



HAL
open science

Etude des phases précoces de la formation des étoiles

Angèle Taillard

► **To cite this version:**

Angèle Taillard. Etude des phases précoces de la formation des étoiles. Astrophysique [astro-ph]. Université de Bordeaux, 2023. Français. NNT : 2023BORD0216 . tel-04352972

HAL Id: tel-04352972

<https://theses.hal.science/tel-04352972>

Submitted on 19 Dec 2023

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

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

THÈSE PRÉSENTÉE
POUR OBTENIR LE GRADE DE
DOCTEURE
DE L'UNIVERSITÉ DE BORDEAUX

ECOLE DOCTORALE SCIENCES PHYSIQUES ET DE L'INGÉNIEUR
ASTROPHYSIQUE PLASMA NUCLÉAIRE

Par **Angèle TAILLARD**

Étude des phases précoces de la formation des étoiles

Sous la direction de : **Valentine WAKELAM**

Soutenue le 20 septembre 2023

Membres du jury :

M. Mathieu BERTIN	Maître de conférences	Sorbonne Université	Rapporteur
M. Sylvain BONTEMPS	Directeur de Recherche	LAB	Président
M. Pierre GRATIER	Astronome adjoint	LAB	Co-encadrant
Mme. Anaëlle MAURY	Directrice de Recherche	CEA Saclay	Rapporteur
Mme. Frederique MOTTE	Directrice de recherche	IPAG	Examinatrice
Mme. Jennifer NOBLE	Chargée de Recherche	PIIM	Examinatrice
Mme. Valentine WAKELAM	Directrice de Recherche	LAB	Directrice

Titre : Étude des phases précoces de la formation des étoiles

Résumé

Les cœurs denses sont la première étape de la formation des étoiles, possédant des densités moyennes (10^4 et 10^6 cm^{-3}), de basses températures (< 15 K) et avec une irradiation par les UV faibles. Ces environnements abritent une chimie riche, se produisant en grande partie à la surface des grains de poussière. Pour comprendre les processus physico-chimiques en jeu, il est essentiel de retracer l'origine des molécules dont la formation se produit en majorité à la surface des grains. Cette chimie est encore mal contrainte mais grâce aux nouveaux instruments, dont le JWST, les caractéristiques des glaces et la formation de ces molécules à la surface vont pouvoir être étudiées à grande échelle et avec une résolution sans précédent. Nous présentons ici l'étude de deux cœurs denses, L429-C et L694, tous deux observés avec le radiotélescope 30m de l'IRAM. Les espèces visées en phase gazeuse sont le CO (et ses isotopologues) et CH_3OH , espèces clés précurseurs des molécules organiques complexes. Une méthode unique est appliquée sur chaque cœur afin d'obtenir les abondances moléculaires de la phase gazeuse. Cette méthode se base sur les paramètres physiques du nuage et permet d'obtenir une densité de colonne grâce à un code de transfert radiatif dans un milieu qui n'est pas à l'équilibre thermodynamique local. Ces observations nous ont permis d'étudier les distributions d'abondance moléculaire en fonction de l'extinction visuelle et la densité. Les deux cœurs présentent des observations de glace (précédent le JWST) et montrent d'intéressantes tendances dans leur rapport gaz-sur-glace. L694 étant plus avancé dynamiquement, nous pouvons ainsi tracer l'évolution de la composition de la glace et du gaz à travers le temps. Couplés à ces observations, nous utilisons des modèles chimiques afin d'ajouter des contraintes sur les mécanismes de désorption non-thermique, responsables de la présence d'espèces formées sur les glaces dans la phase gazeuse. En parallèle de cette étude, nous présentons un outil de création de spectres synthétiques de glace pour les observations du JWST, afin d'aider à l'écriture des demandes de temps d'observation mais également d'aider à l'analyse des observations attendues.

Mots clefs : désorption non-thermique - milieu interstellaire - formation stellaire - glace - gaz - JWST

Unité de recherche

Laboratoire d'Astrophysique de Bordeaux, UMR 5804, Allée Geoffroy Saint-Hilaire, 33600 Pessac

Title : Study of the early phases of star formation

Abstract

Cold cores are the first step of star formation, characterized by medium densities (between 10^4 and 10^6 cm^{-3}), low temperatures ($< 15 \text{ K}$) and low UV radiations. In these environments, a rich chemistry takes place on the surface of the dust grains. Understanding the physico-chemical processes at play in these cores is essential to trace the origin of molecules predominantly formed via reactions on dust grain surfaces. With new instruments, like JWST, and unprecedented resolution and power, the ice phase will be uncovered and studied in depth. We present a study of two cold cores, L429-C and L694, both observed with the IRAM 30m single dish radiotelescope. Observed species count CO (and its isotopologues) and CH₃OH, key species precursors of more complex organic molecules. The same method is applied to each core in order to obtain the gas-phase abundance by deriving the column densities of detected species from physical parameters, with a non-local thermal equilibrium radiative transfer model. These observations allowed us to probe the molecular abundances as a function of density and visual extinction.

Both the cores present ice observations (prior to JWST) and show interesting trends in their gas-to-ice ratio. L694 being at more advanced state (infalling), we try to understand the evolution of both ice and gas abundances in the cold core evolution, as well as the ice composition evolving through time. Coupled to these observations are chemical models trying to uncover the non-thermal mechanisms responsible for the desorption of ice in the gas-phase. In parallel to these studies, we present a synthetic ice spectra generator tool to match JWST observations, in order to support proposals and help analyzing real observations.

Keywords : non-thermal desorption - interstellar medium - stellar formation - ices - gas - JWST

À Florian

“And I go home having lost her love. And write this book.”
Jack Kerouac, *The Subterraneans*

Table des matières

1	Introduction	26
1.1	Formation des étoiles	26
1.1.1	Milieu interstellaire	27
1.1.2	Cœurs denses	28
1.1.3	Proto-étoiles	30
1.2	Les poussières & les glaces	31
1.3	Observer les glaces et le gaz	33
1.4	L'astrochimie - état de l'art	35
1.4.1	Observations des molécules dans l'ISM	35
1.4.2	Formation des molécules complexes organiques	36
1.4.3	Le méthanol	37
1.5	Plan de la thèse	39
2	Méthodologie	40
2.1	Observations radio	40
2.1.1	Radioastronomie	40
2.1.2	Observations avec l'IRAM 30m - Antenne unique	44
2.1.3	Observations avec NOEMA - Interféromètre	44
2.2	Astronomie infrarouge	46
2.2.1	Herschel	46
2.2.2	Observations d'absorption IR devant des étoiles de fond	48
2.2.3	Spitzer	50
2.3	Transfert radiatif	50
2.3.1	Principe fondamental	50
2.3.2	Coefficient d'Einstein	51
2.3.3	Densité de colonne	53
2.3.4	Densité critique hors ETL	54
2.3.5	Température d'excitation	55
2.3.6	Résoudre l'équation de transfert de rayonnement à l'ETL	57
2.3.7	Probabilité d'échappement	58
2.3.8	RADEX	58
2.4	Cartes de paramètres physiques	59
2.4.1	Carte d'intensité intégrée et dv	59
2.4.2	Densité volumique et densité de colonne de H_2	59
2.4.3	Extinction visuelle A_V	61
2.4.4	Température	61
2.4.5	Densité de colonne et abondance	62
2.5	Modèle chimique - Nautilus	63
2.5.1	Fonctionnement général	63
2.5.2	Réactions dans Nautilus	66
2.5.3	Mécanismes de désorption	67

2.5.4	Paramètres du modèle	73
2.5.5	Distance de désaccord	76
3	L429-C	77
3.1	Description de la source	77
3.2	Observations	78
3.3	Résultats	80
3.3.1	Transitions moléculaires et cartes d'intensité intégrée	80
3.3.2	Analyse de la cinématique	80
3.3.3	Abondances moléculaires observées	85
3.3.4	Abondances moléculaires en fonction des paramètres physiques	87
3.4	Modèles chimiques	87
3.4.1	Paramètres du modèle	87
3.4.2	Comparaison entre les abondances modélisées et observées dans le gaz	92
3.4.3	Qualité de l'ajustement	94
3.5	Contraindre la désorption non-thermique du méthanol	94
4	L694	101
4.1	Description de la source	101
4.2	Observations millimétriques avec le télescope 30m de l'IRAM	102
4.3	Résultats	103
4.3.1	Transitions moléculaires et cartes d'intensité intégrée	103
4.3.2	Analyse de la cinématique	103
4.3.3	Abondances moléculaires observées	107
4.3.4	Abondances moléculaires en fonction des paramètres physiques	108
4.4	Modèles chimiques pour L694	110
4.4.1	Paramètres du modèle	112
4.4.2	Comparaison entre les abondances modélisées et observées dans le gaz	113
4.4.3	Qualité de l'ajustement	114
4.5	Contraindre la désorption non-thermique du méthanol dans L694	117
5	SynthIceSpec	120
5.1	James Webb Space Telescope	120
5.2	Description de SynthIceSpec	121
5.2.1	Molécules et calcul des densités de colonne	122
5.2.2	Instruments	123
5.2.3	Silicates	123
5.2.4	Bruit	125
5.3	Extinction et spectres d'étoiles	125
5.3.1	Système photométrique	125
5.3.2	Spectres d'étoiles	125
5.3.3	Extinction	126
5.3.4	Sorties de Nautilus	128
5.3.5	Spectre final	130
5.4	Étude de cas - Dangling OH	130

5.4.1	Ajout du dangling dans SynthIceSpec	132
5.4.2	Discussion sur les mélanges	133
5.5	Prédiction - L429-C	134
5.6	Comparaison - Cham I	136
6	Perspectives & Conclusions	140
6.1	Conclusions	140
6.1.1	L429-C	140
6.1.2	L694	141
6.1.3	Comparaison des deux nuages	142
6.2	Perspectives	142
6.2.1	Observations avec le JWST & analyse	144
6.2.2	Futures contributions dans Nautilus	145
7	Appendix - Articles	150
8	Appendix - Données spectrales pour SynthIceSpec	171
9	Appendix - Ma thèse illustrée dans “Lune et l’autre”	173
10	Memorandum (English)	180
10.1	Chapter I - Introduction	180
10.2	Chapter II - Methodology	180
10.3	Chapter III – L429-C	181
10.4	Chapter IV – L694	181
10.5	Chapter V - SynthIceSpec	182
10.6	Chapter VI – Conclusions and Perspectives	182
10.6.1	L429-C	182
10.6.2	L694	183
10.6.3	Comparing both cores	184
10.7	Perspectives	184
10.7.1	JWST observations and analysis	184
10.7.2	Nautilus - Future contributions	185
10.7.3	SynthIceSpec updates	186
10.8	Appendix	186

Remerciements

Il m'aura fallu du temps pour écrire ces remerciements, tant j'ai de personnes qui ont participé à cette expérience unique qu'est la thèse, que ce soit de près ou de loin. Comme à mon habitude, je déteste partir en laissant des non-dits, alors je vais me permettre quelques pages pour laisser libre court à mon goût pour le romantisme et mes sentiments. La thèse a été plus qu'un travail de recherche de trois ans, ça a également été une expérience humaine immense. J'ai vécu les plus belles choses de ma vie comme d'autres, terribles, tout ça en un si peu de temps... mais ça me permettra de l'ancrer à jamais dans ma mémoire. Ce travail perdra sûrement de la valeur alors que de nouvelles techniques, télescopes et méthodes seront développés, je souhaite que les amitiés et les liens que j'ai pu nouer et entretenir pendant ces trois ans durent dans le temps. Alors allons-y franchement :

Je vais commencer par remercier ma famille sans qui évidemment rien de tout cela ne serait possible. Merci à vous, Maman et Papa, de m'avoir supportée pour tout, de m'avoir laissée faire ce que je voulais faire et d'y avoir cru, sans même une trace de doute. Vous m'avez laissée continuer là où je voulais aller, même en sachant que ça ne serait pas la voie la plus simple. Je vous aime plus que tout et j'espère que vous savez à quel point je suis heureuse dans ce que je fais. Je suis bénie de vous avoir, vous et les garçons, et je sais que quoi qu'il arrive, vous serez présents et avec moi.

Merci Maman d'être l'exemple de force et de persévérance que tu es, je ne peux que souhaiter avoir ne serait-ce qu'un dixième de ton courage. Je te souhaite que ta nouvelle vie soit celle que tu désires et que tu y trouves tout ce que tu cherches. Je serai toujours là si tu as besoin et je sais que c'est réciproque. Merci pour tout, je t'aime.

Merci Papa de m'avoir poussée à faire ce que je fais. Trente ans après toi, je deviens docteure et je vais pouvoir faire ce que j'ai toujours voulu faire. Merci d'être aussi drôle et bienveillant, de toujours me faire voir le côté positif de la vie et de m'aider à y avancer sereinement. Je sais que j'aurai toujours un toit sous lequel m'abriter si l'orage de la vie gronde. Je t'aime.

Merci à mes frères, Oscar et Lucas, sans qui cette existence serait bien moins rigolote et qui n'ont jamais douté, qui ont été là quand il le fallait. Merci d'avoir fait l'effort d'essayer de comprendre ce que je faisais (ou au moins en avoir eu l'air, en hochant la tête de manière déterminée) et de vous y intéresser. Les repas de famille ne seraient pas les mêmes sans vous et je chéris le temps que l'on passe, tous les trois ou seulement à deux. Je suis fière de vous et je vous aime, vous êtes devenus de belles personnes (un plus beau que l'autre mais bref...), je vous souhaite tout le bonheur du monde.

Merci à Mamée et Papé, de m'avoir accueillie pendant mes longues retraites estivales et surtout, d'avoir toujours été de mon côté pour tout ce que j'ai pu faire. Merci de m'avoir acceptée comme j'étais, de vous être toujours montrés optimistes et sûrs de ce que je pouvais devenir. J'aurai toujours une partie de moi dans le Sud et j'espère que vous savez à quel point je vous aime. Merci pour tout ce que vous avez fait pour nous.

Merci à mes cousins, Félix, Clara et César, et bien sûr, Xavier et Cécile, pour la force et les bons moments que l'on a passé tous ensemble. Merci à vous pour les bonnes idées sur le titre de

Lune et l'autre (bon, on gardera secret les premières esquisses...), les repas de famille chaleureux et conviviaux, les parties interminables de Trivial poursuit... Merci Xavier et Cécile d'être venus pour ma soutenance, ça me touche énormément. Je vous aime, à très vite dans le Sud.

Évidemment, je n'écrirai aucun de ces mots si ce n'était pour la chance que j'ai eu d'avoir été prise en thèse. Je me répétais toujours "quand on veut, on peut", mais je ne me rendais pas compte que c'était plutôt "quand on veut, on peut peut-être" et encore faut-il en avoir la chance. Et on me l'a donnée, après des dizaines de refus parce que mon profil n'était pas assez "astro". J'ai cru que le temps c'était arrêté quand j'ai reçu un mail qui me demandait simplement mes disponibilités pour un entretien d'embauche. Et mon cœur a sauté un battement quand j'ai reçu encore un peu plus tard la réponse, positive. Merci de m'avoir donné cette chance, je sais que je ne vous ai peut être pas montré à quel point je vous étais reconnaissante, mais sachez qu'au fond de moi, à partir de ce premier octobre 2020, je n'avais plus qu'une chose en tête, vous rendre fiers.

Alors merci à toi Valentine, d'y avoir cru et de m'avoir prise en thèse. Ma vie a changé pour le meilleur et je crois que je ne peux même pas imaginer faire un autre métier. J'ai appris plus en trois ans que dans toute ma vie, autant scientifiquement que humainement. Merci d'avoir permis une communication entre nous aussi facile et claire, même si ça n'a pas toujours été évident. Merci infiniment pour la patience, sur les très nombreuses fois où tu as ré-expliqué pour la quinzième fois la même chose mais j'avais besoin d'une seizième pour comprendre clairement. Merci de m'avoir envoyée au bout du monde pour me faire voyager et me permettre toutes ces belles collaborations, de m'avoir fait rencontrer malgré toi des gens incroyables avec qui je suis très heureuse de travailler. J'espère devenir à la hauteur de ta réputation et qu'un jour, ça sera à mon tour de permettre à quelqu'un de continuer dans ce merveilleux domaine qu'est l'astronomie (en évitant tous les pièges et les requins...). Merci infiniment pour la confiance. Je ne sais pas où j'en serais si je n'avais jamais eu ce mail pour cette thèse et aujourd'hui, je suis très fière du travail que j'ai pu donner pour. Merci à toi.

Pierre, évidemment, ça en va de même pour toi. Je suis obligée de le répéter mais merci pour la confiance et surtout la patience, parce que j'ai énormément appris après t'avoir fait répéter les mêmes choses, de milles manières différentes. Quelle chance j'ai eue de t'avoir aussi comme co-directeur (on dira que c'était le cas, rétrospectivement...), tu es une personne formidable, je me sentais toujours en confiance quand j'étais avec toi et qu'on avançait, pas à pas, en cherchant une méthode parmi des milliers et qu'on a vu les résultats arriver. Je savais que tu serais toujours là pour aider (sauf pour les zooms à 21h mais bref...) et que ça va me manquer quand je vais devoir avancer seule. Mais je crois bien que c'est la vie d'un doctorant d'apprendre à se débrouiller et tu m'as bien armée pour la suite. Merci à toi, d'avoir été aussi confiant sur de très nombreuses choses, ça m'a donné un courage infini. Merci d'avoir été optimiste et de bonne humeur pendant ces trois ans, j'étais ravie de travailler avec toi et j'espère que ça continuera dans un futur proche comme lointain.

Et cette opportunité, je ne l'aurais peut être pas trouvée sans l'appel désespéré que j'ai eu avec Antoine Gusdorf, qui dans une bienveillance incroyable, ne me connaissant ni d'Adam ni d'Eve, a passé une heure au téléphone avec moi pour m'aider à trouver une thèse. Quelle fierté de t'avoir recroisé en conférence et d'avoir pu échanger avec toi, merci pour cet élan de générosité humaine qui m'a permis d'arriver ici.

Les copines, ça commence à être une très très longue amitié qu'on entretient, et je sais que ça va

durer, même si on est aux quatre coins du monde. Je vous aime fort et je vais vous le dire à chacune :

Julie, ma vie, j'espère que tu sais à quel point je (on) t'aime, merci de m'appeler au beau milieu de la journée alors que je travaille, juste pour me demander ce que je fais. Merci d'être aussi drôle, honnête et forte, je sais que tu essaieras toujours de comprendre mes émotions et sentiments, sans juger, et tu sais que c'est réciproque. Tu es devenue une femme merveilleuse et un modèle pour la jeunesse, tu vas être une formidable professeure et j'ai très hâte de voir la suite. Merci du fond du cœur d'être qui tu es, vraiment, je ne peux pas penser à toi sans sourire. Je t'aime très, très (très) fort.

Charlotte, ma vie pour tes blagues et ta bonne humeur. J'ai certains des plus joyeux souvenirs de mon existence entière avec toi, à des moments difficiles comme à des moments de paix. Je suis très heureuse de t'avoir vu grandir et d'être devenue l'incroyable personne que tu es. J'espère que l'on continuera à écouter du rap ensemble, à chanter comme des animaux en concert et à sauter partout comme des macaques (singes). Je me suis toujours sentie en sécurité chez toi, je sais que je pourrais débarquer n'importe quand que tu m'offrirais toujours du thé ou des pâtes. Je suis très heureuse que l'on se connaisse et je me sens bénie de t'avoir dans ma vie. Merci du fond du cœur et je t'aime du fond du cœur.

