mesure de la vitesse. Cette analyse ne permet pas d'exclure la présence éventuelle de deux composantes à des vitesses différentes.

4.2.3 Disques ou pseudo-disques ?

La dynamique d'un disque est gouvernée par la rotation. Dans ce cas, la vitesse de rotation au rayon R est donnée par la relation $v_{rot}^2 = GM_R/R$. Pour N63 et pour un rayon de $\sim$ 150 ua, correspondant au rayon de la région où la vitesse augmente linéairement avec le rayon, la masse contenue à l'intérieur est comprise entre 2,4 $M_\odot$, en choisissant un profil de densité $\rho \propto r^{-2}$ et la masse de 58 $M_\odot$ déterminée par Motte et al. [2007]. La vitesse d'un élément en rotation képlérienne est alors de l'ordre de 3,8 km s^{-1}. Cette vitesse est compatible avec la vitesse mesurée si l'angle entre l'axe des flots et la ligne de visée vaut $\sim$ 63°. De la même manière, ce calcul pour N53-MM1 donne une vitesse képlérienne de 4,1 km s^{-1}. Dans ce cas, cette vitesse est compatible avec la vitesse observée pour un angle de 45°.

Ces structures aplaties pourraient également être des pseudo-disques, créés par un champ magnétique faible et non supportés par la gravité. Leur taille est compatible avec celles observées vers les protoétoiles de faible masse, de 500 à 1000 ua (voir par exemple Davidson et al. [2011]). Le freinage magnétique permet alors un effondrement contrôlé de l'enveloppe, expliquant l'aplatissement et la rotation différentielle.

4.3 Comparaison chimique

Plusieurs raies sont visibles grâce à WIDEX. Il est donc possible de faire une comparaison de la composition chimique des sources pour les quelques espèces identifiées. L'identification a été effectuée à l'aide de CASSIS. Une espèce est considérée comme détectée lorsqu'une raie au moins est détectée à un niveau au moins égal à 3 σ. Lorsque c'est le cas, les autres raies supérieures à 2 σ sont conservées pour ce travail.

N63 est la source la plus riche (voir figure 4.13). La majorité des raies appartient à des COMs : CH_3OH, CH_2DOH, CH_3OCHO, C_2H_5CN et CH_3CHO. Les autres raies appartiennent à des molécules soufrées : OCS, ^{13}CS et SO_2. La raie CO (2-1) n'est pas considérée ici car elle présente une absorption importante. Ces espèces observées sont typiques des hot cores et des hot corinos, ce qui est attendu car les transitions trouvées à ces fréquences correspondent à des niveaux d'énergie relativement élevée, en moyenne 110 K. De plus, le lobe synthétique du Plateau de Bure, de taille réduite, sonde les régions internes, où l'on s'attend à trouver des températures sensiblement plus élevées que dans l'enveloppe, grâce au chauffage exercé par la protoétoile. Les abondances et l'origine détaillée de ces espèces dans N63 seront discutées au chapitre suivant. Dans cette partie, nous allons seulement comparer les intensités intégrées des raies, qui sont directement reliées à la densité de colonne dans le cas optiquement mince. Nous

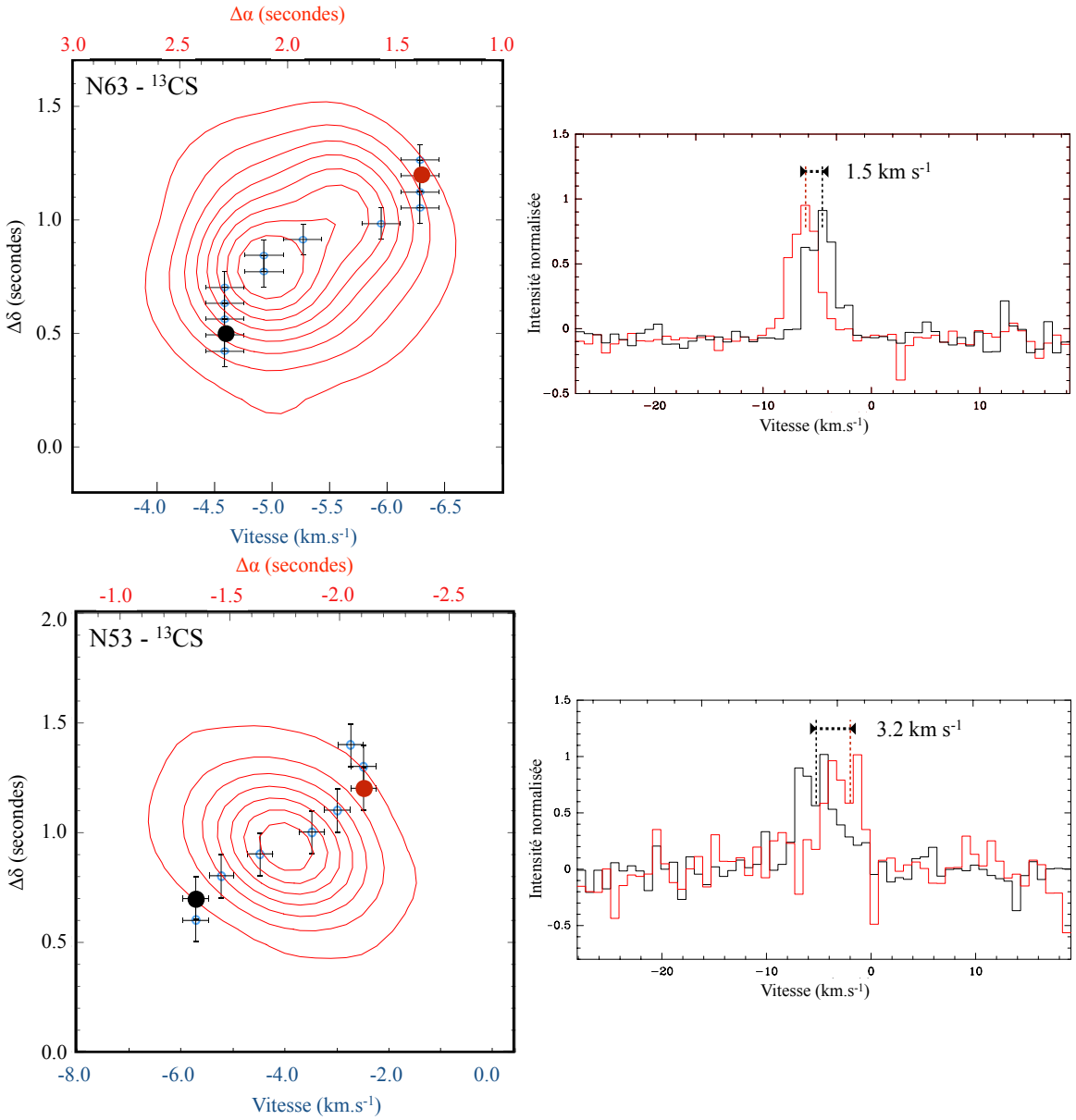


FIGURE 4.12 – Gauche : Diagramme position-vitesse le long de la direction perpendiculaire aux flots pour la raie de ^{13}CS (points bleus), superposé à l'émission de cette même raie (contours rouges). Pour N63, les contours du ^{13}CS vont de 8 mJy à 80 mJy par pas de 10 mJy tandis que pour N53, le niveau le plus bas est 4 mJy. La forme en S du diagramme suggère une rotation différentielle pour les deux sources. Droite : Spectres de ^{13}CS aux positions indiquées sur la carte (points rouge et noir). La vitesse centrale du spectre rouge vaut -6,0 $\pm$ 0,3 km s^{-1} tandis que celle du spectre noir vaut -4.5 $\pm$ 0,3 km s^{-1}.

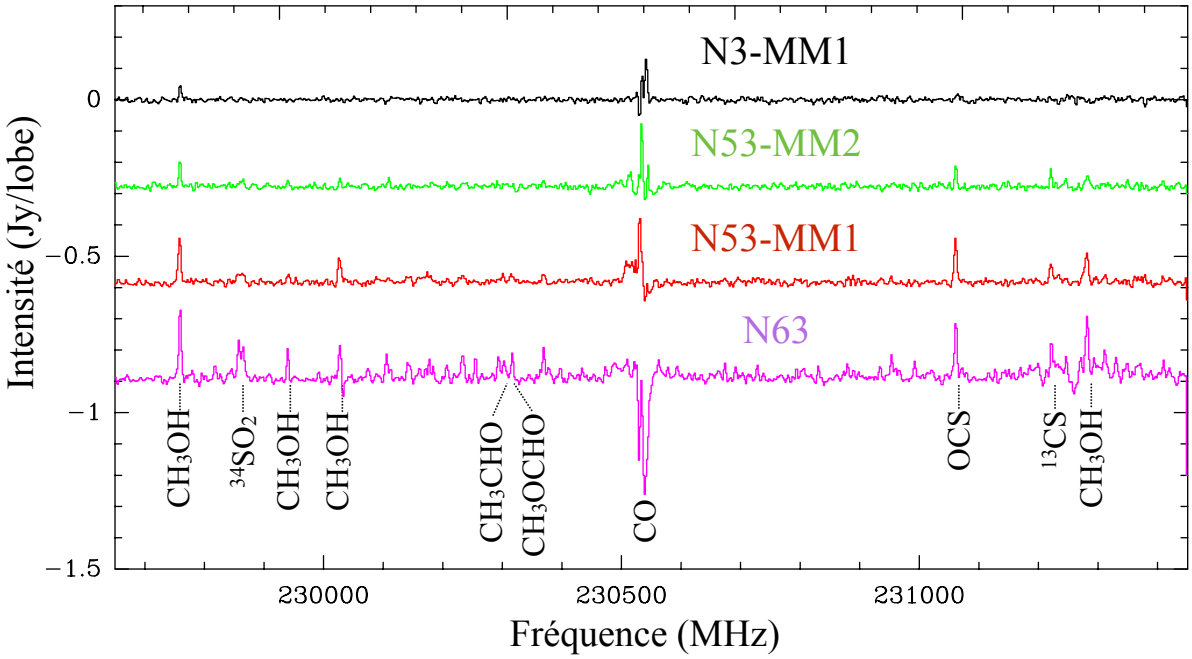


FIGURE 4.13 – Comparaison des spectres des cœurs massifs du Cygne. Ces spectres correspondent au pic de l'émission moléculaire pour chaque source, qui coïncide avec le pic de l'émission de la poussière, sauf pour N3-MM1. Quelques unes des espèces identifiées sont indiquées. Les spectres sont rangés de haut en bas de la source la moins riche à la plus riche.

verrons dans le chapitre suivant que cette hypothèse est correcte dans N63 pour les COMs, hormis le méthanol, et pour une grande partie des raies des espèces soufrées.

Dans N53-MM1, les mêmes espèces sont détectées sauf C_2H_5CN et CH_2DOH. Dans N53-MM2, seules sont détectées CH_3OH, OCS, ^{13}CS et CH_3OCHO. Dans N3-MM1, seule une raie de méthanol est détectée à plus de 3 σ.

Les espèces détectées sont uniquement des COMs et des espèces soufrées. Les deux familles sont produites par la désorption de molécules de la surface des grains, mais la cause de la désorption peut être le chauffage par la protoétoile ou bien les chocs produits par les flots, même si les COMs ont tendance à être des traceurs préférentiels des hot cores et les soufrées à être des traceurs de flots (voir chapitre 5). La figure 4.14 présente la comparaison du flux moyen des transitions à plus de 3 σ vers les différentes sources. Le flux des raies va croissant entre N3-MM1, N53-MM2, N53-MM1 et N63.

Dans les cœurs de N3, le décalage important entre le pic de l'émission moléculaire, principalement le méthanol et celui de l'émission de la poussière indique que les espèces détectées sont produites par les chocs dus aux flots. Par contre, dans N63, N53-MM1 et N53-MM2, l'émission moléculaire est centrée sur la source, suggérant une origine interne. De plus, N53-MM1 possède un flot plus puissant que celui de N63 et pourtant affiche une chimie moins riche et des raies moins intenses, pointant également vers une origine interne de la chimie. Enfin, N53-MM2 ne possède pas de flot bipolaire mais présente pourtant quelques raies moléculaires. La comparai-

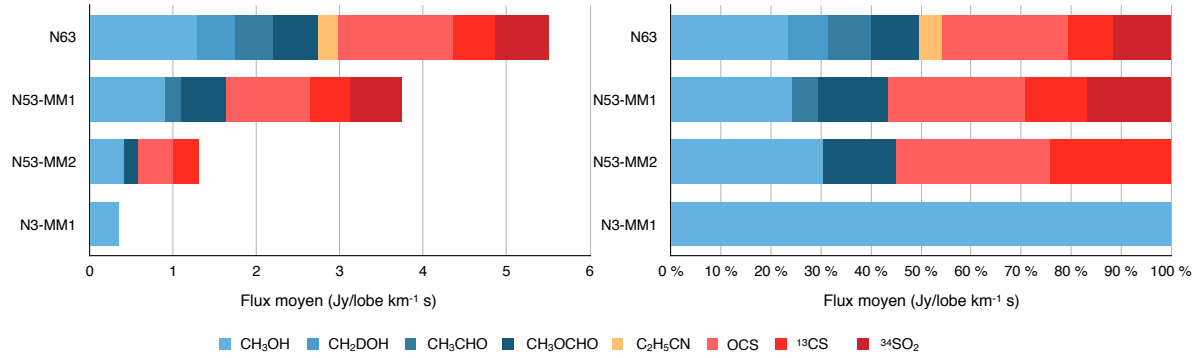


FIGURE 4.14 – Comparaison du flux moyen des raies dans les différentes sources, en valeur absolue (à gauche) ou bien en pourcentage du total (à droite). Les COMs oxygénés sont en bleu, les espèces azotées en orange et les espèces soufrées en rouge.

son chimique entre ces trois sources peut donc fournir une information sur l'état d'évolution de la protoétoile.

Dans la partie droite de la figure 4.14, les flux moyens sont présentés en pourcentage du flux moyen total des raies. Cela met en valeur la similitude chimique existant entre N63, N53-MM1 et MM2. N63 est plus riche chimiquement, mais le rapport entre flux des espèces soufrées et flux des COMs est très similaire, valant 0,9, 1,3 et 1,2 pour N63, N53-MM1 et MM2 respectivement. La différence entre ces sources apparaît être une différence de degré, ou d'âge, et pas de nature. N63 est la source possédant la plus forte luminosité et a donc désorbé le plus d'espèces de la surface des grains, soit parce qu'elle est plus massive, soit parce qu'elle est plus âgée.

4.4 N53-MM2 : un cœur préstellaire ?

N53-MM2 est particulièrement intéressante car elle fait partie des trois sources les plus massives de l'échantillon avec 21,4 $M_\odot$, mais ne présente pas de flot bipolaire clair, bien que l'extension de l'émission de ^{13}CS, OCS, D_2CO, CH_3CHO et CH_3OH vers le sud-est, visible sur la figure 4.8, pourrait être due à un flot naissant. Sa masse est similaire à celle de MM1, mais Duarte-Cabral et al. [2013] ont montré qu'elle n'est pas détectée à 24 μm et présente seulement une détection potentielle à 70 μm, indiquant que MM2 est plus jeune que MM1. Contrairement à N63 et N53-MM1, MM2 ne présente pas de rotation claire. Sa pauvreté chimique est une confirmation supplémentaire de sa jeunesse.

La forme complexe de l'émission de la raie de méthanol à $E_{up} \sim 90$ K vers cette source pourrait être expliquée par l'influence des flots de MM1, la partie des flots décalée vers le bleu recouvrant presque MM2. Alternativement, cette raie de méthanol pourrait tracer une zone de choc à l'interface entre MM2 et la structure filamentaire proche, qui pourrait alimenter la source en matière.

Toutefois, la largeur de raie du méthanol dans cette extension est faible, de l'ordre de 1,5

$km\,s^{-1}$ (voir figure 4.15). Au niveau du pic de l'émission moléculaire et de la poussière, les raies moléculaires observées à haute résolution spectrale ont une largeur moyenne de 1,9 $\pm$ 0,2 $km\,s^{-1}$ dans MM2 contre 4,1 $\pm$ 0,2 $km\,s^{-1}$ dans MM1 et 3,6 $\pm$ 0,2 $km\,s^{-1}$ dans N63. Dans MM2, la raie la plus étroite appartient à CH_3CHO et est de l'ordre de 1,4 $km\,s^{-1}$. Cette molécule est la plus à même de refléter la largeur de raie de la source, car ce n'est pas un traceur de flots, contrairement à OCS ou ^{13}CS. Cette largeur est similaire aux plus petites largeurs de raies trouvées dans N63 (voir chapitre 5). La dispersion thermique correspondante est donnée par $\sigma_T = \sqrt{\frac{k_B T}{\mu_N m_H}}$. Pour une température de 15 K [Duarte-Cabral et al., 2013], σ_T est de l'ordre de 0,05 $km\,s^{-1}$ et n'est donc pas responsable de la largeur de la raie. Si la turbulence est responsable de cette largeur de raie, on peut estimer une masse de Jeans effective, augmentée par la turbulence. La vitesse du son effective s'exprime comme :

$$c_{s,eff} = [c_s^2 + (1/3)\Delta v^2]^{1/2} \tag{4.1}$$

avec c_s la vitesse du son thermique et Δv la largeur de raie due à la turbulence. La masse de Jeans effective s'exprime alors comme :

$$M_{J,eff} = a_J \frac{c_{s,eff}^3}{\sqrt{G^3 \rho}} \tag{4.2}$$

avec ρ la densité de la source, estimée à 7,6 $\times$ 10^{-13} $kg\,m^{-3}$ pour une masse de 34,2 $M_\odot$ dans 3700 ua de diamètre [Duarte-Cabral et al., 2013]. La masse de Jeans effective est alors de l'ordre de 0,6 $M_\odot$, bien inférieure à la masse de la source. Cela suggère que N53-MM2 a dépassé le stade hypothétique du choc entre filaments, qui aurait permis l'apport important de matière nécessaire à sa constitution.

4.5 CygX-N63 : la protoétoile idéale

Ces observations ont permis de sélectionner la source la plus intéressante de l'échantillon : CygX-N63. Cette protoétoile n'est pas sous-fragmentée. C'est le cœur le plus massif de la région ($\sim$ 44 $M_\odot$) et aussi le plus isolé. N63 est une protoétoile jeune, comme le suggèrent plusieurs indices. Le premier d'entre eux est l'absence de région HII vers cet objet. N63 a été observée en 2003 avec les 27 antennes du VLA (*Very Large Array*) en configuration D à 8,4 GHz (bande X) (projet AB1073). La figure 4.16 correspond à un temps d'intégration de 25 minutes. Le *clean* a été effectué à l'aide de l'algorithme de AIPS. Le rms final vaut 60,2 μJy/lobe. A la position de N63, une émission faible de 0,14 mJy est détectée, correspondant à un niveau de 2,3 σ. Toutefois, cette émission inférieure à 3 σ ne peut pas être considérée comme une détection car de l'émission d'intensité égale est contenue dans les lobes secondaires (larges bandes sur l'image 4.16), due à la présence d'une région HII compacte, DR22, située à 5 minutes d'arc au sud de N63. Cette absence d'émission *free-free* significative suggère que N63 n'a pas encore

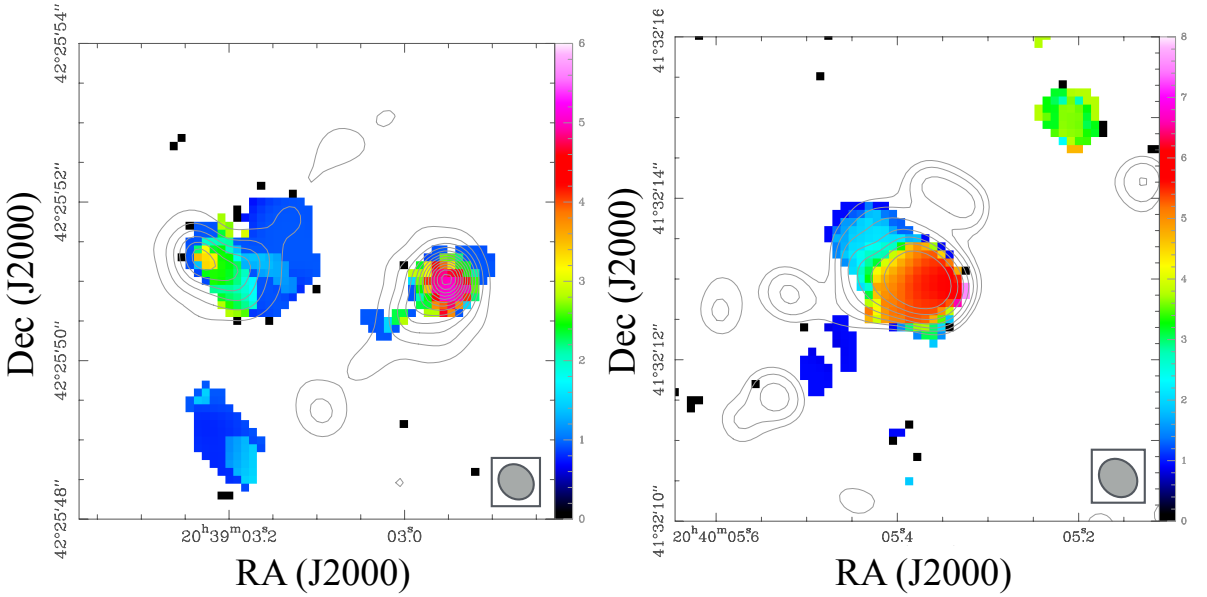


FIGURE 4.15 – Cartes de la largeur de la raie de méthanol à 90 K vers N53 (gauche) et N63 (droite). L'échelle de largeur s'étend jusqu'à 6 km s^{-1} pour N53 et jusqu'à 8 km s^{-1} pour N63.

développé de région HII. Nous verrons également que le placement de N63 sur un diagramme évolutif (détaillé au chapitre 6) indique également que cet objet est particulièrement jeune.

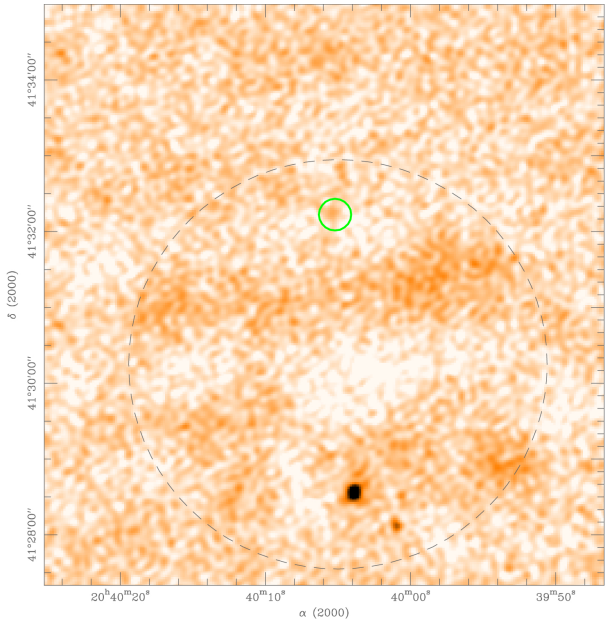


FIGURE 4.16 – Image VLA à 8,4 GHz avec une échelle de couleur de -0.1 à 0,7 mJy/lobe. L'ellipse en tirets indique le lobe primaire du VLA et le cercle vert montre le lobe du 30 m à 102 GHz.

Ce premier aperçu de la chimie de N63 a montré que cette source possède probablement une source de chaleur interne capable de désorber des molécules de la surface des grains. Cette source a donc le potentiel de présenter une grande richesse chimique, propice à l'étude spectro-

scopique que nous souhaitons réaliser. N63 est isolée, massive et jeune, ce qui en fait un objet d'étude idéal pour explorer les conditions initiales de la formation stellaire massive. Les deux chapitres suivants sont consacrés à l'étude détaillée de cette source.

CHAPITRE 5

COMPOSITION ET STRUCTURE CHIMIQUE D'UNE CLASSE 0 MASSIVE : CYGX-N63

Etudier la chimie des premières phases de la formation stellaire est particulièrement intéressant. En premier lieu, la chimie est un outil puissant pour sonder les conditions physiques actuelles et passées. Ensuite, une partie du gaz à l'origine des étoiles forme le disque protoplanétaire, puis les planètes. L'origine même de la vie pourrait alors être éclairée par la chimie de ces phases précoces. Jusqu'où va la complexité chimique des protoétoiles ? Quelle fraction de ces molécules survit à la naissance de l'étoile et sera alors disponible à la surface des planètes ?

Historiquement, la complexité moléculaire a été étudiée dans le gaz froid et dense des régions proches, comme dans le nuage sombre TMC-1, ou bien vers les sources infrarouge les plus fortes de la galaxie, qui s'avèrent être des hot cores aux spectres millimétriques extrêmement riches. Mais les objets intermédiaires entre nuage sombre et hot core sont encore mal connus. Quel est le lien entre la chimie des nuages sombres et celle des hot cores ?

La structure physique et chimique des objets de classe 0 est fortement influencée par la présence d'une source centrale, chauffant son environnement. Il en résulte une stratification de la chimie avec le rayon. Cette structure spatiale a été bien explorée vers les protoétoiles de faible masse, en particulier vers le hot corino IRAS16293 [Caux et al., 2011]. Mais quelle est la structure chimique des protoétoiles massives ? Est-elle similaire à celle des protoétoiles de faible masse ?

CygX-N63 contient une grande quantité de gaz à haute densité (une cinquantaine de $M_\odot$ à des densités supérieures à 5.10^7 cm^{-3}) et semble être au tout début du développement de son hot core. Cela en fait l'objet idéal pour répondre à ces questions. Nous allons pouvoir y explorer les limites de la complexité chimique. En effet, une des difficultés dans l'étude des hot cores est la confusion spectrale, due à la forêt de raies produite par quelques COMs comme le méthanol CH_3OH, le diméthyléther CH_3OCH_3 et le formiate de méthyle CH_3OCHO. Comme nous allons le voir, ce n'est pas (encore) le cas pour N63. D'autre part, sa jeunesse peut nous permettre d'étudier le lien chimique entre nuages sombres et hot cores. Enfin, sa simplicité et son isolement autorise une analyse de sa structure spatiale chimique, sans confusion dans le lobe.

Dans ce chapitre et le prochain, nous essaierons d'apporter des réponses aux questions suivantes, qui serviront de fil rouge aux discussions :

- Quelle est la structure spatiale chimique des protoétoiles massives ?
- Quelle fraction de la chimie a lieu sur les grains et en phase gazeuse ? Quelles contraintes sur les réseaux chimiques peut-on apporter ?
- Comment faire le lien entre la chimie des nuages sombres et celle des hot cores ?
- Comment évoluent les réservoirs de carbone, d'oxygène, d'azote et de soufre à mesure de l'évolution de la protoétoile ? Sont-ils différents dans une protoétoile de faible masse ?

Ce chapitre présente les résultats d'un relevé spectral non biaisé vers N63. J'y présente la composition et la structure chimique de N63 puis les méthodes qui m'ont permis d'obtenir les tailles d'émission pour une grande partie des molécules. Les détections de molécules rares et d'intérêt particulier seront discutées en annexe A.

5.1 Relevé spectral non biaisé avec le télescope de 30 m

L'outil de prédilection pour étudier la chimie d'un objet est le relevé spectral non biaisé, c'est-à-dire le plus large possible. Une large bande donne accès à de très nombreuses raies, assurant une identification fiable. Les diagrammes de population sont également d'autant plus fiables qu'il y a de transitions. Enfin, le relevé non biaisé renseigne sur l'opacité des raies observées, par la possibilité qu'ils offrent de détecter de nombreux isotopologues rares.

5.1.1 Observations

Le relevé spectral a été effectué avec le télescope de 30 m de l'IRAM, en utilisant le récepteur EMIR couplé au *backend* FTS à la résolution spectrale de 195 kHz. La source CygX-N63 est située à (RA, Dec) = (20h 40m 05.2s, 41° 32′ 12.0″). Au total 181 GHz ont été observés. La figure 5.1 présente une vue globale de ce relevé. Les observations ont été effectuées en plusieurs morceaux, représentant au total environ 235 heures, réparties sur les années 2012 à 2014. La bande à 3 mm fut observée en septembre 2012 (projet 013-22), la bande à 1 mm en janvier 2012 (projet 132-12), la bande à 2 mm en janvier et mars 2014 (projet 149-13). Des observations complémentaires ont été faites dans le *pool*, c'est-à-dire réalisées pendant des périodes partagées entre plusieurs projets, dans la bande à 0.8 mm en mars 2014 et dans les bandes à 2 et 1 mm en septembre 2014. Pour couvrir la bande de la façon la plus homogène possible avec une redondance minimale de 2, nous avons placé les *settings* décalés les uns par rapport aux autres et légèrement chevauchant, comme illustré par la figure 5.2. Chaque *setting* est décalé par rapport au précédent de 3,89 GHz. Nous avons utilisé 11 *settings* à 0.8 mm, 13 à 1 mm, 8 à 2 mm

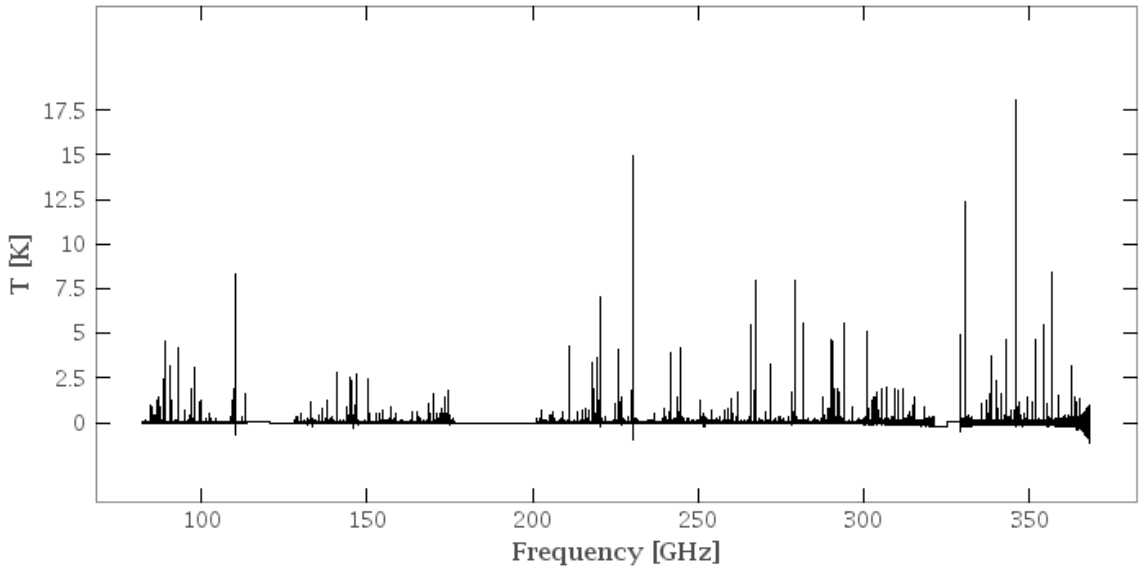


FIGURE 5.1 – Vue d'ensemble du spectre de N63. La température est donnée en T_{mb}.

et 4 à 3 mm. Le pointage du télescope a été vérifié toutes les heures ou toutes les deux heures sur Uranus, Mars ou bien sur les sources K3-50A ou 1741-038. Sur l'ensemble de la bande, la largeur du lobe varie de $\sim 8''$ à 340 GHz jusqu'à $\sim 30''$ à 86 GHz. La résolution initiale des différents settings varie de 0,2 à 0,6 MHz, soit 0,22 à 0,56 km s^{-1} respectivement. Le tableau 5.1 reprend les informations essentielles des observations. La figure 5.3 présente l'évolution du bruit RMS sur l'ensemble du spectre.

TABLE 5.1 – Paramètres des observations au télescope de 30 m.

Bande	Fréquence (GHz)	⟨Résolution⟩ (km s^{-1})	(MHz)	rms (mK)	⟨rms⟩ (mK)	T_{sys} (K)	⟨HPBW⟩ (arcsec)	$\langle F_{eff} \rangle$ %	$\langle B_{eff} \rangle$ %
E0 (3 mm)	82-118	0.56	0.59	3-4	3	75-1049	26	94.5	79.3
E1 (2 mm)	128-172	0.30	0.40	3-10	4	72-539	16.8	93.5	72.9
E2 (1 mm)	201-271	0.26	0.25	8-12	9	140-373	10.3	90.5	57.5
E3 (0.8 mm)	275-368	0.22	0.20	7-28	19	80-1008	8.4	85.4	46.2

D'autre part, comme expliqué dans le chapitre 3, nous avons observé pour chaque *setting* un autre *setting* décalé de 20 MHz par rapport au premier, pour identifier les raies fantômes. 83 raies mal rejetées ont pu être ainsi identifiées.

La réduction des données s'est effectuée avec les versions feb13b et jul14b des programmes GILDAS. Pour chaque *setting*, la procédure fournie par l'IRAM (FtsPlatformingCorrection5.class) a été utilisée pour résoudre le problème de *platforming*. Une première ligne de base a été retirée durant cette étape, la plupart du temps d'ordre 0, mais jusqu'à un ordre 25 pour certaines parties de spectres. La moyenne des paires de spectres décalés de 20 MHz, puis la moyenne de l'ensemble des spectres ont alors été effectuées.

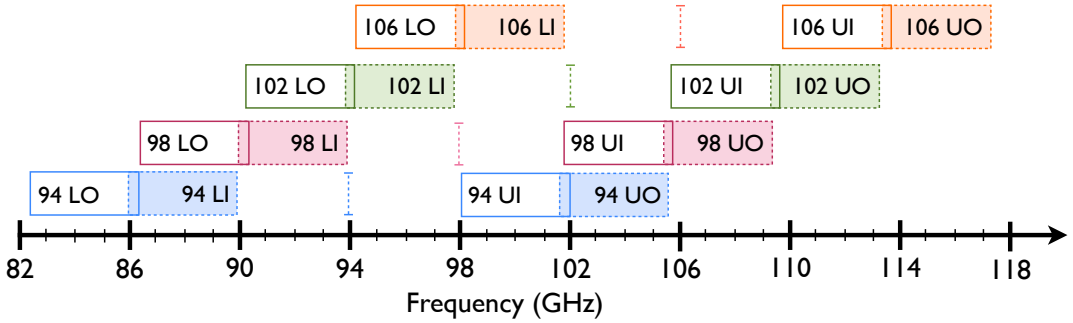


FIGURE 5.2 – Exemple de couverture spectrale dans la bande à 3 mm. Chaque couleur indique un *setting* différent. Les settings décalés de 20 MHz ne sont pas représentés.

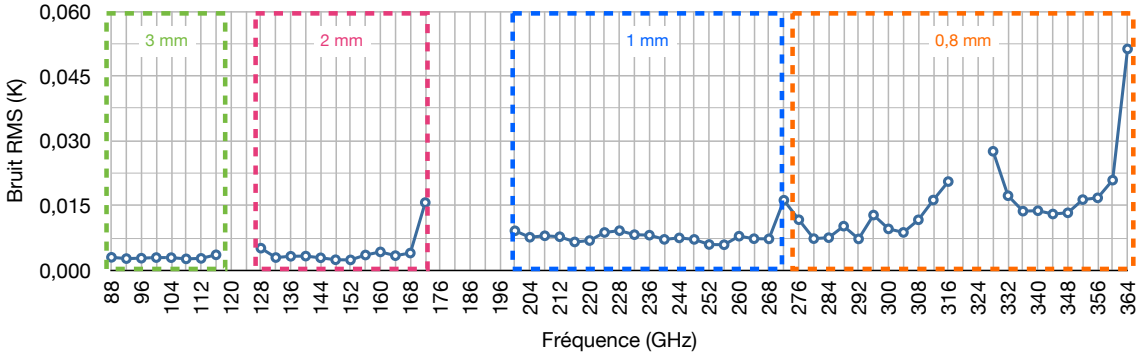


FIGURE 5.3 – Evolution du bruit RMS sur l'ensemble du spectre. Le début de la plage d'absorption par l'eau de l'atmosphère est bien visible au bord de la bande à 2 mm, ainsi qu'entre 1 et 0,8 mm.

Les pics artificiels (*spikes*), lorsqu'ils n'étaient pas supprimés lors de la moyenne, ont été retirés à la main. Les données ont été converties en température *main-beam* T_{mb} en utilisant la fonction de Ruze pour corriger de $B_{\rm eff}(\lambda) = 1,2\ \epsilon\ \exp(-4\pi\sigma/\lambda)^2$ avec $\epsilon = 0,69$, $\sigma = 0,07$ mm et λ la longueur d'onde en mm. Les valeurs de $F_{\rm eff}$ fournies par l'IRAM ont été interpolées pour être appliquées à l'ensemble du spectre.

5.1.2 Vue d'ensemble du relevé spectral

Grâce à la large couverture spectrale et la sensibilité élevée, 2663 raies sont détectées à un niveau de 4 σ. L'intensité des raies varie d'un facteur 2000 entre les plus faibles à 10 mK et les plus fortes à $\sim$20 K. Cette dynamique est illustrée par la figure 5.4. La densité spectrale est de 11, 16, 15 et 5 raies / GHz à 3, 2, 1 et 0,8 mm, respectivement. La densité spectrale globale est de 13 raies / GHz, ce qui est plus faible que la densité atteinte par exemple vers le hot corino IRAS16293 (20 raies / GHz à 3 σ [Caux et al., 2011]) et beaucoup plus faible que celle des hot cores dans SgrB2 (102 raies / GHz à 4 σ [Belloche et al., 2013]). Dans ces deux sources, la plupart des raies appartiennent à quelques COMs, comme le méthanol, le diméthyléther et

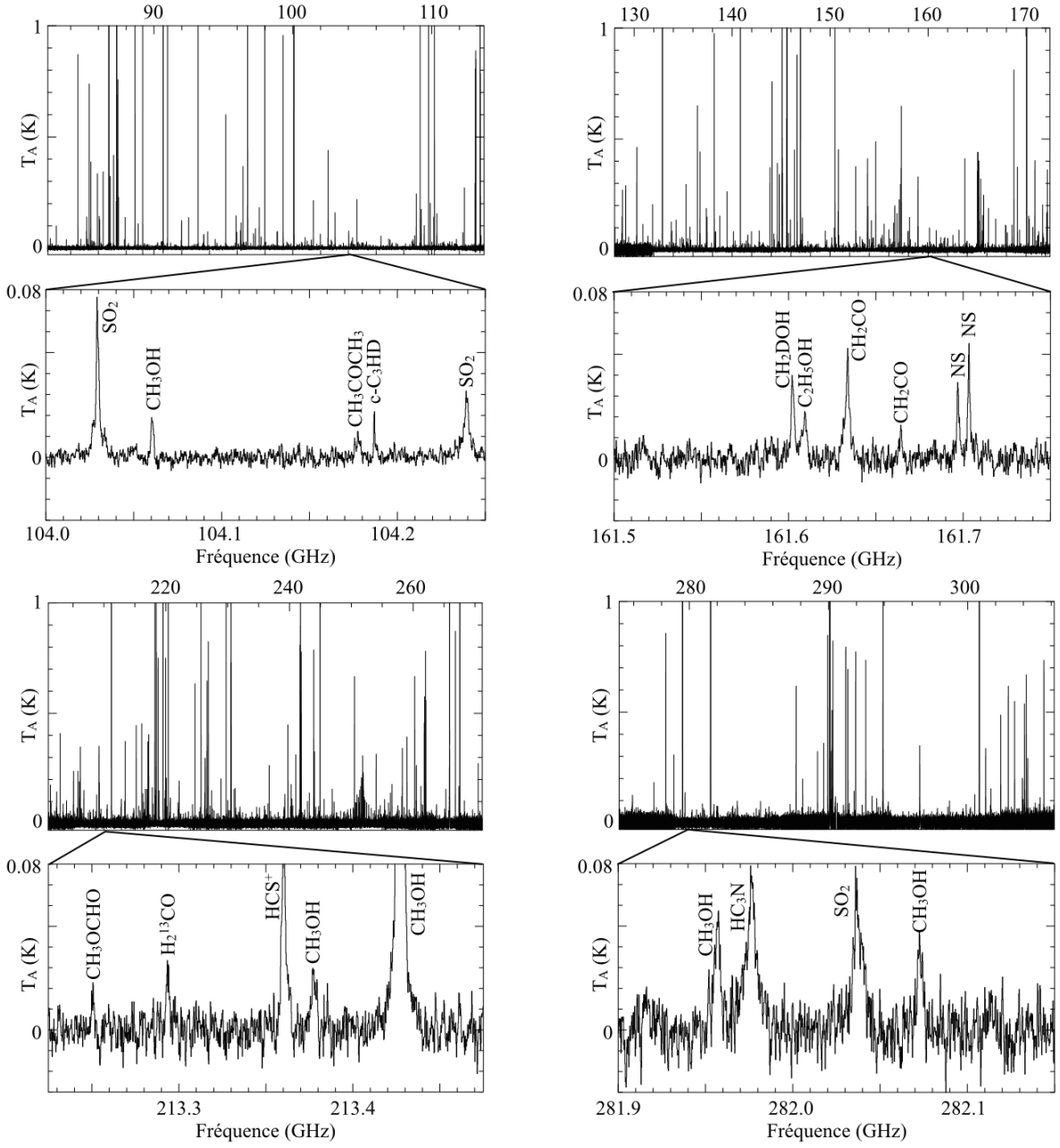


FIGURE 5.4 – Spectres à 3, 2, 1 et 0,8 mm et zooms représentatifs.

le formiate de méthyle. La densité plus faible de raies dans N63 pourrait alors être due au développement moindre d'une région de type hot core.

Cette densité de raies relativement faible réduit fortement les problèmes de confusion (seulement 10 % des raies sont mélangées), ce qui nous a permis d'identifier 95 % des raies, soit 2338 raies non mélangées à 4 σ. Une petite centaine de raies faibles reste non identifiée. J'ai vérifié qu'il ne s'agissait pas de raies fantômes. Ce sont probablement pour la plupart des raies de molécules connues mais dont les données spectroscopiques ne sont pas disponibles dans les catalogues. Parmi ces raies, nous nous sommes par exemple aperçu que 6 sont dues à CH_3SH et 29 autres au méthanol deutéré CH_3OD, deux molécules dont les fréquences des transitions ne sont pas encore intégrées à tous les catalogues. Ces détections additionnelles sont discutées en annexe A.

Aucune raie de recombinaison n'est détectée. Les raies de recombinaison sont attendues lorsque l'on observe une région HII. L'hydrogène ionisé se recombine avec un électron dans un état excité. Par cascades successives, l'atome retourne à l'état fondamental en émettant un photon à chaque transition de l'électron entre deux niveaux. Ces cascades produisent des raies larges qui peuvent être observées dans le domaine radio et millimétrique. Cette non-détection est cohérente avec la jeunesse supposée de N63, qui n'a pas encore développé une région HII suffisamment grande pour être détectée et ne montre pas encore d'émission *free-free* centimétrique [Fechtenbaum et al., 2015].

Sur l'ensemble du spectre, 102 molécules possèdent au moins une raie clairement détectée à 4 σ et non mélangée. Ces détections incluent 42 molécules, 37 isotopologues rares, 7 ions et 16 espèces deutérées (dont 3 ions). Le tableau 5.5 répertorie l'ensemble des espèces détectées. Toutes les familles de molécules sont représentées : organiques, COMs, chaînes carbonées, azotées, soufrées. Parmi ces molécules, certaines sont discutées en détail en annexe A : les molécules prébiotiques CH_2NH et NH_2CHO et le méthanol deutéré CH_3OD. Huit espèces supplémentaires font l'objet d'une détection possible (une raie ou plus détectée à 2 ou 3 σ) et sont également présentées en détail : les COMs s-propanal, propynal, CH_3SH et PN, les ions $DOCO^+$, $HCNH^+$ et H_2COH^+. CF^+ est détecté pour la première fois dans une protoétoile (voir Fechtenbaum et al. 2015 en annexe F.2). Le tableau D en annexe présente en détails les propriétés moyennes des raies identifiées.

5.2 Structure spatiale de l'émission moléculaire d'une proto-étoile massive

Pour déterminer précisément les abondances des molécules détectées, il est nécessaire de connaître la taille de la région d'émission. Connaissant la structure globale d'une protoétoile, décrite au chapitre 3, j'ai cherché dans un premier temps à déterminer l'origine spatiale des molécules : enveloppe froide, flots bipolaires, région centrale. J'ai pour cela employé différentes

Oxygénées	COMs		Azotées		Deutérées		Soufrées		CCs
CO	CH_3OH	CH_3CN	CN	HNCO	HDO	c-C_3HD	CS	SO	CCH
HCO	CH_3CHO	C_2H_5CN	NO	HONC	DCO^+	HDCO	CCS	SO^+	c-C_3H
HCO^+	c-C_2H_4O	NH_2CHO	N_2H^+	HCCNC	CCD	o/p-D_2CO	C_3S	SO_2	C_4H
o/p-H_2CO	CH_3OCH_3	CH_3SH ?	HCN	CH_2NH	N_2D^+	$DOCO^+$?	HCS^+	OCS	o/p-c-C_3H_2
$HOCO^+$	CH_3OCHO		HNC	$HCNH^+$?	DCN	CH_2DOH	o/p-H_2S	NS	a/e-CH_3CCH
H_2CCO	C_2H_5OH		HC_3N		DNC	CH_3OD	H_2CS		**Autres**
t-HCOOH	CH_3COCH_3		HC_5N		NH_2D	DC_3N			SiO PN ?
H_2COH^+ ?	CH_3CH_2CHO ?				HDCS	CH_2DCCH			CF^+

FIGURE 5.5 – Molécules détectées vers N63, rangées par familles. Les détections incertaines sont indiquées par un point d'interrogation et sont discutées en annexe A.

méthodes : analyse des profils spectraux, des diagrammes de population, des relations entre la largeur des raies et l'énergie des niveaux ou bien de la température d'excitation. J'ai de plus utilisé des observations des raies moléculaires réalisées avec l'interféromètre du Plateau de Bure.

5.2.1 Analyse des profils spectraux

Raies simples et étroites

L'analyse des profils spectraux montre que les molécules peuvent être classées en deux groupes. Dans le premier, les profils sont correctement ajustés par une unique gaussienne et la largeur des raies est faible, en moyenne 2,2 $\pm$ 0,3 km s^{-1}. C'est le cas pour 34 espèces, incluant les isotopologues rares et les formes ortho et para séparément : 9 chaînes carbonées CCH, ^{13}CCH, c-C_3H, C_4H, p/o-C_3H_2, HCCNC, HC^{13}CCN, HCC^{13}CN et HC_5N, 8 espèces azotées ^{13}CN, HN^{13}C, NO, N_2H^+, ^{15}NNH$^+$, N^{15}NH$^+$, HOCN et CH_2NH, 10 espèces deutérées CCD, DNC, N_2D^+, NH_2D, C_3HD, DCO^+, D^{13}CO$^+$, o/p-D_2CO, DC_3N et CH_2DCCH, 5 espèces oxygénées C^{17}O, ^{13}C^{18}O, HCO^+, HC^{17}O$^+$, HC^{18}O$^+$ et 2 espèces soufrées NS et C_3S. Plusieurs espèces, $HCNH^+$, H_2COH^+, PN, $DOCO^+$ et CF^+, dont les détections sont incertaines et qui sont discutées en détail en annexe A, ont également des profils de raies simples et étroits et des températures faibles. Elles sont pour cette raison ajoutées à ce groupe, mais avec précaution. Les raies sont toutes résolues spectralement. De nombreuses raies appartenant à ce groupe sont de faible intensité. Sur l'ensemble des raies, nous n'avons pas noté de corrélation entre intensité des raies et largeur, indiquant que ces raies sont véritablement étroites et qu'il ne s'agit pas d'un biais.

Dans ce groupe, certaines molécules ont des largeurs de raie aussi faibles que 1,5 à 1,6 km s^{-1} pour CF^+ ou C^{13}CH par exemple. On peut également constater que la plupart des ions appartiennent à ce groupe. Les seuls ions ayant des raies larges sont HCS^+, HCO^+ et $HOCO^+$.

Les ions de l'enveloppe ont une largeur de raie égale à 1,8 km s^{-1}, légèrement plus faible que la moyenne du groupe de l'enveloppe. Cela pourrait être une indication de la présence de champ magnétique, qui diminuerait le mouvement des ions.

Les diagrammes de population de ces espèces (détaillés à la partie suivante 5.2.2) indiquent une température d'excitation moyenne de 10 $\pm$ 2 K. La figure 5.8 en montre deux exemples et l'ensemble des diagrammes de population est visible en annexe B. Au chapitre 4, nous avons vu que Duarte-Cabral et al. [2013] avaient déterminé la température de la composante froide de la poussière comme étant 16,6 $\pm$ 1,6 K, cohérente avec cette température d'excitation moyenne, mais légèrement plus élevée car probablement contaminée par la région centrale chaude (mise en évidence à la partie suivante). Cette faible température et la faible largeur de raie suggère que les molécules de ce groupe tracent l'enveloppe froide.

Raies larges, à deux composantes

La plupart des raies détectées sont en réalité mieux ajustées par deux gaussiennes à la même vitesse, l'une avec une largeur moyenne comparable à celle du premier groupe (2,6 $\pm$ 0,2) km s^{-1} et l'autre nettement plus large avec une moyenne de (8,9 $\pm$ 0,5) km s^{-1}. La figure 5.6 présente un exemple pour une raie de ^{13}CS. 43 molécules appartiennent à ce second groupe. Les raies les plus larges appartiennent à SO_2, SO et SiO, avec des largeurs respectives de (13,1 $\pm$ 2,7), (15,4 $\pm$ 0,1) et (27,4 $\pm$ 0,2) km s^{-1}. Les diagrammes de population réalisés avec la composante gaussienne étroite donnent une température moyenne de (12 $\pm$ 2) K, semblable à celle du groupe aux raies étroites. Les diagrammes tracés avec la composante large indiquent une température moyenne plus élevée, de l'ordre de (24 $\pm$ 3) K. SiO ou SO_2 sont des traceurs connus de chocs générés par les flots bipolaires, causant un élargissement important des raies. On peut alors supposer en première approximation que l'ensemble des molécules de ce groupe est influencé par les flots. La figure 5.7 présente quelques exemples représentatifs des deux groupes.

Pour définir un groupe réduit de traceurs de flots, je fixe un seuil arbitraire de largeur de raie de la composante large supérieure à 10 km s^{-1}, qui est l'ordre de grandeur de la vitesse des flots. Les molécules concernées sont alors : CO, SiO, les molécules soufrées SO_2, H_2CS, OCS, SO, CS et les molécules azotées HC_3N, HCN, HNCO et CH_3CN.

Les raies les plus fortes du relevé appartiennent à CO, CH_3OH, H_2CO, CS, HCN, HNC, HCO^+ et H_2S. La largeur de ces raies va de 3 km s^{-1} pour les raies les plus étroites de HNC jusqu'à 27 km s^{-1} pour le SiO, elles sont donc également probablement influencées par le flot bipolaire. Toutefois, elles présentent également des profils d'absorption complexes, qui pourraient être dus à de l'émission en position *off* du mode d'observation *wobbler*. Ces raies sont donc exclues de cette analyse de profils.

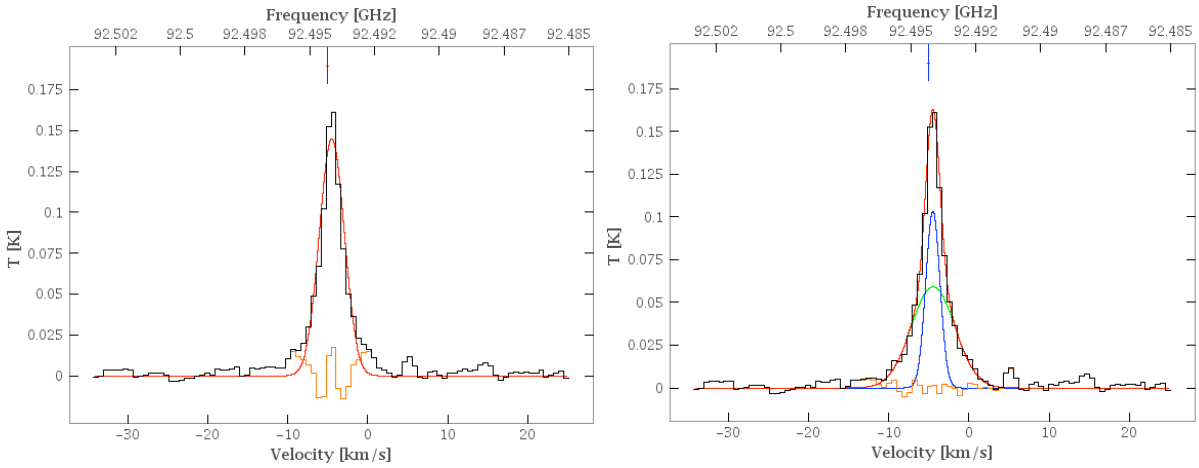


FIGURE 5.6 – Exemple d'ajustement gaussien pour la raie de ^{13}CS (2 - 1). A gauche, la raie est ajustée avec une seule gaussienne. La courbe noire représente l'observation, la courbe rouge l'ajustement global, la courbe orange le résidu. A droite, la raie est ajustée avec deux gaussiennes, une étroite en bleu (FWHM = 2.1 km s^{-1}) et une plus large en vert (6.4 km s^{-1}). La courbe résiduelle montre clairement une amélioration dans le cas de l'ajustement avec deux gaussiennes.

5.2.2 Diagrammes de population

Nous avons vu au chapitre 3, partie 3.4.4, que le tracé de diagrammes de population donne accès, sous certaines conditions, à la température d'excitation et à la densité de colonne des molécules. En premier lieu, l'ETL doit être établi. Celui-ci étant au premier ordre gouverné par la densité, les fortes densités rencontrées dans N63 (supérieures à 10^7-10^8 cm^{-3}) rendent cette hypothèse acceptable. Nous avons quantifié la contribution du rayonnement de fond cosmologique à la partie 3.4.4 à environ 10 % pour une température d'excitation de 10 K à 100 GHz. Enfin, les raies doivent être optiquement minces. J'ai pu le vérifier grâce à la modélisation ETL de CASSIS, qui calcule l'opacité de chaque raie modélisée. Pour les molécules très abondantes, comme par exemple le formaldéhyde, le méthanol ou le CO, j'ai utilisé les nombreux isotopologues rares, optiquement minces, pour tracer les diagrammes. Les rapports isotopiques (voir tableau C.1) appliqués à la région du Cygne [Wilson and Rood, 1994] permettent ensuite d'obtenir les densités de colonne des isotopologues principaux.

J'ai tracé des diagrammes pour toutes les molécules pour lesquelles je disposais d'au moins deux transitions, plus précisément 76 espèces. Lorsque les transitions étaient trop peu nombreuses pour que le diagramme soit fiable, j'ai utilisé la modélisation ETL de CASSIS pour obtenir une estimation de la température d'excitation et de la densité de colonne. La plupart des diagrammes de population ont une pente unique, confirmant que les hypothèses d'ETL et de raies optiquement minces sont raisonnables. Deux exemples de diagrammes de population à pente unique sont donnés à la figure 5.8, partie haute. L'ensemble des diagrammes de population est donné en annexe B.

D'autre part, les diagrammes de population d'une partie des COMs et de plusieurs molé-

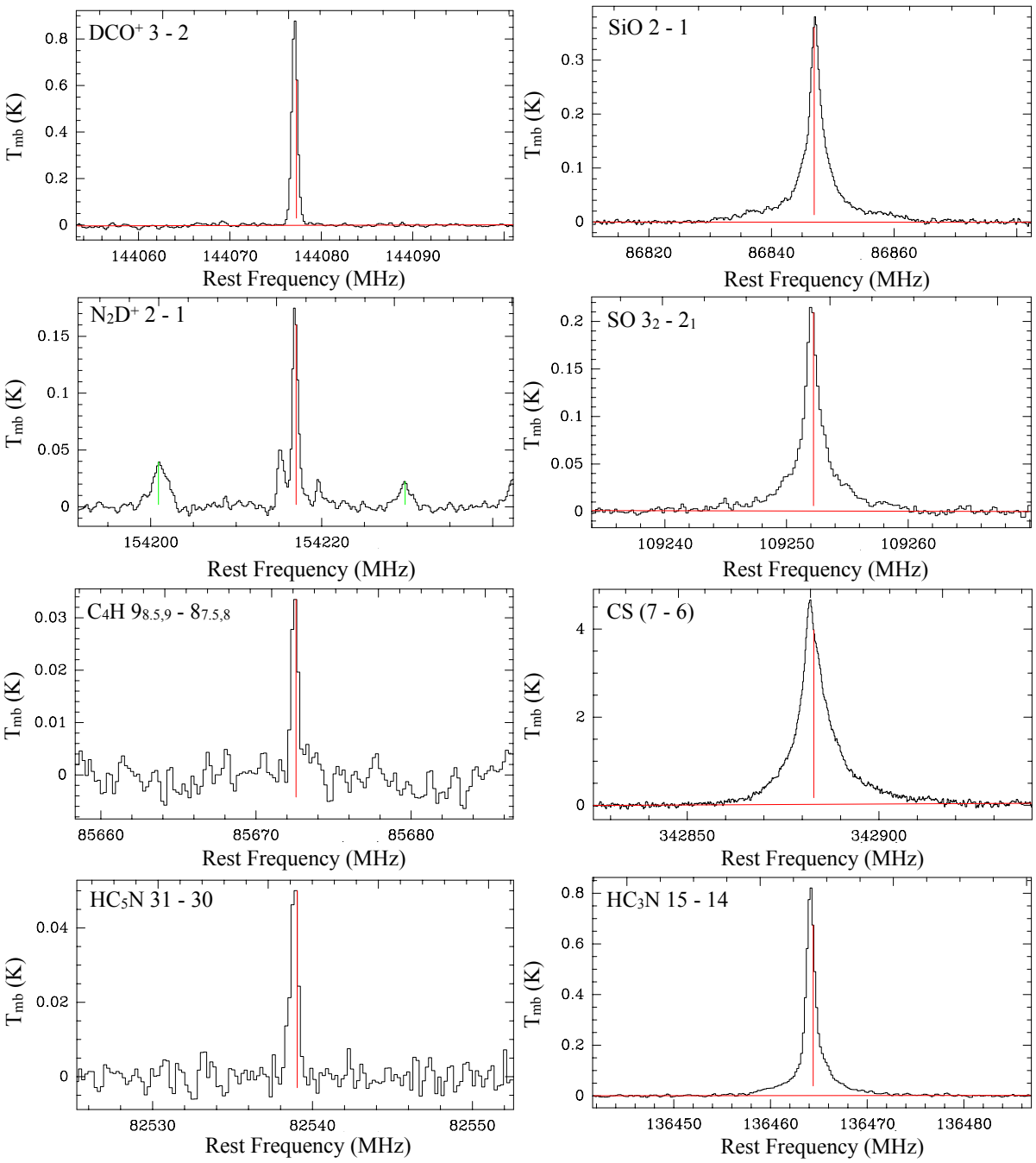


FIGURE 5.7 – Exemples de transitions avec profils étroits (colonne de gauche) et avec profils larges (colonne de droite). La largeur de la fenêtre est de 100 km s^{-1}, sauf pour SiO pour laquelle elle vaut 200 km s^{-1}.

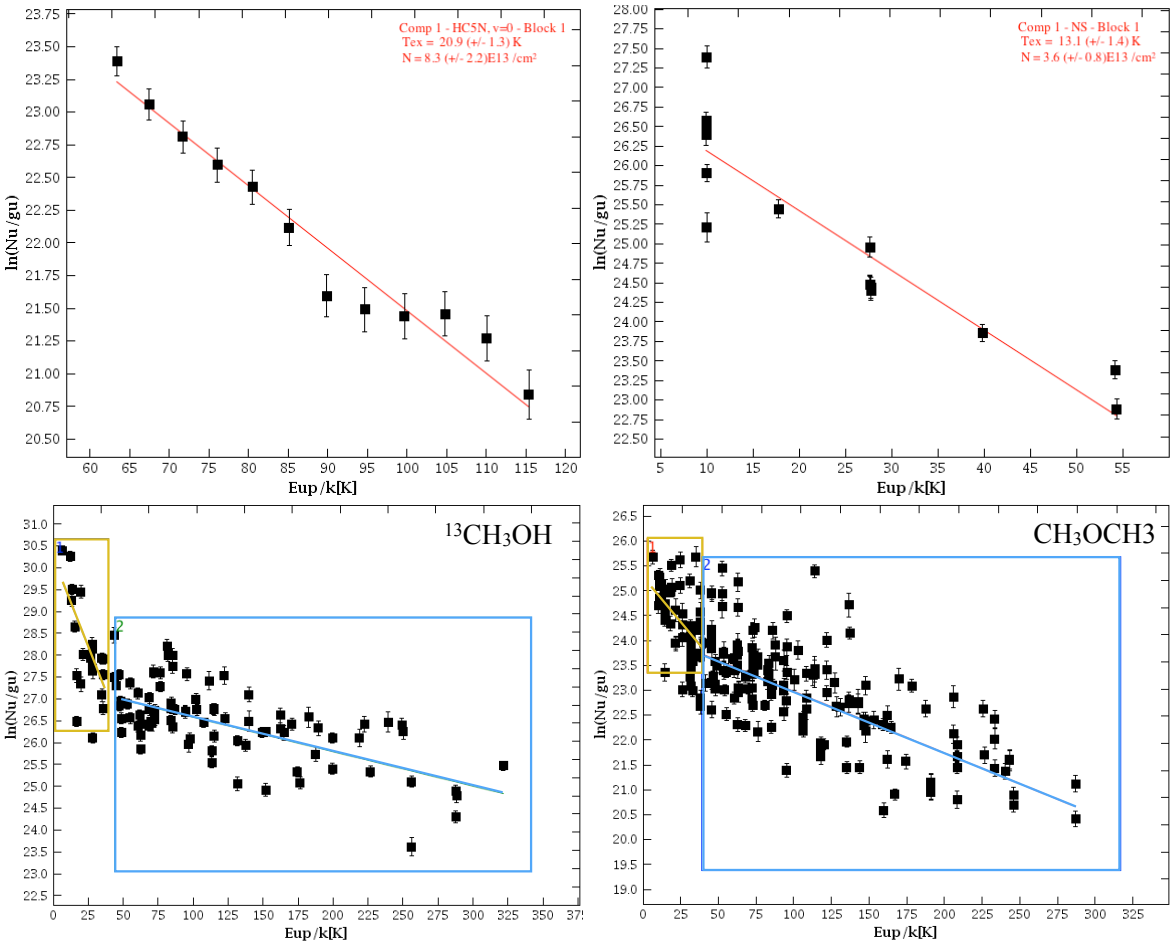


FIGURE 5.8 – Haut : Exemples de diagrammes de population à une pente. Bas : Exemples de diagrammes de population à deux pentes. L'ensemble des diagrammes est présenté en annexe B.

cules oxygénées semblent présenter deux pentes différentes (voir partie basse de la figure 5.8). C'est le cas de $^{13}CH_3OH$, CH_3OCHO et CH_3OCH_3. D'autres diagrammes présentent seulement une légère tendance à 2 pentes. Il s'agit de CH_3CHO, C_2H_5OH, CH_2DOH, des COMs azotés comme CH_3CN et C_2H_5CN. Certaines molécules présentent donc deux températures d'excitation différentes : en moyenne (24 $\pm$ 5) K et (101 $\pm$ 26) K. Cette température de 100 K est compatible avec des régions chaudes proches de la protoétoile, où les glaces des grains sont sublimées et permettent de former des molécules complexes. Ce groupe pourrait alors tracer cette région de type hot core et peut-être une région intermédiaire entre le hot core et l'enveloppe.

La dispersion verticale sur les diagrammes de population des COMs et de certaines autres espèces est importante. Les causes possibles d'une telle dispersion sont : un milieu non ETL, des raies optiquement épaisses, des mauvais ajustements dus à la confusion des raies ou encore un mélange de formes de molécules comme par exemple o-H_2S et p-H_2S (ce n'est pas le cas ici, ces deux formes sont traitées séparément). Les densités importantes de N63 ($\geqslant 10^7$ cm^{-3}) suggèrent que l'ETL doit être atteint. Il est par contre possible que quelques raies ne soient pas optiquement minces. Pour des espèces comme CH_3OCH_3, il est également possible que certaines transitions proches ne soient pas correctement séparées lors de l'ajustement. Concernant le mélange de formes, je les ai séparées chaque fois que les catalogues inclus par CASSIS me le permettaient. Une modélisation tenant compte du transfert radiatif serait d'autre part nécessaire pour expliquer parfaitement cette dispersion. Par manque de temps, celle-ci n'a pas été effectuée.

5.2.3 Modélisation ETL des COMs

Cette forme particulière de diagramme de population pourrait être due à un effet d'opacité, comme l'ont montré par exemple Goldsmith and Langer [1999]. Pour tester cette hypothèse, j'ai modélisé l'ensemble des raies des COMs avec le ou les couples température d'excitation/densité de colonne trouvés grâce aux diagrammes de population et une taille de source de 0,36″ (voir partie 5.3). Le premier résultat de cette modélisation est que les raies de l'ensemble des COMs cités précédemment sont effectivement optiquement minces (de $\tau = 0{,}001$ à 0,1 au maximum pour certaines raies de basse énergie de $^{13}CH_3OH$). Les deux pentes seraient donc réelles et non dues à un effet d'opacité. Un modèle à deux composantes avec une composante chaude et petite (en moyenne 100 K et 0,36″) et une composante froide plus étendue (en moyenne 25 K et 4,3″) reproduit au mieux les observations. C'est ce modèle que nous avons utilisé pour déterminer précisément les abondances des COMs (voir tableau 5.4).

Nous avons tout de même testé la modélisation sans avoir recours à deux températures d'excitation. Pour ces molécules : $^{13}CH_3OH$, CH_2DOH, CH_3CHO, C_2H_5OH, CH_3OCHO et CH_3OCH_3, la modélisation ETL reproduit de façon acceptable l'ensemble des raies (voir la figure 5.9 pour la modélisation de CH_3CHO). Dans ce cas, la température d'excitation moyenne vaut $\sim 51 \pm 6$ K. Ce résultat suggère que la région chaude et l'enveloppe ne sont pas clairement

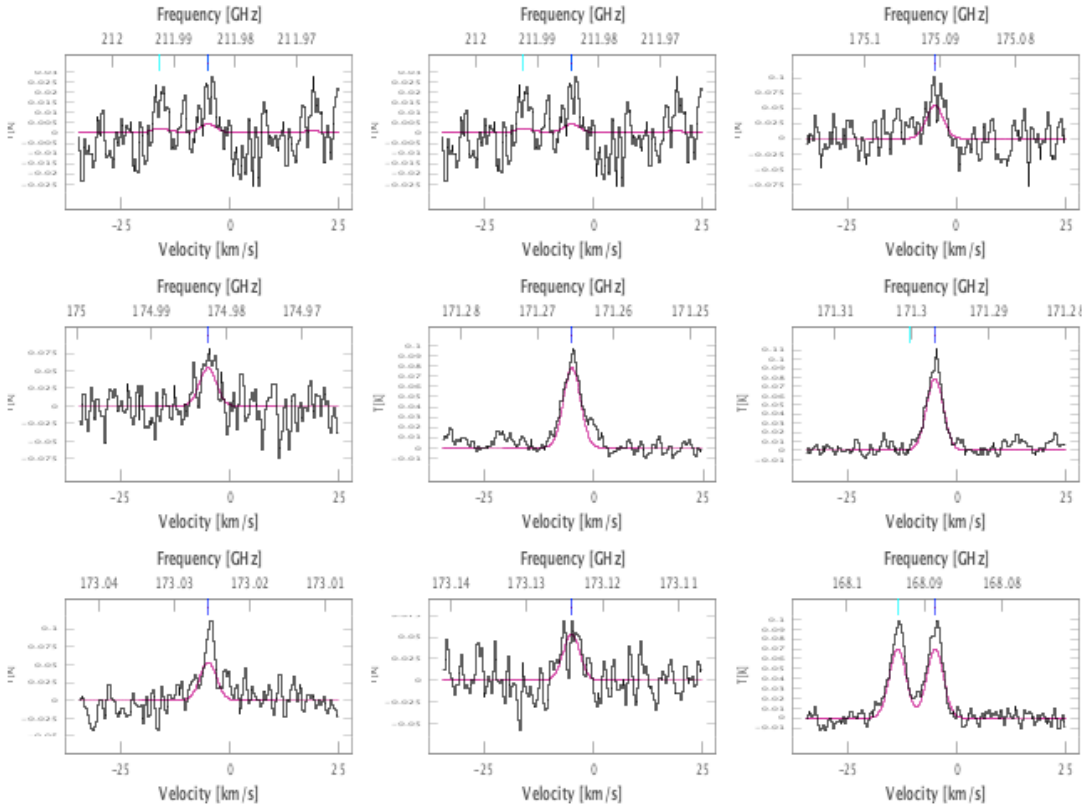


FIGURE 5.9 – Extrait de la modélisation ETL de CH_3CHO.

séparées et que l'écart en température entre les deux n'est pas très important, ce qui permet de modéliser par une température moyenne. Il existe probablement une zone de transition entre ces deux régions.

Les diagrammes de population de HDCS, de HCOOH et de CH_2CO présentent une unique pente mais affichent une température élevée (24 K, 28 K et 71 K respectivement). Ils pourraient être pour cette raison des traceurs d'une région intermédiaire entre le cœur à 100 K et l'enveloppe à 10 K . Les transitions de C_2H_5CN sont assez mal reproduites par le modèle ETL, que ce soit avec une seule température moyenne ou bien avec deux.

5.2.4 Relation entre largeur de raie et vitesse LSR

Pour aller plus loin dans l'analyse de l'origine des émissions moléculaires, on peut aussi étudier la distribution des vitesses centrales des raies détectées. Le grand nombre d'espèces détectées rend possible ce type d'analyse statistique. Seules sont considérées dans cette partie les raies ayant un profil à une seule gaussienne. La figure 5.10 montre la largeur en fonction de la vitesse des raies et fait apparaître deux comportements.

Le premier présente des raies étroites, 2 km s^{-1}, ayant une vitesse centrée sur -4,4 km s^{-1}. Ces coordonnées sont représentés par le point rouge. Ce groupe correspond globalement aux molécules de l'enveloppe froide précédemment identifiées, ayant un profil simple et étroit. Le

deuxième groupe est centré sur une vitesse légèrement décalée, à -5,1 km s^{-1} et une largeur plus importante 4,1 km s^{-1}. Ces valeurs moyennes sont représentées par le point bleu. L'incertitude sur les vitesses est de l'ordre de 0,2 km s^{-1}. Cette différence de vitesse entre les deux groupes est donc faible en comparaison de la largeur des raies (un tiers de la largeur des composantes étroites) mais est tout de même significative. Ce groupe contient de nombreux COMs, mais aussi des molécules soufrées et azotées. Cette largeur plus importante peut alors être due à l'influence du flot et/ou par le fait que ces molécules sont situées plus près du centre, où l'on attend une dispersion de vitesse plus importante due à l'effondrement ou à la rotation. Enfin, un certain nombre d'espèces, comme CH_3OCH_3, CH_3OCHO, des espèces soufrées et azotées, présentent un comportement intermédiaire, semblant faire le lien entre l'enveloppe froide et la région centrale chaude.

Une autre explication à la différence de vitesse entre les deux groupes est la présence d'une binaire, les deux membres ayant des compositions chimiques différentes, comme pour IRAS16293. La binaire devrait alors être plus serrée que 500 UA, inférieur à la résolution des observations au PdBI, qui n'avaient pas révélé de binaire (voir chapitre 4). Une explication alternative est l'influence du flot bipolaire. La partie du flot venant vers nous est proche de la direction de la ligne de visée (voir figure 4.6) et pourrait entraîner une partie de la matière et modifier la vitesse moyenne de l'enveloppe.

5.2.5 Relation entre largeur de raie et température d'excitation

La figure 5.11 présente la largeur de raie en fonction de la température d'excitation. Une molécule peut avoir deux points sur cette figure, lorsque ses profils de raie ont été décomposés en une composante large et étroite, comme pour OCS par exemple, ou bien lorsque son diagramme de population présentait deux pentes, comme pour la plupart des COMs. La plupart des molécules se trouve dans une zone où la température d'excitation est faible (< 30 K) ainsi que la largeur de raie (< 5 km s^{-1}). Ce groupe est représenté par la zone verte. On observe que ce groupe s'étale vers les températures plus élevées, jusqu'à ∼180 K, avec une largeur de raie légèrement croissante, bien visible sur la partie basse de la figure 5.11. Les molécules ayant les températures les plus élevées sont toutes des COMs, indiquant la région centrale chaude (zone rose). Cette augmentation de la largeur de raie avec la température d'excitation a déjà été observée et est probablement due au gaz en effondrement sur la protoétoile (Ceccarelli et al. [2003], Caux et al. [2011]). Ces largeurs de raie peuvent nous donner une estimation de la masse de l'objet central :

$$\mathrm{M}(\mathrm{M}_\odot) = 1.4 \times 10^{-4}(\mathrm{FWHM}^2 - \delta^2_{\mathrm{th}})\mathrm{r} \tag{5.1}$$

avec FWHM la largeur de raie du groupe des COMs, valant 4,1 km s^{-1}, et δ^2_{th} la largeur thermique, égale à la plus faible largeur des raies des traceurs de l'enveloppe froide : 1,5 km s^{-1}. En prenant le rayon approximatif de l'enveloppe de poussière r ∼ 1000 ua, on obtient une masse centrale de 2 $M_\odot$, ce qui est compatible avec les estimations de Duarte-Cabral et al. [2013]

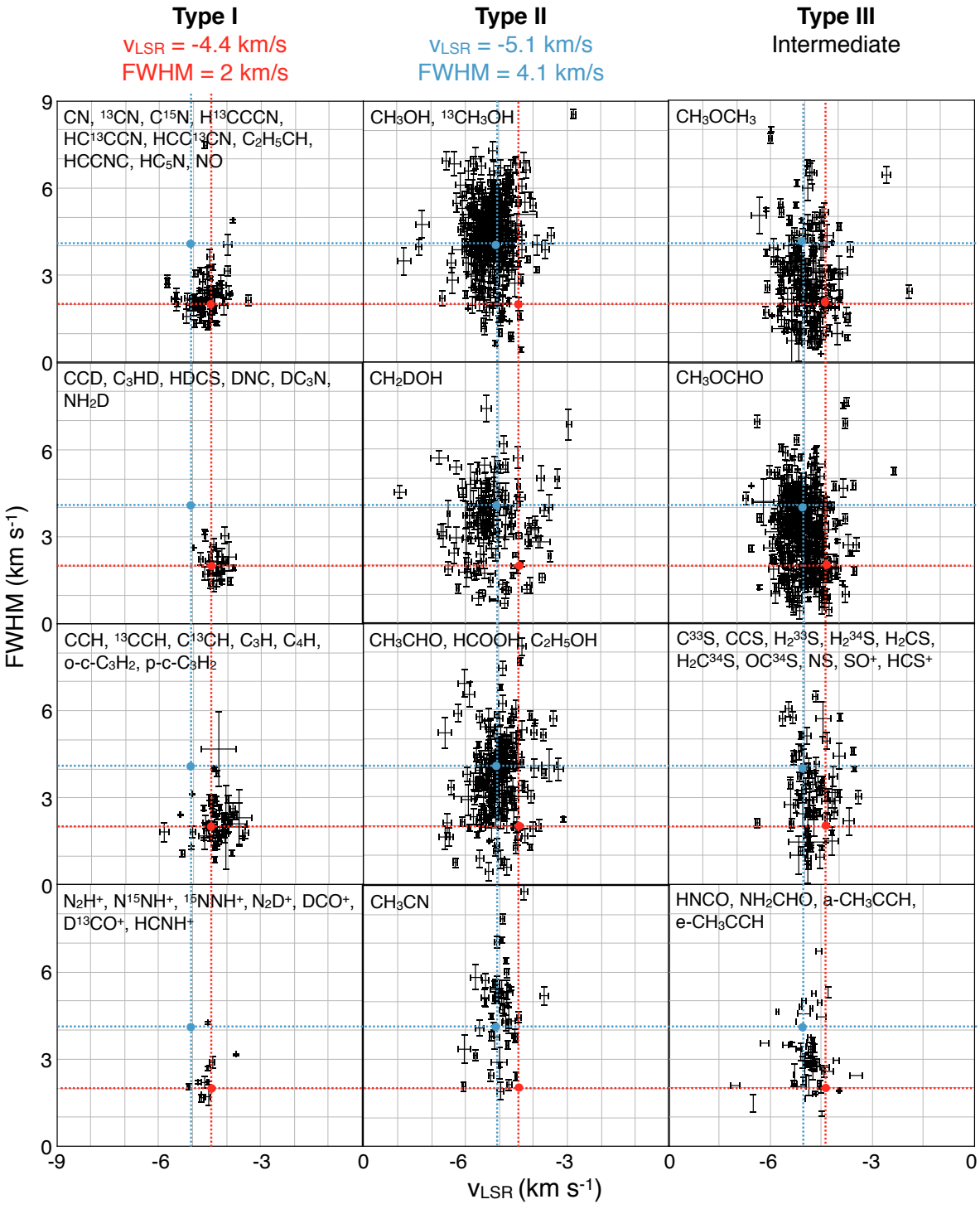


FIGURE 5.10 – Largeur de raie en fonction de la vitesse LSR. Deux comportements sont mis en valeur. Le premier type regroupe les molécules ayant une vitesse centrée sur -4,4 km s^{-1} et une largeur faible autour de 2 km s^{-1} (première colonne). Le point rouge correspond à ce couple de valeurs. Le deuxième type correspond à une vitesse de -5,1 km s^{-1} et une largeur de 4,1 km s^{-1} (point bleu, deuxième colonne). Certaines espèces ont un comportement intermédiaire (troisième colonne).

basées sur le placement de N63 dans un diagramme évolutif.

La transition entre la région chaude et l'enveloppe froide (zone jaune), entre 30 et 100 K, est constituée par les composantes spectrales étroites des traceurs de flots (OCS, SO_2, $H_2^{34}S$..) et par les composantes froides des COMs dont les diagrammes de population présentaient deux pentes (CH_3OCHO, CH_3OCH_3, C_2H_5CN...).

La contamination par le flot est visible pour de nombreuses espèces soufrées comme o-H_2S, ^{13}CS, ^{34}SO... qui possèdent des raies de largeur supérieure à 5 km s^{-1}.

5.3 Détermination de la taille d'émission

La répartition spatiale d'une partie des molécules est maintenant connue. Il nous faut à présent déterminer la taille des différentes régions pour y obtenir des abondances précises. Deux méthodes ont été employées à cette fin, la première utilise les observations à haute résolution de certaines transitions au PdBI, la seconde utilise la modélisation ETL des raies optiquement épaisses.

5.3.1 Relation entre largeur de raie et taille d'émission

Une partie du spectre observé au 30 m a été également observée au PdBI grâce à WIDEX entre 90 et 93.6 GHz (voir chapitre 4 pour plus de détails). Nous avons également effectué d'autres observations en configuration AB pour 8 raies à haute résolution spectrale et avec WIDEX entre 228,75 et 229,65 GHz et entre 230,45 et 231,45 GHz. Le tableau E, en annexe, présente l'ensemble des raies observées. L'objectif de cette partie est de trouver une relation entre largeur de raie et taille d'émission pour les raies contenues dans cette bande, pour pouvoir la généraliser à toutes les raies observées au 30 m.

Cartes de l'émission moléculaire

Pour l'ensemble des observations, le continuum a été retiré. Pour chaque transition, j'ai extrait les canaux contenant la raie puis lancé une procédure de *clean*. Chaque carte des figures 5.12 et 5.13 représente l'émission de la poussière à 1 mm, à laquelle est superposée l'émission de la molécule. La taille d'émission est alors aisément mesurable. La plupart des espèces montre un diamètre d'émission de 4 - 5″. Cette taille est cohérente avec celle estimée par Motte et al. [2007] autour de 6000 au de diamètre, soit 4,3″. Nous adoptons cette taille dans toute la suite du travail comme étant la taille de l'enveloppe. D'autre part, trois espèces ont une émission de plus de 10″ de diamètre : HC_3N, HNC et N_2H^+.Toutefois, le PdBI pouvant filtrer les structures les plus étendues, cette taille est plus incertaine.

Un petit groupe de transitions est détecté au 30 m mais pas au PdBI. Il s'agit des transitions de c-C_3H, C_3S, CCS, DC_3N, DNC, HC_5N, N_2D^+ et $S^{18}O$. Sachant que N_2H^+, HNC et HC_3N sont étendues, on peut supposer que N_2D^+, DNC et DC_3N le sont également. Leur émission est

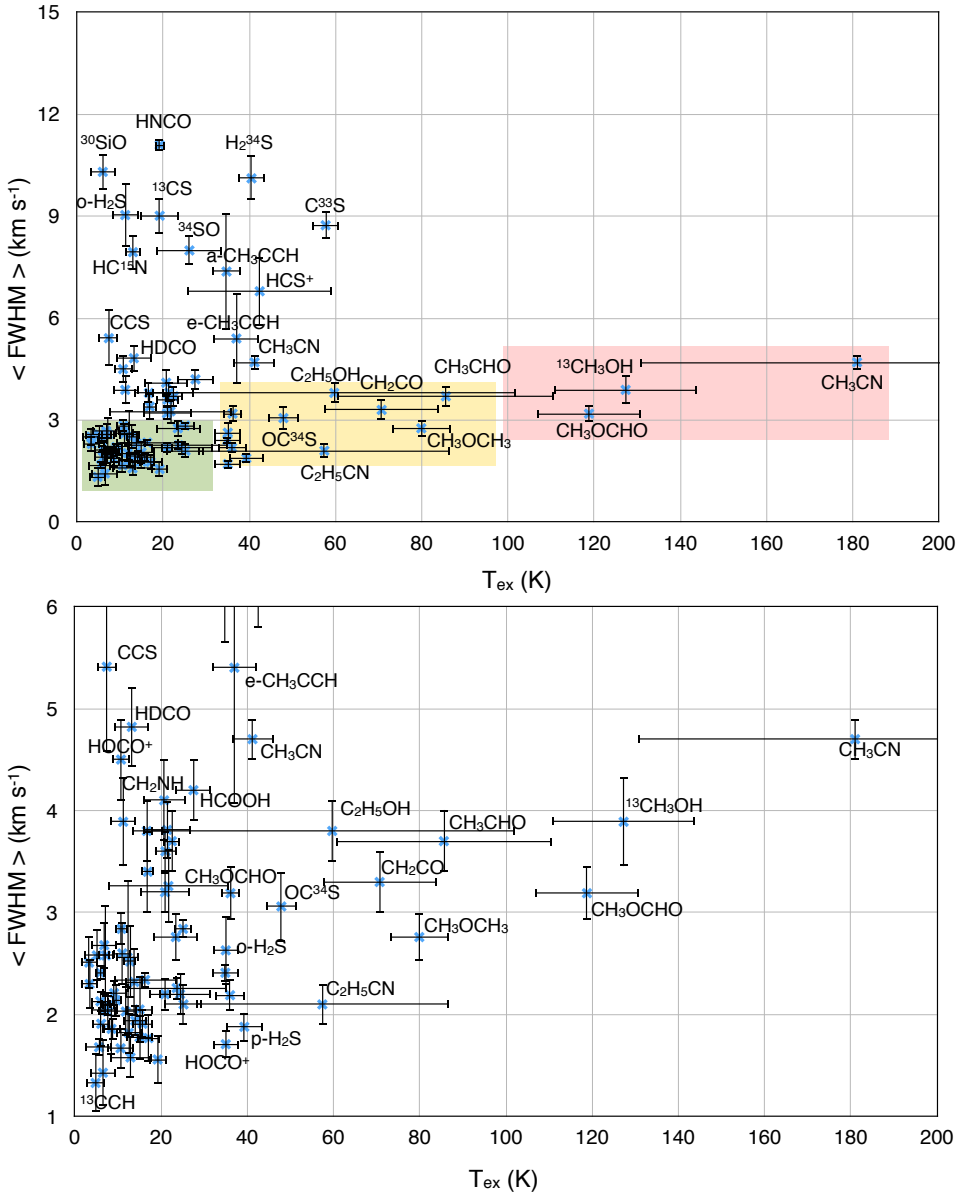


FIGURE 5.11 – Largeur moyenne des raies en fonction de la température d'excitation (haut) et zoom sur les largeurs comprises entre 1 et 6 km s^{-1} (bas). La zone verte regroupe les espèces de l'enveloppe froide, la zone jaune celles de la région intermédiaire et la zone rose celles de la région centrale chaude.

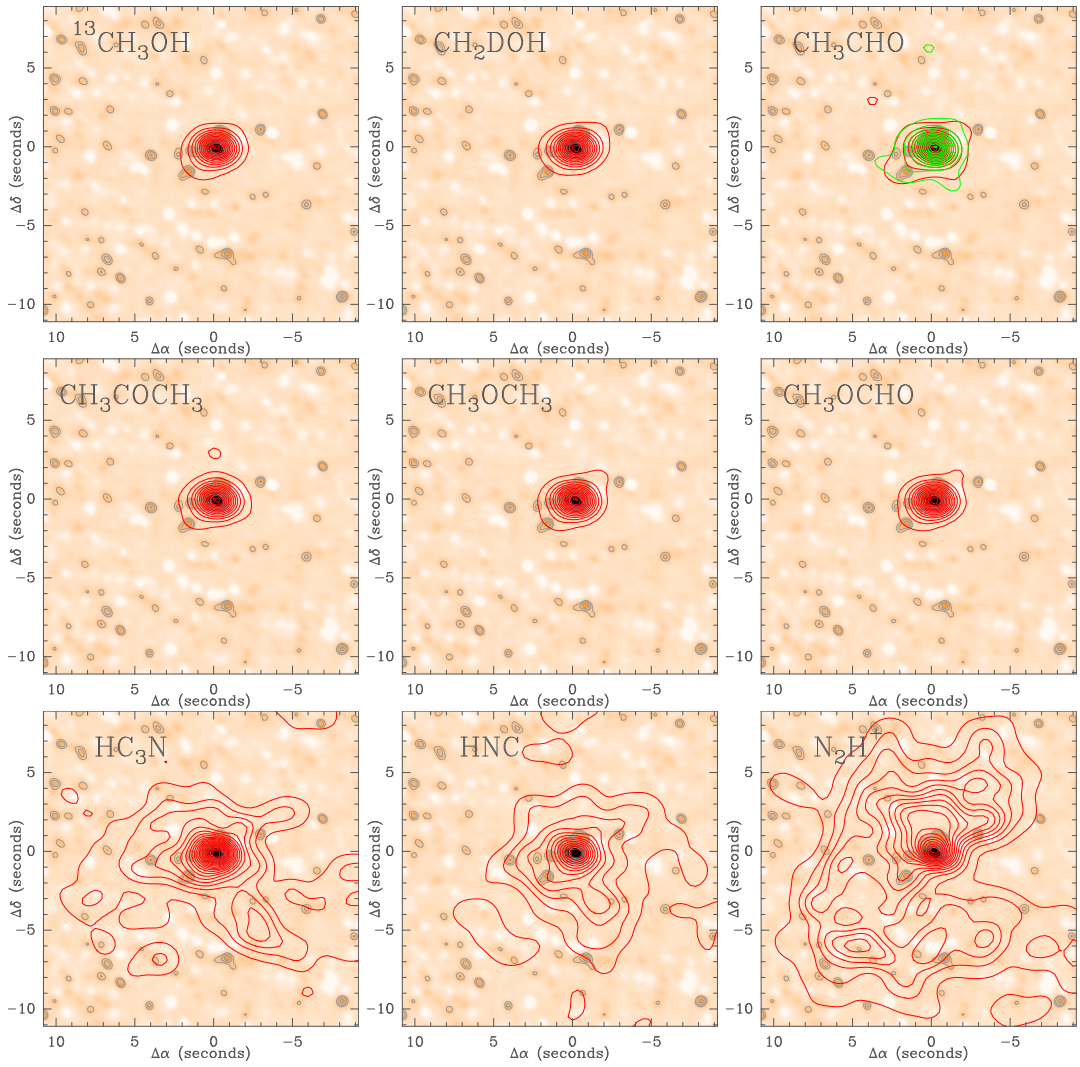


FIGURE 5.12 – Cartes d'émission à 3 mm pour $^{13}CH_3OH$ ($13_{1,13,+0}$ - $12_{2,10,+0}$), CH_2DOH ($9_{1,8,1}$ - $9_{0,9,1}$), CH_3CHO ($5_{1,5,0}$ - $4_{1,4,0}$) et ($5_{1,5,1}$ - $4_{1,4,1}$), CH_3COCH_3 ($9_{0,9,0}$ - $8_{0,8,1}$), CH_3OCH_3 ($6_{0,6,3}$ - $5_{1,5,3}$), CH_3OCHO ($8_{0,8,0}$ - $7_{0,7,0}$), HC_3N (10 - 9), HNC (1 - 0), N_2H+(1 - 0) en contours rouges (et vert pour la seconde raie de CH_3CHO) et superposées au continuum (en dégradé de brun) à 1 mm obtenu avec le PdBI. L'image du continuum est en échelle linéaire de -3 σ à 30 σ. Les contours sont logarithmiques : 3 σ, 4.8 σ, 7.5 σ, 12 σ, 19 σ,30 σ, 48 σ. Les contours pour l'émission moléculaire vont de 10 mJy à 2 Jy par pas de 15 mJy.

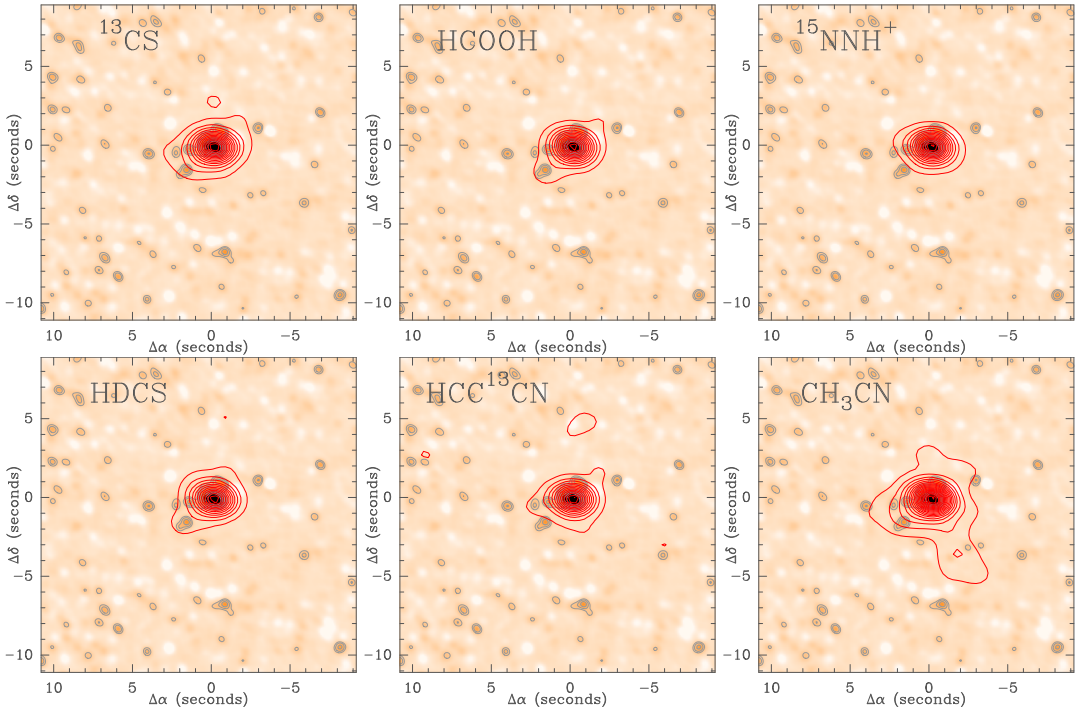


FIGURE 5.13 – Cartes d'émission à 3 mm (contours rouges) pour ^{13}CS (2 - 1), HCOOH ($4_{1,3}$ - $3_{1,2}$), ^{15}NNH+ (1 - 0), HDCS ($3_{0,3}$ - $2_{0,2}$), HCC^{13}CN (10_{10}- 9_9) et CH_3CN (5 - 4). Le code couleur est similaire à celui de la figure 5.12.

alors à la fois faible et étendue, elle est probablement filtrée par le PdBI. C'est également le cas de CF^+, qui est discuté en détail à la partie 5.6.

En guise d'exemple, la figure 5.14 présente les cartes de N_2H^+, de $N^{15}NH^+$ et N_2D^+ et les raies correspondantes. On peut voir que N_2D^+ n'est pas détecté au PdBI alors que la raie au 30 m est plus intense que celle de $N^{15}NH^+$, qui, elle, est détectée au PdBI. La situation est exactement la même pour HC_3N, HCC^{13}CN et DC_3N. Cela signifie que l'émission des espèces deutérées n'est pas piquée au centre, sinon elle serait facilement détectée par le PdBI. La deutération serait donc plus importante dans les parties externes de l'enveloppe, ce qui est le cas si les espèces deutérées sont détruites au centre. La deutération sera discutée plus en détail à la partie 6.2.3.

Pour les autres espèces c-C_3H, C_3S, CCS, $S^{18}O$, HC_5N et CF^+, cette non détection au PdBI signifierait de même que l'émission n'est pas piquée au centre mais au contraire plutôt étendue et faible. On peut s'attendre à ce que $S^{18}O$, comme isotopologue rare d'un traceur de flots, ne soit pas centré sur la source mais sur les zones de chocs. Pour les autres espèces, il peut y avoir deux raisons à cette non-détection : elles se forment uniquement dans une coquille où les conditions physiques sont favorables et/ou elles sont détruites au centre. On peut remarquer qu'il s'agit principalement de chaînes carbonées. Sakai et al. [2008a] rapportent que les chaînes carbonées sont habituellement rares dans les régions de formation stellaire comme IRAS16293. Ces mêmes auteurs prévoient que les chaînes carbonées de type C_nH_m doivent être détruites

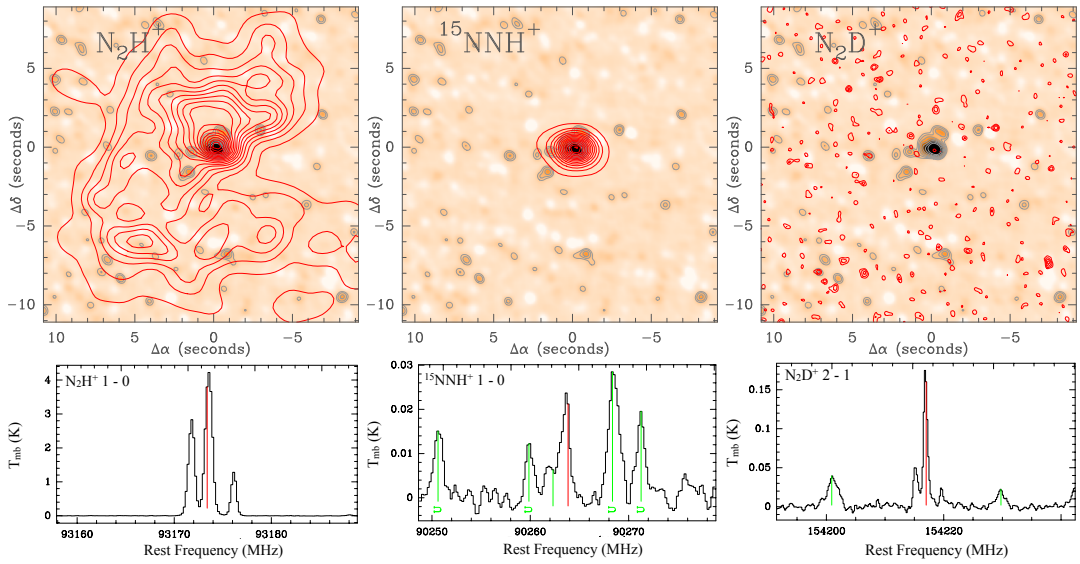


FIGURE 5.14 – Cartes de l'émission de N_2H^+, de $N^{15}NH^+$ et N_2D^+ et raies correspondantes. Sur les deux premières cartes, les contours vont de 3 mJy à 1,5 Jy par pas de 5 mJy, tandis que sur celle de N_2D^+, le niveau le plus bas est 10 mJy.

ou déplétées dans les parties les plus internes proches de la protoétoile, creusant un trou central dans leur distribution spatiale. CCS et HC_5N (ainsi que HC_3N) sont aussi reconnues comme étant des espèces représentant des stades précoces de l'évolution chimique des cœurs denses [Suzuki et al., 1992], qui sont déficientes dans les parties centrales évoluées [Tafalla et al., 1998]. Ces molécules seraient donc un reste de la chimie de nuage sombre, lorsque les chaînes carbonées se formaient en phase gazeuse à partir de C^+ et de C, avant que le CO ne soit déplété [Sakai et al., 2008a]. Cette hypothèse est corroborée par la comparaison de la composition chimique globale de N63 avec d'autres sources (voir partie 6.1), ainsi que par la présence parmi ces espèces de CF^+ dont l'abondance est directement reliée à celle de C^+.

5.3.2 Modélisation ETL de l'émission moléculaire

L'utilisation des données PdBI a permis de confirmer la taille de l'enveloppe, autour de 4,3″. La taille d'émission des COMs, probablement bien plus réduite, et celle des espèces étendues, est encore mal contrainte. Nous avons alors encore une fois tiré avantage du relevé spectral, non biaisé et sensible. La dynamique typique de plusieurs centaines pour les raies fortes permet de détecter simultanément les isotopologues principaux et rares. Dans ces cas, il est possible d'estimer les opacités et d'obtenir des estimations des tailles d'émission par modélisation ETL. La modélisation de l'isotopologue mince permet de contraindre la densité de colonne, en fixant la température d'excitation précédemment déterminée grâce au diagramme de population. Cette densité de colonne, multipliée par le rapport isotopique approprié, est alors utilisée pour modéliser l'isotopologue optiquement épais, permettant alors d'obtenir une limite supérieure pour la

taille d'émission.

Emission compacte du méthanol

Un grand nombre de transitions du méthanol et de son isotopologue rare $^{13}CH_3OH$ sont détectées. J'ai utilisé 12 transitions non mélangées et bien détectées pour les deux isotopologues. Le tableau 5.2 présente l'ensemble des résultats pour le méthanol. Pour modéliser la transition de l'isotopologue rare, j'ai utilisé une taille de 4,3″, qui est la taille supposée de l'enveloppe. Le diagramme de population de $^{13}CH_3OH$ indique deux températures d'excitation : une composante froide à $\sim$ 10 K pour les transitions d'énergie inférieure à $\sim$ 50 K, et une composante chaude à $\sim$140 K pour les transitions d'énergie supérieure de 50 K (voir figure 5.8). Pour modéliser les raies d'énergie E_{up} > 170 K (partie basse du tableau 5.2), j'ai choisi la température d'excitation de 140 K. Pour les raies < 150 K, j'ai essayé les deux températures.

La modélisation de la raie de l'isotopologue mince avec la taille et la température d'excitation fixées me donne alors une densité de colonne. J'utilise ensuite cette densité de colonne, multipliée par le rapport isotopique 70,6 (voir tableau C.1) pour estimer celle de l'isotopologue principal. En gardant la même température d'excitation que pour l'isotopologue ^{13}C, j'utilise alors la modélisation ETL pour estimer la taille d'émission de l'isotopologue principal.

Les transitions d'énergie E_{up} > 160 K sont correctement modélisées par une composante chaude (χ^2 réduit moyen $\sim$ 2). La modélisation indique alors une taille d'émission de 0,36″. Pour les trois transitions d'énergie comprise entre 28 et 99 K, les raies sont correctement reproduites par la modélisation d'une émission compacte et chaude (0,45″ et 140 K) mais aussi par une émission plus étendue et froide (2 à 5″ et 11 K, température de la composante froide du diagramme de population), même si ce dernier choix génère une grande variabilité dans la densité de colonne obtenue, suggérant que ce n'est pas la meilleure option. Cela suggère que ces transitions tracent une région intermédiaire, moins chaude et moins centrale. En utilisant une température intermédiaire de 40 K, le meilleur fit est obtenu pour ces raies, donnant alors une taille de 1,5″. La transition de plus basse énergie ne peut pas, quant à elle, être modélisée par une émission compacte et chaude. Une émission froide et étendue est nécessaire. La taille obtenue pour cette transition est de 20″, ce qui est assez peu fiable car l'opacité de l'isotopologue est plutôt modérée. Des ajustements acceptables sont obtenus avec des tailles de l'ordre de quelques secondes d'arc.

La modélisation de la composante chaude du méthanol donne alors une taille moyenne de 0,36″ et une densité de colonne de $\sim 1 \times 10^{18}$ cm^{-2}.

Emission des raies fortes et étendues : N_2H^+, HNC, CS, p-H_2CO, HCO^+, DCO^+

Pour ces molécules, la modélisation partant d'une taille initiale de 4,3″ ne donne pas de bons résultats. J'ai donc essayé de commencer avec des tailles plus grandes en essayant 10, 15, 20, 25 et 30″. Le meilleur fit pour l'isotopologue principal est presque toujours obtenu avec 30″.

TABLE 5.2 – Résultat de la modélisation de CH_3OH et $^{13}CH_3OH$. L'énergie de la transition et la densité de colonne sont celles de l'isotopologue principal. La taille initiale supposée pour la modélisation de l'isotopologue rare est à chaque fois 4,3″. Les températures d'excitation proviennent du diagramme de population de $^{13}CH_3OH$.

Transition	E_{up}/k	Comp. froide			Comp. chaude		
		T_{ex}	N	Diamètre	T_{ex}	N	Diamètre
	(K)	(K)	(cm^{-2})	(″)	(K)	(cm^{-2})	(″)
$2_{-1,2,0}$ - $1_{-1,1,0}$	13	11	4.06(15)	20	-	-	-
$3_{1,3,+0}$ - $4_{0,4,+0}$	28	11	2.73(16)	1.85	130	2.38(18)	0.40
$5_{2,4,-0}$ - $4_{2,3,-0}$	73	11	1.05(18)	2.59	130	1.12(18)	0.44
$6_{3,3,-0}$ - $6_{2,4,+0}$	99	11	4.62(18)	5.47	130	5.88(17)	0.52
$10_{2,8,+0}$ - $9_{3,7,+0}$	165	11	6.44(21)	1.29	130	2.03(18)	0.25
$10_{3,8,+0}$ - $10_{2,9,-0}$	177	11	-	-	130	4.69(17)	0.25
$9_{4,5,+0}$ - $10_{3,8,+0}$	184	11	-	-	130	2.73(18)	0.4
$11_{3,9,+0}$ - $11_{2,10,-0}$	202	11	-	-	130	5.95(17)	0.32
$12_{3,10,+0}$ - $12_{2,11,-0}$	230	11	-	-	130	5.95(17)	0.35
$13_{3,10,-0}$ - $13_{2,11,+0}$	261	11	-	-	130	5.04(17)	0.42
$14_{3,12,+0}$ - $14_{2,13,-0}$	293	11	-	-	130	7.00(17)	0.35
$15_{3,12,-0}$ - $15_{2,13,+0}$	328	11	-	-	130	1.63(18)	0.25

Le tableau 5.3 présente les résultats des modélisations pour le meilleur ajustement obtenu. La modélisation de ces raies conduit à des tailles d'émission importantes, de 10 à 30″. La taille de DCO^+, entre 2 et 10″, est moins bien contrainte du fait de sa faible opacité. Les diagrammes de population des isotopologues de N_2H^+ indiquaient une température d'excitation de 7 K, ceux-ci étant constitués chacun de seulement deux points, j'ai choisi d'utiliser une température moyenne d'enveloppe de 10 K.

Je ne dispose pas d'isotopologue rare de DNC, mais la modélisation montre que les transitions $3 \rightarrow 2$ et $2 \rightarrow 1$ sont optiquement épaisses tandis que la transition $4 \rightarrow 3$ est optiquement mince, en utilisant T_{ex} = 6 K dérivé des diagrammes de population des isotopologues rares de HNC. Comme précédemment, j'ai essayé différentes tailles initiales pour cette transition mince. Pour une taille initiale de 15″, la modélisation des transitions $3 \rightarrow 2$ et $2 \rightarrow 1$ suggère une taille de 7-8″. Les raies de N_2D^+ et DC_3N sont toutes optiquement minces, je ne peux donc pas utiliser cette méthode pour dériver une taille.

Emission de taille intermédiaire : OCS, H_2S, H_2CS et SO_2

La modélisation de ces quatre molécules indique une taille moyenne de 3,5 ″, avec des températures légèrement plus élevées que les molécules étendues, allant de 25 à 40 K. Les transitions des isotopologues principaux présentent une légère composante large due au flot bipolaire, qui n'est pas prise en compte dans la modélisation. Par simplicité, l'ensemble de la raie est alors modélisé comme étant une seule gaussienne.

TABLE 5.3 – Résultat de la modélisation des espèces autres que le méthanol. L'énergie de la transition et la densité de colonne sont celles de l'isotopologue principal. La température d'excitation est imposée par le diagramme de population de l'isotopologue rare (sauf pour N_2H^+, DCO^+ et SO_2 pour lesquels la température est fixée à 10 K).

Transition	Isotopologue rare	E_{up}/k (K)	T_{ex} (K)	N (cm^{-2})	Diamètre ($''$)
N_2H^+ (1-0)	$^{15}NNH^+$	4	10	1.1(14)	24
N_2H^+ (3-2)	$^{15}NNH^+$	26	10	8.5(13)	11
p-H_2CO ($2_{0,2}$-$1_{0,1}$)	^{13}C	10	24	1.2(14)	14
p-H_2CO ($3_{0,3}$-$2_{0,2}$)	^{13}C	21	24	1.2(14)	14
p-H_2CO ($4_{2,2}$-$3_{2,1}$)	^{13}C	52	24	7.7(13)	6
p-H_2CO ($3_{0,3}$-$2_{0,2}$)	^{13}C	68	24	1.1(15)	5
CS (2-1)	^{33}S	7	15	1.3(15)	11
CS (5-4)	^{13}C	35	15	1.3(15)	7
CS (6-5)	^{34}S	50	15	9.5(14)	11
DCO^+ (2-1)	^{13}C	10	10	5.6(13)	10
HCO^+ (3-2)	^{18}O	25	7	5.0(13)	11
HNC (1-0)	^{15}N	5	10	4.5(14)	16
HNC (3-2)	^{15}N	26	10	1.1(14)	6
DNC (2-1)	-	11	6	1.3(13)	8
DNC (3-2)	-	22	6	1.3(13)	7
SO_2 ($3_{2,2}$-$3_{1,3}$)	^{34}S	15	10	1.2(14)	6
H_2CS ($3_{0,3}$-$2_{0,2}$)	^{34}S	10	21	1.5(15)	4
H_2CS ($4_{1,3}$-$3_{1,2}$)	^{34}S	29	21	3.5(14)	6
H_2CS ($5_{1,5}$-$4_{1,4}$)	^{34}S	37	21	2.4(14)	6
H_2CS ($7_{1,6}$-$6_{1,5}$)	^{34}S	60	21	2.6(14)	5
OCS (12-11)	^{34}S	44	48	2.0(15)	3
OCS (14-13)	^{34}S	61	48	2.9(15)	3
OCS (18-17)	^{34}S	100	48	4.2(15)	3
OCS (19-18)	^{34}S	108	48	4.0(15)	1
p-H_2S ($2_{2,0}$-$2_{1,1}$)	^{34}S	83	35	5.8(15)	1
o-H_2S ($3_{3,0}$-$3_{2,1}$)	^{34}S	149	35	1.8(15)	3

5.4 Conclusions sur la décomposition spatiale

Nous avons pu déterminer l'origine d'une grande partie des molécules. Le tableau 5.4 résume cette décomposition en plaçant chaque espèce dans une ou plusieurs régions : enveloppe, région intermédiaire, hot core, flot. La température d'excitation, la densité de colonne et la méthode employée sont indiquées pour chaque espèce.

La majorité des espèces trace seulement l'enveloppe. Les traceurs d'enveloppe sont considérés comme tel lorsque leur température d'excitation est inférieure à 25 K et que leur largeur de raie est inférieure à 3 $\mathrm{km\,s^{-1}}$. La taille de l'enveloppe a été confirmée par les observations PdBI et vaut 4,3″, soit $\sim$ 6000 UA.

36 espèces tracent le flot, de manière plus ou moins prononcée. La taille de cette région est une des plus incertaines, elle est probablement très variable d'une molécule à l'autre. La seule observation PdBI montrant l'extension du flot est celle du CO, correspondant à une région de $\sim$ 11″ de diamètre. Les molécules traçant le flot possèdent également une composante plus froide, qui sera notée par convention tiède pour T > 25 K ou froide pour T < 25 K. Nous n'avons pas pu déterminer une densité de colonne dans le flot pour chaque espèce car les raies décomposables en deux sont parfois rares pour certaines espèces.

9 COMs présentent deux pentes dans leur diagramme de population, indiquant une température basse, proche de celle de l'enveloppe et une température élevée, pouvant correspondre à une région de type hot core. La modélisation des raies de méthanol a montré que la taille de cette région chaude centrale est de l'ordre de 0,36″, tandis que la modélisation de OCS, H_2S et H_2CS et SO_2 a montré qu'une région de taille intermédiaire, autour de 3,5″ pourrait correspondre à la transition entre la région chaude et l'enveloppe froide.

5.5 Détermination des abondances

Maintenant que les tailles d'émission des différents groupes de molécules ont été déterminées, il faut estimer la densité de colonne de H_2 pour calculer leurs abondances. Motte et al. [2007] ont estimé la masse totale de N63 à 58 $M_\odot$ à partir de l'émission de la poussière à 1,2 mm, observée avec le télescope de 30 m de l'IRAM.

La masse totale de l'enveloppe de 4,3″ de diamètre sera donc prise égale à 58 $M_\odot$. La densité de colonne de H_2 dans l'enveloppe (d $\sim$ 6000 au), dans la région intermédiaire (d $\sim$ 4900 au) et dans la région de type hot core (d $\sim$ 500 au) vaut alors respectivement $4{,}5\times10^{24}$, $5{,}5\times10^{24}$ et 5,4 $\times10^{25}$ $\mathrm{cm^{-2}}$. Cette dernière valeur, dans une région < 1000 ua est une limite supérieure dans la mesure où le profil de densité est probablement plus plat que r^{-2} au centre. Les valeurs d'abondances déterminées seront alors des limites inférieures. La structure des flots étant plus complexe, il est difficile d'y estimer une densité de colonne de H_2 par des considérations de géométrie sphérique. Seules les densités de colonne des molécules dans les flots sont donc déterminées avec une taille égale à celle de l'enveloppe (4,3″). Le tableau 5.4 regroupe toutes les

abondances déterminées pour chaque région. Le tableau 5.5 présente les mêmes informations pour pour une taille unique globale de 4,3″, sans tenir compte des diagrammes de population à deux pentes (une unique pente moyenne est alors utilisée). Ces abondances sont alors globales et seront utilisées au chapitre 6 pour la comparaison avec des sources de référence, pour lesquelles les abondances sont également globales.

TABLE 5.4 – Température d'excitation T_{ex}, densité de colonne N[i] et abondance des espèces N[i] / N[H_2]. La colonne *Méthode* indique le nombre de raies utilisées pour tracer le diagramme de population si celui-ci est inférieur à 3. Elle indique aussi si la densité de colonne provient des diagrammes de population des isotopologues rares ou si la méthode utilisée n'est pas le diagramme de population mais un modèle ETL. La colonne *Remarque* indique si les raies de l'espèce sont contaminées par une composante large (O), ou bien présentent une émission étendue (EE), ou appartiennent également à la région tiède (L) ou au hot core (HC). L'astérisque indique que la température d'excitation est fixée (voir la partie 5.3.2 et l'annexe A pour la modélisation ETL). Le format x ± y(z) signifie (x ± y) × 10^z.

TAG JPL/CDMS	Espèce	T_{ex} (K)	N (cm^{-2})	N[i] / N[H_2]	Méthode	Remarque
Enveloppe, d ∼ 6000 AU, M ∼ 58 $M_\odot$						
18501	NH_2D	21.7 ± 2.6	5.6 ± 1.5(14)	1.3 ± 0.3(-10)		
25501	CCH	-	6.9 ± 0.6(15)	1.5 ± 0.1(-9)	^{13}CCH	
26501	CCD	7.2 ± 1.1	1.6 ± 0.7(14)	3.6 ± 1.6(-11)		
26502	^{13}CCH	4.8 ± 0.2	9.8 ± 0.8(13)	2.2 ± 0.2(-11)	(3)	
26504	CN	-	9.2 ± 0.7(15)	2.1 ± 0.2(-9)	^{13}CN	O
27501	HCN	-	5.2(15)	1.2(-9)	H^{13}CN, HC^{15}N	EE, O
27502	HNC	-	2.0(15)	4.5(-10)	HN^{13}C	EE, O
27505	^{13}CN	3.3 ± 0.1	1.3 ± 0.1(14)	2.9 ± 0.2(-11)		
28002	H^{13}CN	7.2 ± 1.6	8.4 ± 6.5(13)	1.9 ± 1.5(-11)		O
28003	HC^{15}N	9.1 ± 2.8	1.0 ± 0.9(13)	2.2 ± 0.8(-12)	(3)	O
28004	DCN	5.7 ± 0.0	5.5(13)	1.2(-11)	(2)	O
28005	HN^{13}C	5.9 ± 1.1	2.9 ± 2.2(13)	6.5 ± 4.9(-12)		
28008	$HCNH^+$	7.0	1.4(14)	3.1(-11)	(3), voir A.1.3	
28503	CO	-	6.1 ± 0.2(19)	1.4 ± 0.2(-5)	^{13}CO, ^{13}C^{18}O	O
28508	DNC	7.7 ± 1.4	1.5 ± 0.8(13)	3.3 ± 1.8(-12)		
29003	CH_2NH	20.7 ± 5.0	2.7 ± 0.8(13)	6.0 ± 1.8(-12)	voir A.3.1	
29503	C^{17}O	5.9 ± 0.2	2.4 ± 0.2(16)	5.4 ± 0.5(-9)		
29506	N_2H^+	10*	1.7(15)	3.8(-10)	$^{15}NNH^+$, $N^{15}NH^+$	EE
29507	HCO^+	-	5.9 ± 2.9(15)	1.3 ± 0.7(-9)	HC^{17}O$^+$, HC^{18}O$^+$	O
30003	DCO^+	10*	5.6(13)	1.3(-11)	modèle ETL	EE
30008	NO	8.6 ± 0.7	3.5 ± 0.4(15)	7.8 ± 0.9(-10)		
30505	HC^{17}O$^+$	6.1	4.4(12)	9.8(-13)		

voir page suivante

TAG JPL/CDMS	Espèce	T_{ex} (K)	N (cm^{-2})	N[i] / N[H_2]	Méthode	Remarque
30507	$^{15}NNH^+$	6.8	4.6(12)	1.0(-12)	(2)	
30508	$N^{15}NH^+$	6.9	2.9(12)	6.5(-13)	(2)	
30509	N_2D+	5.6	9.3(12)	2.1(-12)	(2)	
30581	p-H_2CO	-	1.6(16)	1.3(-9)	p-$H_2^{13}CO$	EE, O
30591	o-H_2CO	-	2.6(16)	5.8(-9)	o-$H_2C^{18}O$	EE, O
31003	HDCO	12.9 ± 4.7	4.0 ± 3.8(13)	8.9 ± 3.5(-12)		O
31502	$^{13}C^{18}O$	6.8	2.0(15)	4.5(-10)	(2)	
31504	H_2COH^+	4.0	1.0(13)	2.2(-12)	(3), voir A.1.2	
31506	$HC^{18}O^+$	7.5 ± 2.0	6.2 ± 5.4(12)	1.4 ± 1.2(-12)		
31508	$D^{13}CO^+$	10*	7.9(11)	1.8(-13)	modèle ETL	
32582	p-D_2CO	5.1	1.2 ± 0.3(13)	2.7 ± 0.6(-12)	(2)	
32592	o-D_2CO	12.2 ± 2.4	1.2 ± 0.7(13)	2.7 ± 1.6(-12)		
32593	o-$H_2C^{18}O$	2.0	4.9(13)	1.1(-11)	(2)	O
37003	c-C_3H	3.4 ± 0.4	9.8 ± 2.5(13)	2.2 ± 0.6(-11)	(3)	
38082	p-c-C_3H_2	14.0 ± 2.5	3.7 ± 1.4(13)	8.3 ± 3.1(-12)		
38092	o-c-C_3H_2	9.6 ± 1.1	7.3 ± 3.2(13)	1.6 ± 0.7(-11)		
39508	C_3HD	6.1 ± 0.8	1.7 ± 0.6(13)	3.8 ± 1.3(-12)		
41502	CH_2DCCH	6.5	2.9 ± 0.1(14)	6.5 ± 0.2(-11)	(2)	
43002	HNCO	25.1 ± 2.0	1.6 ± 0.4(14)	3.6 ± 0.4(-11)		O
43510	HOCN	10.6	2.5 ± 0.3(12)	5.6 ± 0.7(-13)	(2)	
44001	CS	-	1.9(15)	4.2(-10)	$C^{34}S$	EE, O
44002	SiO	-	2.4 ± 0.8(14)	5.4 ± 1.8(-11)	^{29}SiO, ^{30}SiO	O
45001	^{13}CS	10.8 ± 1.5	4.0 ± 1.5(13)	8.9 ± 1.4(-12)		O
45002	^{29}SiO	8.7 ± 1.5	1.5 ± 0.9(13)	3.3 ± 0.8(-12)		
45005	HCS^+	17.1 ± 2.6	1.3 ± 0.5(13)	2.9 ± 0.5(-12)		O
45010	$HOCO^+$	19.2 ± 0.7	3.3 ± 0.3(13)	7.4 ± 0.3(-12)		O
45502	$C^{33}S$	16.3 ± 7.2	1.5 ± 1.3(13)	3.3 ± 1.2(-12)	(2)	O
45511	PN	15.0 ± 6.1	3.8(12)	8.5(-13)	voir A.3.3	
46002	^{30}SiO	6.1 ± 0.2	1.9 ± 0.2(13)	4.2 ± 0.2(-12)	(3)	O
46010	NS	12.8 ± 1.3	5.1 ± 1.2(13)	1.1 ± 0.3(-11)		
46011	$DOCO^+$	26.0	6.0(12)	1.3(-12)	modèle ETL, voir A.1.1	
49503	C_4H	11.8 ± 2.7	4.6 ± 2.3(14)	1.0 ± 0.5(-10)		
51004	HCCNC	8.5 ± 2.0	1.9 ± 1.4(13)	4.2 ± 3.1(-12)	(3)	
51501	HC_3N	-	6.4 ± 3.5(14)	1.4 ± 0.3(-10)	$HC^{13}CCN$, $HCC^{13}CN$	O, EE
52508	DC_3N	12.5 ± 2.9	7.8 ± 3.9(12)	1.7 ± 0.8(-12)	(3)	
52510	$HC^{13}CCN$	13.8 ± 2.1	1.0 ± 0.3(13)	2.2 ± 0.7(-12)		
52511	$HCC^{13}CN$	21.7 ± 14.0	8.0 ± 7.0(12)	1.8 ± 1.6(-12)		
56007	CCS	15.7 ± 2.3	4.6 ± 1.9(13)	1.0 ± 0.2(-11)		O
64002	SO_2	-	1.8(14)	4.0(-11)	$^{34}SO_2$	O
66501	$^{34}SO_2$	10*	8.1(12)	1.8(-12)	modèle ETL	
68503	C_3S	7.0 ± 1.5	9.8(13)	2.2(-11)		
75503	HC_5N	20.9 ± 1.3	1.2 ± 0.3(14)	2.7 ± 0.7(-11)		

voir page suivante

TAG JPL/CDMS	Espèce	T_{ex} (K)	N (cm^{-2})	N[i] / N[H_2]	Méthode	Remarque
Région tiède, d $\sim$ 2100 AU, M $\sim$ 20 $M_\odot$						
29507	HCO^+	-	6.2(15)	4.8(-10)	$HC^{17}O^+$, $HC^{18}O^+$	O
30581	p-H_2CO	-	1.6(16)	1.3(-9)	p-$H_2^{13}CO$	EE, O
31583	p-$H_2^{13}CO$	23.6 $\pm$ 11.5	2.2 $\pm$ 3.4(14)	1.7 $\pm$ 2.1(-11)	O	
32003	CH_3OH	-	2.5 $\pm$ 1.4(17)	1.9 $\pm$ 1.1(-8)	$^{13}CH_3OH$	O, HC
33004	CH_2DOH	16.9 $\pm$ 1.5	3.4 $\pm$ 0.8(15)	2.7 $\pm$ 0.6(-10)		HC
33502	$^{13}CH_3OH$	11.2 $\pm$ 2.9	3.5 $\pm$ 2(15)	2.7 $\pm$ 1.56(-10)		HC
34082	p-H_2S	35*	5.8(15)	4.5(-10)	modèle ETL	O
34092	o-H_2S	35*	1.8(15)	1.4(-10)	modèle ETL	O
36504	$H_2^{34}S$	34.9	7.0(14)	5.5(-11)	(2)	O
40582	a-CH_3CCH	36.0 $\pm$ 3.3	2.1 $\pm$ 0.6(15)	1.6 $\pm$ 0.4(-10)		O
40592	e-CH_3CCH	39.3 $\pm$ 4.1	7.9 $\pm$ 2.8(15)	6.2 $\pm$ 1.8(-10)		O
41001	CH_3CN	41.2 $\pm$ 4.7	5.9 $\pm$ 1.6(14)	4.6 $\pm$ 1.3(-11)		HC
42002	CH_2CO	70.7 $\pm$ 13.2	1.4 $\pm$ 0.4(15)	1.1 $\pm$ 0.3(-10)		
44003	CH_3CHO	22.5 $\pm$ 0.9	3.7 $\pm$ 0.4(15)	2.9 $\pm$ 0.3(-10)		HC
45003	NH_2CHO	21.0 $\pm$ 2.5	1.9 $\pm$ 0.5(14)	4.2 $\pm$ 1.1(-11)	voir A.3.2	
46004	C_2H_5OH	16.7 $\pm$ 3.4	2.5 $\pm$ 0.8(15)	2.0 $\pm$ 0.6(-10)		HC
46003	H_2CS		3.1(15)	2.4(-10)	$H_2C^{34}S$	O
46005	HCOOH	27.5 $\pm$ 4.2	1.6 $\pm$ 0.3(15)	1.3 $\pm$ 0.2(-10)		
46008	CH_3OCH_3	23.4 $\pm$ 5.1	6.2 $\pm$ 1.4(15)	4.8 $\pm$ 1.09(-10)		HC
47504	HDCS	24.4 $\pm$ 7.1	1.7 $\pm$ 1.3(14)	1.3 $\pm$ 0.8(-11)		
48001	SO	-	7.0(14) $\pm$ 3.5(15)	5.5 $\pm$ 2.7(-10)	^{34}SO	O
48508	$H_2C^{34}S$	20.9 $\pm$ 5.7	1.4 $\pm$ 0.9(14)	1.1 $\pm$ 0.6(-11)		O
50001	^{34}SO	21.4 $\pm$ 5.6	3.2 $\pm$ 1.6(14)	2.5 $\pm$ 1.5(-11)		O
54510	Propynal	25*	3.0(14)	2.3(-11)	mod. ETL, voir A.2.1	
55001	C_2H_5CN	25.2 $\pm$ 4.3	5.2 $\pm$ 2.3(14)	4.1 $\pm$ 1.80(-11)		HC
58505	s-Propanal	25*	1.0(15)	7.8(-11)	mod. ETL, voir A.2.1	
60001	OCS	-	2.9(16)	2.3(-9)	$OC^{34}S$	O
60003	CH_3OCHO	36.1 $\pm$ 2.1	1.0 $\pm$ 0.1(16)	7.8 $\pm$ 0.8(-10)		HC
62505	$OC^{34}S$	47.9 $\pm$ 3.5	1.3 $\pm$ 0.2(15)	1.0 $\pm$ 0.1(-10)		O
Hot core, d $\sim$ 500 AU, M $\sim$ 4.8 $M_\odot$						
33004	CH_2DOH	-	-	-		L
32003	CH_3OH	-	8.5 $\pm$ 1.4(18)	1.6 $\pm$ 0.3(-7)	$^{13}CH_3OH$	L, O
33502	$^{13}CH_3OH$	127.3 $\pm$ 16.4	1.2 $\pm$ 0.2(17)	2.2 $\pm$ 0.4(-9)		L
41001	CH_3CN	181 $\pm$ 50.2	4.1 $\pm$ 1.6(15)	7.6 $\pm$ 3.0(-11)		L
44003	CH_3CHO	85.6 $\pm$ 25.0	1.4 $\pm$ 0.7(16)	2.6 $\pm$ 1.3(-10)		L
46004	C_2H_5OH	59.7 $\pm$ 42.1	6.9 $\pm$ 5.9(16)	1.3 $\pm$ 1.1(-9)		L
46008	CH_3OCH_3	79.9 $\pm$ 6.8	2.1 $\pm$ 0.3(17)	3.9 $\pm$ 0.6(-9)		L

voir page suivante

TAG JPL/CDMS	Espèce	T_{ex} (K)	N (cm^{-2})	N[i] / N[H_2]	Méthode	Remarque
55001	C_2H_5CN	57.4 ± 29.2	5.0(15)	9.3(-11)		L
60003	CH_3OCHO	118.8 ± 12	1.3 ± 0.2(17)	2.4 ± 0.4(-9)		L
Flot, d ∼ 6000 AU ?						
28003	$HC^{15}N$	13.0 ± 1.9	2.2 ± 0.7(12)	-		E
28004	DCN	30.6	2.7(12)	-		E
31003	HDCO	13.2 ± 4.1	9.0 ± 6.5(12)	-		E
34092	o-H_2S	11.2	2.7(12)	-	modèle ETL	L
36504	$H_2^{34}S$	40.5	2.2(13)	-	(2)	L
40582	a-CH_3CCH	34.7 ± 3.2	3.4 ± 0.4(13)	-		L
40592	e-CH_3CCH	37.0 ± 5.2	2.1 ± 0.7(14)	-		L
43002	HNCO	19.2 ± 1.2	3.9 ± 0.4(13)	-		E
45001	^{13}CS	19.2 ± 4.3	9.2 ± 3.2(12)	-		E
45005	HCS^+	42.4 ± 16.7	3.8 ± 1.8(12)	-		E
45010	$HOCO^+$	10.7 ± 0.5	5.3 ± 0.5(12)	-		E
45502	$C^{33}S$	57.7	3.4(12)	-		E
48001	SO	-	3.5 ± 1.3(14)	-	^{34}SO	L
50001	^{34}SO	26.1 ± 7.6	1.6 ± 0.6(13)	-		L
56007	CCS	7.4 ± 2.2	1.9 ± 1.7(13)	-		E

TABLE 5.5 – Température d'excitation T_{ex}, densité de colonne N[i] et abondance des espèces N[i] / N[H_2], déterminées grâce aux diagrammes de population, comme au tableau 5.4, mais pour une **taille unique de 4,3″** et sans tenir compte des deux pentes visibles dans les diagrammes de population de certains COMs. Pour les espèces présentant une composante large, la densité de colonne est la somme des densités de colonnes obtenues grâce aux deux composantes. Ces valeurs globales sont utilisées uniquement dans le chapitre suivant pour la comparaison avec d'autres sources.

TAG JPL/CDMS	Espèce	T_{ex} (K)	N (cm^{-2})	N[i] / N[H_2]	Méthode	Remarque
18501	NH_2D	21.7 ± 2.6	5.6 ± 1.5(14)	1.3 ± 0.3(-10)		E
25501	CCH	-	6.9 ± 0.6(15)	1.5 ± 0.1(-9)	^{13}CCH	
26501	CCD	7.2 ± 1.1	1.6 ± 0.7(14)	3.6 ± 1.6(-11)		E
26502	^{13}CCH	4.8 ± 0.2	9.8 ± 0.8(13)	2.2 ± 0.2(-11)	(3)	E
26504	CN	-	9.2 ± 0.7(15)	2.1 ± 0.2(-9)	^{13}CN	O
27501	HCN	-	5.2(15)	1.2(-9)	$H^{13}CN$, $HC^{15}N$	EE, O
27502	HNC	-	2.0(15)	4.5(-10)	$HN^{13}C$	EE, O
27505	^{13}CN	3.3 ± 0.1	1.3 ± 0.1(14)	2.9 ± 0.2(-11)		E
28002	$H^{13}CN$	7.2 ± 1.6	8.4 ± 6.5(13)	1.9 ± 1.5(-11)		E
28003	$HC^{15}N$	9.1 ± 2.8	1.0 ± 0.9(13)	2.2 ± 2.0(-12)	(3)	E, O
28004	DCN	5.7 ± 0.0	5.5 ± 0.0(13)	1.2 ± 0.0(-11)	(2)	E, O
28005	$HN^{13}C$	5.9 ± 1.1	2.9 ± 2.2(13)	6.5 ± 4.9(-12)		E

voir page suivante

TAG JPL/CDMS	Espèce	T_{ex} (K)	N (cm^{-2})	N[i] / N[H_2]	Méthode	Remarque
28008	$HCNH^+$	7.0	1.4(14)	3.1(-11)		?
28503	CO	-	6.1 ± 0.2(19)	1.4 ± 0.2(-5)	^{13}CO, $^{13}C^{18}O$	O
28508	DNC	7.7 ± 1.4	1.5 ± 0.8(13)	3.3 ± 1.8(-12)		E
29003	CH_2NH	20.7 ± 5.0	2.7 ± 0.8(13)	6.0 ± 1.8(-12)		?
29506	N_2H^+	15*	1.7(15)	3.8(-10)	$^{15}NNH^+$, $N^{15}NH^+$	EE
29507	HCO^+	-	5.9 ± 2.9(15)	1.3 ± 0.7(-9)	$HC^{17}O^+$, $HC^{18}O^+$	O
30003	DCO^+	15*	5.6(13)	1.3(-11)	modèle ETL	EE
30008	NO	8.6 ± 0.7	3.5 ± 0.4(15)	7.8 ± 0.9(-10)		E
30505	$HC^{17}O^+$	6.1 ± 0.0	4.4 ± 0.0(12)	9.8 ± 0.0(-13)	(2)	E
30507	$^{15}NNH^+$	6.8 ± 0.0	4.6 ± 0.0(12)	1.0 ± 0.0(-12)	(2)	E
30508	$N^{15}NH^+$	6.9 ± 0.0	2.9 ± 0.0(12)	6.5 ± 0.0(-13)	(2)	E
30509	N_2D+	5.6 ± 0.0	9.3 ± 0.0(12)	2.1 ± 0.0(-12)	(2)	E
30581	p-H_2CO	-	1.6(16)	1.3(-9)	p-$H_2^{13}CO$	EE, O
30591	o-H_2CO	-	2.6(16)	5.8(-9)	o-$H_2C^{18}O$	EE, O
31003	HDCO	12.9 ± 4.7	4.0 ± 3.8(13)	8.9 ± 8.5(-12)		E, O
31502	$^{13}C^{18}O$	6.8 ± 0.0	2.0 ± 0.0(15)	4.5 ± 0.0(-10)	(2)	E
31504	H_2COH^+	4.0	1.0(13)	2.2(-12)		?
31506	$HC^{18}O^+$	7.5 ± 2.0	6.2 ± 5.4(12)	1.4 ± 1.2(-12)		
31508	$D^{13}CO^+$	15*	7.9(11)	1.8(-13)	modèle ETL	
31583	p-$H_2^{13}CO$	27.1 ± 15.2	2.5 ± 3.9(13)	5.6 ± 8.7(-12)		O
32003	CH_3OH	-	7.1 ± 0.7(16)	1.6 ± 0.2(-8)	$^{13}CH_3OH$	O, HC, L
32582	p-D_2CO	5.1 ± 0.0	1.2 ± 0.3(13)	2.7 ± 0.6(-12)	(2)	E
32592	o-D_2CO	12.2 ± 2.4	1.2 ± 0.7(13)	2.7 ± 1.6(-12)		E
32593	o-$H_2C^{18}O$	2.0	4.9(13)	1.1(-11)		
33004	CH_2DOH	49.7 ± 9.6	8.5 ± 2.1(14)	1.9 ± 0.5(-10)		HC, L
33502	$^{13}CH_3OH$	87.9 ± 8.6	1.0 ± 0.1(15)	2.2 ± 0.2(-10)		HC, L
34082	p-H_2S	35*	5.8(15)	4.5(-10)	modèle ETL	O
34092	o-H_2S	35*	1.8(15)	1.4(-10)	modèle ETL	O
36504	$H_2^{34}S$	36.2 ± 0	9.2 ± 0.0(13)	2.1 ± 0.0(-11)	(2)	O
37003	c-C_3H	3.4 ± 0.4	9.8 ± 2.5(13)	2.2 ± 0.6(-11)	(3)	E
38082	p-c-C_3H_2	14.0 ± 2.5	3.7 ± 1.4(13)	8.3 ± 3.1(-12)		E
38092	o-c-C_3H_2	9.6 ± 1.1	7.3 ± 3.2(13)	1.6 ± 0.7(-11)		E
39508	C_3HD	6.1 ± 0.8	1.7 ± 0.6(13)	3.8 ± 1.3(-12)		E
40582	a-CH_3CCH	38 ± 3.7	2.8 ± 0.7(14)	6.3 ± 1.6(-11)		O
40592	e-CH_3CCH	41 ± 4.3	1.1 ± 0.4(15)	2.5 ± 0.9(-10)		O
41001	CH_3CN	92.4 ± 13.2	8.3 ± 2.0(13)	1.9 ± 0.5(-11)		HC, L, O
41502	CH_2DCCH	6.5 ± 0.0	2.9 ± 0.1(14)	6.5 ± 0.2(-11)	(2)	E
42002	CH_2CO	70.8 ± 12.4	1.9 ± 0.6(14)	4.2 ± 1.3(-11)	L	
43002	HNCO	25.1 ± 2.0	1.6 ± 0.4(14)	3.6 ± 0.9(-11)		E
43510	HOCN	10.6 ± 0.0	2.5 ± 0.3(12)	5.6 ± 0.7(-13)	(2)	E
44002	SiO	-	2.4 ± 0.8(14)	5.4 ± 1.8(-11)	^{29}SiO, ^{30}SiO	O
44003	CH_3CHO	28.5 ± 1	4.3 ± 0.5(14)	9.6 ± 1.1(-11)		HC, L

voir page suivante

TAG JPL/CDMS	Espèce	T_{ex} (K)	N (cm^{-2})	N[i] / N[H_2]	Méthode	Remarque
44001	CS	-	2.3 ± 1.3(15)	5.1 ± 2.9(-10)	^{13}CS, C^{33}S, C^{34}S	E, O
45001	^{13}CS	10.8 ± 1.5	4.0 ± 1.5(13)	8.9 ± 1.4(-12)		O
45002	^{29}SiO	8,7 ± 1,5	1.5 ± 0.9(13)	3.3 ± 0.8(-12)		O
45003	NH_2CHO	21.6 ± 2.5	2.4 ± 0.6(13)	5.4 ± 1.3(-12)		L/HC
45005	HCS^+	17.1 ± 2.6	1.3 ± 0.5(13)	2.9 ± 1.1(-12)		E, O
45010	$HOCO^+$	19.2 ± 0.7	3.3 ± 0.3(13)	7.4 ± 0.7(-12)		E, O
45502	C^{33}S	16.3 ± 7.2	1.5 ± 1.3(13)	3.3 ± 2.9(-12)	(2)	E, O
45511	PN	15.0 ± 6.1	3.8(12)	8.5(-13)		E
46001	C^{34}S	11.6 ± 2.7	9.7 ± 6.0(13)	2.2 ± 1.3(-11)		E,O
46002	^{30}SiO	6.1 ± 0.2	1.9 ± 0.2(13)	4.2 ± 0.2(-12)	(3)	O
46003	H_2CS	-	4.2 ± 2.6(14)	9.4 ± 5.8(-11)	$H_2C^{34}S$	L, O
46004	C_2H_5OH	29.4 ± 4.6	4.7 ± 1.2(14)	1.0 ± 0.3(-10)		HC, L
46005	HCOOH	27.9 ± 4.3	2.1 ± 0.4(14)	4.7 ± 8.9(-11)		L
46008	CH_3OCH_3	71.4 ± 4.2	1.7 ± 0.1(15)	3.8 ± 0.2(-10)		HC, L
46010	NS	12.8 ± 1.3	5.1 ± 1.2(13)	1.1 ± 0.3(-11)		E
46011	$DOCO^+$	26.0	6.0(12)	1.3(-12)	modèle ETL	?
47504	HDCS	25.7 ± 7.7	2.3 ± 1.8(13)	5.1 ± 4.0(-12)		L
48001	SO	-	2.6 ± 2.2(15)	5.8 2.5(-10)	^{34}SO	O
48508	$H_2C^{34}S$	22.3 ± 6.5	1.9 ± 1.2(13)	4.2 ± 2.7(-12)		L, O
49503	C_4H	11.8 ± 2.7	4.6 ± 2.3(14)	1.0 ± 0.5(-10)		E
50001	^{34}SO	-	1.2 ± 0.5(14)	2.7 ± 1.1(-11)	L, O	
51004	HCCNC	8.5 ± 2.0	1.9 ± 1.4(13)	4.2 ± 3.1(-12)	(3)	E
51501	HC_3N	-	6.4 ± 3.5(14)	1.4 ± 0.3(-10)	HC^{13}CCN, HCC^{13}CN	O, EE
52508	DC_3N	12.5 ± 2.9	7.8 ± 3.9(12)	1.7 ± 0.9(-12)	(3)	E
52510	HC^{13}CCN	13.8 ± 2.1	1.0 ± 0.3(13)	2.2 ± 0.7(-12)		E
52511	HCC^{13}CN	21.7 ± 14.0	8.0 ± 7.0(12)	1.8 ± 1.6(-12)		E
54510	Propynal	25*	3.0(14)	2.3(-11)	modèle ETL	L/HC
55001	C_2H_5CN	53.6 ± 16.2	5.3 ± 3.1(13)	1.2 ± 0.7(-11)		HC, L
56007	CCS	15.7 ± 2.3	4.6 ± 1.9(13)	1.0 ± 0.4(-11)		E, O
58505	s-Propanal	25*	1.0(15)	7.8(-11)	modèle ETL	L/HC
60001	OCS	-	3.7 ± 0.4(15)	8.3 ± 0.9(-10)	OC^{34}S	O
60003	CH_3OCHO	63.3 ± 2.2	1.4 ± 0.1(15)	3.1 ± 0.2(-10)		HC, L
62505	OC^{34}S	50.5 ± 3.9	1.7 ± 0.2(14)	3.8 ± 0.5(-11)		L, O
64002	SO_2		1.8(14)	4.0(-11)	$^{34}SO_2$	O
66501	$^{34}SO_2$	15*	8.1(12)	1.8(-12)	modèle ETL	E, O
68503	C_3S	7.0 ± 1.5	9.8(13)	2.2(-11)		E
75503	HC_5N	20.9 ± 1.3	1.2 ± 0.3(14)	2.7 ± 0.7(-11)		E

5.6 Première détection de CF^+ vers une protoétoile massive

Grâce à la profondeur du relevé spectral, de nombreuses espèces rares ont été identifiées vers N63. Ce sont principalement des ions et des COMs. L'ion $DOCO^+$, n'ayant jamais été détecté dans le milieu interstellaire, pourrait être détecté vers N63. Deux ions protonés rare-

ment observés, $HCNH^+$ et H_2COH^+ sont également observés. Parmi les COMs rares détectées figurent le propanal CH_3CH_2CHO, détecté seulement auparavant vers le CMZ et SGrB2(N) [Hollis et al., 2004], le méthanethiol CH_3SH et le méthanol deutéré CH_3OD. Deux molécules prébiotiques sont détectées : le méthanimine CH_2NH et le formamide NH_2CHO. Le nitrure de phosphore PN est aussi identifié. Ces détections et leurs implications pour les réseaux chimiques sont discutées en annexe A.

La détection d'une espèce en particulier, CF^+, a donné lieu à une publication (annexe F.2). Les principaux résultats de cet article sont résumés ici, ainsi que le résultat de nouvelles observations, postérieures à la publication. L'émission de CF^+ est un outil intéressant pour étudier l'ionisation générée par l'accrétion et les chocs de flots. Contrairement à C^+ observable dans l'infrarouge lointain, CF^+ peut être observé dans le domaine millimétrique à haute résolution. Il pourrait permettre de détecter des régions où le carbone est ionisé, tandis que l'hydrogène ne l'est pas encore. La raie du fluorométhylidynium CF^+ $(1 \rightarrow 0)$ à 102.59 GHz est clairement détectée à 6.2 σ (en prenant en compte tous les canaux où la raie est présente). La transition $(2 \rightarrow 1)$ à 205.17 GHz est quant à elle mélangée à une raie de CH_3CHO, rendant impossible une détection certaine.

Il s'agit de la première détection de CF^+ vers une protoétoile. CF^+ étant formé à partir de C^+, nous avons cherché une source d'ionisation possible du carbone. En premier lieu, nous avons écarté l'origine PDR (*Photon-dominated region*) externe. Aucune émission des PAHs (hydrocarbones polycycliques aromatiques) n'a été détectée en IR moyen, signe de l'absence de PDR. La source ionisante pourrait être la protoétoile elle-même. Toutefois, N63 ne possède pas encore de région HII et ne présente pas d'émission libre-libre détectable. De plus, nous estimons que le flux UV de N63 n'est pas suffisant pour ioniser la quantité nécessaire de C^+ permettant la formation d'une quantité détectable de CF^+, même en négligeant l'extinction de la poussière, pourtant très importante dans l'enveloppe interne. Les chocs d'accrétion sont une source de rayonnement X, qui est moins affecté par l'extinction et qui pourrait être à l'origine de ces grandes quantités de C^+. De même, les chocs générés par les flots pourraient produire une quantité suffisante de photons ionisants.

Après la soumission de l'article, nous avons utilisé le Plateau de Bure pour poursuivre la recherche de l'origine de CF^+. La raie à 102,587 GHz étant détectée au 30 m avec une température pic de T_{mb} = 10,5 mK, soit T_a^* = 8,7 mK (en prenant F_{eff} et B_{eff} fournis par l'IRAM à 115 GHz), soit encore 49,6 mJy (S/T_a^* = 5,7 à 115 GHz). Si l'émission est compacte, la raie devrait alors être détectée au PdBI. Les observations ont été réalisées en décembre 2014 (projet w14bc) en configuration C et N63 a été observée pendant 4,5 heures. Le bruit atteint vaut 4 mJy/lobe. La raie de CF^+ n'est pas détectée vers N63 (voir figure 5.15). La situation de CF^+, détectée au 30 m mais pas au PdBI, est similaire à celle des raies de DC_3N, HC_5N, N_2D^+, $S^{18}O$, CCS, DNC, c-C_3H et C_3S. Ce comportement a été décrit plus en détail à la partie 5.3.1. Dans cette hypothèse, CF^+ occuperait seulement les parties externes de l'enveloppe froide et sa faible intensité, combinée à un éventuel filtrage spatial, empêcherait sa détection au PdBI.

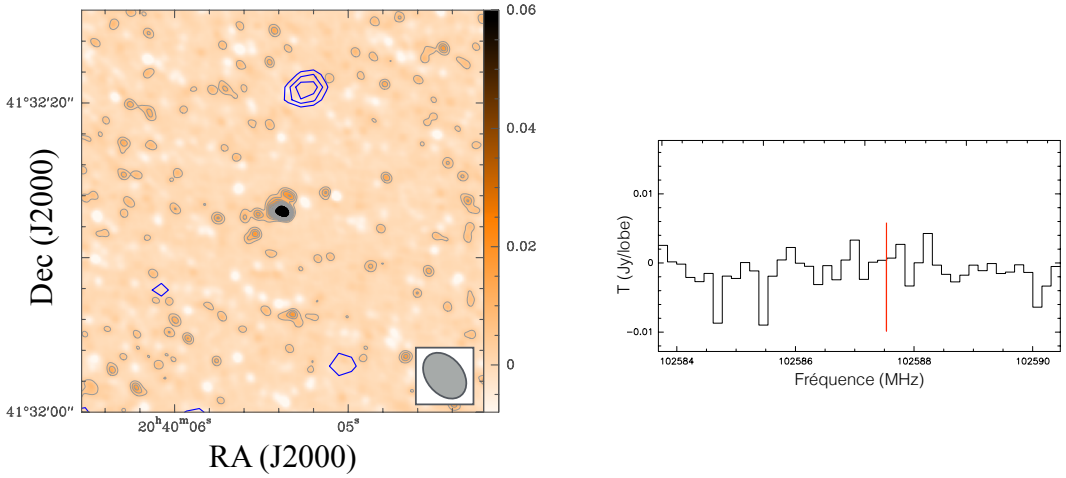


FIGURE 5.15 – Gauche : Carte de l'émission à la position de la raie de CF^+ à 102,587 GHz (contours bleus, de 1 σ = 4 mJy/lobe à 10 mJy/lobe par pas de 1 mJy/lobe) superposée à l'émission du continuum (mêmes conventions qu'à la figure 4.4). Droite : Spectre observé à la position du pic de la poussière. La ligne rouge figure la position attendue de la raie de CF^+.

De nouvelles observations ont été demandées avec SOFIA et l'instrument GREAT. L'objectif est d'explorer la piste d'une formation de CF^+ soit par ionisation du carbone par les rayons X dans les chocs d'accrétion, soit par les UV produits par les chocs de flot. Pour cela, nous avons demandé l'observation dans le domaine THz de la raie de carbone ionisé [CII] à 158 μm, de la raie de CO 13 $\rightarrow$ 12 et éventuellement de la raie de l'oxygène [OI] à 63μm. Des observations d'objets stellaires jeunes et massifs avec Herschel ont montré que ces transitions contribuent grandement au refroidissement en infrarouge lointain : 75% pour les raies de CO de J élevé et 20% pour les raies de l'oxygène [Karska et al., 2014]. Ces raies permettront d'étudier la cinématique et la chimie de ces régions de chocs. En particulier, observer la largeur de raie de [CII] permettra peut-être de comprendre la faible largeur de raie de CF^+.

CHAPITRE 6

CYGX-N63 : LIEN ASTROCHIMIQUE ENTRE NUAGES SOMBRES ET HOT CORES ?

N63 est une jeune protoétoile massive de classe 0, avec plus de la moitié de sa masse contenue dans son enveloppe [Duarte-Cabral et al., 2013]. Il est possible de modéliser l'évolution de la masse de l'enveloppe M_{env} en fonction de la luminosité bolométrique L_{bol} ainsi que le flux du moment cinétique des flots de CO, F_{CO}, en fonction de L_{bol}, pour dériver certaines propriétés des protoétoiles comme leur âge, la masse de l'objet central et la masse de l'étoile finale. L'enveloppe d'une protoétoile est considérée comme le réservoir de matière disponible pour construire l'étoile. Toutefois, une partie de cette matière échappe à la protoétoile par le biais des flots et de la pression de radiation. La masse de l'enveloppe va donc diminuer avec le temps, à un taux dépendant de l'efficacité d'accrétion. La luminosité bolométrique est la luminosité totale de la protoétoile, incluant la luminosité d'accrétion et la luminosité stellaire. La luminosité d'accrétion est reliée au taux d'accrétion et à la vitesse des flots. Duarte-Cabral et al. [2013] ont montré que les propriétés des protoétoiles sont reproduites au mieux avec un taux d'accrétion décroissant avec le temps et une efficacité d'accrétion de 50% (voir figure 6.1). Grâce à ce modèle, ces auteurs ont montré que N63 est âgée de 3000 à 5000 ans, qu'elle contient pour l'instant un cœur protostellaire de seulement 0,5-1,5 $M_\odot$, possède un taux d'accrétion de $1{,}2\times10^{-4}$ $M_\odot$/an et devrait former à terme une étoile de 15 à 25 $M_\odot$. Ces valeurs sont indicatives et donnent seulement un ordre de grandeur des propriétés de N63.

D'après ses propriétés physiques, nous pensons que N63 est jeune. Ses propriétés chimiques peuvent également nous renseigner sur son stade évolutif. Dans ce chapitre, nous allons comparer la composition chimique globale de N63 à celle d'autres objets de référence, des nuages sombres, un hot core et un hot corino, pour essayer de caractériser N63, qui pourrait faire le lien entre chimie des nuages sombres et chimie des hot cores. Nous allons également modéliser cette chimie et rechercher des indicateurs évolutifs chimiques.

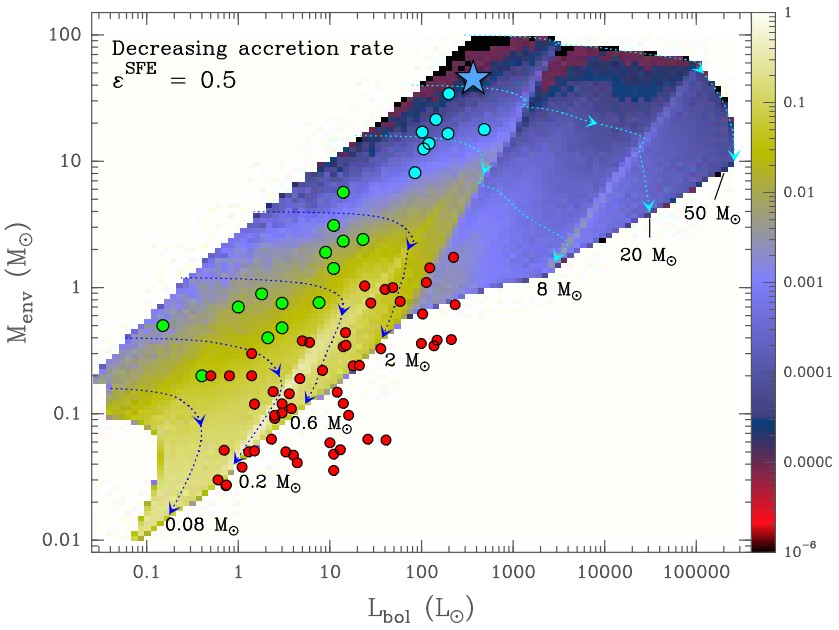


FIGURE 6.1 – Masse de l'enveloppe en fonction de la luminosité bolométrique, avec un taux d'accrétion diminuant dans le temps. Les lignes pointillées montrent les tracés évolutifs pour 0,08, 0,2, 0,6, 2, 8, 20 et 50 $M_\odot$ et les flèches montrent la position où 50 et 90% de la masse de l'enveloppe a été accrétée par la protoétoile. Le fond coloré représente la densité normalisée du nombre de sources prédites. Les points bleus figurent les protoétoiles massives de Duarte-Cabral et al. [2013], les points vert et rouges figurent respectivement les sources de classe 0 et de classe 1 ([Bontemps et al., 1996] et [Andre et al., 2000]). L'étoile bleue représente N63. Cette figure est adaptée de Duarte-Cabral et al. [2013].