Mona, si je disais que les filles seraient toujours prêtes à m'accueillir, toi je sais que tu pourrais m'adopter et te battre pour moi. Je crois que notre amitié est la plus solide, après avoir été mouvementée, mais maintenant, elle est incassable. Je suis très heureuse de t'avoir comme modèle de détermination et de courage, je crois que j'ai encore de très nombreuses choses à apprendre de toi, autant que de bons moments à passer. Nos conversations nocturnes, pendant une soirée ou juste en se promenant, valent de l'or pour moi et m'ont permis de prendre conscience de nombreuses choses et de grandir. Alors merci, d'avoir été patiente et honnête, d'essayer de toujours être au top de ta forme et de ta bonne humeur, de me soulever quand je n'ai plus l'énergie pour rien et de me balancer dans un ravin pour me faire me ressaisir. J'ai de la chance de t'avoir, je t'aime fort, merci.

Nathou, je crois que si je pense à la joie et la bonne humeur, tu es la première à apparaître dans ma tête. Vraiment je n'ai pas les mots pour exprimer à quel point ton optimisme est nécessaire à mon existence. Je suis très heureuse de passer du temps avec toi, que ça soit au bord de la mer, de ta piscine à bronzer ou à écouter Julie en karaoké dans la Nathou mobile. Quelle serait mon existence sans le gâteau au beurre (le tien autant que celui de ta maman). Merci pour ton enthousiasme et ta bonne humeur, t'es la plus belle, je t'aime.

Moana, parfois j'avais peur qu'être le seul garçon de la bande ne te pèse, mais tu es tellement naturel avec nous que je ne peux qu'être heureuse que tu partages des bouts de vie avec les nôtres. Ta bienveillance n'a d'égal que ton humour noir (et dosé à la perfection) et je suis très heureuse que nos chemins se croisent et se recroisent, pour un jeu ou pour une soirée. Merci d'être aussi gentil et chaleureux, d'être une belle personne et de veiller sur nous. Pleins de bonnes choses sur toi, je t'aime fort.

Pierre, je pense qu'on s'est déjà répété 1000 fois les mêmes choses mais je vais l'écrire sur du papier : Merci à toi d'être présent depuis tout ce temps, d'être toujours aussi enthousiaste pour tout et n'importe quoi, d'avoir toujours cru que j'étais capable de faire de grandes (et petites) choses, alors que je doutais à chaque fois. Merci d'avoir été là aux meilleurs comme aux pires moments, tu as été et tu es toujours un véritable phare dans ma vie. Merci à toi, vraiment, d'être là, après tout ce qu'on

a pu vivre ensemble. Je sais qu'au beau milieu de la nuit, tu répondrais. J'espère que tu sais que c'est réciproque. Merci pour tout, je t'aime du fond du cœur et je suis très heureuse de t'avoir dans ma vie.

Dragić, my brother from another mother, I wish I could express how much I love you. Thank you for everything, e-ve-ry-thing you have done for me, for all the discussions, all the years and the (almost ?) everyday talking. I am so happy to have met you and so honored that we are still, after all these years apart, playing, chatting, drawing and having fun together. I wish you all the best and I am so proud of who you are, who you are working to be. You are a beautiful soul and I really hope that our friendship will be this strong for the years to come, and I can't wait for us to share our next projects to each other, to listen to our stories and our many, many ideas... I am thankful to know you and I can only wish for you to be happy, to be strong and to be my friend. I love you.

Malo, j'ai l'impression que ça fait une éternité qu'on se connaît et on a toujours la même relation depuis tout ce temps, tu es un ami sur lequel je pourrais toujours compter. Merci du fond du cœur de prendre des nouvelles aussi souvent et de toujours être à fond sur tout, d'être tellement enthousiaste et bienveillant, de rire sur les mêmes vieilles blagues et les nouvelles. J'espère que l'on va se suivre encore pendant très longtemps et que ce lien que l'on partage ne s'amenuisera pas. Merci à toi d'être le meilleur ami que je peux souhaiter. Je t'aime fort, prends soin de toi.

Basil, c'est pareil pour toi, on se connaît depuis une éternité et je suis tellement fière de qui tu es devenu, tu es un exemple de persévérance de de courage, et j'espère du fond du cœur que tu as trouvé le bonheur au fond de toi. Merci à toi d'être toujours aussi présent après tout ce temps, même si des centaines de kilomètres nous séparent, tu sais que je serai toujours très heureuse d'entendre tes aventures autour d'un café ou d'un chocolat chaud. Je te souhaite le meilleur et la toute la réussite, la joie et le bonheur que tu mérites.

Baptiste, merci à toi pour tout le temps qu'on a passé à discuter, à se démêler les noeuds mentaux et essayer d'encourager l'un et l'autre à continuer. Merci d'avoir été aussi présent, d'avoir été si compréhensif et si patient, d'avoir pris le temps de se poser. Tu m'as aidée de très nombreuses soirées à penser à autre chose et qu'est-ce qu'on a pu rigoler. Notre carrière de streamer pro ne décollera sûrement pas mais au moins je sais que je peux compter sur un ami dans les moments sombres. Je te souhaite tout le meilleur, que tu sois heureux dans la voie que tu te trouveras et j'espère pouvoir te rendre la pareille pour tout ce que tu as fait pour moi (même si tu ne t'en rends peut être pas compte). Merci à toi, vraiment.

À tous les gens du labo qui m'ont fait apprécier mon travail, qui me donnaient une raison de me lever et d'aller sur place. Vous avez associé cet endroit à une deuxième maison, où je sais que je peux compter sur chacun pour partager de grandes conversations (rarement scientifiques...) et longues pauses (mais qu'est-ce qu'elles étaient agréables). Il y a une longue liste à remercier, alors ne tardons pas :

Luz, tu n'as pas idée de la sensation de soulagement qui m'a envahie le jour où je t'ai vu pour la première fois (radar aiguisé). Je suis très, très heureuse de te connaître et je veux que tu saches que tu possèdes une âme incroyable, avec des qualités que personne ne peut prétendre avoir et t'en dérober, pas même toi. Tu es d'une humilité presque trop grande pour ton propre bien, tu n'as aucun

jugement, toujours dans la justesse et la réflexion, desquelles il faut que je prenne exemple. Je te souhaite de trouver ton poète (ou de les être tous), tes vagues, tes cieux, ton bleu ou ton rouge (ou les deux). Je te souhaite de te voir enfin comme je te vois, et non plus comme tu te perçois. Je veux que l'on puisse toujours échanger, dans la joie de partager un livre, pour que de sa prose, nous ruine notre existence ou la change pour le mieux. Alors je profite de ces quelques lignes pour te remercier, d'avoir veillé sur moi et de t'être occupé.e de mes grands chagrins comme de mes joies. J'espère pouvoir toujours te rendre la pareille, à défaut de t'offrir des duels épiques de sabre. Aime-toi comme on t'aime, c'est tout ce que je peux te souhaiter.

Sarah, Sarah, Sarah. Par où commencer ? Je suis très heureuse de te connaître parce que tu as rendu ce labo tellement léger et drôle. Je n'ai pas les mots pour décrire la fois où tu as découvert pour la première fois les premières planches de Lune et l'autre, que j'apprenne que c'était un rêve d'enfant qu'on réalisait ensemble, je crois que je vais chérir ce souvenir très longtemps. Ça m'a rendue tellement heureuse de savoir qu'on ferait quelque chose qui plairait aux gens, mais qui nous plairait à nous surtout. Je ne peux pas exprimer à quel point tes réactions à chaque dessin m'emplissent d'une fierté et d'une détermination sans limite, d'être aussi bienveillante pour tout et de me pousser à continuer, tu m'as redonné le goût de transmettre le savoir et tu es un exemple autant scientifique que humain. Quelle belle personne tu es et quel plaisir c'est de travailler à tes côtés, j'espère que l'on continuera d'être Lune pour l'autre et que l'on ira loin ensemble. Merci à toi, du fond du cœur, le labo ne serait pas le même sans toi et tu vas grandement me manquer.

Aimie ma petite soeur de thèse (ça fait bizarre écrit, ça sonnait mieux dans ma tête), je ne sais pas par où commencer, toujours est-il qu'il n'y a qu'une chose que je veux pour toi, et c'est ton bien. Je te souhaite tout le bonheur de monde, vraiment, tout (même le mien, allez je te le donne, c'est pas bien grand. Bon d'accord je le garde). Je te souhaite que ton fardeau s'estompe et que tu te rendes compte de la merveilleuse personne que tu es, qui avec Luz, êtes les personnes les plus humbles, justes et gentilles que je connaisse. Je me battrais pour toi, pour que tu comprennes à quel point tu es précieuse et forte, tu as toutes ces qualités en toi et je ne peux que souhaiter que tu les prennes en main, que tu te rendes compte de ton immense valeur et que ça devienne tes plus grandes forces. Tu es une merveilleuse personne et je te souhaite de persévérer, car ça vaudra le coup. Rappelle-toi que tout ça, tu le fais pour toi et que ça t'emplit de joie et de bonheur. On observe la forge des étoiles, c'est quand même fou que l'on ait fait de notre passion notre métier. Alors prends confiance, tu as toutes les cartes en main et je te souhaite le meilleur.

Nina, merci à toi d'être comme tu es. Et là tu me dirais sûrement, "morte à l'intérieur ?" mais je crois que tu ne rends pas bien compte de la chaleur que tu projettes. D'accord, peut-être pas de la manière la plus lisible qui soit, mais que je perçois comme une véritable source de force et de courage (bon là tu dois lever les yeux au ciel parce que tu penses que je raconte des bêtises). OK, ce n'est pas évident à exprimer, mais en même temps, tu n'es pas évidente à cerner et pourtant, j'adore ça. J'ai découvert une grande artiste, de tes toiles à tes négatifs, qui a un véritable besoin de reproduire le monde de la plus belle des façons. J'ai également découvert un amour qui n'a d'égal que ta grandeur mais bref je m'égare..... Je suis ravie de t'avoir rencontrée et je te souhaite le meilleur, que tout aille mieux et que tu deviennes célèbre pour que je puisse enfin devenir richissime en vendant tes toiles. Alors merci de t'accrocher pour que j'en vive (et accessoirement, je t'apprécie beaucoup, alors continue de te battre, merci).

Mélie. Je pourrais juste écrire ton nom parce que ça résumerait bien notre amitié : un mot, un regard et on est déjà en train de pouffer de rire. Merci d'avoir été une co-bureau exemplaire, c'est-à-dire, avec qui je pouvais discuter d'absolument tout (et surtout de rien) et qui prenait tout au sérieux (mais rien non plus), qui aurait pris une batte pour me défendre ou qui m'aurait juste poussée dans un bar jusqu'à que ça aille mieux. Merci à toi, de m'avoir donné des fous rires, de m'avoir aidée, écoutée (probablement avec tout le labo) et partagé tes combats, craintes, peurs et joies. Je savais que tant que tu étais au labo, j'avais un endroit où me sentir en sécurité et écoutée. Je te souhaite tout le meilleur (et surtout une bonne grosse nuit de sommeil. Allez peut-être deux, mais c'est déjà bien généreux).

Yassin, merci pour tous les bons moments, je crois qu'il n'y a pas un seul jour où on a été sérieux pendant plus de quinze minutes. Merci à toi d'avoir toujours mis la bonne ambiance, l'enthousiasme et la bonne humeur. J'avais l'impression que tous mes problèmes étaient plus légers après t'en parler, même si parfois j'avais l'impression de me retrouver sur le divan alors que c'est moi qui t'avais posé une question... Bizarre. Quoiqu'il en soit, prends bien soin de toi, tu es une très (trop) bonne personne, tu nous fais tous nous sentir mal en comparaison de ton humilité. Mais c'est bien, tu nous pousse à être de meilleures versions de nous même. Merci à toi pour tout ce que tu as fait.

Clément, merci pour cette fin de thèse extrêmement agréable (et les memes notamment), j'étais ravie de débarquer en trombe dans le bureau et d'utiliser vos tableaux blancs comme des toiles, malgré les plaintes d'Alexandre. Merci d'avoir été le psy du psy, du coup il va falloir en trouver un troisième psy (et un quatrième... ah ok en fait ça ne s'arrête pas, c'est donc ça les maths). Merci d'être une personne beaucoup trop sympa, j'ai une confiance aveugle en toi et tu me butes de rire, vraiment tu as un humour très très fin et fort (bravo les muscles). Je te souhaite tout le meilleur (pour les oreilles surtout) et j'espère qu'on se recroisera souvent. Beaucoup d'amour, merci.

Bizarre, je vais remercier maintenant que des garçons, mais ça doit être seulement le hasard. Merci à vous tous, Maxime, Noé, Thomas, Tommy, Alexandre (particulièrement tes gâteaux...) et Pierre, d'avoir été de super collègues de déjeuners et de pauses très, très longues, avec une bienveillance et un humour qui m'ont fait mal aux abdos. J'avais une raison de venir tous les jours au labo parce que je savais que l'ambiance serait au rendez-vous. Merci Benjamin, d'avoir été un très bon camarade de thèse, malgré tout, j'étais très contente de faire le chemin avec toi et j'ai découvert une belle personne. Je vous souhaite à tous une grande réussite, vous êtes géniaux et j'espère que vous irez où vous le souhaitez. Ne m'en voulez pas de ne pas être cité un par un, vous savez où se trouve mon cœur... Merci à vous tous.

Des jeunes collègues que j'ai rencontrés et re-rencontrés en conférence et au laboratoire, merci particulièrement à Sacha pour les bons moments passés (il faudrait peut être qu'on ré-équilibre en parlant un peu plus sciences... ou pas) et ta bonne humeur. Merci à Laure, pour ta gentillesse et ton humour, pour toutes les fois où tu as accepté le lourd fardeau du Journal Club... Si l'on devient permanents tous ensemble, ce sera un plaisir de travailler avec vous.

Merci Nadège pour de très nombreuses choses. Déjà sur le plan professionnel, de te battre pour nous et d'être un exemple de persévérance et de bienveillance, pour nous toutes. Et puis sur le plan

humain, puisque j'ai trouvé en toi une amie formidable, drôle et qui m'a donné une confiance en moi incroyable. Ton humour (je le répète) et ta justesse d'esprit m'ont tellement aidée à avancer, j'avais toujours une bonne raison d'aller au labo pour te voir, mais c'était décuplé en soirée ou en conf, quel plaisir de m'avoir fait prendre conscience que l'âge n'était en rien (en même temps, avec seulement deux ans d'écart...) un obstacle humain mais qu'en plus, je pouvais y trouver des amis géniaux. Merci à toi, pour tout ce que tu fais, continues de faire et feras, je suis très, très heureuse de t'avoir rencontrée.

Merci à toi, Jérémy, d'avoir été mon parrain de thèse pour un an. Bien évidemment, tu as fait bien plus que ça en trois ans et je te remercie pour toutes nos discussions, profondes ou humoristiques, que l'on a échangées. J'ai trouvé en toi un véritable confident, sans jugement et avec une très grande justesse d'esprit et de sympathie. Je ne te souhaite que le meilleur et je te remercie d'avoir été là de très nombreuses fois où j'en avais besoin, que ce soit en tant qu'"adulte" ou en tant qu'ami. Merci à toi, vraiment.

David, si Valentine et Pierre m'ont donné une opportunité en or, toi tu m'as donné l'opportunité d'une vie. Grâce à toi, j'ai pu faire entrer dans la recherche et plus particulièrement dans le domaine que je chérissais enfant (et toujours adulte). Quelle chance j'ai eu de t'avoir rencontré au lycée, où tu es venu nous présenter les pulsars. Je me rappelle encore de l'incompréhension, la surprise et l'envie de tout savoir, quand tu nous as fait écouter les différents enregistrements de pulsars et de leur période. Je n'en revenais pas et ce souvenir est gravé dans ma mémoire. Si j'avais déjà envie de devenir astrophysicienne, tu as enfoncé le clou de ma curiosité ce jour-là. Merci à toi, pour ta présence au laboratoire qui est si chaleureuse et ta bonne humeur, mais surtout, merci de m'avoir donné cette chance. Je t'en suis extrêmement reconnaissante. Merci.

Merci à tout le personnel administratif, Leïla, Cécile, Sophie, Nathalie, pour votre efficacité et votre sang-froid malgré les embûches des logiciels, des galères de missions et des oublis ô-combien nombreux que j'ai pu effectuer personnellement... Vous êtes les meilleures.

Merci à tous mes collègues qui m'ont aidée de plus ou moins loin à avancer dans ma thèse et à comprendre les très (trop) nombreux phénomènes qui ont lieu dans le milieu interstellaire. Merci à l'équipe FEMIS pour nos échanges et les réunions du mercredi qui pouvaient être explosives comme instructives (on a toujours rien compris aux recrutements, mais merci d'avoir essayé)... Merci pour votre patience et votre bonne humeur.

Zak, I found in you a wonderful friend with whom I could laugh about anything at any time. Thanks for the memes, for the jokes, for the long talks that helped me greatly. I would have loved working with you, but on another hand, I think it is for our career's best interest that you and I don't share the same room too often... I don't think much would be accomplished. I can't wait to see you again in conferences or sending me useless GIFs in IceAge meetings. See you around, I'm glad I've met you (even though you are British, but nobody's born perfect I guess...).

Un merci tout particulier à Emmanuel, qui avec Jenny, m'a pris sous leur aile et qui a joué le rôle de mentor à de nombreuses reprises. Merci pour tous les enseignements que tu m'as donnés, qu'ils soient professionnels ou humains (j'ai certaines de tes paroles gravées dans mon esprit). C'était tou-

jours un véritable plaisir de discuter avec toi, j'avais toujours l'impression d'être devant une source inépuisable de savoir et j'ai énormément appris à tes côtés, ou bien d'être au bord d'un puits sans fond d'humour... ce qui était génial aussi. J'ai eu cette chance immense de côtoyer des collègues qui m'ont fait aimer ce métier, et tu en fais partie.

Jenny, ça va être difficile de tout condenser en un petit texte, mais tu es la meilleure rencontre que j'ai pu faire pendant cette thèse. Je te l'ai déjà dit mais je le répète, le fait que dès lors que nous nous sommes serrées la main pour la première fois, tu m'as parlé comme à une collègue, dans le plus grand des respects, je suis immédiatement tombée sous le charme. Pour une raison qui m'échappe encore aujourd'hui, tu as eu la confiance de m'envoyer à l'autre bout du monde, à deux reprises... Merci à toi, qui m'a insufflé ta passion et ton énergie, à toute épreuve, et ce, à chaque fois que l'on s'est croisées. Tu as eu un rôle capital pendant ma dernière année, alors que je n'avais plus aucune confiance en moi, tu m'as donné la force de me donner à fond et mon Dieu, ce que ça a payé. Quand on travaillait ensemble, sur des proposals à 2h du matin (IAFR!!) ou sur un financement inespéré, j'avais l'impression que tout était possible. Tu fais ressortir le meilleur de moi-même, en me rappelant que l'on fait ce métier par passion mais également parce qu'on a la force et la carrure pour. Ton parcours est une inspiration et je te remercie du fond du cœur de m'avoir accordé la confiance d'essayer de faire un petit bout de chemin ensemble. On ne va peut être pas pouvoir le faire pour le moment, mais je n'ai aucun doute que dans le futur ça sera le cas. Quoi qu'il arrive, j'ai trouvé en toi une incroyable amie sur qui je peux compter, une excellente collègue qui me pousse à me surpasser et une superbe camarade de bêtises. Je suis très, très contente de t'avoir rencontrée et j'espère que c'est le début d'un long voyage.

Je remercie la bande de L3, restée en contact, et avec qui on se soutient tous mutuellement, même aux quatre coins du monde. Merci à Victor, Léna, Valentin, Kyla, Renaud, Nathan d'être les plus optimistes, de répondre présent dès qu'il y a besoin et d'arriver à rire de tout en toutes circonstances. Vous êtes géniaux et je suis fière de tout ce que vous avez accompli personnellement. Je vous aime très fort les copains.