6.1 Comparaison avec des sources de référence

Dans cette partie, notre but est de situer N63 par rapport à d'autres sources pour en déduire ses particularités chimiques et préciser son stade d'évolution. Comparer N63 à un nuage sombre comme TMC-1, qui pourrait représenter les conditions initiales de la formation stellaire, revient à se poser la question de l'évolution des conditions physiques et chimiques depuis le stade préstellaire jusqu'au début du stade protostellaire. IRAS16293 est une protoétoile de faible masse bien étudiée, qui nous permettra de nous poser la question des différences qu'il peut exister entre protoétoile de faible masse et de masse élevée. Enfin, la comparaison avec le hot core avéré et évolué G34 permettra de chercher des liens astrochimiques entre cette source et N63, qui est supposée être un pré-hot core. Nous allons comparer un certain nombre de molécules dont nous avons pu trouver les abondances dans la littérature pour ces différentes sources, regroupées dans le tableau 6.1.

6.1.1 Les sources de référence

Les nuages sombres TMC-1 et L134

TMC-1 (Taurus Molecular Cloud) est un nuage sombre et calme, avec une température d'environ 10 K et une densité comprise entre 4×10^3 et 2×10^4 cm^{-3}, situé à 140 pc [Markwick et al., 2000]. Il a prouvé être un excellent objet pour l'étude de la chimie dans des conditions de nuage sombre calme. Il possède néanmoins la particularité de contenir beaucoup de molécules à chaîne carbonée [Kalenskii et al., 2004]. Garrod et al. [2007] ont suggéré que TMC-1 pourrait être une superposition de fragments à différents stades d'évolution. Les abondances présentées ici ont été mesurées par Ohishi et al. [1992] et Dickens et al. [2000] à la position du pic de cyanopolyynes [1]. Une source supplémentaire, L134, est aussi utilisée pour la comparaison. L134 est un petit nuage sombre très opaque, situé à ∼100 pc. Il est plutôt isolé, ne possède pas de source interne d'énergie et ne présente pas d'activité de formation stellaire [Mao and Sun, 2005].

Le hot corino IRAS16293

IRAS16293 est un système protobinaire de type solaire, située dans le nuage L1689N (∼120 pc) [Caux et al., 2011]. Les deux sources sont séparées d'environ 480 UA et ont une masse de 0,5 $M_\odot$ et 1,5 $M_\odot$. Elles sont entourées d'une enveloppe d'environ 2 $M_\odot$, qui s'étend jusqu'à 6000 UA depuis le centre du système. Un relevé spectral non biaisé a été réalisé vers cette source par Caux et al. [2011] dans les bandes à 3, 2 et 1 mm avec le télescope de 30 m de l'IRAM, et à 0.9 mm avec le JCMT. Ces auteurs ont montré que les deux sources possédaient une composition chimique différente. Ceci complique la comparaison chimique. Toutefois, IRAS16293 est une source de référence pour la chimie des hot corinos.

Le hot core G34

G34.26+0.15 (abrégé par la suite G34) est un hot core situé à 3,7 kpc du Soleil [Mookerjea et al., 2007] et environ 6 kpc du centre galactique [Kuchar and Bania, 1994]. Il est associé à 2 régions HII ultracompactes, une région HII plus évoluée de forme cométaire et une région HII étendue en forme d'anneau. Mookerjea et al. [2007] ont observé l'émission moléculaire du hot core proche de la région HII cométaire. Deux pics dans l'émission moléculaire sont identifiés au sein de ce hot core. Les abondances utilisées correspondent à la moyenne des deux abondances, celles-ci étant proches l'une de l'autre.

G34 a été observé en avril 2011 à 3 mm avec le 30 m (projet 181-10) et à 0,8 mm avec APEX (F. Wyrowski, échange privé). Le rms moyen atteint à 3 mm est de 22 mK et de 113 mK à 0,8mm. A l'aide de diagrammes de population et en utilisant une taille de source de 10″ et une

1. Un cyanopolyyne est un composé organique possédant une chaîne carbonée caractérisée par au moins deux triples liaisons et se terminant par un groupe fonctionnel cyanure, c'est-à-dire une triple liaison entre C et N. HC_3N est le plus simple des cyanopolyynes.

densité de colonne de H_2 valant n(H_2) = 4 $\times$ 10^{23} cm^{-2} comme indiqué par Mookerjea et al. [2007], les abondances de 42 espèces, incluant les isotopologues rares, ont été déterminées. Ces abondances sont utilisées lorsque je ne les ai pas trouvées dans la littérature (voir tableau 6.1). Les abondances déterminées grâce à ces nouvelles observations sont similaires à celles déterminées par Mookerjea et al. [2007]. Les raies de NO sont situées dans la bande à 2 mm et le nombre de raies n'était pas suffisant pour déterminer les abondances de N_2H^+, c-C_3H et H_2S. Les abondances de ces espèces ne sont donc pas connues.

Autres sources massives

Gerner et al. [2014] ont étudié 59 régions de formation stellaire massive à différents stades d'évolution. Ils ont estimé l'abondance de nombreuses molécules grâce au télescope de 30 m à 1 et 3 mm dans ces différentes régions. Leurs sources sont divisées en quatre groupes par ordre d'évolution : les nuages sombres en infrarouges (IRDC), les objets protostellaires massifs (HMPO), les cœurs moléculaires chauds (HMC) et les régions ultra compactes d'hydrogène ionisé (UCHII). Les HMCs se différencient des HMPOs par leur composition chimique. Ils contiennent une ou plusieurs sources centrales qui chauffent le gaz environnant, sublimant les glaces et donnant naissance à une richesse chimique importante. Ces sources sont situées en moyenne à 4 kpc.

6.1.2 Comparaison de la composition chimique

Une comparaison de la composition chimique espèce par espèce peut s'effectuer avec G34 dans la mesure où le même travail a été effectué pour N63 et G34 et sur la même plage de fréquence, à 3 mm. Il convient de tronquer les résultats de N63 car le rms obtenu dans N63 est bien inférieur à celui obtenu pour G34, permettant la détection de raies plus faibles. Seules les raies d'intensité supérieure à 50 mK, correspondant à une détection à 3 σ dans G34, sont considérées pour cette comparaison.

La figure 6.2 présente le nombre de transitions observées dans G34 et N63, par familles de molécules, ainsi que le nombre d'espèces détectées. Ici les molécules oxygénées comme CO ou H_2CO sont intégrées à la famille des COMs. Toutes les espèces détectées dans N63 au delà du seuil de 50 mK le sont également dans G34, tandis que de nombreuses espèces observées dans G34 sont en dessous du seuil dans N63. Deux fois plus de chaînes carbonées et d'espèces azotées sont détectées dans G34 et presque trois fois plus de COMs. Les seuls COMs dépassant le seuil dans N63 sont le méthanol et CH_3CHO. Une seule espèce deutérée possède des raies dépassant le seuil de 50 mK : NH_2D, dans G34 et dans N63. G34 présente deux espèces supplémentaires, CH_3C_3N et CO^+, qui ne sont pas observées dans N63, même sans tenir compte du seuil. Des transitions vibrationnelles de HC_3N, v7=1, sont également observées dans G34 et pas dans N63. Ce dernier résultat est cohérent avec une température supérieure dans G34 par rapport à N63, correspondant à un hot core beaucoup plus développé.

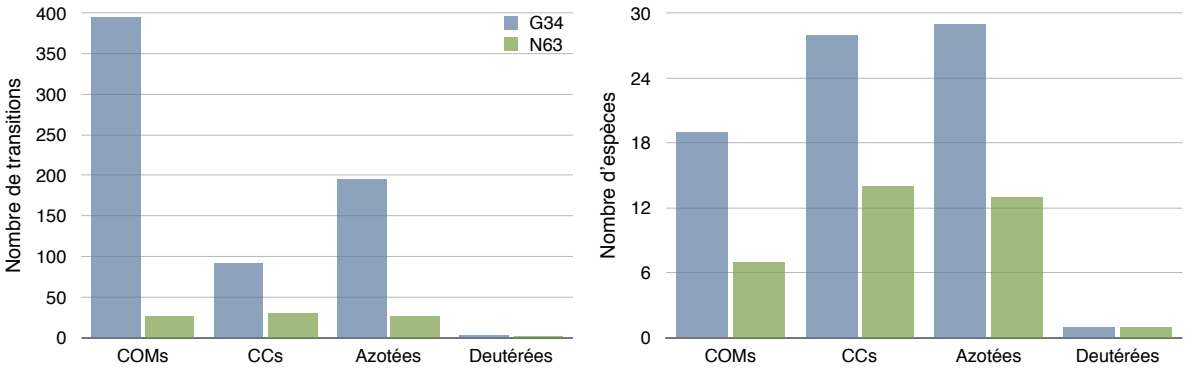


FIGURE 6.2 – Nombre de transitions par famille de molécules dans G34 et N63 (gauche) et nombre d'espèces (droite).

En nombre de transitions observées, N63 possède globalement le même nombre de transitions pour chaque famille de molécules, autour d'une trentaine. G34, par contre, présente un nombre très élevé de transitions de COMs, presque 400 contre 100 à 200 pour les chaînes carbonées et les azotées, indiquant sa nature de hot core. Cette comparaison met en perspective la composition de N63, qui peut sembler être à première vue celle d'un hot core par le grand nombre de transitions de COMs identifiées et par sa richesse chimique. En effet, sans tenir compte du seuil de 50 mK, presque toutes les espèces détectées dans G34 le sont aussi dans N63. En réalité, cette richesse est observée grâce aux très grandes densités de colonne observées dans N63 (de l'ordre de $10^{24}\,\mathrm{cm}^{-2}$ pour l'ensemble de l'enveloppe) et à la profondeur importante du relevé, rendant possible la détection de molécules peu abondantes. G34 présente d'autres signes de son évolution plus avancée : de nombreux profils de raies indiquent l'effondrement. C'est le cas de HCO, CN, HCN, HNC, o-c-C_3H_2, SiO, CS, H_2CS, SO, HCS^+ et CF^+. D'autre part, des raies de recombinaison sont observées, ce qui n'est pas le cas dans N63. Ces raies indiquent la présence d'une région HII déjà développée.

Grâce au relevé non biaisé réalisé vers IRAS16293 par Caux et al. [2011] dans les mêmes bandes que pour N63, il est également possible de comparer la composition chimique de N63 avec celle de IRAS16293 en tronquant, comme pour la comparaison avec G34, les résultats obtenus pour N63. En effet, le bruit RMS obtenu pour IRAS16293 est légèrement supérieur à celui de N63. A 3 mm, le bruit dans les spectres d'IRAS16293 vaut 4-8 mK, tandis que celui obtenu pour N63 est compris entre 2 et 3 mK. Pour corriger cette différence, seules les molécules ayant une ou plusieurs transitions d'intensité supérieure à 13 mK sont comptabilisées dans N63, correspondant à une détection à 3 σ dans IRAS16293. La comparaison sera limitée à la bande à 3 mm, car la différence de rms est trop importante à plus haute fréquence. La plupart des molécules ayant leurs transitions de basse énergie dans la bande à 3 mm, cette réduction influe peu sur l'étendue de la comparaison.

Les espèces détectées sont globalement les mêmes dans IRAS16293 et dans N63, du fait du

seuil de détection choisi, relativement bas. 11 molécules manquent dans IRAS16293 par rapport à N63 : C_3N, CH_2NH, HC_5N, HOCN, HCCNC, NH_2CHO, C_2H_5OH, c-C_2H_4O, HCO, $HOCO^+$ et N_2D^+. N_2H^+ n'est pas mentionné dans Caux et al. [2011] mais a été observé dans cette source par Jørgensen et al. [2004]. Les espèces manquantes sont principalement des azotées. HDS est la seule molécule détectée dans IRAS16293 et pas dans N63, même sans considérer le seuil. Ces différences peuvent être dues à une différence d'âge, N63 serait plus jeune et disposerait donc de plus de traceurs de gaz froid. Mais il n'est pas exclu que les deux sources aient des compositions initiales différentes. La comparaison des abondances ainsi que l'étude détaillée du stade évolutif de N63 peuvent apporter des éléments de réponse. C'est l'objet des parties suivantes.

6.1.3 Comparaison des abondances

Dans cette partie, la composition chimique globale de N63 est comparée à celle d'autres sources. Les abondances ne sont donc plus les abondances précises dans chaque région : enveloppe, région centrale, etc.., mais des abondances globales déterminées avec une unique taille de source de 5,2″, répertoriées dans le tableau 5.5. Les abondances de l'enveloppe ne changent donc pas mais les abondances des COMs de la région centrale s'en trouvent diminuées. Le tableau 6.1 présente ces abondances dans N63 et dans les autres sources pour le plus grand nombre de molécules dont j'ai pu trouver l'abondance dans la littérature.

La partie haute de la figure 6.3 présente les abondances de ces espèces dans les différentes sources par familles de molécules. Quelques abondances n'ont pas été déterminées dans IRAS16293 et G34. Pour la simplicité de la comparaison, ces espèces ne sont pas considérées dans cette figure. L'ensemble des abondances dans N63 est environ 10 fois plus faible que dans les nuages sombres L134 et TMC-1 et 100 fois plus faible que dans G34 et IRAS16293. N63 étant un précurseur d'étoile massive, elle doit évoluer rapidement en un hot core, lorsque son rayonnement sublimera les glaces des grains. Toutefois, ces faibles abondances montrent que le hot core n'est pas encore réellement développé, ce qui est cohérent avec la faible luminosité de l'objet (340 $L_\odot$, [Duarte-Cabral et al., 2013]). De plus, malgré le fait que N63 possède déjà un puissant flot bipolaire, sa composition globale reste dominée par l'enveloppe froide et de hauts niveaux de déplétion pour toutes les espèces. N63 est donc bien une protoétoile très jeune. La masse de son enveloppe ($\sim$ 40-60 $M_\odot$) suggère fortement qu'elle évoluera en hot core. C'est en ce sens que N63 peut être considérée comme un pré-hot core.

Pour pouvoir considérer la composition chimique et avoir une vue globale des réservoirs en s'affranchissant des effets de la déplétion, les abondances sont représentées sur la figure 6.3 en pourcentage du total des abondances, toujours en excluant le CO. Cela revient finalement à étudier les proportions entre les différentes molécules ou familles de molécules et aussi à s'affranchir en partie des erreurs possibles et des méthodes différentes de détermination des abondances.

TABLE 6.1 – Comparaison des abondances globales dans N63, L134, TMC-1, G34 et IRAS16293. Les espèces sont classées par familles : azotées, oxygénées et COMs, chaînes carbonées et soufrées. Les abondances dans TMC-1 et L134 sont principalement extraites de Garrod et al. [2007]. Pour G34, les abondances non annotées proviennent de mon travail. Les abondances manquantes sont celles qui n'ont pas été trouvées dans la littérature. Les abondances indiquées comme des limites inférieures le sont car l'abondance dans le flot est inconnue.

Espèce	L134	TMC-1	N63	G34	IRAS16293
CN	8.2(-10)	5(-9)	$\geqslant$2.1(-9)	2.5(-8)	8(-11)[e]
NO	6(-8)	3(-8)	7.8(-10)	-	-
HCN	1.2(-8)	2(-8)	$\geqslant$1.2(-9)	9.2(-8)	1.1(-9)[c]
HNC	4.7(-8)	2(-8)	$\geqslant$4.5(-10)	1.1(-7)	5.4(-11)[e]
CH_3CN	1(-9)	6(-10)	$\geqslant$1.9(-11)	3.3(-8)[a]	1(-8)[d]
N_2H^+	6.8(-10)	3.8(-10)	3.0(-10)	-	1.4(-10)[e]
CO	8(-5)	8(-5)	$\geqslant$1.4(-5)	2(-4)	3.3(-5)
o+p-H_2CO	2(-8)	5(-8)	$\geqslant$4.0(-10)	3(-8)	1(-7)[f]
HCO^+	1.2(-8)	8(-9)	1.3(-9)	2(-07)	1.4(-9)[e]
CH_3OH	3.7(-9)	3(-9)	1.6(-08)	1(-06)[a]	3(-7)[f]
HCOOH	3(-10)	2(-10)	4.7(-11)	9(-10)[a]	6.2(-8)[f]
CH_2CO	7(-10)	6(-10)	4.2(-11)	4(-9)	1(-10)[g]
CH_3CHO	6(-10)	6(-10)	9.6(-11)	1.3(-9)[a]	2(-8)[f]
CCH	5(-8)	2.3(-8)	$\geqslant$1.5(-09)	4.6(-8)	-
C_3H	3(-10)	1(-8)	2.2(-11)	-	-
C_4H	1(-9)	9(-8)	1.0(-10)	7.3(-10)[a]	8(-12)[i]
p+o-c-C_3H_2	2(-9)	1(-8)	2.5(-11)	5.3(-10)[a]	-
CCS	6(-10)	8(-9)	$\geqslant$1.0(-11)	2.3(-10)	-
HC_3N	8.7(-10)	2(-8)	$\geqslant$1.4(-10)	2.3(-10)[a]	1.5(-10)[e]
HC_5N	1(-10)	4(-9)	2.7(-11)	2.4(-10)	-
CS	1.7(-9)	4(-9)	$\geqslant$5.1(-10)	9(-07)	5.1(-7)[e]
OCS	2(-9)	2(-9)	$\geqslant$8.3(-10)	1(-07)[a]	1(-6)[b]
SO	3.1(-9)	2(-9)	$\geqslant$2.5(-10)	1.2(-7)[a]	1.7(-6)[h]
SO_2	1.6(-9)	1(-9)	$\geqslant$4.0(-11)	2.6(-8)[a]	5.4(-7)[h]
H_2CS	6(-10)	7(-10)	$\geqslant$9.4(-11)	1.7(-8)	-
o+p-H_2S	8(-10)	5(-10)	$\geqslant$5.9(-10)	-	5.3(-7)[h]
HCS^+	6(-11)	4(-10)	$\geqslant$2.9(-12)	-	-
SiO	3(-12)	2(-12)	$\geqslant$5.4(-11)	-	1.5(-08)

[a] Mookerjea et al. [2007] [b] Herpin et al. [2009] [c] Stäuber et al. [2007]
[d] Bottinelli et al. [2007] [e] Jørgensen et al. [2004] [f] Cazaux et al. [2003]
[g] Jaber et al. [2014] [h] Wakelam et al. [2004] [i] Sakai et al. [2009]

Cette représentation fait apparaître la composition de la phase gazeuse de N63 comme intermédiaire entre les nuages sombres et le hot core. N63 possède encore une large proportion de molécules azotées comme les nuages sombres, ainsi que quelques chaînes carbonées, essentiellement représentées par CCH (voir tableau 6.1). D'un autre côté, la répartition des molécules de

N63 est proche de celle de G34 : autour de 15% de molécules azotées par rapport au total des abondances de ces espèces et 40 à 50% de molécules oxygénées, surtout du méthanol. D'autre part, N63 possède peu de molécules soufrées, environ 10%, tandis que G34 en possède plus de 40%. N63 est par contre clairement différente du hot corino IRAS16293, qui possède une grande proportion de molécules soufrées, jusqu'à 90%. Si IRAS16293 est représentative des hot corinos, alors N63 ne peut clairement pas être considérée comme un hot corino massif. Cela renforce l'interprétation selon laquelle N63 est plutôt un pré-hot core qu'un hot corino massif.

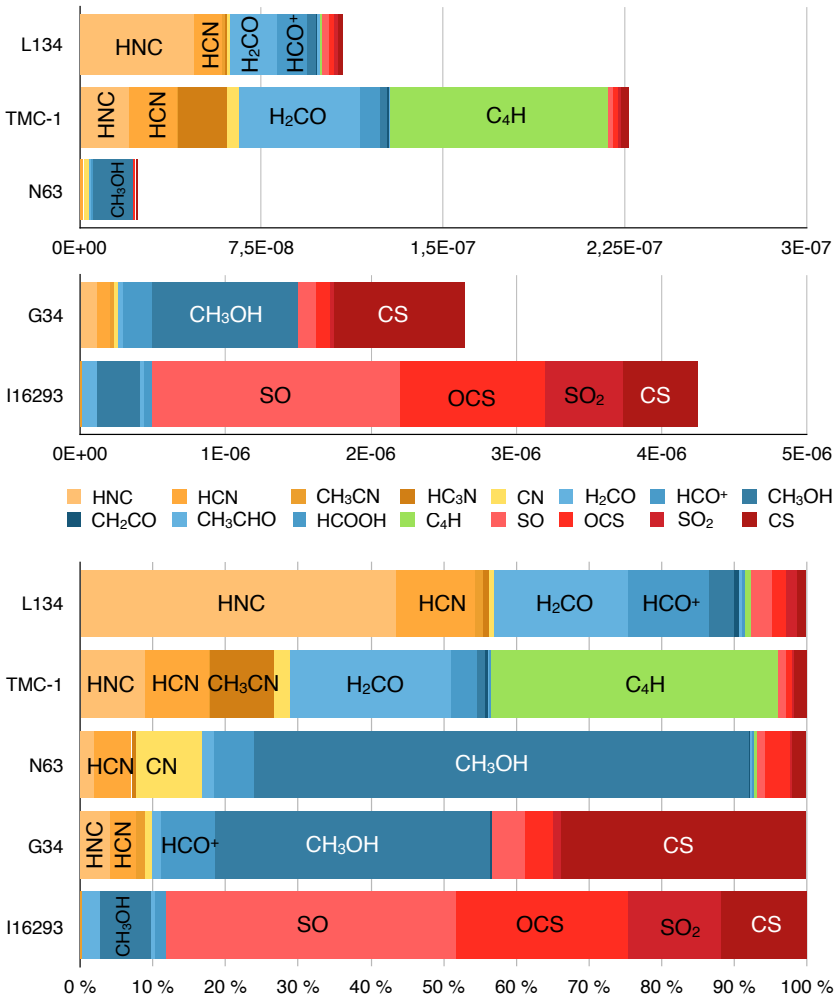


FIGURE 6.3 – **Partie haute** : Abondances de toutes les espèces du tableau 6.1 sauf CO et CH_3OH dans L134, TMC-1, N63, G34 et IRAS16293. Notez que l'échelle n'est pas la même pour L134, TMC-1 et N63, et G34 et I16293 de l'autre. Les espèces azotées sont représentées en jaune orangé, les oxygénées en bleu, les chaînes carbonées en vert et les soufrées en rouge et violet. **Partie basse** : Abondances exprimées en pourcentage du total.

6.1.4 Discussion sur l'évolution des proportions d'éléments

Les réservoirs principaux des éléments C, O, N et S, sont souvent des espèces qui ne sont pas observées : N atomique et N_2, O et O_2 par exemple. Il serait donc difficile de raisonner

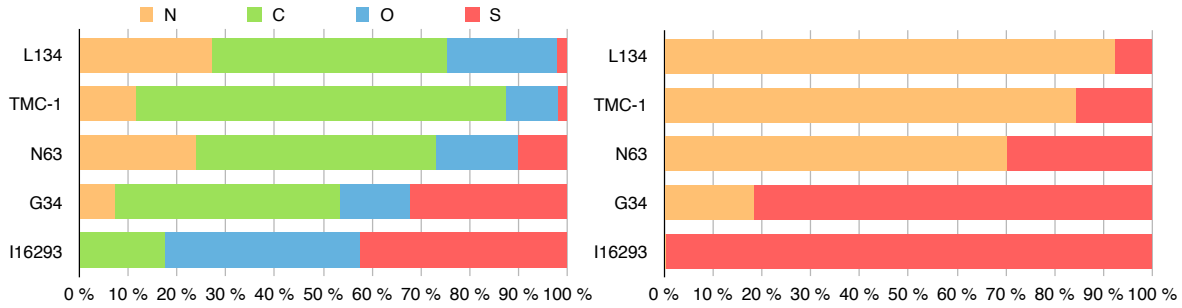


FIGURE 6.4 – Proportions d'azote, carbone, oxygène et soufre dans les différentes sources, en excluant CO et et CH_3OH.

en terme de réservoirs d'éléments au sein de chaque famille de molécules pour comparer les différentes sources. Il est toutefois possible de regarder les proportions entre les différentes espèces observées.

La partie gauche de la figure 6.4 présente les abondances des éléments C, N, O et S dans les différentes sources, faisant apparaître la diminution progressive de la proportion d'azote en phase gazeuse et l'augmentation de la proportion du soufre avec l'évolution de la source. La partie droite présente seulement les azotées et les soufrées pour mettre en valeur ce comportement. Le rapport [S]/[N] peut alors servir d'indicateur évolutif. Il est de l'ordre de 0,1 pour les nuages sombres, atteint 0,4 pour N63 et 4 pour G34. Ce même rapport vaut 360 dans IRAS16293, il pourrait donc servir également à distinguer les hot cores des hot corino. Les abondances d'azote du tableau 6.2 montrent que dans G34, l'azote ne disparaît pas réellement, mais les autres éléments deviennent 100 fois plus abondants. Par contre, dans IRAS16293 et N63, son abondance diminue réellement par rapport aux nuages sombres. L'azote pourrait avoir été transféré dans d'autres espèces plus complexes et faiblement abondantes, donc non observées. Contrairement aux autres éléments, la proportion d'azote n'augmente pas lorsque les glaces sont sublimées. Il n'y a donc probablement pas beaucoup d'azote sur les grains. Cette image est cohérente avec ce que l'on sait des espèces azotées comme N_2H^+ ou NH_3 qui sont moins déplétées que d'autres molécules [Bergin and Tafalla, 2007b]

D'autre part, la proportion de soufre en phase gazeuse augmente avec l'évolution de la source, allant jusqu'à représenter plus de 35% des espèces mesurées dans la phase gazeuse de IRAS16293, en excluant le CO. Le soufre semble être de façon prédominante sur les grains, peut-être sous forme de polymères de soufre, comme proposé par Wakelam et al. [2004]. Le rapport des abondances des espèces soufrées sur les azotées est alors un indicateur sensible d'évolution, avec une variation de 3 ordres de grandeur entre les nuages sombres et IRAS16293.

Les espèces azotées

Les abondances et les proportions entre molécules azotées sont présentées à la figure 6.5 (partie gauche). Si l'on considère que TMC-1 n'est pas représentative de sa catégorie en ce qui

TABLE 6.2 – Abondances d'azote, carbone, oxygène et soufre dans les différentes sources, en excluant le CO.

	L134	TMC-1	N63	G34	IRAS16293
N	1.2(-7)	1.0(-7)	5.5(-9)	2.6(-7)	1.2(-8)
C	2.2(-7)	6.8(-7)	1.2(-8)	2.7(-6)	2.0(-6)
O	1.1(-7)	9.9(-8)	3.9(-9)	1.5(-6)	4.3(-6)
S	1.1(-8)	2.0(-8)	2.3(-9)	1.2(-6)	4.3(-6)
S / N	0.08	0.20	0.43	4.47	366.94

concerne les chaînes carbonées, ici sous la forme de HC_3N, on peut remarquer la diversification de la chimie de l'azote avec l'évolution des sources. Le rapport [CH_3CN]/[HCN+HNC] pourrait être un bon indicateur d'âge. Celui-ci est en effet faible pour les nuages sombres et pour N63, respectivement 0,02 et 0,01, tandis qu'il vaut 0,16 pour G34 et 8,7 pour I16293. La modélisation de la chimie des régions de formation stellaire par Garrod et al. [2008] a indiqué que CH_3CN en phase gazeuse est produit en petites quantités à partir de l'évaporation de HCN qui réagit avec CH_3^+, mais surtout directement par évaporation du CH_3CN contenu dans les glaces des grains, lorsque la température dépasse les 90 K.

Les espèces oxygénées

La partie droite de la figure 6.5 présente les proportions des espèces oxygénées. Le rapport [H_2CO + HCO^+]/[SO + OCS + SO_2] varie de façon importante avec l'évolution, de l'ordre d'un facteur 8 pour les nuages sombres. Pour les sources massives N63 et G34, ce rapport est proche de 1, respectivement 1,5 et 0,9. Par contre, dans I16293, ce rapport vaut 0,03. N63 apparaît de nouveau comme fondamentalement plus proche d'un hot core que d'un hot corino. G34 et IRAS16293 possèdent une source chaude centrale et un flot, capables de sublimer les glaces. Pourtant, elles apparaissent différentes. Une stratification chimique des glaces pourrait expliquer cette différence. IRAS16293 pourrait avoir sublimé de façon partielle ses glaces. Castets et al. [2001] ont montré que les chocs dans IRAS16293 sont relativement lents ($\leqslant$ 40 km s^{-1}) et peu violents.

6.1.5 N63 parmi les sources massives

Les spectres des sources massives observées par Gerner et al. [2014] sont comparés à ceux de N63 sur les mêmes plages de fréquence à la figure 6.6. Toutes les molécules détectées vers les IRDCs sont présentes dans N63, avec des raies plus fortes pour cette dernière. Le spectre est également plus riche, mais pas seulement parce que le relevé est plus profond dans N63. Des raies fortes sont détectées. Ce sont celles de traceurs de flots : SiO et SO, du formaldéhyde, de molécules complexes : CH_3OH et CH_3CN et de chaînes carbonées : C_3H_2, HC_3N et HC_5N. Le flot bipolaire et le hot core en développement dans N63 expliquent la présence de ces molécules supplémentaires.

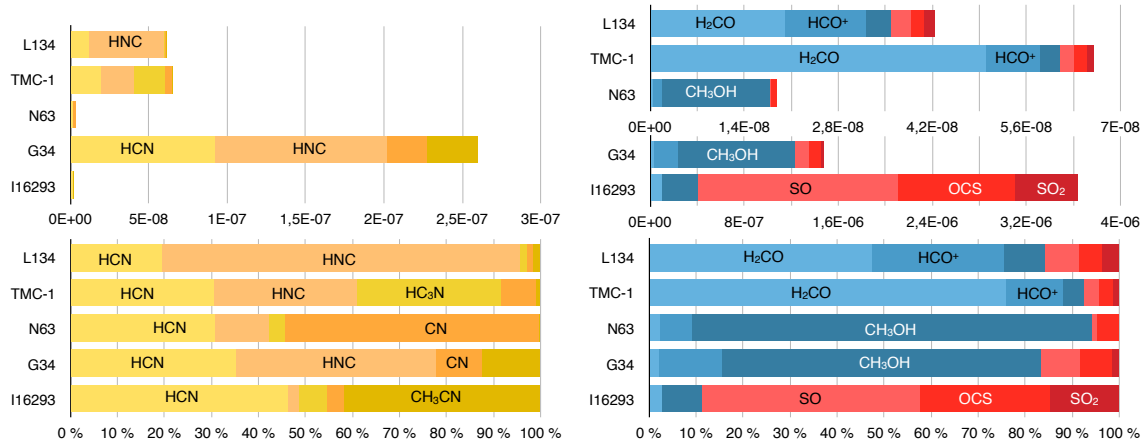


FIGURE 6.5 – Abondances (haut) et proportions (bas) des molécules contenant de l'azote (gauche) et de l'oxygène (droite), en excluant CO et CH_3OH. Les espèces azotées sont représentées en dégradé de jaune, les espèces oxygénées en bleu et les espèces soufrées en rouge.

En revanche, le spectre de N63 ressemble beaucoup plus à celui du hot core G29.96 qu'à celui de IRAS18151, considérée comme un HMPO typique. Le spectre de N63 est nettement plus riche que celui de IRAS18151, avec de fortes raies des COMs, particulièrement du méthanol. N63 semble plutôt être intermédiaire entre le nuage sombre et le hot core qu'entre le nuage sombre et l'objet protostellaire. La différence principale entre N63 et le hot core est une émission beaucoup plus forte des espèces azotées CH_3CN et C_2H_5CN dans le hot core. Il semble étrange que la source protostellaire IRAS18151 ne soit pas intermédiaire entre N63 et le hot core car elle est clairement plus évoluée que N63. Elle est déjà brillante en infrarouge (c'est une source IRAS brillante) et son enveloppe en effondrement n'est pas aussi massive que celle de N63. Cela pourrait indiquer que IRAS18151 n'est peut-être pas un précurseur d'étoile massive mais plutôt un objet de classe I de masse intermédiaire.

Pour comparer les sources de façon plus quantitative, les abondances des 16 espèces mesurées dans ces sources massives sont comparées à celles de N63 et de G34 (voir tableau 6.3). La partie gauche de la figure 6.7 représente les valeurs de ces abondances. Les molécules dans G34 présentent à première vue des abondances excessivement grandes comparées aux autres sources, mais IRAS16293 affiche des abondances encore plus grandes (voir figure 6.3). Pour s'affranchir en partie des problèmes liés à la détermination de la valeur absolue des abondances, nous pouvons, comme précédemment, comparer les proportions entre les différentes espèces (voir partie droite de la figure 6.7). Le méthanol apparaît bien plus abondant dans G34 et N63 que dans les autres sources, mais il se pourrait que l'abondance de méthanol soit sous-estimée par Gerner et al. [2014], qui ont eux-mêmes constaté que leurs valeurs étaient dans la partie basse de la gamme d'abondances dérivées par Sakai et al. [2008b] par exemple pour les IRDCs. La partie basse de la figure 6.7 compare les abondances en excluant les espèces les plus abondantes qui masquent les différences chimiques entre les sources : CH_3OH, CCH et $C^{18}O$. Dans cette comparaison, les HMPOs sont similaires aux HMCs, excepté pour CH_3CN. Cela souligne le fait que

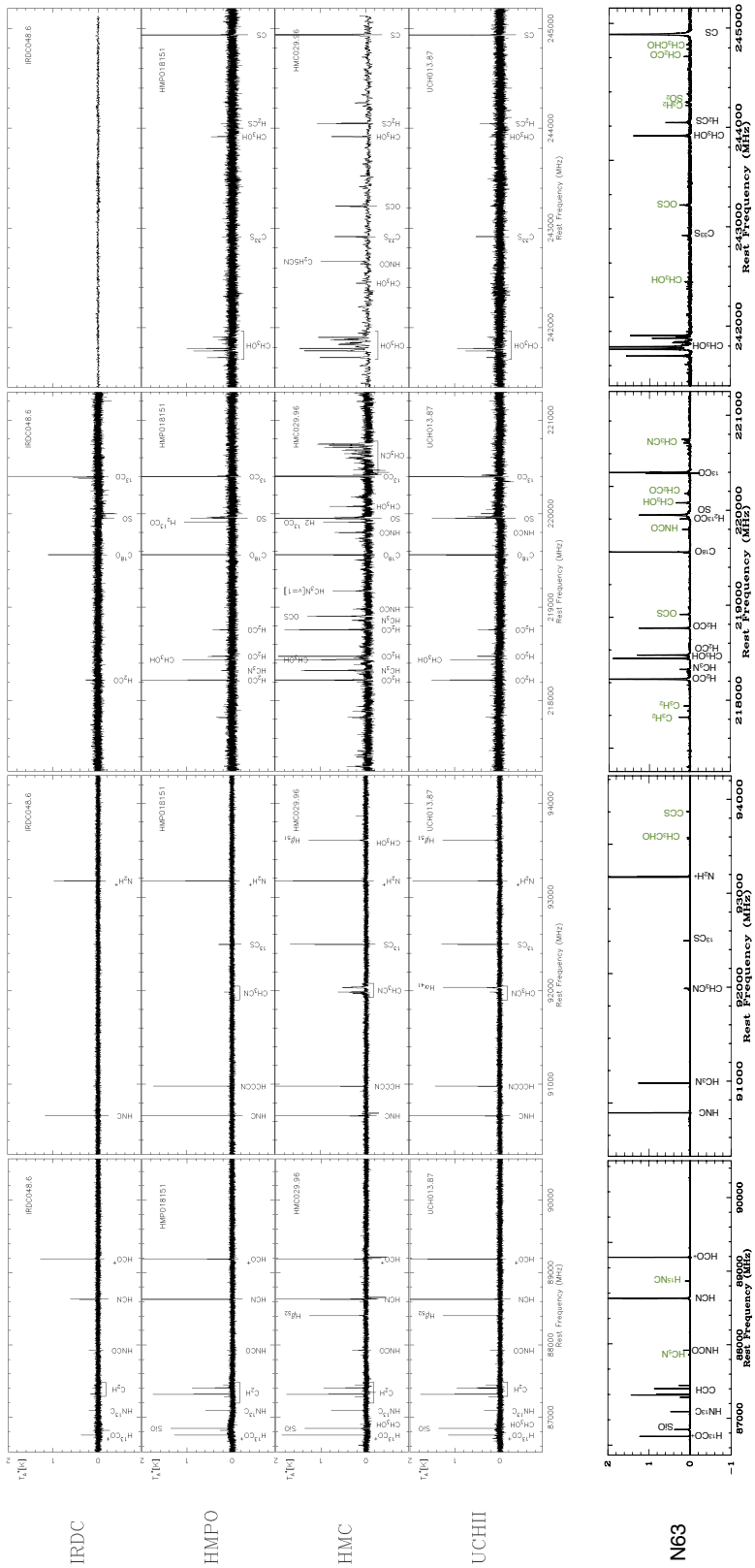


FIGURE 6.6 – Spectres de 4 sources observées par Gerner et al. [2014] dans 2 bandes à 3 mm et 2 bandes à 1 mm, comparés à celui de N63, à droite. Les sources correspondent à un nuage sombre en infrarouge (IRDC), une source massive protostellaire (HMPO), un hot core moléculaire (HMC) et une région HII ultra compacte (UCHII). Les molécules indiquées en vert sont celles qui ne sont pas visibles dans les spectres des autres sources.

TABLE 6.3 – Comparaison des abondances moyennes déterminées par Gerner et al. [2014] pour les IRDCs, HMPOs et HMCs, avec celles déterminées dans N63. Les abondances des COMs : CH_3OH, CH_3OCHO et CH_3CN, sont déterminées dans ce cas pour une taille d'émission de 5,2″, comme pour toutes les autres molécules dans cette partie. Les abondances de HNCO, N_2H^+ et SiO sont inconnues pour G34. L'abondance de $C^{18}O$ est dérivée de celle de $^{13}C^{18}O$ pour N63.

Molécule	IRDCs	HMPOs	HMCs	N63	G34
HCN	3.2(-09)	3.8(-09)	7.4(-09)	1.2(-09)	9.2(-08)
HNCO	1.8(-10)	7.7(-11)	1.5(-10)	3.6(-11)	-
$HN^{13}C$	1.2(-10)	1.3(-10)	7.5(-11)	⩽6.5(-12)	2.1(-09)
CCH	2.3(-08)	5.0(-08)	4.6(-08)	1.5(-09)	4.6(-08)
SiO	1.6(-10)	1.4(-10)	2.1(-10)	⩽ 5.4(-11)	-
$H^{13}CO^+$	9.1(-11)	1.5(-10)	1.3(-10)	⩽7.4(-12)	3.8(-9)
N_2H^+	9.6(-10)	1.1(-09)	2.7(-10)	3.0(-10)	-
^{13}CS	⩽ 1.3(-10)	3.2(-10)	8.8(-10)	⩽8.4(-12)	1.7(-08)
SO	⩽ 2.4(-10)	6.4(-10)	2.8(-09)	2.5(-10)	1.2(-07)
$C^{18}O$	9.0(-08)	1.1(-07)	3.0(-07)	⩽3.2(-08)	5.1(-07)
H_2CO	5.3(-10)	4.7(-10)	1.9(-09)	⩽ 7.1(-9)	3.0(-08)
$C^{33}S$	⩽ 1.1(-10)	⩽6.8(-11)	4.3(-10)	⩽3.3(-12)	7.1(-09)
OCS	⩽ 1.1(-08)	⩽2.0(-09)	9.6(-09)	⩽ 8.3(-10)	1.0(-07)
CH_3OH	⩽1.2(-09)	1.0(-09)	3.6(-09)	1.6(-08)	1.0(-06)
CH_3OCHO	⩽3.9(-10)	⩽2.1(-10)	⩽ 2.4(-10)	3.1(-10)	7.1(-08)
CH_3CN	⩽1.8(-10)	1.0(-10)	1.2(-08)	1.9(-11)	3.3(-08)
$x(e)_{sup}$	9.0(-09)	1.5(-08)	1.2(-08)	1.9(-07)	-

le classement en HMPO est difficile et que probablement certains objets n'appartiennent pas à cette catégorie. De même, la forte proportion d'espèces soufrées dans les IRDCs suggère que certains objets subliment leurs glaces et présentent donc peut-être déjà une activité de formation stellaire. Dans ce contexte, il est difficile de situer N63 parmi ces différentes classes d'objets.

Ces auteurs estiment également le taux d'ionisation des sources, défini comme l'abondance d'électrons x(e) = n(e) / $n(H_2)$. Avoir une idée du taux d'ionisation permet d'estimer la force du couplage entre le gaz et le champ magnétique, qui peut jouer un rôle dans l'évolution du cœur. Le taux d'ionisation a également une influence sur les réactions chimiques en phase gazeuse. Une limite inférieure de x(e) peut être simplement estimée en faisant la somme des abondances des ions, supposant la neutralité globale du gaz. Les deux ions largement dominants étant N_2H^+, HCO^+ et ses isotopologues $H^{13}CO^+$ et DCO^+, il vient

$$x(e)_{inf} = x(N_2H^+) + x(HCO^+) + x(H^{13}CO^+) + x(DCO^+) \tag{6.1}$$

Dans N63, ce calcul donne $x(e)_{inf} = 8.4 \times 10^{-10}$. Miettinen et al. [2011] trouvent des valeurs de l'ordre de 10^{-8}-10^{-7} pour plusieurs clumps massifs associés à des nuages sombres en infrarouges. Dans DR21(OH), un cœur massif appartenant également à la région du Cygne-X, Hezareh et al. [2008] ont trouvé x(e) = $3{,}2\times10^{-8}$.

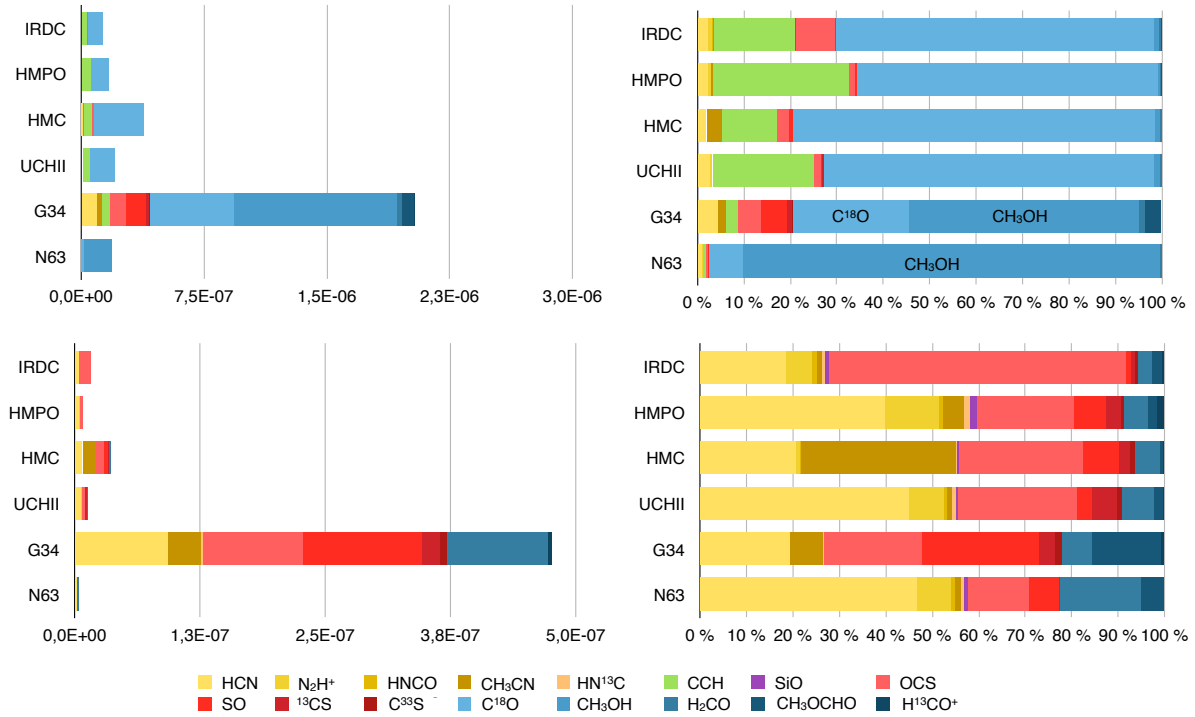


FIGURE 6.7 – Partie haute : abondances de plusieurs espèces dans les sources observées par Gerner et al. [2014], G34 et N63. Les abondances de N_2H^+, HNCO et SiO sont inconnues dans G34. Partie basse : abondances représentées en excluant les espèces les plus abondantes : CH_3OH, $C^{18}O$ et CCH.

Gerner et al. [2014] estiment une limite supérieure pour x(e) grâce à un modèle chimique simplifié, dépendant principalement du facteur de déplétion f_D et du rapport $R_D = [DCO^+]/[HCO^+]$ [Caselli et al., 1998] :

$$x(e) \leqslant \frac{2.7 \times 10^{-8}}{R_D} - \frac{1.2 \times 10^{-6}}{f_D} = 1.9 \times 10^{-7} \tag{6.2}$$

Ces calculs donnent une estimation grossière du taux d'ionisation. Le modèle chimique considère que l'équilibre est atteint, or nous avons vu que ce n'est pas le cas dans N63. La limite inférieure semble plus fiable. Celle-ci est plus basse que celles trouvées par exemple par Miettinen et al. [2011]. Dans N63, la densité de colonne ($\sim 5\times10^{24}$ cm^{-2} pour l'ensemble de l'enveloppe) est en moyenne deux ordres de grandeur plus élevées que dans les IRDCs massifs étudiés par ces auteurs. A ces densités, la photoionisation induite par le champ UV externe est largement négligeable [McKee, 1989]. L'ionisation est alors due principalement aux rayons cosmiques. Miettinen et al. [2011] estiment que le couplage entre le gaz neutre et le champ magnétique est négligeable pour les sources observées et que la diffusion ambipolaire n'est pas un facteur important dans l'évolution des IRDCs. Le couplage étant directement proportionnel à x(e) [Williams et al., 1998], celui-ci sera donc 2 ordres de grandeur plus faible dans N63 par rapport aux IRDCs.

6.2 Etude du gaz originel de l'enveloppe froide

Au chapitre précédent, nous avons mis en évidence l'existence d'une enveloppe de gaz froid et dense. Ce gaz est particulièrement intéressant car il n'a subi presque aucune modification depuis le début de l'histoire de la protoétoile, étant suffisamment éloigné de la région centrale. Seule sa densité a considérablement augmenté, passant de 10^3-10^4 à presque 10^8 cm^{-3}. Ce gaz originel peut contenir dans sa composition chimique des indices précieux sur l'évolution physique antérieure à l'effondrement. Cette phase pré-effondrement étant totalement inconnue pour les étoiles massives, ces indications potentielles sont essentielles à recueillir.

D'autre part, le contenu moléculaire et la distribution spatiale des molécules dans les disques protoplanétaires sont encore mal connus. Les observations à haute résolution angulaire sont rares, les disques étant petits ($\sim$ 100 - 1000 AU). Ces observations sont également souvent bruitées et peuvent être biaisées par l'émission de la poussière du disque [Dutrey et al., 2007]. Dans le plan médian des disques, la température peut être inférieure à 20 K (par exemple Guilloteau et al. [2012]) et la densité est de l'ordre de 10^6-10^8 cm^{-3} (par exemple Sakai et al. [2014]). Ces conditions sont comparables à celles régnant au sein de l'enveloppe de N63. Etudier ce gaz originel est un moyen de tester la chimie qui peut régner dans les disques.

Dans une première partie, nous allons explorer en détail la composition et les propriétés de ce gaz, puis, grâce au code Nautilus, nous allons tenter de contraindre le passé de N63.

6.2.1 Composition

Nous avons déterminé au chapitre précédent la composition de l'enveloppe froide (voir tableau 5.4). La liste des traceurs les plus certains de l'enveloppe froide est la suivante : c-C_3H, C_4H, p-c-C3H2, o-c-C3H2, C_3HD, HC_5N, HCCNC, NO, HOCN, N_2H^+, $^{15}NNH^+$, $N^{15}NH^+$, N_2D^+ and NH_2D. HC_5N est une chaîne carbonée portant un atome d'azote. HCCNC est un isomère de HC_3N et donc également une chaîne carbonée. La moitié des espèces du gaz originel est donc constituée de chaînes carbonées, tandis que l'autre moitié est constituée d'espèces azotées. Aucune espèce soufrée ne semble tracer de façon propre uniquement l'enveloppe froide.

En proportion, l'azote est l'élément le plus abondant, sous la forme de monoxyde d'azote NO et de N_2H^+. La figure 6.8 présente les abondances des différentes espèces en pourcentage. La déplétion du CO, l'un des principaux destructeurs de N_2H^+, est responsable d'une augmentation importante de l'abondance de N_2H^+. NH_3 se forme alors à partir de N_2H^+ et peut produire d'autres espèces azotées [Bergin and Tafalla, 2007a]. Celles-ci sont également déplétées sur les grains, mais sur des échelles de temps plus longues [Lippok et al., 2013].

NO est une molécule particulièrement abondante dans les nuages sombres, formée par la réaction : N + OH $\rightarrow$ NO + H, qui ne possède pas de barrière d'activation, ou une barrière inférieure à 50 K [Gerin et al., 1992]. Elle est détruite par la réaction N + NO $\rightarrow$ N_2 + O, réaction qui initie la chimie en phase gazeuse de l'ammoniac NH_3 et d'autres hydrures d'azote.

La présence importante de chaînes carbonées est également attendue dans le gaz froid où l'hydrogénation de C et de C^+ forme efficacement CH, CH_2, CH_3, CH_4, etc ... avant qu'une grande partie du carbone ne soit sous forme de CO [Sakai et al., 2009]. La composition de ce gaz originel est cohérente avec la composition des nuages sombres, suggérant que la protoétoile ne l'a pas encore modifié. Ce gaz pourrait donc encore contenir de l'information sur le passé de N63.

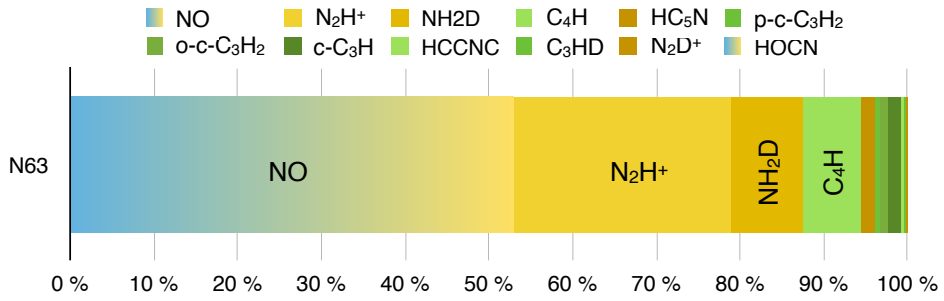


FIGURE 6.8 – Abondances des espèces présentes dans l'enveloppe froide, en pourcentage. Les chaînes carbonées sont représentées en vert, les azotées en jaune, les oxygénées en bleu. NO est en dégradé entre le jaune et le bleu.

6.2.2 Taux de déplétion

Nous avons vu que la température régnant dans l'enveloppe est d'environ 10 K et que la densité moyenne vaut $\sim 7 \times 10^7$ cm^{-3}. En comparaison, pour les protoétoiles de faible masse, de telles densités ne sont atteintes que dans les régions très internes, nettement plus chaudes, pour des rayons < 100-200 AU (voir par exemple Hincelin et al. [2013]), tandis que pour N63, l'enveloppe s'étend jusqu'à $\sim$ 3000 AU. Une énorme quantité de matière est donc portée à haute densité et à basse température. Dans de telles conditions, la déplétion des espèces doit être très importante. D'après la définition donnée par Miettinen et al. [2011], le facteur de déplétion peut s'exprimer comme :

$$f_D = \frac{x(CO)_{can}}{x(CO)_{obs}} \tag{6.3}$$

avec $x(CO)_{can} = 9.5 \times 10^{-5}$ l'abondance canonique de CO pour une distance au centre galactique de 8,5 kpc [Miettinen et al., 2011]. Pour estimer l'abondance de CO, j'utilise les isotopologues minces $C^{17}O$ et $^{13}C^{18}O$, qui donnent une abondance moyenne de CO de $1{,}1 \times 10^{-5}$. Le facteur de déplétion vaut alors $f_D = 7$. A titre de comparaison, Miettinen et al. [2011] mesurent un facteur de déplétion autour de 1 dans plusieurs nuages sombres en infrarouge pour lesquels la densité de colonne de H_2 est trois ordres de grandeur plus basse et la densité de colonne de $C^{17}O$ deux ordres de grandeur plus élevée. Fontani et al. [2006] trouvent des valeurs comparables à celle mesurée dans N63 pour au moins deux sources sur les 10 candidates à être des cœurs massifs préstellaires (M $\sim 10^2$ $M_\odot$, diamètre inférieur à 0,1 pc, T $\sim$ 20 K et pas d'émis-

sion du continuum). Toutefois, le taux de déplétion mesuré dans N63 n'est pas aussi élevé que l'on pourrait s'y attendre à ces densités. La modélisation de ce gaz originel va nous éclairer sur ce point.

6.2.3 Deutération

En considérant la liste élargie des traceurs d'enveloppe (voir partie 5.2.1), une fraction significative des espèces de l'enveloppe froide sont des espèces deutérées. D'autre part, presque toutes les espèces deutérées tracent l'enveloppe froide. Seules quelques molécules tracent d'autres régions. HDCS est un traceur de la région intermédiaire, HDCO et DCN sont influencés par les flots et CH_2DOH trace les régions centrale et intermédiaire.

Les rapports de deutération dans N63, ainsi que dans plusieurs autres sources, sont présentés dans le tableau 6.4. L'erreur sur ces taux est estimée à 50% en moyenne. Le taux de deutération moyen de l'enveloppe vaut $\sim$ 5%, . Le taux de deutération de H_2CS, le seul traceur de la région tiède, est comparable à celui des autres espèces. On s'attend à une deutération plus faible lorsque la température s'approche des 30 K, car à cette température, les processus de deutération en phase gazeuse via H_2D^+ deviennent inefficaces [Treviño-Morales et al., 2014]. La température moyenne de la région tiède, 25 K, n'est peut-être pas suffisante pour observer ces effets. Il faudrait observer la deutération d'autres espèces de la région tiède pour pouvoir conclure sur la validité de cette tendance.

Le taux de deutération global dans l'enveloppe de N63 est tout à fait comparable à celui de TMC-1, qui vaut 4,6%, mais inférieur à celui observé dans IRAS16293, autour de 9%.

$D_{frac}(N_2H^+)$ est particulièrement bas dans N63 (0,5%), ce qui est plutôt intriguant. En effet, Fontani et al. [2011] ont montré que dans des cœurs massifs sans étoile, ce rapport est de l'ordre de 20% et diminue pour les objets plus évolués jusqu'à atteindre 4% pour les régions UCHII. De plus, il a été montré que N_2H^+ et N_2D^+ ne gèlent pas sur les grains même à haute densité (voir par exemple Crapsi et al. [2005]), on pourrait alors s'attendre à une deutération élevée. Toutefois, cette valeur fait partie des plus incertaines car elle est basée sur les diagrammes de population de $^{15}NNH^+$ et $N^{15}NH^+$, qui ne possèdent que 2 transitions chacun. D_{frac}(HNC) est comparable dans N63, TMC-1 et MonR2, ce qui est conforme aux observations de Treviño-Morales et al. [2014], qui ont montré que D_{frac}(HNC) varie peu entre les sources. $D_{frac}(HC_3N)$ dans N63 est comparable au taux observé dans TMC-1 et 2,5 fois plus faible que dans IRAS16293. La non-détection de DC_3N, DNC et N_2D^+ au PdBI est cohérente avec une deutération faible de ces espèces azotées dans l'enveloppe et suggère que celle-ci est encore plus faible dans les parties centrales plus chaudes. Le taux de deutération de HCO^+ est du même ordre de grandeur que dans TMC-1, ainsi que dans le disque circumstellaire TW Hya ($D_{frac}(HCO^+) = 35 \times 10^{-3}$) [van Dishoeck et al., 2003].

On peut également se demander si la deutération a lieu en phase gazeuse ou bien sur les grains pour ces différentes espèces. L'appartenance à l'enveloppe froide ($\sim$ 12 K) d'une grande

partie des espèces deutérées pointe vers une deutération en phase gazeuse [Treviño-Morales et al., 2014]. La situation peut être plus complexe pour les espèces appartenant à la région tiède ($\sim$ 24 K). Le rapport [HDCS]/[H_2CS] a été mesuré par Marcelino et al. [2005] comme valant 30% dans Barnard 1, 5 fois plus que dans N63. Leur modèle chimique incluant seulement les réactions en phase gazeuse parvient à reproduire en partie ce rapport. Bacmann et al. [2003] ont étudié [D_2CO]/[H_2CO] vers des cœurs préstellaires de faible masse et ont observé une corrélation entre ce rapport et la déplétion du CO. La valeur observée dans N63, de l'ordre de 0,06%, s'inscrit dans cette tendance observationnelle avec un facteur de déplétion de 7. Toutefois, les modèles de Roberts and Millar [2000] suggèrent que [D_2CO]/[H_2CO] atteint un maximum de 4% au delà d'un facteur de déplétion de $\sim$ 13. Nos observations indiquent que ce n'est pas le cas. Cela ne permet toutefois pas de trancher entre une deutération en phase gazeuse et une deutération sur les grains pour H_2CO. Dans les régions internes où la température dépasse les 100 K, la deutération a lieu sur les grains puis les espèces sont relâchées en phase gazeuse, mais dans la région tiède et dans l'enveloppe, les deux voies sont probablement possibles. Le méthanol deutéré est quant à lui observé seulement dans la région tiède et la région de type hot core, suggérant fortement une deutération sur les grains.

Au vu des conditions physiques régnant dans l'enveloppe, température basse et déplétion élevée, on aurait pu s'attendre à un taux deutération beaucoup plus important dans N63 par rapport à TMC-1. Ceccarelli et al. [2007] ont observé le taux de deutération dans des cœurs préstellaires de faible masse, dans lesquels le facteur de déplétion varie de 2,5 à 16. Pour les cœurs présentant la plus forte déplétion, le taux de deutération (incluant [N_2H^+]/[N_2D^+] et/ou [D_2CO]/[H_2CO]) est de l'ordre de 0,2-0,3, un ordre de grandeur supérieur au taux de deutération incluant ces deux espèces dans N63. Il est clair que la déplétion et la température ne sont pas les uniques paramètres déterminant le taux de deutération. Bacmann et al. [2003] ont proposé un autre facteur : l'abondance d'électrons x(e). En effet ces derniers peuvent réagir avec H_2D^+ et empêcher la deutération. Toutefois, nos estimations suggèrent que x(e) n'est pas particulièrement important dans N63.

6.2.4 Modélisation 0D du gaz originel avec Nautilus

Nous avons utilisé le code chimique Nautilus, présenté à la partie 2.4.1, pour modéliser l'évolution du gaz originel. Les molécules deutérées n'étant pas encore incluses dans Nautilus, seules les molécules suivantes sont étudiées : NO, N_2H^+, c-C_3H, C_4H, HCCNC et HC_5N. La figure 6.9 présente les différentes phases considérées. La première phase, jusqu'à 10^3 ans, est moyennement dense 10^5 cm^{-3} et tiède T = 25 K, correspondant à une période de nuage diffus dans le cas de cœurs de masse élevée. La seconde phase conserve la même densité mais voit sa température baisser à 10 K, jusqu'à 10^6 ans, correspondant à une évolution au sein d'un filament. A ce moment, la phase 3 correspondant à la collision entre filaments commence. La température augmente alors jusqu'à 100 K, tandis que la densité augmente jusqu'à 10^7 cm^{-3}.

TABLE 6.4 – Comparaison du rapport DX / HX dans N63, TMC-1, IRAS16293 et MonR2, qui est une région UCHII proche. Dans N63, les taux de deutération sont déterminés dans l'enveloppe, sauf pour H_2CS et CH_3OH qui sont déterminés dans la région tiède. Sauf mention contraire, les données concernant TMC-1 proviennent de Turner [2001] et Markwick et al. [2001] (au niveau du pic de cyanopolyynes), de Awad et al. [2014] pour IRAS16293 et de Treviño-Morales et al. [2014] pour MonR2. Le mode de deutération supposé est indiqué, sur les grains (Gr) ou en phase gazeuse (G).

Espèces	Type	N63 %	TMC-1 %	IRAS16293 %	MonR2 %	Orion KL %
N_2D^+/N_2H^+	G	0.5	8	25	1.5	< 30
DCN/HCN	G	1.1	0.8	1.3	-	0.3
DNC/HNC	G	2.8	1	3	1	-
DC_3N/HC_3N	G	1.2	0.8	3	-	-
CCD/CCH	G	2.3	3-6	18	2	-
DCO^+/HCO^+	G	0.9	1.3	0.9	0.2	14
$HDCO/H_2CO$	G/Gr	0.1	5	14	1	14
C_3HD / (o+p)-C_3H_2[d]	G	15.5	8	-	-	-
CH_2DCCH / CH_3CCH[d]	G	21	11-22	-	-	-
$D_2CO/HDCO$[d]	G/Gr	60	-	⩽50	< 3800	2.1
HDCS / H_2CS	G/Gr	5.5	2	-	-	-
CH_2DOH/CH_3OH	G/Gr	1.2	-	-	-	⩽ 0.02

[a] Ce travail. [b] Butner et al. [1995] ; Turner [2001] ; Minowa et al. [1997] ; Markwick et al. [2002] [c] Awad et al. [2014]
[d] Treviño-Morales et al. [2014] [e] Turner [1990] ; Schilke [1992] [e] Tous les rapports sont calculés grâce à l'abondance dérivée du diagramme de population d'un isotopologue rare, excepté pour ces trois espèces : CH_3CCH, HDCO and C_3H_2.

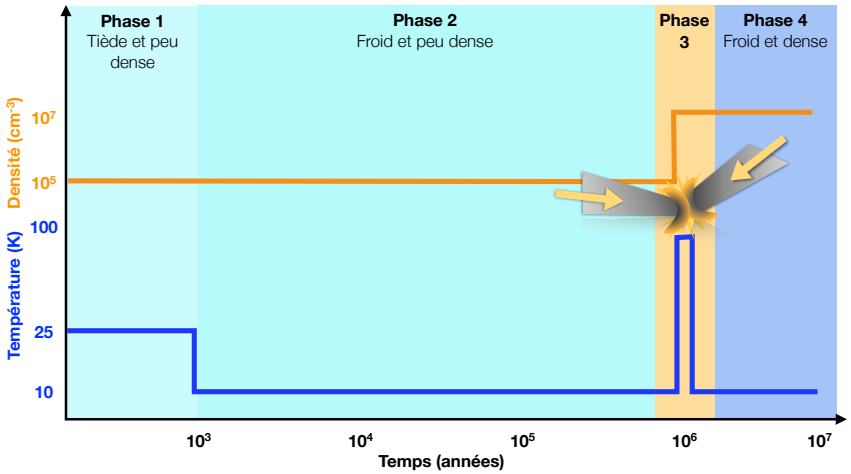


FIGURE 6.9 – Evolution des conditions physiques durant la modélisation de la chimie avec Nautilus.

Au bout de 10^3 ans, la température chute de nouveau à 10 K alors que la densité reste élevée car l'effondrement du cœur doit avoir commencé au moment de ce refroidissement. Nous avons simulé deux cas, l'un avec la phase de chauffage, l'autre sans. La dernière phase dure 10^6 ans.

Les résultats présentés à la figure 6.10 présentent l'évolution des abondances des espèces juste après la phase 2 pour le cas sans chauffage et juste après la phase 3 pour le cas avec chauffage. Les bandes de couleur correspondent aux abondances mesurées dans N63. La hauteur des bandes prend en compte l'erreur sur l'abondance. La longueur minimale temporelle des bandes est arbitraire, pour des raisons de lisibilité.

Premièrement, les observations sont très bien reproduites par la modélisation, et ce, au même temps, environ 2.10^3 ans après le début de la phase 4 à haute densité. Ajouter une phase de chauffage augmente l'abondance de NO et HCCNC de deux ordres de grandeur, tandis que cela diminue l'abondance d'1 à 3 ordres de grandeur pour c-C_3H, C_4H et N_2H^+. L'abondance de HC_5N est seulement légèrement diminuée initialement. Au bout de $7{,}5\times10^3$ ans, les abondances deviennent stables et sont identiques aux abondances du cas sans phase de chauffage. Le deuxième résultat est donc qu'au delà de $7{,}5 \times 10^3$ ans à haute densité, les espèces semblent perdre la mémoire de leur passé, pourtant très récent (moins de 10^4 ans). Il ne semble donc pas possible de retrouver la trace d'un éventuel choc de filaments dans le passé de ce gaz. Enfin, l'accord entre observations et modèle intervient justement à ce moment de transition, à 2.10^3 ans. La chimie du gaz originel dans N63 pourrait donc être encore hors équilibre au moment des observations. La période à haute densité dans N63 aurait alors commencé il y a environ 2.10^3 ans, permettant d'observer ces espèces, reliquats de la chimie de nuage sombre. Cet âge chimique est légèrement inférieur mais compatible avec l'âge physique déterminé par Duarte-Cabral et al. [2013], entre 3000 et 5000 ans.

D'autre part, les abondances mesurées dans L134 sont présentées au temps zéro sur la figure de gauche, pour toutes les espèces sauf HCCNC, qui n'a pas été mesurée dans cette source à ma connaissance. L134 a été choisie pour représenter un nuage sombre typique à la place de

TMC-1, qui est connue pour avoir des chaînes carbonées plus abondantes que dans d'autres nuages sombres. L'erreur sur ces abondances étant inconnue, seul l'ordre de grandeur peut être comparé. Les abondances mesurées sont en bon accord avec la modélisation, sauf pour N_2H^+, qui est plus abondant que prédit par Nautilus. Cet accord confirme que les conditions initiales chimiques proposées par Nautilus sont cohérentes avec la chimie observée dans les nuages sombres.

NO et N_2H^+ sont particulièrement sensibles à la phase de chauffage. Un rapport [NO]/[N_2H^+] important dans un objet jeune pourrait être un traceur de ces phases de chauffage précoces, mais seulement pendant 1000 ans, ce qui le rend difficile à utiliser.

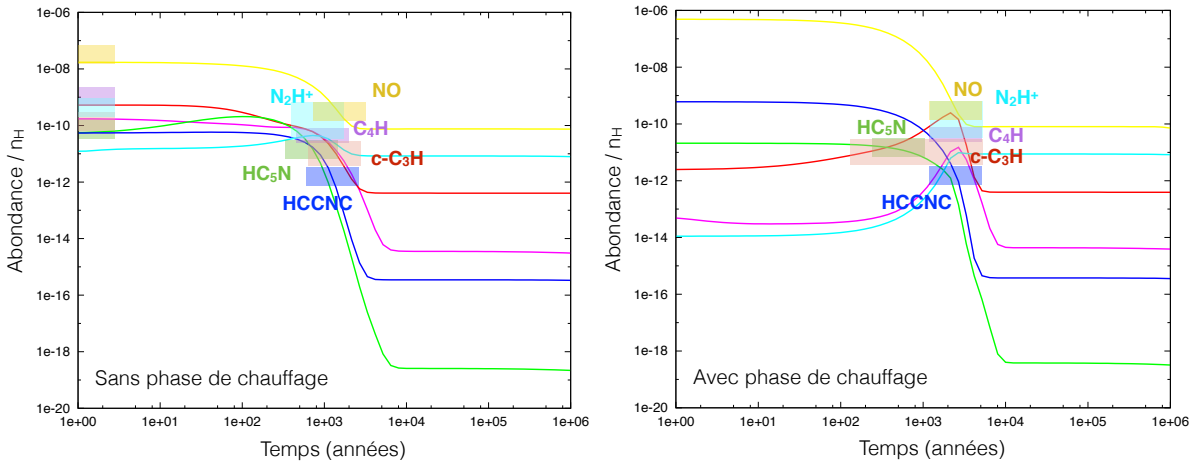


FIGURE 6.10 – Résultats de la modélisation 0D avec Nautilus, avec une évolution des conditions physiques avec ou sans phase de chauffage. Le temps zéro marque la fin de la phase 3 dans le cas avec chauffage et de la phase 2 dans le cas sans chauffage. Les bandes centrales correspondent aux mesures des abondances dans N63. Les bandes situées au temps zéro sur la courbe de gauche sont les abondances mesurées dans L134. Les courbes de la figure de droite, avec chauffage, sont retardées de 1000 ans, correspondant à la durée du chauffage.

La figure 6.11 présente la modélisation de l'abondance de CO pour une histoire physique sans chauffage. Au bout d'environ 5000 ans, une large fraction du CO est déplétée. Comme précédemment, la modélisation indique que N63 est clairement dans une phase de transition, 900 à 2000 ans après le début de la phase à haute densité. L'abondance mesurée est assez incertaine car dérivée des diagrammes de population de $C^{17}O$ et $^{13}C^{18}O$ avec seulement deux raies. Cette mesure permet toutefois d'exclure des âges supérieurs à 5000 ans, et inférieurs à 500 ans. Cette phase de transition que traverse N63 explique le taux de déplétion plutôt modéré observé.

6.3 Etude de la naissance d'un hot core

15 COMs sont détectées dans N63 : 7 oxygénés, CH_3OH, C_2H_5OH, CH_3CHO, CH_3OCHO, CH_3OCH_3, 3 azotés, CH_3CN, C_2H_5CN et NH_2CHO, 2 espèces à chaîne carbonée HC_5N et

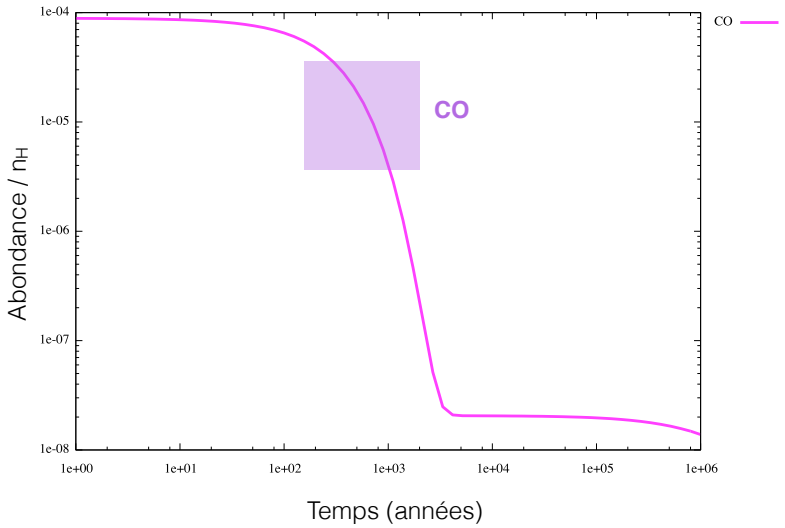


FIGURE 6.11 – Résultat de la modélisation 0D avec Nautilus de l'abondance de CO sans phase de chauffage. Le début de l'échelle de temps se situe après les phases 1 et 2 (voir texte). L'erreur sur l'abondance de CO est une estimation, car l'abondance est déterminée à partir des diagrammes de population de $C^{17}O$ et $^{13}C^{18}O$ avec seulement deux transitions.

CH_3CCH, 3 deutérées, CH_2DOH, CH_3OD et CH_2DCCH et 1 isotopologue rare $^{13}CH_3OH$. Les COMs sont des signatures typiques des hot cores. Les modèles prévoient que la plupart des COMs sont produites à la surface des grains lorsque leur température dépasse les 30 K, puis libérées en phase gazeuse lorsque la température atteint une centaine de K.

Toutefois, les abondances observées sont beaucoup plus faibles que dans IRAS16239 et G34 (voir tableau 6.5), indiquant que N63 ne possède pas encore de hot core pleinement développé. Seul le méthanol de la région de type hot core atteint une abondance comparable à celle observée dans IRAS16293. Le méthanol pourrait être le premier signe du développement du hot core.

D'autre part, nous avons mis en évidence l'existence d'une région tiède (T $\sim$ 24 K) qui pourrait être favorable à cette chimie complexe. Les modèles chimiques de Garrod and Herbst [2006] ont par exemple montré que CH_3OCHO peut être produit en phase gazeuse à des températures intermédiaires entre 20 et 40 K. Une autre voie possible pour expliquer l'observation de COMs dans des cœurs préstellaires à basse température (< 20 K) a été proposée par Vastel et al. [2014]. Les COMs pourraient avoir pour origine les parties externes du nuage, où l'interaction des rayons cosmiques avec H_2 produit des photons FUV capables de désorber une petite fraction de H_2O, de CH_3OH et d'éthylène C_2H_4. Ces espèces peuvent alors réagir en phase gazeuse pour former des COMs en quantité détectable. Les abondances observées dans le cœur préstellaire L1544 par Vastel et al. [2014] sont tout à fait similaires à celles observées dans l'enveloppe tiède de N63, suggérant que ces processus de photodésorption peuvent aussi concerner des fragments massifs de densité plus importante ($\sim 1.10^8$ cm^{-3} dans l'enveloppe tiède de N63, contre $\sim 1.10^6$ dans L1544).

TABLE 6.5 – Abondances des COMs dans les différentes régions de N63 : la région tiède (L), le flot (O) et la région de type hot core (HC). Les abondances dans le flot, assez incertaines, sont estimées en utilisant une taille d'émission de 5,2″, similaire à celle de l'enveloppe. Ces abondances sont comparées avec celles observées dans TMC-1, IRAS16293 et G34.

Espèce	Origine	N63	TMC-1	IRAS 16293	G34
CH_3OH	L	1.9(-8)	3(-9)	3(-7)	1(-6)
	O	9.0(-10)			
	HC	1.6(-7)			
CH_3CN	L	4.6(-11)	6(-10)	1(-8)	3.3(-8)
	O	3.3(-11)			
	HC	7.6(-11)			
CH_3CHO	L	2.9(-10)	6(-10)	2(-8)	1.3(-9)
	HC	2.6(-10)			
CH_3OCH_3	L	4.8(-10)	-	1.7(-7)	7(-8)
	HC	3.6(-9)			
CH_3OCHO	L	7.8(-10)	-	2.4(-7)	1.1(-7)
	HC	2.4(-9)			

6.3.1 Modélisation 1D des COMs

Pour tester la formation des COMs dans N63, nous avons modélisé N63 à une dimension de façon statique. La composition initiale de l'ensemble est donnée par la sortie du modèle 0D détaillé précédemment. Le flot n'est pas considéré, seulement l'enveloppe, le hot core et une transition douce entre les deux régions. Nous avons choisi un profil de densité en r^{-2} pour un rayon supérieur à 1000 AU et une densité constante au centre $n_H = 4{,}35\times10^9$ cm^{-3}. La température passe de 12 K dans l'enveloppe pour un rayon de 7400 AU à 100 K à 500 AU (voir figure 6.12). Les COMs les plus abondants dans N63 sont examinés : le méthanol, le formiate de méthyle et le diméthyléther. En seulement quelques centaines d'années, un état stationnaire est atteint. La figure 6.13 présente les résultats pour t = 2000 ans après la début de la phase 4 à haute densité, qui est l'ordre de grandeur de l'âge déterminé grâce au modèle 0D de l'enveloppe.

La modélisation fait apparaître que les trois COMs considérés deviennent suffisamment abondants pour être observés seulement dans les régions internes $\lesssim$ 500 ua, confirmant que la taille déterminée pour la région intermédiaire est probablement une limite supérieure. Öberg et al. [2011] ont observé une tendance des espèces riches en -HCO, comme CH_3OCHO, à être plus abondantes que les espèces riches en $-CH_{3/2}$, comme CH_3OCH_3 dans les enveloppes de YSOs (*Young Stellar Objects*) de faible masse. Cette tendance est inversée dans les parties internes de ces enveloppes, ainsi que dans les YSOs de masse élevée. La modélisation et les observations confirment cette tendance pour les YSOs massifs, avec une abondance de CH_3OCH_3 supérieure à celle de CH_3OCHO dans les parties les plus internes et une inversion dans la région intermédiaire. La modélisation suggère qu'à plus grand rayon, la tendance s'inverse à nouveau, mais pour des abondances difficilement observables. Cette observation suggère une composi-

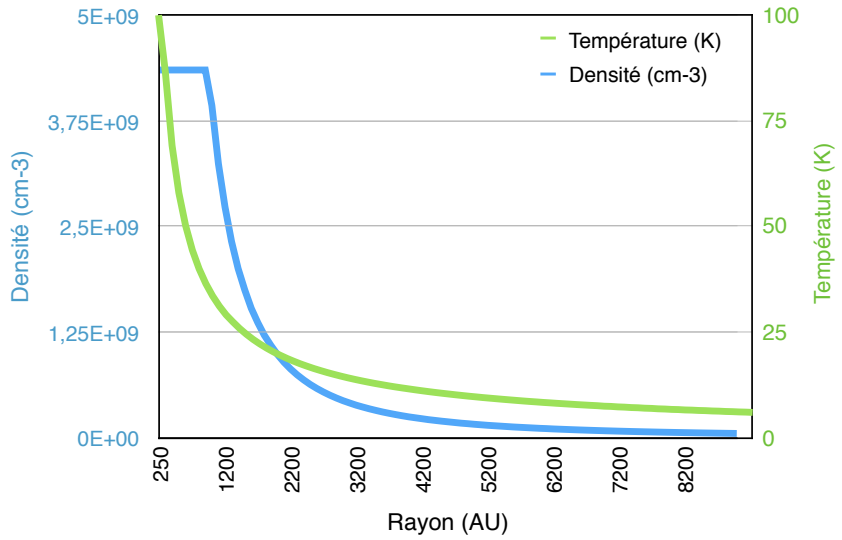


FIGURE 6.12 – Profil de température et de densité utilisé dans la modélisation 1D.

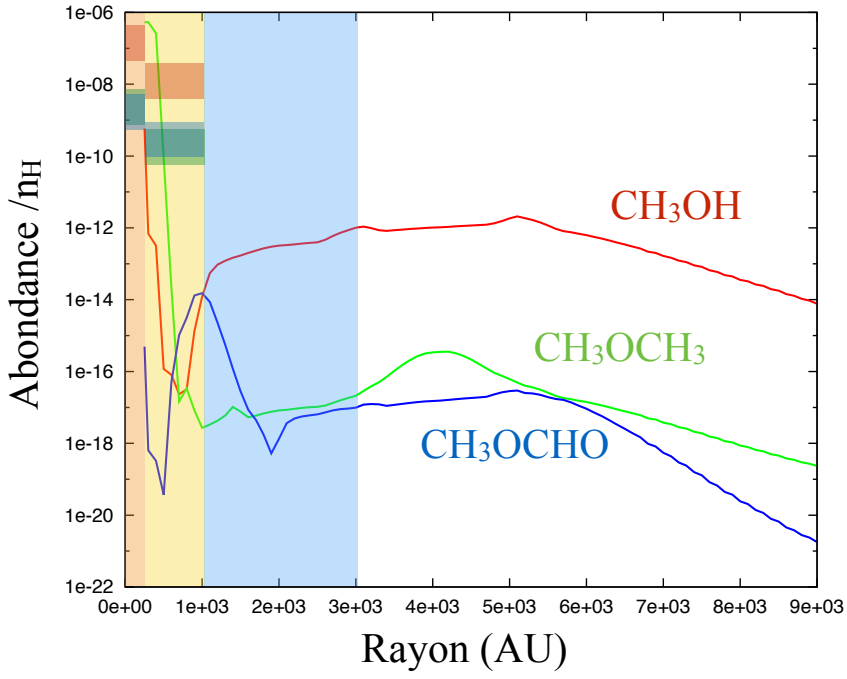


FIGURE 6.13 – Résultats de la modélisation 1D pour t = 2000 ans après le début de la phase à haute densité. La zone rouge correspond à la région de type hot core, de $\sim$ 250 AU de rayon, la zone orange correspond à la région intermédiaire, de rayon $\sim$ 1050 AU et la région bleue est l'enveloppe, de rayon $\sim$ 3000 AU. Les bandes horizontales rouge, bleue et verte sont les valeurs mesurées des abondances des trois COMs dans la région de type hot core et dans la région intermédiaire.

tion des glaces différente entre la région de type hot core et la région tiède. Dans les parties centrales, les glaces seraient plus riches en -$CH_{3/2}$ qu'en -HCO.

6.3.2 Formation asymétrique d'un hot core ?

L'étude spectroscopique de N63 a montré que deux groupes de molécules se dégageaient du point de vue de leur vitesse et de leur largeur de raie. Le premier type a une vitesse de -5,1 $\mathrm{km\,s^{-1}}$ et regroupe l'ensemble des COMs et des molécules soufrées tandis que le deuxième est à -4,4 $\mathrm{km\,s^{-1}}$, regroupant des traceurs d'enveloppe froide. L'hypothèse de deux objets de composition chimique différente vient alors à l'esprit. Toutefois, l'image est compliquée par les observations à haute résolution angulaire du chapitre 4. Nous avons vu que les molécules présentent un pic d'émission principal, à -5,0 $\mathrm{km\,s^{-1}}$ et une extension vers -6,3 $\mathrm{km\,s^{-1}}$ (voir figures 4.7 et 4.12). Le pic principal de l'émission moléculaire pourrait bien correspondre au groupe des COMs et donc à une région de type hot core. Par contre, la vitesse du groupe des traceurs froids ne correspond pas à celle mesurée dans l'extension. L'extension a une longueur d'environ 0,4″ soit $\sim$ 560 ua, ce qui est quasiment la résolution du PdBI pour ces observations. Nous sommes donc à la limite de résoudre plus en détails la complexité de cette source. L'enveloppe pourrait être chauffée de façon asymétrique, guidée par les cavités du flot et former une région de type hot core décentrée par rapport au reste de l'enveloppe froide.

Dans ces deux derniers chapitres, nous avons pu identifier la structure spatiale chimique de N63 : une enveloppe froide et fortement déplétée à 10 K, une région de transition tiède entre 20 et 50 K, une région de hot core naissant à plus de 100 K. Nous avons également commencé la modélisation du gaz froid de l'enveloppe et des COMs de la région centrale. De plus amples détails peuvent être trouvés dans l'article en cours de préparation *Unbiased spectral survey of CygX-N63 : pre-hot core chemistry and pristine gas for high-mass star formation* (annexe F.1).

CHAPITRE 7

CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

7.1 Conclusions

La naissance des étoiles massives ($M \geqslant 8\ M_\odot$) reste une question ouverte en astronomie. Les étoiles massives sont de première importance dans le budget énergétique des galaxies, elles sont une source majeure de la richesse chimique interstellaire. Pourtant, les premières étapes de leur formation sont encore aujourd'hui mal connues. Il semble maintenant admis que les étoiles massives naissent au sein de cœurs denses massifs, mais les différents scénarios expliquant leur formation sont encore débattus (voir chapitre 2).

Nous avons souhaité éclairer les conditions initiales de la formation des étoiles massives du point de vue astrochimique. Le chapitre 4 a présenté une étude interférométrique des cœurs denses massifs de la région du Cygne, qui nous a permis de confirmer que ceux-ci sont monolithiques jusqu'à une échelle de 500 ua et possèdent des masses *super-Jeans*. Nous avons sélectionné la source la plus massive et la plus riche chimiquement, CygX-N63, pour y mener une étude plus poussée de sa structure par une approche astrochimique. Nous avons réalisé vers cette source un relevé spectral non biaisé à 0,8, 1, 2 et 3 mm avec le télescope 30 m de l'IRAM, révélant une complexité chimique significative de plus de 40 espèces. La richesse de ce relevé associée à la fastidieuse mais complète analyse des données chimiques, incluant même une première modélisation chimique, m'a permis de progresser sur les trois grandes lignes de recherche que nous nous étions fixées (voir page 1.2).

7.1.1 Utiliser la chimie comme diagnostic pour contraindre le scénario de formation des étoiles massives

Les travaux de Bontemps et al. [2010] ont montré que les objets froids les plus massifs dans Cygnus-X sont probablement des précurseurs de vraies étoiles massives. Le travail de Duarte-Cabral et al. [2013] a renforcé cette interprétation en montrant que les flots moléculaires de ces objets sont plus puissants que ceux des précurseurs d'étoiles de faible masse et en suggérant que les objets massifs et froids du Cygne sont probablement des objets de classe 0 massifs. Parmi ces objets, le plus extrême s'est révélé être CygX-N63, avec une masse d'enveloppe de 58 $M_\odot$ pour une luminosité de 350 $L_\odot$. Avec une telle masse d'enveloppe, l'objet pourrait former une étoile d'environ 60 $M_\odot$, c'est-à-dire de type O4 environ, à un facteur deux seulement des

masses stellaires maximales connues (de l'ordre de 120 $M_\odot$). Si l'on considère une efficacité d'accrétion de 30 à 50 %, N63 deviendra alors plutôt une étoile d'environ 20 à 30 $M_\odot$, ce qui est encore clairement dans le domaine des étoiles O. Avec une luminosité de seulement 350 $L_\odot$, CygX-N63 pourrait être une protoétoile qui n'évoluerait qu'en une étoile de masse intermédiaire si l'efficacité d'accrétion était très réduite, de l'ordre de 10 %. Cette faible efficacité pourrait être due à l'effet du flot sur l'enveloppe. Ces considérations montrent qu'il est vital de contraindre la nature exacte de CygX-N63. Alternativement, Duarte-Cabral et al. [2013] ont proposé que la faible luminosité de CygX-N63 serait due à son extrême jeunesse, impliquant une faible masse actuelle de l'embryon stellaire en croissance (environ $1 - 2$ $M_\odot$ pour un âge de 3000 à 5000 ans).

Avant ce travail de thèse, aucun bon traceur moléculaire d'enveloppe en effondrement des protoétoiles massives n'était connu. En effet, les densités de ces enveloppes impliquent habituellement des taux de déplétion importants. De plus, les protoétoiles massives plus évoluées sont dominées par la richesse moléculaire des coeurs chauds, ne permettant pas d'étudier le gaz froid en effondrement sur la protoétoile. Il était donc particulièrement important de réussir à identifier les raies moléculaires traçant effectivement l'enveloppe en effondrement. La profondeur du relevé a même permis d'identifier quelques 15 traceurs d'enveloppe froide. Cela nous a permis de montrer que N63 contient effectivement une grande quantité de gaz froid, confirmant par là même sa grande jeunesse. De plus, l'observation de cet important réservoir de matière disponible pour la formation de la protoétoile soutient le scénario de l'effondrement monolithique.

Nous avons aussi pu discuter les propriétés physiques de ce gaz froid. La dispersion de vitesse, par exemple, apparaît similaire ou seulement légèrement plus élevée que dans les protoétoiles de faible masse (1,6 km s^{-1} par rapport à 1,4 km s^{-1} dans IRAS16293). Cette observation est surprenante dans la mesure où l'on aurait attendu une turbulence plus importante dans un objet massif ou encore un processus d'apport de matière qui augmenterait la dispersion de vitesse. Finalement, la dispersion de vitesse des enveloppes en effondrement semble peu dépendre de la masse de l'objet. Cela conforte l'image selon laquelle les étoiles massives se forment de la même façon que les étoiles de faible masse. En plus de cette analyse physique, nous avons analysé la composition chimique de l'enveloppe de CygX-N63. De façon très intéressante, nous avons observé que la composition globale de cette enveloppe ressemble bien plus à celle des hot cores qu'à celle des hot corinos. Or les hot cores sont des signes clairs de formation stellaire massive alors que les hot corinos sont des indicateurs de protoétoiles de faible masse. CygX-N63 serait donc bien un pré-hot core plutôt qu'un hot corino massif.

Enfin, la composition chimique du gaz froid de l'enveloppe a pu être analysée et modélisée avec Nautilus. Il en ressort le résultat extrêmement intéressant que la chimie de l'enveloppe de CygX-N63 est très bien reproduite par le modèle et que cette chimie est encore fortement hors équilibre malgré les hautes densités. Cela suggère un âge chimique extrêmement faible, estimé à environ $\sim$ 1000 ans. C'est une confirmation claire de la jeunesse de CygX-N63.

CygX-N63 est donc bien un précurseur extrêmement jeune d'étoile massive qui se formerait par effondrement monolithique. Le niveau de turbulence dans l'enveloppe froide n'est néanmoins actuellement pas suffisant pour expliquer une masse de Jeans importante. Le scénario de type Tan & McKee n'est donc pas directement applicable. Une autre source de soutien (magnétique ?) doit être invoquée. Alternativement, la turbulence pourrait ne pas être entretenue comme le suppose Tan & McKee et aurait pu diminuer depuis le début de l'effondrement.

Les travaux de Motte et al. [2007] ont montré que la phase préstellaire, pré-effondrement, pour la formation stellaire massive est très courte (quelques 10000 ans alors qu'elle est de l'ordre du million d'années pour les étoiles de faible masse). Il est donc très difficile de trouver des coeurs préstellaires massifs nous permettant d'étudier les conditions initiales physiques et chimiques de la formation des étoiles massives.

Sur ce point, notre travail a permis de mettre en évidence une enveloppe en effondrement contenant du gaz froid ayant très peu évolué depuis la phase préstellaire. Ce gaz peut nous permettre de contraindre certaines propriétés des conditions initiales de la formation des étoiles massives. Nous avons tenté de remonter le temps grâce à une modélisation chimique pour déterminer si le gaz préstellaire avait subi des chocs supersoniques avant l'effondrement. Il ressort de cette modélisation que, bien qu'indiquant une grande jeunesse, la composition du gaz froid de CygX-N63 ne permet pas de discriminer les deux scénarios qui se distinguent chimiquement, entre autres, par un rapport $[N_2H^+]/[NO]$ très différent. Cet écart chimique entre les deux scénarios est en effet de très courte durée (< 1000 ans). Il sera possible de continuer à chercher des diagnostics pertinents pour contraindre l'évolution préstellaire de la formation des étoiles massives.

7.1.2 Progresser sur l'origine astrochimique des composés moléculaires, en particulier dans les hot cores

L'identification du gaz froid et chimiquement jeune dans N63 est une première étape importante dans la compréhension de ces composés, car ce gaz sera incorporé au hot core naissant. Une stratification de la chimie a été mise en évidence, entre une région de type hot core, une région tiède et une enveloppe froide. Cette région tiède est particulièrement intéressante car les conditions qui y règnent ($T \sim$ 20-50 K, $n \sim 10^8$ cm^{-3}) sont propices aux échanges entre la phase gazeuse et les grains et à la formation des COMs grâce à la mobilité des espèces à la surface des grains, permise par la température, et à la désorption de CO.

Nous avons pu déterminer les abondances de nombreuses espèces dans les trois couches de la stratification. La comparaison avec les modèles de la chimie protostellaire ne fait que commencer. Par exemple, nous pourrons probablement comprendre bientôt pourquoi certains COMs sont plus présents dans la partie tiède que d'autres. La stratification chimique est aussi temporelle. Il est donc possible, par la modélisation, de suivre l'évolution des espèces, et en

particulier des COMs. La longue analyse du relevé ne nous pas permis d'approfondir autant que souhaité cette exploitation de grande importance mais le succès de cette décomposition ouvre des perspectives très importantes.

Ce travail a également confirmé l'importance des espèces azotées dans le gaz froid et déplété. Dans les objets de faible masse, lorsque le gaz froid domine l'émission, très peu de transitions sont détectables. Etudier un objet massif et peut-être légèrement plus chaud, comme N63, permet l'étude de ce gaz froid. Le formamide NH_2CHO est observé par exemple pour la première fois dans une protoétoile massive jeune. Son origine semble être dans l'enveloppe tiède la où il y a probablement encore des espèces azotée en phase gazeuse mais pas trop d'espèces oxygénées qui pourrait empêcher la formation en favorisant les COMs classiques. De même si la détection de CH_2NH est confirmée, sa présence dans l'enveloppe d'une protoétoile pourrait avoir des implications sur la formation des espèces prébiotiques qui contiennent beaucoup de groupements azotes. CygX-N63 pourrait devenir une cible de référence pour rechercher les origines protostellaires des espèces prébiotiques.

7.1.3 Rechercher de nouveaux diagnostics d'état évolutif pour les étoiles massives

Nous avons recherché des diagnostics chimiques temporels, des horloges chimiques, mais également des diagnostics permettant de différencier les précurseurs de hot cores des hot corinos. En étudiant les proportions de carbone, d'oxygène, d'azote et de soufre dans N63 par rapport à plusieurs sources de référence, nous avons montré que les rapports [N]/[S] et [H_2CO + HCO^+]/[SO + OCS + SO_2] remplissent ces deux fonctions : ils diminuent avec l'évolution et permettraient de distinguer hot core et hot corino. L'observation de NO, qui est un réservoir d'azote non négligeable dans N63 et les nuages sombres, pourrait fournir facilement un diagnostic de phases préstellaires, via le rapport [NO]/[SO] par exemple. Enfin, comme dit précédemment, le rapport [NO]/[N_2H^+] pourrait permettre de tracer les phases post-choc.

7.2 Perspectives

Ce travail ouvre de vastes perspectives. En premier lieu, la modélisation de l'évolution de l'enveloppe dans son ensemble mérite d'être poursuivie pour confirmer la diminution de l'abondance des espèces azotées et l'augmentation de celle des espèces soufrées et tester l'ensemble des diagnostics chimiques proposés. De plus, les espèces deutérées sont depuis peu de temps incluses au code chimique Nautilus. Nous avons montré leur importance dans l'enveloppe froide de N63. Leur modélisation va nous permettre d'affiner nos résultats et peut-être d'identifier des espèces qui conserveraient plus longtemps leur mémoire pré-effondrement.

L'exploration spatiale à haute résolution de N63 va être poursuivie grâce à l'utilisation des différentes lignes de base du PdBI permettant une détermination encore plus précise de la taille

des régions internes et donc des abondances.

La mise en évidence de diagnostics chimiques dans N63 peut maintenant servir à réaliser des études statistiques des propriétés du gaz préstellaire à plus grande échelle. Les différents rapports évolutifs proposés vont pouvoir être testés de façon statistique mais également sur N53-MM2, qui a le potentiel d'être un cœur préstellaire massif. Un programme ALMA en cours d'observation (Motte, Bontemps, Louvet et al.) permettra bientôt de détecter et caractériser le gaz préstellaire de cette région, étendant ce travail à un grand nombre d'objets, ainsi qu'au gaz préstellaire en général.

ANNEXE A

DÉTECTIONS ET DÉTECTIONS POTENTIELLES D'ESPÈCES RARES

A.1 Les ions

A.1.1 Le dioxyde de carbone hydrogéné et deutéré $DOCO^+$

$DOCO^+$ est la version deutérée de $HOCO^+$, aussi noté HCO_2^+, qui est le dioxyde de carbone hydrogéné. $DOCO^+$ n'a jamais été observée dans le milieu interstellaire. $HOCO^+$ a été pour la première fois identifié dans SgrB2(OH) par Thaddeus et al. [1981], puis dans des nuages sombres comme TMC-1 [Turner et al., 1999]. Plus récemment, il a été détecté dans une protoétoile de faible masse [Sakai et al., 2008a]. L'efficacité de formation de $HOCO^+$ dépend du taux de rayons cosmiques et de la densité. Comme N_2H^+ et HCO^+, $HOCO^+$ se forme en phase gazeuse par des réactions avec H_3^+ [Podio et al., 2014] :

$$H_3^+ + CO_2 \rightarrow HOCO^+ + H_2 \tag{A.1}$$

La transition $DOCO^+$ ($12_{0,12} \rightarrow 11_{0,11}$) est détectée à 2,8 σ. Une autre transition, $DOCO^+$ ($5_{0,5} \rightarrow 4_{0,4}$) est contaminée par C_2H_5OH ($16_{3,13,2} \rightarrow 16_{2,14,2}$) (voir table A.1 et figure A.1). La vitesse pic moyenne obtenue pour ces transitions est -4,6 $\pm$ 0,1 km s^{-1} tandis la largeur moyenne est 3,2 $\pm$ 0,3 km s^{-1}, ce qui est cohérent avec les valeurs obtenues pour $HOCO^+$. Le diagramme de population de ces deux transitions suggère une température d'excitation de 26 K et une densité de colonne de 2×10^{13} cm^{-2}. Cette température est cohérente avec celle trouvée pour $HOCO^+$, valant 19 K.

D'autre part, j'ai utilisé la modélisation ETL en tenant compte des transitions non détectées de $DOCO^+$, avec une température d'excitation de 26 K , une taille de 4,3″ et en prenant en compte C_2H_5OH (avec T_{ex} = 37 K et N = 1×10^{15} cm^{-2}, valeurs moyennes tirées du diagramme de population). L'ensemble des raies est correctement reproduit pour une densité de colonne légèrement plus faible, de l'ordre de 6×10^{12} cm^{-2}. De plus, la modélisation de C_2H_5OH seul ne parvient pas à reproduire l'intégralité de la raie mélangée (voir partie basse de la figure A.1).

La densité de colonne de $HOCO^+$ vaut $3{,}3\times 10^{13}$ cm^{-2}, correspondant à une abondance de $3{,}1 \times 10^{-12}$ en considérant que $HOCO^+$ fait partie de l'enveloppe de taille 4,3″. La densité de colonne de $HOCO^+$ a été mesurée à $\sim 10^{15}$ cm^{-2} vers le centre galactique et est inférieure

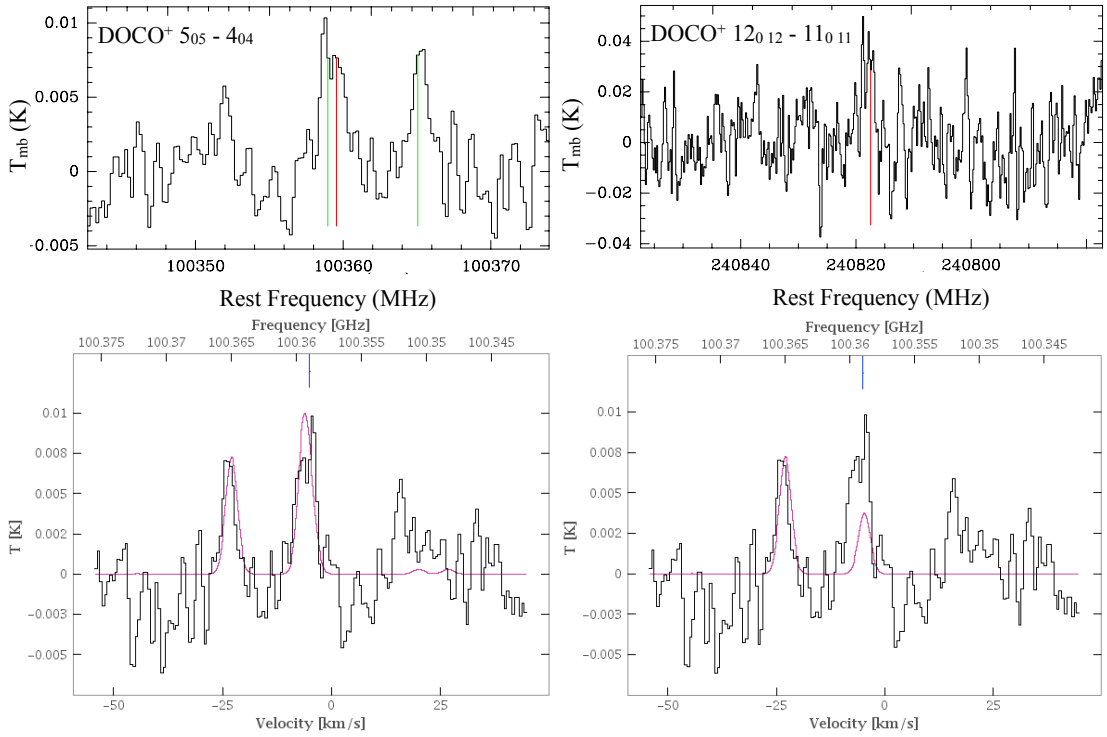


FIGURE A.1 – Haut : Spectres des raies potentielles de $DOCO^+$. Les lignes rouges indiquent la position de $DOCO^+$ tandis que les lignes vertes marquent l'emplacement des raies de C_2H_5OH. Bas : Modélisation ETL de la raie de $DOCO^+(5_{0,5}$ - $4_{0,4})$ et de C_2H_5OH (gauche), des raies de C_2H_5OH seules (droite).

TABLE A.1 – Propriétés des raies de $DOCO^+$: fréquence, énergie du niveau supérieur, température pic en unité de température *main-beam*, bruit rms, vitesse du pic, FWHM et intensité intégrée. Ces paramètres sont ceux des ajustements gaussiens.

Transition	Freq. (MHz)	E_{up} (K)	T_{peak} (mK)	rms (mK)	V_{peak} (km s^{-1})	FWHM (km s^{-1})	$\int T_{mb}dV$ (K km s^{-1})
$5_{0,5}$ - $4_{0,4}$	100359.55	14.4	7.4 ± 1.3	3	-4.9 ± 0.7	4.4 ± 1.5	0.0323
$12_{0,12}$ - $11_{0,11}$	240817.45	75.1	35.9 ± 5.4	13	-5.7 ± 0.2	3.1 ± 0.5	0.0941

à 10^{12} cm^{-2} dans les nuages sombres. Le rapport [$HOCO^+$] / [CO_2] vaut environ 10^{-5} dans les nuages moléculaires [Minh et al., 1991]. L'abondance de CO_2 serait alors de l'ordre de 6×10^{-7} dans N63, compatible avec les observations vers des régions de formation stellaire massive [Boonman et al., 2003].

Le rapport de deutération [$DOCO^+$] / [$HOCO^+$] est alors de l'ordre de 0,2, ce qui est élevé en comparaison avec les autres molécules deutérées. Seules C_3HD et CH_2DCCH atteignent des niveaux comparables avec un taux de deutération de 0,15 et 0,13, respectivement.

A.1.2 Le formaldéhyde protoné H_2COH^+

Trois raies de H_2COH^+ sont détectées : $(1_{1,0} \rightarrow 1_{0,1})$ à 168,4 GHz, $(1_{1,1} \rightarrow 0_{0,0})$ à 226,7 GHz et $(2_{1,2} \rightarrow 1_{0,1})$ à 285.1 GHz, respectivement à 3,2 σ, 1,7 σ et 1,9 σ (voir table A.2 et figure

A.2). Le diagramme de population, très incertain, propose une température de 4 K et une densité de colonne de $\sim 10^{13}$ cm^{-2}, soit une abondance de $\sim 2 \times 10^{-12}$. Le modèle ETL utilisant ces valeurs reproduit correctement les raies et ne prédit pas d'autres raies observables. Les vitesses pic sont compatibles avec la vitesse de l'enveloppe froide.

Minh et al. [1993] essayèrent de détecter H_2COH^+ dans les nuages sombres TMC-1 et L134, ainsi que vers Orion KL et Orion (3N, 1E), sans succès. Toutefois, les fréquences disponibles à l'époque n'étaient pas exactes et ont été corrigées par Chomiak et al. [1994]. Ohishi et al. [1996] ont alors pu observer le formaldéhyde protoné (6 transitions dont celle à 168.4 GHz détectée dans N63) dans des régions de formation stellaire massive, en l'occurrence SgrB2, W51 et Orion KL, et potentiellement vers DR21(OH) et NGC7538. Ce sont les seules détections publiées à ce jour. Dans Orion KL, ces auteurs obtiennent une densité de colonne de 2,3 $\times$ 10^{13} cm^{-2} et une température d'excitation de 110 K via un ajustement de ces paramètres par la méthode des moindres carrés. Ils dérivent une abondance de 8 $\times$ 10^{-11} et un rapport [H_2COH^+]/[H_2CO] entre 0,001 et 0,002. Dans N63, ce rapport est comparable et vaut 0,003. Dans Sgr B2, leur modélisation suggère la présence d'une composante froide supplémentaire, avec une température de quelques K. La densité de colonne et l'abondance y sont un ordre de grandeur plus élevées et le rapport [H_2COH^+]/[H_2CO] vaut 0,14.

La principale voie de formation est supposée être le transfert de proton sur H_3^+, HCO^+, H_3O^+ et H_2CO. Toutefois, Ohishi et al. [1996] ont proposé que la voie $CH_3OH + H_3^+ \rightarrow CH_3OH_2^+ + H_2 \rightarrow H_2COH^+ + 2\,H_2$ puisse être aussi importante du fait de la forte abondance de méthanol dans les régions de formation stellaire massive. Le méthanol est toutefois un à deux ordres de grandeur moins abondant dans N63 par rapport aux sources considérées.

TABLE A.2 – Propriétés des raies de H_2COH^+.

Transition	Freq. (MHz)	E_{up} (K)	T_{peak} (mK)	rms (mK)	V_{peak} (km s^{-1})	FWHM (km s^{-1})	$\int T_{mb} dV$ (K km s^{-1})
$1_{1,0}$ - $1_{0,1}$	168401.14	11.1	19.4 $\pm$ 0.3	6.1	-4.8 $\pm$ 0.2	2.3 $\pm$ 0.4	0.0489
$1_{1,1}$ - $0_{0,0}$	226746.31	10.9	19.3 $\pm$ 0.4	11.1	-4.3 $\pm$ 0.3	3.9 $\pm$ 0.8	0.0792
$2_{1,2}$ - $1_{0,1}$	285087.85	16.7	28.1 $\pm$ 0.6	14.7	-4.2 $\pm$ 0.3	2.1 $\pm$ 0.7	0.0569

A.1.3 Le cyanide d'hydrogène protoné $HCNH^+$

Les trois transitions observables dans la bande, J = 2 $\rightarrow$ 1 à 148,2 GHz, J = 3 $\rightarrow$ 2 à 222,3 GHz et J = 4 $\rightarrow$ 3 à 296,4 GHz, sont potentiellement détectées à 2,4, 3,6 et 1,8 σ respectivement (voir table A.3 et figure A.2). Le diagramme de population, très incertain une fois encore, indique une température de 10 K et une densité de colonne de l'ordre de $\sim 9 \times 10^{13}$ cm^{-2}. La modélisation ETL appliquée à ces deux raies et à la transition 4 $\rightarrow$ 3 non détectée, permet d'affiner légèrement les résultats avec une température de 7 K et une densité de colonne de $1{,}4 \times 10^{14}$ cm^{-2}, soit une abondance de $\sim 3{,}1 \times 10^{-11}$. Le profil de la transition 2 $\rightarrow$ 1 est tout à fait compatible avec une structure hyperfine, comme l'a montré Schilke [1992].

TABLE A.3 – Propriétés des raies de $HCNH^+$.

Transition	Freq. (MHz)	E_{up} (K)	T_{peak} (mK)	rms (mK)	V_{peak} (km s^{-1})	FWHM (km s^{-1})	$\int T_{mb} dV$ (K km s^{-1})
2 - 1	148221.42	10.7	17 ± 3	7.2	-5.0 ± 0.2	2.2 ± 0.1	0.0724
3 - 2	222329.40	21.3	31 ± 3	8.5	-4.4 ± 0.1	1.4 ± 0.5	0.0411
4 - 3	296433.68	35.6	23 ± 5	13	-3.9 ± 0.4	2.1 ± 0.3	0.0732

$HCNH^+$ est formé par plusieurs transferts de protons sur HCN grâce aux réactions suivantes [Daniel et al., 2012] :

$$HCO^+ + HCN \rightarrow HCNH^+ + CO \tag{A.2}$$

$$C_2H_3^+ + HCN \rightarrow HCNH^+ + C_2H_2 \tag{A.3}$$

$$H_3^+ + HCN \rightarrow HCNH^+ + H_2 \tag{A.4}$$

Ce processus est dirigé par l'ionisation de H_2 par les rayons cosmiques. HNC, un isomère métastable de HCN, est alors principalement formé par les réactions :

$$HCNH^+ + NH3 \rightarrow HNC/HCN + NH_4^+ \tag{A.5}$$

et

$$HCNH^+ + e^- \rightarrow HNC/HCN + H \tag{A.6}$$

Le rapport de branchement entre HCN et HNC dans cette dernière réaction est environ de 1 [Ishii et al., 2006]. Cette voie de formation permet d'expliquer l'observation de HNC. HNC étant en effet moins stable que HCN par 0,62 eV, on ne devrait quasiment pas l'observer dans des objets froids à l'équilibre. En réalité, [HNC]/[HCN] est élevé dans les nuages sombres. Il vaut par exemple 4.4 dans L134 [Wootten et al., 1978]. A l'inverse, il est faible dans le hot core OMC-1, de 10^{-2} à 1. Dans N63, [HNC]/[HCN] = 0,15.

De l'observation des transitions hautement excitées de HNC dans une enveloppe d'étoile, Daniel et al. [2012] ont conclu que HNC ne se forme probablement pas près de l'étoile mais dans les couches intermédiaires et externes où l'ionisation par les rayons cosmiques permet de former $HCNH^+$. Dans N63, l'observation au PdBI de la raie HNC J = 1 $\rightarrow$ 0 montre que l'émission est largement plus étendue que l'enveloppe ($\sim 10''$) avec un maximum sur l'objet.

D'autre part, les raies de HCN sont plus larges que celles de HNC, en moyenne 8,7 km s^{-1} contre 3,3 km s^{-1} respectivement. Les raies de HNC sont quasi gaussiennes tandis que celles de HCN présentent une composante large, suggérant que la production de HCN est reliée à l'activité des flots.

La production de HNC passe essentiellement par la recombinaison dissociative de $HCNH^+$[Loison et al., 2014]

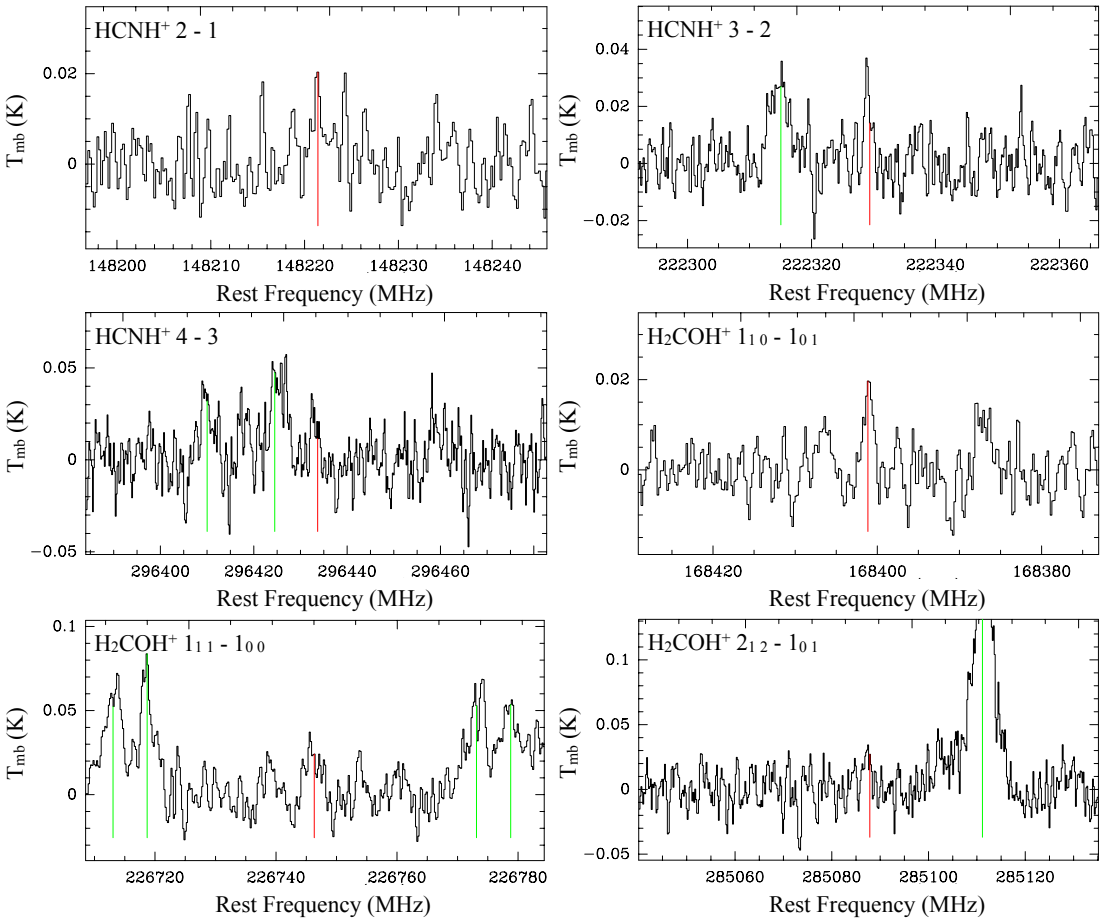


FIGURE A.2 – Spectres des raies de $HCNH^+$ et H_2COH^+.

TABLE A.4 – Propriétés des raies du propanal et de propynal.

Espèce	Transition	Freq. (MHz)	E_{up} (K)	T_{peak} (mK)	rms (mK)	V_{peak} (km s^{-1})	FWHM (km s^{-1})	$\int T_{mb} dV$ (K km s^{-1})
s-Propanal	$3_{3,1}$ - $2_{2,0}$	88548.39	8.0	6.0 ± 1.5	2.2	-5.2 ± 0.4	1.9 ± 0.9	0.0124
	$3_{3,0}$ - $2_{2,1}$	88663.98	8.0	3.2 ± 1.4	2.5	-4.6 ± 0.8	-	0.0364
	$4_{3,2}$ - $3_{2,1}$	98810.19	10.0	8.6 ± 2.3	2.6	-5.5 ± 0.2	1.0 ± 0.4	0.0094
	$4_{3,1}$ - $3_{2,2}$	99394.46	10.0	7.1 ± 0.1	3.0	-3.1 ± 1.1	-	0.0941
Propynal	$10_{0,10}$ - $9_{0,9}$	93043.28	24.6	8.6 ± 2	3.0	-4.8 ± 0.3	1.5 ± 0.8	0.0139

A.2 Les COMs

A.2.1 Le propanal et le propynal

Quatre raies de s-Propanal CH_3CH_2CHO sur 5, d'énergie inférieure à 10 K et avec un coefficient A_{ij} supérieur à 10^{-6}, sont détectées (voir figure A.3) à des niveaux allant de 1,3 à 3,3 σ. La transition $5_{3,1}$ - $2_{2,0}$ n'est pas détectable car elle est contaminée par une raie forte de méthanol. La table A.4 présente les caractéristiques des transitions.

Les raies sont trop faibles pour construire un diagramme de population fiable. Je choisis une température d'excitation égale à celle de la composante tiède des COMs, c'est-à-dire 25 K, pour modéliser les raies. Le modèle ETL propose une densité de colonne de 1×10^{15} cm^{-2}, correspondant à une abondance de $7{,}8 \times 10^{-11}$. Cette valeur est comparable aux abondances des autres COMs azotés CH_3CN et C_2H_5CN, mais un ordre de grandeur plus faible que les abondances des COMs oxygénés.

Requena-Torres et al. [2008] ont trouvé des abondances de l'ordre de 10^{-9} dans le CMZ (*central molecular zone*). Cette observation est cohérente avec les abondances de l'ensemble des COMs, un à deux ordres de grandeur plus élevées dans le CMZ que dans N63.

Jusqu'à maintenant, le propanal a été détecté seulement dans le CMZ et vers SgrB2(N) [Hollis et al., 2004]. Ces auteurs rapportent également la détection du propynal HC_2CHO, qui pourrait être à l'origine du propanal par addition d'hydrogène. J'ai recherché les raies du propynal vers N63 et la transition de plus forte probabilité ($10_{0,10}$ - $9_{0,9}$) à 93043.28 MHz pourrait en effet être très faiblement détectée à 2,9 σ. La modélisation ETL, avec une taille de 1,5″ et T_{ex} = 25 K, pour l'ensemble des raies d'énergie inférieure à 25 K, propose une densité de colonne maximale de l'ordre de $\sim 3 \times 10^{14}$ cm^{-2}, soit une abondance inférieure à $2{,}3 \times 10^{-11}$.

A.2.2 Le méthanethiol CH_3SH

Le méthanethiol (*methyl mercaptan*) a été détecté pour la première fois dans Sgr B2 par [Linke et al., 1979], vers le hot core G327.3-0.6 par [Gibb et al., 2000] et plus récemment par Cernicharo et al. [2012] et Kolesniková et al. [2014] dans Orion KL.

CH_3SH ne fait pas partie des catalogues JPL et CDMS inclus dans CASSIS. J'ai donc utilisé le catalogue SLAIM pour essayer de détecter cette molécule. 6 raies pourraient être détectées,

FIGURE A.3 – Spectres des détections potentielles des raies de propanal et de propynal.

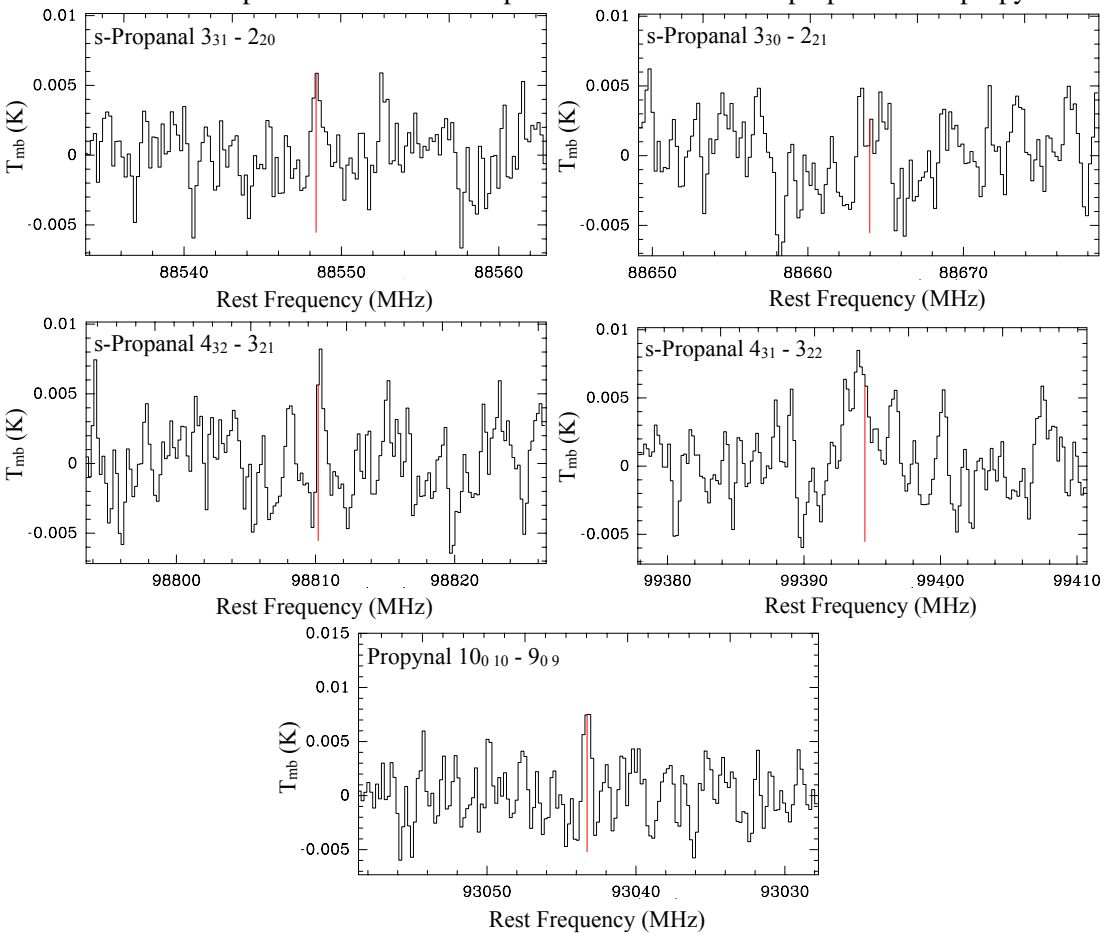


TABLE A.5 – Propriétés des raies de CH_3SH.

Transition	Freq. (MHz)	E_{up} (K)	T_{peak} (mK)	rms (mK)	V_{peak} (km s^{-1})	FWHM (km s^{-1})	$\int T_{mb} dV$ (K km s^{-1})
4_{0+} - 3_{0+} A	101139.256 ± 0.0774	12.1	13.5 ± 1.5	3.5	-	5.4 ± 0.6	0.0781
4_{1-} - 3_{1-} A	102202.147 ± 0.0726	17.3	8.6 ± 1.4	2.4	-	2.7 ± 0.5	0.0249
5_{1-} - 5_{0+} A	109719.584 ± 0.2005	23.5	3.5 ± 1.2	2.5	-	6.4 ± 1.5	0.0235
6_0 - 5_0 E	151664.479 ± 0.1979	28.6	7.0 ± 2.0	3.6	-	2.3 ± 1.0	0.0173
2_{1+} - 1_{0+} A	155533.316 ± 0.1118	8.7	11.2 ± 1.4	3.7	-	3.7 ± 0.5	0.0435
4_{1+} - 3_{0+} A	204288.989 ± 0.1149	17.1	57.8 ± 2.8	15.6	-	8.4 ± 0.4	0.5145

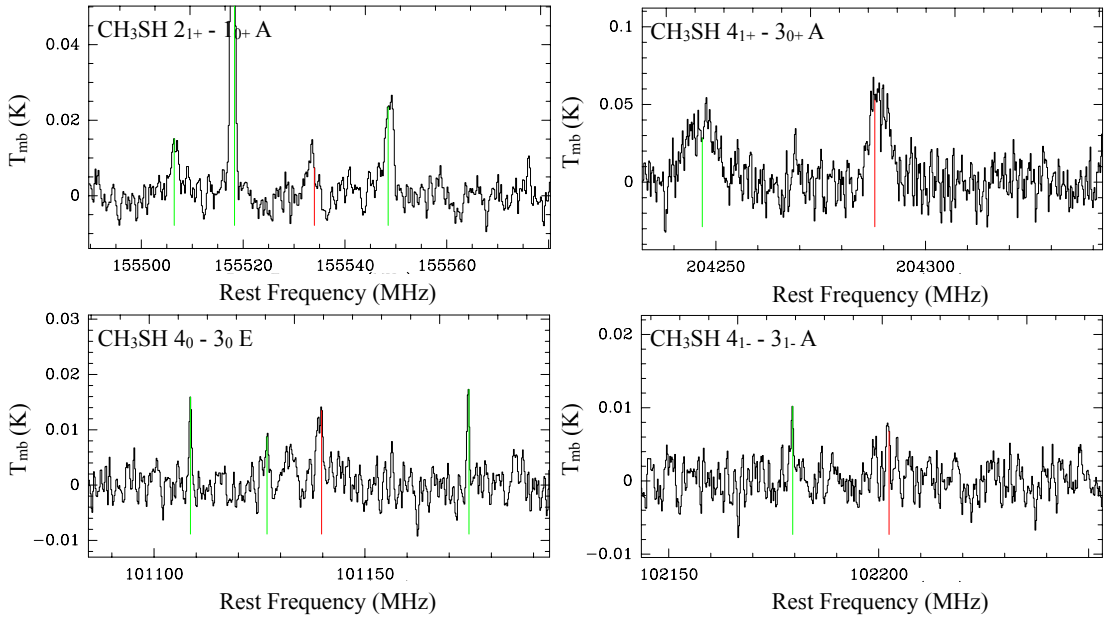


FIGURE A.4 – Spectres des raies de CH_3SH. Spectre 1 : les autres raies notées par un trait vert sont $S^{34}O$, p-c-C_3H_2 et CH_3OH. Spectre 2 : SO_2. Spectre 3 : Raie fantôme, CH_3OH, HC_5N. Spectre 4 : CH_3OCHO.

de 1,4 à 3,8 σ (voir table A.5). 4 d'entre elles sont présentées en figure A.4.

A.2.3 Le méthanol deutéré CH_3OD

Le méthanol deutéré CH_2DOH étant abondant, j'ai recherché parmi les raies qui étaient restées non identifiées d'autres formes de méthanol deutéré. CHD_2OH et CD_3OH ne sont a priori pas détectés. Les coefficients d'Einstein n'étant pas disponibles dans les bases de données, je n'ai pas pu modéliser pour obtenir de limite supérieure pour leur densité de colonne. D'autre part, l'isomère CH_3OD est clairement détecté. Les paramètres des raies n'étant pas encore publiques, la description est donc pour le moment purement qualitative.

Les fréquences des transitions sont extraites de Caux et al. [2011] et sont également répertoriées dans le catalogue Lovas/NIST [1], sauf celle de la transition (5_{-1} - 4_{-1}) qui provient de Peng et al. [2012]. Les transitions (5_{0+} - 4_{0+}) à 226.54 GHz, ($1_{1,0}$ - $1_{0,1}E$) à 110.19 GHz, ($2_{1,1}$

1. Catalogue Lovas/NIST : http://physics.nist.gov/cgi-bin/micro/table5/start.pl

.

TABLE A.6 – Propriétés des raies de CH_3OD.

Transition	Fréquence. catalogue (MHz)	Fréquence mesurée (MHz)	E_{up} (K)	T_{peak} (mK)	rms (mK)	FWHM (km s^{-1})	$\int T_{mb} dV$ (K km s^{-1})
$2_{-1,2}$ - $1_{-1,1}E$[c]	90703.78	90703.399	...	7.0 ± 1.7	2.5	3.2 ± 0.8	0.0238
$2_{0,2}$ - $1_{0,1}A^+$[c]	90705.77	90704.947	...	8.8 ± 1.9	2.5	3.0 ± 0.7	0.0283
$2_{1,1}$ - $1_{1,1}E$[c]	90743.56	90743.757	...	6.5 ± 1.2	2.6	5.0 ± 1.0	0.0368
$2_{1,1}$ - $1_{1,0}A^-$[c]	92075.51	90743.757	...	5.7 ± 1.6	2.7	5.0 ± 0.9	0.0303
3_1 - 3_0[a]	110475.80	110475.880	15.4	10.0 ± 1.4	3.0	3.8 ± 0.7	0.0401
$4_{1,4}$ - $4_{0,4}E$[c]	110950.75	110950.894	...	18.2 ± 1.7	4.0	4.2 ± 0.6	0.0811
$6_{1,5}$ - $6_{0,6}E$[c]	113350.80	113351.851	...	12.7 ± 2.2	4.8	5.0 ± 1.0	0.0622
1_{1-} - 1_{1+}[a]	133925.40	133925.726	6.0	18.5 ± 2.2	6.0	4.76 ± 0.8	0.0939
$3_{0,3}$ - $2_{0,2}E$[c]	135958.38	135958.699	...	11.5 ± 1.7	4.2	5.3 ± 0.6	0.0646
$3_{-1,2}$ - $2_{-1,1}E$[c]	135972.50	135971.931	...	8.4 ± 1.5	3.5	4.1 ± 0.8	0.0369
$3_{0,3}$ - $2_{0,2}A^{++}$[c]	136026.40	136026.370	...	12.8 ± 1.3	4.0	5.3 ± 0.9	0.0716
3_2 - 2_2A^{--}[c]	136055.46	136055.300	...	11.2 ± 1.4	3.7	4.0 ± 1.0	0.0537
$3_{2,1}$ - $2_{2,0}E$[c]	136098.96	136098.804	...	4.2 ± 1.7	3.7	3.6 ± 1.3	0.0179
$3_{2,1}$ - $2_{2,0}A^{++}$[c]	136102.82	136102.636	...	5.6 ± 2.1	3.5	3.4 ± 0.8	0.0200
$3_{-2,2}$ - $2_{-2,1}E$[c]	136107.60	136107.335	...	9.2 ± 3.1	3.6	5.3 ± 2.3	0.0516
$3_{1,2}$ - $2_{1,1}E$[c]	136171.61	136171.973	...	13.6 ± 0.2	4.2	2.2 ± 0.6	0.0321
$4_{1,3}$ - $4_{0,4}A^-$[c]	140175.20	140175.754	...	18.4 ± 1.5	5.7	6.7 ± 0.7	0.1309
$5_{1,4}$ - $5_{0,5}A^-$[c]	143741.65	143741.866	...	18.1 ± 0.2	6.2	4.0 ± 0.6	0.0781
$6_{0,6}$ - $5_{1,5}A^+$[c]	148359.77	148358.687	...	18.0 ± 4.0	6.6	2.2 ± 0.6	0.0429
$7_{1,6}$ - $7_{0,7}A^-$[c]	153324.00	153323.967	...	20.1 ± 1.1	4.2	5.2 ± 0.3	0.0429
$1_{1,0}$ - $0_{0,0}E$[c]	155533.08	155533.368	...	11.2 ± 0.2	3.8	3.6 ± 0.5	0.0430
$6_{0,6}$ - $5_{1,5}E$[c]	159571.09	159570.543	...	9.8 ± 1.5	4.8	6.1 ± 0.7	0.0639
$5_{1,5}$ - $4_{1,4}A^{++}$[c]	223308.57	223308.265	...	30.1 ± 3.3	9.4	3.2 ± 0.4	0.1009
5_{-1} - 4_{-1}[b]	226185.93	226186.552	37.3	39.4 ± 4.8	13.1	3.5 ± 0.4	0.1456
$5_{2,4}$ - $4_{2,3}A^-$[c]	226706.60	226705.963	...	30.6 ± 3.6	8.7	3.9 ± 0.4	0.1292
$5_{-4,2}$ - $4_{-4,1}E$[c]	226738.86	226738.825	...	17.8 ± 4.6	8.7	2.1 ± 0.5	0.0393
$5_{-2,4}$ - $4_{-2,3}E$[c]	226922.58	226921.910	...	35.7 ± 5.2	11.5	1.3 ± 0.4	0.0507
$5_{3,3}$ - $4_{3,2}A^+$[c]	226942.83	226943.426	...	36.5 ± 4.5	12.6	3.1 ± 0.3	0.1214
$8_{0,8}$ - $7_{1,7}A^{++}$[c]	246522.43	246522.161	...	32.5 ± 3.2	15.9	10.1 ± 0.8	0.3495

[a] [Caux et al., 2011] [b] [Peng et al., 2012] [c] Lovas/NIST

- $2_{0,2}E$) à 110.26 GHz, ($8_{1,7}$ - $8_{0,8}E$) à 159.4 GHz et ($5_{0,5}$ - $4_{0,4}A$) à 226.5 GHz sont mélangées respectivement avec des raies de CH_2DOH, potentiellement CH_3COCH_3, CH_3OCHO et les deux dernières à des raies de CH_2DOH. Hormis ces transitions contaminées, toutes les transitions référencées par le catalogue NIST sont détectées, à des niveaux variant entre 1,2 et 4,8 σ. La table A.6 présente les propriétés de ces raies et la figure A.5 donne quelques exemple de spectres.

A.3 Les molécules prébiotiques

Les molécules prébiotiques, par exemple les acides aminés, sont celles qui ont rendu possible l'apparition de la vie sur Terre. Dans les années 50, Stanley Miller a reconstitué expérimentalement l'atmosphère primitive de la Terre, telle qu'il l'imaginait, constituée de CH_4, NH_3 et H_2. En présence d'eau liquide et sous l'action de décharges électriques simulant les orages,

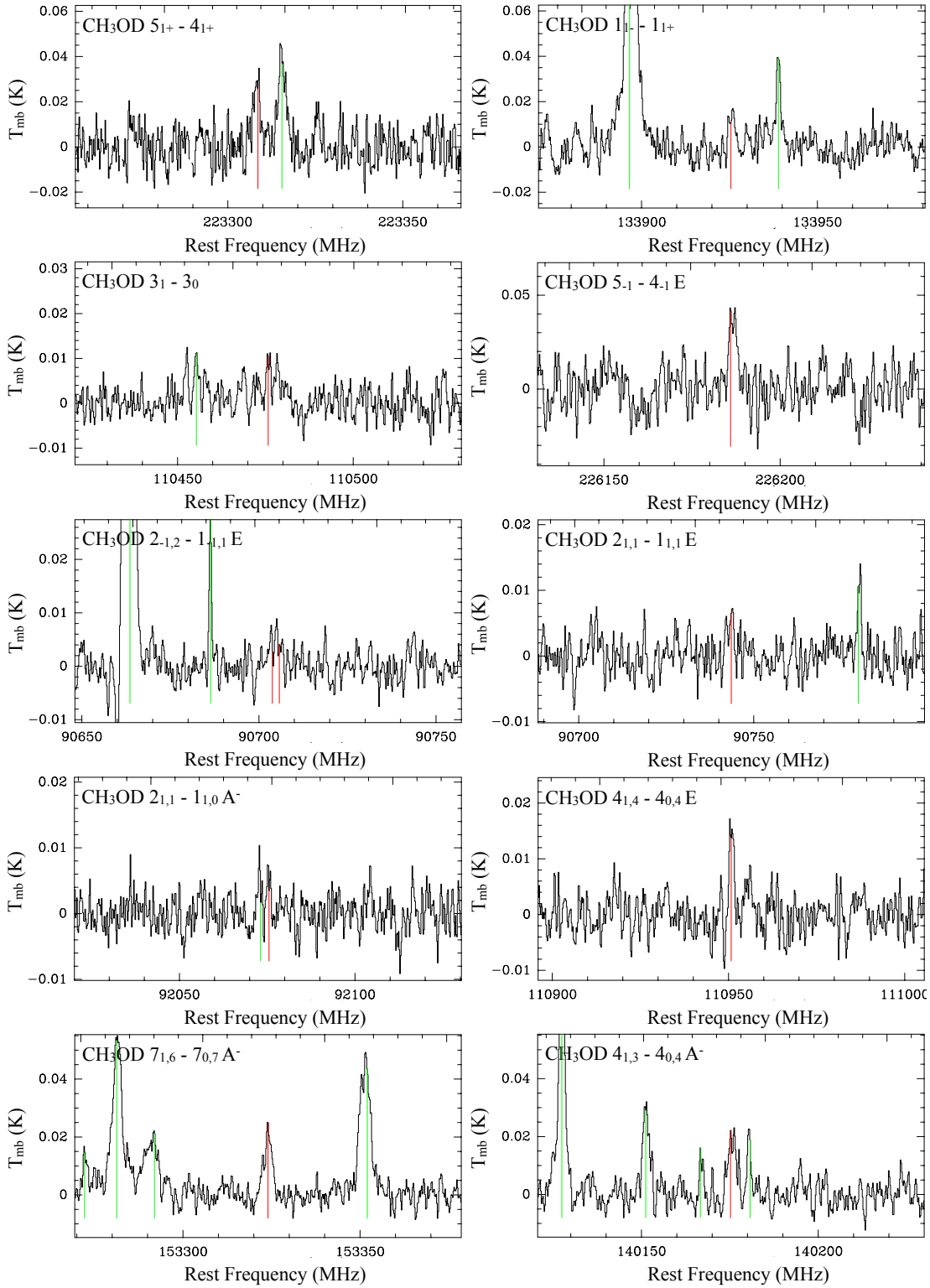


FIGURE A.5 – Exemples de spectres des raies de CH_3OD. L'emplacement des raies est noté par un trait rouge tandis que les traits verts indiquent la position des autres raies présentes dans la fenêtre, en l'occurrence pour le spectre 1 : CH_2DOH, spectre 2 : raies fantômes, spectre 3 : CH_3OCHO, spectre 5 : CCS et HNC, spectre 6 : CH_2DOH, spectre 7 : potentiellement CH_3OCHO, mais incertain et spectre 9 : C_2H_5CN, CH_3OH, HNCO, CH_3OCHO.

des acides aminés peuvent se former. Toutefois, la composition de l'atmosphère primitive reste discutée. Les autres pistes aujourd'hui explorées pour expliquer l'apparition de la vie sont sa formation près des fumeurs noirs au fond des océans et l'apport par les comètes et/ou les météorites des molécules prébiotiques. Cette dernière hypothèse est la plus probable aujourd'hui car des acides aminés ont effectivement été identifiés sur des comètes et des météorites. Nous ne sommes pas sûrs que la présence de ces molécules complexes suffit à conduire à l'apparition de la vie, mais il demeure très intéressant de se demander quelle est la complexité chimique maximale atteinte dans le milieu interstellaire. En particulier, les environnements préstellaires et protostellaires pourraient réunir les conditions idéales pour former ces molécules complexes.

A.3.1 Le méthanimine CH_2NH

Le méthanimine, notée CH_2NH ou H_2CNH, a d'abord été identifiée dans Sgr B2 par Godfrey et al. [1973], puis dans d'autres hot cores comme Orion KL [Dickens et al., 1997], dans le nuage moléculaire L183 [Turner et al., 1999] et peut-être même dans l'atmosphère de Titan [Vuitton et al., 2007]. Un des intérêts de CH_2NH, avec également le méthylamine CH_3NH_2, est d'être l'un des précurseurs potentiels d'un des acides aminés, la glycine NH_2CH_2COOH [Godfrey et al., 1973], qui n'a pas encore été identifiée de façon certaine dans le milieu interstellaire [Snyder et al., 2005]. Theule et al. [2011] ont proposé qu'une série d'hydrogénation à la surface des grains pourrait produire CH_2NH mais aussi CH_3NH_2, le méthylamine :

$$\mathrm{HCN} \rightarrow^{\mathrm{H}} \mathrm{CH_2N} \rightarrow^{\mathrm{H}} \mathrm{CH_2NH} \rightarrow^{\mathrm{H}} \mathrm{CH_2NH_2} \rightarrow^{\mathrm{H}} \mathrm{CH_3NH_2} \tag{A.7}$$

CH_2N et CH_2NH_2 sont des radicaux et vivent donc peu de temps. CH_2NH et CH_3NH_2 sont par contre des molécules stables.

8 raies non contaminées de CH_2NH sont détectées vers N63 (voir figure A.6), à des niveaux variant de 2,1 à 3,8 σ. Pour chaque raie, le catalogue JPL indique un groupe de transitions de nombres quantiques J, K et L identiques mais de M différents, tandis que le catalogue CDMS ne considère pas cet effet. Les propriétés des raies sont décrites dans la table A.8, utilisant le CDMS.

Le diagramme de population (voir figure A.8), tracé avec une taille d'émission de 4,3″, indique une température de 21 ± 5 K et une densité de colonne de $2{,}7 \pm 0{,}8 \times 10^{13}$ cm^{-2}, plus faible que celle dérivée par Halfen et al. [2013] dans Sgr B2 ($9{,}1 \pm 4{,}4 \times 10^{14}$ cm^{-2}). La modélisation ETL utilisant ces valeurs confirme que les transitions ($4_{0,4} \rightarrow 3_{1,3}$) à 105.8 GHz et ($2_{1,1} \rightarrow 1_{1,0}$) à 133.3 GHz sont contaminées. L'utilisation du catalogue JPL avec les mêmes valeurs donne des résultats similaires. L'abondance de CH_2NH est alors $5{,}7 \times 10^{-12}$.

Si le processus A.7 est bien à l'oeuvre, je devrais observer également le méthylamine CH_3NH_2. Or, cette dernière molécule n'est pas clairement détectée dans N63. Seules deux raies très faibles pourraient être présentes. Une troisième raie potentiellement plus forte, la transition ($3_{-1,3} \rightarrow 2_{0,2}$) à 215,1 GHz est contaminée par une raie de C_2H_5CN. En reprenant la tempé-

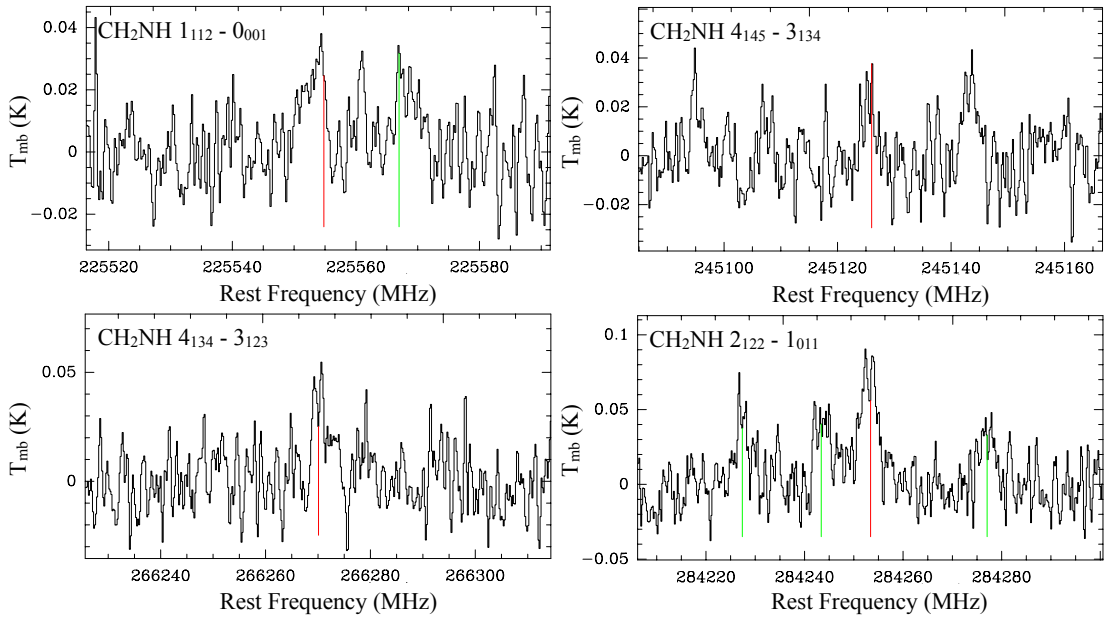


FIGURE A.6 – Raie de CH_2NH à 225.55 GHz, accompagnée d'une raie de $^{13}CH_3OH$ (haut, gauche). CH_2NH à 245.13 GHz (haut, droite). CH_2NH à 266.27 GHz (bas, gauche). CH_2NH à 284.25 GHz, accompagnée de 2 raies de CH_3OCHO et d'une raie de HDCS (bas, droite).

rature d'excitation de CH_2NH, le modèle ETL donne une valeur maximale pour la densité de colonne de CH_3NH_2 valant $\sim 7 \times 10^{13}$ cm^{-2}.

Halfen et al. [2013] ont observé que, dans Sgr B2, les deux molécules n'avaient ni la même distribution spatiale, ni la même température d'excitation. Ils en avaient conclu qu'il est peu probable que CH_2NH soit le précurseur de CH_3NH_2. D'autres voies de formation, en phase gazeuse cette fois, sont possibles : la réaction ion-molécule $CH_3^+ + NH_2 \rightarrow CH_4N^+ + H$, suivie d'une recombinaison dissociative, ou bien la réaction neutre-neutre $CH_3 + NH_2 \rightarrow CH_2NH + H_2$. Le méthylamine pourrait être formé par une réaction similaire : $CH_3 + NH_3 \rightarrow CH_3NH_2 + H$ [Turner et al., 1999]. Les deux molécules ne seraient donc effectivement pas directement reliées chimiquement. Nos observations confirment cette vision. D'autre part, la vitesse moyenne des raies est -4,5 km s^{-1}, c'est-à-dire celle des molécules de l'enveloppe. C'est un autre argument en faveur de la formation en phase gazeuse. Toutefois, la largeur des raies est comparable à celle des COMs (FWHM = 4 km s^{-1}).

A.3.2 Le formamide NH_2CHO

Le formamide est l'amide le plus simple et a été récemment proposé comme étant une espèce centrale dans la synthèse des molécules métaboliques et génétiques [Saladino et al., 2012]. Dans le milieu interstellaire, le formamide est une molécule plutôt abondante, typique des hot cores. Elle a été identifiée pour la première fois dans Sgr B2 par Rubin et al. [1971], puis dans Orion KL [Turner, 1989]. Par la suite, elle a été observée dans plusieurs hot cores [Bisschop et al., 2007], dans des hot corinos [López-Sepulcre et al., 2015], dans l'enveloppe

TABLE A.7 – Propriétés des raies non mélangées détectées de CH_2NH, d'après le catalogue CDMS.

Transition	Freq. (MHz)	E_{up} (K)	A_{ij} s^{-1}	T_{peak} (mK)	rms (mK)	V_{peak} (km s^{-1})	FWHM (km s^{-1})	$\int T_{mb} dV$ (K km s^{-1})
$1_{1,0}$ - $1_{0,1}$	166851.760	11.1	5.65(-5)	20.7 ± 1.6	5.7	-5.1 ± 0.2	4.2 ± 0.6	0.0996
$2_{1,1}$ - $2_{0,2}$	172267.054	17.5	6.12(-5)	30.0 ± 2.1	7.9	-5.0 ± 0.1	3.8 ± 0.3	0.1215
$1_{1,1}$ - $0_{0,0}$	225554.609	10.8	9.31(-5)	37.0 ± 4.6	13.1	-4.1 ± 0.2	3.2 ± 0.6	0.1868
$4_{1,4}$ - $3_{1,3}$	245125.866	37.3	1.28(-4)	26.1 ± 3.7	12.5	-4.4 ± 0.2	3.2 ± 0.6	0.0890
$4_{0,4}$ - $3_{0,3}$	254685.137	30.6	1.53(-4)	80.3 ± 4.7	21.8	-4.9 ± 0.1	5.1 ± 0.3	0.4323
$4_{1,3}$ - $3_{1,2}$	266270.024	39.8	1.64(-4)	37.2 ± 4.5	14.5	-5.3 ± 0.2	5.2 ± 0.4	0.2042
$2_{1,2}$ - $1_{0,1}$	284253.959	16.7	1.68(-4)	83.4 ± 5.1	22.9	-4.0 ± 0.1	4.4 ± 0.3	0.3956
$3_{1,3}$ - $2_{0,2}$	340353.934	25.5	2.76(-4)	76.1 ± 13.2	36.9	-3.7 ± 0.1	3.7 ± 0.3	0.3020

froide du hot corino IRAS16293 [Kahane et al., 2013], dans des régions de chocs de flots L1157 [Yamaguchi et al., 2012] et dans des comètes [Biver et al., 2014]. Ces observations renforcent l'hypothèse de la formation des molécules prébiotiques dans les environnements préstellaires, puis de leur transport sur Terre par les comètes [Caselli and Ceccarelli, 2012].

Une première voie de formation aujourd'hui considérée pour le formamide est la formation à la surface des grains par hydrogénation de HNCO. López-Sepulcre et al. [2015] ont recherché HNCO et NH_2CHO dans dix objets préstellaires et protostellaires du programme de l'IRAM ASAI (*Astrochemical Surveys At IRAM*). HNCO est détecté dans toutes les sources tandis que NH_2CHO est absent des sources les plus froides, suggérant que HNCO pourrait être formé durant les phases froides alors que NH_2CHO serait libéré des glaces lorsque la température est suffisante. D'autre part, NH_2CHO pourrait se former en phase gazeuse par la réaction NH_2 + $H_2CO \rightarrow NH_2CHO$ + H. Cette dernière réaction a été récemment réétudiée par Barone et al. [2015] et suffirait à elle seule à expliquer les observations, à la fois dans les sources froides et chaudes observées par López-Sepulcre et al. [2015].

25 transitions non contaminées du formamide, noté NH_2CHO ou $HC(O)NH_2$, dont 11 à un niveau supérieur à 3 σ sont détectées vers N63. Le diagramme de population, avec une taille d'émission de 4,3″, incluant seulement les raies détectées à plus de 2 σ indique une température de 21,8 ± 2,5 K et une densité de colonne de 2,4 ± 0,6 × 10^{13} cm^{-2}. La vitesse moyenne des raies est -5,5 km s^{-1} et la largeur moyenne des raies 4,5 km s^{-1}, suggérant une origine de la région centrale chaude ou intermédiaire. La température d'excitation et la densité de colonne peuvent donc être estimées plus précisément avec une taille d'émission de 1,5″ correspondant à la région tiède, respectivement 21,8 ± 2,5 K et 2,4 ± 0,6 × 10^{13} cm^{-2}. Contrairement à CH_2NH, cela pointe vers une voie de formation sur les grains. De plus, la vitesse moyenne des raies de HNCO est de -4,8 km s^{-1}, proche de celle des molécules de l'enveloppe froide, ce qui est cohérent avec une formation dans le gaz froid, comme proposé par López-Sepulcre et al. [2015].

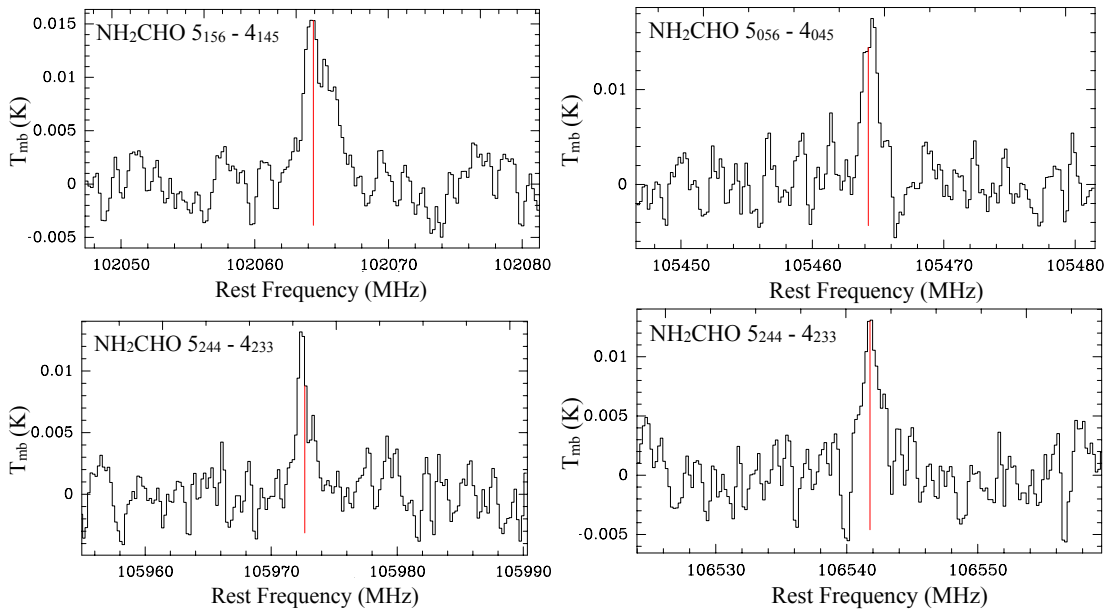


FIGURE A.7 – Exemples de transitions de NH_2CHO détectées.