Alexis, merci. Tu as traversé un océan pour t'assurer que j'aille bien et tu m'as aidée à passer un moment critique de ma vie et de cette thèse. Je sais que tu le referais si cela se reproduisait, alors je veux que tu saches que c'est réciproque. Merci pour tout, merci pour l'amour, merci pour les rires et larmes. On a marché sur un volcan, on s'est paumés dans la jungle et on a nagé au milieu des raies manta : je crois qu'on pourra difficilement faire mieux comme aventure et je suis tellement heureuse de l'avoir vécue avec toi car désormais, j'en garde un souvenir fantastique. Merci à toi, je t'aime fort, je te souhaite tout le bonheur du monde et que tu t'éclates dans ce que tu fais, car en plus d'être très doux, tu es très bon. Bravo pour ton humanité et ta douceur, merci de faire partie de ma vie.

Une mention spéciale à tous les professeurs qui depuis toujours, m'ont poussée à continuer et à me surpasser, en particulier Raphaël M., Robert A. (à qui je dois la magnifique citation qui apparaît sur les premières pages, merci pour tous nos échanges épistolaires numériques, c'est toujours un plaisir de les recevoir), Alain V., Catherine P. (comme quoi, des années plus tard, je n'arrive pas à croire qu'une discussion ait pu changer ma vie pour le meilleur, merci du fond du cœur), Frederic C. et Cédric C. et Frederic S.. Merci à vous, qui avez marqué de façon durable ma vie, que ce soit

d'un point de vue scientifique ou personnel, merci d'avoir été patient.es, tolérant.es et passionné.es. Ce goût de l'enseignement, vous me l'avez transmis et j'espère pouvoir le transmettre à mon tour.

Un remerciement un peu spécial à Paul, mon "kiné-psy-thérapeute", qui a œuvré pendant 2 bonnes années à me faire aller mieux physiquement et mentalement, et Dieu sait que parfois ça semblait peine perdue... Les nuages vont se réchauffer et je réusis à glisser un jeu de mots dans une revue très prestigieuse, ce jour-là, ça sera pour vous !

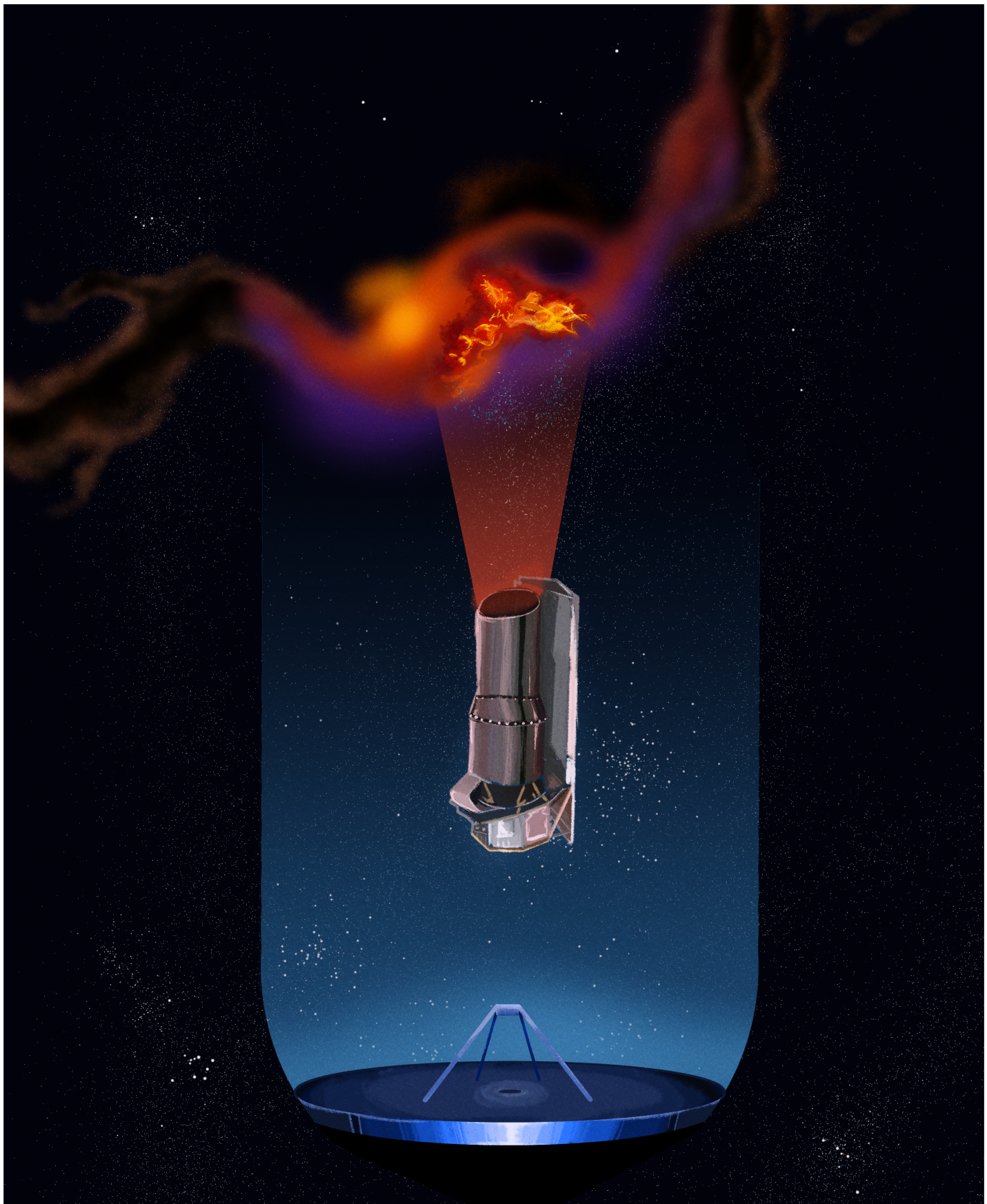
Драга Ивана, упркос свему, ти си била највећи део ове тезе, и научила си ме више о животу него што сам ја научила о звездама. За те две године си ме учинила најсрећнијом особом на Земљи. Мислила сам тада да постојимо само ја и ти... И то је учинило космос много мање страшним него што јесте. Хвала ти на свему, што си ме волела и дала ми да те волим, што си марила, што си се смејала и на најмању шалу, и што си ми дозволила да видим твој свет. Можда више ниси моје сунце, али ћеш увек бити моја звезда што сја у најтамнијим ноћима, на коју ћу се увек освртати са осмехом. Хвала ти. Волела сам те, волим те још увек и волећу те заувек јер си била мој живот. За тебе бескрајно осећам нежност, и желим ти само најбоље.

Enfin, je remercie Florian, sans qui ce rêve ne serait peut-être jamais né. Je n'ai jamais su te le dire clairement que tout ça, c'était en grande partie grâce à toi, à ces nuits où l'on a regardé les étoiles, que ce fut en Provence ou sur le balcon de ton appartement. Je suis heureuse que tu aies pu être là quand j'ai pu décrocher la thèse et j'ai pris tous tes conseils très au sérieux, j'ai posé 1000 questions (parfois les mêmes, plusieurs fois aux mêmes personnes!!) et j'ai fait autant de présentations que je pouvais (personne ne voulait participer à mon Journal Club...). Merci d'avoir rendu Orion magique et de m'avoir accueillie plusieurs fois, toi et tes amis, dans le monde de la physique, avec la plus grande gentillesse et bienveillance. Je chérirais mes souvenirs de nos conversations sur l'univers, de la plus insignifiante forme qu'il ait pu prendre aux infinies sur lequel il s'étend. Merci à toi, merci d'avoir été une force de la nature, dotée de la plus grande humilité et de m'avoir partagé cette passion. Je ne peux qu'espérer qu'aujourd'hui et pour le restant de mes jours, je la transmettrai exactement avec la même intensité que tu avais.

Préface

C'est une nuit d'été, comme tant d'autres, que je découvre le ciel nocturne sous un nouvel oeil. Mon cousin me pointe du doigt des étoiles très lumineuses et me donne leur nom, que j'oublierais dans la minute, mais que je retrouverais à chaque fois que je sortirais dehors après cette nuit. Si aujourd'hui ça me fait doucement sourire de n'avoir pas réussi à me rappeler du nom des étoiles du triangle de l'été (au grand nombre de... trois) quand j'avais 12 ans, je me projetais déjà astronaute ou astronome. Finalement, après avoir compris qu'un décollage de fusée se ferait avec 300 tonnes de carburant sous mon siège, je me suis tournée vers la tranquillité d'un télescope. C'est ainsi que j'observe mes premières nébuleuses, galaxies et amas. Mon cousin me parlait sans cesse de la beauté de la nébuleuse d'Orion, mais quand je l'ai enfin aperçue dans mon objectif, mon cœur s'est arrêté. Certes, de surprise d'abord d'apercevoir cette petite tâche, puis d'une très faible déception : elle n'était pas aussi colorée que toutes les images que j'avais pu voir. Frustrée, je m'en vais raconter ça à mon cousin quand je le recroise. C'est avec amusement qu'il l'a pris et qu'il a commencé à m'expliquer les principes de spectre de la lumière, je suis fascinée de cet univers invisible qui m'échappe. Très vite j'en suis convaincue, je serais astrophysicienne... Au lycée, mon professeur de physique-chimie m'encourage, me montre Orion sous un nouveau jour avec son télescope C8 et me pousse à continuer dans la physique. Je suis loin de me douter que la voie serait pavée d'équations différentielles (horrible), de dynamique des fluides (atroce) et de physique quantique (sans commentaire). Finalement après des études qui ont pris plusieurs tournures très intéressantes, je me vois enfin entrer dans le grand monde de l'astronomie. Grâce à M. David Smith (que je ne peux toujours pas tutoyer par respect), j'ai l'opportunité de faire un stage au Laboratoire d'Astrophysique de Bordeaux. Puis grâce à la confiance que m'ont accordée Valentine Wakelam et Pierre Gratier, je peux aujourd'hui vous partager les travaux de 3 ans qui auront été plus formatrices que l'entièreté de mes études, tant d'en ma vie scientifique que personnelle. Je vous prie donc de trouver le fruit de mes humbles recherches sur la formation des étoiles.

Les illustrations se trouvant dans ce manuscrit, sans mention de crédits, ont été réalisées par mes soins. Si vous veniez à les utiliser, je vous demanderai de ne pas effacer ou couper ma signature et de me créditer (A. Taillard), merci.



Study of the early phases
of star formation

Angèle Taillard

1 | Introduction

Les étoiles ont fasciné l'humanité depuis la nuit des temps. D'aussi loin que les écrits nous portent, les civilisations du monde entier ont étudié ces astres, s'en sont servis comme guides et ont tracé entre les étoiles, les plans d'un monde lointain, qui semblait inaccessible. L'astronomie est l'une des plus anciennes sciences et nos ancêtres comprenaient déjà que le monde ne se limitait pas à la terre qu'ils foulaient. Limités dans leurs instruments d'observations, les scientifiques de l'Antiquité avaient déjà commencé à définir les mouvements réguliers qui animaient les astres, les cycles de la Lune et commençaient à émettre l'hypothèse que la Terre tourne autour du Soleil. C'est du grec (*galaxias kýklos*), par l'intermédiaire d'une traduction latine, qu'est né le nom de "Voie Lactée" (*via lactea*) pour désigner notre galaxie. La nature même de cette traînée lumineuse dans le ciel reste pendant longtemps un mystère, mais servant de source à de nombreux mythes.

Il aura fallu attendre les premières lunettes astronomiques, avec Galilée en 1609 qui découvre les satellites de Jupiter, les cratères lunaires et les amas d'étoiles minuscules, composant la Voie Lactée. Depuis, les instruments ont évolué et les astronomes ont pu ouvrir les portes du monde si lointain et inaccessible qu'ils contemplaient depuis toujours. Les nébuleuses, comètes, galaxies, pulsars... tout ce spectacle nocturne a enfin pu être étudié et décrit. Ce ne sera que très récemment que l'on comprendra les origines cosmiques de la vie sur Terre, dont les éléments chimiques sont créés dans les étoiles et que les éléments les plus lourds naissent dans la mort de celles-ci. Depuis l'avènement des satellites, télescopes gigantesques et observatoires aux sommets du monde, nous avons pu remonter au début de l'Univers et de la matière qui le compose. Aujourd'hui, les photographies d'*Hubble*, du VLT, d'ALMA... sont entrées dans l'imaginaire collectif et attisent toujours un sentiment enfoui de comprendre d'où l'on vient. Les nébuleuses aux mille couleurs que ces images nous ont apporté sont d'une grande beauté, tant dans leur apparence que dans la science qu'elles nous ont apprise. C'est dans ces grands nuages que se portent les travaux de cette thèse. Nous remontons aux origines mêmes des molécules qui composent notre planète. C'est dans les toutes premières étapes de la formation des étoiles que nous allons nous pencher, afin de comprendre quels sont les mécanismes qui ont permis la formation des premières briques de la vie, à la surface des grains de poussière les plus insignifiants, et comment elles se sont retrouvées dans le milieu interstellaire.

1.1 Formation des étoiles

La formation des étoiles est un processus extrêmement long qui passe par de multiples phases très différentes. Il est cependant capital de comprendre chacune de ces phases, permettant d'en savoir plus sur comment la vie telle que nous la connaissons a pu apparaître sur Terre. Si les molécules que nous observons sur notre planète sont très complexes, nous avons maintenant des pistes indiquant que leurs origines remontent aux premières phases de la formation des étoiles. Ces étoiles définissent les structures et l'évolution globale des galaxies. Elles permettent de fournir au milieu interstellaire des éléments chimiques, formés au sein même des astres, pendant leur vie. À leur mort, de nouveaux atomes sont formés grâce aux supernovae des étoiles massives, tandis que les étoiles de plus faibles masses brassent la matière autour d'elles en se débarrassant de leurs couches internes. Le milieu interstellaire est donc ainsi réapprovisionné en éléments chimiques et agité par ces mêmes étoiles

qu'il forme. Ce cycle est continu et se produit dans toute la galaxie. On a donc la formation des étoiles sur le plan microphysique mais également macrophysique. Nous allons ici décrire les deux aspects pour chaque étape, en commençant par le milieu interstellaire qui se densifie en nuage moléculaire, en se basant sur les écrits de [Tielens \(2005\)](#) et [Draine \(2011\)](#).

1.1.1 Milieu interstellaire



FIGURE 1 – Chameleon I, nuage moléculaire sombre observé avec NIRC*am* par le *James Webb Space Telescope*. Cette région de formation d'étoiles est l'une des premières cibles de ce nouveau télescope. La partie la plus froide du nuage (en bleu au centre) est illuminé en infrarouge par la proto-étoile Ced 110 IRS 4 (en orange, en haut à gauche). On peut apercevoir de nombreuses galaxies en fond, un jet de matière au centre de l'image par une étoile en formation et de nombreuses étoiles se trouvant derrière le nuage. Crédits : NASA, ESA, CSA, and M. Zamani (ESA/We*bb*) ; Science : F. Sun (Steward Observatory), Z. Smith (Open University), and the Ice Age ERS Team.

Le milieu interstellaire (ou ISM par la suite) est l'ensemble des particules gazeuses (atomiques et moléculaires) et la poussière qui composent les galaxies. Le gaz représente près de 99% de la masse totale de l'ISM et les 1% restant sont les poussières. Les éléments chimiques qui constituent le gaz sont majoritairement l'hydrogène et l'hélium (74% et 24% de la masse de l'ISM respectivement), la fraction minimale restante provient du reste du tableau périodique des éléments (majoritairement l'oxygène, le carbone et l'azote). Plusieurs types de poussières existent mais elles sont principalement formées de silicates recouvertes de glaces, nous les détaillerons par la suite. L'ISM est divisé en plusieurs catégories (ou phases) qui peuvent être résumées à :

1. **HIM** (*Hot Interstellar Medium*) - Plasma chaud, $T > 10^6$ K, produit par des chocs rapides. Les temps de refroidissements peuvent être très longs ($\sim 10^8$ années) pour les pressions dans le disque galactique. Observable en UV, rayons X et rayonnement synchrotron.

2. **Région HII** - Milieu ionisé par les rayons UV émis par les étoiles massives (type O/B), $T > 10^4$ K. Observable dans le visible et grâce aux émissions *free-free*.
3. **WIM** (*Warm Interstellar Medium*) - Gaz ionisé chaud, $T > 8000$ K, observable grâce à la présence du continuum de photons Lyman H_α (photons émis par l'hydrogène ionisé), en UV et par émissions *free-free*.
4. **CNM** (*Cold Neutral Medium*) - Gaz atomique neutre qui est séparé en deux catégories stables : le milieu neutre froid ($T < 100$ K) et neutre chaud ($T \sim 7000$ K). Observable grâce à la raie à 21 cm de HI, la raie du carbone ionisé CII à $157 \mu\text{m}$ et en UV (pour le gaz chaud).
5. **Nuage moléculaire** - Gaz froid (< 20 K), dense ($> 200 \text{ cm}^{-3}$). Observable grâce aux émissions moléculaires, comme CO ou les raies atomiques de C et de O.

Nous nous intéresserons en particulier à la dernière catégorie.

La matière dans notre galaxie orbite autour du noyau central de cette dernière. Via les mouvements internes de ces structures, de grands nuages froids se forment, principalement formé d'hydrogène atomique. Ces nuages peuvent atteindre des masses comprises entre 10^2 et $10^7 M_\odot$ (M_\odot , i.e. une masse solaire, 1.98×10^{30} kg). En présence d'étoiles jeunes aux alentours, ces nuages peuvent être ionisés à cause des rayonnements UV des astres. On observe alors les émissions de l'atome d'hydrogène dont l'électron a été arraché. Ce milieu ionisé est alors composé d'un mélange de protons et d'électrons que l'on appelle région HII. Lorsque les électrons se recombinent au proton pour reformer l'atome d'hydrogène, l'atome formé est à un niveau excité et se dés-excite en émettant un photon dans une cascade radiative. Ces photons peuvent être observés dans le visible (qui donne en partie les couleurs aux nébuleuses), en particulier la raie de H_α à 656 nm, mais aussi en infrarouge et en radio.

Des perturbations externes peuvent influencer la densité de ces milieux, comme les ondes de choc provoquées par des supernovae, turbulences, vents stellaires ou par gravitation. Les nuages formés peuvent être diffus, avec des température de quelques dizaines de Kelvin et des densités inférieures à quelques milliers de particules par cm^3 . Ils sont composés d'atomes neutres (H, C, N, O...) ou ionisés (C^+ , Mg^+ , Si^+ ...). Les nuages plus denses sont appelés nuages moléculaires, qui ont commencé à former les premières molécules neutres (CO, CS, CN...) ou ionisées (CH^+ ...) dans le gaz. Si l'extinction visuelle est suffisamment grande ($A_V > 4$), on peut également observer la formation de glace sur les grains de poussière avec, à la surface, la formation de H_2 , ce dernier étant le moteur principal de la chimie de surface.