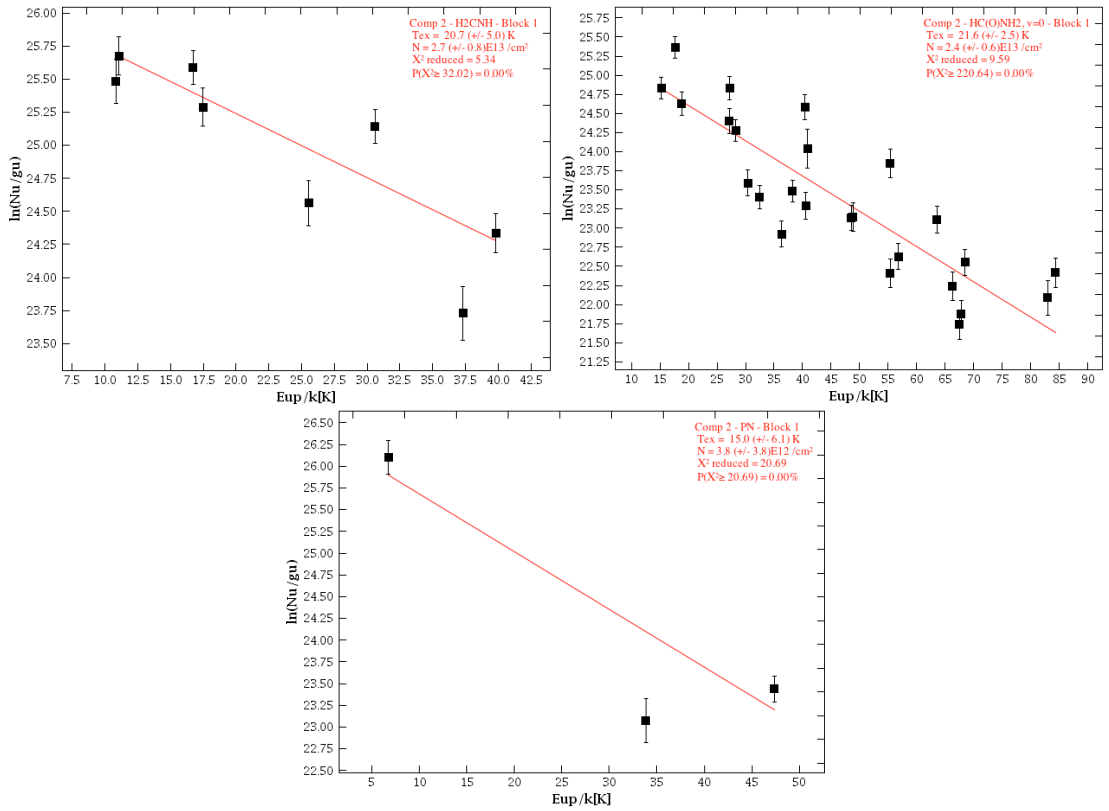


FIGURE A.8 – Diagramme de population de CH_2NH (haut gauche), de NH_2CHO (haut droite) et de PN (bas), utilisant les transitions détectées à plus de 2 σ et avec une taille d'émission de 4.3″.

TABLE A.8 – Propriétés des raies non mélangées détectées de NH_2CHO, d'après le catalogue CDMS. Certaines raies sont détectées mais leurs propriétés ne sont pas fiables pour les raisons suivantes : la transition à 171,6 GHz possède une structure hyperfine, celle à 142,7 GHz est partiellement mélangée et celle à 175,2 GHz est trop faible.

Transition	Freq. (MHz)	E_{up} (K)	A_{ij} s^{-1}	T_{peak} (mK)	rms (mK)	V_{peak} (km s^{-1})	FWHM (km s^{-1})	$\int T_{mb}dV$ (K km s^{-1})
$5_{1,5}$ - $4_{1,4}$	102064.267	17.7	7.06(-5)	13.5 ± 0.8	3.7	-6.3 ± 0.2	8.1 ± 0.5	0.1166
$5_{0,5}$ - $4_{0,4}$	105464.219	15.2	8.11(-5)	16.9 ± 1.2	3.6	-5.6 ± 0.1	4.4 ± 0.4	0.0785
$5_{2,4}$ - $4_{2,3}$	105972.599	27.2	6.92(-5)	10.7 ± 0.8	2.6	-4.8 ± 0.2	3.8 ± 0.4	0.0437
$5_{2,3}$ - $4_{2,2}$	106541.680	27.2	7.03(-5)	11.8 ± 1.0	3.3	-5.5 ± 0.2	5.4 ± 0.4	0.0682
$5_{1,4}$ - $4_{1,3}$	109753.503	18.8	8.78(-5)	15.0 ± 1.2	3.8	-5.2 ± 0.1	4.4 ± 0.3	0.0696
$7_{1,7}$ - $6_{1,6}$	142701.325	30.4	2.02(-4)	-	4.9	-	-	-
$7_{0,7}$ - $6_{0,6}$	146871.475	28.3	2.25(-4)	28.3 ± 2.2	7.7	-6.6 ± 0.2	5.5 ± 0.5	0.1660
$7_{2,6}$ - $6_{2,5}$	148223.143	40.4	2.12(-4)	8.8 ± 2.1	6.4	-6.0 ± 0.6	-	0.2124
$7_{3,4}$ - $6_{3,3}$	148709.018	55.4	1.91(-4)	13.1 ± 2.1	6.4	-6.3 ± 0.3	6.6 ± 0.8	0.0917
$7_{2,5}$ - $6_{2,4}$	149792.574	40.6	2.19(-4)	16.3 ± 1.7	5.2	-6.2 ± 0.3	3.5 ± 0.7	0.0603
$7_{1,6}$ - $6_{1,5}$	153432.176	32.5	2.51(-4)	13.1 ± 1.1	4.3	-5.8 ± 0.2	5.5 ± 0.6	0.0769
$8_{1,8}$ - $7_{1,7}$	162958.657	38.2	3.05(-4)	19.8 ± 1.9	5.8	-4.7 ± 0.2	5.4 ± 0.5	0.1142
$8_{0,8}$ - $7_{0,7}$	167320.697	36.4	3.35(-4)	11.6 ± 1.6	5.0	-4.8 ± 0.3	5.8 ± 0.7	0.0711
$8_{2,7}$ - $7_{2,6}$	169299.154	48.5	3.26(-4)	19.4 ± 2.0	6.6	-5.6 ± 0.2	4.1 ± 0.5	0.0852
$8_{4,5}$ - $7_{4,4}$	169861.469	84.3	2.63(-4)	9.7 ± 1.9	5.3	-5.0 ± 0.2	6.5 ± 0.5	0.0671
$8_{3,6}$ - $7_{3,5}$	169955.835	63.5	3.02(-4)	9.3 ± 1.9	4.8	-4.5 ± 0.3	7.8 ± 0.8	0.0773
$8_{2,6}$ - $7_{2,5}$	171620.760	48.8	3.39(-4)	-	5.7	-	-	-
$8_{1,7}$ - $7_{1,6}$	175185.412	40.9	3.79(-4)	-	24.8	-	-	-
$10_{1,10}$ - $9_{1,9}$	203335.761	56.8	6.03(-4)	38.9 ± 4.1	12.3	-5.4 ± 0.2	2.8 ± 0.4	0.1138
$10_{0,10}$ - $9_{0,9}$	207679.189	55.3	6.47(-4)	20.4 ± 3.9	9.7	-5.6 ± 0.2	4.5 ± 0.6	0.0973
$10_{2,9}$ - $9_{2,8}$	211328.960	67.8	6.56(-4)	37.8 ± 4.4	9.4	-5.0 ± 0.1	1.4 ± 0.3	0.0576
$10_{3,7}$ - $9_{3,6}$	212832.307	82.9	6.36(-4)	23.9 ± 5.4	11.4	-5.6 ± 0.3	2.7 ± 0.8	0.0693
$10_{2,8}$ - $9_{2,7}$	215687.009	68.4	6.98(-4)	25.0 ± 3.4	10.4	-6.1 ± 0.2	4.5 ± 0.6	0.1207
$11_{1,11}$ - $10_{1,10}$	223452.512	67.5	8.05(-4)	22.4 ± 3.0	8.8	-5.2 ± 0.2	2.8 ± 0.4	0.0667
$11_{0,11}$ - $10_{0,10}$	227605.658	66.3	8.55(-4)	30.5 ± 4.2	13.4	-5.6 ± 0.2	3.6 ± 0.6	0.1164

A.3.3 Le nitrure de phosphore PN

Le nitrure de phosphore n'est pas une molécule prébiotique à proprement parler mais le phosphore qu'elle contient joue un rôle central dans la biochimie. La liaison P-O en particulier est une unité fondamentale dans l'ADN, l'ARN et l'ATP. Le phosphore est important dans la réplication cellulaire et pour le métabolisme des systèmes vivants [Macia et al., 1997]. Le phosphore est relativement abondant avec P/H $\sim 3 \times 10^{-7}$ [Grevesse and Sauval, 1998], pourtant, peu de molécules phosphorées ont été détectées dans le milieu interstellaire. Le nitrure de phosphore PN a été d'abord détecté dans les régions de formation d'étoiles massives Orion KL, W51M et Sgr B2 [Turner and Bally, 1987], puis dans la région de chocs de flots L1157 B1 [Yamaguchi et al., 2011]. Dans cette dernière observation, PN étant seulement détecté dans la région de chocs et pas vers la protoétoile elle-même, les auteurs en avaient conclu que PN est formé par les chocs. PO, le monoxide de phosphore, n'a par contre pas été détecté dans Orion KL et Sgr B2 [Matthews et al., 1987], ni dans L1157 B1 [Aota and Aikawa, 2012].

Charnley and Millar [1994] ont proposé que le phosphore soit initialement sous forme de PH_3 sur les grains et que la chimie du phosphore commence par son évaporation. En réagissant avec l'hydrogène atomique, PH_3 est converti en phosphore atomique. Ces réactions possèdent des barrières d'activation et sont pour cette raison actives seulement au delà de 100 K [Aota and Aikawa, 2012]. Le phosphore réagit alors avec les ions H_3O^+ pour former PO, qui forme alors PN par la réaction :

$$\mathrm{PO} + \mathrm{N} \rightarrow \mathrm{PN} + \mathrm{O} \tag{A.8}$$

Les modèles chimiques de chocs à une dimension de Aota and Aikawa [2012] ont montré que cette voie de formation explique les abondances de PN observées dans L1157 et la non détection de PO.

Les transitions J = 2 $\rightarrow$ 1, 5 $\rightarrow$ 4 et 6 $\rightarrow$ 5 sont potentiellement détectées à 3,0 σ, 1, 3 σ et 2,2 σ, respectivement. La transition 3 $\rightarrow$ 2 est contaminée par une raie de CH_2DOH. La figure A.9 présente ces transitions et la table A.9 résume leurs propriétés. Le diagramme de population des trois raies non contaminées (voir figure A.8) suggère T_{ex} = 15 $\pm$ 6 K et N $\sim$ 3,8 $\times 10^{12}$ cm^{-2}, soit une abondance de $\sim 9 \times 10^{-13}$. La modélisation ETL avec ces valeurs et incluant CH_2DOH (avec T_{ex} = 106 K et n = 6.10^{16} cm^{-2} dans 0,5″, correspondant à la composante chaude, car E_{up} = 80 K) reproduit correctement les quatre raies (voir figure A.9). Les raies sont trop faibles pour que leurs propriétés moyennes signifient réellement quelque chose. Il est difficile d'indiquer une origine précise pour cette molécule.

PO n'est pas détecté dans N63. La modélisation ETL indique une densité de colonne maximale de 1.10^{13} cm^{-2} pour une température de 15 K, similaire aux valeurs maximales trouvées par Matthews et al. [1987] dans Orion KL et Sgr B2.

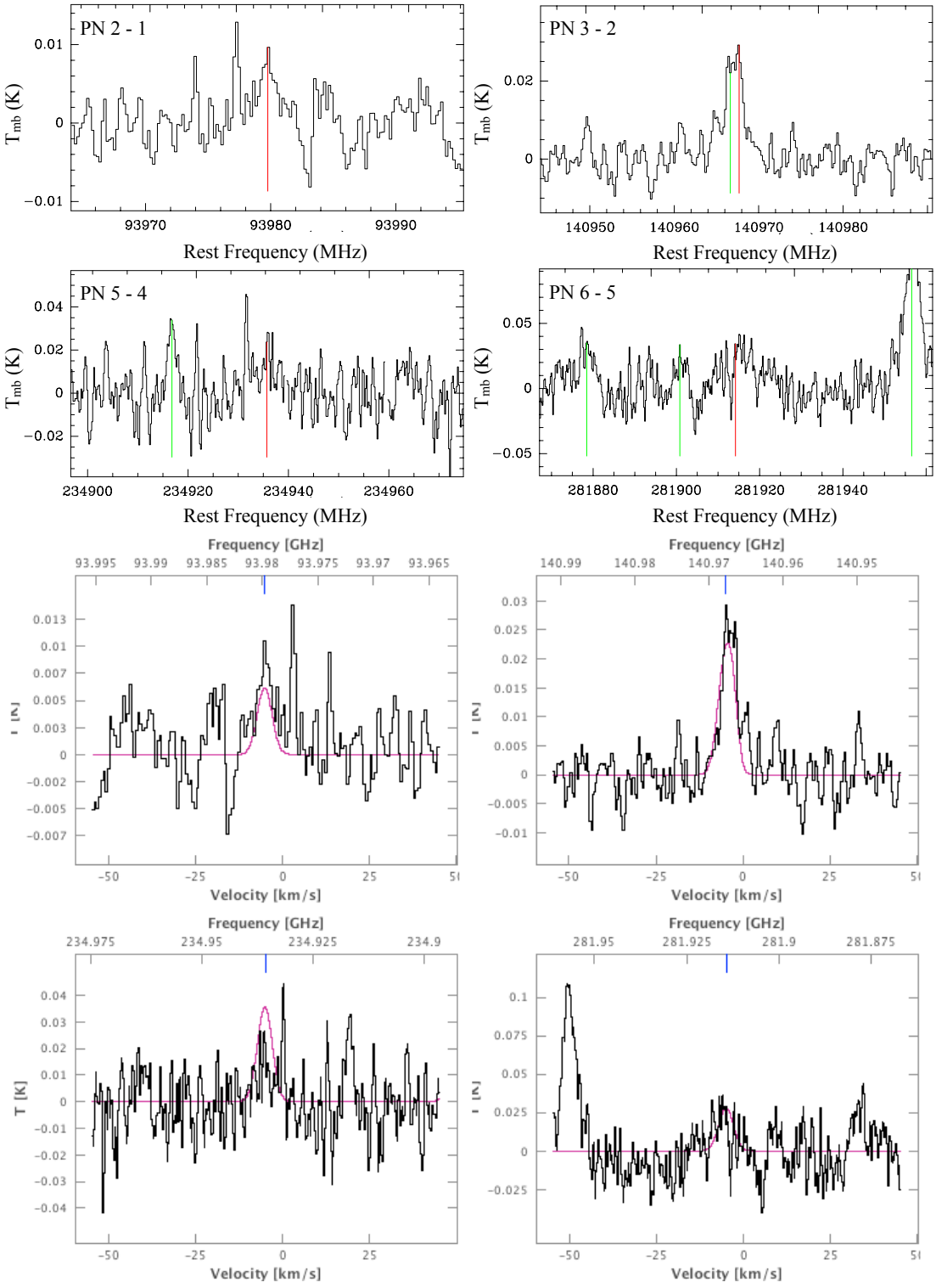


FIGURE A.9 – Haut : Spectres des raies de PN. Les lignes rouges indiquent la position des raies de PN et les lignes vertes indiquent la position des raies d'autres molécules : CH_2DOH avec PN 3 -2, CH_3OCHO ($9_{5,4,0}$ - $8_{4,5,0}$) avec PN 5-4 and CH_3OCHO ($22_{5,17,3}$ - $21_{5,16,3}$), CH_3OCHO ($23_{11,13,4}$ - $22_{11,12,4}$) et CH_3OH, vt=0,1 ($9_{-3,7,0}$ - $10_{-2,9,0}$) avec PN 6 - 5. Bas : Résultat de la modélisation de raies de PN avec T_{ex} = 15 $\pm$ 6 K et n = 2,5 $\times$ 10^{12} cm^{-2} dans 5,2″ et de la raie CH_2DOH ($8_{1,8,0}$ - $7_{0,7,1}$) avec T_{ex} = 106 K et n = 6.10^{16} cm^{-2} dans 0,5″.

TABLE A.9 – Propriétés des raies de PN.

.

Transition	Freq. (MHz)	E_{up} (K)	A_{ij} s^{-1}	T_{peak} (mK)	rms (mK)	V_{peak} (km s^{-1})	FWHM (km s^{-1})	$\int T_{mb} dV$ (K km s^{-1})
2 - 1	93979.769	6.7655	2.92(-5)	9.3 ± 1.8	3.1	-5.0 ± 0.3	4.7 ± 0.6	0.0461
3 - 2	140967.693	13.5311	1.05(-4)	-	6.2	-	-	-
5 - 4	234935.695	33.8267	5.18(-4)	14.7 ± 3.8	11.2	-5.6 ± 0.3	5.0 ± 0.7	0.0771
6 - 5	281914.205	47.3566	9.08(-4)	33.0 ± 4.5	14.6	-7.2 ± 0.2	6.2 ± 0.5	0.2169

ANNEXE B

DIAGRAMMES DE POPULATION

FIGURE B.1 – Diagrammes de population des espèces de l'enveloppe, réalisés avec une taille de source de 5,2″ et en supposant une erreur de calibration de 10%.

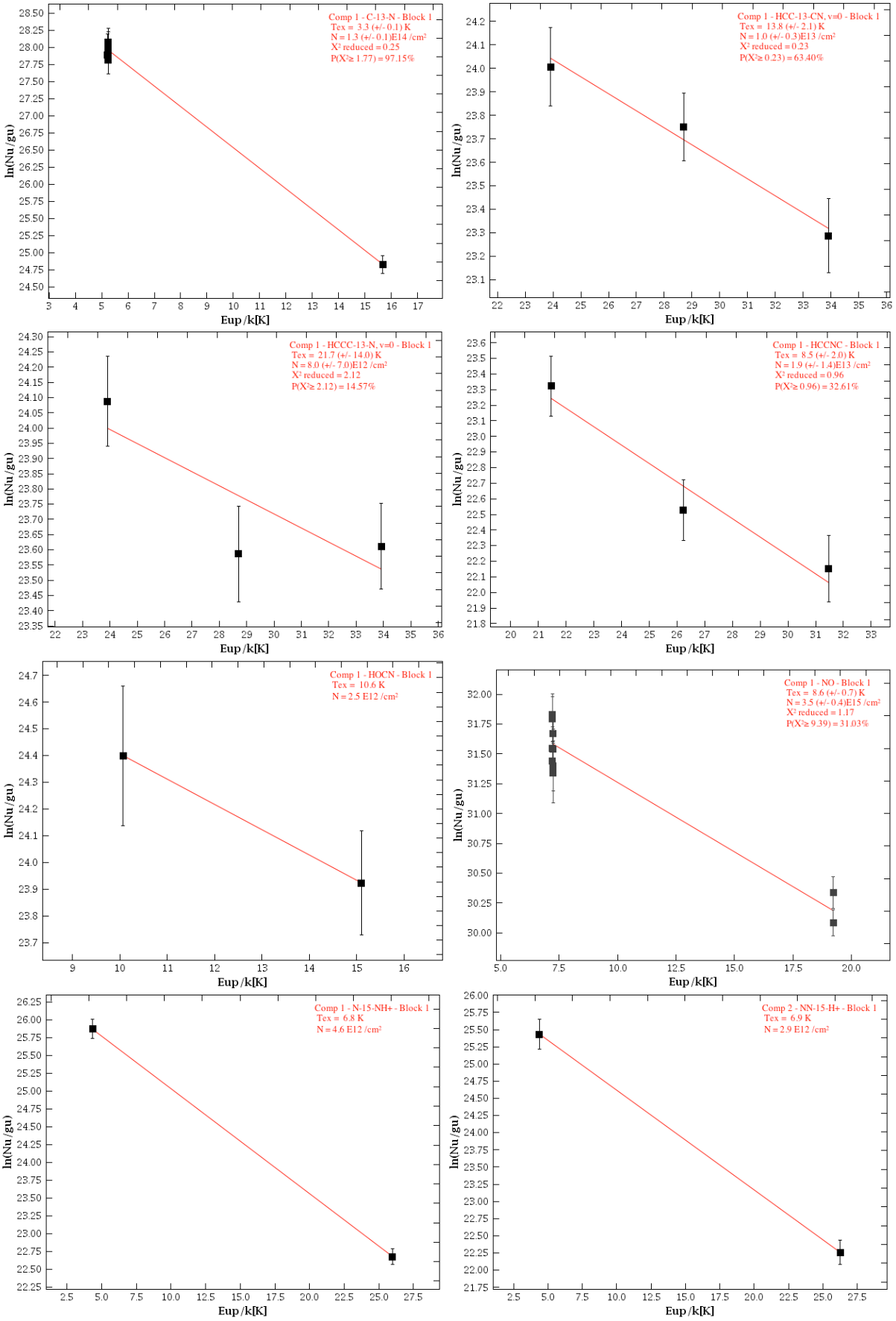


FIGURE B.2 – Suite de la figure B.1.

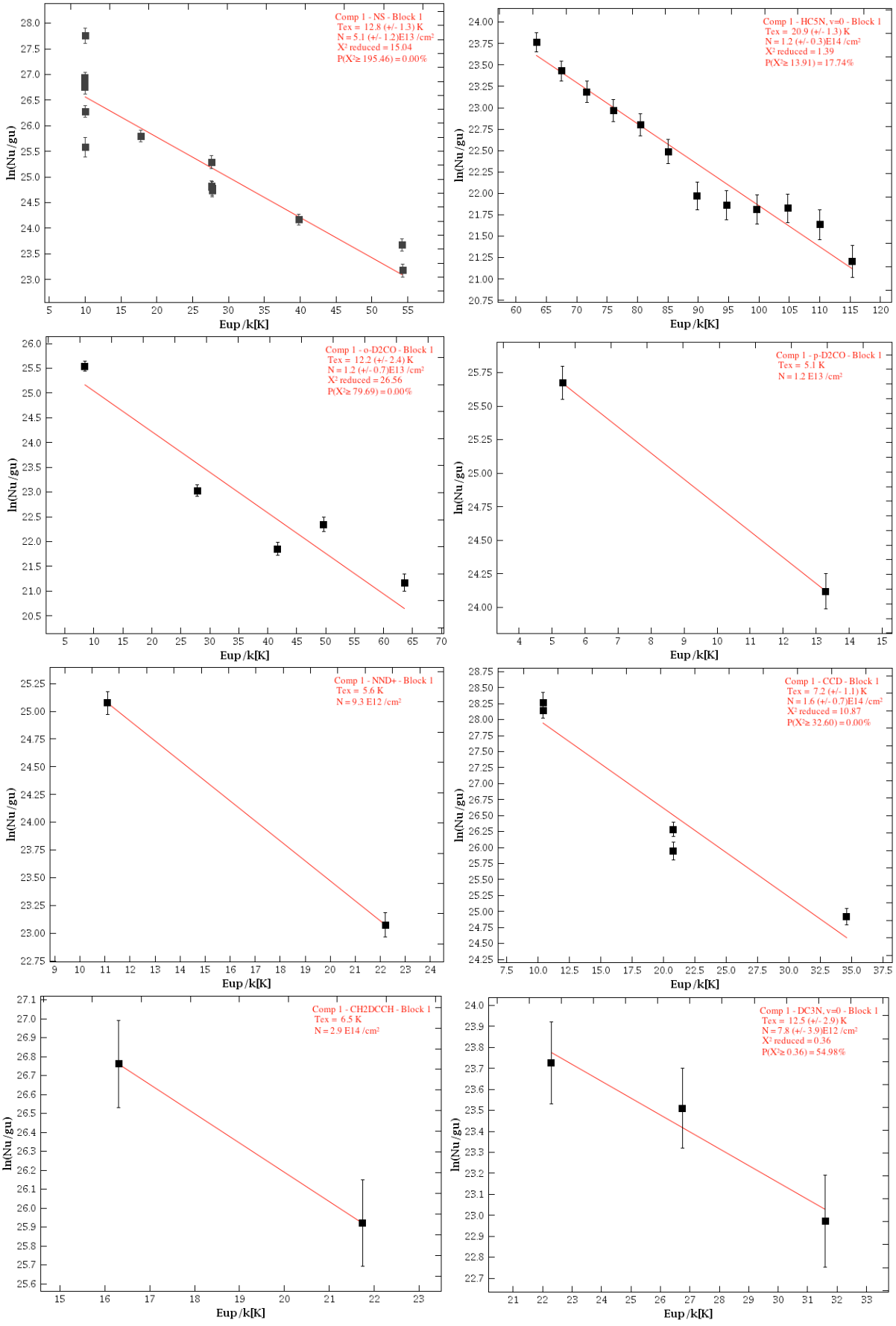


FIGURE B.3 – Suite de la figure B.1.

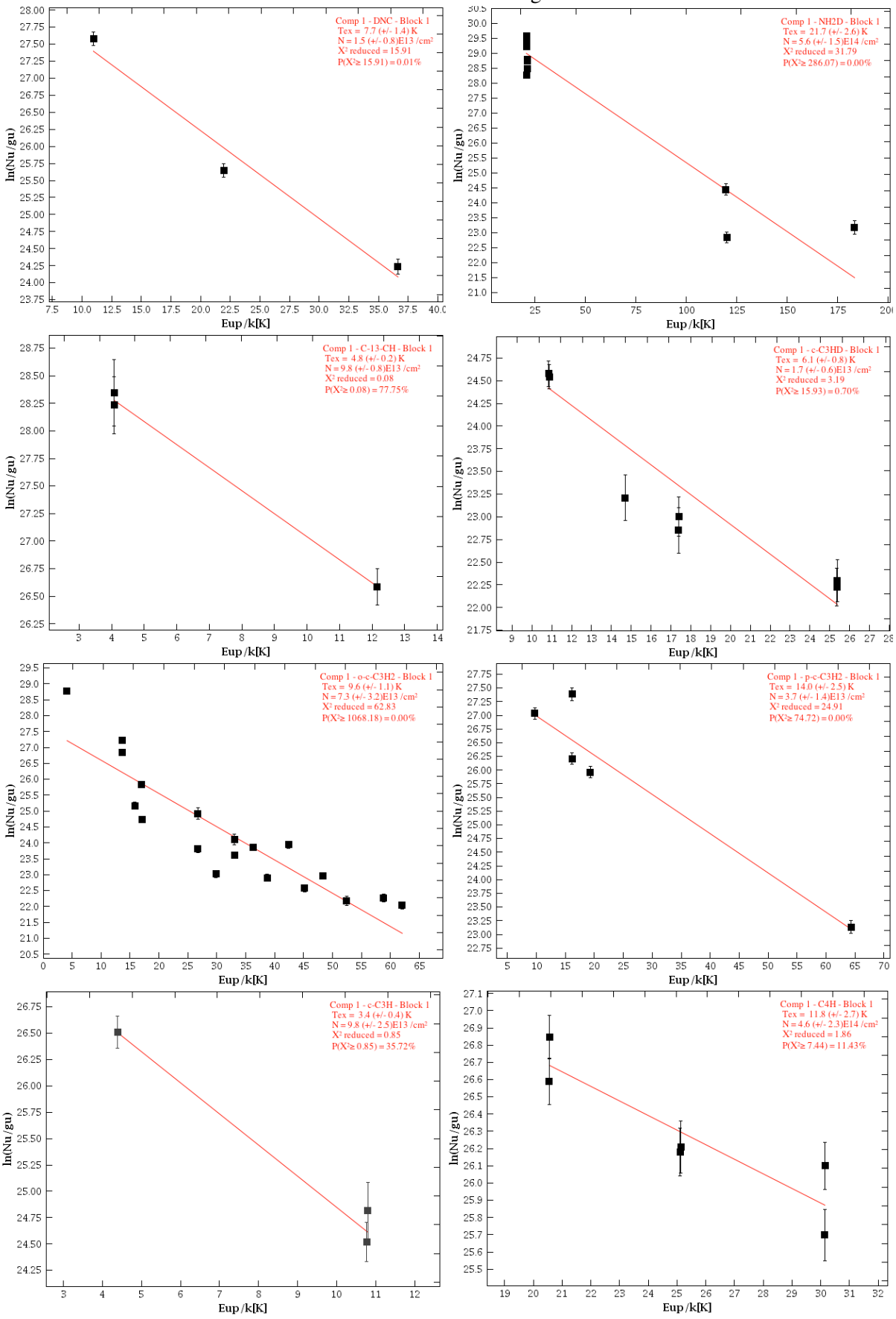


FIGURE B.4 – Suite de la figure B.1.

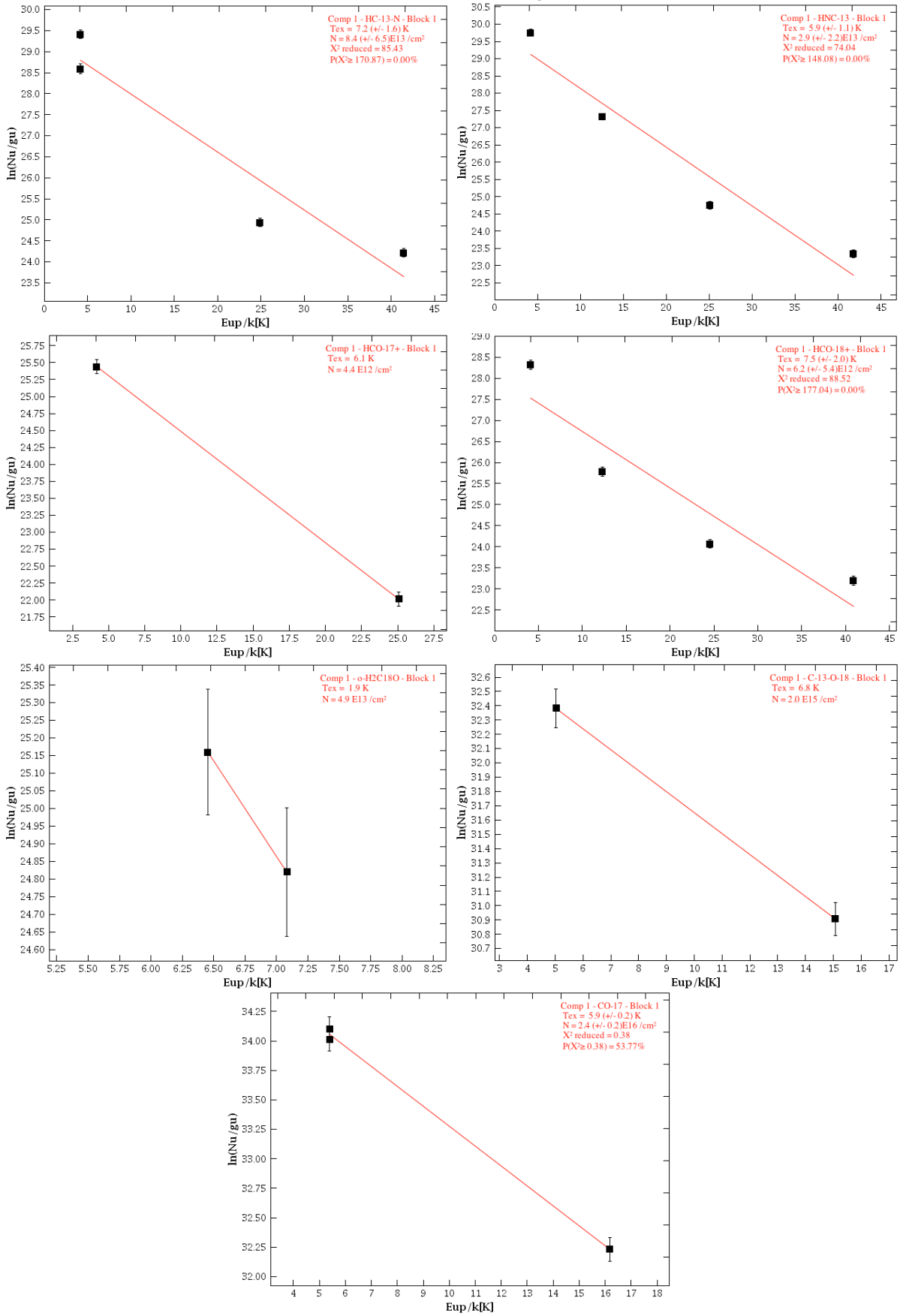


FIGURE B.5 – Diagrammes de population des espèces de la région tiède, réalisés avec une taille de source de 3,5″ et une erreur de calibration de 10%.

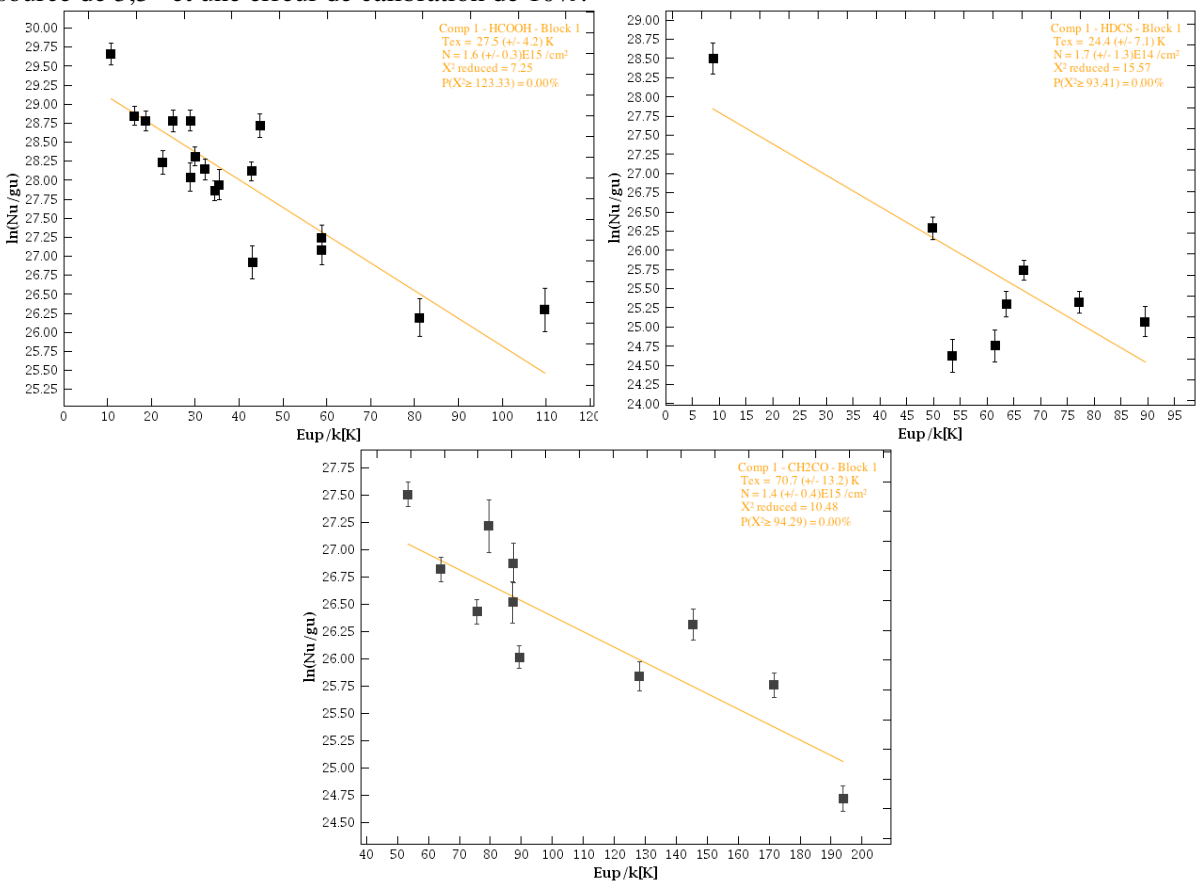


FIGURE B.6 – Diagrammes de population des espèces traçant la région tiède (jaune) et le flot (vert), réalisés respectivement avec une taille de source de 3,5″ et 11″, et une erreur de calibration de 10%. Pour certaines espèces, trop peu de raies sont correctement décomposables en deux composantes pour tracer le diagramme de population de la composante large.

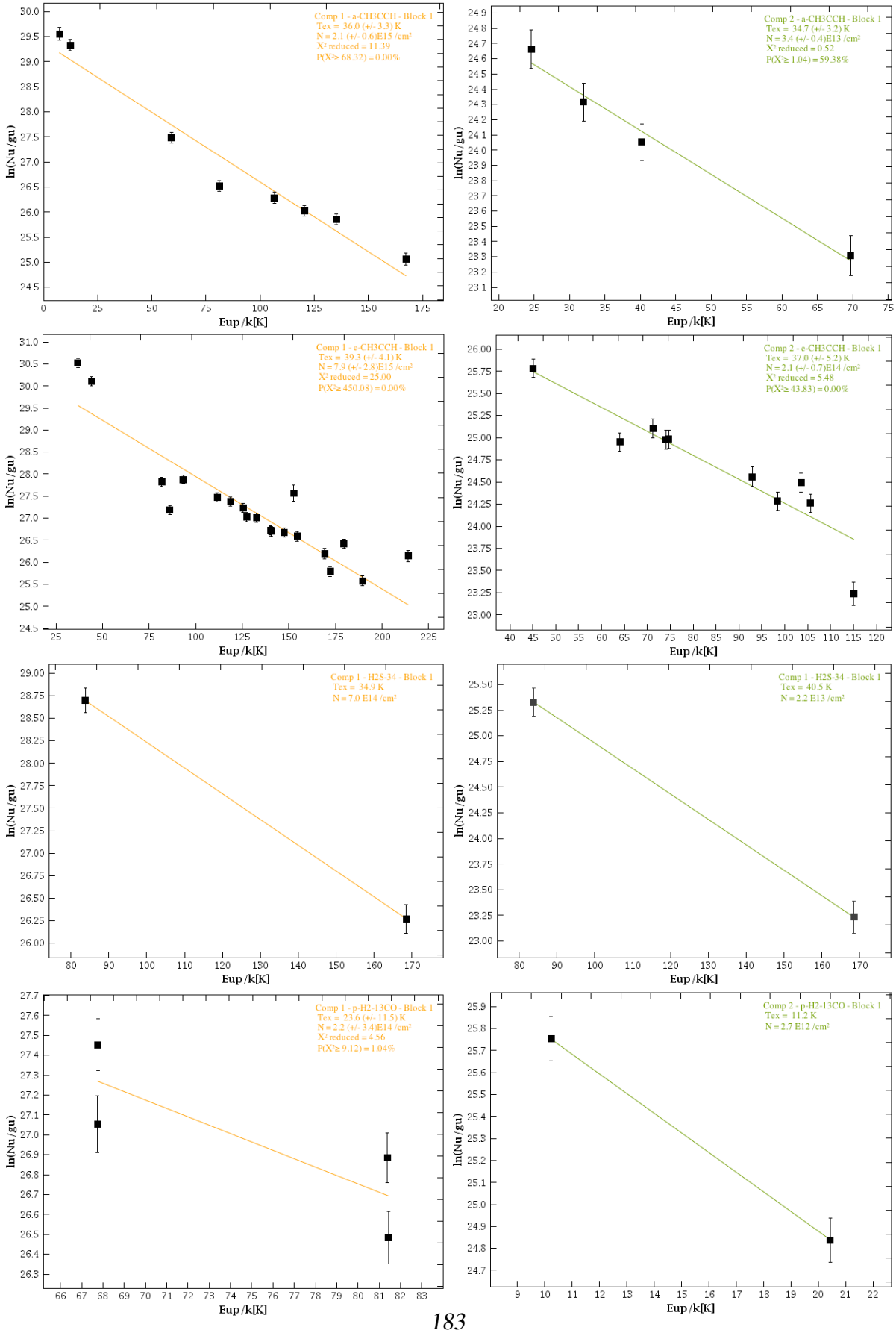


FIGURE B.7 – Suite de la figure B.6. Trop peu de points étaient disponibles pour tracer un diagramme de population de la composante large de $H_2C^{34}S$ et $OC^{34}S$.

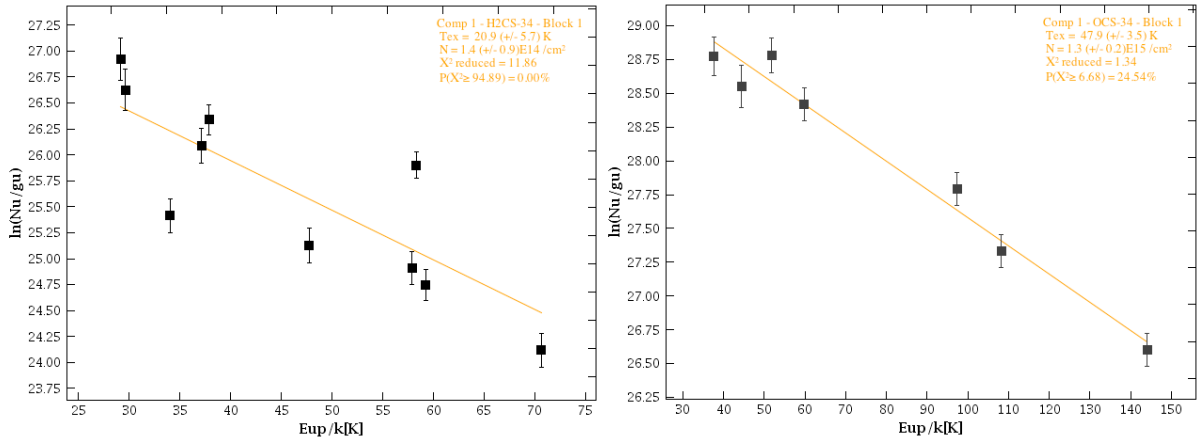


FIGURE B.8 – Diagrammes de population des espèces traçant la région tiède et la région centrale, indiqués respectivement en jaune et bleu, tracés avec une unique taille de source de 1,5″ et une erreur de calibration de 10%. La température d'excitation et la densité de colonne pour la région centrale sont estimées avec ces diagrammes, mais pour une taille de 0,36″. Les cadres indiquent les points pris en compte pour réaliser les ajustements. Les diagrammes de C_2H_5CN et CH_2CO ne contiennent pas assez de points pour séparer deux composantes. Leur température élevée (> 50 K) indique que ces deux espèces tracent la région centrale plutôt que la région intermédiaire. Le diagramme de CH_2DOH semble montrer deux pentes, toutefois, la pente suggérée par les raies de haute énergie est positive, ce qui indiquerait une température d'excitation négative.

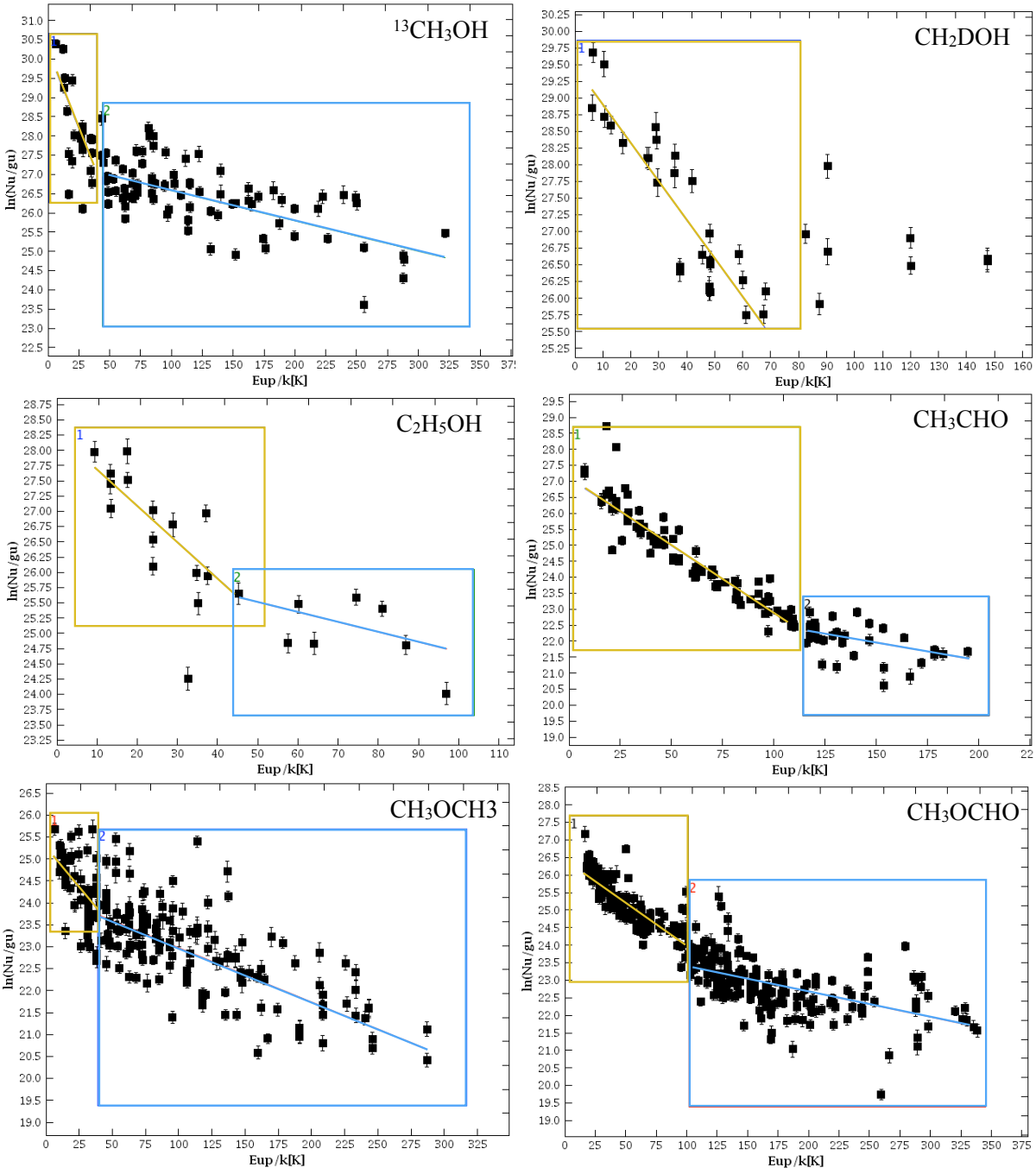


FIGURE B.9 – Diagrammes de population des espèces traçant la région tiède et la région centrale, indiqués respectivement en jaune et bleu, tracés avec une unique taille de source de 3,5″ et une erreur de calibration de 10%. Pour plus de détails, voir la légende de la figure B.8.

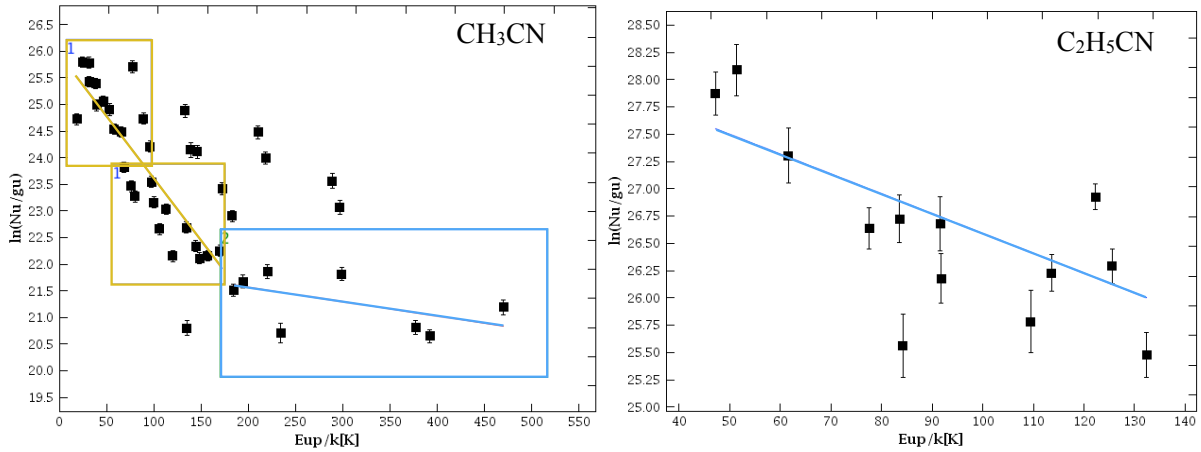


FIGURE B.10 – Diagrammes de population des espèces traçant l'enveloppe (rouge) et le flot (vert), tracés respectivement avec une taille de source de 5,2″ et 11″ et une erreur de calibration de 10%.

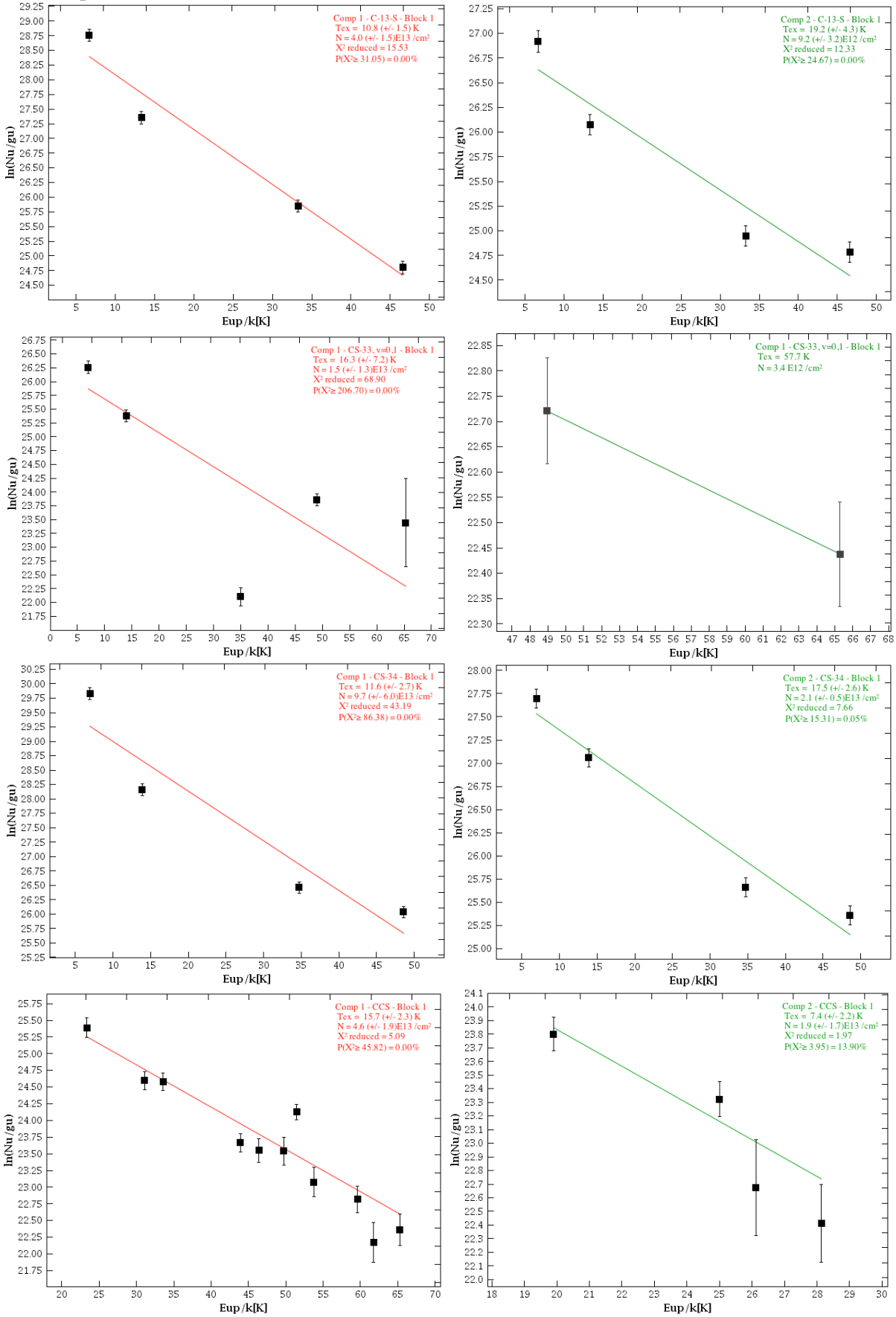


FIGURE B.11 – Suite de la figure B.10.

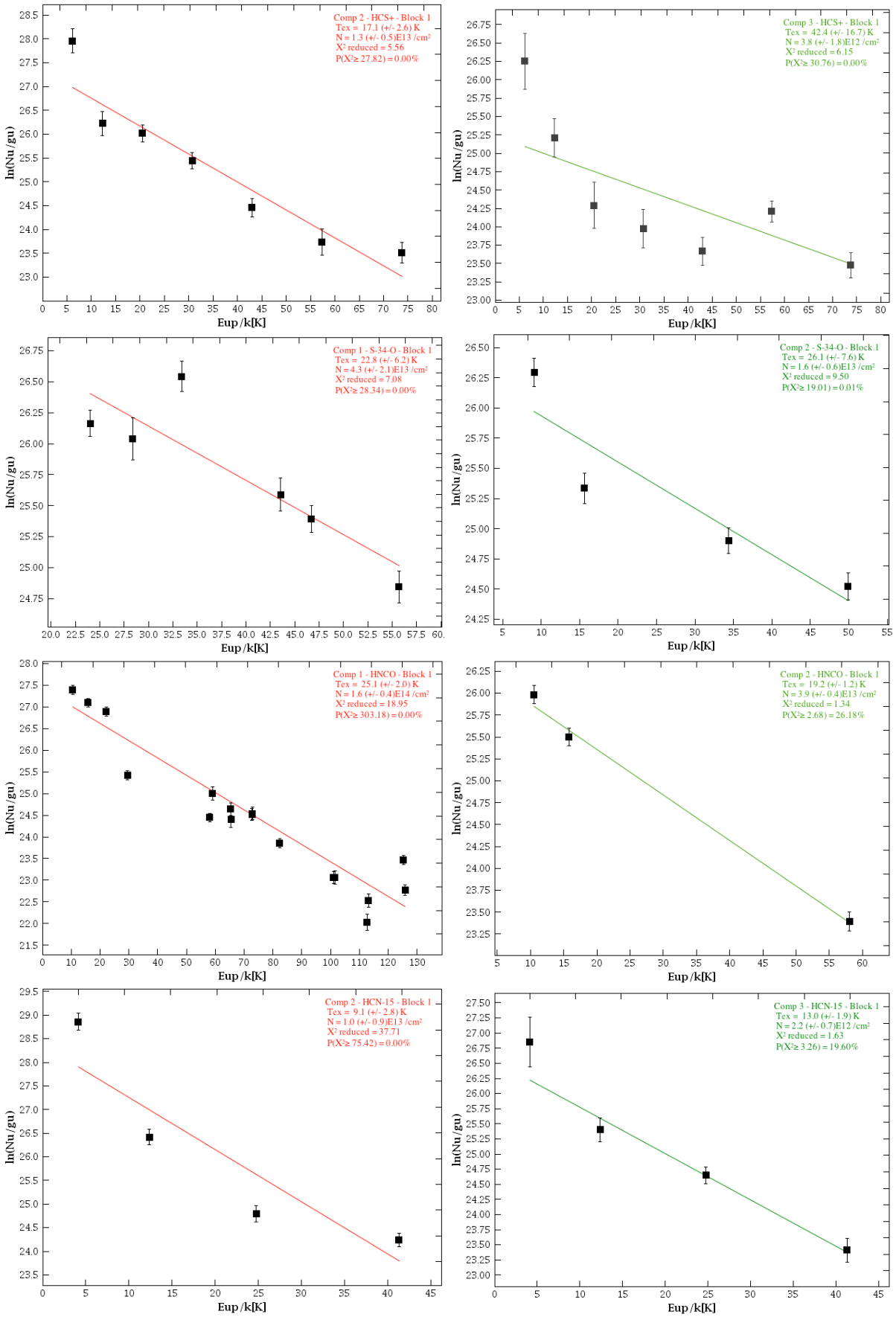
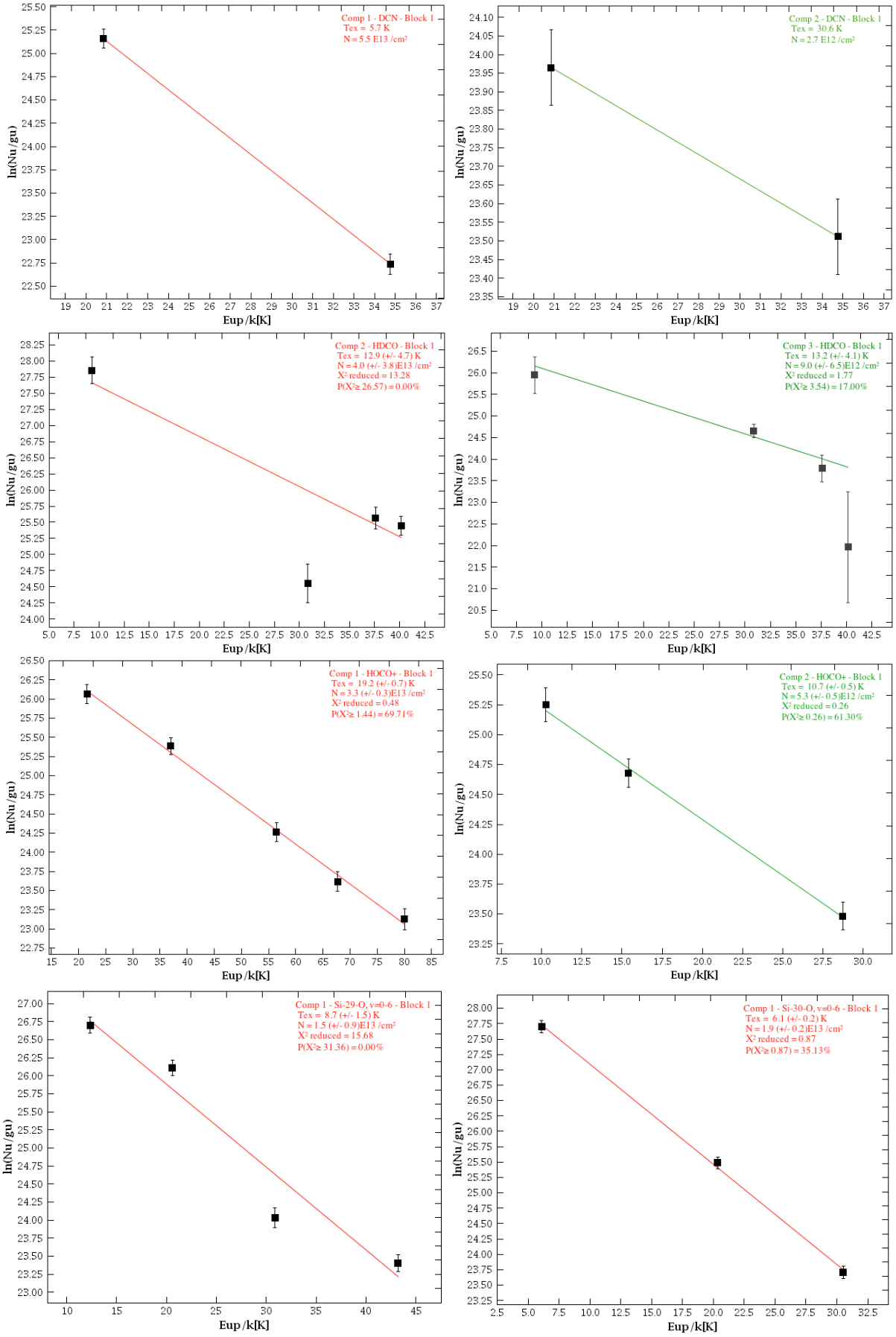


FIGURE B.12 – Suite de la figure B.10.



ANNEXE C

RAPPORTS ISOTOPIQUES

TABLE C.1 – Rapports isotopiques calculés d'après Wilson and Rood [1994] pour la région du Cygne-X, située à environ 8 kpc du centre galactique.

Rapport	Valeur	Rapport	Valeur
^{32}S / ^{34}S	22	^{16}O / ^{18}O	531 ± 182
^{32}S / ^{33}S	127[a]	^{16}O / ^{17}O	$1938 \pm$ -
^{12}C / ^{13}C	70.6 ± 29	^{28}Si / ^{30}Si	~ 14
^{14}N / ^{15}N	448 ± 137	^{28}Si / ^{29}Si	~ 13

[a] Abondance solaire [Anders and Grevesse, 1989]

ANNEXE D

RAIES OBSERVÉES AU 30 M

TABLE D.1 – Propriétés des raies détectées : code de l'espèce, nom de l'espèce, composante simple (*single*), étroite (*narrow*) ou large (*broad*), nombre de raies détectées à 4 σ, énergie minimale et maximale du niveau supérieur E_{up} en K, vitesse pic moyenne v_0 en km s^{-1}, FWHM moyenne en km s^{-1}, intensité moyenne en K et flux $\int T_{mb} dv$ en K km s^{-1}. Ces propriétés sont celles des ajustements gaussiens des raies.

.

TAG	Espèce	Comp.	Nb lines	E_{up} min-max (K)	$\langle v_0 \rangle$ (km s^{-1})	$\langle$FWHM$\rangle$ (km s^{-1})	$\langle$Intensité$\rangle$ (K)	$\langle$Flux$\rangle$ (K.km s^{-1})
18004	NH_2D	S	13	21 - 261	-4.42 ± 0.09	2.22 ± 0.20	0.077 ± 0.004	0.178
19002	HDO	S	3	95 - 168	-5.43 ± 0.14	5.41 ± 0.36	0.043 ± 0.004	0.263
25501	CCH	N	29	4 - 25	-4.00 ± 0.01	2.27 ± 0.05	0.554 ± 0.014	1.361
25501	CCH	B	8	-	-3.50 ± 0.02	7.01 ± 0.09	0.015 ± 0.481	0.481
26501	CCD	N	8	10 - 35	-4.58 ± 0.05	2.10 ± 0.12	0.077 ± 0.005	0.168
26502	^{13}CCH	N	3	4 - 12	-4.60 ± 0.12	2.45 ± 0.30	0.015 ± 0.002	0.031
26503	C^{13}CH	N	4	4 - 4	-3.88 ± 0.15	1.80 ± 0.38	0.018 ± 0.002	0.034
26504	CN	N	27	5 - 16	-4.83 ± 0.01	2.21 ± 0.04	0.907 ± 0.020	2.136
26504	CN	B	3	-	-4.15 ± 0.02	8.34 ± 0.08	0.084 ± 0.020	0.739
27001	HCN	A	5	4 - 25	-3.87 ± 0.05	5.48 ± 0.12	1.625 ± 0.046	9.463
27002	HNC	N	3	4 - 43	-3.89 ± 0.01	2.75 ± 0.02	2.267 ± 0.070	6.642
27002	HNC	B	2	-	-3.71 ± 0.02	4.48 ± 0.07	1.019 ± 0.044	4.854
27505	^{13}CN	N	10	5 - 15	-4.65 ± 0.06	2.60 ± 0.14	0.035 ± 0.002	0.111
27506	C^{15}N	N	1	5 - 5	-4.45 ± 0.03	1.74 ± 0.06	0.030 ± 0.001	0.055
28001	CO	A	3	5 - 33	-	-	-	-
28002	H^{13}CN	N	6	4 - 41	-4.23 ± 0.20	2.38 ± 0.63	0.240 ± 0.040	0.677
28002	H^{13}CN	B	4	-	-3.48 ± 0.33	8.31 ± 0.86	0.126 ± 0.036	1.313
28003	HC^{15}N	N	6	4 - 41	-4.45 ± 0.04	2.16 ± 1.13	0.143 ± 0.008	0.330
28003	HC^{15}N	B	4	-	-3.83 ± 0.17	7.97 ± 0.63	0.070 ± 0.007	0.625
28004	DNC		3	10 - 52	-4.49 ± 0.04	2.09 ± 0.10	0.343 ± 0.013	0.737
28005	HN^{13}C		4	4 - 41	-4.52 ± 0.03	2.41 ± 0.07	0.360 ± 0.005	0.916
28006	H^{15}NC		2	4 - 25	-4.23 ± 0.07	2.02 ± 0.19	0.086 ± 0.005	0.187
28008	$HCNH^+$		1	10 - 10	-4.52 ± 0.04	2.19 ± 0.09	0.023 ± 0.001	0.053
28509	DCN	N	3	10 - 36	-4.58 ± 0.01	1.50 ± 0.06	0.380 ± 0.039	0.661
28509	DCN	B	2	-	-4.88 ± 0.02	5.07 ± 0.11	0.313 ± 0.029	1.521
29001	^{13}CO	A	3	5 - 31	-4.05 ± 0.06	2.24 ± 0.15	8.109 ± 0.214	19.337
29003	CH_2NH	S	2	16 - 39	-4.75 ± 0.11	2.19 ± 0.28	0.051 ± 0.009	0.112
29004	HCO	S	2	4 - 4	-3.32 ± 0.08	2.04 ± 0.20	0.018 ± 0.001	0.038
29006	C^{17}O	S	4	5 - 16	-4.69 ± 0.04	2.13 ± 0.10	0.500 ± 0.010	1.190
29506	N_2H^+	S	4	4 - 26	-4.61 ± 0.01	2.60 ± 0.03	2.580 ± 0.020	7.492
29507	HCO^+	N	3	4 - 42	-4.30 ± 0.01	3.28 ± 0.02	4.037 ± 0.051	14.114
29507	HCO^+	B	1	-	-4.42 ± 0.02	10.90 ± 0.05	0.495 ± 0.038	5.746
30001	C^{18}O	N	3	5 - 31	-4.50 ± 0.01	1.81 ± 0.03	2.643 ± 0.074	5.055
30001	C^{18}O	B	2	-	-3.31 ± 0.02	7.64 ± 0.08	0.175 ± 0.057	1.486
30002	H$^{13}CO^+$	S	4	4 - 41	-4.36 ± 0.02	2.38 ± 0.05	1.155 ± 0.015	2.933
30003	DCO^+	S	4	10 - 52	-4.57 ± 0.03	1.68 ± 0.07	0.690 ± 0.010	1.190
30008	NO	N	10	7 - 19	-4.42 ± 0.04	1.01 ± 0.13	0.081 ± 0.008	0.088
30008	NO	B	2	-	-4.74 ± 0.09	4.58 ± 0.30	0.072 ± 0.006	0.351
30505	HC$^{17}O^+$	S	2	4 - 25	-4.76 ± 0.19	5.52 ± 0.47	0.036 ± 0.004	0.187
30507	$^{15}NNH^+$	S	2	4 - 25	-4.18 ± 0.09	2.68 ± 0.23	0.056 ± 0.004	0.143
30508	N$^{15}NH^+$	S	1	4 - 4	-5.12 ± 0.02	2.05 ± 0.05	0.022 ± 0.001	0.048
30509	N_2D^+	S	2	11 - 22	-4.63 ± 0.04	1.68 ± 0.09	0.146 ± 0.005	0.263
30581	p-H_2CO	N	13	10 - 82	-4.73 ± 0.04	3.66 ± 0.17	1.516 ± 0.066	7.255
30581	p-H_2CO	B		-	-5.15 ± 0.14	10.06 ± 0.60	0.704 ± 0.068	7.910
30591	o-H_2CO	N	15	6 - 195	-5.25 ± 0.07	2.20 ± 0.32	0.029 ± 0.006	0.067
30591	o-H_2CO	B		-	-5.27 ± 0.10	5.96 ± 0.58	0.035 ± 0.006	0.221

TABLE D.2 – Suite de la table D.1.

TAG	Espèces	Comp.	Nb raies	E_{up} min-max (K)	$\langle v_0 \rangle$ (km s^{-1})	$\langle$FWHM$\rangle$ (km s^{-1})	$\langle$Intensité$\rangle$ (K)	$\langle$Flux$\rangle$ (K.km s^{-1})
31003	HDCO	N	13	9 - 102	-4.67 ± 0.05	1.58 ± 0.20	0.122 ± 0.013	0.212
31003	HDCO	B	7	-	-5.07 ± 0.11	4.82 ± 0.39	0.134 ± 0.013	0.641
31007	$D^{13}CO^+$	S	1	11 - 11	-4.75 ± 0.09	1.78 ± 0.21	0.033 ± 0.02	0.062
31506	$HC^{18}O^+$	S	4	4 - 40	-4.41 ± 0.03	2.07 ± 0.08	0.158 ± 0.004	0.339
31511	$^{13}C^{18}O$	S	2	5 - 15	-4.56 ± 0.04	1.98 ± 0.10	0.054 ± 0.001	0.120
31583	p-$H_2{}^{13}CO$	N	7	10 - 81	-4.40 ± 0.03	1.56 ± 0.10	0.052 ± 0.004	0.094
31583	p-$H_2{}^{13}CO$	B	2	-	-4.99 ± 0.03	4.78 ± 0.10	0.096 ± 0.004	0.492
31593	o-$H_2{}^{13}CO$	N	9	6 - 125	-4.53 ± 0.02	1.65 ± 0.08	0.076 ± 0.007	0.134
31593	o-$H_2{}^{13}CO$	B	5	-	-5.09 ± 0.03	5.21 ± 0.11	0.155 ± 0.007	0.849
32504	CH_3OH	N	375	7 - 947	-5.02 ± 0.05	3.33 ± 0.18	0.561 ± 0.031	1.243
32504	CH_3OH	B	64	-	-5.14 ± 0.22	9.57 ± 0.53	0.374 ± 0.027	3.825
32582	p-D_2CO	S	2	5 - 23	-4.53 ± 0.10	2.58 ± 0.25	0.031 ± 0.003	0.083
32592	o-D_2CO	S	7	8 - 64	-5.08 ± 0.30	2.56 ± 0.75	0.061 ± 0.007	0.182
32593	o-$H_2C^{18}O$	S	2	4 - 40	-4.41 ± 0.03	2.07 ± 0.08	0.158 ± 0.004	0.339
33004	CH_2DOH	S	128	6 - 353	-5.10 ± 0.17	3.40 ± 0.40	0.030 ± 0.003	0.101
33502	$^{13}CH_3OH$	S	116	7 - 333	-5.22 ± 0.20	3.87 ± 0.43	0.042 ± 0.004	0.175
34092	o-H_2S	N	2	8 - 150	-4.75 ± 0.10	4.43 ± 0.29	0.512 ± 0.026	3.127
34092	o-H_2S	B	1	-	-3.98 ± 0.23	9.03 ± 0.92	0.117 ± 0.017	1.121
34582	p-H_2S	N	1	83 - 83	-4.74 ± 0.04	1.71 ± 0.13	0.118 ± 0.008	0.214
34582	p-H_2S	B	1	-	-4.82 ± 0.06	6.07 ± 0.23	0.146 ± 0.008	0.944
35503	$H_2{}^{33}S$	S	3	28 - 28	-4.75 ± 0.06	1.77 ± 0.14	0.018 ± 0.002	0.036
36504	$H_2{}^{34}S$	S	3	28 - 169	-4.79 ± 0.07	3.98 ± 0.23	0.070 ± 0.004	0.219
37002	c-C_3H	S	3	4 - 11	-4.26 ± 0.10	2.32 ± 0.25	0.014 ± 0.001	0.035
38082	o-c-C_3H_2	S	19	4 - 75	-4.38 ± 0.07	2.27 ± 0.17	0.212 ± 0.008	0.451
38092	p-c-C_3H_2	S	6	10 - 64	-4.10 ± 0.06	1.94 ± 0.15	0.093 ± 0.004	0.206
39003	c-C_3HD	S	7	11 - 25	-4.31 ± 0.12	1.75 ± 0.30	0.017 ± 0.002	0.033
40582	a-CH_3CCH	N	12	7 - 167	-4.70 ± 0.04	2.19 ± 0.15	0.089 ± 0.007	0.212
40582	a-CH_3CCH	B	4	-	-4.65 ± 0.40	7.37 ± 1.73	0.028 ± 0.007	0.220
40592	e-CH_3CCH	N	36	30 - 370	-4.56 ± 0.06	1.81 ± 0.15	0.212 ± 0.022	0.399
40592	e-CH_3CCH	B	32	-	-4.91 ± 0.44	5.43 ± 1.11	0.091 ± 0.019	0.519
41001	CH_3CN	N	63	13 - 470	-4.77 ± 0.08	3.14 ± 0.26	0.063 ± 0.007	0.244
41001	CH_3CN	B	24	-	-4.97 ± 0.14	7.90 ± 0.57	0.055 ± 0.005	0.459
41006	CH_2DCCH	S	2	16 - 22	-4.69 ± 0.14	1.43 ± 0.33	0.012 ± 0.002	0.019
42002	CH_2CO	N	29	14 - 219	-4.38 ± 0.10	1.71 ± 0.27	0.041 ± 0.012	0.081
42002	CH_2CO	B	12	-	-4.94 ± 0.17	4.98 ± 0.36	0.072 ± 0.010	0.377
43002	HNCO	N	21	10 - 195	-4.46 ± 0.03	2.63 ± 0.08	0.148 ± 0.007	0.412
43002	HNCO	B	5	-	-5.78 ± 0.06	10.11 ± 0.19	0.063 ± 0.006	0.625
43510	HOCN	S	2	10 - 28	-4.73 ± 0.08	1.66 ± 0.20	0.014 ± 0.001	0.025
44001	CS	N	5	7 - 65	-4.38 ± 0.02	4.05 ± 0.08	2.557 ± 0.046	11.016
44001	CS	B	3	-	-5.50 ± 0.07	16.72 ± 0.24	0.989 ± 0.040	17.252
44002	SiO	N	8	6 - 75	-7.06 ± 0.12	5.62 ± 0.71	0.196 ± 0.072	1.210
44002	SiO	B	6	-	-6.43 ± 0.14	27.13 ± 0.49	0.240 ± 0.006	7.095
45003	NH_2CHO	S	12	10 - 49	-5.10 ± 0.11	4.05 ± 0.27	0.015 ± 0.001	0.061
45005	HCS^+	N	7	6 - 77	-4.11 ± 0.06	1.93 ± 0.19	0.089 ± 0.010	0.191
45005	HCS^+	B	3	-	-4.81 ± 0.54	6.79 ± 0.99	0.037 ± 0.007	0.269
46506	t-HCOOH	S	23	11 - 145	-5.01 ± 0.13	4.07 ± 0.33	0.022 ± 0.002	0.091
51501	HC_3N	N	19	24 - 260	-4.51 ± 0.03	2.44 ± 0.08	0.366 ± 0.009	0.877
51501	HC_3N	B	15	-	-5.25 ± 0.09	15.50 ± 0.30	0.165 ± 0.008	1.870
52509	$H^{13}CCCN$	N	4	23 - 65	-4.36 ± 0.15	3.13 ± 0.39	0.019 ± 0.002	0.081
52509	$H^{13}CCCN$	B	1	-	-4.11 ± 0.09	6.46 ± 0.45	0.009 ± 0.004	0.062
55001	C_2H_5CN	S	17	25 - 147	-5.14 ± 0.09	2.62 ± 0.23	0.019 ± 0.002	0.046
66501	$S^{34}O_2$	S	2	7 - 19	-6.07 ± 0.07	1.22 ± 0.17	0.046 ± 0.005	0.061
75503	HC_5N	S	12	63 - 115	-4.29 ± 0.06	2.20 ± 0.16	0.027 ± 0.001	0.062

TABLE D.3 – Suite de la table D.1.