1.1.2 Cœurs denses

Lorsque les nuages moléculaires se fragmentent et voient leur densité augmenter abruptement ($n_{\text{H}} > 10^5 \text{ cm}^{-3}$ et densité de colonne de H_2 $N_{\text{H}_2} > 10^{21} \text{ cm}^{-2}$) (Dickman 1975; Keene 1981; Onishi et al. 1998), on parle de formation de globules, ou cœurs denses (comme le nuage sombre B68, voir Figure 2). Ces structures ont une masse $> 2 M_\odot$ (Bourke et al. 1995), cette mesure dépend grandement de la méthode utilisée pour déterminer la taille et la masse de ces objets, faisant apparaître de grandes incertitudes sur les masses mesurées. Il est établi qu'une densité de $n > 10^5 \text{ cm}^{-3}$ permet de mener à la formation d'une étoile, correspondant à environ $10 M_\odot$ (Evans 1999) dans les limites d'un facteur 2. Les coeurs ayant une masse $< 2 M_\odot$ ne favoriseraient donc pas la formation d'une étoile. Ces globules ont la particularité de ne pas laisser passer la lumière dans le visible et de rayonner principalement en infrarouge, via l'émission des poussières. Faute de source de chaleur interne, leur

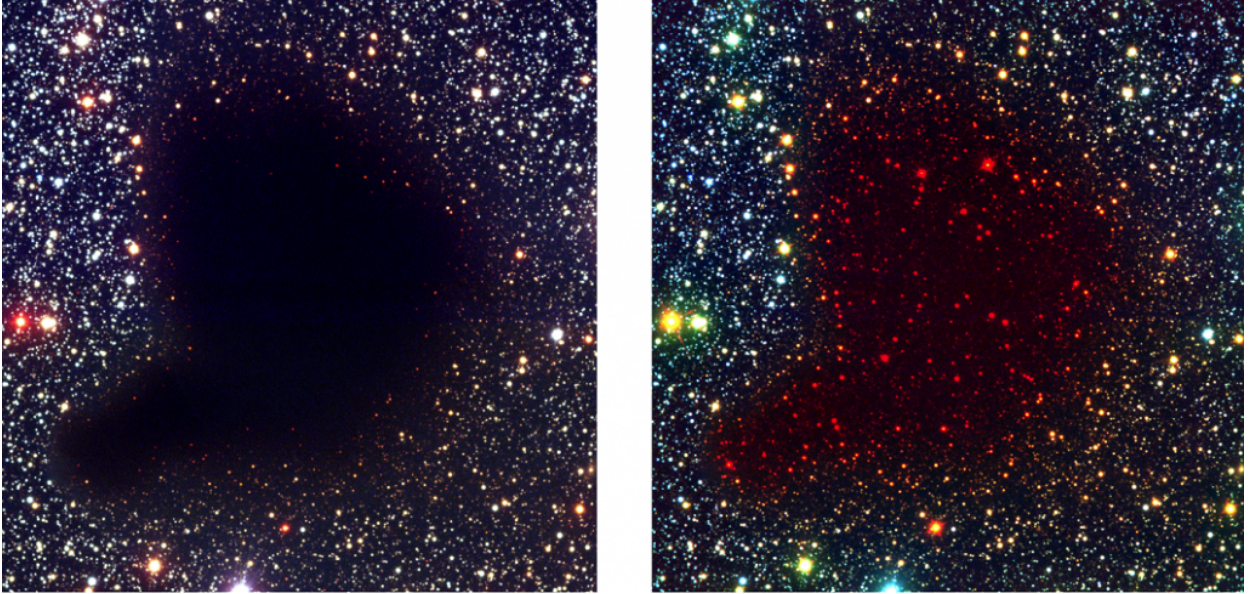


FIGURE 2 – Le nuage sombre Barnard 68, observé dans deux longueurs d’onde différentes. A gauche, le nuage vu dans le visible, ne laissant passer aucune lumière des étoiles de fond. A droite, la même région en infrarouge. On peut observer les étoiles derrière le nuage et y sonder la composition de B68. Crédit : ESO/VLT

température chute brutalement ($T < 15$ K) (Kane et al. 1994). Leur forte densité permet de protéger les molécules à la surface des grains des rayons UV externes et la seule source de ionisation à ces $A_v (> 4)$ sont les interactions des rayons cosmiques avec les molécules de H_2 . Ces derniers sont une des seules sources de chauffage disponibles dans le cas de cœur isolé. À haute densité ($> 10^5$ cm^{-3}), les collisions entre les grains et le gaz vont les coupler et ainsi avoir la même température. Les émissions radiatives du gaz moléculaire tel que CO contribuent également au refroidissement du milieu. Grâce à ces conditions extrêmes, on observe un enrichissement chimique à la surface des grains. Les molécules à plus de 5 atomes (contenant au moins H, C et O) qui s’y forment sont appelées COMs (*Complex Organic Molecules*), ou molécules organiques complexes (Hollenbach et al. 2009). Ces molécules nous font nous interroger sur le niveau de complexification pouvant être atteint dans l’ISM.

Les cœurs denses ont une durée de vie allant jusqu’à plusieurs 10^6 années, dépendante de la densité centrale du cœur. Leur durée de vie est liée à leur capacité à rester en équilibre hydrostatique. Tant que l’énergie cinétique de la pression du gaz est en équilibre avec l’énergie potentielle de la force gravitationnelle interne, le cœur restera dans ce stade d’évolution pré-stellaire. Cette stabilité peut être décrite par l’équation suivante :

$$\frac{dp}{dr} = -\frac{G\rho(r)M_{<r}}{r^2} \quad (1)$$

Avec p la pression, r le rayon de la zone, ρ la densité du gaz au rayon r , G la constante gravitationnelle et $M_{<r}$ la masse contenue dans le rayon r . On parle d’instabilité de Jeans lorsque cet équilibre est rompu. Un autre moyen de décrire la limite de cet équilibre thermostatique est de

calculer la masse maximale d’une sphère de gaz isotherme dans un milieu pressurisé, restant en équilibre hydrostatique. C’est ce qu’on appelle la masse de Bonnor-Ebert et elle peut être décrite par l’équation suivante :

$$M_{BE}(p_0) = 1.18 \frac{c_s^3}{\rho_0^{1/2} G^{3/2}} \quad (2)$$

Où c_s est la vitesse du son isotherme et ρ_0 est la densité centrale de la sphère. Si la masse du gaz excède cette limite, on assiste à un évènement clef : l’effondrement gravitationnel du cœur. Le cœur se contracte et la matière “tombe” vers le centre du cœur, la densité augmentant abruptement pour former une proto-étoile. Plus tard, à l’énergie gravitationnelle qui est apportée par la chute de matière dans la proto-étoile en contraction s’ajoute l’énergie cinétique du gaz. L’énergie se dissipe via les collisions entre le gaz et le disque en formation. Le transfert de moment cinétique, dû à l’instabilité magnéto-rotationnelle si le gaz est suffisamment ionisé ou à cause de la viscosité des turbulences ou des moments de torsions gravitationnelles, va causer le mouvement de la matière du disque vers l’intérieur et permettre de libérer d’avantage d’énergie gravitationnelle. On a donc deux sources d’énergie dominantes : la première étant l’énergie gravitationnelle qui est relâchée en accréant de la matière dans la proto-étoile et par la contraction de cette dernière ; la deuxième étant l’énergie libérée par la proto-étoile quand elle est capable de produire les premières réactions de fusions nécessaires pour “brûler” du deutérium, puis de l’hydrogène.

1.1.3 Proto-étoiles

Les proto-étoiles se trouvent au centre de leur enveloppe, ou de leur proto-disque selon l’avancement de l’effondrement. Il n’est pas clairement compris aujourd’hui ce qui détermine la masse de ces objets nouvellement nés. Une estimation actuelle peut se faire par la Fonction de Masse Initiale (IMF). En effet, cette loi, décrite par les travaux pionniers de [Salpeter \(1955\)](#), permet de déterminer la distribution des masses des étoiles pour une population d’étoiles nouvellement formées dans notre galaxie. Cette fonction se base notamment sur les observations d’étoiles naissantes dans la Voie Lactée, mais les proto-étoiles étant difficiles à observer, ajoute une certaine incertitude à cette loi. De plus il n’a pas encore été démontré que cette loi est universelle et si elle s’applique seulement à notre galaxie. Les travaux récents montrent que la proportion de coeurs massifs est plus importante que celle attendue dans l’IMF ([Motte et al. 2018](#); [Nony et al. 2023](#)).

On observe tout de même plusieurs stades évolutifs de proto-étoiles de faibles masses ([Andre et al. 2000](#)), caractérisés par leur indice spectral. Le spectre de l’énergie rayonnée est dépendant du facteur d’obscurcissement (“*obscuring factor*”) autour de la proto-étoile. Les proto-étoiles les moins évoluées sont appelées “Class 0”. Ces objets ont un facteur d’obscurcissement très élevé, avec leur spectre rayonné maximum à $\lambda 100$, ce qui rend difficile la détection en infrarouge pour les observations au sol, sur la bande K à $2.2 \mu\text{m}$ (correspondant à une fenêtre atmosphérique), et à cause de la forte absorption des silicates froids à $10 \mu\text{m}$. Ces objets sont cependant observables en utilisant des interféromètres radio à résolution spatiale suffisamment forte, en cherchant des signaux forts là où la densité est maximale, pouvant révéler des enveloppes sphéroïdales. On peut également utiliser le gaz comme traceur de la cinématique du gaz : lorsque les raies d’émission moléculaire présentent des asymétries, cela révèle les mouvements à l’intérieur de l’enveloppe. Les émissions moléculaires peuvent également tracer les mouvements de gaz dirigés vers l’extérieur du nuage, parfois de manière anisotrope (ou “*outflows*”). Les Class 0 ont une durée de vie courte de $\sim 10^4$ années. Les

proto-étoiles plus avancées ($\sim 10^5$ années), entourée d'un disque et d'une enveloppe circumstellaire de faible masse ($< 0.1 - 0.3 M_{\odot}$) sont appelées "Class I". Ces proto-étoiles continuent d'accréter le gaz la poussière dans le disque, ainsi que des jets polaires plus rapides. Elles sont observables en infrarouge proche. Les "Class II" ont leur enveloppe pré-stellaire qui a disparu. Elles ont atteint leur masse finale, correspondant à des étoiles dites "T Tauri", qui sont des étoiles de pré-séquence principale de faible masse. Elles subissent encore des contractions gravitationnelles avec une accréation du disque résiduelle, avec un taux d'accréation de $\sim 10^{-6} M_{\odot \text{yr}^{-1}}$ (contre $\sim 10^{-5} M_{\odot \text{yr}^{-1}}$ pour des étoiles de faible masse et $\sim 10^{-4} M_{\odot \text{yr}^{-1}}$ pour des étoiles massives [Hosokawa & Omukai \(2009\)](#)). Elles peuvent être observées en visible avec un excès en IR dû au proto-disque. Enfin, les "Class III" sont des étoiles formées appartenant à la séquence principale d'âge zéro, avec la présence d'un disque circumstellaire pauvre en poussières mais avec la possibilité d'apparition de corps en orbite (débris ou proto-planètes). Ces objets sont observables dans le visible avec une très faible composante en IR dû aux restes du disque.

Une fois le disque dissipé, on a désormais une étoile de la séquence principale, avec si la formation l'a permis, des objets en orbite (planètes, astéroïdes, comètes...). Le cycle complet est résumé dans la Figure 3.

1.2 Les poussières & les glaces

C'est dans les atmosphères des étoiles évoluées et lors des supernovae que se forment les grains de poussières interstellaires. Ces grains sont principalement composés de silicates ou de carbone amorphe hydrogéné, avec des tailles variant de quelques nanomètres à quelques dixième de microns ($> 0.25 \mu\text{m}$ dans l'ISM) ([Mathis et al. 1977](#); [Draine 2011](#)). Les grains se trouvant dans les milieux denses participent à l'absorption des rayons UV et visibles et ré-émettent des photons en infrarouge. La coagulation des grains forme alors des agrégats dits "fluffy" ([Mathis & Whiffen 1989](#)). Dans les régions compactes, le nombre de petites particules en partie responsables de l'absorption des UV est réduit et la taille moyenne de ces grains augmente. C'est également à la surface de ces grains que se forment les glaces interstellaires.

Traduit de [Boogert et al. \(2015\)](#), la glace interstellaire se définit par "l'ensemble de la phase solide des molécules volatiles pures (H_2O , CO ...) ou de leur mélange (avec CO_2 , NH_3 , CH_4 ...), avec peut-être, des inclusions réfractaires, se trouvant à la surface des grains de poussière interstellaires". La chimie des glaces est à l'origine de la formation de nombreuses molécules dans les nuages denses, incluant les espèces chimiques qui ne peuvent pas se former facilement dans le gaz ([Tielens & Hagen 1982](#); [Herbst & van Dishoeck 2009](#)). Ce qui montre que la chimie de surface n'influence pas seulement les espèces se trouvant dans les manteaux de glaces, mais également dans le gaz. Dans les milieux froids, on définit les processus qui permettent de libérer ces espèces solides dans le gaz comme les mécanismes de désorption non-thermique. Ces mécanismes comprennent les réactions chimiques exothermiques de surface, la photodésorption et les interactions des rayons cosmiques avec les grains ([Schutte et al. 1993](#); [Theulé et al. 2013](#)).

Les glaces sont d'importants réservoirs élémentaires. On estime que plus de 60% de l'oxygène, qui ne se trouve pas dans les silicates, permet la formation de molécules dans les glaces connues (CO , CO_2 , H_2O). Elles se forment dans les environnements denses ($> 10^3 \text{ cm}^{-3}$), à basse température ($< 90 \text{ K}$) et avec des champs UV faibles ($G_0 < 0.07$ à des extinctions visuelles $A_v > 1.6 \text{ mag}$) ([Hollenbach et al. 2009](#)). Grâce aux contraintes observationnelles que nous avons actuellement, il semble qu'il existe un seuil d'extinction visuelle nécessaire à la formation de certaines espèces sur

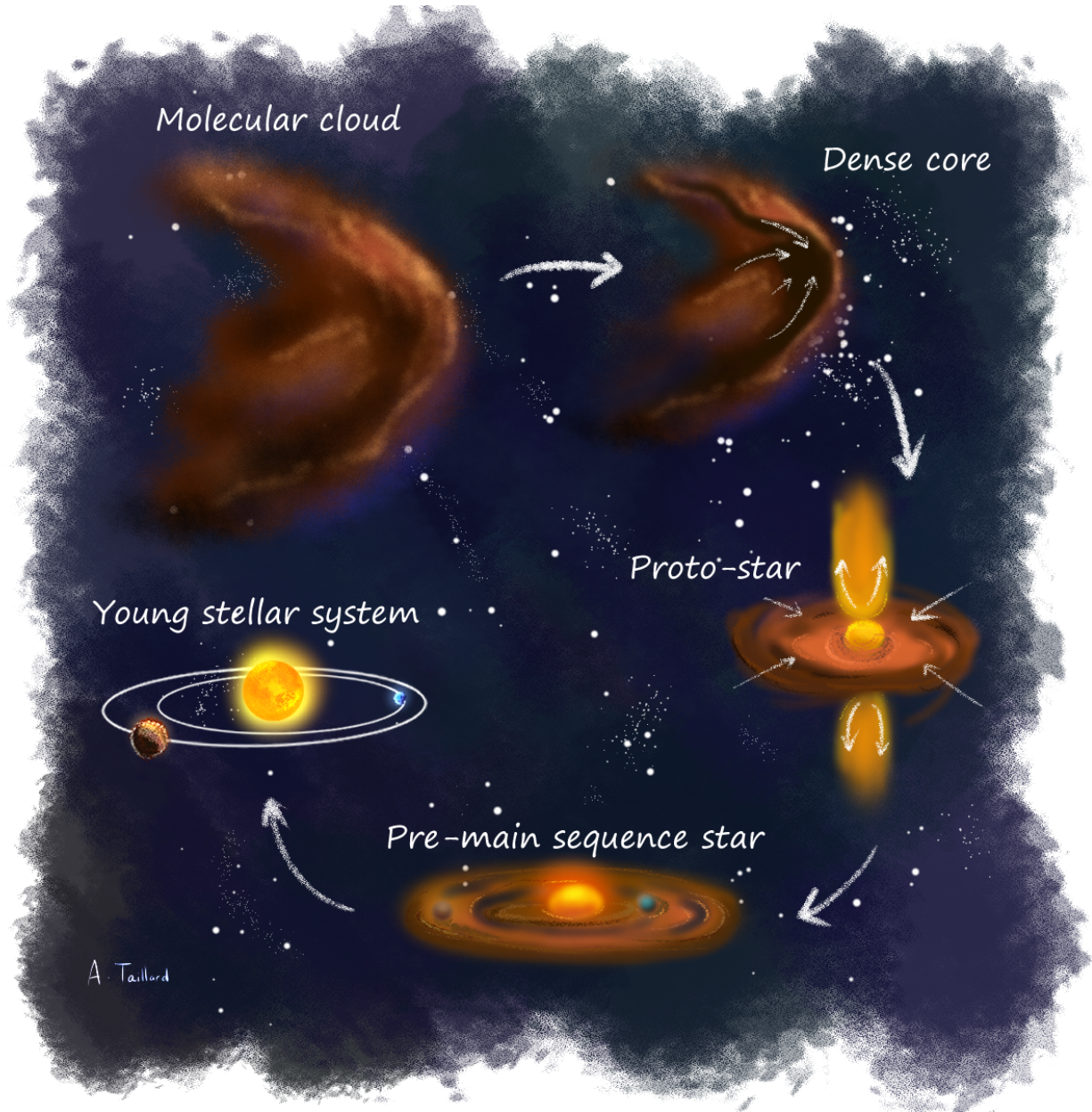


FIGURE 3 – Cycle de formation des étoiles, résumé en quelques étapes clés. Un nuage moléculaire va se densifier en formant des cœurs denses. Ces derniers vont subir un effondrement gravitationnel menant à la formation d’une proto-étoile. Le proto-disque va se dissiper avec le temps en formant des planétésimaux et autres corps en orbite avant d’enfin former un système stellaire.

les glaces. Pour H_2O , ce seuil semble être atteint pour des $A_v > 1.6$ dans la région Taurus (Whittet et al. 2001). Pour le CO_2 , cette valeur serait proche de celle de l’eau, montrant un lien chimique entre les deux espèces, même si leurs abondances relatives varient d’un facteur 3. Le CO peut se coller sur les grains dans les parties plus profondes du nuage, à des $A_v > 3$ (Chiar et al. 1995). Ces valeurs peuvent varier selon les environnements, plus ou moins sujets aux radiations externes. Les glaces de CH_3OH pourrait se former à des $A_v > 9$ (Boogert et al. 2011), ce qui semble concorder à la nécessité d’avoir un *catastrophic CO freeze-out* pour favoriser la formation du méthanol. Cet évènement “catastrophique” se produit à très hautes densités ($> 10^5 \text{ cm}^{-3}$) et basse température ($< 20 \text{ K}$), le rapport H/CO dans le gaz est drastiquement augmenté. Le CO se déplete alors fortement sur les grains, formant une couche de glace apolaire, et permet d’accéder à une chimie dirigée par cette molécule. La composition de la glace peut alors changer, vers des glaces plus riches en CO et CO_2 (formé à partir de son prédecesseur). On observe alors l’apparition de H_2CO et CH_3OH dans les glaces (Pontoppidan et al. 2004; Pontoppidan 2006).

L’observation des glaces est difficile, comme nous le verrons dans les Chapitres 2 et 5. Cependant, avec l’avènement du *James Webb Space Telescope* et ses promesses de cartographie des glaces, une nouvelle ère de l’étude de la phase solide va débuter. Mais pour le moment, les observations de cette phase n’ont été faite que sur quelques sources aux travers de quelques lignes-de-visée. Boogert et al. (2015) a résumé les tendances observées des glaces à différents A_v , dont la Figure 7 de l’article a été extraite et présentée dans la Figure 4.

1.3 Observer les glaces et le gaz

Les observations du gaz et de la glace diffèrent beaucoup, tant dans la méthode d’observation que dans l’information qu’elles transmettent. Selon la phase observée, les photons auront une longueur d’onde différente et nécessitent donc des instruments adaptés. Les méthodes d’observations seront détaillées dans les chapitres suivants.

Les radiations émises par les atomes ou les molécules apparaissent sous deux formes : elles peuvent être produites par continuum ou par spectre de raie. Le continuum désigne plusieurs processus non-discrets dans lesquels des photons sont absorbés ou émis. Il existe plusieurs types de continuum détectable en astronomie, comme par exemple le continuum de Bremsstrahlung (ou “free-free”) qui désigne l’émission et/ou absorption de photons par accélération ou décélération d’une particule chargée dans un champ électrique. Dans ces travaux, nous aborderons le continuum thermique qui provient de la poussière interstellaire. Se comportant comme un corps noir avec une émissivité en loi de puissance, les grains absorbent des photons et en ré-émettent dans l’infrarouge, ils peuvent donc être un traceur de température important.

Les raies spectrales sont le résultat de l’émission d’un photon lors d’un changement d’état énergétique discret. Ce changement intervient lorsque l’énergie reçue par la molécule est assez importante pour passer d’un niveau rotationnel bas à un niveau plus élevé d’excitation. Le retour vers un niveau de plus basse énergie émet alors un photon d’une certaine longueur d’onde. L’excitation à un niveau énergétique plus élevé peut se faire via l’absorption d’énergie cinétique (excitation collisionnelle) ou par l’absorption d’un photon (excitation radiative). De la même manière, la dés-excitation peut se faire par collision ou émission de photon. La fréquence du photon produit correspond à la différence d’énergie entre le niveau élevé (E_H) et le niveau bas (E_L) et peut s’écrire $h\nu = \Delta E_{H-L}$ où $\Delta E_{H-L} = E_H - E_L$. Les spectres d’émissions sont directement liés de la structure moléculaire des émetteurs, ils sont facilement identifiables. Les raies d’émissions peuvent être mesurées avec précision

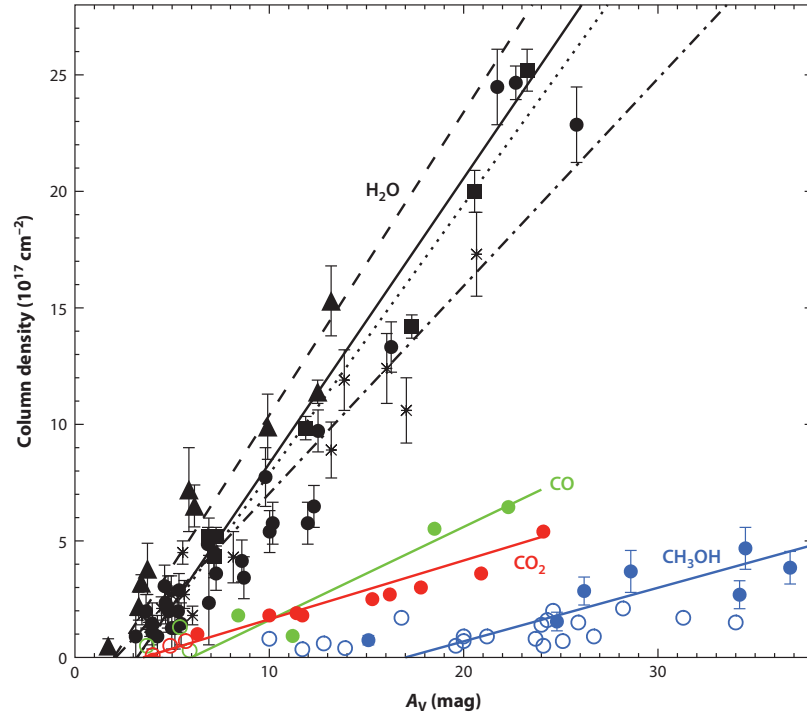


FIGURE 4 – Figure extraite de [Boogert et al. \(2015\)](#). Relation entre les densités de colonne de H_2O (en noir), CO (en vert), CO_2 (en rouge) et CH_3OH (en bleu) et de l’extinction visuelle pour les lignes-de-visée observées dans les nuages froids et cœurs denses. Les limites hautes sont représentées par les symboles ouverts. Les lignes représentent les tendances pour les détections observées. Pour H_2O , les données proviennent de Taurus (rond et ligne solide), Lupus IV (astérisques et tirets-pointillés), L183 (triangles et tirets) et IC 5146 (carré et pointillés). Pour CO et CO_2 , les données proviennent de Taurus seulement et pour CH_3OH , de multiples cœurs denses. Les données ont été tiré de [Chiar et al. \(1995\)](#); [Whittet et al. \(2007\)](#); [Boogert et al. \(2011\)](#); [Chiar et al. \(2011\)](#); [Whittet et al. \(2013\)](#); [Boogert et al. \(2013\)](#)

à travers des spectromètres de laboratoire pour obtenir une fréquence précise de référence.

Les glaces sont observées via des transitions vibrationnelles, qui sont influencées par la composition et la structure des glaces (cristalline ou amorphe, densité et homogénéité). Les différentes molécules présentes sur la surface du grain interagissent ensemble via les attractions et répulsions des dipôles. La position des pics, leur largeur et leur forme, résultants de ces vibrations sont également influencées par les propriétés du grain de poussière (taille, forme, couverture et volume du manteau). Ces effets peuvent être étudiés en laboratoire via l'analyse des propriétés optiques de la surface.

1.4 L'astrochimie - état de l'art

L'une des grandes questions de l'astrochimie est de caractériser la complexité moléculaire des différentes étapes de la formation des étoiles et si cette complexité moléculaire peut être héritée par les systèmes (proto-)planétaires. La grande diversité des régions observées ainsi que leurs conditions physiques intrinsèques semblent indiquer que ce degré de complexité peut varier d'un environnement à l'autre. En effectuant les inventaires chimiques des molécules disponibles dans les objets étudiés, à différent stade d'évolution, il est possible de rassembler des pistes pour répondre à ces questions, en le comparant. Le but ultime serait de comprendre les étapes et conditions clés qui ont permis la formation de la vie sur Terre, en observant divers régions de formation d'étoiles pour les comparer avec notre Système Solaire.

1.4.1 Observations des molécules dans l'ISM

L'astrochimie a débuté avec l'étude du gaz et de la condensation des gaz sur la poussières. Les premières molécules interstellaires (CH, CN et CH⁺) furent découvertes dans les spectres optiques d'étoiles voisines (Swings & Rosenfeld 1937; McKellar 1940; Douglas & Herzberg 1941), puis les premières molécules complexes furent découvertes presque trente ans plus tard, avec par exemple NH₃ ou le formaldéhyde H₂CO (Cheung et al. 1968, 1969). Le développement des radio-télescopes dans les années 70 permit de continuer la recherche de bien plus de molécules organiques, permettant ainsi de se pencher désormais sur la chimie ayant lieu dans l'ISM. La détection de CO, molécule la plus abondante dans l'ISM après H₂ (Wilson et al. 1970) va permettre d'étudier en profondeur les mécanismes à l'origine de la formation de molécules complexes sur les grains. La recherche de ces molécules se faisaient en parallèle dans les laboratoires d'astrophysique, identifiant en amont les fréquences où seraient trouvées les molécules. Cela a permis une explosion dans les détections de très nombreuses molécules, avec les premières molécules "non-terrestres" détectées, dont HCO⁺, N₂H⁺, CCH, C₃N et C₄ (Green et al. 1974; Herbst & Klemperer 1974; Tucker et al. 1974; Guélin et al. 1977, 1978), espèces instables qui n'avaient pas été observées en laboratoire et montrant que l'espace avait encore de très nombreux secrets.

En 2022, plus de 250 molécules ont été détectées (Guélin & Cernicharo 2022) grâce aux observations radio, sub-millimétriques et millimétriques, aux observations optiques et infrarouge, principalement des molécules organiques acycliques ou des radicaux composés de chaînes de carbone. Des molécules exotiques et trouvables uniquement dans l'espace comme des chaînes carboniques hautement saturées (par exemple HC₁₁N, Bell et al. (1997)) ou même des fullerènes, comme C₆₀, C₆₀⁺ et C₇₀ ont été détectées (Cami et al. 2010; Berné et al. 2013; Campbell et al. 2015), représentent les plus grosses molécules jamais observées à ce jour dans l'ISM.

Il est communément accepté que la plupart des molécules interstellaires, comprenant les molécules complexes non-saturées, peuvent se former au travers d'une chimie purement basée sur la cinétique

du gaz. Les réactions ions-molécules ainsi que les réactions de recombinaisons dissociatives sont d'une importance capitale. Ces mécanismes n'ont pas de barrière d'activation et ont un taux de réaction importants, qui peuvent être amplifiés, même dans les milieux froids à 10 – 20 K [Adams et al. \(1985\)](#); [Herbst & Leung \(1986\)](#). Cependant la chimie du gaz n'est pas suffisante pour synthétiser les molécules organiques saturées, qui nécessitent en pratique de hautes températures et/ou des réactions à trois corps, conditions rarement atteintes dans l'ISM. Penchons-nous donc sur les moyens de former ces molécules autrement.

1.4.2 Formation des molécules complexes organiques

Dans les régions chaudes ($T > 100$ K) comme les enveloppes proto-stellaires ou YSOs, les molécules se trouvant dans les glaces peuvent être sublimées et réagir dans le gaz ([Charnley et al. 1992](#); [Caselli et al. 1993](#)). Mais dans les régions froides, les conditions physiques ne permettent pas de désorber la glace par voie thermique. Alors, il faut expliquer comment peut-on quand même détecter certaines COMs sous forme gazeuse dans les régions froides. [Lindblad \(1935\)](#) a étudié pour la première fois la condensation des métaux dans les petits corps comme les météorites, débutant la formation des planètes. [van de Hulst \(1946\)](#) a poursuivi l'idée de cette condensation du gaz, en considérant les abondances élémentaires des atomes, menait également à la formation de H_2O , CH_4 et NH_3 dans les glaces à la surface des grains de poussière. Cette hypothèse a propulsé la compréhension de la formation de molécules plus complexes dans les nuages denses et les enveloppes circumstellaires, comprenant également les espèces qui ne peuvent pas être formées dans le gaz ([Tielens & Hagen 1982](#)). La chimie de surface contrôle alors la composition des glaces, mais aussi des molécules de gaz désorbées des grains de poussières, et ce, dans toutes les phases de la formation des étoiles.

Le grain de poussière a plusieurs rôles : premièrement celui d'être une surface qui sert de point de rencontre pour les molécules présentes dessus, où les molécules et atomes vont se lier au grain via des forces de van der Waals ou par forces électrostatiques, ce qu'on appelle la physisorption, ou en formant des liaisons chimiques à la surface. Deuxièmement, le grain peut jouer le rôle de catalyseur chimique, lors de réactions générant des excès d'énergie, permettant de stabiliser le produit. Troisièmement, dans les régions denses (10^4 cm^{-2}) et froides (< 100 K), le grain peut se couvrir d'une couche de glace (d'environ une centaine de mono-couches) et il sert alors de réservoir de molécules, protégées du champ UV. Les molécules présentes dans la glace sont alors protégées du champ de radiation interstellaire (ISRF) aux UV-lointains. Ces molécules peuvent cependant être exposées aux radiations produites par la réaction entre rayons cosmiques et espèces présentes à la surface. Dans un premier temps, la glace est majoritairement composée d'eau, avec la formation de H_2O qui est bien connue et reproduite dans les laboratoires et modèles chimiques ([van Dishoeck et al. 2013](#)). CH_4 , NH_3 et CO_2 sont également formés dans les phases précoces de la formation des étoiles, avec l'épaisseur des glaces qui augmente avec la densité dans les coeurs en formation, synthétisant ainsi ces molécules. Ces dernières constituent des réservoirs pour les réactions chimiques en plus des abondances atomiques de O, C, N et H présents à la surface des grains.

Lorsque la densité atteint $> 10^5 \text{ cm}^{-3}$, les échelles de temps pour l'adsorption des molécules de gaz sur le grain deviennent plus courtes. CO dans le gaz devient alors la forme dominante de carbone volatile dans ces hautes densités et se retrouve à dépler rapidement sur le grain. On appelle cet événement le "*catastrophic CO freeze-out*", qui permet de changer vers un régime pauvre en eau ou une glace apolaire, qui a été observée à de nombreuses reprises dans les régions de coeurs

denses (Bacmann et al. 2002; Qasim et al. 2018). Une glace riche en CO peut ensuite permettre des réactions avec l'hydrogène pour former H_2CO et CH_3OH , processus qui a été montré efficace en laboratoire (Hidaka et al. 2009; Fuchs et al. 2009; Chuang et al. 2018; Krim et al. 2018). Plusieurs autres processus peuvent transformer CO en CO_2 et en molécules plus complexes. Si les conditions le permettent et que la formation stellaire se produit, alors ces glaces peuvent être potentiellement soumises à un chauffage et une irradiation associée à la formation de l'étoile en cours. On assiste alors à la formation de molécules plus complexes, plus volatiles et des produits organiques refractaires, comme des amino-acides (Kvenvolden et al. 1970; Ehrenfreund & Charnley 2000; Elsila et al. 2009).

La séquence de formation des glaces précédemment énoncée est cependant simplifier et tous les processus de formation de molécules dans l'ISM n'ont pas été clairement identifiés. Des expériences de laboratoire, comme montrées dans les études de Schutte et al. (1993); Theulé et al. (2013) peuvent mener à la formation de nouvelles molécules purement par réactions thermiques. Ces expériences peuvent également permettre d'augmenter la mobilité des radicaux présents sur les surfaces en utilisant des photons UV ou des rayons cosmiques. Ces derniers sont très étudiés en laboratoire, permettant de comprendre comment des molécules simples peuvent mener à la formation de COMs lourdes (Gredel et al. 1989; Shen et al. 2004) et seront présentés dans cette thèse comme les acteurs d'un des mécanismes de désorption les plus importants.

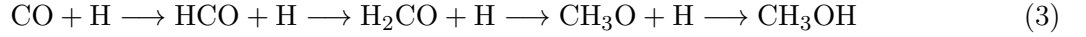
Mais plus important encore, des COMs dans le gaz ont été détectées dans de récentes études de coeurs denses (Bacmann et al. 2012; Öberg et al. 2010). Leur voie de formation n'est pas un problème puisqu'on peut les reproduire en laboratoire, mais plutôt comment ces molécules se retrouvent dans le gaz malgré le manque évident de chauffage qui ne permet pas la désorption thermique. Les mécanismes de désorption non-thermiques ont donc été étudié en profondeur, avec les principaux étant la photodésorption (Bertin et al. 2016), la désorption chimique (Dulieu et al. 2013), le chauffage stochastique par rayons cosmiques (Hasegawa & Herbst 1993a) et l'érosion par les rayons cosmiques (Leger et al. 1985). Ces mécanismes sont difficilement contraints et mènent très souvent à la fragmentation des molécules désorbées, n'expliquant toujours pas les abondances observées dans les coeurs denses.

Afin de comprendre les formations et la désorption des molécules à la surface des grains dans les environnements extrêmes, les astrochimistes emploient des modèles. Les premiers modèles théoriques a avoir réussi à expliquer la présence et les abondances des premières molécules observées ont été développés par Bates & Spitzer (1951); Watson & Salpeter (1972); Herbst & Klemperer (1973); Watson (1974) et ont par la suite été significativement améliorés. Les modèles chimiques qui vont nous intéresser ici sont les modèles permettant de simuler les réactions gaz-grain à des degrés variables de complexité (Tielens & Hagen 1982; Hasegawa & Herbst 1993b; Garrod 2013; Ruaud et al. 2016). Ces modèles utilisent une approche permettant de reproduire d'immenses réseaux de réactions chimiques, en utilisant les équations de taux de réactions ("*rate equations*") pour la chimie du gaz, et en parallèle, la chimie du grain. Les espèces chimiques sont décrites par plusieurs équations différentielles couplées à des conditions physiques fixes pour des temps d'évolution donnés, et les abondances chimiques sont "moyennées" sur la population entière de grains.

1.4.3 Le méthanol

Cette thèse se concentre sur la molécule de méthanol, CH_3OH . Cette molécule particulière est l'une des COMs les plus simples et fait également partie de cette famille de molécules ne pouvant être formées que sur les grains. À partir d'observations, de calculs théoriques et d'expériences de

laboratoire, il a été accepté que le méthanol était formé à la surface des grains en suivant une route d'hydrogénation de la glace de CO (dominante après le “catastrophic CO freeze-out”), par des ajouts successifs d'hydrogènes (Tielens & Hagen 1982; Watanabe & Kouchi 2002; Cuppen et al. 2011; Boogert et al. 2015; Chuang et al. 2016) tel que :



Une autre possible voie de formation du méthanol est la photolyse de glaces simples, malgré une efficacité bien moindre en comparaison à l'hydrogénation (Schutte et al. 1999; Whittet et al. 2007). Il est également possible de former du méthanol par radiolyse, dans des mélanges similaires à ceux étudiés en photolyse UV, avec des taux de formation de méthanol de quelques pour-cents Hudson & Moore (1999); Minissale et al. (2016). Qasim et al. (2018) a récemment montré qu'une possible formation de la molécule pourrait se faire dans des glaces riches en eau, avec une chaîne de réactions de surfaces $\text{CH}_4 + \text{OH} \longrightarrow \text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O}$ et $\text{CH}_3 + \text{OH} \longrightarrow \text{CH}_3\text{OH}$, privilégiant l'effet de tunnel quantique. Le taux de formation est cependant 20 fois inférieur à la voie d'hydrogénation. Aujourd'hui, les abondances de méthanol modélisées prennent en compte la faible volatilité de l'espèce mais pas son possible fractionnement (ie, se séparant en plusieurs composés chimiques plus petits), lors d'évènements thermiques que la molécule pourrait subir.

Le méthanol est observé dans les régions à forte densité mais il ne semble pas y avoir de corrélation entre la quantité de CO dans un nuage et la quantité de méthanol formé, avec quelques lignes de visées qui présentent de faibles “upper limits” et d'autres, avec des conditions similaires, qui présentent de solides détections (Bottinelli et al. 2010; Whittet et al. 2011). La désorption non-thermique du méthanol pour comprendre ces différences a été étudié en laboratoire dans des études récentes et va servir de base aux hypothèses prises dans nos modèles chimiques :

Dulieu et al. (2013) et Minissale et al. (2016) ont étudié la désorption chimique de plusieurs molécules dans les glaces et ont essayé de contraindre les efficacités des espèces étudiées. Ce mécanisme est intéressant puisqu'il ne nécessite pas de sources extérieures (comme les UV ou rayons cosmiques) pour avoir lieu et permettrait d'expliquer la présence de COMs dans les régions à forte extinction UV. Les auteurs ont fait réagir le méthanol avec H et avec O ainsi que $\text{H}_2\text{CO} + \text{H} \longrightarrow \text{CH}_3\text{OH}$, permettant de libérer du méthanol intact dans le gaz sur plusieurs types de surfaces à 10 K. Ces réactions semblent donner une efficacité inférieure à 8% (avec une forte incertitude) des espèces désorbées depuis les surfaces. Les auteurs notent que lorsque la surface utilisée comme substrat est de l'eau, l'efficacité de désorption est réduite, ce qui est aussi observée dans les études de photodésorption.

Bertin et al. (2016) a étudié la photodésorption par rayons UV, en montrant que la composition des glaces est très importante pour les taux de désorption non-thermiques. L'étude a montré que la photodésorption du méthanol intact se situe entre 3×10^{-6} (CH_3OH mélangé à du CO) et 10^{-5} molécules/photons (glace pure de CH_3OH). Cette différence provient du fait que le méthanol pourrait peut-être désorber à cause d'une réaction de recombinaison dans les glaces, qui mènerait à la formation des radicaux $\text{CH}_3\text{O}/\text{CH}_2\text{OH}$. Ce qui laisserait entendre que la photodésorption du méthanol serait moins efficace dans des glaces mélangées, comme ce serait le cas dans les coeurs denses. L'étude montre que les photons interagissant avec la glace pure ou mélangée mène à la photodésorption de fragments (comme CH_3 , OH, ou $\text{CH}_3\text{O}/\text{CH}_2\text{OH}$), avec une efficacité aussi grande que celle du méthanol.