TAG	Espèces	Comp.	Nb raies	E_{up} min-max (K)	$\langle v_0 \rangle$ (km s^{-1})	$\langle$FWHM$\rangle$ (km s^{-1})	$\langle$Intensité$\rangle$ (K)	$\langle$Flux$\rangle$ (K.km s^{-1})
	CH_3OD	S	3	8 - 39		4.42 ± 0.41	0.028 ± 0.002	0.125
44003	CH_3CHO	N	183	7 - 98	-5.00 ± 0.10	3.42 ± 0.25	0.055 ± 0.004	0.213
44003	CH_3CHO	B	10	-	-5.14 ± 0.07	6.60 ± 0.21	0.042 ± 0.004	0.275
44504	Ethylene oxide	S	6	22 - 52	-4.52 ± 0.12	3.08 ± 0.29	0.030 ± 0.004	0.100
45001	^{13}CS	N	4	6 - 46	-4.39 ± 0.05	2.67 ± 0.19	0.151 ± 0.017	0.431
45001	^{13}CS	B	4	-	-4.82 ± 0.13	9.01 ± 0.48	0.080 ± 0.017	0.772
45002	$Si^{29}O$	N	5	6 - 43	-5.95 ± 0.16	8.48 ± 0.42	0.035 ± 0.004	0.306
45002	$Si^{29}O$	B	1	-	-7.30 ± 0.24	18.41 ± 0.80	0.014 ± 0.003	0.282
45010	$HOCO^+$	N	8	10 - 80	-4.49 ± 0.06	1.56 ± 0.23	0.027 ± 0.004	0.044
45010	$HOCO^+$	B	4	-	-4.84 ± 0.13	4.41 ± 0.38	0.025 ± 0.004	0.117
45502	$C^{33}S$	N	5	6 - 65	-4.43 ± 0.03	2.34 ± 0.08	0.054 ± 0.004	0.144
45502	$C^{33}S$	B	3	7 - 66	-4.77 ± 0.09	8.73 ± 0.39	0.060 ± 0.003	0.476
46001	$C^{34}S$	N	4	-				
46001	$C^{34}S$	B	4	7 - 65	-4.48 ± 0.03	2.95 ± 0.09	0.385 ± 0.012	1.218
46002	$Si^{30}O$	S	2	-	-4.46 ± 0.10	12.29 ± 0.37	0.133 ± 0.011	1.730
46003	H_2CS	N	51	10 - 402	-4.98 ± 0.06	2.33 ± 0.20	0.190 ± 0.01	0.500
46003	H_2CS	B	28	-	-5.58 ± 0.13	7.53 ± 0.39	0.145 ± 0.010	1.149
46004	C_2H_5OH	S	35	8 - 146	-4.89 ± 0.13	3.27 ± 0.33	0.026 ± 0.003	0.083
46008	CH_3OCH_3	S	218	7 - 287	-4.91 ± 0.10	2.76 ± 0.23	0.037 ± 0.004	0.111
46010	NS	S	15	9 - 54	-4.73 ± 0.11	2.65 ± 0.27	0.058 ± 0.005	0.177
47504	HDCS	S	8	8 - 90	-4.75 ± 0.08	1.59 ± 0.20	0.027 ± 0.003	0.044
48001	SO	N	36	9 - 87	-4.93 ± 0.04	3.30 ± 0.11	0.383 ± 0.014	1.351
48001	SO	B		-	-5.18 ± 0.08	15.76 ± 0.26	0.294 ± 0.009	5.070
48003	$H_2C^{34}S$	S	10	10 - 71	-4.39 ± 0.16	2.88 ± 0.39	0.028 ± 0.003	0.075
48010	SO^+	S	2	16 - 16	-4.68 ± 0.11	2.25 ± 0.32	0.022 ± 0.002	0.052
49003	C_4H	S	6	21 - 48	-4.35 ± 0.07	2.22 ± 0.18	0.027 ± 0.001	0.060
50001	$S^{34}O$	N	10	9 - 56	-4.75 ± 0.09	1.67 ± 0.25	0.028 ± 0.005	0.053
50001	$S^{34}O$	B	4	-	-5.39 ± 0.18	7.54 ± 0.42	0.040 ± 0.003	0.331
51004	HCCNC	S	3	21 - 31	-4.41 ± 0.10	1.86 ± 0.25	0.016 ± 0.001	0.030
52508	DC_3N	S	7	-	-4.33 ± 0.08	2.16 ± 0.18	0.016 ± 0.001	0.035
52510	$HC^{13}CCN$	S	3	24 - 74	-4.60 ± 0.16	2.85 ± 0.38	0.016 ± 0.002	0.045
52511	$HCC^{13}CN$	S	3	24 - 74	-4.51 ± 0.15	3.32 ± 0.38	0.017 ± 0.001	0.052
56007	CCS	N	15	20 - 65	-4.37 ± 0.04	1.91 ± 0.14	0.036 ± 0.003	0.070
56007	CCS	B	4	-	-4.24 ± 0.41	5.41 ± 0.83	0.013 ± 0.002	0.073
58003	CH_3COCH_3	S	2	23 - 87	-4.51 ± 0.08	3.27 ± 0.20	0.032 ± 0.002	0.105
60001	OCS	N	11	-	-5.61 ± 0.13	3.88 ± 0.38	0.124 ± 0.012	0.500
60001	OCS	B		16 - 254	-5.48 ± 0.12	8.82 ± 0.51	0.101 ± 0.012	0.700
60003	CH_3OCHO	S	429	10 - 347	-5.01 ± 0.11	3.19 ± 0.26	0.037 ± 0.004	0.120
62505	$OC^{34}S$	S	8	20 - 144	-5.36 ± 0.12	3.53 ± 0.29	0.039 ± 0.004	0.136
64002	SO_2	N	55	7 - 293	-4.89 ± 0.12	2.89 ± 0.44	0.045 ± 0.006	0.144
64002	SO_2	B	21	-	-5.11 ± 0.45	13.06 ± 2.95	0.047 ± 0.005	0.665
66002	$^{34}SO_2$	S	2	-	-6.07 ± 0.07	1.22 ± 0.17	0.046 ± 0.005	0.061

ANNEXE E

RAIES OBSERVÉES AU PDBI

TABLE E.1 – Raies moléculaires observées au PdBI à 1 mm et 3 mm. ND signifie non détectée.

TAG	Transition	Fréquence (MHz)	Intensité au 30 m (Jy)	Intensité du PdBI (Jy)	Rayon source (‘’)
27002	HNC (1 - 0)	90663.59	14.8762 ± 0.6365	0.0385 ± 0.0035	6.41 ± 4.70
29506	N_2H^+ (1 - 0)	93173.39	20.0975 ± 0.5086	0.0498 ± 0.0017	6.43 ± 3.53
30507	$^{15}NNH^+$(1 - 0)	90263.84	0.1029 ± 0.0306	0.0167 ± 0.0023	2.29 ± 0.09
32504	$CH_3OH(1_{+0,1,1} - 2_{+1,2,1})$	93196.67	0.0915 ± 0.0387	0.0284 ± 0.0059	1.92 ± 0.11
33004	CH_2DOH ($9_{1,8,1} - 9_{0,9,1}$)	91179.52	0.0278 ± 0.0181	0.0164 ± 0.0035	1.65 ± 0.09
33004	$CH_2DOH(2_{1,1,0} - 1_{1,0,0})$	90779.84	0.0652 ± 0.0252	0.0127 ± 0.0030	2.18 ± 0.14
33004	$CH_2DOH(2_{1,1,1} - 1_{1,0,1})$	90315.01	0.0289 ± 0.0171	0.0115 ± 0.0029	1.83 ± 0.12
33004	$CH_2DOH(4_{1,3,0} - 4_{0,4,0})$	91586.85	0.0764 ± 0.0328	0.0260 ± 0.0046	1.89 ± 0.09
33502	$^{13}CH_3OH$ ($13_{1,13,+0} - 12_{2,10,+0}$)	90384.31	0.0345 ± 0.0223	0.0150 ± 0.0032	1.79 ± 0.11
33502	$^{13}CH_3OH(7_{2,6,-0} - 8_{1,7,-0})$	92588.70	0.0362 ± 0.0225	0.0164 ± 0.0017	1.75 ± 0.00
37003	c-$C_3H(2_{1,2,1.5,2} - 1_{1,1,0.5,1})$	91699.47	0.0463 ± 0.0194	ND	3.86 ± 0.00
37003	c-$C_3H(2_{1,2,2.5,3} - 1_{1,1,1.5,2})$	91494.35	0.0913 ± 0.0275	ND	3.81 ± 0.01
41001	$CH_3CN(5_0 - 4_0)$	91987.09	0.3980 ± 0.0413	0.0649 ± 0.0018	2.27 ± 0.03
41001	$CH_3CN(5_2 - 4_2)$	91979.99	0.2508 ± 0.0276	0.0358 ± 0.0016	2.34 ± 0.03
41001	$CH_3CN(5_3 - 4_3)$	91971.13	0.1750 ± 0.0206	0.0415 ± 0.0016	2.06 ± 0.02
41001	$CH_3CN(5_4 - 4_4)$	91958.73	0.0652 ± 0.0190	0.0247 ± 0.0010	1.84 ± 0.02
44003	CH_3CHO ($5_{1,5,0} - 4_{1,4,0}$)	93580.91	0.2614 ± 0.1170	0.0105 ± 0.0006	3.19 ± 0.11
44003	CH_3CHO ($5_{1,5,1} - 4_{1,4,1}$)	93595.23	0.2329 ± 0.1170	0.0110 ± 0.0006	3.07 ± 0.11
45501	^{13}CS ($2_0 - 1_0$)	92494.31	0.6483 ± 0.0635	0.0256 ± 0.0012	3.23 ± 0.08
46004	C_2H_5OH ($4_{1,4,2} - 3_{0,3,2}$)	90117.61	0.0451 ± 0.0248	0.0061 ± 0.0019	2.39 ± 0.21
46005	HCOOH ($4_{1,3} - 3_{1,2}$)	93098.36	0.0909 ± 0.0274	0.0112 ± 0.0015	2.42 ± 0.09
46005	$HCOOH(4_{2,2} - 3_{2,1})$	90164.63	0.0462 ± 0.0143	0.0112 ± 0.0018	2.07 ± 0.09
46008	CH_3OCH_3 ($6_{0,6,3} - 5_{1,5,3}$)	90938.67	0.0713 ± 0.0432	0.0250 ± 0.0054	1.88 ± 0.13
47504	HDCS ($3_{0,3} - 2_{0,2}$)	92981.60	0.0876 ± 0.0268	0.0075 ± 0.0012	2.65 ± 0.12
50002	SO-18($2_3 - 1_2$)	93267.27	0.0374 ± 0.0188	ND	3.11 ± 0.00
51501	HC_3N (10 - 9)	90979.02	5.5206 ± 0.2559	0.0545 ± 0.0017	4.59 ± 0.76
52002	$HC^{13}CCN$ ($10_{10} - 9_9$)	90593.06	0.0936 ± 0.0200	0.0086 ± 0.0017	2.63 ± 0.13
52508	DC_3N (11 - 10)	92872.38	0.0960 ± 0.0201	ND	3.88 ± 0.01
56502	CCS ($7_7 - 6_6$)	90686.38	0.1403 ± 0.0311	ND	4.43 ± 0.01
58003	$CH_3COCH_3(9_{0,9,0} - 8_{1,8,1})$	92735.67	0.0619 ± 0.0248	0.0084 ± 0.0024	2.36 ± 0.18
60003	$CH_3OCHO(7_{2,5,0} - 6_{2,4,0})$	90156.47	0.0679 ± 0.0266	0.0185 ± 0.0041	2.01 ± 0.12
60003	$CH_3OCHO(7_{2,5,2} - 6_{2,4,2})$	90145.72	0.0434 ± 0.0234	0.0167 ± 0.0040	1.84 ± 0.12
60003	$CH_3OCHO(8_{0,8,0} - 7_{0,7,0})$	90229.62	0.0935 ± 0.0444	0.0306 ± 0.0059	1.92 ± 0.11
64002	$SO_2(18_{5,13} - 19_{4,16})$	91550.44	0.0368 ± 0.0176	0.0115 ± 0.0019	1.93 ± 0.08
68503	C_3S(16 - 15)	92488.49	0.0368 ± 0.0193	ND	3.16 ± 0.00
75503	HC_5N (34 - 33)	90525.89	0.1576 ± 0.0344	ND	4.42 ± 0.01
75503	HC_5N (35 - 34)	93188.12	0.1345 ± 0.0353	ND	4.35 ± 0.01
28508	DNC(3 - 2)	228910.48	1.4053 ± 0.2831	ND	1.69 ± 0.22
30509	N_2D^+(3 - 2)	231321.83	0.4752 ± 0.1181	ND	1.18 ± 0.02
32504	CH_3OH ($10_{2,0} - 9_{3,0}$)	231281.11	0.2150 ± 0.1388	0.1566 ± 0.0152	0.55 ± 0.04
32504	CH_3OH ($3_{-2,0} - 4_{-1,0}$)	230027.05	0.7554 ± 0.1824	0.0956 ± 0.0089	0.85 ± 0.07
32504	$CH_3OH(15_{4,0} - 16_{3,0})$	229589.06	0.2130 ± 0.1021	0.1254 ± 0.0060	0.58 ± 0.02
32592	o-D_2CO ($4_{0,4} - 3_{0,3}$)	231410.23	0.3022 ± 0.2206	0.2357 ± 0.1020	0.54 ± 0.09
33004	CH_2DOH ($11_{2,9,0} - 11_{1,10,0}$)	228231.68	0.2231 ± 0.1244	0.0911 ± 0.0103	0.63 ± 0.04
33004	$CH_2DOH(8_{2,7,0} - 7_{1,7,2})$	228436.59	0.1475 ± 0.1014	0.0905 ± 0.0091	0.57 ± 0.02
45501	^{13}CS (5 - 4)	231221.00	1.1806 ± 0.2756	0.2292 ± 0.0106	0.76 ± 0.06
46005	$HCOOH(10_{2,8} - 9_{2,7})$	228544.17	0.1029 ± 0.0882	0.0290 ± 0.0085	0.69 ± 0.07
60001	OCS(19 - 18)	231060.98	0.8838 ± 0.3950	0.2348 ± 0.0101	0.70 ± 0.11
60003	$CH_3OCHO(18_{3,15,0} - 17_{3,14,0})$	229420.34	0.2405 ± 0.1055	0.0795 ± 0.0092	0.67 ± 0.04
60003	$CH_3OCHO(18_{3,15,2} - 17_{3,14,2})$	229405.02	0.2743 ± 0.1099	0.0874 ± 0.0090	0.67 ± 0.04
60003	$CH_3OCHO(18_{5,13,0} - 17_{5,12,0})$	228651.40	0.1941 ± 0.1002	0.0737 ± 0.0097	0.64 ± 0.03
60003	$CH_3OCHO(18_{5,13,2} - 17_{5,12,2})$	228628.88	0.1625 ± 0.0961	0.0746 ± 0.0096	0.61 ± 0.03

ANNEXE F

LISTE DES PUBLICATIONS

S. Fechtenbaum, S. Bontemps, N. Schneider, T. Csengeri. Unbiased spectral survey of CygX-N63 : pre-hot core chemistry and pristine gas for high-mass star formation. En préparation.

S. Fechtenbaum, S. Bontemps, N. Schneider, T. Csengeri, A. Duarte-Cabral, F. Herpin, B. Lefloch. First detection of CF^+ towards a high-mass protostar. *A&A*, 574 : L4, feb 2015.

S. Fechtenbaum, S. Bontemps. First unbiased spectral survey of a young and single massive protostar : CygX-N63. *SF2A-2013 : Proceedings of the Annual meeting of the French Society of Astronomy and Astrophysics* : 219-222, nov 2013.

En préparation

F.1 Unbiased spectral survey of CygX-N63 : pre-hot core chemistry and pristine gas for high-mass star formation

Astronomy & Astrophysics manuscript no. N63-sf5
December 9, 2015
©ESO 2015

Unbiased spectral survey of CygX-N63: pre-hot core chemistry and pristine gas for high-mass star formation

S. Fechtenbaum[1], S. Bontemps[1], T. Csengeri[2], and et al.

[1] Univ. Bordeaux, LAB, UMR 5804, F-33270, Floirac, France
CNRS, LAB, UMR 5804, F-33270 Floirac, France
e-mail: Sarah.Fechtenbaum@obs.u-bordeaux1.fr
[2] Max-Planck-Institut für Radioastronomie, Auf dem Hügel 69, 53121 Bonn, Germany
e-mail: ctimea@mpifr-bonn.mpg.de

Received ..., 2015; accepted ..., 2015

ABSTRACT

Context. Astrochemistry for high-mass star formation has not been much explored so far except for well developed hot cores revealing significant molecular complexity. The composition of the pristine gas at the origin of high-mass stars is poorly known since high-mass pre-stellar cores are difficult to recognize with no clear example known yet. Recent high resolution investigations of nearby high-mass star forming regions such as Cygnus-X has revealed the existence of high-mass class 0 young stellar objects (YSOs) which may still contain pristine gas as initial conditions for hot core formation.
Aims. We aim at studying the chemical composition of the best example of high-mass class 0 YSOs in Cygnus X (CygX-N63). As a Class 0 object, it could be expected to be the source of a hot corino region in analogy with its low/intermediate mass counterparts. As a high-mass young protostars it may instead show already signature of hot cores.
Methods. We have obtained an unbiased spectral line survey of CygX-N63 with the IRAM-30 m telescope covering 106 GHz in the atmospheric bands between 82 and 368 GHz.
Results. We identified 52 molecules. Two prebiotic molecules were found : CH_2NH (methanimine) and NH_2CHO (formamide) and some other rare molecules, such as CF^+ (fluoromethylidynium) or PN (phosphorous nitride). Spectral profiles and rotational diagrams of the molecules allow us to identify three emission regions in the protostar : the envelope, the outflow and the hot core.

Key words. massive star formation – CygX-N63

1. Introduction

The understanding of the origin and formation of high mass stars is of high importance to reveal what limits star formation and stellar masses in our Galaxy and to constrain star formation at large cosmological distances/times where only effects from massive stars can be observed. The earliest phases of the formation of massive stars are however still poorly known. When the massive protostars are evolved with a large luminosity detected in the infrared (IR), it has been relatively easy to recognize them as precursors of high-mass stars (ref...). The early, colder phases when large luminosities are not yet established, namely class 0 protostars and pre-stellar cores have been much more difficult to firmly recognized. So far only a couple of true individual massive class 0 YSOs are known, and no single true individual pre-stellar core could be so far firmly identified despite significant efforts (ref.). One of the important characteristics of luminous/evolved massive protostars is their ability to strongly reveal their chemical composition during the so-called hot core phase when the strong radiation from the protostar warms up the collapsing envelope up to ice sublimation temperatures releasing the molecular content from the grains and initiating rich gas phase chemistry. The chemical richness of hot cores has been extensively studied towards prominent targets such as the Orion hot core, or SgrB2. SgrB2 is probably the best reference source despite its large distance (7.9 kpc) as it contains several strong hot cores with an emission fully dominated by hot core emission. On the other hand its richness and its relatively large excitation temperature make it difficult to observed at low level of sensitivity due to a very high density of lines from the 3 species CH_3OH, CH_3OCH_3 and CH_3OCHO (Belloche et al.). The Orion hot core is nearby (420 pc) but it seems to be dominated by shocks due to a recent (500 yr ago) close encounter between a runaway B star (BN object) and an intermediate protostar (source I in the BN/KL region). It may not be at the end a true massive protostar. Some other well known hot cores have been studied at few kpc distances in the Galaxy (G34, ..., ref.). Hot cores are dominated by complex organic molecules (COMs) emission basically due to (successive) hydrogenations of CO leading to H_2CO, CH_3OH, and more complex hydrocarbons, most probably onto grains. Some nitrogen complex molecules are also formed on ices and revealed in hot cores such as CH_3CN or C_2H_5CN. Deuterated species from grains are observed in hot cores but at relatively low abundances. Such ice sublimation is also claimed in the so-called hot corinos towards low to intermediate mass Class 0 YSOs. The two prototypes IRAS16293 in rho Ophiuchi (125 pc) and IRAS4A in Perseus (230 pc) are indeed displaying rich emission from COMs and nitrogen complex molecules but with substantial differences in composition compared to hot cores. The level of deuteration of COMs is significantly larger reaching extremely high values for, for instance, methanol (values ...). These differences can be due to (1) different process of desorption (more outflow shocks in hot corinos); (2) different composition of ices or to (3) different time for post-desorption, warm

gas phase chemistry. All three possibilities may play a role. For instance in outflows driven by young protostars the shock layers are possibly thin with short times for warm gas phase chemistry to develop after desorption since post-shock temperatures could drop rapidly behind shocks while in hot core the strong radiation could keep warm the gas for a much longer period.

In the low-mass star formation case, pre-stellar cores are well recognized and can be studied to directly investigate the chemical composition of the so-called pristine gas. Due to non-thermal desorption, it was recently found that even the composition on ices can be traced by line emission in the millimeter range even for such cold sources (ref). In contrast, for high-mass star formation, the pre-stellar phase is much less understood and recognized. It is therefore more difficult to study gas composition at birth. It was so far claimed to be possible to get pristine gas for high-mass star formation in cold clumps and cores in the vicinity of bright IRAS massive prostars or inside the IR dark clouds (IRDCs; ref.). Deuterated species have been, for instance, claimed to be present also in pristine gas for high-mass star formation (see Fontani et al. 2006, 2011; Pillai et al. 2007). It is however difficult to be sure that these massive, starless clumps are really the direct precursors of high-mass stars.

CygX-N63 (hereafter, N63) was first discovered by Motte et al. (2007). This close object (1.4 kpc) is ideal to study the early phases of massive star formation. It is massive (M_{env}=~44 M⊙ within 2500 AU) (Duarte-Cabral et al. 2013) and features a high column density, in average 6×10^{24} cm^{-2}. Even if one takes into account the effect of the beam dilution, this value is higher by a factor of a few than the column densities observed in low-mass protostellar cores in Taurus, such as L1544 for example, which are located much closer, at 140 pc. CygX-N63 has also a more massive envelope than NGC7129 FIRS2 (Fuente et al. 2014) which is an intermediate mass Class 0 YSO.

N63 is not sub-fragmented, as showed by the dust emission, the molecular emission of ^{13}CS, OCS, D_2CO and CH_3CHO, seen with the Plateau de Bure Interferometer (PdBI) in 2012 and the presence of an outflow, pointing to one single object. It is also still young, with a total luminosity of only 350 L⊙ (Duarte-Cabral et al. 2013), which indicates that the inner protostellar embryo is still intermediate mass and not yet in the high-mass range (from its location in a $M_{\rm env}$ vs $L_{\rm bol}$ evolutionary diagram it would have a stellar mass of 1 to 1.5 M$_\odot$, see Duarte-Cabral et al. 2013) .

We present in this article an unbiased spectral survey of N63 to investigate the initial chemical conditions of high-mass star formation and trace the earliest phases of the development of a hot core. The observations and data analysis are detailed in Sect. 2. The immediate results including line identification, line fitting, excitation diagrams and simple LTE modeling results are derived in Sect. 3. These results allow us to propose a spatial decomposition of the line emissions from the source in a cold envelope and an inner hot-core like region in Sect. 4 so that detailed abundances for a large fraction of the detected species can be derived for both component of emission (cold envelope and hot core) in Sect. 5. These precise abundances allow us to discuss the composition of pristine gas in the cold envelope, as well as the pre-hot core nature of N63 (Sect. 6).

2. Observations and data analysis

We carried out an unbiased spectral survey with the IRAM-30 m telescope on Pico Veleta, Spain, towards CygX-N63, located at (RA, Dec) = (20h 40m 05.2s, 41° 32′ 12.0″). We used the EMIR

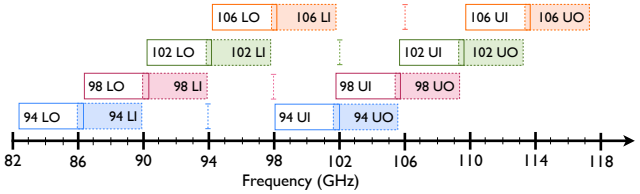


Fig. 1. Observing strategy at 3 mm. Each color represents a setting of observation, named by the central frequency. The 20 MHz shifted settings are not represented.

receiver with the FTS backend with 195 kHz of spectral resolution. The first part was observed in September 2012 at 3 mm between 82.350 and 117.500 GHz (project 013-12), at 1 mm between 201.000 and 271.159 GHz in January 2013 (project 132-12), at 2 mm between 128.000 GHz and 172.430 GHz in January 2014 (project 149-13). Complementary pool observations were made at 0.8 mm between 274.950 and 306.209 GHz in March 2014 in September 2014 and at 2 and 1 mm (project 149-13). The half power beam width varied between ~30" at 306 GHz and ~8" at 82 GHz. The spectral resolution ranged from 0.18 to 0.59 MHz, corresponding to a velocity resolution of 0.2 to 0.67 km s^{-1} (see Table 1). We used 4 settings at 0.8 mm, 9 at 1 mm, 7 at 2 mm and 4 at 3 mm, separated by 3.89 GHz to cover the band with a minimum redundancy of 2, except for the band edges which are covered once (see Figure 1). The pointing was checked every one or two hours on Uranus or K3-50A.

The system temperature varied between 72 and 1049 K because of the different weather conditions. Scans with too high system temperature were excluded. In total, a bandwidth of 181 GHz was observed for ~117.5 hours. Calibration uncertainties were determined from line observation redundancy. We compared the peak temperature, FWHM and line position of 11 lines between two observations in the same run. with two different polarizations or between two runs on the same day of observation. In each case, we chose strong lines (> 4 σ), on different parts of the spectrum, at 3, 2, 1 and 0.8 mm. Gaussian fits were made to derive the different characteristics of the lines. The error on the line intensity, FWHM and line position is respectively around 2.7%, 6.8% and 1.3%. The mean error made by doing a Gaussian fit on these lines is respectively 4.4%, 4.6% and 1.3%.

The data were reduced with the feb13b and jul14b versions of GILDAS softwares[1]. We used the 20 MHz shifted spectra to get rid of ghost lines from bright lines in the incompletely rejected sideband. Indeed, when superimposing the spectrum and the corresponding 20 MHz shifted, real lines are correctly superimposed but ghosts lines are shifted from 20 MHz, since their position is related to the setting central frequency. It was then possible to identify and exclude 83 residual lines. Artificial spikes were most of the time automatically removed when averaging redundant spectra.

All spectra corresponding to the same setting were collected. We used the procedure provided by IRAM (FtsPlatformingCorrection5.class) to solve the FTS platforming problem, occurring when assembling the three parts of each spectrum. During this phase, we determined the line positions to remove a zeroth-order baseline to each third of the spectrum. A few spectra showed waves that were removed with a 25th-order baseline.

The spectra were then averaged with the corresponding 20 MHz shifted spectra and afterwards with the overlapping spectra

[1] See http:/www.iram.fr/IRAMFR/GILDAS/ for more information.

Table 1. Parameters of the observations at the IRAM-30m telescope.

Band	Frequency	Resolution		rms	⟨rms⟩	T_{sys}	⟨HPBW⟩	⟨B_{eff}⟩	⟨F_{eff}⟩
	(GHz)	(km s^{-1})	MHz	(mK)	(mK)	(K)	(arcsec)	%	%
E0 (3 mm)	82-118	0.56	0.59	3-4	3	75-1049	26	94.5	79.3
E1 (2 mm)	128-172	0.30	0.40	3-10	4	72-539	16.8	93.5	72.9
E2 (1 mm)	201-271	0.26	0.25	8-12	9	140-373	10.3	90.5	57.5
E3 (0.8 mm)	275-368	0.22	0.20	7-28	19	80-1008	8.4	85.4	46.2

with equal weights (see Figure 1). The mean noise level was determined after this step in 4 GHz bandwidth ranges. At the end all spectra were gathered to form a unique spectrum, in order to be analyzed.

We converted the data into main-beam temperature (T_{mb}) using the forward and main-beam efficiencies (F_{eff} and B_{eff} respectively). B_{eff} was computed using the Ruze function: $B_{eff}(\lambda) = 1.2\ \epsilon \exp(-4\pi R\sigma/\lambda)^2$ with $\epsilon = 0.69$, $R\sigma = 0.07$ and λ the wavelength in mm. The values of F_{eff} given by the IRAM were interpolated to be applied to the whole spectral coverage with CASSIS.

The mean noise level is on average 3, 4, 9 and 19 mK for the 3, 2, 1 and 0.8 mm band respectively. The raw spectral resolution ranges from 0.2 at ∼ 270 GHz to 0.7 kms^{-1} at ∼ 80 GHz. These values are summarized in Table 1.

3. Results

3.1. Line identification

The analysis of the IRAM-30 m telescope spectra was performed with CASSIS[2] using the CDMS[3], the JPL[4] catalogues and some additional entries added by C. Vastel[5] for ortho and para forms of several molecules. We first searched for the known molecules in protostellar objects (see for example Caux et al. (2011)). For molecules with abundant transitions, such as methanol, dimethyl ether or methyl formate, we selected a low transition energy range, for example 0 - 50 K, and set the Einstein coefficient A_{ij} to zero. CASSIS could then display the position of the expected lines in the whole spectrum, ordered by raising A_{ij}. Each visible line was fitted with a Gaussian, using the AMOEBA Fitter (Nelder-Mead method). The energy range was then raised, 50 K by 50 K, or less if the lines were particularly numerous, until all lines were found.

For molecules with few transitions, E_{up} was set to a large value and the transitions ordered by growing E_{up}. The energy range was then reduced and A_{ij} was increased to display only visible lines. We then displayed the whole spectrum with all identified lines to find the remaining unidentified lines. For each lines, we superimposed the whole catalogues to select the most probable candidates: transitions with the lowest energy E_{up} and the highest A_{ij}. We then searched for the other expected lines of the candidate molecules to further confirm or infer the tentative line identification.

A molecule is considered as detected if it shows at least one line with a signal-to-noise ratio of 4 and if there is no unexplained missing line. In the same energy range, a line can be missing if the noise is locally higher in the spectrum, or if its Einstein coefficient is much lower than other lines. At the end of this analysis, we checked once again the whole spectrum to find unnoticed overlapping or forgotten lines.

3.2. Overall survey results

Thanks to the large spectral coverage of 181 GHz and the high sensitivity (rms ranging from 3 to 19 mK), we could detect as many as 2663 lines at a 4 σ and 3144 lines above 3 σ. The obtained dynamical range reaches ∼ 2000 from ∼ 10 mK up to 18 K.

The line density is 11, 16, 15 and 5 lines/GHz at 3, 2, 1, 0.8 mm, respectively. All families of molecules have their maximum line density at 2 mm. The global line density is 13 lines per GHz at 3 σ, a bit lower than for IRAS16293 (20 lines per GHz at 3 σ (Caux et al. 2011)) and much lower than for SgrB2(N) (102 lines per GHz at 4 σ (Belloche et al. 2013)). It is however important to note that in these two reference sources a large fraction of the detected transitions are due the 2 to 3 most abundant large COMs. The sligthly lower density of lines in CygX-N63 compared to IRAS16293 is primary due to lower intensities of lines of COMs.

We directly identified ∼ 95 % of the lines (2338 unblended lines) with a mean-beam peak temperature 4 times higher than the mean noise level in the considered band, listed in Table **??**. A hundred of weak lines remain unidentified. We have verified that there are not ghost lines. They are most probably transitions of known species lacking spectroscopic data in the databases. During the process of data analysis we, for instance, identified xx additional lines using new frequencies not yet incorporated in the databases. For the rest of the article, unless otherwise specified, we consider only the 4 sigma detections.

A total of 102 species, including 42 molecules, 7 ions, 37 rarer isotopologues and 16 deuterated species (13 molecules and 3 ions), have been identified (see Table **??**). No recombination line was found. All families of molecules are represented: complex organic molecules (COMs[6]), O-bearing, N-bearing, S-bearing and carbon chains. Some rare molecules were also identified, such as PN, CH_2NH, and the ions $HCNH^+$, and H_2COH^+. So far no detection of completely new molecules in ISM is reported but we detect for the first time in a protostar the ion CF^+ (fluoromethyliumylidene) (see Fechtenbaum et al. 2015) and we here propose the first detection of $DOCO^+$ the deuterated version of $HOCO^+$ formed from CO_2 and H_3^+ such as CO and H_3^+ to form HCO^+. The tentative detections are discussed in Section 6.

3.3. Line profiles and Gaussian fitting

Line positions, line peak intensities, FWHM and fluxes were determined using Gaussian fit and the AMOEBA fitter of CASSIS. The analysis of the spectral profiles of the unblended lines shows that the molecules can be separated into two groups: a first group with simple, relatively narrow gaussian lines and a second group

[2] See http://cassis.irap.omp.eu/ for more information.
[3] See http://www.astro.uni-koeln.de/cgi-bin/cdmssearch
[4] See http://spec.jpl.nasa.gov/
[5] See http://cassis.irap.omp.eu/?page=pleasereadme
[6] Complex Organic Molecule : Molecule with more than 6 atoms.

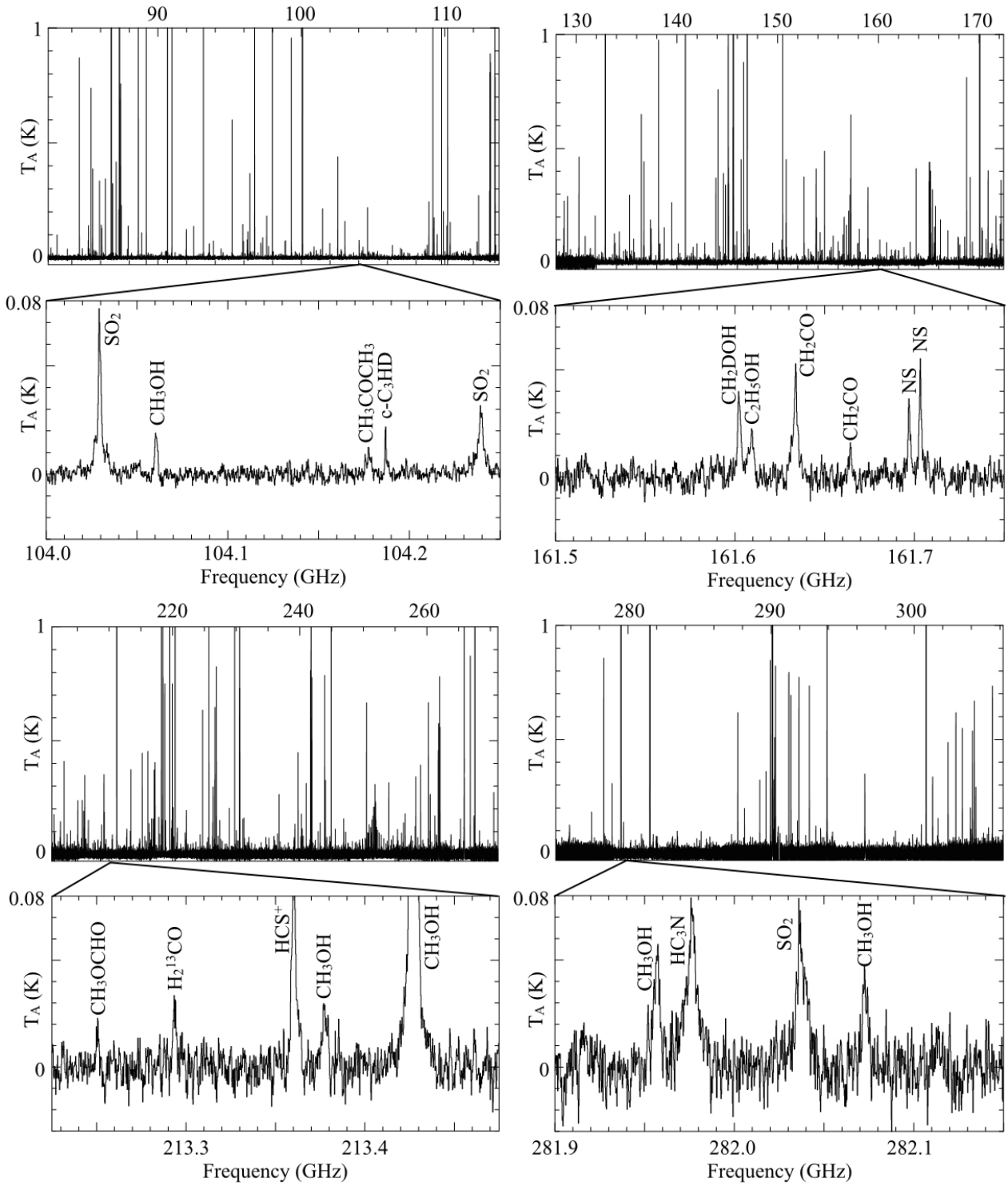


Fig. 2. The CygX-N63 spectra in the four bands of the survey. *Upper panels:* 3 mm and 2 mm bands and zoomed views of sample frequency ranges. *Lower panels:* 1 mm and 0.8 mm bands and zoomed views of sample frequency ranges.

showing broad line wings indicative of outflowing gas which are better fitted with 2 Gaussians.

Considering only lines above 4.5 σ, the first group contains 15 species: two carbon chains c-C_3H, C_4H, 3 nitrogen-bearing species HC_5N, HCCNC, N_2H^+ and a number of deuterated species DCO^+, $D^{13}CO^+$, CCD, DC_3N, CH_2DCCH, DNC, C_3HD, HDCS, N_2D^+ and NH_2D (left panels in Fig. 3 for a few examples of profiles). The lines have a mean FWHM of 2.2 ± 0.3 km s^{-1}. It is relatively narrow for a high-mass protostar, and is actually similar to linewidths observed in envelopes of low to intermediate mass protostars such as IRAS16293 Caux et al. (2011) or NGC7129 FIRS2 Fuente et al. (2014). The thinnest lines belong to ^{13}CCH with a mean FWHM of only 1.3 km s^{-1}. No line seems to be spectrally unresolved.

In the second group the spectral profiles are better fitted with a narrow and a broad gaussians at the same v_{LSR}. This concerns a

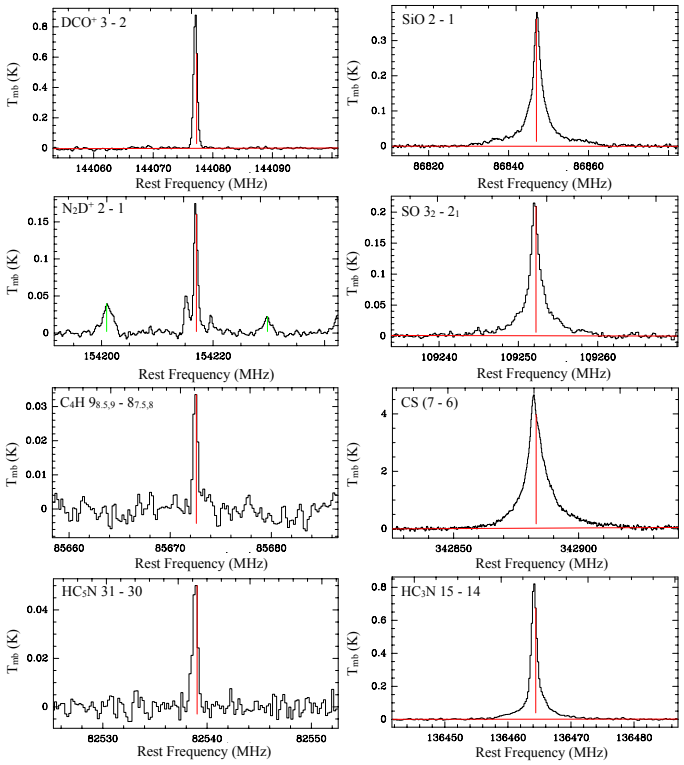


Fig. 3. Representative examples of transitions with narrow line profiles (left column) from the envelope and with broad line profiles (right column) from the outflow. The width of the windows is 100 km s^{-1}. The broad components are clearly associated with large velocity gas, ie to the outflow. Red lines show the rest frequency of the transitions.

large fraction of the detected species with 43 different molecules and 384 lines even if a large fraction of them have still relatively narrow lines with only slightly improved fit adding a broad component. The mean FWHM of the narrow and the broad components are found to be 2.6 ± 0.2 km.s^{-1} and 8.9 ± 0.5 km s^{-1}, respectively. The right panel of figure 3 shows examples of profiles of molecules in this group. SO_2, SO and SiO show the largest lines with a mean FWHM of the broad component of 13.1 ± 2.7, 15.4 ± 0.1 and 27.4 ± 0.2 km s^{-1}, respectively.

Several molecules in this group are known tracers of outflows, such as SiO, SO or CS. As a first approximation, we can therefore conclude that all molecules of this group are tracers of the outflow. We note however that a large fraction of the lines stays relatively narrow and that the narrow component average linewidth is similar to the linewidth of single component species from the envelope. It suggests that a large fraction of the second group species are actually tracing the envelope with an additional component form the outflow.

Finally, a few of the most abundant species have bright lines which display more complex profiles with for instance absorption features. These species are CO, CH_3OH, o-H_2CO, CS, HCN, HNC, HCO^+ and o-H_2S. For simplicity and because some of them may be due to off position emission, we have excluded these lines from the analysis.

3.4. Population diagrams

The present spectral survey provides the possibility to detect a large number of transitions per species to build population diagrams.

In the optically thin case, a simple linear fit to the populations of the detected levels provides a good estimate of the excitation temperature and of the column density. For the most abundant species which tends to be optically thick, we have use the brightness ratios between main and rarer isotopologues to correct for opacity using the below formalism.

A population diagram is a plot of $\ln(N_u/g_u)$ as a function of E_u/kT_{ex}, following the relation :

$$\ln\frac{N_u}{g_u} = \ln N_{tot} - \ln Q(T_{ex}) - \frac{E_u}{kT_{ex}}$$

where N_u is the column density of the energy level u, g_u is the statistical weight of this level, and Q is the partition function[7]. N_u is directly related to the integrated area of the line W by :

$$N_u = W \times \frac{8\pi k\nu^2}{hc^3 A_{ul}} \times C_{tau}$$

with A_{ul} the Einstein coefficient and C_{tau} the optical depth correction factor. The total column density and the excitation temperature, which is equal to the kinetic temperature if the LTE is established, are then given by CASSIS. For molecules with spectra displaying two spectral components, we plotted separately the population diagrams for the narrow and the broad component.

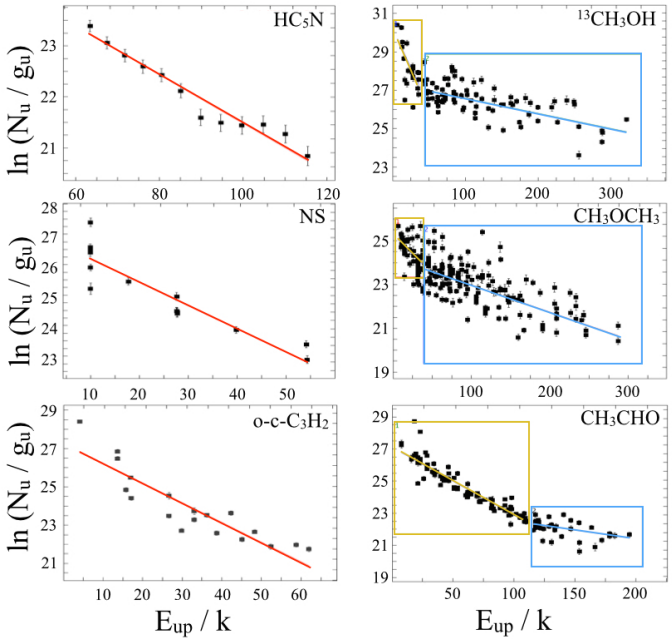


Fig. 4. Population diagrams of scarce data for some cold gas tracers (HC_5N, NS, o-c-C_3H_2; left column), and of rich spectra for COMs ($^{13}CH_3OH$, CH_3OCH_3, CH_3CHO; right column).

The excitation diagrams can be directly used to derive the excitation temperatures and column densities of each species when one assumes LTE conditions and that the transitions are optically thin. Since the typical densities are here high (higher than 10^5 cm^{-3}, see Sect. 4.2) we can easily consider that NLTE effects are negligible.

Such a detailed and precise analysis could be achieved for as many as 77 species. The obtained excitation temperature, total column densities are listed in Table **??**.

[7] See *Formalism for the CASSIS software by Charlotte Vastel, for more information*

4. Origin of line emission

4.1. Linewidth, excitation temperatures and velocity components

In Fig. 5-left we have plotted the linewidth from Sect. 3.3 versus the excitation temperature derived in Sect. 3.4 for single component species as well as for the species for which a broad and a narrow gaussian component have been fitted (two points on the plot). Species with two excitation temperature components in their population diagram are displayed with two points at the same linewidth. It is stricking to see that there is a clear clustering of species at low T_{ex} below 25 K and low linewidth at $\sim$ 2 km/s (light green shaded square). These species are tracing the bulk of the cold envelope. Above this group with large linewidths up to more than 20 km/s for SiO lies the outflow tracers and species with a broad component which trace outflowing gas. A third group comprising mostly complex organic molecules (hereafter COMs) spreads from the location of the cold gas up to above 100 K (light red shaded square). This probably traces the warmest parts of the envelope, i.e. a nascent hot core in the innest regions of the envelope. It is striking to see that there is no well separated clusters of points at cold and hot gas locii, and that it is more a soft transition from cold gas to hot gas with a significant population of species which display intermediate excitation temperature between 25 and 100 K. Methanol, CH_3CN, and CH_3OCHO are the best tracers of the hot core region even if their excitation diagram also include a colder component from the external envelope. Methanol and CH_3CN have a clear contribution from the outflow while CH_3OCHO displays a single component profile of with a linewidth of the order of 3 km/s only. The intermediate temperature region is made of complex saturated molecules, mostly COMs, CH_3OCH_3, C_2H_5OH, C_2H_5CN, CH_3CHO as well as a few less saturated molecules such as CH_3CCH and CH_2CO, and some simpler species such as OCS, H_2S, SO_2 which are usually the narrow component of an outflow tracer. These latter species could actually trace the outflow walls in the envelope.

Fig. 5-right displays the distribution of rest velocities V_{LSR} versus the linewidth FWHM for the brightest transitions of the most abundant species. A first group of transitions referred to as type I is found to cluster at a small linewidth of $\sim$ 2 km/s and an average V_{LSR} equal to -4.4 km/s. It roughly corresponds to the cold envelope group in Fig. 5-left and to the species with simple, narrow line profile discussed in Sect. 3.3. A second type of lines, type II, appears at a larger linewidth (centered at 4.1 km/s) and at a rest velocity slightly shifted down to -5.1 km/s. This second group clearly corresponds to the complex molecules of the hot core region discussed above. The clear hot core species are shown in the upper panels while the less saturated, intermediate T_{ex} species are shown in the 2 lowest panels. We see that the intermediate T_{ex} species are also found intermediate in the $dV-V_{LSR}$ plot since they tend to fill the region between the locii of type I and II lines (cold and hot envelope). It suggests that the soft transition between the cold envelope to the inner hottest regions is accompanied with a progressive velocity shift in V_{LSR} (of 0.7 km/s) and of a slight increase of linewidth from 2 to 4.1 km/s. We note that this grouping based on V_{LSR} vs linewidth makes possible to recognize some additional candidates to trace the intermediate warm region for which excitation diagram could not be derived such as HCOOH, NH_2CHO, or HCS^+. A last type of lines show a much more dispersed distribution of points and is not centered on any particular location in the $dV-V_{LSR}$ plot. These species actually correspond to the outflow lines discussed above in Sect. 3.3 and are expected to show such a large dispersion in their line properties.

We note that such two groupings in a $dV-V_{LSR}$ plot with a velocity shift between the two groups have also been obtained for IRAS16293 in Caux et al. (2011) for which the obvious interpretation is that the shift in velocity is due to a slight difference in V_{LSR} between the two components A and B of the well resolved known binarity system. We could therefore speculate whether CygX-N63 is an unresolved binary showing a similar V_{LSR} shift. CygX-N63 has been observed at high spatial resolution down to 0.3″ (500 AU) without any sign of multiplicity, i.e. below the derived size of the hot core region. Virtually all line emissions showing the V_{LSR} difference are not coming from these innermost regions and would not show the velocity shift from such a tight binary system. The binary interpretation would also not explain the soft transition between the two groups. Finally the observed species dichotomy between the two groups is exactly what is expected for a cold outer component and a hot inner component of the envelope.We therefore exclude the binary interpretation for CygX-N63 and adopt an interpretation with a single collapsing envelope containing two line emission components with slightly different kinematic and chemical properties. The larger linewidth of the type II species suggests these species are either contaminated by the outflow (see below) and are situated in the most inner regions of the envelope where velocity dispersion is expected to be larger due larger keplerian or collapse velocities. The small shift in V_{LSR} between the two main groups might be seen as surprising. We note however that the shift is small compared to the linewidths, being only 1/6 of the linewidth of the inner regions (type II lines) and 1/3 of the outer cold envelope (type I lines). We will discuss further the possible origin of these two components in the discussion.

For species affected by outflowing gas, we note on the one hand that the gaussian decomposition may have cause a part of the strong dichotomy in linewidths between narrow and broad components leading to the possible interpretation that some outflow tracers may also originate from the warm envelope. On the other hand it is striking to see that this decomposition makes that some additional species are possibly also emerging from a warm inner region. It might therefore well be that these species are indeed composed from two separated components, one from the outflowing gas, and one from the inner warm regions above the hottest regions. A more subtle picture could also be that the hottest inner regions have their primary origin from the existence of inner outflow cavities, providing favored spread of the protostar radiation to larger radii to increase the size of the radiatively heated inner region. This would explain the close connection and soft transition between clear hot core species emission such as COMs and clear outflowing gas tracers such as SO, SiO, or CS. It is for instance well accepted that the formation of UC-HII regions from massive protostars develop first through outflow cavities (ref.). This might be a similar process which can drawn best the early spread of hot core like regions. We therefore, in the following, adopt the gaussian fitting results as a way to decompose contribution from outflowing gas and more quiet (in terms of velocity dispersion) warm and hot inner regions of the envelope.

4.2. Simple line modeling and emission sizes

The envelope of N63 is on average very dense from 10^6 to $> 10^8$ cm^{-3} and the molecular emissions are therefore expected to be at the local thermodynamic equilibrium (LTE). If the corresponding excitation temperature T_{ex} is known one can derive either the total column density of the detected species if the

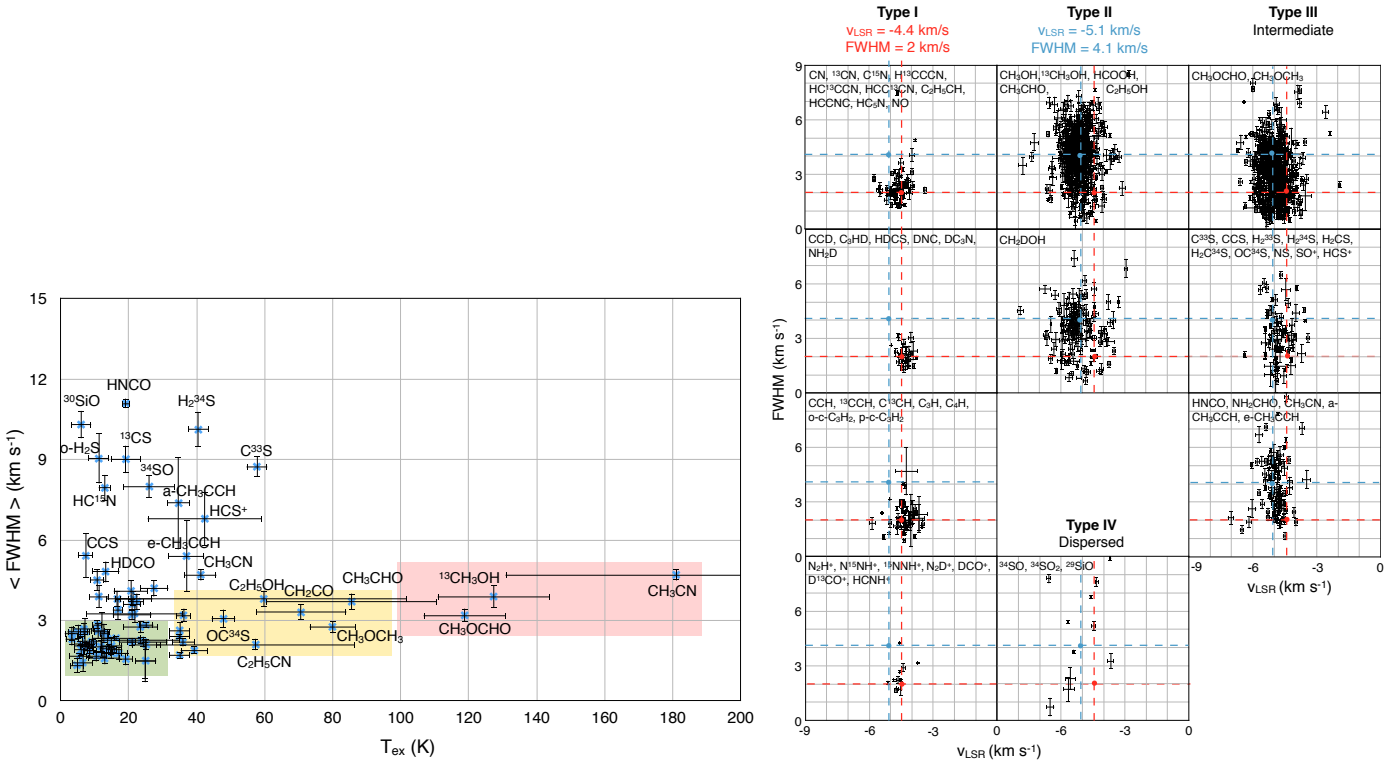


Fig. 5. Linewidth versus T_{ex} plot for all species for which a population diagram could be build. There are two groups of species. The outflow tracer have large linewidths, typically larger than 2.5 km/s while the envelope tracers are narrower (see Sect. 3.3). Among the envelope tracers, there is a clear trend of an increase of the linewidth as T_{ex} increases.

emission is optically thin, or the emission size if the emission is optically thick. One advantage of a sensitive unbiased spectral survey is that one can systematically detect lines from all abundant species (bright lines) as well as their isotopologues when they are optically thick. In other words, for all optically thick emission from an abundant species with bright enough lines, there is virtually always a rarer isotopologue to be detected if the main species is optically thick. In reverse if a relatively abundant isotopologue is not detected the obtained constrains are strong enough to determine whether or not the main isotopologue is optically thin.

A number of typical emission sizes could be directly derived for optically thick lines of the most abundant species. These sizes vary from a fraction of arcsec to several arcsec and should indicate the spatial origin of the different species. We use a simple modeling in CASSIS to constrain these emission sizes for the most abundant species with optically thick lines.

4.3. Methanol emission

A large number of methanol transitions are well detected with for some of them the detection of the same transitions from rarer isotopologues. We use the 12 cleanest lines of methanol with simultaneous detection of the rare isotopologue $^{13}CH_3OH$ for the same transition to have a simple model of emission to discuss the sizes of emission. We obtain good modelings of these pairs of lines with emission sizes between 0.25 and 0.45″ and consistent column densities of methanol of $\sim 1.5 \times 10^{16}$ cm^{-2} (inside the average 0.36″) for all lines with relatively large energies ($E_{up} > 150$ K), and for which we adopt the excitation temperature $T_{ex} = 140$ K derived for the hot component of the excitation diagram discussed in Sect. 3.4. For the 3 pairs of lines below 150 K but higher than 20K, we get a similar good fit quality with a small, hot region (average size of 0.45″ and column density of $\sim 2 \times 10^{16}$ cm^{-2} in 0.45″) with $T_{ex} = 140$ K than with a larger size region of 2 to 5″ using the low temperature T_{ex} of 14 K obtained for the second component of the excitation diagram. We could best model these intermediate energy lines as due to an intermediate, warm region above the hot inner region. Using an intermediate T_{ex} of 40 K, we obtain a best fit for these 3 pairs which corresponds to a size of 1.5″. The lowest energy transition of methanol (E_{up}=13K) cannot be explained by the single contribution of the inner hot region. It definitely requires the addition of a cold component with large emission size. Using $T_{ex} = 14$ K the best fit size is as large as 20″ but this size is not well constrained since the obtained opacity of the main isotopologues is moderate. Acceptable fits are obtained with sizes down to a few arcsec compatible with the size of the cold envelope.

We conclude that the two temperature behavior of the excitation temperature diagram of methanol discussed in the previous section is best interpreted as due to the superposition of two different regions: a hot inner region of size of 0.36″ ($\sim$ 500 AU) with T_{ex} ~140 K and a colder, more extended (few arcsec size) component of unclear nature. Some hints for the existence of a warm emission surrounding the hot inner region are also identified. From the 3 pairs of lines with E_{up} betweeen 20 and 150 K, we find that this component has systematically a larger column density of methanol which is best interpreted as due to a larger emission size with lower T_{ex}. Using the best fit for an intermediate T_{ex} of 40 K of size of 1.5″ we get an average column density of the order of 5×10^{15} cm^{-2} inside 1.5″ ($\sim$ 2000 AU).

4.4. Emission from extended, bright lines: HNC, CS, H_2CO, HCO^+, DCO^+

The brightest lines for which we get optically thick emission in some lines are all rather abundant species and therefore tend to be the ones expected to be extended with significant/dominant emission from the surroundings of N63 such as HCO^+ for instance. By modeling these lines, we indeed get large emission sizes of more than 10″ for best fits. These lines includes lines from HNC, CS, H2CO, and HCO^+. DCO^+ is intermediate with an emission size which can be as large as 10″ from the fit, but which is still well reproduced with lower sizes down 1 − 2″ (the size is not well constrained due to levels of opacity which stays relatively low).

4.5. Intermediate sizes for warm excitations from OCS, H_2S

A group of species which are found to be optically thick in their main isotopologues and bright enough to have rarer isotopologues which are detected are found to be best modeled with warm (T_{ex} of the order of 40 K derived from their excitation diagram) regions of sizes of 1 − 2″. These species comprises OCS and H_2S. They may originate from the same region than the warm CH_3OH component discussed above in Sect. 4.3.

4.6. A stratified envelope from cold external envelope to hot-core like inner regions

The envelope of CygX-N63 is compact. In Duarte-Cabral et al. (2013), the best fit of the SED and source extraction in the Herschel map is obtained for 44 $M_\odot$ inside a FWHM size of only 2500 AU (assuming a gaussian profile, we expect 90 % of the total mass of 44 $M_\odot$ inside an effective outer radius[8] of 2070 AU). In Motte et al. (2007) the best estimate of the total mass of the envelope was found to be 58 $M_\odot$. Since the precise value of the size of the envelope in uncertain we here adopt an outer radius of ∼ 3000 AU which corresponds to the radius which should contain 58 $M_\odot$ assuming a r^{-2} density profile and extrapolating from the above effective radius of 2070 AU and mass of 44 $M_\odot$ from Duarte-Cabral et al. (2013).

A total of 15 species with narrow line profiles (type I lines) are the best candidates to originate from the bulk of the cold dust envelope surrounding CygX-N63. Their excitation temperature when it can be derived are consistent with the dust temperature of 17 K, and they have the narrowest line profile. Among these 15 species, only DCO^+ is found to be partly optically thick with well detected isotopologue lines and could therefore be used to derived an emission size from simple LTE modeling. Good fits are obtained for sizes ranging from 1 to 10″ which are therefore consistent with the adopted envelope outer diameter of 6000 AU (4.3″). We therefore adopt as emission origin for these narrow line species the cold envelope which has a mass of 58 $M_\odot$ inside a radius of 3000 AU.

The COMs are clearly found to display a hot component in their excitation diagrams indicating that a part of the envelope is significantly hotter that the average dust temperature of 17 K (Duarte-Cabral et al. 2013) which is best interpreted as an inner hot core region. The best estimate of the size of this hot core is obtained from the LTE modeling of methanol and isotopologue lines with a size of ∼ 0.36″ for the component at ∼ 140 K (see Sect. 4.3). The other derivation of sizes from modeling of COM lines are all consistent with this size. We therefore adopt for the hot-core region a size of 0.36″ (∼ 500 AU). Assuming a r^{-2} density profile, we then derive a total mass of 4.8 $M_\odot$ inside this hot core.

We noted that virtually all the species tracing the hottest gas tend to show a population diagram with two slopes, corresponding to two excitation temperatures: 21 K and 127 K on average. It is the case for all the oxygen bearing COMs: CH_3OH, $^{13}CH_3OH$, CH_3OCH_3, CH_3OCHO, CH_3CHO, C_2H_5OH, possibly for C_2H_5CN, CH_2DOH, HCOOH and CH_2CO, and for CH_3CN. Thanks to isotopologues we have checked that this behavior is mostly not due to opacity effects. This is for instance the case for $^{13}CH_3OH$ and CH_2DOH (see Fig. 4) which have similar two slopes than the main species (methanol).

A soft transition between hot core lines and cold envelope lines is observed in the linewidth, $dV-V_{LSR}$, and $dV-T_{ex}$ distributions (Sect. 4.1 and Fig. 5). It suggests that the lowest energy transitions of all COMs as well as some few other species are tracing an intermediate warm or lukewarm region which is most probably located above the hot core. We will use for this lukewarm region an intermediate size of 1.5″ (2000 AU) which is only slightly suggested by the LTE modeling of OCS, H_2S, and of the cold component of the CH_3OH lines. This lukewarm region would then contain of the order of 20 $M_\odot$ of gas.

5. Column densities of the detected species

5.1. Column densities of the detected species

We used CASSIS to derive the column densities thanks to population diagrams for a large number of species. We assumed the local thermodynamical equilibrium (LTE) and neglected the cosmological background. The derivation of the column densities for CH_3OH, CO, CCH, CS, H_2CS, HCO^+, H_2CO, SiO, SO_2, HCN, HNC, HC_3N and N_2H^+ is based on population diagrams of their rare isotopologues. When several rare isotopologues are available, the listed column density is an average. We used the isotopic ratios listed in Table 2.

When the population diagram was inconclusive (not enough lines or too noisy points due to weak lines), we used the LTE model of CASSIS to fit the lines as described below. The optically thick lines, identified thanks to the isotopologues, were excluded. The LTE model was also used for each molecule to check that all lines are optically thin. This method is based on a Jython script provided by CASSIS which minimizes the χ^2 to find the best parameters to adjust the observations. With a spectrum i of N points, the χ^2 is derived as:

$$\chi^2_i = \sum_{j=1}^{N} \frac{(I_{obs,j} - I_{model,j})^2}{rms_i^2 + cal_i^2 (I_{obs,j} - I_{cont,j)^2}}$$

where I_{obs} and I_{model} are respectively the observed and the modeled intensities. I_{cont} is the continuum intensity, cal_i the calibration factor for the spectrum i, N is the total number of points of the spectrum. The reduced χ^2 is the calculated as following:

$$\chi^2_{red} = \frac{1}{N_{spectra}} \sum_{i=1}^{N_{spectra}} \frac{\chi^2_i}{\frac{N}{N_{ind}} - dof}$$

with $N_{spectra}$ the number of spectra, N_{ind} the number of independent points and dof the degree of freedom. The adjustable parameters are the column density, temperature, FWHM, size of the source and v_{LSR}. CASSIS takes also into account the beam size variation as a function of the frequency.

[8] $R_{eff} = 1.95 \times \sigma$ with $\sigma = FWHM/\sqrt{8 \times ln(2)}$

Table 2. Isotopic ratios for the Cygnus-X region at ~ 8 kpc of the galactic center (Wilson & Rood 1994).

Ratio	Value	Ratio	Value
^{32}S / ^{34}S	22	^{16}O / ^{18}O	531 ± 182
^{32}S / ^{33}S	127	^{16}O / ^{17}O	1938 ± 182
^{12}C / ^{13}C	70.6 ± 29	^{28}Si / ^{30}Si	~ 14
^{14}N / ^{15}N	448 ± 137	^{28}Si / ^{29}Si	~ 13

5.2. Determination of the total H_2 column density and of average abundances

We use the constraints on the total mass of the CygX-N63 envelope from the dust continuum. Based on studies by Motte et al. (2007); Bontemps et al. (2010); Duarte-Cabral et al. (2013) we adopt a total mass of the envelope of 58 $M_\odot$ inside a radius of 3000 AU, the average column density is then $n_{H_2} = 4.7 \times 10^{24}$ cm^{-2}.

In order to scale this mass to smaller size regions for the inner envelope, we will use a typical r^{-2} density profile. For the hot core like inner region of 0.36″ size (~ 250 AU radius), for instance, we consider a mass of 4.8 $M_\odot$ leading to an average column density $n_{H_2} = 5.6 \times 10^{25}$ cm^{-2}.

We use these reference total column densities to derive all the abundances listed in Tab. **??**.

6. Discussion

6.1. A cold and highly depleted envelope

Thanks to the present unbiased survey we have derived the column densities of a large number of species. In Fig. **??** we show the global abundances (averaged over the entire envelope) in CygX-N63 compared with those of two prototypical low-mass dark clouds TMC1 and L134, of the prototypical hot corino IRAS16293, and of the classical hot core G34 for all species with average abundances larger than 10^{-8} in CygX-N63, and excluding the (too) dominant species CO.

It is immediately clear that in absolute values, the abundances in CygX-N63 are low compared to all other objects including low-mass dark clouds. We propose that it is due to high level of average depletion. The envelope of CygX-N63 has an exceptionally high average density n_{H2} of 7.9×10^7 cm^{-3} for 58 $M_\odot$ inside a radius of only 3000 AU. As a comparison such a high density is obtained in a low-mass protostellar object inside a much smaller region of 100−200 AU size (e.g. Hincelin et al. 2013). At these high densities molecular depletion onto grains is expected to be extremely high if dust temperature stays low. We estimated the global CO depletion using the C^{17}O lines which are found to be optically thin such as in Bacmann et al. (2002). We get a total depletion factor of 16 which is the ratio between the expected column density of C^{17}O for an isotope $^{17}O/^{16}O$ ratio of ~ 1/2000 and a total abundance of CO of 2×10^{-5}, and the observed C^{17}O column density. It shows that N63 is indeed dominated by an amount of gas which is depleted with most of the molecules stored on the grains. It also suggests that the bulk of the gas stays cold, and below the CO desorption temperature, ie below 20-25 K. It is compatible with the effective dust temperature of 17 K derived from SED fitting (Duarte-Cabral et al. 2013). The large depletion factor could have make difficult the detection of any molecule from the cold gas. Fortunately the total column density of such a massive envelope is large enough to compensate for the low gas phase abundances. The total column density reaches 4.7×10^{24} cm^{-2} inside the radius of 3000 AU (4.3″diameter), and 1.4×10^{23} cm^{-2} averaged in the IRAM 30m beam at 100 GHz (~25″). With a typical sensitivity to molecular column densities of ~ 10^{12} cm^{-2} with the IRAM 30m, we can thus probe abundances as low as a few times 10^{-12} which is 8 orders of magnitude below the elemental abundances of the CNO group (e.g. Jenkins 2009), and 3 to 4 orders of magnitude below the typical abundances in pre-stellar cores and dark clouds.

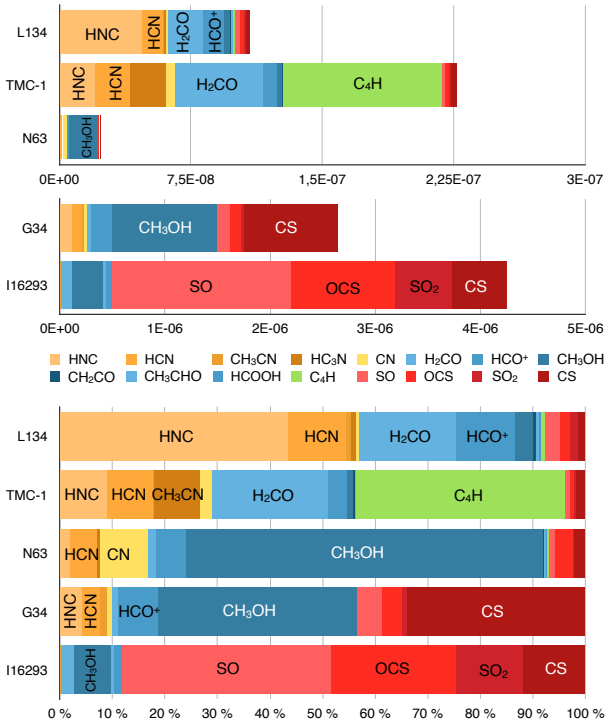


Fig. 6. Up: Abundances of all species except CO in L134, TMC-1 and N63 on a linear scale up to 3×10^{-7} cm^{-3} and in IRAS16293 and G34 up to 5×10^{-6} cm^{-3}. N-bearing species are represented in shades of orange, O-bearing species in blue, carbon chains in green and sulphur-bearing species in red. **Down:** The same abundances are shown in percentages of the total abundances of the displayed species. A global evolutionary trend of a strong decrease of the fraction of N-bearing species and of a strong increase of S-bearing species is shown.

6.2. Differentiation in global abundances

Due to depletion and with values of a few times 10^{-8}, abundances in CygX-N63 are a factor of 10 lower than in TMC1 and L134 and 1000 times lower than in chemically rich hot cores and hot corinos. It is the extremely large column density of gas in CygX-N63 which makes that we can still detect virtually all the species detected in these reference objects.

In Fig. 6 we can compare in details the obtained global abundances with those of the hot core and of the hot corino. In the down panel, the abundances are displayed as fractions of the total amount of plotted species. N-bearing molecules are shown in brown, O-bearing molecules in shades of blue, S-bearing molecules in red and carbon chains in green. We see that if we forget about depletion, the composition of CygX-N63 is actually close to those of the dark clouds and of the hot core G34 while it seems to differ significantly from the composition of the hot corino IRAS16293. Both CygX-N63 and G34 have large fractions of HNC, HCN, and HCO^+ while these species are not

dominant at all in IRAS16293. IRAS16293 is instead dominated by S-bearing species. CygX-N63 also shows strong similarities with dark clouds with a similar fraction of N-bearing molecules. Since N-bearing molecules (such as N_2H^+, CN) are known to be the last species to deplete onto grains, these similarities with dark clouds may be due to the still large cold and depleted envelope of CygX-N63 which did not evolve chemically yet. In contrast, the large fraction of S- and COMs in IRAS16293 indicates that this source is dominated by warm and hot gas where ice sublimation has occurred revealing grain chemistry in full in the gas phase. The absolute abundance of N-bearing species in IRAS16293 are indeed similar to those of CygX-N63 such as if the original N-bearing species in IRAS16293 are still present and if it is more the overwhelming from ice sublimation species which explains the difference. IRAS16293 would therefore be a more evolved protostar than CygX-N63. Interestingly enough the hot core G34 which may be seen as an even more evolved protostellar object since it has a complete developed hot core does not show such a large excess of S-bearing species. More precisely it does not show large abundances of SO and SO_2. Since SO and SO_2 are actually tracers of the outflowing gas, we could wonder whether the main origin of strong chemical differences between CygX-N63/G34 and IRAS16293 is not due to a much stronger chemical influence of the outflow in IRAS16293 compared to CygX-N63 and G34. And the chemical difference between the dark clouds/CygX-N63 and IRAS16293/G34 would be primarily due to evolution with the former sources still dominated by a cold envelope and the latter dominated by warm, hot gas with desorbed ices revealing ice chemistry compounds.

We show in Fig. 7 more details of the chemical compositions of the five sources. Additional chemical differences can be identified. For N-bearing species we see that for CygX-N63, a large amount of CN is present. In G34 CN is also present in addition to HCN and HNC but there is also a significant contribution from CH_3CN. In IRAS16293, CH_3CN is even more dominant. For S-bearing species, we note that CS is the main species in G34 while in IRAS16293 it is SO and SO_2. Dark clouds and CygX-N63 are very similar with similar fractions of CS, OCS and SO/SO_2. CygX-N63 appears with an intermediate composition with a significant amount of S-bearing species and COMs (CH_3OH, see Fig. 8) and at the same time with some N-bearing species such as CN, HNC and HCN. Finally for O-bearing species not considering the dominating CH_3OH (in CygX-N63 , IRAS16293, and G34) H_2CO is dominant for dark clouds due to its formation route in gas phase and is much less present in relative fraction in more evolved sources (see also Fig. 8). This is opposed to the global behavior of abundance of CH_3OH which clearly increases with time. This probably reflects the conversion of H_2CO into CH_3OH with time (see Sect. 6.7 for a more detailed discussion of COMs evolution and formation).

From global abundances, we therefore see that CygX-N63 appears intermediate between dark clouds and the hot core G34 and that CygX-N63 does not seem to show strong similarities with hot corinos. At least it does not display signs for a strong influence of its outflow on the chemistry with a moderated amount of S-bearing species and especially of SO/SO_2.

6.3. Properties of the pristine cold gas

A list of 19 species are found to be dominated by emission from the cold envelope and can therefore serve as molecular probe for this pristine gas. These species are NH_2D, CH_2NH, HCO, N_2H^+, DCO^+, N_2D^+, HC_5N, $HCNH^+$, DCN, C_3H, C_3H_2, C_3HD, HOCN, NS, HDCS, SO^+, C_4H, HCCNC, and DC_3N.

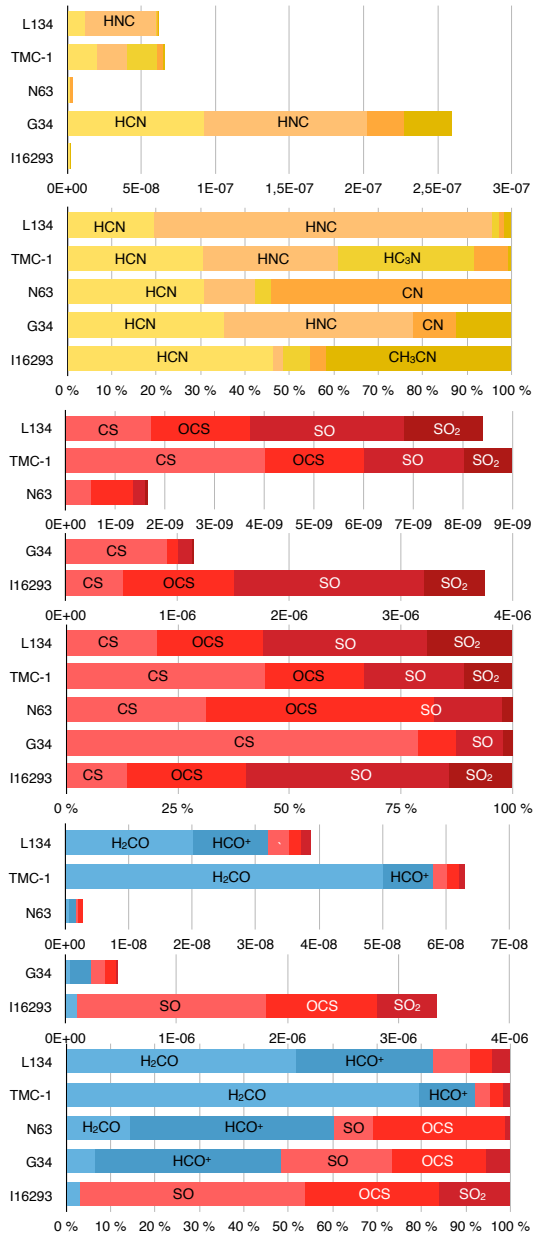


Fig. 7. Top panels: Nitrogen reservoirs in L134, TMC-1, CygX-N63, IRAS16293 and G34 as absolute abundances and as fraction of plotted species. **Middle panels:** Sulphur reservoirs in L134, TMC-1, CygX-N63, IRAS16293 and G34 as absolute abundances and as fraction of plotted species. The abundances of C_3S, H_2CS and HCS^+ are unknown in IRAS16293 and the abundances of C_3S, H_2S and HCS^+ are unknown in G34. **Bottom panels:** Oxygen reservoirs, excluding CO and methanol as absolute abundances and as fraction of plotted species.

Some additional species are also tracing large scale dense gas and are much less dominated by the dense enveloppe, it comprises N_2H^+, HNC, H_2CO, HC_3N.

Among the 19 best candidates to be uniquely cold gas tracers, we find very large fractions of N bearing ($\sim$ 60 %; 11/19) and of deuterated species($\sim$ 50 %; 10/19). These large fractions confirms the proposed picture that they trace cold and dense gas since N-bearing molecules are known to be the least affected by depletion and the abundances of deuterated species are increased in CO depleted gas. The 5 remaining species (non N-bearing and

not deuterated) are HCO, C_3H, C_3H_2, C_4H and SO^+. The formyl radical HCO has recently been shown to be present in cold dense gas. It has been proposed to be a probable precursor of COMs on grains and may come in cold gas from non thermal desorption (see Agúndez et al. 2015). C_3H, C_3H_2, C_4H are the most abundant carbon chain species and are also expected to be present in cold dense gas but more in slightly warm gas as the result of the so-called warm carbon chains chemistry (Sakai et al. 2008). They would form after the desorption of CH_4 from grains at temperatures of the order of 25 to 30 K. Interestingly enough both HCO and CH_4 are indeed among the first species to desorb from grains at temperature below or close to 30 K (see the list of desorption temperatures in Garrod 2013). It therefore suggests that even if the bulk of the cold gas has to stay below 20 K to explain the average high depletion level, a significant part of the envelope is probably warmer in the 25 - 30 K range to explain the presence of HCO and of carbon chains in the envelope. We will further discuss the presence of a lukewarm layer in the envelope of CygX-N63 in Sect. 6.5 below. SO^+ is more a tracer of PDR than of cold dense gas and could such as CF^+ traces the X-ray illuminated outflow walls (see Fechtenbaum et al. 2014) with a possible contribution of an external PDR. The SO^+ is also a weak line (22 mK) and the linewidth is therefore uncertain. Other species with larger linewidths and with complex line profiles are expected to be present in the cold phase but their identification is more difficult due to the difficulties to separate the different contributions from the outflow walls, and from the hot core.

The large fraction of deuterated species in the cold gas is expected for highly depleted gas since differentiation occurs only for low gas phase abundance of CO. The deuteration levels are found to range from 0.1 to a few percent with DCN, N_2D^+, DC_3N having the lowest levels (0.11 to 0.65 %) while C_3HD, HDCS, and DCO^+ have the largest ranging from 2.4 to 10 %. These values tend to be lower than in dark clouds and in hot corinos such as if the time at low temperature and high levels of depletion to get deuteration has been shorter for CygX-N63 than in low-mass star formation. Alternatively since a part of the gas has already been warmed up (see above) with some desorbed CO the deuteration levels may have already started to decrease.

The above prime molecular species to trace the cold envelope are very interesting since they may trace the molecular abundance of the original gas forming CygX-N63. It can be considered as pristine gas since it has not been processed by radiation from the protostar or by shocks of the outflow, and the increase of density is recent and still limited. It is important since the initial composition of gas for high-mass star formation is not known. We see that N-bearing molecules dominates the gas phase and may therefore play a limited role to the chemistry on grains except for NH_3 which is known to be one of the primary ice content. Also deuterated molecules are abundant as expected but the level of deuteration seems to be lower than in low-mass protostellar envelopes despite the high level of depletion.

Among the above prime molecular species to trace the cold envelope, some have really small linewidth down to $\sim$ 1.7 km/s. The two species showing such a small linewidth while having strong enough lines to ensure a reliable measure of the linewidth are DCO^+ and N_2D^+. They are both deuterated ions. Interestingly enough such a linewidth is actually very similar to the linewidth reported in the low-mass Class 0 IRAS16293 (Caux et al. 2011). This is surprising since the mass enclosed in the CygX-N63 envelope is significantly larger than in IRAS16293 (of the order of a factor of 10 larger). Similarly the smallest linewidths towards the intermediate-mass Class 0s NGC7129 FIRS2 is also similar (Fuente et al. 2014). It is like if the typical velocity dispersion in the envelopes of class 0 objects does not depend on the enclosed mass. Also such a weak velocity field even if fully interpretated as isotrope turbulence may not be enough to explain a large effective Jeans mass at birth. Alternatively Caux et al. (2011) proposed that the velocity dispersion would reflect the keplerian velocity and could be used to determine a dynamical mass. Using the effective radius of the bulk of cold gas of 3000 AU, we obtain a dynamical mass of only 1.3 $M_\odot$ inside 3000 AU which is believed to enclose a mass of 58 $M_\odot$ (neglecting the mass of the central protostellar embryo). The velocities in the cold envelope are therefore found to be clearly sub-keplerian, by a factor $\sim$ 7. Also we note that the narrowest lines are systematically ions while neutral species tend to have broader profiles. The averaged linewidth of the 3 brightest neutral species (NH_2D, CH_2NH, and NS) is 2.35 km/s leading to a dynamical mass of 2.5 $M_\odot$ and velocities then being sub-keplerian by a factor of $\sim$ 5. The velocity shift between ions and neutral is pointing to a significant effect of magnetic field with a possible effective magnetic breaking acting directly on ions and indirectly on neutrals through ions-neutral friction. The sub-keplerian nature of the velocity field is actually expected for a collapsing envelope not dominated by rotation and for which magnetic field dissipate angular momentum through magnetic breaking. Magnetic breaking has even been recognized as a necessary ingredient to explain formation of massive stars by increasing accretion rates and accretion luminosities to warm up collapsing gas to avoid fragmentation (Commerçon et al. 2011).

6.4. A hot core in the making

It is striking to see that while the overall molecular emission of CygX-N63 is dominated by the high average depletion level due to a large fraction of cold gas, there is also clear signs of the existence of warmer regions where ice sublimation has occurred.

The emission size of virtually all methanol lines is well defined and found to be of the order of only 0.36″ (500 AU) showing it is very much confined to the innest regions of the envelope. The excitation temperature of this emission is found to be 140 K (from T_{ex} of $^{13}CH_3OH$) indicating that a hot core region with full desorption of grain ices exists. This region with gas temperature above 100 K is referred to as a hot core. Warm gas is clearly seen in the excitation diagrams of COMs and especially of CH_3OH, CH_3CN, and CH_3OCHO with T_{ex} above 100 K but also possibly for species with cooler T_{ex} between 40 and 100 K such as CH_3OCH_3, CH_2CO, C_2H_5CN, C_2H_3OH (see Fig. 5) if the derived T_{ex} actually underestimates the kinetic temperature. This finding is very similar to the recent observations by Fuente et al. (2014) for the intermediate-mass Class 0s NGC7129 FIRS2 with the detection of a small hot core in a cold envelope. With a size of 500 AU (diameter), it is smaller than the hot core in NGC7129 FIRS2 (900 AU; Fuente et al. 2014) and smaller than all known radiatively excited hot cores. Hot corinos are smaller with sizes more of the order of 100 AU but they may be of different nature than classical hot cores. The maximum excitation temperature is also smaller than the temperature obtained in hot cores with 120 - 130 K for CH_3CN and $^{13}CH_3OH$ respectively, while hot cores often reach several hundreds of K (600 K for NGC7129 FIRS2). We interpret these results as indications that the hot core of CygX-N63 is very young and is still growing in size. While young and not yet developed much, it has however a larger size than hot corinos reinforcing the interpretation that CygX-N63 is a young hot core more than a hot corino associated with the Class 0 nature of CygX-N63.

In terms of composition, the hot core of CygX-N63 does not seem to differ from other hot cores with a significant fraction of COMs. A total of 15 complex molecules are detected: 7 COMs (oxygenated), CH_3OH, C_2H_5OH, CH_3CHO, CH_3OCHO, CH_3OCH_3 and CH_3COCH_3; 3 nitrogen-bearing species, CH_3CN, C_2H_5CN, NH_2CHO; 2 carbon chains, CH_3CCH and HC_5N; 3 deuterated species, CH_2DOH, CH_3OD and CH_2DCCH and 1 rare isotopologue $^{13}CH_3OH$. Only these 3 deuterated species CH_2DOH, CH_3OD and CH_2DCCH are detected as originating from the hot core region. Other species such as HDCO, D_2CO, may have contributions from the hot core since they are probably deuterated on grains but we can not evaluate these contributions. For the methanol, the fraction of CH_2DOH is actually found to be relatively low with 1.5 % in the hot core (excited lines) and 2 % in the cold/warm envelope (low excitation lines). This level of deuteration is clearly lower than what has been found in hot corinos where fractions of several times 10 % are usually observed. The abundances of CH_3OD could not be derived. Average on the envelope, HDCO and D_2CO have deuteration fraction of 2.3 and 1.1 % respectively, ie similar to CH_2DOH. Such as for gas phase deuteration discussed in the previous section, the deuteration tends to be less high than in the low-mass case, i.e. for hot corinos and similar to values found in hot cores confirming again a stronger link with hot cores than with hot corinos.

Assuming a r^{-2} density profile, a region of 500 AU would contain 8 % of the total mass of the envelope, i.e. 4.8 $M_\odot$. The linewidth of the group of species associated with the hot core (type II in Fig. 5-right) is found to be 4.1 km/s. At a radius of 250 AU, this velocity dispersion would correspond to a dynamical mass of 0.6 $M_\odot$ which is lower than the inner mass of 4.8 $M_\odot$ (plus the mass of the protostellar embryo) suggesting the motions are still sub-keplerian at R=250 AU. Compared to the cold outer envelope, the motions in the hot core appears less sub-keplerian (velocities $\sim$ 3 times larger than keplerian velocity for 4.8 $M_\odot$ inside 250 AU) suggesting the motions may become keplerian at lower radii.

We also note that since some species, SO, SO_2, SiO, CO and some of the brightest lines of HCN and HCO^+, show low excitation transitions with clear outflow wings, we could wonder whether the hot gas in the inner region cannot be attributed to outflow shocks. The nice separation of two groups of lines in Fig. 5 suggests a separated contribution form outflow shock and inner hot core. For the methanol lines, only the lowest energy transitions show outflow wings. The global low abundance of clear outflow tracers such as SO also claims for a reduced effect of shocks on the chemistry of CygX-N63. The analysis of the excitation temperature of the line wings indicate that the outflowing gas is actually not very hot with T_{ex} lower than 30-40 K. This suggests that the layers which are here detected are more at the interface between the outflow and the envelope than inside the outflow shocks along the outflow. We are detecting the molecular content of the outflow walls. Since the present paper aims more at understanding the cold, dense gas and its relationship with the formation of hot core, we will not attempt to study in details the outflow related molecular emission.

6.5. A significant lukewarm region

Despite the large average level of depletion in the whole envelope of N63 which clearly shows that CO is on average still depleted, a number of species show relatively large excitation temperatures indicative of warm gas. In Fig. 5-left we have emphasized the lukewarm region with a yellow background. In Fig. 5-right, the lukewarm species are type III with v_{LSR} and line width ranging from the values of type I (v_{LSR} = −4.4 km/s; dv=2 km/s) and type II (v_{LSR} = −5.1 km/s; dv=4.1 km/s) confirming they are intermediate between the cold outer envelope and the inner hot core. This soft transition for warm gas tracers suggests that the lukewarm region physically link the cold external regions with the inner hot regions.

A total of 13 species are best found to trace this lukewarm region: OCS, ^{13}CS, $H_2{}^{13}CO$, OCS, H_2S, H_2CS, C_2S, HNCO, CH_3CCH, CH_3CHO, C_2H_5CN, C_2H_5OH, CH_3OCH_3. Some of the species are more expected in the hot core such as C_2H_5CN, C_2H_5OH, and CH_3OCH_3. It may indicate that a significant non thermal desorption occurs in the lukewarm region revealing the ice content. H_2CO is expected to be present in gas phase in such a lukewarm region since it is desorbed just after CO, CH_4 and HCO at temperature of the order of 40 K. CO_2 is also expected to desorb at similar temperature. The detection of $HOCO^+$ which is the protonated CO_2 may result from the lukewarm region where gas phase abundance of CO_2 has increased above T=40 K. It is important to assert how significant is the fraction of gas at intermediate temperatures between 20 and 50 K since at these temperatures the radical mobility has increased enough to allow the synthesis of molecules more complex than CH_3OH and CH_3CHO which are formed through the simplest hydrogenation of CO (see Herbst & van Dishoeck 2009, Sect. 6.7). The size of the region is difficult to constrain since none of the line tracing well this warm region is bright and rich enough to get good excitation diagrams, and most of them are optically thin, not tracing their typical emission size. The best estimate is obtained in Sect. 4.5 which indicate that the size is of the order of 1 to 2″. We will adopt a size of 1.5″i.e. 2100 AU diameter containing of the order of 20 $M_\odot$ of gas. This would basically correspond to the size of the dust continuum emission seen at high spatial resolution with the IRAM PdB interferometer by Bontemps et al. (2010).

6.6. Chemical evolution from dark clouds to hot cores

The global abundances obtained in CygX-N63 are very much consistent with those in dark clouds for all species tracing well cold dense gas. A few species may trace outflowing gas, and COMs are already tracing a nascent hot core in the innest parts of the envelope. Compared to the prototypical hot corino IRAS16293, CygX-N63 appears to be younger and to show possibly a different chemistry especially concerning the ratio N-bearing/S-bearing species. The lack of N-bearing species in IRAS16293 compared to CygX-N63 could be understood as due to a much reduced predominance of cold gas in IRAS16293 as expected if it is more evolved than CygX-N63 and possibly to a much stronger impact of the outflow on the chemistry of IRAS16293. We therefore need to discuss more in details the possible evolution of individual species from dark clouds to hot cores (G34) and hot corinos (IRAS16293). In this context we consider CygX-N63 as intermediate between G34 or IRAS16293.

We first note that within uncertainties for basically all main species, the abundances found in gas phase in TMC1 and L134 are consistent and can indeed serve as a starting point of chemical evolution for protostars. We also note that CygX-N63 is significantly affected by depletion (a CO depletion factor of 16) while IRAS16293 and G34 can be considered not to be too much affected by depletion on their global abundances due to their more developed hot core like regions. Finally there is a clear evolution from cold tracers such as N-bearing molecules

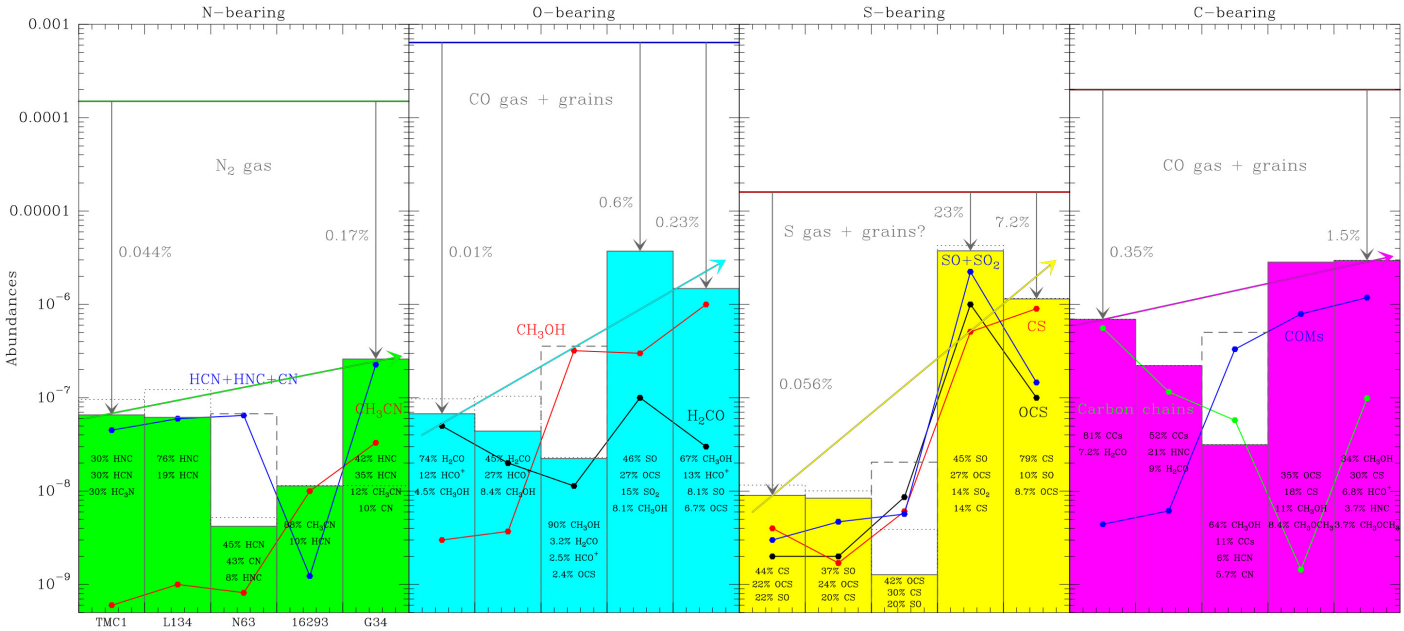


Fig. 8. Global chemical evolution from dark clouds (TMC1 and L134) to hot core (G34) and hot corino (IRAS16293) for all three large families N, O, S and C-bearing species (from left to right). The cosmic total abundances out of the grain refractory cores are shown as straight lines with grey arrows showing the fraction of each element inside the observed species. The main reservoir for each element is indicated as N_2 in the gas, CO in the gas and on grains, and atomic sulfur. We see that the fractions of N- and C-bearing species increase with time by only a factor of 4 while O-bearing increases by a factor 30, and S-bearing by a factor of 200. It even reaches a significant fraction of sulfur in molecular species for hot corinos and hot cores. CygX-N63 is clearly dominated by depletion explaining its lower abundances. The dashed line histogram shows the probable location of the true global abundances accounting for species on grains for CygX-N63. It corresponds to observed abundances multiplied by the depletion factor of 16 derived in Sect. 6.1. The fraction of the dominant species for each sources are indicated on the histograms. The light dotted histograms show the effect of species which could not be included because we do not have their abundance for all sources (see Tab. 3; NO and N_2H^+ for N-bearing, NO for O-bearing, mostly H_2S for S-bearing panel). The behavior of some important species and groups of species are shown as colored curves. We see that the main evolution of N-bearing species is the formation of CH_3CN, that the formation of methanol is dominating the oxygen chemistry while the sulfur chemistry lead to the formation of several less complex species (SO, SO_2, OCS, and CS). The evolution of carbon chemistry seems to be dictated by a transfer from carbon chains (unsaturated) to COMs (saturated).

in dark clouds to hot core like tracers such as COMs (O-bearing molecules) in G34 and IRAS16293. This is due to the ice sublimation which re-incorporate in gas phase the main constituents of ices namely CO, H_2O, NH_3 and presumably H_2S (for S-bearing species), but also the more complex molecules formed on grains, H_2CO, CH_3OH, CH_3CN and the secondary COMs CH_3CHO, HCOOH, $HCOOCH_3$ and CH_3OCH_3. Due to non thermal desorption, all these grain products (COMs) are already abundant enough in the gas phase to be detected already in dark clouds (CH_3OH has an abundance of $\sim 3 \times 10^{-9}$ in TMC1 and L134) and in CygX-N63.

In Fig. 8 we have plotted the evolution of global abundances for the three main families of species (N-, O-, and S-bearing) in a fractional plot of abundances. This allows to visualize the fraction each elements stored in molecules others that the main reservoirs (N_2, CO, and S). In this plot we show also the location of abundances for CygX-N63 in an attempt to correct for depletion by multiplying values by 16. From this plot, we see clearly that IRAS16293 shows a strong deficit in N-bearing species and a strong over-abundance of S-bearing species compared to the others sources. Also when CygX-N63 is corrected for depletion it agrees well with abundances in dark clouds and in hot core since it indeed seems intermediate between the two extreme as expected if it is a young massive protostar evolving towards a hot core. We also see that while the fraction of N-bearing species in molecules different from the main reservoir (N_2) is not much evolving around the 0.1 % level, the fraction for O- and S-bearing in species different than CO and S is clearly increasing from 0.1 % to a few % especially in IRAS16293 reaching almost 5 % of oxygen in SO, SO_2, OCS and CH_3OH. This conversion from CO to other species is presumably due to grain chemistry with for instance the hydrogenation of CO on grains leading to CH_3OH. The strong conversion from CO to SO, SO_2 and OCS in IRAS16293 has a much less clear origin and could be due a specific chemistry in outflow (strong) shocks instead of grain chemistry. In contrast most of the conversion in G34 is indeed from CO to CH_3OH with an increase of CH_3OH global abundance of a factor 300 reaching as much as 1 % of oxygen in methanol. Globally the strongest conversion is for S-bearing species with an average increase of 300 (1000 for IRAS16293). N-bearing species only increases by a factor of 5 for G34. The origin of the decrease of N-bearing species for IRAS16293 is unclear. It could be due to a conversion of gas phase N-bearing species such as HNC and CN in N_2. Outflow shock chemistry could play a role for this conversion, not observed in CygX-N63 and G34.

In this global scheme of evolution from dark clouds to hot cores/hot corinos (IRAS16293 and G34), CygX-N63 appears for virtually all main species as having abundances intermediate between those of dark clouds and those of G34. This is illustrated in Fig. 8 for the abundances of 10 species or group of species (curves on the histograms). This clearly indicates that CygX-N63 appears much more as a young hot core than as a massive hot corino. The above discussion also suggests that the main

Table 3. Global species abundances listed by families.

Molecule	L134	TMC-1	N63	IRAS 16293	G34
Nitrogen					
CN	8.2(-10)	5(-9)	2.1(-09)	8(-11)[f]	2.5(-8)[a]
NO	6(-8)	3(-8)	7.8(-10)	-	-
HCN	1.2(-8)	2(-8)	1.2(-9)	1.1(-9)[d]	9.2(-8)[a]
HNC	4.7(-8)	2(-8)	4.5(-10)	5.4(-11)[c]	1.1(-7)[a]
CH3CN	1(-9)	6(-10)	1.9(-11)	1(-8)[e]	3.3(-8)[b]
N_2H^+	6.8(-10)	3.8(-10)	3.0(-10)	1.4(-10)[f]	-
Oxygen					
CO	8(-5)	8(-5)	⩾1.4(-5)	3.3(-5)[f]	2(-4)[b]
H_2CO	2(-8)	5(-8)	⩾4.0(-10)	1(-7)[g]	3(-8)[a]
HCO^+	1.2(-8)	8(-9)	1.3(-9)	1.4(-9)[f]	2(-7)[a]
CH_3OH	3.7(-9)	3(-9)	1.6(-8)	3(-7)[g]	1(-6)[b]
Sulfur					
CS	1.7(-9)	4(-9)	5.1(-10)	5.1(-7)	9.0(-7)[a]
OCS	2(-9)	2(-9)	8.3(-10)	1(-6)	1(-7)[b]
SO	3.1(-9)	2(-9)	2.5(-10)	1.7(-6)	1.2(-7)[b]
SO_2	1.6(-9)	1(-9)	4.0(-11)	5.4(-7)	2.6(-8)[b]
H_2CS	6(-10)	7(-10)	⩾9.4(-11)	-	1.7(-8)[a]
H_2S	8(-10)	5(-10)	⩾5.9(-10)	5.3(-7)	-
HCS^+	6(-11)	4(-10)	2.9(-12)	-	-
CCs					
C_2H	5(-8)	2(-8)	1.5(-9)	-	4.6(-8)[a]
C_3H	3(-10)	1(-8)	2.2(-11)	-	-
C_4H	1(-9)	9(-8)	1.0(-10)	8(-12)	7.3(-10)[b]
C_3H_2	2(-9)	1(-8)	2.5(-11)	-	5.3(-10)[b]
C_2S	6(-10)	8(-9)	⩾1.0(-11)	-	2.3(-10)[a]
C_3S	2(-10)	1(-9)	2.2(-11)	-	-
HC_3N	8.7(-10)	2(-8)	1.4(-10)	1.5(-10)[f]	2.3(-10)[b]
HC_5N	1(-10)	4(-9)	2.7(-11)	-	2.4(-10)[a]

[a] This work. [b] Mookerjea et al. (2007) [c] ... [d] Schöier et al. (2002)
[e] Bottinelli et al. (2007) [f] Jørgensen et al. (2004)
[g] Cazaux et al. (2003)

chemical differences between the hot core and the hot corino are the lack of N-bearing species and a large over-abundance in S-bearing species SO and SO_2 in IRAS16293 which could be due to a much stronger impact of outflow shocks in the chemistry of IRAS16293. Otherwise the evolution of COMs abundances are as expected from dark clouds to hot cores and hot corinos with an increase of methanol of 300 and 100 in G34 and IRAS16293, and of more complex COMs such as CH_3OCH_3 and $HCOOCH_3$ from non detectable levels to more than 10 % of the O-bearing species (other than CO and H_2O) in G34. IRAS16293 has a similar fraction of these COMs compared to methanol than in G34.

CygX-N63 appears intermediate between dark clouds and G34 but we can see differences between species whether CygX-N63 is closer to dark clouds or to G34. For all N-bearing species, CygX-N63 is looking more like a dark cloud while for COMs and especially methanol CygX-N63 has already a substantial level of abundances closer to G34 than to dark clouds. Methanol abundance has indeed already been multiplied by 120 times in CygX-N63 and the COMs CH_3OCH_3 and $HCOOCH_3$ already represent ∼5 % of the O-bearing species (other than CO and H_2O) assuming a depletion factor of 16 like for CO. This suggests that a large fraction of the CO conversion to COMs on grains is happening in the earliest times of the protostellar collapse (see more discussion of this point below in Sect. 6.7).

6.7. Origin of complex molecules

The origin of COMs is of high importance to be understood since it traces one of the most critical step in the complexification of molecules in the interstellar medium before being incorporated in protoplanetary disks. CygX-N63 with its stratified envelope containing both cold and hot gas showing hot core composition as well as its original gas phase composition in the cold external gas can help to constrain the issue. Also CygX-N63 contains a significant amount of warm gas where formation of complex molecules is expected to be favored by the increased of mobility of reactants onto the grains.

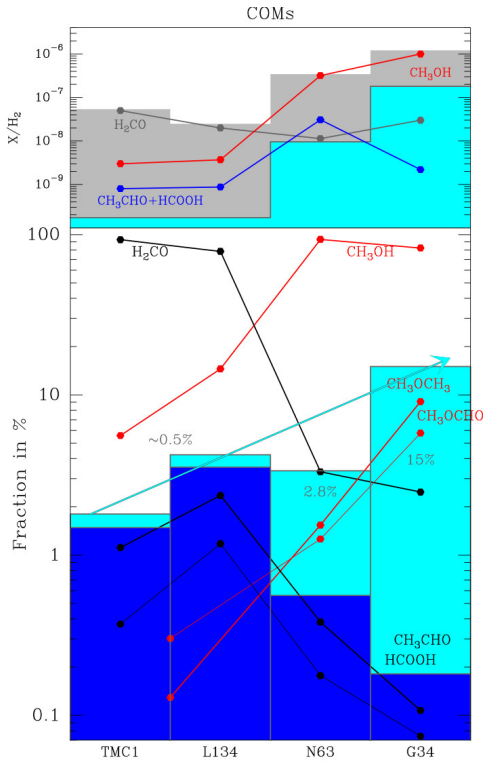


Fig. 9. Evolution of COM abundances from dark clouds to hot cores. CygX-N63 appears intermediate between TMC1/L134 and G34 with most of methanol already formed while warm grain chemistry products CH_3OCH_3 and CH_3OCHO are only formed halfway at the age of CygX-N63. The pure products of hydrogenation of CO on cold grains, CH_3CHO and HCOOH, show a peak of abundance for CygX-N63 such as if these products are not produced later and are even destroyed. **Up:** Evolution of the absolute abundances. The grey histogram comprises all COMs (H_2CO, CH_3OH, CH_3CHO, HCOOH, CH_3OCH_3 and CH_3OCHO). The cyan histogram shows the evolution of the most complex species (CH_3OCH_3 and CH_3OCHO) most probably formed from radicals on warm grains (see Sect. 6.7.3). Note that these second generation COMs have their abundances multiplied by 50 in CygX-N63 and by 1000 in G34 compared to dark clouds. **Down:** Fractions of the same abundances expressed in percentage of the total amount of COMs. Dark blue histogram displays the fraction of CH_3CHO/HCOOH which strongly decreases most probably due to the end of CO hydrogenation on warm grains. Cyan histogram shows the additional contribution from CH_3OCH_3 and CH_3OCHO. The fraction of these second generation COMs evolves from ∼ 0.5 % in dark clouds to up to 15 % in G34.

6.7.1. Hydrogenation of CO on cold ices

On cold grains, it is mainly the mobility of species which drives chemistry. Since H is the most mobile atom, hydrogenation dom-

inates grains chemistry at low temperature. Hydrogenation of oxygen, carbon, and nitrogen atoms leads to three main constituent of ices: H_2O, CH_4, and NH_3 respectively. When the CO abundance on grains increases by depletion, hydrogenation of CO starts to be also important. The main path leads to the successive products HCO, H_2CO, H_2COH, and CH_3OH. All these species except the radical H_2COH have indeed been detected towards CygX-N63 supporting this path to form methanol. Other paths are possible if some atomic species remains free on grains. We can for instance get the formation of CH_3CHO and CH_3CH_2OH if a carbon is added to HCO instead of an hydrogen, by the chain of products CO->HCO->HCCO->CH_2CO->CH_3CHO->CH_3CH_2OH. Similarly the inclusion of an oxygen or a nitrogen atom leads to HCOOH or NH_2CHO respectively (see Fig. 12 in Herbst & van Dishoeck 2009 and references therein). Interestingly enough all these expected products H_2CO, CH_3OH, CH_3CHO, HCOOH, and NH_2CHO from CO hydrogenation on cold grains have been detected in the envelope of CygX-N63 mostly in the lukewarm region intermediate between the cold envelope and the hot core. This suggests that they have been indeed formed on cold grains and have been released (presumably by non thermal desorption) at a significant rate in the lukewarm region. Among the ones with a derived T_{ex} (CH_3OH, CH_3CHO, H_2CO and CH_3CH_2OH) we note that the warmest ones are the most complex with CH_3OH and CH_3CH_2OH with T_{ex} close to 100 K while CH_3CHO, H_2CO have T_{ex} close to 40 K.

6.7.2. Formation of COMs from radicals on warm grains

On cold grains the formation of complex molecules is limited since only light species are mobile enough to react with compounds of ices. But when grain temperature increases some radicals can become mobile too and can participate to grain chemistry. From Table 4 of Garrod (2013) we see that the first most reactive radicals to become mobile are CH_2, CH_3 and HCO. They are expected to be the main bricks to form complex molecules at intermediate temperatures when CO has desorbed, strongly reducing the hydrogenation of CO on grains. The easily detected species CH_3OCH_3 and CH_3OCHO are expected to be among the main product of this warm grain chemistry. When CO, CH_4 and H_2CO have desorbed from grains (T>40K), radicals CH_3 and HCO may then only originates from the destruction of the most abundant COMs on grains, i.e. CH_3OH, CH_3CHO, and HCOOH transferring organic bricks from some COMs to larger COMs. We note also that nitrogen radicals such NH, NH_2 required to form complex pre-biotic species are the latest to get mobile on grains making the formation of the most complex prebiotic species very much dependent of the time spent in warm chemistry when T>40K (see for instance predictions by Garrod 2013 for glycine).

6.7.3. Increase of the fraction of large COMs with time

Fig. 9 shows the evolution of COMs abundances from dark clouds to hot core thanks to the measured abundances in TMC1, L134, CygX-N63 and G34. In the top panel we see that the global increase of COMs is found to be of the order of 20 when including H_2CO which is actually very much abundant in dark clouds due its gas phase formation route. Excluding H_2CO, the increase is 300 times mostly dominated by methanol formation. For larger COMs such as CH_3OCH_3 and CH_3OCHO shown as cyan histogram, the increase reaches a factor of 1000. In the bottom panel of Fig. 9, it is the fractional compositions which are displayed showing that these large COMs represents only 0.5 % of the COMs in dark clouds but reaches as much as 15 % for G34. These species have abundances which contineously increase while methanol seems to saturate after an early formation, early formed species such as CH_3CHO, and HCOOH have a fraction which strongly decreases. This is very much in line with the cold and warm grain chemistry with CO hydrogenation followed by radical COM formation discussed in the two previous sections. We even see in top panel of Fig. 9 that the absolute abundances of the early CO hydrogenation products CH_3CHO, and HCOOH decrease from CygX-N63 to G34 such as if these species are indeed destroyed on grains, and converted into larger COMs as proposed in the above Sect. 6.7.3. The absolute abundance of methanol does not seem to decrease with time suggesting methanol is not destroyed on grains as CH_3CHO, and HCOOH or methanol has another formation path which continues to produce methanol after CO has desorbed grains. We have for instance well detected H_2COH^+, the protonated H_2CO, which can easily form methanol by H_2COH^++H_2 -> CH_3OH+H^+ in the warm gas phase.

The significant conversion of most abundant first generation COMs into more complex COMs in the lukewarm region has to be further investigated to further constrained how far molecular complexity is possible during the protostellar collapse before the gas/grains get incorporated into a protostellar disk. By observing the most abundant second generation COMs, CH_3OCH_3 and CH_3OCHO, we can expect to trace a much more diverse population of hidden more complex species formed from mobile radicals. Deeper observations could detect some of them towards sources such as CygX-N63 which has a large column density of warm gas and which is not too much affected by line crowding since the hot core is still small. Some rare COMs not found so far in protostellar objects outside SgrB2 are already seen at the limit of detection in the present survey such as propanal with 4 unconfused lines (among the 5 brightest expected lines) seem at levels between 1.4 and 3 σ. Methanimine (CH_2NH) is also found to be marginally detected in CygX-N63 which would be the first detection outside SgrB2.

6.7.4. Constrains on the high-mass star formation process

6.7.5. Additional hints for monolitical collapse

The chemical study of CygX-N63 confirms the nature of CygX-N63 as a single collapsing object with an envelope as massive as $\sim 60\,M_\odot$. Such a massive envelope should form an OB star. It also shows a stronger chemical similarity with hot cores than with hot corinos, such as is CygX-N63 is more a pre-hot core than a massive hot corino. The extreme youth of CygX-N63 is also confirmed by a clear intermediate chemistry between dark clouds and hot core/hot corinos. Together with its large mass envelope and powerful outflow (Duarte-Cabral et al. 2013), it indicates that this object will form an OB star in the close future. We therefore confirm that a $\sim 60\,M_\odot$ collapsing core can exist and collapse in a single star (or a close binary) clearly supporting the view that massive stars can form in a monolithic fashion.

We also found some hints for a decrease of angular momentum with the radius in the collapsing envelope assuming the linewidths are tracing the infall velocities. These velocities are found sub-keplerian and are becoming less sub-keplerian in the innermost regions with a decrease which is not as large as expected if angular momentum would be conserved. The specific angular momentum scales as radius×velocity (see Belloche et

al. 2013). From the outer envelope of radius 3000 AU to the hot core region of radius 250 AU, the linewidths increased by only a factor of 3 while the increase would be of a factor 12 if angular mometum would be conserved. The specific angular momentum has decreased by a factor 4. Together with the different linewidth for ions compared to neutrals in the cold envelope, it suggests that a significant magnetic breaking is occurring in the CygX-N63 collapsing envelope, increasing accretion rates and allowing rapid increase of gas temperature in the inner envelope to avoid fragmentation as predicted by numerical simulations (Commerçon et al. 2011).

6.7.6. Deuteration in CygX-N63 and short pre-stellar stage

We find a level of deuteration from the gas phase in the cold envelope which is not as large as expected for such a dense cold gas. We note that this is line with earlier claims by Fontani et al. (2006, 2011) based on the ratio N_2D^+/N_2H^+ that deuteration is lower in gas at the origin of high-mass star formation than in low-mass pre-stellar cores. We believe that it is an indication of a short pre-stellar stage at high densities and high level of depletion leading to low level of deuteration. This supports the results by Motte et al. (2007); Csengeri et al. (2014) that the pre-stellar phase for the formation of high-mass stars and rich clusters is much shorter than for low-mass star formation.

6.8. Pre-biotic species

Two rare N-bearing prebiotic species are indeed well detected towards CygX-N63: the methanimine CH_2NH and the formamide NH_2CHO. Their significant abundances in the cold envelope of CygX-N63 may indeed indicate that simple amides may originate from the earliest phases of protostellar collapse when N-bearing species are still abundant at high densities and possibly when grains warmer to increase formation efficiency (on grains) before S-bearing and O-bearing molecules take over the gas phase chemistry.

Formamide NH_2CHO:

We identified 13 lines of NH_2CHO at a 4 σ level (see Fig. 10). The population diagram indicates a temperature of (13 ± 3) K and a column density of (1.3 ± 0.6)×10^{13}, corresponding to an abundance of (3.0 ± 1.3)×10^{-12}. The low temperature and large FWHM of 4 km s^{-1} suggest an origin from the inner envelope, near the hot core (see part **??**), where the temperature is still low but with a hot core influenced chemistry.

NH_2CHO is formed on grains at low temperatures by hydrogenation of OCN or HNCO and in the gas phase by the reaction between formaldehyde and NH_2, after the release of formaldehyde at ∼ 40 K. This molecule was detected in the hot core G20.08-0.14N by Xu & Wang (2013) with a rotational temperature of 100 K and an abundance of (5.7 ± 0.3)×10^{-10}.

NH_2CHO may therefore indeed come from the warm inner region above the hot core like region.

Methanimine CH_2NH:

Methanimine CH_2NH has never been detected in a protostellar objects. 2 lines of methanimine are here detected at a 4.8 and 4.7 σ level (at 266 and 284 GHz, respectively, see Table 11 for details) and 2 others at a 2.3 and 3.1 σ level (at 225 and 245 GHz). These detections and tentative detections are shown in Fig. 11. Since all the expected brightest lines are here found we believe we can safely claim the first detection of methanimine in an individual protostar. It as first detected towards Sgr B2 (Godfrey et al. 1973) and found to be extended across a large fraction of the Sgr B2 cloud complex. It is so far not detected towards TMC-1 (Dickens et al. (1997); Turner et al. (1999)) and is thought to form into the gas phase through ion-molecule reaction in dark clouds and also through neutral-neutral reactions in warmer regions like Sgr B2 (Halfen et al. 2013). The detection of methanimine in CygX-N63 is therefore very interesting. The weakness of the lines prevents us from deriving the origin of the lines from their linewidths and rest velocities. If it is formed in cold gas, it might be the high densities in CygX-N63 which explain its formation. It is more unlikely that the warm inner regions of CyX-N63 have particular properties to explain the detection in CygX-N63, and not so far in other hot cores or hot corinos except SgrB2.

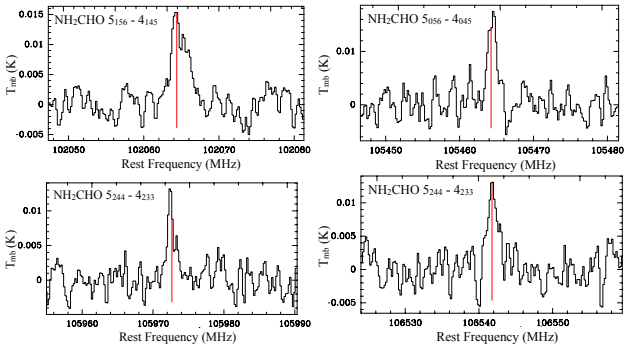


Fig. 10. Top left: NH_2CHO ($5_{1,5,6}$ - $4_{1,4,5}$) at 102064.31 MHz. NH_2CHO ($5_{0,5,6}$ - $4_{0,4,5}$) at 105464.26 MHz. **Top right:**NH_2CHO ($5_{2,4,4}$ - $4_{2,3,3}$) at 105972.66 MHz. **Bottom left:**NH_2CHO ($5_{2,3,4}$ - $4_{2,2,3}$) at 106541.77 MHz. **Bottom right:**NH_2CHO ($5_{1,4,4}$ - $4_{1,3,3}$) at 109753.55 MHz. These lines are each time blended with two other close lines of NH_2CHO of slightly lower E_{up}.

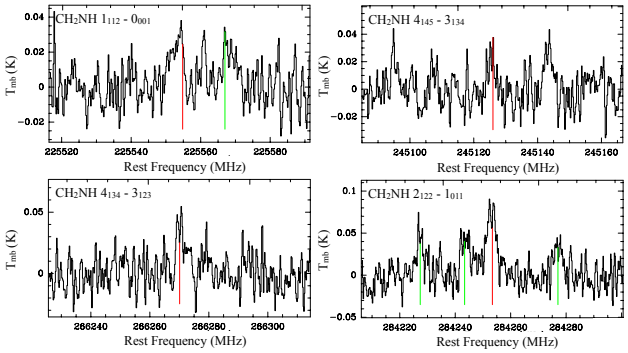


Fig. 11. Top left: CH_2NH ($1_{1,1,0}$ - $0_{0,0,1}$), ($1_{1,1,2}$ - $0_{0,0,1}$) and ($1_{1,1,1}$ - $0_{0,0,1}$) at 225556.01, 225554.82 and 225554.03 MHz, respectively. The green line corresponds to $^{13}CH_3OH$, vt=0,1 ($14_{-1,14,0}$ - $13_{-2,12,0}$) at 225566.99 MHz. **Top right:** CH_2NH ($4_{1,4,5}$ - $3_{1,3,4}$), ($4_{1,4,4}$ - $3_{1,3,3}$) and ($4_{1,4,3}$ - $3_{1,3,2}$) at 245126.01, 245125.94 and 245125.92 MHz, respectively. The other peaks are unknown lines. **Bottom left:** CH_2NH ($4_{1,3,3}$ - $3_{1,2,2}$), ($4_{1,3,5}$ - $3_{1,2,4}$), ($4_{1,3,4}$ - $3_{1,2,3}$) and at 266270.21, 266270.13 and 266270.10 MHz, respectively. **Bottom right:** Spectrum of CH_2NH ($2_{1,2,1}$ - $1_{0,1,0}$), ($2_{1,2,3}$ - $1_{0,1,2}$) and ($2_{1,2,2}$ - $1_{0,1,1}$) at 284254.50, 284254.28 and 284253.41 MHz, respectively. Green lines correspond to CH_3OCHO ($23_{10,13,2}$ - $22_{10,12,2}$) at 284227.37 MHz, CH_3OCHO ($23_{10,13,0}$ - $22_{10,12,0}$) at 284243.38 MHz and HDCS ($9_{1,8}$ - $8_{1,7}$) at 284277.05 MHz.

Table 4. DX / HX ratio comparison between N63, the dark cloud TMC-1 (at the cyanopolyyne peak), the hot corino IRAS+16293-2422, the UCHII region MonR2 (at the position IF) and the hot core Orion KL. The type indicates that the deuteration is expected to occur in the gas phase (G) or/and on the grains (Gr).

Species	Type	N63[a] %	TMC-1[b] %	IRAS16293[c] %	MonR2[d] %	Orion KL[e] %
N_2D^+/N_2H^+	G	0.5	8	25	1.5	< 30
DCN/HCN	G	1.1	0.8	1.3	-	0.3
DNC/HNC	G	2.8	1	3	1	-
DC_3N/HC_3N	G	1.2	0.8	3	-	-
CCD/CCH	G	2.3	3-6	18	2	-
DCO^+/HCO^+	G	0.9	1.3	0.9	0.2	14
$HDCO/H_2CO$	G/Gr	0.1	5	14	1	14
C_3HD / (o+p)-C_3H_2[d]	G	15.5	8	-	-	-
CH_2DCCH / CH_3CCH[d]	G	21	11-22	-	-	-
$D_2CO/HDCO$[d]	G/Gr	60	-	⩽50	< 3800	2.1
HDCS / H_2CS	G/Gr	5.5	2	-	-	-
CH_2DOH/CH_3OH	G/Gr	1.2	-	-	-	⩽ 0.02

[a] This work. [b] Butner et al. (1995); Turner (2001); Minowa et al. (1997); Markwick et al. (2002) [c] Awad et al. (2014) [d] Treviño-Morales et al. (2014) [e] Turner (1990); Schilke (1992) [e] All ratios are determined with population diagrams of rare isotopologues, except for these three species : CH_3CCH, HDCO and C_3H_2.

7. Conclusions

References

Agúndez, M., Cernicharo, J., & Guélin, M. 2015, A&A, 577, L5
Awad, Z., Viti, S., Bayet, E., & Caselli, P. 2014, MNRAS, 443, 275
Belloche, A., Müller, H. S. P., Menten, K. M., Schilke, P., & Comito, C. 2013, A&A, 559, A47
Bontemps, S., Motte, F., Csengeri, T., & Schneider, N. 2010, A&A, 524, A18
Bottinelli, S., Ceccarelli, C., Williams, J. P., & Lefloch, B. 2007, A&A, 463, 601
Butner, H. M., Lada, E. A., & Loren, R. B. 1995, ApJ, 448, 207
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
Commerçon, B., Hennebelle, P., & Henning, T. 2011, The Astrophysical Journal Letters
Csengeri, T., Urquhart, J. S., Schuller, F., et al. 2014, A&A, 565, A75
Dickens, J. E., Irvine, W. M., DeVries, C. H., & Ohishi, M. 1997, ApJ, 479, 307
Duarte-Cabral, A., Bontemps, S., & Motte, F. 2013, A&A, 558, A125
Fechtenbaum, S., Bontemps, S., Schneider, N., et al. 2014, A&A
Fontani, F., Caselli, P., Crapsi, A., et al. 2006, A&A, 460, 709
Fontani, F., Palau, A., Caselli, P., et al. 2011, A&A, 529, L7
Fuente, A., Cernicharo, J., Caselli, P., et al. 2014, A&A, 568, A65
Garrod, R. T. 2013, ApJ, 778, 158
Godfrey, P. D., Brown, R. D., Robinson, B. J., & Sinclair, M. W. 1973, Astrophys. Lett., 13, 119
Halfen, D. T., Ilyushin, V. V., & Ziurys, L. M. 2013, ApJ, 767, 66
Herbst, E. & van Dishoeck, E. F. 2009, ARA&A, 47, 427
Hincelin, U., Wakelam, V., Commerçon, B., Hersant, F., & Guilloteau, S. 2013, The Astrophysical Journal, 775, 44
Jenkins, E. B. 2009, ApJ, 700, 1299
Jørgensen, J. K., Schöier, F. L., & van Dishoeck, E. F. 2004, A&A, 416, 603
Markwick, A. J., Millar, T. J., & Charnley, S. B. 2002, A&A, 381, 560
Minowa, H., Satake, M., Hirota, T., et al. 1997, ApJ, 491, L63
Mookerjea, B., Casper, E., Mundy, L. G., & Looney, L. W. 2007, ApJ, 659, 447
Motte, F., Bontemps, S., Schilke, P., et al. 2007, A&A, 476, 1243
Pillai, T., Wyrowski, F., Hatchell, J., Gibb, A. G., & Thompson, M. A. 2007, A&A, 467, 207
Sakai, N., Sakai, T., Hirota, T., & Yamamoto, S. 2008, ApJ, 672, 371
Schilke, P. 1992, PhD thesis, California Institute of Technology
Schöier, F. L., Jørgensen, J. K., van Dishoeck, E. F., & Blake, G. A. 2002, A&A, 390, 1001
Treviño-Morales, S. P., Pilleri, P., Fuente, A., et al. 2014, A&A, 569, A19
Turner, B. E. 1990, ApJ, 362, L29
Turner, B. E. 2001, ApJS, 136, 579
Turner, B. E., Terzieva, R., & Herbst, E. 1999, ApJ, 518, 699
Wilson, T. L. & Rood, R. 1994, ARA&A, 32, 191
Xu, J.-L. & Wang, J.-J. 2013, MNRAS, 431, 2385

F.2 First detection of CF^+ towards a high-mass protostar

Reproduction d'un article publié en 2015
Astronomy & Astrophysics
volume 574
Pages L4
(version éditeur)

A&A 574, L4 (2015)
DOI: 10.1051/0004-6361/201424718
© ESO 2015

Astronomy & Astrophysics

L E

First detection of CF^+ towards a high-mass protostar⋆

S. Fechtenbaum[1,2], S. Bontemps[1,2], N. Schneider[1,2], T. Csengeri[3], A. Duarte-Cabral[4], F. Herpin[1,2], and B. Lefloch[5]

[1] Univ. Bordeaux, LAB, UMR 5804, 33270, Floirac, France
e-mail: Sarah.Fechtenbaum@obs.u-bordeaux1.fr
[2] CNRS, LAB, UMR 5804, 33270 Floirac, France
[3] Max-Planck-Institut für Radioastronomie, Auf dem Hügel 69, 53121 Bonn, Germany
[4] School of Physics and Astronomy, University of Exeter, Stocker Road, Exeter EX4 4QL, UK
[5] Laboratoire AIM Paris-Saclay, CEA/IRFU – CNRS/INSU – Université Paris Diderot, CEA-Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette Cedex, France

Received 31 July 2014 / Accepted 6 January 2015

ABSTRACT

Aims. We report the first detection of the $J = 1–0$ (102.6 GHz) rotational lines of CF^+ (fluoromethylidynium ion) towards CygX-N63, a young and massive protostar of the Cygnus X region.
Methods. This detection occurred as part of an unbiased spectral survey of this object in the 0.8−3 mm range, performed with the IRAM 30 m telescope. The data were analyzed using a local thermodynamical equilibrium model (LTE model) and a population diagram in order to derive the column density.
Results. The line velocity (–4 km s^{-1}) and line width (1.6 km s^{-1}) indicate an origin from the collapsing envelope of the protostar. We obtain a CF^+ column density of 4×10^{11} cm^{-2}. The CF^+ ion is thought to be a good tracer for C^+ and assuming a ratio of 10^{-6} for CF^+/C^+, we derive a total number of C^+ of 1.2×10^{53} within the beam. There is no evidence of carbon ionization caused by an exterior source of UV photons suggesting that the protostar itself is the source of ionization. Ionization from the protostellar photosphere is not efficient enough. In contrast, X-ray ionization from the accretion shock(s) and UV ionization from outflow shocks could provide a large enough ionizing power to explain our CF^+ detection.
Conclusions. Surprisingly, CF^+ has been detected towards a cold, massive protostar with no sign of an external photon dissociation region (PDR), which means that the only possibility is the existence of a significant inner source of C^+. This is an important result that opens interesting perspectives to study the early development of ionized regions and to approach the issue of the evolution of the inner regions of collapsing envelopes of massive protostars. The existence of high energy radiations early in the evolution of massive protostars also has important implications for chemical evolution of dense collapsing gas and could trigger peculiar chemistry and early formation of a hot core.

Key words. stars: formation – stars: protostars – stars: massive – stars: winds, outflows – stars: individual: CygX-N63

1. Introduction

The formation of massive stars is still not well understood. Important questions are related to accretion rates required to form massive stars in the monolithic collapse scenario, and to the evolution of the inner regions of the collapsing cores where the disks form and stellar feedback occurs (e.g. Yorke & Sonnhalter 2002; Duarte-Cabral et al. 2013). For high accretion rates (10^{-4} to 10^{-3} $M_\odot$/yr), the protostars have large radii (10 to 100 $R_\odot$) before they contract to reach the main sequence while still accreting (e.g. Hosokawa & Omukai 2009). It is roughly when the protostars reach the main sequence that they start to develop ultra-compact (UC HII) regions which may then regulate and possibly stop further accretion, limiting the final mass of the stars. Massive protostars also form hot cores with large fractions of collapsing gas radiatively warmed over 100 K. They release into the gas phase molecular species previously frozen on grains and drive a warm gas chemistry. It is not clear whether this hot core phase occurs before or at the same time as the development of an UC HII region. By opening large inner cavities, outflows and UC HII regions may help to heat up a large fraction of collapsing envelopes, leading to well-developed hot cores.

CygX-N63 has been determined by Motte et al. (2007) to be one of the brightest and most compact 1.2 mm cores in the Cygnus X region (Schneider et al. 2006) at a distance of 1.4 kpc (Rygl et al. 2012). It is very likely a massive protostar in its earliest phase of formation (Bontemps et al. 2010). With an envelope mass of 44 $M_\odot$ within 2500 AU, and a luminosity of 340 $L_\odot$, it is the most massive and youngest protostar detected in Cygnus X, and is recognized as a Class 0 massive protostar driving a powerful CO outflow (Duarte-Cabral et al. 2013). It does not yet excite an UC HII region and does not contain a developed hot core and could thus be a rare example of a massive protostar in its pre-UC HII region and pre-hot core phase. This exceptional object is one of the best known examples of a dense core in monolithic collapse with no sign of sub-fragmentation from 0.1 pc down to 500 AU, although it could still form a close binary.

Molecular lines are important probes of the dense gas from which stars form and hence provide important insight for understanding the earliest phases of star formation. One of the major cooling lines of the warm interstellar medium is the far-infrared fine structure line of ionized carbon (C^+) at 158 μm. It was recognized (Neufeld et al. 2005) that in the molecular gas phase of the interstellar medium, HF is the main fluor reservoir and that CF^+ could be a good indirect tracer of C^+, which is not reachable from ground-based facilities. The first (and only) detections

⋆ Appendices are available in electronic form at http://www.aanda.org

Table 1. Observation parameters, Gaussian fits results and LTE model results.

Line	Frequency GHz	E_{up}/k K	A_{ij} s^{-1}	F_{eff}	B_{eff}	Beam arcsec	V_{LSR} km s^{-1}	*FWHM* km s^{-1}	T_{peak} mK	Noise mK
$CF^+(1-0)$	102.587533	4.9235	4.82×10^{-6}	0.94	0.79	25.5	-4.1 ± 0.5^a	1.6 ± 0.5^a	10.5^a	2.3
$CF^+(2-1)$	205.170520	14.7703	4.62×10^{-5}	0.94	0.64	11.4	-4.1^b	1.6^b	$<62^c$	14.7

Notes. [(a)] Gaussian fit results; [(b)] fixed equal to the $J = 1-0$ line parameters; [(c)] upper limit. LTE modeling with a 25″ source size (beam size) and an excitation temperature of 10 K gives $T_{peak} = 24$ mK.

of mm-transitions of CF^+ towards the Orion Bar (Neufeld et al. 2006) and the Horsehead nebula (Guzman et al. 2012) confirmed these predictions and indicate that CF^+ can trace C^+ in photon dominated regions (PDRs).

Here we present the first detection of CF^+ towards a protostar obtained within a 0.8 to 3 mm unbiased spectral survey employing the IRAM 30 m towards CygX-N63. In Sect. 2 the observations are detailed while results are provided in Sect. 3. Section 4 discusses the origin of CF^+ detection and its implications.

2. Observations and data reduction

We carried out an unbiased spectral survey with the IRAM 30 m telescope on Pico Veleta, Spain, towards the source CygX-N63, located at (RA, Dec)$_{J2000}$ = ($20^h40^m05.2^s$, 41°32′12.0″). CygX-N63 is an isolated single object and can therefore be observed without confusion within the beam of the IRAM 30 m (up to 30″ at 3 mm). The observations were obtained between September 2012 and January 2014 using the wobbler switching mode to assure good baselines, and covering so far the whole 1, 2, and 3 mm bands (80–270 GHz). The EMIR receiver was connected to the FTS backend at 195 kHz with settings, separated by 3.89 GHz to cover the bands with a redundancy of 2. In order to distinguish ghosts from bright lines in the rejected sideband, we observed each frequency as pairs of settings shifted by 20 MHz. The data were reduced with the GILDAS package[1]. After a zeroth-order baseline , all spectra were averaged and converted into main-beam temperature (T_{mb}) using the forward and main-beam efficiencies (F_{eff} and B_{eff}) listed in Table 1 leading to typical rms noise levels of 2.9, 4.2, and 8.6 mK for the 3, 2, and 1 mm band, respectively.

3. Analysis and results

3.1. Line identification and detection of CF^+ (1–0)

The analysis was performed using CASSIS[2] and the CDMS[3] catalogue. We here report a clear detection (6.2 σ) of the $J = 1 \rightarrow 0$ line of CF^+ at 102.59 GHz at $v_{LSR} = -4$ km s^{-1}. The only other line of CF^+ ($J = 2 \rightarrow 1$ at 205.17 GHz) in our spectral coverage cannot be firmly detected because of blending with a line of CH_3CHO ($11_{1\ 11\ 0}-10_{1\ 10\ 0}$) (see Fig. 1).

3.2. Total column density and excitation temperature

Using an excitation temperature of 10 K as in Neufeld et al. (2006) and Guzmán et al. (2012), assuming local thermodynamical equilibrium (LTE) and optically thin lines, we derive a total CF^+ column density of 4×10^{11} cm^{-2} (see Appendix A for details). Taking the ($2 \rightarrow 1$) line tentative detection as an upper limit, we obtain a maximum excitation temperature of ~20 K.

The line velocity of –4 km s^{-1} is exactly the rest velocity of the protostar (Bontemps et al. 2010), which suggests an origin from the protostar. The study of line profiles suggests a correlation between the line width and the spatial origin of molecules (Fechtenbaum et al., in prep.). The observed full width at half maximum (FWHM) of 1.6 km s^{-1} points to an origin from the envelope.

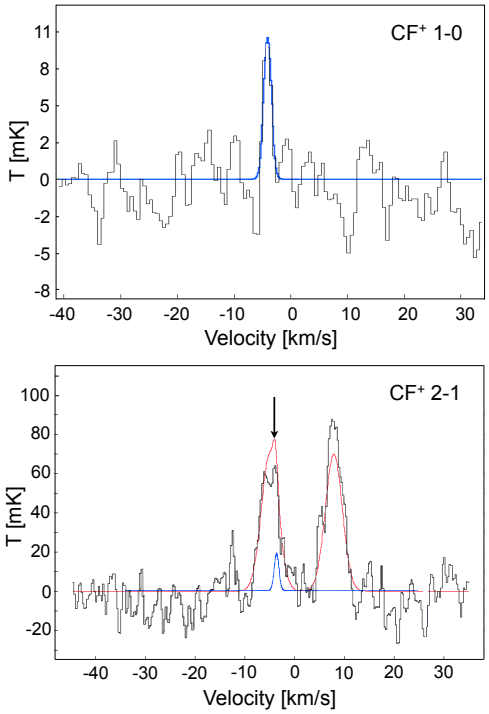


Fig. 1. Spectra of the CF^+ $J = 1 \rightarrow 0$ and $2 \rightarrow 1$ lines on a main beam brightness temperature scale. The blue curves are the modeled spectra of the CF^+ lines and the red curve is the model for CF^+ and CH_3CHO together.

4. Discussion and conclusion

4.1. First detection of CF^+ towards a massive protostar

The CF^+ ion is stable and is the second fluorine reservoir after HF in PDRs. Its formation route is simple (Neufeld et al. 2005)

$F + H_2 \rightarrow HF + H$ and $HF + C^+ \rightarrow CF^+ + H$,

where both HF and C^+ are abundant, i.e. at the interface HI – H_2 and more generally where ionization is strong enough to produce C^+. CF^+ should be an excellent proxy for C^+ in partially ionized regions. CF^+ has so far been detected only towards two bright PDRs: the Orion Bar and the Horsehead nebula. The Orion Bar is an intense PDR partly seen edge-on leading to a large column density of CF^+ (Neufeld et al. 2006). The Horsehead nebulae is a weaker PDR, but the interface is seen almost perfectly edge-on with a significant limb-brightening increasing the observed column density of CF^+ (Guzmán et al. 2012).

The present detection is the first detection towards an object which is most likely not a PDR (see Sect. 4.2). It is an interesting

[1] http:/www.iram.fr/IRAMFR/GILDAS/
[2] http://cassis.irap.omp.eu/
[3] http://www.astro.uni-koeln.de/cgi-bin/cdmssearch

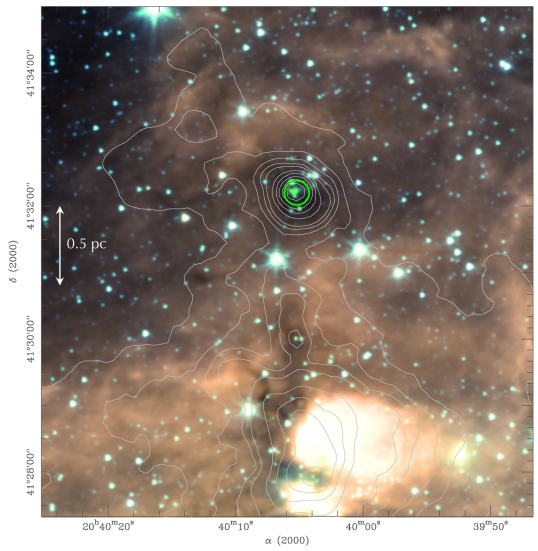


Fig. 2. IRAM 30 m beam at 102 GHz (green circle) overlaid on a RGB (8, 4.5, and 3.6 μm) *Spitzer* IRAC image towards CygX-N63. Contours show the 250 μm dust emission from *Herschel* (Hennemann et al. 2012). No prominent PAH emission (red, 8 μm) is detected towards CygX-N63.

finding because it then points to the existence of a source of C^+ inside the CygX-N63 core. A column density of 4×10^{11} cm^{-2} in a 25″ *FWHM* beam corresponds to a total number of CF^+ ions of 1.2×10^{47}. With the abundance ratio CF^+/C^+ of the order of 10^{-6} at high density and high UV field (see Fig. 4 in Neufeld et al. 2006), it converts to a total number of C^+ of 1.2×10^{53}. We discuss below the different possibilities to explain this amount of C^+ indirectly traced by CF^+.

4.2. A PDR front detected at the distance of Cygnus X?

Since CygX-N63 is situated in the rich Cygnus X complex hosting a large number of OB stars, the detected CF^+ could potentially originate from the PDR at the surface of the clump hosting CygX-N63, excited by the most nearby massive stars. However, CygX-N63 is located in a quiet part of Cygnus X where no nearby O stars can be detected (the projected distance to the central regions of the Cygnus OB2 cluster is ~20−30 pc). In comparison, the Orion Bar PDR is situated at less than 0.5 pc from the O stars of the Orion nebula cluster. To detect such a weak CF^+ line in Cygnus X, a PDR has to be bright and should therefore exhibit strong PAH emission in the mid-IR. In Fig. 2 showing a three-color *Spitzer* image, one sees that the CygX-N63 core actually coincides with one of the darkest parts of the region with no sign of PAH red (8 μm) emission in the observed beam. Only some green (4.5 μm) weak extended features are seen precisely coinciding with CygX-N63. It does not trace a PDR front and is most probably due to outflow shock[4] from the strong CO outflow driven by CygX-N63 (see Sect. 4.5). There is therefore no hint of the existence of a bright PDR at the surface of the clump which would explain the observed strong source of C^+.

4.3. An inner CII region towards CygX-N63?

CygX-N63 is an OB star in formation. It is or will soon become a strong ionizing source and a strong source of C^+. Interestingly enough, however, CygX-N63 is not yet an UC HII region. It has not been detected in free-free emission with the VLA. CygX-N63 only coincides with a 2.3σ peak of 0.14 mJy at 8.4 GHz (see Appendix B). Since carbon has a lower ionization energy (11.3 eV) than hydrogen (13.6 eV), a C^+ region can exist before the development of an HII region.

With a luminosity of 340 $L_\odot$, CygX-N63 can host a B5−B6 main sequence star of photospheric temperature 15 000 K with a carbon ionizing flux (between 11.3 and 13.6 eV) of 2.63×10^{45} s^{-1} (Diaz-Miller et al. 1998). Assuming a r^{-2} law and having 44.3 $M_\odot$ inside a FWHM of 2500 AU (Duarte-Cabral et al. 2013), we get an H_2 density of $1.95\times10^{10}\times(r/100\,\mathrm{AU})^{-2}$ cm^{-3}. Using the recombination rate of the UMIST database (McElroy et al. 2013), assuming all carbon in atomic form and that ionization is dominated by carbon, we can estimate the thickness of the CII region (see Appendix C for details). For this estimate we also neglect the effect of dust extinction on the ionizing radiation. Even with these strong assumptions the above carbon ionizing flux can ionize a thin layer of only 0.1 AU for an internal radius of 100 AU (Appendix C). Such a thin layer would only contain 2.6×10^{50} ionized carbons, i.e. ~500 times less than observed. To increase the efficiency of the ionization, the ionizing radiation needs to reach lower density layers where the recombination is less efficient so that the relatively weak ionizing radiation is able to keep a large amount of carbon ionized. The typical required H_2 density is 4×10^7 cm^{-3} (see Appendix C). Such a density is expected at large radii, of the order of 2000 AU, which cannot be easily reached by inner UV radiation because of the expected large dust extinction from the inner envelope. Since CygX-N63 drives an outflow (Duarte-Cabral et al. 2013), its envelope has bipolar cavities, and should have a disk-like structure in the central regions that reduces extinction in the equatorial directions. It is difficult, however, to expect a reduced enough extinction for ionizing radiation to reach 2000 AU, which is close to the physical size of the envelope (see Bontemps et al. 2010).

4.4. X-ray ionization from an accretion shock?

CygX-N63 is actually a young protostar (Class 0) with a luminosity dominated by accretion. An accretion shock creates a hot plasma which radiates half of the accretion power outward. This plasma has a typical temperature of 10^6 K and mostly radiates in extreme UV, but also in X-rays. X-rays ionize gas more efficiently than does photospheric radiation (e.g. Montmerle 2001), and are also less affected by extinction than UVs (Ryter 1996) and could thus ionize carbon deeper in the envelope decreasing the extinction problem discussed in the previous section. A large fraction of X-ray ionization originates from locally emitted UV radiation (possibly down to carbon ionizing photons) as a result of local deposition of energy from photoelectric electrons generated by X-rays (Krolik & Kallman 1983; Glassgold et al. 2000). This has the interesting effect that X-rays, especially high-energy X-rays, can propagate deep in the envelope, being less affected by extinction than UVs, and deposit locally their energy as UV ionizing radiation. The total luminosity of CygX-N63 could represent up to 7.2×10^{46} s^{-1} ionizing photons for carbon, assuming that all the radiated energy is dedicated to C ionization, which is obviously the most optimistic view. Using the same assumptions as in Sect. 4.3, we find that the carbon ionized layer for an inner cavity of 100 AU would then be 2.6 AU and would contain 6.8×10^{51} ionized carbons, i.e. ~20 times less than observed. This is still a bit low, but the discrepancy is reduced compared to Sect. 4.3. The local density required to keep 1.2×10^{53} carbons ionized would be 1.1×10^9 cm^{-3}, i.e. ~20 times lower than the density at 100 AU

[4] There are no PAH features at 4.5 μm. Such strong excesses at 4.5 μm are usually referred to as EGOs (extended green objects) and are due to H_2 line emission in outflow shocks (e.g. Cyganowski et al. 2008).

in the pure spherical case. If the reachable density could be a bit reduced, for instance at the surface of the outflow cavities, as in the irradiated outflow wall scenario of Bruderer et al. (2009), the agreement could perhaps be reached, providing that a significant fraction of the available energy can be transfered to carbon ionization as discussed above. The estimate of the possible X-ray luminosity which could increase by orders of magnitude during accretion bursts (see Montmerle 2001 and references therein) and the overall efficiency of X-ray ionization at $R \sim 100$ AU accounting for X-ray absorption in such a complex geometry are difficult to assess precisely. We can only conclude that the ionizing power expected from an accretion shock may reach the right order of magnitude to explain our CF^+ detection.

4.5. Outflow shocks?

The last possible source of ionization is outflow shocks whose energy is extracted from the inner regions of the collapsing envelope. With a CO velocity of 40 km s^{-1} and an outflow force of 2.9×10^{-3} $M_\odot$ km s^{-1} yr^{-1} (Duarte-Cabral et al. 2013), we get an outflow luminosity of 9.6 $L_\odot$ which could represent up to 2×10^{45} s^{-1} carbon ionizing photons. Young jets are expected to radiate their energy through shocks. Three knots of 4.5 μm emission (shocked H_2) are indeed located in projection at only ~3.5″ from CygX-N63 (Fig. 2). These shocks should radiate in UV (van Kempen et al. 2009). For an average projection angle of 57°, the shocks would be then located at a radius of 9000 AU from the protostar where the expected n_H density in the envelope is 4.8×10^6 cm^{-3} (see Sect. 4.3). At this density an ionizing flux of only 1.6×10^{44} s^{-1} is required to keep ionized 1.2×10^{53} carbons. This is less than the available ionizing power of 2×10^{45} s^{-1}. An attenuation of the ionizing UVs in the outflow cavities is expected, but it is reduced to only 0.24 mag for the expected density[5] of 3.0×10^3 cm^{-3} in the cavities and for a distance[6] of 4500 AU. The shocks in the outflow may thus provide the required amount of ionizing photons to explain our CF^+ detection.

4.6. A CII region without HII region

In the two possible scenarios discussed above (Sects. 4.4 and 4.5) the produced UV radiation should ionize first hydrogen and create an HII region which has, however, not been detected in free-free emission (Fig. B.1). For densities and sizes involved in the accretion shock case the free-free emission has to be optically thick. We then estimate that the 5σ upper limit in free-free of 0.3 mJy would correspond to an emitting region of ~20 AU radius (see Appendix D). The C ionized region is expected to be more extended than the HII region and given the very uncertain geometry and density distribution, 20 AU could be considered to be roughly compatible with the 100 AU scale discussed above. In the outflow shock scenario, for a dissociative outflow shock with a jet velocity of 200 km s^{-1} and $n_H = 3 \times 10^{-3}$ cm^{-3}, the free-free emission is optically thin with $\tau_{ff} = 5 \times 10^{-4}$. For an ionizing flux of 2×10^{44} s^{-1}, using a recombination rate of $3 \times 10^{-13} n_{e^-}$ s^{-1} (Spitzer 1978) and for full ionization ($n_{e^-} = 3 \times 10^{-3}$ cm^{-3}), one gets $EM_V = 6.6 \times 10^{56}$ cm^{-3} leading to 0.94 mJy at 8.4 GHz (see Appendix D). This is only three times larger than the 0.3 mJy upper limit with the VLA which could be seen as a still acceptable discrepancy given the large uncertainties in the above estimates. We can therefore conclude that in both the accretion and outflow shocks scenarios a CII region can be detected in CF^+, while no free-free emission has been detected in the accompanying HII region.

4.7. A new probe of the early evolution of massive protostars

In conclusion, the first detection of CF^+ towards a massive protostar may provide us with a new tool for investigating the ionizing power of accretion and outflow shocks. In contrast to C^+ in the far-IR, CF^+ in the millimeter range can be observed at high spatial resolution with interferometer. It could offer the opportunity to image the development of C^+ regions even in the case of non-detection of any HII region. The indication of a possible strong X-ray and/or UV ionization also has important implications for the early chemical evolution in collapsing envelopes in the context of the formation of a hot core.

Acknowledgements. We thank V. Wakelam for fruitful discussions and N. Lagarde for reducing VLA data. This work is supported by the IdEx Bordeaux funding and by the project STARFICH, funded by the French National Research Agency (ANR). A.D.C. acknowledges funding from the FP7 ERC starting grant project LOCALSTAR.

References

André, P. 1987, in Protostars and Molecular Clouds, eds. T. Montmerle, & C. Bertout, 143
Bontemps, S., Motte, F., Csengeri, T., & Schneider, N. 2010, A&A, 524, A18
Bruderer, S., Benz, A. O., Doty, S. D., van Dishoeck, E. F., & Bourke, T. L. 2009, ApJ, 700, 872
Curiel, S., Canto, J., & Rodriguez, L. F. 1987, Rev. Mex. Astron. Astrofis., 14, 595
Curiel, S., Rodriguez, L. F., Bohigas, J., et al. 1989, Astrophys. Lett. Comm., 27, 299
Cyganowski, C. J., Whitney, B. A., Holden, E., et al. 2008, AJ, 136, 2391
Diaz-Miller, R. I., Franco, J., & Shore, S. N. 1998, ApJ, 501, 192
Duarte-Cabral, A., Bontemps, S., & Motte, F. 2013, A&A, 558, A125
Glassgold, A. E., Feigelson, E. D., & Montmerle, T. 2000, Protostars and Planets IV, 429
Guzmán, V., Roueff, E., Gauss, J., et al. 2012, A&A, 543, L1
Hennemann, M., Motte, F., Schneider, N., et al. 2012, A&A, 543, L3
Hosokawa, T., & Omukai, K. 2009, A&A, 691, 823
Krolik, J. H., & Kallman, T. R. 1983, ApJ, 267, 610
McElroy, D., Walsh, C., Markwick, A. J., et al. 2013, A&A, 550, A36
Montmerle, T. 2001, in From Darkness to Light: Origin and Evolution of Young Stellar Clusters, eds. T. Montmerle, & P. André, ASP Conf. Ser., 243, 731
Motte, F., Bontemps, S., Schilke, P., et al. 2007, A&A, 476, 1243
Neufeld, D., Wolfire, M., & Schilke, P. 2005, ApJ, 628, 260
Neufeld, D. A., Schilke, P., Menten, K. M., et al. 2006, A&A, 454, L37
Rygl, K. L. J., Brunthaler, A., Sanna, A., et al. 2012, A&A, 539, A79
Ryter, C. E. 1996, Ap&SS, 236, 285
Schneider, N., Bontemps, S., Simon, R., et al. 2006, A&A, 458, 855
Spitzer, L. 1978, Physical processes in the interstellar medium (New York: Wiley-Interscience)
van Kempen, T. A., van Dishoeck, E. F., Güsten, R., et al. 2009, A&A, 501, 633
Yorke, H., & Sonnhalter, C. 2002, ApJ, 569, 846

Pages 5 to 6 are available in the electronic edition of the journal at http://www.aanda.org

[5] For pressure equilibrium (Bruderer et al. 2009) and infall and outflow velocities of 1 and 40 km s^{-1} respectively, the cavity density should be $(1/40)^2$ of 4.8×10^6 cm^{-3}, i.e. 3.0×10^3 cm^{-3}.