En parallèle, Dartois et al. (2020) ont étudié la désorption du méthanol dans des glaces de CO_2

irradiées à 10 K par des ions lourds rapides (simulant des rayons cosmiques). Les auteurs ont conclu qu'une large fraction des molécules intactes sont désorbées par l'érosion des rayons cosmiques à un taux proche de leurs expériences de laboratoire, soit environ un tiers du rapport méthanol/CO composant leurs glaces. Ce qui implique que lorsque le méthanol est piégé dans une glace de CO₂, environ 20% du méthanol intact est désorbé des glaces. En plus du méthanol, une large partie du CO₂ est soumis à des réactions de radiolyses et va éjecter des fragments (principalement de CO). Cela permet de conclure que l'érosion par les rayons cosmiques semble être le mécanisme dominant dans la désorption non-thermique du méthanol.

Les différents mécanismes de désorption non-thermiques et leur impact dans les modèles chimiques seront traités de manière extensive dans la Section 2.5.3.

1.5 Plan de la thèse

L'objectif de cette thèse est d'étudier les mécanismes de désorption non-thermique intervenant dans les cœurs denses, en particulier pour le méthanol. Cette molécule est observée dans le gaz, or elle est formée exclusivement sur les grains dans ces régions froides. En se basant sur les observations de gaz et de glace, nous allons essayer de contraindre l'efficacité des processus en jeu en utilisant des modèles chimiques. L'étude présentée ici est une préparation aux observations qu'effectuera le *James Webb Space Telescope*.

Cette thèse débute sur un premier chapitre, où je présenterai les méthodes d'observations, télescopes et satellites utilisés pour ces travaux, avec les méthodes numériques développées pour obtenir les abondances des molécules observées en radio, puis du modèle chimique employé pour interpréter ces résultats. Dans un deuxième chapitre, je détaillerai le contenu de mon premier article sur le cœur dense L429-C, des observations aux modèles chimiques obtenus et de l'étude de la désorption non-thermique du méthanol. Le troisième chapitre est le travail en cours sur le cœur dense L694, traité avec la même méthode que L429-C. Le quatrième chapitre présentera un outil que j'ai développé pour obtenir des spectres de glace synthétiques basé sur l'instrumentation du *James Webb Space Telescope*. Enfin, je terminerai par les perspectives de cette thèse ainsi que ses conclusions générales.

2 | Méthodologie

2.1 Observations radio

La lumière est le messager de l'univers, voyageant depuis la nuit des temps. C'est notre meilleur observable pour comprendre ce qu'il se passe et s'est passé, dans notre galaxie proche comme dans les plus éloignées. Si le spectre de la lumière dit "visible" nous est le plus familier et nous reflète la beauté de l'espace, ce sont les parties "cachées" à l'oeil humain qui nous intéressent ici. Les différents domaines d'observation astronomique ont permis de mettre en lumière la complexité de l'univers. Selon la longueur d'onde observée, pour une même région, les photons nous révéleront des propriétés très différentes de la matière.

Bien que l'on puisse accéder à une large gamme de fréquences depuis la Terre, de nombreuses limitations physiques ont besoin d'être levées en envoyant des télescopes et satellites dans l'espace. L'atmosphère terrestre étant la principale barrière observationnelle, elle absorbe une partie des photons qui arrivent sur Terre. L'absorption est complète pour les rayons gamma, X, UV et les ondes radio à grande longueur d'onde. En infrarouge, seulement quelques fenêtres de fréquence sont observable.

Les fréquences que nous aborderons pour ce travail, utilisées pour les observations présentes dans cette thèse, sont les ondes millimétriques et l'infrarouge.

2.1.1 Radioastronomie

L'évolution de la radioastronomie a connu un bond important technologiquement après la deuxième guerre mondiale. Les instruments qui furent utilisés pour l'espionnage, les radars, se sont tournés vers le ciel. D'importantes découvertes ont suivi, comme la détection de la raie d'hydrogène atomique neutre (par Ewen et Purcell en 1952) à la longueur d'onde de "21 cm" lorsque son électron change de spin ou encore la découverte du premier pulsar par Jocelyn Bell en 1967.

Aujourd'hui, les ondes radios (en sub-millimétrique) sont utilisées pour sonder la présence des molécules et l'émission des grains de poussières dans l'ISM froid ($T < 100$ K) mais également par exemple, à mesurer le rayonnement cosmologique (à 2.7 K). Ce sont les longueurs d'ondes idéales pour observer la formation des étoiles dans les phases précoces, des nuages de gaz aux proto-étoiles, car les seules transitions détectables à de telle températures sont les transitions rotationnelles.

De plus, ces transitions sont facilement détectables pour de nombreuses molécules simples dans le gaz (CO, CS, SO...), associées à une fréquence particulière. Chaque molécule possède un nombre discret d'états rotationnels, correspondant chacun à la transition entre deux niveaux d'énergies décrit par le nombre quantique de rotation J . Ce changement d'état est possible lorsque la molécule est excitée, où l'énergie reçue par l'excitation va être ré-émise sous forme de rayonnement, en retombant à un niveau d'énergie inférieure. Par exemple, la transition fondamentale est notée : $J = 1 - 0$, correspondant à la transition du niveau d'énergie excité 1 au niveau fondamental 0. Cette transition correspond à une énergie particulière intrinsèque à la molécule, équivalente à une fréquence. Les raies observées ont généralement une forme Gaussienne mais peuvent être déformées par de nombreux paramètres physiques. Elles ont une intensité propre qui se mesure par la hauteur de la Gaussienne, une fréquence centrale et une largeur à mi-hauteur (FWHM). La FWHM et l'intensité sont liées à

l'agitation thermique et la dynamique du gaz, la quantité de l'espèce observée mais également de la température du milieu émetteur.

Plus la température du milieu augmente, plus les transitions détectables seront associées à de hautes énergies. Ces hautes énergies permettent également la détection de nouvelles formes de transitions : certaines transitions vibrationnelles (qui nécessitent des télescopes infrarouges pour être détectées). Le domaine radio est très large et ces différents milieux peuvent être sondés selon la fréquence utilisée par un télescope. Les longueurs d'ondes correspondantes au domaine radio sont comprises entre 1 et 10 mm (60 à 300 GHz) pour les ondes “millimétriques” des milieux froids, entre 0.3 et 1 mm (> 300 GHz) pour les ondes “submillimétriques” en général des milieux plus chauds.

L'un des principaux avantages de cette méthode d'observation est sa capacité d'observer de jour comme de nuit, mais également d'être moins affecté par l'atmosphère en comparaison aux autres méthodes d'observations. Même si l'atmosphère terrestre reste assez transparente aux ondes radio, la vapeur d'eau, le dioxygène et l'ozone peuvent interférer avec le signal qui traverse ces différents milieux. Pendant les observations, la quantité de vapeur d'eau précipitable est mesurée pour déterminer la qualité du signal, pouvant induire des effets indésirables de réfractions au sein du télescope. Observer en hiver, en altitude et à des endroits secs est un bon remède pour échapper au mieux à ces molécules, d'où la présence de ces gigantesques antennes aux sommets du monde.

Les détails techniques de la radioastronomie ne seront pas traités ici, mais un excellent livre couvrant en détails les méthodes utilisées (ainsi que les démonstrations mathématiques des principes) est “Tools for Radio Astronomy” (Wilson et al. 2009). Nous allons cependant expliciter les méthodes utilisées pour cette thèse.

Il y a deux types d'observatoires radios, les antennes uniques (dites “*single dish*”) ou les réseaux d'antennes (dits “*array*”). Le principe de collecte du signal est cependant le même selon le type de radiotélescope : le réflecteur principal (très souvent parabolique mais aussi sphérique, plus grand que la longueur d'onde observée), réfléchit les ondes reçues vers un foyer qui renvoie les ondes vers le détecteur. Le détecteur traite ensuite le signal de manière électronique. La puissance reçue par l'antenne est maximale dans la direction de la source observée.

Les différences entre les antennes uniques et les réseaux d'antennes sont multiples. Les antennes simples peuvent présenter une plus grande passante (nombre de canaux) et une meilleure résolution spectrale. Pour le 30m de l'IRAM, la résolution spatiale est limitée à 30" à 80 GHz et 22" à 115 GHz, mais cette résolution est largement suffisante pour étudier les cœurs denses et l'émission étendue en général. Là où les réseaux d'antennes vont avoir une résolution spatiale bien plus petite, ne traçant pas l'émission étendue, mais qui permet de tracer les sous-structures : NOEMA peut faire varier sa résolution spatiale de 3 à 6" selon la configuration des antennes.

L'enregistrement des données une fois collectées se fait sous forme de “cube de données” à 3 dimensions : x et y pour les coordonnées physiques d'un objet et un axe z qui correspond à la longueur d'onde de propagation dans le milieu sondé. En effet, lorsqu'une antenne pointe vers un objet, elle sonde toute la matière qui se trouve entre l'objet ciblé et le télescope. C'est ce qu'on appelle ligne-de-visée (qui sera ensuite abrégée “LDV”). Il est donc important de garder en tête que plusieurs objets peuvent être rencontrés sur une même LDV. De là émerge une difficulté majeure : il n'est pas possible de connaître la position physique des objets sondés, seulement la fréquence à laquelle ils émettent et à quelle vitesse systémique (V_{LSR}) ils s'approchent ou s'éloignent de nous. S'ajoute donc la possibilité d'un milieu à absorber les photons émis par des objets se trouvant derrière. On peut alors caractériser un milieu par son épaisseur optique τ , dépendant de son épaisseur Δs et de

son coefficient d'absorption massique κ tel que :

$$\Delta\tau \propto \kappa\Delta s \quad (4)$$

On dit d'un milieu qu'il est optiquement mince si $\tau < 1$ et épais si $\tau > 1$.

Mais nous considérerons plutôt la propriété suivante : l'opacité des raies observées. En effet, comme énoncé précédemment, chaque raie est définie par une fréquence précise. Les photons émis peuvent être absorbés par le milieu qu'ils traversent selon leur longueur d'onde. Ainsi, certaines raies d'une même molécule peuvent être optiquement mince alors qu'une raie à différente énergie peut être complètement opaque sur une même LDV.

On peut coupler cette caractéristique à l'effet Doppler. Il est possible de se renseigner sur la dynamique d'un objet interstellaire grâce au profil des spectres mesurés. Si l'on s'attend en théorie à un spectre de type Lorentzien pour des transitions rotationnelles (et ro-vibrationnelles à plus haute température), l'effet Doppler va leur donner une apparence Gaussienne et provoquer un élargissement, dû aux distributions de vitesse. Un effet d'élargissement des raies est aussi causé par les conditions thermiques d'une source, du fait de la loi de distribution des vitesses de Maxwell, dont les profils de raies sont Gaussien et dépendant de la température. Comme plusieurs couches de molécules se succèdent, elles peuvent former des gradients de température qui affectent donc leur profil de raie. La pratique nous révèle des spectres bien plus complexes, dont la cause peut également venir des mouvements internes des nuages, comme par exemple :

1. **Turbulence** : La turbulence correspond à des mouvements aléatoires irréguliers, dont l'origine peut provenir de mouvements internes à grande échelle induits par des vents stellaires, supernovae et autres mécanismes pouvant perturber l'ISM (Arons & Max 1975; McKee & Ostriker 2007) et peut causer des effets magnéto-hydrodynamiques. Cette turbulence se propage à toutes les échelles de l'ISM. Une étude des raies spectrales peut permettre d'identifier de la turbulence, avec les largeurs de raie des spectres pouvant varier dans un même nuage.
2. **Rotation** : Des gaz peuvent se trouver en rotation autour d'un coeur dense et il est possible d'identifier ces mouvements grâce aux gradients de vitesse. Pour une raie optiquement mince, une variation systématique de la position de la vitesse centrale v_{lsr} dans des profils de raie symétriques peut indiquer un gradient de vitesse dans le gaz. Si ce gradient est symétrique par rapport à une vitesse moyenne et une position, alors il peut être attribué à de la rotation (Di Francesco et al. 2001; Myers 2005). L'utilisation d'un diagramme "Position-vitesse" (PV) peut permettre de détecter ce gradient de vitesse, en plus de l'analyse des raies spectrales.
3. **Effondrement gravitationnel** : les coeurs denses en effondrement vont présenter des composantes multiples, dues aux mouvements vers l'intérieur du nuage. La signature spectrale d'un effondrement s'appelle "l'asymétrie d'effondrement" ("*infalling asymetry*") et est observable si le gaz tombant vers la source a une température d'excitation plus basse que le gaz de fond (Lucas 1976; Leung & Brown 1977; Myers et al. 2000; Myers 2005). Si ces conditions sont réunies, les raies optiquement épaisses présenteront une signature d'effondrement se traduisant par un profil double piqué et les raies optiquement minces par un profil simple piqué, avec une composante bleue légèrement asymétrique (Masunaga & Inutsuka 2000). Selon le champ en vitesse, ce profil de raie peut varier.
4. **Jets et Outflows** : Les jets sont de la matière éjectée par le coeur, à des vitesses > 100 km.⁻¹, pouvant entraîner une déformation de la cavité du coeur, venant vers ou s'éloignant



FIGURE 5 – Antenne 30m de l’IRAM, au Pico Veleta en Espagne. Avec ses 800 tonnes, l’antenne peut opérer 24 heures sur 24, tous les jours de l’année. Plus de 250 astronomes viennent chaque année utiliser le télescope pour leurs projets scientifiques. Crédits : K. Zacher

de l’observateur, pouvant être observée dans les spectres de raie. Un moyen d’identifier les jets sont d’utiliser un profil de raie dit “P Cygni” : lorsqu’une couche de gaz s’étend ou qu’un vent fort permet de souffler de la matière hors de l’étoile, une asymétrie dans le spectre se crée. Si la matière vient vers l’observateur depuis l’étoile ou le cœur, cela produit une absorption à une vitesse qui est “*blue-shifted*” par rapport à la vitesse centrale. L’autre partie de la couche de gaz produit un spectre simple d’émission. Si la matière tombe vers le cœur (dans le cas d’un effondrement par exemple, la composante d’absorption est “*red-shifted*” par rapport à la vitesse centrale (on appelle ce cas un profil “*inverse P Cygni*”) (Myers et al. 2000; Pineda et al. 2012). Les jets peuvent aussi être identifiés en utilisant des traceurs spécifiques dans le gaz (Bachiller & Pérez Gutiérrez 1997; Motte et al. 2007).

Afin de sonder toutes ces propriétés, il faut utiliser plusieurs fréquences mais également choisir quel type d’antenne on veut utiliser. Ces configurations, avec une ou plusieurs antennes, ont des propriétés très différentes et ne révéleront pas les mêmes structures sur une même région. Ces deux techniques peuvent cependant être combinées afin de comprendre la géométrie d’un objet et sa structure en vitesse décrivant le mouvement des molécules à l’intérieur. Pour les sources étendues, il est préférable d’utiliser les antennes uniques, qui ne peuvent pas résoudre de sous-structures comme un cœur en train de s’effondrer ou des filaments dans les disques protoplanétaires. Au contraire, les interféromètres vont permettre de sonder les structures plus complexes car capables d’une résolution spatiale plus fine. Cette dernière propriété est donc la principale différence de ces deux types d’observatoire. Ce paramètre sera détaillé dans les deux sous-parties suivantes.

2.1.2 Observations avec l'IRAM 30m - Antenne unique

Comme les cibles de cette thèse sont des nuages pré-stellaires, l'émission moléculaire est plus proche du nuage diffus que d'un système proto-stellaire avec une véritable structure. Le choix s'est donc porté sur l'utilisation d'une *single dish* pour les deux sources observées.

Dans le cas d'une antenne unique, sa caractéristique principale est sa résolution angulaire, c'est-à-dire sa capacité à séparer deux objets à une même distance. C'est ce que l'on appelle le lobe du télescope. Pour une antenne unique, la résolution angulaire θ est déterminée par la formule :

$$\theta = 1.22 \frac{\lambda}{D} \quad (5)$$

Où λ est la longueur d'onde observée et D le diamètre de l'antenne. Afin d'obtenir une meilleure résolution angulaire, on peut diminuer la longueur d'onde observée, mais comme expliqué précédemment, l'étude de certains objets ne peut être faite que dans certains domaines très précis. La taille de l'antenne va donc jouer un rôle important : plus le diamètre sera élevé, meilleure sera la résolution angulaire. Cependant, les limitations techniques deviennent plus importantes en augmentant la taille de l'antenne : il faut une surface uniforme dans tout le réflecteur, une monture plus forte pour soulever l'antenne et la maintenir immobile contre les éléments, etc.

Afin d'observer les deux sources présentées dans cette thèse, nous avons utilisé le radiotélescope 30 mètres de l'IRAM (visible sur la Figure 2.1.2, situé à plus de 2 800 mètres d'altitude au Pico Veleta dans la Sierra Nevada espagnole (Greve et al. 1996, 1998, pour le fonctionnement complet du télescope). Comme son nom l'indique, il est composé d'une antenne unique de 30 mètres de diamètre et peut sonder les longueurs d'onde millimétriques. Les deux sources observées se trouvant dans des milieux extrêmement froids, le 30m était l'instrument idéal pour déterminer la composition de la phase gazeuse dans ces nuages. Ces observations visaient en particulier CH₃OH ainsi que CO, ses isotopologues et enfin H₂S (dans le cas de L429-C). Pour les deux sources, nous avons utilisé le récepteur spectral EMIR (Eight MIXer Receiver) (Carter et al. 2012) qui permet d'opérer dans les bandes de fréquence 73 - 117 GHz (E090), 125 - 184 GHz (E150), 202 - 274 GHz (E230) et 277 - 350 GHz (E330). Les fréquences observées, tailles des cartes et autres paramètres des observations seront décrits en détails dans les sections dédiées.

Dans les deux sources, la réduction de donnée a été effectuée avec le logiciel Gildas et son package CLASS¹. Afin d'identifier les différentes raies observées, nous avons utilisé la Cologne Database for Molecular Spectroscopy² (CDMS, Müller et al. 2001) ainsi que le Jet Propulsion Laboratory catalog³.

2.1.3 Observations avec NOEMA - Interféromètre

La taille des antennes étant une limitation majeure, les astronomes ont trouvé un moyen de contourner le problème grâce aux interféromètres. Le principe de ces observatoires reprend le concept des fentes de Young. Au XIX^e siècle, le physicien Thomas Young démontre une des propriétés fondamentales de la lumière : sa nature ondulatoire. En dirigeant deux faisceaux de lumière cohérent (de même fréquence) d'une même source vers des fentes, un motif de diffraction va être observé, alternant franges sombres et franges lumineuses. Les deux ondes interagissent avec elles-mêmes et

1. <http://www.iram.fr/IRAMFR/GILDAS>
 2. <https://cdms.astro.uni-koeln.de/classic/>
 3. <https://spec.jpl.nasa.gov>

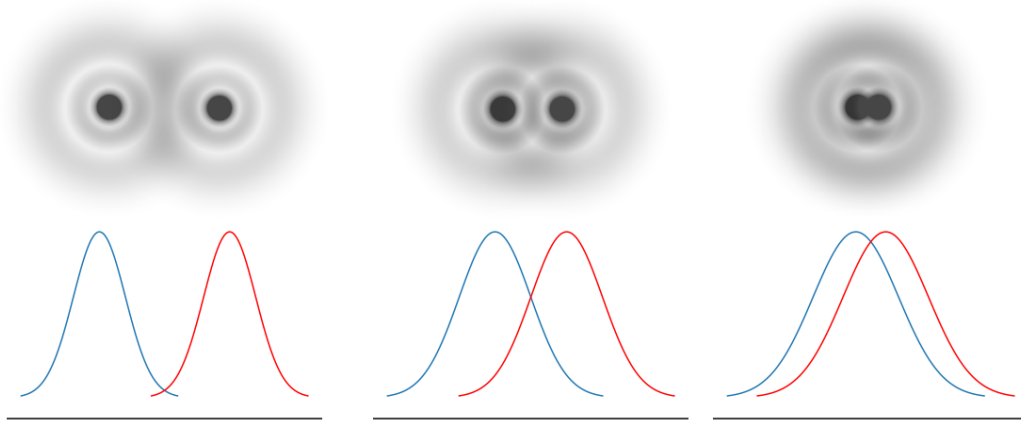


FIGURE 6 – Illustration du principe d’interférométrie par les taches d’Airy. De gauche à droite, on perd le pouvoir de résolution des deux taches mais on gagne en intensité de signal.