[6] For an outflow opening angle of 60°, the distance to the outflow walls is typically of 4500 AU. For $n_H = 3 \times 10^3$ cm^{-3}, the visual extinction A_V is then of the order of 0.1 mag and the UV extinction of 0.24 mag using the A_{UV}/A_V ratio of 2.4 used in Bruderer et al. (2009).

Appendix A: CASSIS LTE modeling

CASSIS provides a Jython script which minimizes the χ^2 to find the best parameters to adjust the observations. With a spectrum i of N points, the χ^2 is derived as

$$\chi_i^2 = \sum_{j=1}^{N} \frac{(I_{\mathrm{obs},j} - I_{\mathrm{model},j})^2}{\mathrm{rms}_i^2 + \mathrm{cal}_i^2 (I_{\mathrm{obs},j} - I_{\mathrm{cont},j)^2}},$$

where I_{obs} and I_{model} are respectively the observed and the modeled intensities, I_{cont} is the continuum intensity, cal_i the calibration uncertainty for the spectrum i and N is the total number of points of the spectrum. The reduced χ^2 is the calculated as

$$\chi^2_{\mathrm{red}} = \frac{1}{N_{\mathrm{spectra}}} \sum_{i=1}^{N_{\mathrm{spectra}}} \frac{\chi_i^2}{\frac{N}{N_{\mathrm{ind}}} - \mathrm{d.o.f.}},$$

with N_{spectra} the number of spectra, N_{ind} the number of independent points, and dof the degree of freedom.

The adjustable parameters are the column density, temperature, FWHM, size of the source, and v_{LSR}. In the case of CF^+, the column density varies between 10^{10} and 10^{14} cm^{-2} with 500 steps; the other parameters were fixed. The temperature was set to 10 K, as in Neufeld et al. (2006) and Guzmán et al. (2012). The FWHM was measured on the spectrum as 1.6 km s^{-1}. No source size was assumed, so we kept the 30 m beam size of 25″. The velocity of the source is around −4 km s^{-1}. CASSIS also takes into account the beam size variation as a function of the frequency. The obtained χ^2_{red} is 3.22 and the column density is $(4 \pm 1) \times 10^{11}$ cm^{-2}.

The V_{LSR} and FWHM derived for the $J = 1{-}0$ line are then used to predict the intensity of the $J = 2{-}1$ line. We detected 202 CH_3CHO lines in the whole coverage and used a population diagram to derive a mean excitation temperature of 40 K and a column density of 3×10^{13} cm^{-2}. These values were used to model the CH_3CHO lines as shown in the bottom panel of Fig. 1.

Appendix B: VLA observations

CygX-N63 was observed on 27 April 2003 with the 27 antennas of the VLA in D configuration at 8.4 GHz (band *X*) (project AB1073). The image shown in Fig. B.1 corresponds to a total integration time of 25 mins spread over 4.5 h (track sharing technique to improve UV coverage). It has been cleaned with the clean algorithm of AIPS. The resulting rms is equal to 60.2 μJy/beam.

In the direction of CygX-N63, a weak peak of 0.14 mJy, i.e. at a level of 2.3σ, is found. Below 3σ it cannot be considered as a possible detection, especially because the side lobes (large stripes in the image of Fig. B.1) are roughly of the same intensity.

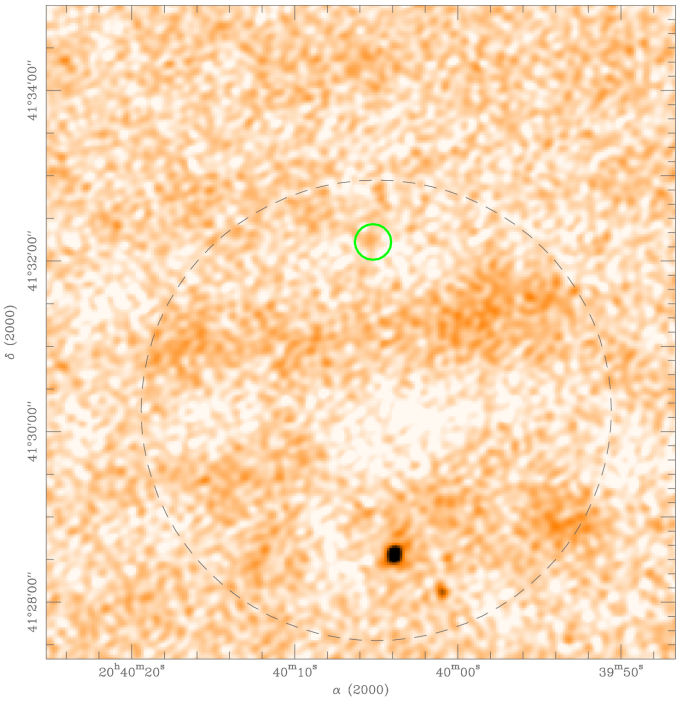


Fig. B.1. VLA image at 8.4 GHz of the same region than in Fig. 2 with color scale from −0.1 to 0.7 mJy/beam. The dashed ellipse indicates the VLA primary beam and the green circle shows the IRAM 30 m beam at 102 GHz. The rms in this image stays large, of the order of 0.06 mJy/beam, due to strong sidelobes originating from to DR22, a strong radio source (a compact HII region) outside the imaged field (~5 arcmin south).

Appendix C: Carbon ionization equilibrium

At equilibrium in spherical geometry from an initial radius r_{i} to the radius of the CII region (where mostly all carbons are ionized) r_{CII} the equilibrium of carbon ionization can be expressed as

$$Q_{\mathrm{CII}} = \int_{r_i}^{r_{\mathrm{CII}}} k_{\mathrm{rec}} n_{\mathrm{c+}} n_{\mathrm{e-}} 4\pi r^2 \mathrm{d}r,$$

where Q_{CII} is the total rate of ionizing photons (in s^{-1}), k_{rec} is the carbon recombination rate that we take as equal to $2.36 \times 10^{-12} (T/300)^{-0.29} \exp(-17.7/T)$ cm^3 s^{-1} (UMIST 2012 database McElroy et al. 2013), and $n_{\mathrm{c+}}$ and $n_{\mathrm{e-}}$ are the densities of C^+ and of electrons. For a large range of gas temperature (10 to 4000 K), k_{rec} stays within a factor of less than 2 around the adopted value of 1.74×10^{-12} s^{-1} (ranging from 1.08 to 2.80×10^{-12} s^{-1} with the maximum obtained at ~60 K).

If carbon ionization dominates and assuming C^+/H equal to the standard C/H ratio of 1.6×10^{-4} (if most of the carbon is in atomic form), we have $n_{\mathrm{e-}} = n_{\mathrm{C+}} = 1.6 \times 10^{-4} \times n_{\mathrm{H}}$. Assuming a r^{-2} density law and having 44.3 $M_\odot$ inside a FWHM of 2500 AU (Duarte-Cabral et al. 2013), we here get an H_2 density of $1.95 \times 10^{10} \times (r/100\,\mathrm{AU})^{-2}$ cm^{-3}. For this simple model, we get the following expression of the extent of the ionized region in the inner envelope,

$$r_{\mathrm{CII}} = \frac{r_i}{1 - \eta\, r_i} \quad \text{with} \quad \eta = \frac{Q_{\mathrm{CII}}}{2.85 \times 10^{50}\ \mathrm{s}^{-1}},$$

and the radii expressed in AU. For the case of Sect. 4.3 ($Q_{\mathrm{CII}} = 2.63 \times 10^{45}$ s^{-1}), one gets a very small value of 9.4×10^{-6} for η. For $r_i = 100$ AU, r_{CII} is then equal to 100.1 AU. Only the very first layers are ionized for values of Q_{CII} significantly lower than ~10^{50} s^{-1}.

The ionization equilibrium can also be expressed as

$$Q_{\mathrm{CII}} = \int_{r_i}^{r_{\mathrm{CII}}} k_{\mathrm{rec}} n_{\mathrm{e-}} \mathrm{d}N_{\mathrm{c+}}$$

with $N_{\mathrm{c+}}$ being the number of ionized carbons. It shows that $k_{\mathrm{rec}} n_{\mathrm{e-}}$ is the fraction of ionized carbons that recombines per second. For $n_{\mathrm{e-}} = 1.6 \times 10^{-4} \times n_{\mathrm{H}}$, we can then derive the typical

density (assuming constant density) required to keep an amount of ionized carbon N_{c+} ionized under an ionizing rate Q_{CII}. Here is the expression of this density n_H^{CII} for our adopted numerical values:

$$n_H^{CII} = 3.6 \times 10^{15} \frac{Q_{CII}}{N_{c+}} \text{ cm}^{-3}.$$

For the case of Sect. 4.3 with $Q_{CII} = 2.63 \times 10^{45}$ s^{-1} and $N_{c+} = 1.2 \times 10^{53}$, one gets $n_H^{CII} = 7.9 \times 10^7$ cm^{-3}.

Appendix D: Centimetric free-free emission

As discussed in Sect. 4.6, any ionized gas is expected to emit free-free emission.

The centimetric flux of free-free emission in the optically thin case can be expressed as a function of EM_V, the emission measure (see André 1987; Curiel et al. 1987),

$$\left(\frac{S_\nu}{\text{mJy}}\right) = 1.41 \left(\frac{EM_V}{10^{57}\text{ cm}^{-3}}\right)\left(\frac{T_e}{10^4\text{ K}}\right)^{-0.35} \times \left(\frac{\nu}{8.4\text{ GHz}}\right)^{-0.1} \left(\frac{d}{1.4\text{ kpc}}\right)^{-2}$$

with

$$EM_V \equiv \iiint n_e^2 \, \text{d}V.$$

The optical depth is expressed as a function of the linear emission measure EM_L ($\equiv \int n_e^2 \, \text{d}l$),

$$\tau_\nu \sim 1.22 \left(\frac{EM_L}{10^{27}\text{ cm}^{-5}}\right)\left(\frac{T_e}{10^4\text{ K}}\right)^{-1.35} \left(\frac{\nu}{8.4\text{ GHz}}\right)^{-2.1},$$

which is equal to $\sim 8.8 \times 10^6$ for $n_{e-} = n_H = 2.2 \times 10^9$ cm^{-3}, $l = 100$ AU (see Sect. 4.4), 10^4 K (the opacity is even larger for lower temperatures) and at 8.4 GHz (frequency of the VLA observation from Appendix B).

In the optically thick case the emission depends on the area of emission expressed in physical surface A_{em} if distance scaling is included,

$$\left(\frac{S_\nu}{\text{mJy}}\right) = 2.60 \frac{A_{em}}{(100\text{ au})^2} \left(\frac{T_e}{10^4\text{ K}}\right) \times \left(\frac{\nu}{8.4\text{ GHz}}\right)^2 \left(\frac{d}{1.4\text{ kpc}}\right)^{-2},$$

which is equal to 0.3 mJy for $A_{em} = \pi R_{em}^2$ with $R_{em} = 19.2$ AU (Sect. 4.4).

Curiel et al. (1987, 1989) also expressed the expected flux and optical depth in the case of a dissociative shock as a function of pre-shock density n_0 and shock velocity V_s (for $V_s \gtrsim 60$ km s^{-1}),

$$\tau_\nu \sim 5.22 \times 10^{-4} \left(\frac{n_0}{10^4\text{ cm}^{-3}}\right)\left(\frac{V_s}{100\text{ km s}^{-1}}\right)^{1.68} \times \left(\frac{T_e}{10^4\text{ K}}\right)^{-0.55} \left(\frac{\nu}{8.4\text{ GHz}}\right)^{-2.1},$$

which is found equal to 5×10^{-4} for $n_0 = 3 \times 10^{-3}$ cm^{-3}, $V_s = 200$ km s^{-1} (see Sect. 4.5), 10^4 K and at 8.4 GHz.

F.3 First unbiased spectral survey of a young and single massive protostar : CygX-N63

Proceeding SF2A
2013
Pages 219-22

SF2A 2013
L. Cambrésy, F. Martins, E. Nuss and A. Palacios (eds)

FIRST UNBIASED SPECTRAL SURVEY OF A YOUNG AND SINGLE MASSIVE PROTOSTAR: CYGX-N63

S. Fechtenbaum[2,1] and S. Bontemps[1,2]

Abstract. We present an unbiased spectral survey of a unique massive protostar in the Cygnus-X region: CygX-N63, performed with the 30m IRAM telescope. We identified 48 molecules over 106 GHz of bandwidth. Two prebiotic molecules were found: CH_2NH (methanimine) and NH_2CHO (formamide) and several rare molecules, such as CF^+ (fluoromethylidynium) or PN (phosphorous nitride). The spectral profiles and the population diagrams of the molecules allowed us to identify three emission regions in the protostar: the envelope, the outflow and a hot core-like region.

Keywords: star formation, chemistry, spectral survey, Cygnus-X

1 Introduction

The early phases of the massive star formation are poorly known. There are two main scenarios to explain the formation of massive stars (more than 8 solar masses). In the first one, a strong microturbulence allows the existence of large Jeans masses but T.Csengeri et al. (2010) found no clear evidence for such a microturbulence. They showed instead that small scale converging flows could initiate the formation of massive stars. This alternative scenario is supported by MHD simulations (B.Commerçon et al. 2011).

In this highly dynamical scenario, filaments play a key role. They are generated by large-scale magneto-hydrodynamic turbulence. Above a critical value of the mass per unit length, they fragment and form low-mass and intermediate mass stars (P.Palmeirim et al. 2013). In this view, high-mass stars could form where the filaments merge into ridges (M.Hennemann et al. 2012), leading to shocks. Therefore, the gas and possibly the grains undergo short temperature and density peaks. The chemical composition of the pre-collapse gas can be significantly modified by these variations. It is therefore crucial to explore precisely the chemical composition of young protostars, looking for signs of this early warm-up phase.

CygX-N63 was first discovered by F.Motte et al. (2007). This close object (1.4 kpc) is ideal to study the early phases of massive star formation. First, it is isolated enough to be observed alone in the beam of the IRAM 30m telescope. Secondly, it is very massive (M_{env}=$\sim$44 M$\odot$ within 2500 AU) (Duarte-Cabral et al. 2013) and not sub-fragmented, as showed by the dust emission, the molecular emission of ^{13}CS, OCS, D_2CO and CH_3CHO (seen with the PdBI in 2012, unpublished) and the presence of a powerful outflow, pointing to one single object. Thirdly, this protostar is still young, with a total luminosity of only 350 L$\odot$(Duarte-Cabral et al. 2013), which indicates that the accretion is not very strong yet. Besides, N63 is chemically very rich, suggesting that this object could be in a pre-hot core phase. We performed an unbiased spectral survey of this object to fully investigate its chemical composition. In a second part, we determined the spatial origin of the molecular emission, based on spectral profiles and population diagrams. Our main goal was to identify the molecules tracing the envelope, which contains the pristine gas at the origin of the massive stars.

2 Observations and data reduction

The unbiased spectral survey was made over 71 GHz at 1 mm and over 35 GHz at 3 mm with the IRAM-30m telescope in september 2012 and january 2013 toward CygX-N63, located at (δRA, δDec) = (20 40 05.2, 41 32 12.0) with respect to the phase center J2000. We used the wobbler switching mode.

[1] Univ. Bordeaux, LAB, UMR 5804, F-33270, Floirac, France
[2] CNRS, LAB, UMR 5804, F-33270, Floirac, France

© Société Francaise d'Astronomie et d'Astrophysique (SF2A) 2013

The spectra were assembled and baseline-corrected with the GILDAS* softwares. We converted the data into main-beam temperature (T_{mb}) using the interpolated forward and main-beam efficiencies (F_{eff} and B_{eff}) given by the IRAM. The spectral resolution is 195 kHz. The analysis was performed with the help of the CASSIS† software using the CDMS, JPL and VASTEL catalogues.

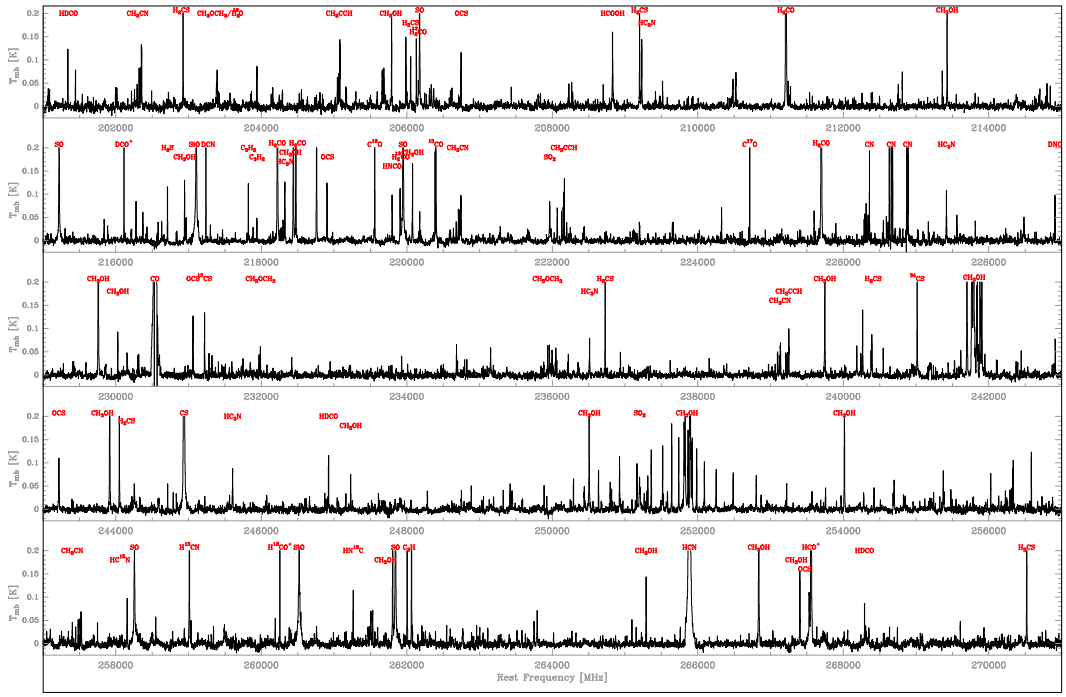


Fig. 1. Spectrum of CygX-N63 at 1mm, with some of the strongest identified lines.

3 Results

3.1 Line identification

We were able to identify $\sim$ 95% of the lines, namely 1702 identified lines. The figure 1 displays the spectrum at 1 mm. 48 molecules were found in CygX-N63, plus 35 isotopologues and 14 deuterated molecules, shown in the table 1. All families of molecules are represented: organic molecules, complex organic molecules (COMs: more than 6 atoms), N-bearing, S-bearing, carbon chains. Some rare molecules were also identified, such as the ion fluoromethyliumylidene CF^+ (see details in S.Fechtenbaum *in prep.*) or the phosphorous nitride PN. Two prebiotic molecules were also observed: the methanimine CH_2NH and the formamide NH_2CHO.

3.2 Chemical composition

We used the software CASSIS to derive the column densities and the excitation temperatures using population diagrams for the molecules for which we had at least two lines. We assumed that the local thermodynamical equilibrium (LTE) was established and that the cosmological background was negligible. For a part of the molecules, such as SO, SO_2, OCS, o-H_2CO, CS, HCO^+ or HCN, we had several isotopologues and could therefore correct the opacity effect. For the other molecules, we know that the column densities may be underestimated.

The beam dilution was taken into account. Based on previous observations of the source with the Plateau de Bure Interferometer (PdBI) at 1 mm, we chose different source size: 10" of diameter for the outflow, 1.4" for the envelope and 0.1" for the hot core-like region. The corresponding size for the hot core-like region is $\sim$ 140 AU, larger than a hot corino. Population diagrams were made by plotting $ln(N_u/g_u)$ as a function of E_u/kT_{ex}, following the relation:

*See `http:/www.iram.fr/IRAMFR/GILDAS/` for more information.
†See `http://cassis.irap.omp.eu/` for more information.

Organic molecules	CO	HCO	CH_3OH	H_2CO	H_2CCO
Complex organic molecules	CH_3OCH_3	$HCOOCH_3$	CH_3CHO	C_2H_5OH	HCOOH
CH_3COCH_3 ?	Ethylene oxide ?	Propanal ?			
Carbon chains	CCH	C_3H	C_4H	o-c-C_3H_2	p-c-C_3H_2
CH_3CCH					
N-bearing molecules	CN	HCN	HNC	HC_3N	HC_5N
C_3N	CH_3CN	C_2H_5CN	HNCO	NO	HCCNC ?
S, P and Si-bearing molecules	CS	CCS	C_3S	H_2S	H_2CS
OCS	SO	SO_2	NS	SiO	PN
Deuterated molecules	CH_2DOH	HDCS	HDCO	NH_2D	o-D_2CO
CCD	DCN	DC_3N	HDO	CH_2DCCH	C_3HD
Ions	HCO^+	$HOCO^+$	N_2H^+	DCO^+	$DOCO^+$?
N_2D^+	HCS^+	CF^+			

Table 1. Molecules detected toward CygX-N63

$$ln\frac{N_u}{g_u} = lnN_{tot} - lnQ(T_{ex}) - \frac{E_u}{kT_{ex}} \qquad with \qquad N_u = W \times \frac{8\pi k\nu^2}{hc^3 A_{ul}} \times C_{tau} \tag{3.1}$$

where N_u is the column density of the energy level u, g_u the statistical weight of this level, W the integrated area of the line and Q is the partition function[‡]. A_{ul} is the Einstein coefficient and C_{tau} the optical depth correction factor. The total column density and the excitation temperature, which is equal to the kinetic temperature if the LTE is established, are then given by CASSIS. The excitation temperatures are presented in figure 2.

To derive the column density of H_2, we used the envelope mass determined by Duarte-Cabral et al. (2013): 44 M$\odot$ within a full width at half maximum (FWHM) of 2500 AU. We took the mass contained in 1.95 σ and derived $n_{H_2} = 7.81 \times 10^{24} cm^{-2}$. We could then obtain the abundances by dividing the column densities by n_{H_2}.

3.3 Spatial origin of the molecular emission

Analyzing the spectral profiles and the rotational diagrams allowed us to find the origin of the emission for a part of the observed molecules. The spectral profiles can be divided into two groups. In the first group, the spectral profiles are well fitted by a single gaussian. The lines have a low average FWHM of (2.3 ± 0.3) km.s^{-1} and the population diagrams give an average excitation temperature of T_{ex} = (18 ± 3) K. This group contains C_4H, DC_3N, HC_5N, HDCS, $HOCO^+$, o-c-C_3H_2 and o-D_2CO. These molecules are probably tracing the envelope, where we expect such low temperature and velocity dispersion.

In the second group, the spectral profiles are better fitted with two gaussians, a narrow and a large. We plotted population diagrams for the two components separately. The features of the first component are a FWHM of (2.8 ± 0.2) km.s^{-1} and T_{ex} = (19 ± 3) K, which is very similar to the first group and therefore indicates that this narrow component may also correspond to the envelope. The large component features T_{ex} = (26 ± 3) K and a FWHM of (9.6 ± 0.5) km.s^{-1}. This group contains SiO, ^{29}SiO, SO, ^{34}SO, SO_2, HC_3N, $H^{13}CCCN$, HNCO, CCS, CH_3CN, a-CH_3CCH, e-CH_3CCH, H_2CCO, CS, CCS, OCS, o-H_2CO, HDCO, HCO^+ and HCN. CygX-N63 is known to have a powerful outflow (T.Csengeri et al. 2010) and some of these molecules, such as SiO, are recognized tracers of the outflow. We can thus infer that all molecules in this group are tracing the outflow, which is consistent with this large velocity dispersion.

On the other hand, we noticed that some molecules display population diagrams with two different slopes, which means two different excitation temperatures. It was the case for several COMs: CH_3OH, $HCOOCH_3$ and CH_3OCH_3, but also for $^{13}CH_3OH$ and CH_2DOH, which suggest that these two different temperatures are not only an effect of the opacity. The two averaged excitation temperatures are (23^{+28}_{-7}) K and (124^{+199}_{-43}) K. Note that these two components were not distinguishable in the spectral profiles, which means that they have approximately the same velocity dispersion. The two emission regions may therefore be spatially related. In addition, the COMs are known to be features of the hot core. Therefore we conclude that the cold component could correspond to the envelope or to the inner edge of the envelope and that the hot component could arise

[‡]See *Formalism for the CASSIS software on* `http://cassis.irap.omp.eu/?page=documentation`

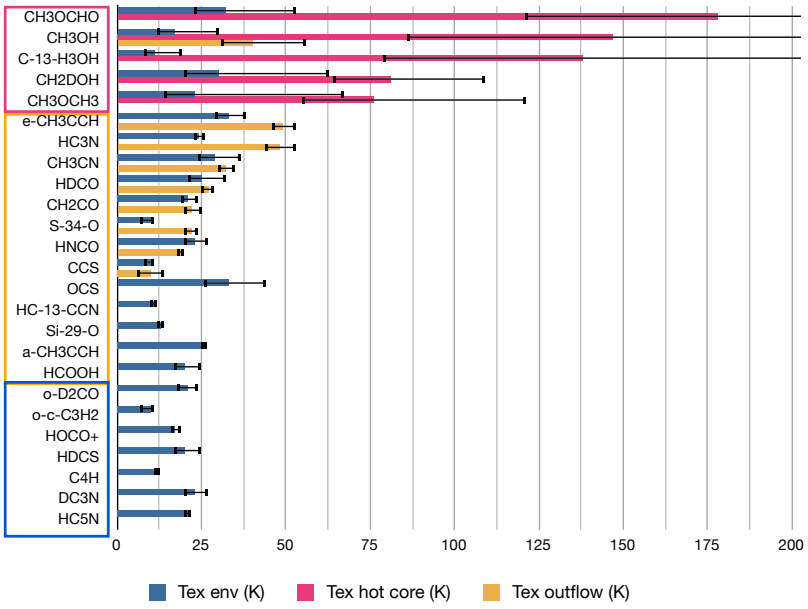


Fig. 2. Excitation temperatures derived from population diagrams. Molecules tracing the envelope are represented in blue, those tracing the outflow in yellow and those tracing the hot core-like region in pink.

from a hot core-like region. The abundances in this heated hot core-like region give a first-order idea of the composition of the grains, because a part of the ice mantle of the grains is sublimated, releasing the molecules.

The excited methanol $^*CH_3OH$ is a particular case because it displays at the same time two components in its spectral profile and two components in its rotational diagram. It traces the envelope, the hot core-like region and the outflow.

4 Conclusions

We performed a large unbiased spectral survey toward a young and massive protostellar object, revealing a very rich chemistry. Population diagrams and spectral profiles allowed us to separate the possible sources of the emission: outflow, envelope and hot core-like region. We were able to identify molecules tracing the cold envelope, which contains the pristine gas at the origin of the massive stars. The next step of our work is to compare the observed abundances, in particular in the envelope and on the grains, to the predictions given by a chemical gas-grain code called Nautilus developed in Bordeaux (U.Hincelin et al. 2013). The aim is to follow the evolution of the physical conditions in the gas which will eventually form the massive star.

References

B.Commerçon, P.Hennebelle, & T.Henning. 2011, The Astrophysical Journal Letters
Duarte-Cabral, A., S.Bontemps, F.Motte, et al. 2013, Astronomy and Astrophysics
F.Motte, S.Bontemps, P.Schilke, et al. 2007, Astronomy and Astrophysics
M.Hennemann, F.Motte, N.Schneider, et al. 2012, Astronomy and Astrophysics
P.Palmeirim, P.André, J.Kirk, et al. 2013, Astronomy and Astrophysics
T.Csengeri, S.Bontemps, N.Schneider, F.Motte, & S.Dib. 2010, Astronomy and Astrophysics
U.Hincelin, Wakelam, V., B.Commerçon, Hersant, F., & S.Guilloteau. 2013, The Astrophysical Journal

BIBLIOGRAPHIE

F. C. Adams, C. J. Lada, and F. H. Shu. Spectral evolution of young stellar objects. *ApJ*, 312 :788–806, jan 1987.

E. Anders and N. Grevesse. Abundances of the elements - Meteoritic and solar. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 53 :197–214, jan 1989.

P. André. Low-Mass Protostars and Protostellar Stages. *Astrophysics and Space Science*, 224 :29–42, feb 1995.

P. Andre, D. Ward-Thompson, and M. Barsony. Submillimeter continuum observations of Rho Ophiuchi A - The candidate protostar VLA 1623 and prestellar clumps. *ApJ*, 406 :122–141, mar 1993.

P. Andre, D. Ward-Thompson, and M. Barsony. From Prestellar Cores to Protostars : the Initial Conditions of Star Formation. *Protostars and Planets IV*, may :59, 2000.

T. Aota and Y. Aikawa. Phosphorus Chemistry in the Shocked Region L1157 B1. *ApJ*, 761 :74, dec 2012.

Z. Awad, S. Viti, E. Bayet, and P. Caselli. Deuterium chemistry of dense gas in the vicinity of low-mass and massive star-forming regions. *MNRAS*, 443 :275–287, sep 2014.

A. Bacmann, B. Lefloch, C. Ceccarelli, J. Steinacker, A. Castets, and L. Loinard. CO Depletion and Deuterium Fractionation in Prestellar Cores. *ApJ*, 585 :L55–L58, mar 2003.

A. Bacmann, V. Taquet, A. Faure, C. Kahane, and C. Ceccarelli. Detection of complex organic molecules in a prestellar core : a new challenge for astrochemical models. *A&A*, 541 :L12, may 2012.

V. Barone, C. Latouche, D. Skouteris, F. Vazart, N. Balucani, C. Ceccarelli, and B. Lefloch. Gas phase formation of the prebiotic molecule formamide : insights from new quantum computations. *ArXiv e-prints*, jul 2015.

M. R. Bate. Collapse of a Molecular Cloud Core to Stellar Densities : The First Three-dimensional Calculations. *ApJ*, 508 :L95–L98, nov 1998.

A. Belloche. *"Structure en vitesse des enveloppes protostellaires : effondrement gravitationnel et rotation"*. Thèse de doctorat, Université Paris-Sud XI, 2002.

A. Belloche, P. André, D. Despois, and S. Blinder. Molecular line study of the very young protostar IRAM 04191 in Taurus : infall, rotation, and outflow. *A&A*, 393 :927–947, oct 2002.

A. Belloche, H. S. P. Müller, K. M. Menten, P. Schilke, and C. Comito. Complex organic molecules in the interstellar medium : IRAM 30 m line survey of Sagittarius B2(N) and (M). *A&A*, 559 :A47, nov 2013.

E. A. Bergin and M. Tafalla. Cold Dark Clouds : The Initial Conditions for Star Formation. *ARA&A*, 45 :339–396, sep 2007a.

E. A. Bergin and M. Tafalla. Cold Dark Clouds : The Initial Conditions for Star Formation. *ARA&A*, 45 :339–396, sep 2007b.

S. E. Bisschop, J. K. Jørgensen, E. F. van Dishoeck, and E. B. M. de Wachter. Testing grain-surface chemistry in massive hot-core regions. *A&A*, 465 :913–929, apr 2007.

N. Biver, D. Bockelée-Morvan, V. Debout, J. Crovisier, J. Boissier, D. C. Lis, N. Dello Russo, R. Moreno, P. Colom, G. Paubert, R. Vervack, and H. A. Weaver. Complex organic molecules in comets C/2012 F6 (Lemmon) and C/2013 R1 (Lovejoy) : detection of ethylene glycol and formamide. *A&A*, 566 :L5, jun 2014.

I. A. Bonnell and M. R. Bate. Star formation through gravitational collapse and competitive accretion. *MNRAS*, 370 :488–494, jul 2006.

I. A. Bonnell, M. R. Bate, C. J. Clarke, and J. E. Pringle. Accretion and the stellar mass spectrum in small clusters. *MNRAS*, 285 :201–208, feb 1997.

I. A. Bonnell, M. R. Bate, and H. Zinnecker. On the formation of massive stars. *MNRAS*, 298 :93–102, jul 1998.

I. A. Bonnell, M. R. Bate, C. J. Clarke, and J. E. Pringle. Competitive accretion in embedded stellar clusters. *MNRAS*, 323 :785–794, may 2001.

W. B. Bonnor. Boyle's Law and gravitational instability. *MNRAS*, 116 :351, 1956.

S. Bontemps, P. Andre, S. Terebey, and S. Cabrit. Evolution of outflow activity around low-mass embedded young stellar objects. *A&A*, 311 :858–872, jul 1996.

S. Bontemps, F. Motte, T. Csengeri, and N. Schneider. Fragmentation and mass segregation in the massive dense cores of cygnus x. *A&A*, 524 :A18, dec 2010.

A. M. S. Boonman, E. F. van Dishoeck, F. Lahuis, and S. D. Doty. Gas-phase CO_2 toward massive protostars. *A&A*, 399 :1063–1072, mar 2003.

S. Bottinelli, C. Ceccarelli, J. P. Williams, and B. Lefloch. Hot corinos in NGC 1333-IRAS4B and IRAS2A. *A&A*, 463 :601–610, feb 2007.

H. M. Butner, E. A. Lada, and R. B. Loren. Physical Properties of Dense Cores : DCO + Observations. *ApJ*, 448 :207, jul 1995.

P. Caselli and C. Ceccarelli. Our astrochemical heritage. *A&A Rev.*, 20 :56, oct 2012.

P. Caselli, T. I. Hasegawa, and E. Herbst. Chemical differentiation between star-forming regions - The Orion Hot Core and Compact Ridge. *ApJ*, 408 :548–558, may 1993.

P. Caselli, C. M. Walmsley, R. Terzieva, and E. Herbst. The Ionization Fraction in Dense Cloud Cores. *ApJ*, 499 :234–249, may 1998.

A. Castets, C. Ceccarelli, L. Loinard, E. Caux, and B. Lefloch. Multiple shocks around the low-luminosity protostar IRAS 16293-2422. *A&A*, 375 :40–53, aug 2001.

E. Caux, C. Kahane, A. Castets, A. Coutens, C. Ceccarelli, A. Bacmann, S. Bisschop, S. Bottinelli, C. Comito, F. P. Helmich, B. Lefloch, B. Parise, P. Schilke, A. G. G. M. Tielens, E. van Dishoeck, C. Vastel, V. Wakelam, and A. Walters. TIMASSS : the IRAS 16293-2422 millimeter and submillimeter spectral survey. I. Observations, calibration, and analysis of the line kinematics. *A&A*, 532 : A23, aug 2011.

S. Cazaux, A. G. G. M. Tielens, C. Ceccarelli, A. Castets, V. Wakelam, E. Caux, B. Parise, and D. Teyssier. The Hot Core around the Low-mass Protostar IRAS 16293-2422 : Scoundrels Rule ! *ApJ*, 593 : L51–L55, aug 2003.

C. Ceccarelli, S. Maret, A. G. G. M. Tielens, A. Castets, and E. Caux. Theoretical H2CO emission from protostellar envelopes. *A&A*, 410 :587–595, nov 2003.

C. Ceccarelli, P. Caselli, E. Herbst, A. G. G. M. Tielens, and E. Caux. Extreme Deuteration and Hot Corinos : The Earliest Chemical Signatures of Low-Mass Star Formation. *Protostars and Planets V*, pages 47–62, 2007.

J. Cernicharo, N. Marcelino, E. Roueff, M. Gerin, A. Jiménez-Escobar, and G. M. Muñoz Caro. Discovery of the Methoxy Radical, CH_3O, toward B1 : Dust Grain and Gas-phase Chemistry in Cold Dark Clouds. *ApJ*, 759 :L43, nov 2012.

C. J. Chandler, W. K. Gear, and R. Chini. Dust emission associated with DR21 (OH). *MNRAS*, 260 : 337–342, jan 1993.

S. B. Charnley. Hot Core Chemistry. *Astrophysics and Space Science*, 224 :251–254, feb 1995.

S. B. Charnley and T. J. Millar. The Chemistry of Phosphorus in Hot Molecular Cores. *MNRAS*, 270 : 570, oct 1994.

S. B. Charnley, S. D. Rodgers, and P. Ehrenfreund. Gas-grain chemical models of star-forming molecular clouds as constrained by ISO and SWAS observations. *A&A*, 378 :1024–1036, nov 2001.

D. Chomiak, A. Taleb-Bendiab, S. Civis, and T. Amano. Millimetre-wave laboratory detection of H2COH+. *Canadian Journal of Physics*, 72(11-12) :1078–1081, 1994.

A. Crapsi, P. Caselli, C. M. Walmsley, P. C. Myers, M. Tafalla, C. W. Lee, and T. L. Bourke. Probing the Evolutionary Status of Starless Cores through N2H+ and N2D+ Observations. *ApJ*, 619 :379–406, jan 2005.

P. A. Crowther, O. Schnurr, R. Hirschi, N. Yusof, R. J. Parker, S. P. Goodwin, and H. A. Kassim. The R136 star cluster hosts several stars whose individual masses greatly exceed the accepted 150M_{solar} stellar mass limit. *MNRAS*, 408 :731–751, oct 2010.

T. Csengeri, S. Bontemps, N. Schneider, F. Motte, and S. Dib. Gas dynamics in massive dense cores in cygnus-x. *A&A*, 527 :A135, mar 2011a.

T. Csengeri, S. Bontemps, N. Schneider, F. Motte, F. Gueth, and J. L. Hora. Convergent Flows and Low-velocity Shocks in DR21(OH). *ApJ*, 740 :L5, oct 2011b.

F. Daniel, M. Agúndez, J. Cernicharo, E. De Beck, R. Lombaert, L. Decin, C. Kahane, M. Guélin, and H. S. P. Müller. Herschel/HIFI observation of highly excited rotational lines of HNC toward IRC +10 216. *A&A*, 542 :A37, jun 2012.

J. A. Davidson, G. Novak, T. G. Matthews, B. Matthews, P. F. Goldsmith, N. Chapman, N. H. Volgenau, J. E. Vaillancourt, and M. Attard. Magnetic Field Structure Around Low-mass Class 0 Protostars : B335, L1527, and IC348-SMM2. *ApJ*, 732 :97, may 2011.

J. E. Dickens, W. M. Irvine, C. H. DeVries, and M. Ohishi. Hydrogenation of interstellar molecules : A survey for methylenimine (ch_2nh). *ApJ*, 479 :307–312, apr 1997.

J. E. Dickens, W. M. Irvine, R. L. Snell, E. A. Bergin, F. P. Schloerb, P. Pratap, and M. P. Miralles. A Study of the Physics and Chemistry of L134N. *ApJ*, 542 :870–889, oct 2000.

B. T. Draine. Interstellar dust grains. *ARA&A*, 41 :241–289, 2003.

A. Duarte-Cabral, S. Bontemps, and F. Motte. CO outflows from high-mass Class 0 protostars in Cygnus-X. *A&A*, 558 :A125, oct 2013.

A. Dutrey, T. Henning, S. Guilloteau, D. Semenov, V. Piétu, K. Schreyer, A. Bacmann, R. Launhardt, J. Pety, and F. Gueth. Chemistry in disks. I. Deep search for N2H+ in the protoplanetary disks around LkCa 15, MWC 480, and DM Tauri. *A&A*, 464 :615–623, mar 2007.

R. Ebert. Temperatur des interstellaren Gases bei grossen Dichten. Mit 1 Textabbildung. *Zeitschrift für Astrophysik*, 36 :222, 1955.

M. Elitzur, D. J. Hollenbach, and C. F. McKee. H2O masers in star-forming regions. *ApJ*, 346 :983–990, nov 1989.

C. Fallscheer, H. Beuther, Q. Zhang, E. Keto, and T. K. Sridharan. Rotational structure and outflow in the infrared dark cloud 18223-3. *A&A*, 504 :127–137, sep 2009.

S. Fechtenbaum, S. Bontemps, N. Schneider, T. Csengeri, A. Duarte-Cabral, F. Herpin, and B. Lefloch. First detection of cf+ towards a high-mass protostar. *A&A*, 574 :L4, feb 2015.

C. Federrath. Inefficient star formation through turbulence, magnetic fields and feedback. *MNRAS*, 450 : 4035–4042, jul 2015.

F. Fontani, P. Caselli, A. Crapsi, R. Cesaroni, S. Molinari, L. Testi, and J. Brand. Searching for massive pre-stellar cores through observations of $N2H^+$ and $N2D^+$. *A&A*, 460 :709–720, dec 2006.

F. Fontani, A. Palau, P. Caselli, Á. Sánchez-Monge, M. J. Butler, J. C. Tan, I. Jiménez-Serra, G. Busquet, S. Leurini, and M. Audard. Deuteration as an evolutionary tracer in massive-star formation. *A&A*, 529 :L7, may 2011.

A. Fuente, R. Neri, and P. Caselli. Detection of a hot core in the intermediate-mass Class 0 protostar NGC 7129-FIRS 2. *A&A*, 444 :481–493, 2005.

G. Garay and S. Lizano. Massive stars : Their environment and formation. *The Publications of the Astronomical Society of the Pacific*, 111 :1049–1087, sep 1999.

R. T. Garrod and E. Herbst. Formation of methyl formate and other organic species in the warm-up phase of hot molecular cores. *A&A*, 457 :927–936, oct 2006.

R. T. Garrod, V. Wakelam, and E. Herbst. Non-thermal desorption from interstellar dust grains via exothermic surface reactions. *A&A*, 467 :1103–1115, jun 2007.

R. T. Garrod, S. L. W. Weaver, and E. Herbst. Complex chemistry in star-forming regions : An expanded gas-grain warm-up chemical model. *ApJ*, pages 283–302, jul 2008.

W. D. Geppert, M. Hamberg, R. D. Thomas, F. Österdahl, F. Hellberg, V. Zhaunerchyk, A. Ehlerding, T. J. Millar, H. Roberts, J. Semaniak, M. A. Ugglas, A. Källberg, A. Simonsson, M. Kaminska, and M. Larsson. Dissociative recombination of protonated methanol. *Faraday Discussions*, 133 :177, 2006.

M. Gerin, F. Combes, G. Wlodarczak, P. Encrenaz, and C. Laurent. Interstellar detection of deuterated methyl acetylene. *A&A*, 253 :L29–L32, jan 1992.

T. Gerner, H. Beuther, D. Semenov, H. Linz, T. Vasyunina, S. Bihr, Y. L. Shirley, and T. Henning. Chemical evolution in the early phases of massive star formation. i. *A&A*, 563 :A97, 2014.

E. Gibb, A. Nummelin, W. M. Irvine, D. C. B. Whittet, and P. Bergman. Chemistry of the Organic-Rich Hot Core G327.3-0.6. *ApJ*, 545 :309–326, dec 2000.

B. Godard, E. Falgarone, and G. Pineau Des Forêts. Models of turbulent dissipation regions in the diffuse interstellar medium. *A&A*, 495 :847–867, mar 2009.

P. D. Godfrey, R. D. Brown, B. J. Robinson, and M. W. Sinclair. Discovery of Interstellar Methanimine (Formaldimine). *Astrophys. Lett.*, 13 :119, feb 1973.

P. F. Goldsmith and W. D. Langer. Population Diagram Analysis of Molecular Line Emission. *ApJ*, 517 : 209–225, may 1999.

J. M. Greenberg and V. Pirronello. Book-Review - Chemistry in Space. *Journal of the British Astronomical Association*, 101 :128, apr 1991.

N. Grevesse and A. J. Sauval. Standard Solar Composition. *Space Science Reviews*, 85 :161–174, may 1998.

S. Guilloteau, A. Dutrey, V. Wakelam, F. Hersant, D. Semenov, E. Chapillon, T. Henning, and V. Piétu. Chemistry in disks. VIII. The CS molecule as an analytic tracer of turbulence in disks. *A&A*, 548 : A70, dec 2012.

D. T. Halfen, V. V. Ilyushin, and L. M. Ziurys. Insights into Surface Hydrogenation in the Interstellar Medium : Observations of Methanimine and Methyl Amine in Sgr B2(N). *ApJ*, 767 :66, apr 2013.

T. I. Hasegawa and E. Herbst. New gas-grain chemical models of quiescent dense interstellar clouds - the effects of h2 tunnelling reactions and cosmic ray induced desorption. *MNRAS*, 261 :83–102, mar 1993.

P. Hennebelle and R. Teyssier. Magnetic processes in a collapsing dense core. II. Fragmentation. Is there a fragmentation crisis ? *A&A*, 477 :25–34, jan 2008.

M. Hennemann, F. Motte, N. Schneider, P. Didelon, T. Hill, D. Arzoumanian, S. Bontemps, T. Csengeri, P. André, V. Konyves, F. Louvet, A. Marston, A. Men'shchikov, V. Minier, Q. Nguyen Luong, P. Palmeirim, N. Peretto, M. Sauvage, A. Zavagno, L. D. Anderson, J.-P. Bernard, J. Di Francesco, D. Elia, J. Z. Li, P. G. Martin, S. Molinari, S. Pezzuto, D. Russeil, K. L. J. Rygl, E. Schisano, L. Spinoglio, T. Sousbie, D. Ward-Thompson, and G. J. White. The spine of the swan : a herschel study of the dr21 ridge and filaments in cygnus x. *A&A*, 543 :L3, jul 2012.

R. Henriksen, P. Andre, and S. Bontemps. Time-dependent accretion and ejection implied by pre-stellar density profiles. *A&A*, 323 :549–565, jul 1997.

E. Herbst and E. F. van Dishoeck. Complex organic interstellar molecules. *ARA&A*, 47 :427–480, sep 2009.

E. Herbst, N. G. Adams, D. Smith, and D. J. Defrees. Ion-molecule calculation of the abundance ratio of CCD to CCH in dense interstellar clouds. *ApJ*, 312 :351–357, jan 1987.

F. Herpin, M. Marseille, V. Wakelam, S. Bontemps, and D. C. Lis. S-bearing molecules in massive dense cores. *A&A*, 504 :853–867, sep 2009.

F. Hersant, V. Wakelam, A. Dutrey, S. Guilloteau, and E. Herbst. Cold CO in circumstellar disks. On the effects of photodesorption and vertical mixing. *A&A*, 493 :L49–L52, jan 2009.

T. Hezareh, M. Houde, C. McCoey, C. Vastel, and R. Peng. Simultaneous Determination of the Cosmic Ray Ionization Rate and Fractional Ionization in DR 21(OH). *ApJ*, 684 :1221–1227, sep 2008.

T. Hill, F. Motte, P. Didelon, S. Bontemps, V. Minier, M. Hennemann, N. Schneider, P. André, A. Men'shchikov, L. D. Anderson, D. Arzoumanian, J.-P. Bernard, J. di Francesco, D. Elia, T. Giannini, M. J. Griffin, V. Könyves, J. Kirk, A. P. Marston, P. G. Martin, S. Molinari, Q. Nguyen Luong, N. Peretto, S. Pezzuto, H. Roussel, M. Sauvage, T. Sousbie, L. Testi, D. Ward-Thompson, G. J. White, C. D. Wilson, and A. Zavagno. Filaments and ridges in Vela C revealed by Herschel : from low-mass to high-mass star-forming sites. *A&A*, 533 :A94, sep 2011.

U. Hincelin. *Caractérisation physico-chimique des premières phases de formation des disques protoplanétaires*. PhD thesis, Université Bordeaux 1, 2012.

U. Hincelin, V. Wakelam, F. Hersant, S. Guilloteau, J. C. Loison, P. Honvault, and J. Troe. Oxygen depletion in dense molecular clouds : a clue to a low O_2 abundance ? *A&A*, 530 :A61, jun 2011.

U. Hincelin, V. Wakelam, B. Commerçon, F. Hersant, and S. Guilloteau. Survival of interstellar molecules to prestellar dense core collapse and early phases of disk formation. *The Astrophysical Journal*, 775 :44, sep 2013.

J. M. Hollis, P. R. Jewell, F. J. Lovas, A. Remijan, and H. Møllendal. Green Bank Telescope Detection of New Interstellar Aldehydes : Propenal and Propanal. *ApJ*, 610 :L21–L24, jul 2004.

A. Isella. *Interferometric observations of pre-main sequence disks*. PhD thesis, Universita degli Studi di Milano, 2006.

K. Ishii, A. Tajima, T. Taketsugu, and K. Yamashita. Theoretical Elucidation of the Unusually High [HNC]/[HCN] Abundance Ratio in Interstellar Space. *ApJ*, 636 :927–931, jan 2006.

A. A. Jaber, C. Ceccarelli, C. Kahane, and E. Caux. The Census of Complex Organic Molecules in the Solar-type Protostar IRAS16293-2422. *ApJ*, 791 :29, aug 2014.

E. B. Jenkins. A Unified Representation of Gas-Phase Element Depletions in the Interstellar Medium. *ApJ*, 700 :1299–1348, aug 2009.

Z. Jiang, M. Tamura, M. Fukagawa, J. Hough, P. Lucas, H. Suto, M. Ishii, and J. Yang. A circumstellar disk associated with a massive protostellar object. *Nature*, 437 :112–115, sep 2005.

J. K. Jørgensen, F. L. Schöier, and E. F. van Dishoeck. Molecular inventories and chemical evolution of low-mass protostellar envelopes. *A&A*, 416 :603–622, mar 2004.

C. Kahane, C. Ceccarelli, A. Faure, and E. Caux. Detection of Formamide, the Simplest but Crucial Amide, in a Solar-type Protostar. *ApJ*, 763 :L38, feb 2013.

S. V. Kalenskii, V. I. Slysh, P. F. Goldsmith, and L. E. B. Johansson. A 4-6 ghz spectral scan and 8-10 ghz observations of the dark cloud tmc-1. *ApJ*, 610 :329–338, jul 2004.

A. Karska, F. Herpin, S. Bruderer, J. R. Goicoechea, G. J. Herczeg, E. F. van Dishoeck, I. San José-García, A. Contursi, H. Feuchtgruber, D. Fedele, A. Baudry, J. Braine, L. Chavarría, J. Cernicharo, F. F. S. van der Tak, and F. Wyrowski. Far-infrared molecular lines from low- to high-mass star forming regions observed with Herschel. *A&A*, 562 :A45, feb 2014.

L. Kolesniková, B. Tercero, J. Cernicharo, J. L. Alonso, A. M. Daly, B. P. Gordon, and S. T. Shipman. Spectroscopic Characterization and Detection of Ethyl Mercaptan in Orion. *ApJ*, 784 :L7, mar 2014.

S. Kraus, K.-H. Hofmann, K. M. Menten, D. Schertl, G. Weigelt, F. Wyrowski, A. Meilland, K. Perraut, R. Petrov, S. Robbe-Dubois, P. Schilke, and L. Testi. A hot compact dust disk around a massive young stellar object. *Nature*, 466 :339–342, jul 2010.

M. R. Krumholz, R. I. Klein, C. F. McKee, S. S. R. Offner, and A. J. Cunningham. The Formation of Massive Star Systems by Accretion. *Science*, 323 :754–, feb 2009.

T. A. Kuchar and T. M. Bania. Kinematic distances of Galactic H II regions from H I absorption studies. *ApJ*, 436 :117–124, nov 1994.

R. Kuiper, H. W. Yorke, and N. J. Turner. Protostellar Outflows and Radiative Feedback from Massive Stars. *ApJ*, 800 :86, feb 2015.

R. B. Larson. Numerical calculations of the dynamics of collapsing proto-star. *MNRAS*, 145 :271, 1969.

B. Larsson, R. Liseau, L. Pagani, P. Bergman, P. Bernath, N. Biver, J. H. Black, R. S. Booth, V. Buat, J. Crovisier, C. L. Curry, M. Dahlgren, P. J. Encrenaz, E. Falgarone, P. A. Feldman, M. Fich, H. G. Florén, M. Fredrixon, U. Frisk, G. F. Gahm, M. Gerin, M. Hagström, J. Harju, T. Hasegawa, Å. Hjalmarson, L. E. B. Johansson, K. Justtanont, A. Klotz, E. Kyrölä, S. Kwok, A. Lecacheux, T. Liljeström, E. J. Llewellyn, S. Lundin, G. Mégie, G. F. Mitchell, D. Murtagh, L. H. Nordh, L.-Å. Nyman, M. Olberg, A. O. H. Olofsson, G. Olofsson, H. Olofsson, G. Persson, R. Plume, H. Rickman, I. Ristorcelli, G. Rydbeck, A. A. Sandqvist, F. V. Schéele, G. Serra, S. Torchinsky, N. F. Tothill, K. Volk, T. Wiklind, C. D. Wilson, A. Winnberg, and G. Witt. Molecular oxygen in the ρ Ophiuchi cloud. *A&A*, 466 : 999–1003, may 2007.

P. R. Lawson. *Principles of Long Baseline Stellar Interferometry*. JPL Publication, 1999.

J. Lequeux, E. Falgarone, and C. Ryter. *The interstellar medium*. A&A Library, 2003.

R. A. Linke, M. A. Frerking, and P. Thaddeus. Interstellar methyl mercaptan. *ApJ*, 234 :L139–L142, dec 1979.

N. Lippok, R. Launhardt, D. Semenov, A. M. Stutz, Z. Balog, T. Henning, O. Krause, H. Linz, M. Nielbock, Y. N. Pavlyuchenkov, M. Schmalzl, A. Schmiedeke, and J. H. Bieging. Gas-phase co depletion and n_2h^+ abundances in starless cores. *A&A*, 560 :A41, dec 2013.

J.-C. Loison, V. Wakelam, and K. M. Hickson. The interstellar gas-phase chemistry of HCN and HNC. *MNRAS*, 443 :398–410, sep 2014.

A. López-Sepulcre, A. A. Jaber, E. Mendoza, B. Lefloch, C. Ceccarelli, C. Vastel, R. Bachiller, J. Cernicharo, C. Codella, C. Kahane, M. Kama, and M. Tafalla. Shedding light on the formation of the pre-biotic molecule formamide with ASAI. *MNRAS*, 449 :2438–2458, may 2015.

F. Louvet, F. Motte, P. Hennebelle, A. Maury, I. Bonnell, S. Bontemps, A. Gusdorf, T. Hill, F. Gueth, N. Peretto, A. Duarte-Cabral, G. Stephan, P. Schilke, T. Csengeri, Q. Nguyen Luong, and D. C. Lis. The w43-mm1 mini-starburst ridge, a test for star formation efficiency models. *A&A*, 570 :A15, oct 2014.

E. Macia, M. V. Hernandez, and J. Oro. Primary sources of phosphorus and phosphates in chemical evolution. *Origins of Life and Evolution of the Biosphere*, 27, 1997.

J. G. Mangum and Y. L. Shirley. How to calculate molecular column density. *ArXiv e-prints*, jan 2015.

X.-J. Mao and X.-X. Sun. C-18-O Observations of the Dark Molecular Cloud L134 and Gas Depletion onto Dust. *Chinese Journal of Astronomy and Astrophysics*, 5 :144–150, apr 2005.

N. Marcelino, J. Cernicharo, E. Roueff, M. Gerin, and R. Mauersberger. Deuterated Thioformaldehyde in the Barnard 1 Cloud. *ApJ*, 620 :308–320, feb 2005.

S. Maret, E. A. Bergin, and C. J. Lada. A low fraction of nitrogen in molecular form in a dark cloud. *Nature*, 442 :425–427, jul 2006.

A. J. Markwick, T. J. Millar, and S. B. Charnley. On the abundance gradients of organic molecules along the tmc-1 ridge. *ApJ*, 535 :256–265, may 2000.

A. J. Markwick, S. B. Charnley, and T. J. Millar. Deuterium fractionation along the TMC-1 ridge. *A&A*, 376 :1054–1063, sep 2001.

A. J. Markwick, T. J. Millar, and S. B. Charnley. CH2DCCH along the TMC-1 ridge. *A&A*, 381 : 560–565, jan 2002.

H. E. Matthews, P. A. Feldman, and P. F. Bernath. Upper limits to interstellar PO. *ApJ*, 312 :358–362, jan 1987.

C. McKee and J. Tan. The formation of massive stars from turbulent cores. *ApJ*, 585 :850–871, mar 2003.

C. F. McKee. Photoionization-regulated star formation and the structure of molecular clouds. *ApJ*, 345 : 782–801, oct 1989.

C. F. McKee and J. C. Tan. Massive star formation in 100,000 years from turbulent and pressurized molecular clouds. *Nature*, 416 :59–61, mar 2002.

A. Men'shchikov, P. André, P. Didelon, F. Motte, M. Hennemann, and N. Schneider. A multi-scale, multi-wavelength source extraction method : getsources. *A&A*, 542 :A81, jun 2012.

K. M. Menten. The discovery of a new, very strong, and widespread interstellar methanol maser line. *ApJ*, 380 :L75–L78, oct 1991.

O. Miettinen, M. Hennemann, and H. Linz. Deuterium fractionation and the degree of ionisation in massive clumps within infrared dark clouds. *A&A*, 534 :A134, oct 2011.

Y. C. Minh, M. K. Brewer, W. M. Irvine, P. Friberg, and L. E. B. Johansson. Abundance and chemistry of interstellar HOCO(+). *A&A*, 244 :470–476, apr 1991.

Y. C. Minh, W. M. Irvine, and D. McGonagle. Search for H2COH+, and H2-13CO in Dense Interstellar Molecular Clouds. *Journal of Korean Astronomical Society*, 26 :99–101, oct 1993.

H. Minowa, M. Satake, T. Hirota, S. Yamamoto, M. Ohishi, and N. Kaifu. Laboratory Microwave Spectroscopy of HDCS and Its Astronomical Detection toward TMC-1. *ApJ*, 491 :L63–L66, dec 1997.

S. Molinari, J. Brand, R. Cesaroni, and F. Palla. A search for precursors of ultracompact hii regions in a sample of luminous iras sources. iii. circumstellar dust properties. *A&A*, 355 :617–628, mar 2000.

B. Mookerjea, E. Casper, L. G. Mundy, and L. W. Looney. Kinematics and chemistry of the hot molecular core in g34.26+0.15 at high resolution. *ApJ*, 659 :447–458, apr 2007.

K. Motoyama, O. Morata, H. Shang, R. Krasnopolsky, and T. Hasegawa. A Hydrochemical Hybrid Code for Astrophysical Problems. I. Code Verification and Benchmarks for a Photon-dominated Region (PDR). *ApJ*, 808 :46, jul 2015.

F. Motte, S. Bontemps, P. Schilke, N. Schneider, K. M. Menten, and D. Broguière. The earliest phases of high-mass star formation : a 3 square degree millimeter continuum mapping of cygnus x. *A&A*, 476 : 1243–1260, dec 2007.

A. Nagaoka, N. Watanabe, and A. Kouchi. H-D Substitution in Interstellar Solid Methanol : A Key Route for D Enrichment. *ApJ*, 624 :L29–L32, may 2005.

Q. Nguyen Luong, F. Motte, M. Hennemann, T. Hill, K. L. J. Rygl, N. Schneider, S. Bontemps, A. Men'shchikov, P. André, N. Peretto, L. D. Anderson, D. Arzoumanian, L. Deharveng, P. Didelon, J. di Francesco, M. J. Griffin, J. M. Kirk, V. Könyves, P. G. Martin, A. Maury, V. Minier, S. Molinari, M. Pestalozzi, S. Pezzuto, M. Reid, H. Roussel, M. Sauvage, F. Schuller, L. Testi, D. Ward-Thompson, G. J. White, and A. Zavagno. The Herschel view of massive star formation in G035.39-00.33 : dense and cold filament of W48 undergoing a mini-starburst. *A&A*, 535 :A76, nov 2011.

J. Nittmann, S. A. E. G. Falle, and P. H. Gaskell. The dynamical destruction of shocked gas clouds. *MNRAS*, 201 :833–847, dec 1982.

K. I. Öberg, S. Bottinelli, J. K. Jørgensen, and E. F. van Dishoeck. A cold complex chemistry toward the low-mass protostar b1-b : Evidence for complex molecule production in ices. *ApJ*, 716 :825–834, jun 2010.

K. I. Öberg, N. van der Marel, L. E. Kristensen, and E. F. van Dishoeck. Complex Molecules toward Low-mass Protostars : The Serpens Core. *ApJ*, 740 :14, oct 2011.

M. Ohishi, W. M. Irvine, and N. Kaifu. Molecular Abundance Variations among and Within Cold, Dark Molecular Clouds(rp). In Singh, P. D., editor, *Astrochemistry of Cosmic Phenomena*, volume 150 of *IAU Symposium*, page 171, 1992.

M. Ohishi, S.-I. Ishikawa, T. Amano, H. Oka, W. M. Irvine, J. E. Dickens, L. M. Ziurys, and A. J. Apponi. Detection of a New Interstellar Molecular Ion, H 2COH + (Protonated Formaldehyde). *ApJ*, 471 :L61, nov 1996.

P. H. Bodenheimer. *Principles of Star Formation*. A&A Library, 2011.

P. Padoan and Å. Nordlund. The Stellar Initial Mass Function from Turbulent Fragmentation. *ApJ*, 576 : 870–879, sep 2002.

P. Palmeirim, P. André, J. Kirk, D. Ward-Thompson, D. Arzoumanian, V. Könyves, P. Didelon, N. Schneider, M. Benedettini, S. Bontemps, J. Di Francesco, D. Elia, M. Griffin, M. Hennemann, T. Hill, P. G. Martin, A. Men'shchikov, S. Molinari, F. Motte, Q. Nguyen Luong, D. Nutter, N. Peretto, S. Pezzuto, A. Roy, K. L. J. Rygl, L. Spinoglio, and G. L. White. Herschel view of the taurus b211/3 filament and striations : evidence of filamentary growth ? *A&A*, 550 :A38, feb 2013.

N. A. Patel, S. Curiel, T. K. Sridharan, Q. Zhang, T. R. Hunter, P. T. P. Ho, J. M. Torrelles, J. M. Moran, J. F. Gómez, and G. Anglada. A disk of dust and molecular gas around a high-mass protostar. *Nature*, 437 :109–111, sep 2005.

T.-C. Peng, D. Despois, N. Brouillet, B. Parise, and A. Baudry. Deuterated methanol in Orion BN/KL. *A&A*, 543 :A152, jul 2012.

J. H. Piddington and H. C. Minnett. Radio-Frequency Radiation from the Constellation of Cygnus. *Australian Journal of Scientific Research A Physical Sciences*, 5 :17, mar 1952.

L. Podio, B. Lefloch, C. Ceccarelli, C. Codella, and R. Bachiller. Molecular ions in the protostellar shock L1157-B1. *A&A*, 565 :A64, may 2014.

A. Poglitsch, F. Herrmann, R. Genzel, S. C. Madden, T. Nikola, R. Timmermann, N. Geis, and G. J. Stacey. Atomic Oxygen in Molecular Clouds ? High-Resolution Spectroscopy of the [O i 63 Micron Line toward DR 21. *ApJ*, 462 :L43, may 1996.

B. Reipurth and J. Bally. Herbig-Haro Flows : Probes of Early Stellar Evolution. *ARA&A*, 39 :403–455, 2001.

M. A. Requena-Torres, J. Martín-Pintado, S. Martín, and M. R. Morris. The Galactic Center : The Largest Oxygen-bearing Organic Molecule Repository. *ApJ*, 672 :352–360, jan 2008.

H. Roberts and T. J. Millar. Gas-phase formation of doubly-deuterated species. *A&A*, 364 :780–784, dec 2000.

M. Ruaud, J. C. Loison, K. M. Hickson, P. Gratier, F. Hersant, and V. Wakelam. Modelling complex organic molecules in dense regions : Eley-Rideal and complex induced reaction. *MNRAS*, 447 :4004–4017, mar 2015.

R. H. Rubin, G. W. Swenson, Jr., R. C. Benson, H. L. Tigelaar, and W. H. Flygare. Microwave Detection of Interstellar Formamide. *ApJ*, 169 :L39, oct 1971.

D. P. Ruffle, T. W. Hartquist, P. Caselli, and D. A. Williams. The sulphur depletion problem. *MNRAS*, 306 :691–695, jul 1999.

R. P. . B. R. R. P. . B. Ryden. *Interstellar and Intergalactic Medium*. Pogge, R. and Ryden, B., 2015.

K. L. J. Rygl, A. Brunthaler, A. Sanna, K. M. Menten, M. J. Reid, H. J. van Langevelde, M. Honma, K. J. E. Torstensson, and K. Fujisawa. 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, mar 2012.

N. Sakai, T. Sakai, Y. Aikawa, and S. Yamamoto. Detection of $HCO^+{}_2$ toward the Low-Mass Protostar IRAS 04368+2557 in L1527. *ApJ*, 675 :L89–L92, mar 2008a.

N. Sakai, T. Sakai, T. Hirota, and S. Yamamoto. Abundant Carbon-Chain Molecules toward the Low-Mass Protostar IRAS 04368+2557 in L1527. *ApJ*, 672 :371–381, jan 2008b.

N. Sakai, T. Sakai, T. Hirota, M. Burton, and S. Yamamoto. Discovery of the Second Warm Carbon-Chain-Chemistry Source, IRAS15398 - 3359 in Lupus. *ApJ*, 697 :769–786, may 2009.

N. Sakai, Y. Oya, T. Sakai, Y. Watanabe, T. Hirota, C. Ceccarelli, C. Kahane, A. Lopez-Sepulcre, B. Lefloch, C. Vastel, S. Bottinelli, E. Caux, A. Coutens, Y. Aikawa, S. Takakuwa, N. Ohashi, H.-W. Yen, and S. Yamamoto. A Chemical View of Protostellar-disk Formation in L1527. *ApJ*, 791 :L38, aug 2014.

R. Saladino, G. Botta, S. Pino, G. Costanzo, and E. Di Mauro. Genetics first or metabolism first ? The formamide clue. *Chemical Society Reviews*, 41 :5526–5565, jun 2012.

P. Schilke. *The Chemistry of Interstellar Hydrogen Cyanide : Observations and Theory*. PhD thesis, California Institute of Technology, March 1992.

W. Schlosser. Le disque de nebra : un calendrier agricole ? *Pour la Science*, apr 2004.

N. Schneider, S. Bontemps, R. Simon, H. Jakob, F. Motte, M. Miller, C. Kramer, and J. Stutzki. A new view of the Cygnus X region. KOSMA 13-CO 2 to 1, 3 to 2, and 12-CO 3 to 2 imaging. *A&A*, 458 : 855–871, nov 2006.

N. Schneider, T. Csengeri, S. Bontemps, F. Motte, R. Simon, P. Hennebelle, C. Federrath, and R. Klessen. Dynamic star formation in the massive DR21 filament. *A&A*, 520 :A49, sep 2010.

N. Schneider, R. Güsten, P. Tremblin, M. Hennemann, V. Minier, T. Hill, F. Comerón, M. A. Requena-Torres, K. E. Kraemer, R. Simon, M. Röllig, J. Stutzki, A. A. Djupvik, H. Zinnecker, A. Marston, T. Csengeri, D. Cormier, V. Lebouteiller, E. Audit, F. Motte, S. Bontemps, G. Sandell, L. Allen, T. Megeath, and R. A. Gutermuth. Globules and pillars seen in the [cii] 158 μm line with sofia. *A&A*, 542 :L18, jun 2012.

L. E. Snyder, F. J. Lovas, J. M. Hollis, D. N. Friedel, P. R. Jewell, A. Remijan, V. V. Ilyushin, E. A. Alekseev, and S. F. Dyubko. A Rigorous Attempt to Verify Interstellar Glycine. *ApJ*, 619 :914–930, feb 2005.

T. K. Sridharan, H. Beuther, M. Saito, F. Wyrowski, and P. Schilke. High-Mass Starless Cores. *ApJ*, 634 :L57–L60, nov 2005.

P. Stäuber, A. O. Benz, J. K. Jørgensen, E. F. van Dishoeck, S. D. Doty, and F. F. S. van der Tak. Tracing high energy radiation with molecular lines near deeply embedded protostars. *A&A*, 466 :977–988, may 2007.

H. Suzuki, S. Yamamoto, M. Ohishi, N. Kaifu, S.-I. Ishikawa, Y. Hirahara, and S. Takano. A survey of CCS, HC3N, HC5N, and NH3 toward dark cloud cores and their production chemistry. *ApJ*, 392 : 551–570, jun 1992.

M. Tafalla, D. Mardones, P. C. Myers, P. Caselli, R. Bachiller, and P. J. Benson. L1544 : A Starless Dense Core with Extended Inward Motions. *ApJ*, 504 :900–914, sep 1998.

V. Taquet, C. Ceccarelli, and C. Kahane. Formaldehyde and Methanol Deuteration in Protostars : Fossils from a Past Fast High-density Pre-collapse Phase. *ApJ*, 748 :L3, mar 2012.

P. Thaddeus, M. Guelin, and R. A. Linke. Three new 'nonterrestrial' molecules. *ApJ*, 246 :L41–L45, may 1981.

P. Theule, F. Borget, F. Mispelaer, G. Danger, F. Duvernay, J. C. Guillemin, and T. Chiavassa. Hydrogenation of solid hydrogen cyanide HCN and methanimine CH2NH at low temperature. *A&A*, 534 : A64, oct 2011.

A. G. G. M. Tielens. The molecular universe. *Rev. Mod. Phys.*, 85 :1021–1081, Jul 2013.

S. P. Treviño-Morales, P. Pilleri, A. Fuente, C. Kramer, E. Roueff, M. González-García, J. Cernicharo, M. Gerin, J. R. Goicoechea, J. Pety, O. Berné, V. Ossenkopf, D. Ginard, S. García-Burillo, J. R. Rizzo, and S. Viti. Deuteration around the ultracompact hii region monoceros r2. *A&A*, 569 :A19, sep 2014.

B. E. Turner. A molecular line survey of Sagittarius B2 and Orion-KL from 70 to 115 GHz. I - The observational data. *ApJS*, 70 :539–622, jul 1989.

B. E. Turner. Detection of doubly deuterated interstellar formaldehyde (D2CO) - an indicator of active grain surface chemistry. *ApJ*, 362 :L29–L33, oct 1990.

B. E. Turner. Deuterated molecules in translucent and dark clouds. *ApJS*, 136 :579–629, oct 2001.

B. E. Turner and J. Bally. Detection of interstellar PN - The first identified phosphorus compound in the interstellar medium. *ApJ*, 321 :L75–L79, oct 1987.

B. E. Turner, R. Terzieva, and E. Herbst. The Physics and Chemistry of Small Translucent Molecular Clouds. XII. More Complex Species Explainable by Gas-Phase Processes. *ApJ*, 518 :699–732, jun 1999.

R. K. Ulrich. An infall model for the T Tauri phenomenon. *ApJ*, 210 :377–391, dec 1976.

F. F. S. Van der Tak, A. M. S. Boonman, R. Braakman, and E. F. van Dishoeck. Sulphur chemistry in the envelopes of massive young stars. *A&A*, 412 :133–145, dec 2003.

E. F. van Dishoeck, W.-F. Thi, and G.-J. van Zadelhoff. Detection of DCO+ in a circumstellar disk. *A&A*, 400 :L1–L4, mar 2003.

C. Vastel, C. Ceccarelli, B. Lefloch, and R. Bachiller. The Origin of Complex Organic Molecules in Prestellar Cores. *ApJ*, 795 :L2, nov 2014.

A. I. Vasyunin and E. Herbst. Reactive Desorption and Radiative Association as Possible Drivers of Complex Molecule Formation in the Cold Interstellar Medium. *ApJ*, 769 :34, may 2013.

T. Vasyunina, A. I. Vasyunin, E. Herbst, and H. Linz. Chemical Modeling of Infrared Dark Clouds : The Role of Surface Chemistry. *ApJ*, 751 :105, jun 2012.

V. Vuitton, R. V. Yelle, and M. J. McEwan. Ion chemistry and N-containing molecules in Titan's upper atmosphere. *Icarus*, 191 :722–742, nov 2007.

V. Wakelam, P. Caselli, C. Ceccarelli, E. Herbst, and A. Castets. Resetting chemical clocks of hot cores based on S-bearing molecules. *A&A*, 422 :159–169, jul 2004.

V. Wakelam, F. Hersant, and F. Herpin. Sulfur chemistry : 1D modeling in massive dense cores. *A&A*, 529 :A112, may 2011.

V. Wakelam, C. Vastel, Y. Aikawa, A. Coutens, S. Bottinelli, and E. Caux. Chemical modelling of water deuteration in IRAS16293-2422. *MNRAS*, 445 :2854–2871, dec 2014.

S. Weinreb, A. H. Barrett, M. L. Meeks, and J. C. Henry. Radio observations of oh in the interstellar medium. *Nature*, 200 :829–831, nov 1963.

D. A. Williams. Gas and dust in the interstellar medium. *Journal of Physics Conference Series*, 6 :1–17, jan 2005.

J. P. Williams, E. A. Bergin, P. Caselli, P. C. Myers, and R. Plume. The Ionization Fraction in Dense Molecular Gas. I. Low-Mass Cores. *ApJ*, 503 :689–699, aug 1998.

T. L. Wilson and R. Rood. Abundances in the Interstellar Medium. *ARA&A*, 32 :191–226, 1994.

T. L. Wilson, K. Rohlfs, and S. Hüttemeister. *Tools of Radio Astronomy*. ISBN 978-3-642-39949-7. Springer-Verlag, astronomy and astrophysics library edition, 2013.

A. Wootten, N. J. Evans, II, R. Snell, and P. vanden Bout. Molecular abundance variations in interstellar clouds. *ApJ*, 225 :L143–L148, nov 1978.

T. Yamaguchi, S. Takano, N. Sakai, T. Sakai, S.-Y. Liu, Y.-N. Su, N. Hirano, S. Takakuwa, Y. Aikawa, H. Nomura, and S. Yamamoto. Detection of Phosphorus Nitride in the Lynds 1157 B1 Shocked Region. *Publications of the Astronomical Society of Japan*, 63 :L37–L41, oct 2011.

T. Yamaguchi, S. Takano, Y. Watanabe, N. Sakai, T. Sakai, S.-Y. Liu, Y.-N. Su, N. Hirano, S. Takakuwa, Y. Aikawa, H. Nomura, and S. Yamamoto. The 3 mm Spectral Line Survey toward the Lynds 1157 B1 Shocked Region. I. Data. *Publications of the Astronomical Society of Japan*, 64 :105, oct 2012.

H. Yorke and C. Sonnhalter. On the formation of massive stars. *ApJ*, 569 :846–862, 2002.

H. W. Yorke and E. Kruegel. The dynamical evolution of massive protostellar clouds. *A&A*, 54 :183–194, jan 1977.

C. H. Young, J. K. Jørgensen, Y. L. Shirley, J. Kauffmann, T. Huard, S.-P. Lai, C. W. Lee, A. Crapsi, T. L. Bourke, C. P. Dullemond, T. Y. Brooke, A. Porras, W. Spiesman, L. E. Allen, G. A. Blake, N. J. Evans, II, P. M. Harvey, D. W. Koerner, L. G. Mundy, P. C. Myers, D. L. Padgett, A. I. Sargent, K. R. Stapelfeldt, E. F. van Dishoeck, F. Bertoldi, N. Chapman, L. Cieza, C. H. DeVries, N. A. Ridge, and Z. Wahhaj. A "starless" core that isn't : Detection of a source in the l1014 dense core with the spitzer space telescope. *ApJS*, 154 :396–401, sep 2004.