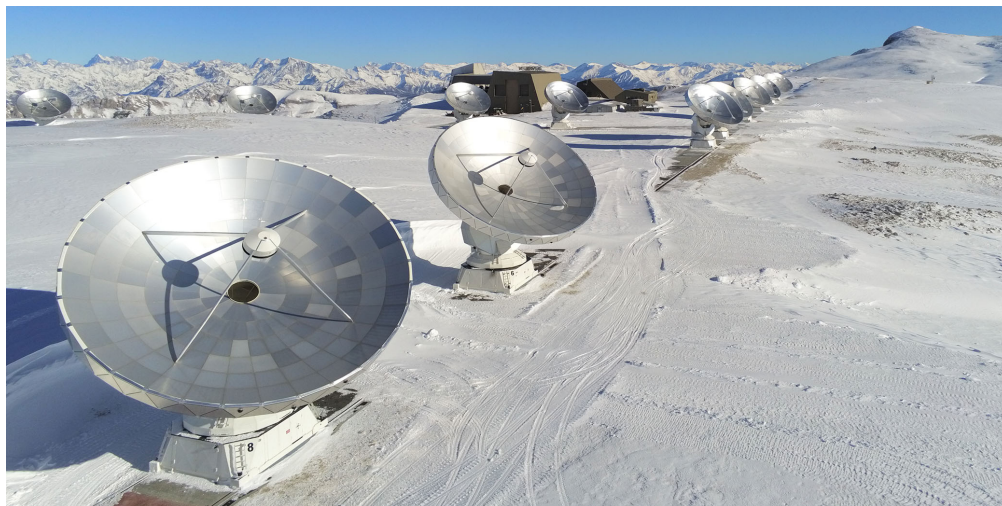


FIGURE 7 – Le champ d’antennes qui constitue NOEMA, avec 12 antennes de 15 m de diamètre et 125 tonnes, à 2550 m d’altitude sur le Plateau de Bure. Comme le 30m, NOEMA peut fonctionner de jour comme de nuit et tourne en permanence toute l’année, avec une petite équipe d’astronomes et techniciens pour veiller au bon fonctionnement des antennes et leur sécurité. Crédits : IRAM

s'additionner si elles sont en phases ou s'annuler dans le cas contraire. Plus tard, cette expérience montrera également que la manière d'observer influe sur le résultat obtenu, montrant que la lumière n'est pas seulement ondulatoire, mais peut aussi être corpusculaire.

Les interféromètres radio utilisent un principe similaire pour observer le ciel. Plusieurs antennes sont espacées d'un écart variable (baseline) entre chacune, prenant en compte la rotation de la Terre. Elles sont ensuite toutes dirigées vers la même source et les différents signaux sont combinés à un corrélateur. Ce dernier permet de résoudre des structures très fines avec une très forte résolution spatiale. La distance entre chaque antenne, combinée aux nombres d'antennes, permet de simuler une antenne unique synthétique de plusieurs centaines de mètres de diamètre. La résolution angulaire peut être modifiée en déplaçant les antennes. Certaines configurations peuvent alors résoudre des sources ponctuelles avec une résolution spatiale de 0.1 seconde d'arc (à 350 GHz pour NOEMA dans sa configuration la plus étendue).

L'interféromètre de l'IRAM, NOEMA (voir Figure 2.1.3), se trouve au plateau de Bures à 2500 m d'altitude, dans les Alpes Françaises. Il est composé de 12 antennes de 15 m de diamètre. C'est l'équivalent d'une antenne unique de 1.7 km de diamètre, atteignant une très forte sensibilité et résolution. Il peut sonder les fréquences comprises entre 80 et 370 GHz. Dans le cadre de ma thèse, NOEMA a été utilisé pour cibler L429-C, afin de comprendre sa possible structure interne, en s'attendant à trouver un cœur dense évolué ou sur le point de s'effondrer.

2.2 **Astronomie infrarouge**

Afin d'observer les glaces dans le milieu interstellaire, il faut utiliser l'astronomie infrarouge (IR) qui permet le mieux d'observer les basses températures. Les longueurs d'ondes concernées sont comprises entre 0.75 et 300 micromètres. L'astronomie IR a commencé dans les années 1830, après la découverte de la lumière infrarouge par William Herschel en 1800. Les progrès sur ce domaine furent fait au XX^e siècle, quand la technologie le permit enfin. C'est en suivant les découvertes faites avec l'astronomie radio que les astronomes comprirent l'étendue invisible du spectre de la lumière. Il faudra attendre les années 50 pour la construction des premiers détecteurs IR. Mais sur Terre, l'atmosphère absorbe une grande partie des rayons IR et ne permet pas d'étudier correctement les phénomènes associés dans l'espace. C'est en 1983 que le premier télescope spatial IR, *IRAS*, décolle pour faire une étude complète du ciel. Ont ensuite suivi plusieurs autres télescopes spatiaux dont *Spitzer* en 2003 ou *Herschel* en 2009. Les découvertes associées furent majeures : *Spitzer* permit d'observer la formation des planètes pour la première fois dans les disques protoplanétaires et *Herschel* de mettre en lumière les structures gigantesques et très complexes de la poussière interstellaire. Sur Terre, les télescopes optiques peuvent accéder aux ondes IR mais sont limités par l'impact de l'atmosphère : c'est ainsi que le NASA Infrared Telescope Facility (IRFT) fut bâti au sommet du Mauna Kea à Hawai'i pour contourner les effets atmosphériques. Enfin, le *James Webb Space Telescope* décolla en décembre 2021 avec un détecteur IR pour observer les glaces interstellaires avec une résolution inédite.

2.2.1 **Herschel**

Pour établir les cartes d'abondance moléculaire des molécules observées par le 30m, il nous a fallu estimer la température du gaz et la densité de colonne totale du gaz N_{H_2} . Pour se faire, nous avons utilisé les données collectées par le télescope spatial *Herschel*. *Herschel* possède un miroir primaire de 3.5 m et peut observer dans le domaine sub-millimétrique de 60 à 670 microns. Il est équipé

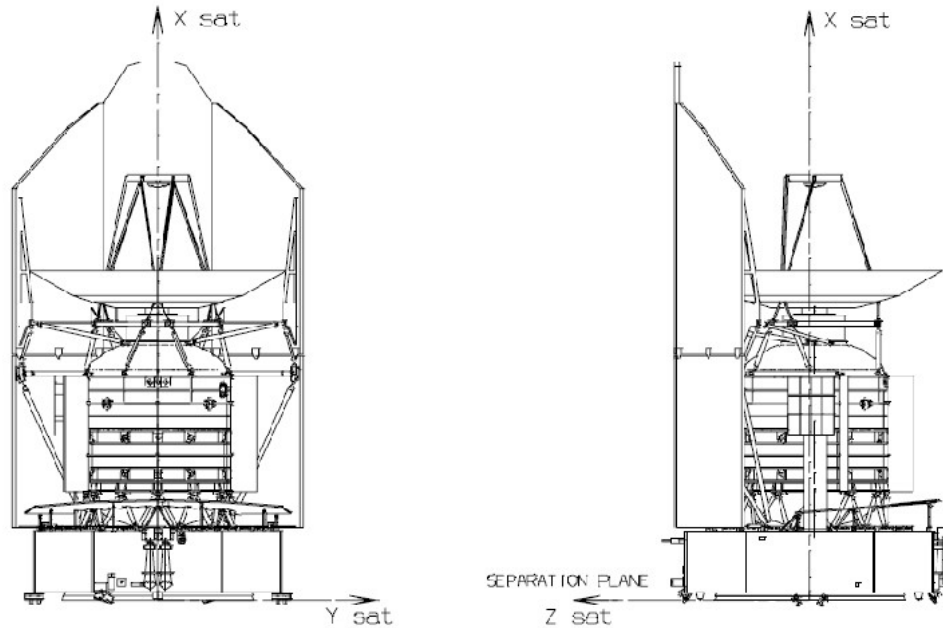


FIGURE 8 – Plans d’Herschel, l’axe X est l’axe optique du télescope, qui est tourné vers la cible à observer. Les axes X et Z forment un plan perpendiculaire qui fait face au Soleil, protégeant le télescope et récoltant les photons dans les panneaux solaires. Crédits : ESA

de 3 instruments, deux caméras pour de la spectroscopie d’imagerie (PACS et SPIRE) ainsi qu’un spectromètre à haute résolution (HIFI). Afin d’observer les rayonnements les plus froids, le télescope doit refroidir ses instruments en conséquence avec de l’hélium liquide et peut ainsi accéder à plusieurs canaux d’observations. Ce télescope est capable de détecter la lumière émise par la poussière en IR : en effet la poussière interstellaire absorbe grandement la lumière visible et la ré-émet en IR : même si le gaz et la poussière ne sont pas exactement aux mêmes températures, l’ordre de grandeur est proche et l’approximation $T_{\text{gaz}} = T_{\text{dust}}$ à haute densité ($> 10^5 \text{ cm}^{-3}$) simplifie grandement les calculs quand l’information sur la température du gaz n’est pas disponible (nous aborderons d’autres méthodes de détermination de la température dans ce chapitre). La température du gaz pourrait être obtenue en utilisant certaines raies de molécules spécifiques (CH_3CN , CH_3CCH ...), mais dans le cadre de cette thèse, nous n’avons pas effectué d’observation à leurs fréquences. *Herschel* a permis de réaliser une grande étude du ciel et de nombreuses zones de formation stellaire ont ainsi été cartographiées par le satellite et ces données ont été utilisées dans l’étude de cette thèse.

Pour L429-C, nous avons utilisé les données de [Sadavoy et al. \(2018\)](#). Les auteurs ont extrait de la base de données Herschel⁴, des données PACS (160 μm) et SPIRE (250, 350 and 500 μm). Ils ont également utilisé les données du télescope spatial *Planck* à la fréquence de 353 GHz afin d’obtenir les paramètres physiques servant à calculer un modèle de corps noir modifié, dont l’épaisseur optique τ_{353} à 353 GHz. Le modèle de corps noir modifié est obtenu à partir d’un modèle de corps noir “simple”. Ce dernier décrit le profil de rayonnement électromagnétique (et thermique) émis par un corps absorbant parfaitement la chaleur. Le rayonnement peut se traduire par un spectre d’intensité

4. <http://archives.esac.esa.int/hsa/whsa/>

spécifique dépendant de la température. Dans le cas des profils observés pour la SED, un modèle simple de corps noir pour une température de poussière fixée n'est plus suffisant, les auteurs ont donc utilisé un modèle de corps noir modifié afin d'ajuster la SED. L'ajustement permet donc d'obtenir indirectement la température de poussière via le meilleur ajustement possible d'une série de modèles de corps noirs modifiés à diverses températures. Une fois les paramètres décrivant le modèle acquis, les auteurs ont déduit la SED sur plus de 50 globules. Une fois la SED extraite, les auteurs ont essayé d'en déduire le profil de rayonnement. À partir du modèle trouvé et l'ajustement effectué pour chaque SED à chaque pixel, ils peuvent dériver les cartes de températures de poussière :

$$S_\nu = B_\nu(T)(1 - \exp(-\tau_\nu))\Omega \quad (\text{pour } \tau \ll 1) \quad (6)$$

Avec S_ν le flux par lobe, B_ν le rayonnement du corps noir pour une température unique de poussière T (déterminée via l'ajustement à la SED), τ_ν l'épaisseur optique et Ω l'angle solide d'observation. Les auteurs prennent l'hypothèse que l'épaisseur optique devient une loi de puissance dans les longueurs d'onde IR telle que : $\tau_\nu \sim \nu^\beta$ avec β l'indice de réfractivité de la poussière. Comme cet indice est peu connu, il est souvent arrondi aux valeurs trouvées par les modèles de *Planck* qui mesurent la température globale de la poussière dans les grands et petits nuages, tel que $\beta \sim 1.8$ (Planck Collaboration et al. 2011). Enfin, en utilisant les données d'épaisseur optique fournies par *Planck*, ils en déduisent l'épaisseur optique de la poussière :

$$\tau_\nu = \tau_{353} \left(\frac{\nu}{353\text{GHz}} \right)^\beta \quad (7)$$

Avec cette méthode, Sadavoy et al. (2018) a pu obtenir les cartes de température et d'épaisseur optique de L429-C qui seront décrites dans la Section 2.4.4.

2.2.2 Observations d'absorption IR devant des étoiles de fond

Malgré leurs longueurs d'ondes observées proches, les observations effectuées par *Herschel* diffèrent de celles du JWST. Là où *Herschel* étudie le continuum émis par la poussière et en conséquence, peut en déduire les propriétés physiques de cette dernière, JWST permet d'étudier les spectres d'absorption des poussières par une étoile se trouvant derrière cette poussière (appelée étoile de fond). Des objets assez lumineux de type YSO (*Young Stellar Object*) peuvent aussi être utilisés avec cette méthode. On observe l'émission des grains de poussière nus et des silicates dans les régions très chaudes comme les enveloppes d'étoiles évoluées. Mais pour les milieux froids dans lesquels les glaces se forment, on utilise les observations par absorption devant une source de fond. Grossièrement, les étoiles de fond agissent comme un projecteur et les instruments reçoivent l'ombre projetée par la poussière se trouvant sur la LDV du télescope. Le signal reçu par les instruments permet alors d'accéder à certains paramètres physiques de l'étoile mais également les propriétés chimiques de la poussière, notamment les espèces qui s'y trouvent en surface. Le spectre total obtenu est donc la combinaison d'un spectre d'absorption de l'étoile de fond et du spectre d'absorption des glaces sur les poussières :

1. Le spectre d'une étoile est la superposition d'un spectre d'émission d'origine thermique, qui s'apparente à un modèle de corps noir associé à une certaine température, et de raies d'absorption provoquées par la photosphère de l'étoile. Ces spectres ont des propriétés bien distinctes : une luminosité, une température de surface (la température effective T_{eff}), une métallicité et un facteur de gravitation de surface (simplifié $\log(g)$)... Ces propriétés combinées permettent

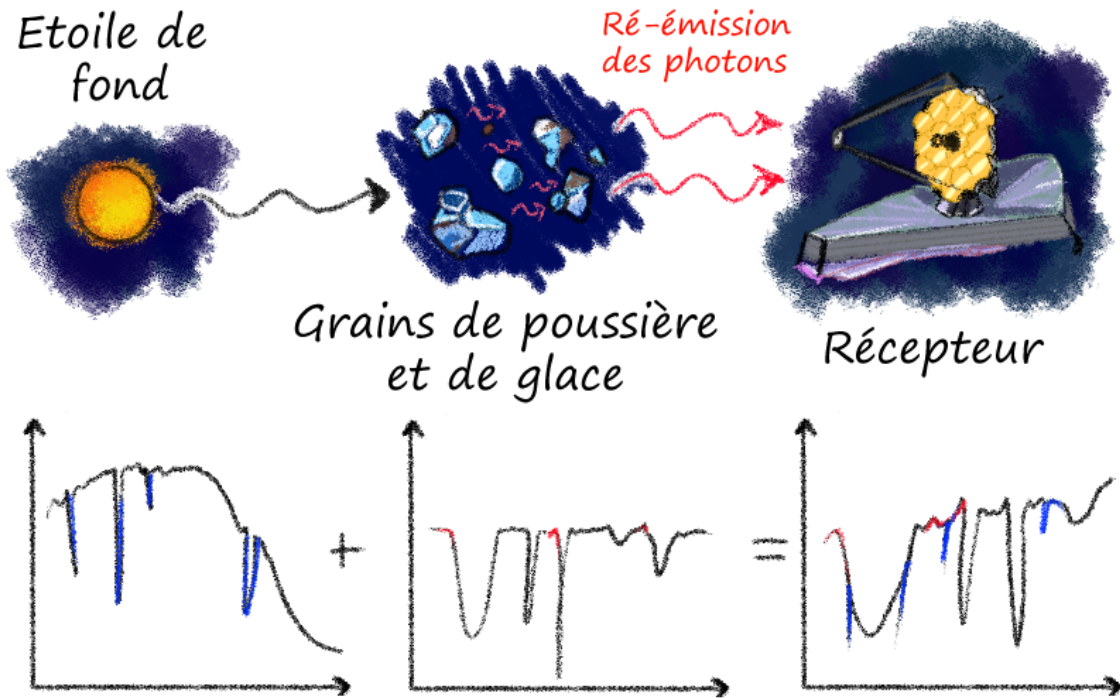


FIGURE 9 – Schématiquement, l’observation par étoile de fond permet d’observer les espèces chimiques présentes sur les grains de poussière, trop petits pour être observés directement. Le spectre de l’étoile de fond (avec certaines absorptions intrinsèques à ce spectre, repassées en bleu) va se superposer sur le spectre des grains de poussière (avec certains éléments propres à la structure des grains en rouge) afin de former le spectre final, reçu par le télescope (les éléments rouges et bleus sont superposés sur le spectre final).

de caractériser la photosphère de l’étoile et selon la classe spectrale de l’étoile, les lignes d’absorption photosphériques vont différer.

2. Les spectres d’absorption de poussière sont un peu différents des spectres d’émissions des molécules dans le gaz. Ces dernières sont le produit de transitions rotationnelles (et ro-vibrationnelles à plus haute température) qui sont un nombre discret pour chaque atome ou molécule associé(e) à une fréquence. Ici, on sonde les états vibrationnels des molécules, qui se présentent comme des transitions très larges. La différence majeure avec les raies rotationnelles et ro-vibrationnelles sont les longueurs d’onde sur lesquelles on les observe. Le spectre présente également certaines caractéristiques propres aux grains, comme leur nature ou leur géométrie, qui compliquent la ligne de base. On observe la présence des silicates puisque les molécules les composant vibrent également. Deux bandes d’absorption sont facilement identifiables : la bande à $10 \mu\text{m}$ correspondant à l’étirement de la liaison Si-O et la bande à $18 \mu\text{m}$ correspondant à la déformation angulaire de O-Si-O.

Cette combinaison de deux spectres est extrêmement complexe et le type de l’étoile n’est pas toujours connu avant l’observation, compliquant l’analyse. En effet, les raies photosphériques peuvent

se superposer sur des raies vibrationnelles plus faibles et ne pas permettre leur identification. En plus de cela peuvent s'ajouter le bruit et la superposition des bandes de plusieurs molécules. Il n'est pas non plus possible de prédire la position spatiale du grain de poussière observée, toute la LDV est sondée. C'est un problème lorsque l'on observe des disques protoplanétaires par exemple, ne permettant pas de prédire exactement à quelle profondeur le télescope sonde.

Il y a cependant des méthodes d'inversion (Rocha et al. 2021) utilisant des spectres de laboratoire qui peuvent aider à l'interprétation de ces données, mais ne permettent pas avec certitude d'identifier les étoiles de fond et les différentes espèces se trouvant sur un seul et même spectre. En approche de centaines de LDV différentes, de nouveaux outils devront donc être développés en conséquence.

Plusieurs données provenant d'étoiles de fond ont été utilisées afin d'identifier les densités de colonne de glace de méthanol. Pour L429-C, les données utilisées proviennent de Boogert et al. (2011). Dans ce papier, les auteurs ont utilisé le télescope spatial *Spitzer* (5-20 μm) et des observations au sol avec le télescope Keck (McLean et al. 1998) (2-14 μm). Après identification des bandes de silicates, les auteurs ont essayé de soustraire les raies photosphériques de la poussière. Une fois l'étoile identifiée, le continuum d'extinction est soustrait, les bandes des molécules sont identifiées et la densité de colonne de ces dernières est mesurée.

2.2.3 Spitzer

Spitzer (Space Infrared Telescope Facility) est un télescope spatial infrarouge lancé en 2003. Il est équipé d'un télescope de 85 cm et plusieurs instruments : IRAC, une caméra en infrarouge moyen (3.6 - 5.5 μm) ; IRS, un spectrographe mesurant le rayonnement entre 5 à 38 μm et MIPS, une caméra imageur sur l'infrarouge lointain (24 à 160 μm). Dans le cadre de cette thèse, les données de Boogert et al. (2011) mesurées par *Spitzer* (IRS) et Keck ont été utilisées pour déterminer les densités de colonne du méthanol sur 4 positions dans L429-C.

2.3 Transfert radiatif

Afin de déduire les abondances des molécules observées par le 30m de l'IRAM, nous avons développé un code d'inversion de transfert de rayonnement.

2.3.1 Principe fondamental

Le transfert radiatif décrit la propagation d'une radiation au travers d'un milieu (vide ou homogène) et la manière dont elle interagit avec. Plusieurs phénomènes peuvent avoir lieu en interagissant (émission ou absorption d'un photon) avec la matière et l'énergie du système va varier (diminuer ou augmenter). Afin de caractériser la quantité de transfert de radiation qui a lieu, il faut définir une grandeur, l'intensité I_ν , qui définit la quantité d'énergie, ou radiance, (à une fréquence ν) qui traverse perpendiculairement une surface dans une direction donnée. Dans le cas d'un rayon contenu dans un angle solide $d\omega$ qui traverse pendant un temps dt une surface $ds = da \cos \theta$ avec da la surface incidente et θ l'angle entre la droite perpendiculaire à la surface et le faisceau incident, dans un intervalle de fréquence $d\nu$, l'énergie du rayonnement est alors définie par :

$$dE_\nu = I_\nu * ds * d\nu * dt * d\omega * \cos\theta \quad (8)$$

Le faisceau va donc traverser un milieu et interagir avec. L'équation de transfert de la propagation de la radiation au travers de cette surface ds (Spitzer 1978; Draine 2011), en ignorant les effets de diffusion, se traduit par :

$$\frac{dI_\nu}{ds} = j_\nu - \alpha_\nu I_\nu \quad (9)$$

Où j_ν est le coefficient d'émission local, c'est-à-dire la quantité d'énergie émise à la fréquence ν , ds l'abscisse curviligne le long du chemin optique. α_ν est le coefficient d'extinction local, qui décrit la quantité d'énergie absorbée à la fréquence ν . Ces deux termes permettent de définir la fonction de source S_ν :

$$S_\nu = \frac{j_\nu}{\alpha_\nu} \quad (10)$$

La fonction de source est la quantité de photons qui est renouvelée quand ils passent au travers d'un milieu.

En définissant une nouvelle variable, l'épaisseur optique τ_ν , qui définit le taux d'absorption d'une radiation traversant un milieu absorbant. Ce taux dépend de la largeur du milieu traversé mais également des propriétés absorbantes du milieu et peut s'écrire :

$$\tau_\nu = \alpha_\nu ds \quad (11)$$

On dit d'un milieu qu'il est optiquement épais si $\tau_\nu > 1$, absorbant alors la plupart des photons émis. Si le milieu est extrêmement épais, l'émission observée correspondra à la dernière surface avant l'absorption complète. A l'inverse, un milieu est optiquement mince si $\tau_\nu < 1$ et permet aux photons de le traverser entièrement. L'équation 9 peut se réécrire telle que :

$$\frac{dI_\nu}{\alpha_\nu ds} = \frac{j_\nu}{\alpha_\nu} - I_\nu \quad (12)$$

Et en injectant les équations 10 et 11, on obtient :

$$\frac{dI_\nu}{d\tau_\nu} = S_\nu - I_\nu \quad (13)$$

En résolvant l'équation de transfert radiatif à partir des conditions de départ $\tau_\nu = 0$ et $I_\nu = I_\nu(0)$ pour avoir la solution générale :

$$I_\nu(\tau_\nu) = I_\nu(0) \exp(-\tau_\nu) + \int_0^{\tau_\nu} S_\nu e^{-(\tau_\nu - \tau')} d\tau' \quad (14)$$

Où I_ν est l'intensité en sortie du milieu vue par l'observateur et $I_\nu(0)$ est l'intensité de "fond" avant d'être atténuée par le milieu traversé, $\tau_\nu - \tau'$ l'épaisseur optique entre le point d'émission et le point où l'on calcule l'intensité.

2.3.2 Coefficient d'Einstein

L'équation de transfert radiatif permet de décrire la variation macroscopique de l'intensité spécifique du rayonnement. Cependant, des processus microscopiques se produisent lors de l'absorption et de l'émission. Pour décrire l'équation de transfert radiatif à ce niveau, il faut dériver des solutions

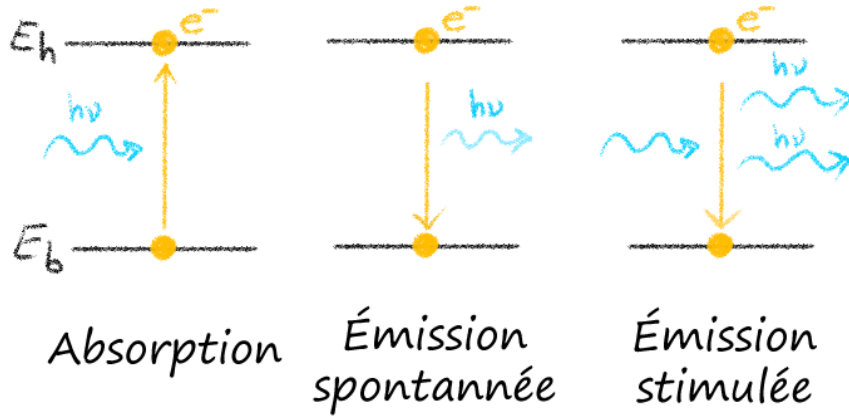


FIGURE 10 – Les trois processus de transitions radiatives entre deux niveaux d’énergie dégénérés. E_b et E_h sont respectivement le niveau d’énergie bas et le niveau d’énergie haut, avec $E_b < E_h$

selon les propriétés microscopiques locales qui sont affectées lors du passage de la radiation. Ces phénomènes quantiques peuvent être décrits grâce aux niveaux d’énergies, et selon leur nature, on leur définit un coefficient (dit “coefficient d’Einstein”).

Si l’on reprend notre notation précédente, nous avons deux niveaux d’énergie chacun potentiellement dégénérés, h (haut) et b (bas), séparés par une énergie ΔE . Ces transitions ne seront pas uniquement définies par une fréquence ν mais par un ensemble de fréquences voisines également, permettant d’introduire la notion de “profil de raie d’absorption” $\phi(\nu)$ et “profil de raie d’émission” $\chi(\nu)$. Les spectres de raie n’étant pas infiniment fine et peuvent être élargis par des effets physiques (comme l’effet Doppler) et ne peuvent en conséquence pas être considéré comme des Dirac. Nous avons donc 3 processus de transitions radiatives quantifiés (illustrés dans la Figure 10) :

1. L’émission spontanée : émission d’un photon d’énergie ΔE par transition entre le niveau h vers b sans influence externe. A cette émission est associée le coefficient d’Einstein A_{hb} , la probabilité que la transition se produise par unité de temps (s^{-1}).
2. L’émission stimulée : similaire à l’émission spontanée, ce phénomène décrit l’émission d’un photon par rayonnement électromagnétique par transition entre le niveau h vers b. Le photon émis est cohérent avec le rayonnement incident : il possède la même polarisation, direction de propagation et est en phase. Ce phénomène est décrit par $B_{hb}u_\nu$ où B_{hb} est le coefficient d’absorption et $u_\nu = \frac{4\pi I_\nu}{c}$ est la densité d’énergie monochromatique pour un champ de rayonnement isotrope à la fréquence ν .
3. L’absorption stimulée : absorption d’un photon d’énergie ΔE , permettant de monter du niveau b vers h. Cette absorption est définie par la probabilité d’absorption par unité de temps $B_{bh}u_\nu$.

Il existe deux relations qui permettent de relier les coefficients d’Einstein entre eux. En considérant le système à l’équilibre thermodynamique (ET), on a :

$$A_{hb} = \frac{2h\nu_0^3}{c^2} B_{hb} \quad (15)$$

$$g_h B_{hb} = g_b B_{bh} \quad (16)$$

Où g_b et g_h sont respectivement les dégénérescences des niveaux E_b et E_h . Nous pouvons désormais retranscrire l'équation de transfert en termes de coefficients d'Einstein. Lorsque un rayonnement passe au travers d'un milieu, l'émission stimulée et émission spontanée des niveaux h vers b vont permettre d'augmenter l'intensité spécifique. Elle sera en même temps diminuée par l'absorption des photons des atomes dans l'état b. Dans le cas de l'émission spontanée, l'augmentation de l'intensité à la fréquence ν va être liée à la densité d'atomes n_h (cm^{-3}) rencontrés dans l'abscisse curviligne ds et est obtenue en multipliant par le coefficient d'Einstein A_{hb} . Les photons étant émis ou absorbés de manière isotrope, la variation se fait par unité d'angle solide donc nous avons un facteur $1/4\pi$ à considérer. À partir de l'équation 9, on peut réécrire les coefficients d'émissivité, d'absorption et la fonction source comme :

$$j_\nu = \frac{h\nu}{4\pi} \phi(\nu) n_h A_{hb} \quad (17)$$

$$\alpha_\nu = \frac{h\nu}{4\pi} \phi(\nu) (n_b * B_{bh} - n_h * B_{hb}) \quad (18)$$

$$S_\nu = \frac{j_\nu}{\alpha_\nu} = \frac{n_h A_{hb}}{(n_b * B_{bh} - n_h * B_{hb})} \quad (19)$$

En les injectant dans l'équation 13 et 31, on obtient :

$$\frac{dI_\nu}{ds} = \frac{h\nu}{4\pi} \phi(\nu) \left[n_h A_{hb} + (n_h * B_{hb} - n_b * B_{bh}) \frac{4\pi I_\nu}{c} \right] \quad (20)$$

Pour l'illustrer plus facilement, on peut également réécrire cette équation selon la dégénérescence des niveaux :

$$S_\nu = \frac{2h\nu_0^3}{c^2} \left(\frac{n_b g_h}{n_h g_b} - 1 \right)^{-1} \quad (21)$$

2.3.3 Densité de colonne

Nous allons introduire les fractions $f_h = n_h/n$ et $f_b = n_b/n$, respectivement la fraction d'atomes dans les niveaux h et dans les niveaux b avec n la densité totale d'atome. En repartant de l'équation 18, on peut alors écrire :

$$\alpha_\nu = \frac{c^2 A_{hb}}{8\pi\nu_0^2} \phi(\nu) f_h n \frac{g_h}{g_b} \left(1 - \frac{f_h g_b}{f_b g_h} \right) \quad (22)$$

Qui nous permet de montrer qu' α_ν est proportionnel à la répartition statistique des atomes entre leurs différents niveaux d'énergie. Si l'on intègre alors cette profondeur optique le long de la LDV, nous obtenons :

$$N = \int n ds \quad (23)$$

Avec N la densité de colonne (cm^{-2}), soit la quantité d'atome se trouvant sur la LDV pour une unité de surface. Elle s'obtient à condition de connaître les fractions d'atomes dans les deux niveaux d'énergie, que l'on pourrait qualifier de condition d'excitation de la transition. C'est le paramètre que nous allons essayer de contraindre afin de dériver les abondances des molécules observées.

2.3.4 Densité critique hors ETL

Afin de remonter à la densité de colonne, il faut connaître l'état d'excitation de l'atome (ou molécule), dépendant de la population des niveaux d'énergies. Dans le milieu interstellaire, le gaz est rarement à l'équilibre thermodynamique. Des variations de conditions physiques perturbent le milieu et le mettent hors-ETL (Équilibre Thermodynamique Local). Ces variations entraînent des changements dans l'activité des collisionneurs présents dans le milieu. On définit C_{ij} le taux de collisions par seconde pour une espèce chimique. Ce taux dépend de la densité d'un deuxième collisionneur tel que l'on puisse définir le taux comme : $C_{ij} = K_{ij}n^j$ où n^j est la densité du deuxième collisionneur, souvent H_2 . Les taux de collisions K_{ij} ($\text{cm}^{-3}.\text{s}^{-1}$) sont les sections efficaces intégrées sur la vitesse. Ces taux dépendent de la température via la vitesse relative des molécules collisionneuses. Ces taux de collisions obéissent à la relation d'équilibre. Pour un système à deux corps, en thermodynamique, cet équilibre est défini par :

$$n_1 C_{12} = n_2 C_{21} \quad (24)$$

Si on y ajoute une distribution de Boltzmann pour n_1 et n_2 :

$$C_{12} = \frac{g_1}{g_2} C_{21} e^{-\frac{\Delta E}{kT}} \quad (25)$$

Puisque les taux K_{ij} sont des constantes microscopiques, cette relation marche également dans les cas hors ETL. On peut obtenir les équilibres statistiques pour le cas à deux niveaux, (2,1) :

$$\begin{aligned} \frac{dn_1}{dt} &= -n_1(B_{12}\bar{J} + C_{12}) + n_2(A_{12} + B_{12}\bar{J} + C_{21}) \\ \frac{dn_2}{dt} &= -n_1(B_{12}\bar{J} + C_{12}) - n_2(A_{12} + B_{12}\bar{J} + C_{21}) \end{aligned} \quad (26)$$

Où \bar{J} est J_ν intégré sur $\phi(\nu)$ et J_ν est la moyenne de I_ν sur 4π steradian. Pour résoudre ces deux équations, il nous faut donc connaître le champ de radiation

Dans le cas à l'ETL, les populations des niveaux vont être fixées par l'équilibre statistique entre les différents niveaux d'une transition. En plus des trois processus radiatifs décrits auparavant, les atomes vont également subir des collisions inélastiques par les autres molécules ou atomes plus légers qui peuplent le milieu environnant. Dans le milieu interstellaire, H et H_2 sont les éléments les plus abondants, où viennent s'ajouter également He et de petites molécules. L'interaction avec ces éléments peuvent donc mener à un scénario où les désexcitations peuvent se produire plus rapidement par collisions que par transfert radiatif. On peut alors dans ce cas définir la "densité critique" à une température donnée :

$$n_{crit} = \frac{A_{hb}}{\langle \sigma_{hbv} \rangle} \quad (27)$$

Où σ_{hb} est la section efficace de désexcitation collisionnelle, dépendant de la vitesse v de l'atome (ou molécule) en collision. Dans le cas d'une distribution de Boltzmann pour le gaz, on prend la moyenne de la section efficace. La densité critique représente donc la densité minimum nécessaire afin de désexciter une transition plus rapidement que par émission de photon. Ainsi, quand $n_{coll} \gg n_{crit}$, la densité des collisionneurs n_{coll} est largement supérieure à la densité critique, l'excitation et la désexcitation sont dominées par les collisions et on atteint l'ETL. Dans ce cas, les populations relatives des niveaux ne dépendent ni de la densité de collisionneur ni du champ de rayonnement et obéissent à une loi de Boltzmann :

$$\frac{n_h}{n_b} = \frac{g_h}{g_b} e^{-h\nu_0/kT_{kin}} \quad (28)$$

Où T_{kin} est la température cinétique des collisionneurs, k la constante de Boltzmann, ν_0 la fréquence de transition des états h et b , g_h et g_b les poids statistiques des niveaux. Plus les coefficients d'Einstein seront forts, plus la densité critique nécessaire pour atteindre l'ETL est élevée. La densité critique est donc dépendante de la désexcitation collisionnelle et de la transition (certaines transitions peuvent être à l'ETL pendant que d'autres n'y seront pas).

2.3.5 Température d'excitation

Par analogie avec la loi de Boltzmann, on peut définir la température d'excitation T_{ex} dont dépendent la population des niveaux d'énergie :

$$T_{ex} = \frac{h\nu/k}{\ln\left(\frac{n_b * g_h}{n_h * g_b}\right)} \quad (29)$$

Dans le cas de l'ETL, on a $T_{ex} = T_{kin}$. Le champ radiatif serait alors défini par une équation de corps noir avec $I_\nu = B_\nu$. On peut alors réécrire la fonction de source tel que :

$$S_\nu = \frac{2h\nu_0^3}{c^2} \frac{1}{\left(\frac{g_h n_b}{g_b n_h} - 1\right)} = \frac{2h\nu_0^3}{c^2} \frac{1}{e^{h\nu_0/kT_{ex}} - 1} = B_{\nu_0}(T_{ex}) \quad (30)$$

L'équation 31 devient alors :

$$I_\nu(\tau_\nu) = I_\nu(0) * \exp -\tau_\nu + \int_0^{\tau_\nu} B_\nu(T_{ex}) e^{-(\tau_\nu - \tau'_\nu)} d\tau'_\nu \quad (31)$$

Et en faisant l'hypothèse de T_{ex} constante :

$$I_\nu(\tau_\nu) = I_\nu(0) * \exp -\tau_\nu + B_\nu(T_{ex})(1 - e^{(-\tau_\nu)}) \quad (32)$$

Si l'on prend se place à une fréquence hors de du profil spectral tel que $\phi(\nu) = 0$, alors on obtient $\tau_\nu = 0$ et $I_\nu = I_\nu(0)$, ce qui définit le continuum du spectre. La mesure de raie spectrale moléculaire implique une différentiation de l'intensité mesurée vers une position de référence, contenant seulement l'intensité de fond, de l'intensité mesurée vers la source de l'émission. Cela se traduit par :

$$\begin{aligned}
\Delta I_\nu &= I_\nu - I_\nu(0) \\
&= I_\nu(0)e^{-\tau_\nu} + B_\nu(T_{ex})[1 - e^{-\tau_\nu}] - I_\nu(0) \\
&= I_\nu(0)(1 - e^{-\tau_\nu}) + B_\nu(T_{ex})(1 - e^{-\tau_\nu}) \\
&= [B_\nu(T_{ex}) - I_\nu(0)][1 - e^{-\tau_\nu}] \\
&= [B_\nu(T_{ex}) - B_\nu(T_{fond})][1 - e^{-\tau_\nu}]
\end{aligned} \tag{33}$$

Où T_{fond} est la température du fond, pouvant être décrit comme un corps noir. En radioastronomie, l'intensité I_ν peut être remplacée par une loi de température équivalente de Rayleigh-Jeans, équivalent de la température T d'un corps noir :

$$J_\nu(T) = \frac{h\nu/k}{e^{h\nu/kT} - 1} \tag{34}$$

Aux fréquences radio, on a généralement $h\nu \ll kT$, si bien que $e^{h\nu/kT} - 1 \simeq h\nu/kT$ et la fonction de Planck s'écrit alors :

$$B_\nu(T) \simeq \frac{2kT\nu^2}{c^2} \tag{35}$$

Il s'agit de l'approximation de Rayleigh-Jeans pour le spectre de corps noir. On peut alors définir la température de brillance T_B dans l'approximation de Rayleigh-Jeans :

$$T_B = \frac{c^2}{2k\nu^2} I_\nu \tag{36}$$

On peut relier $B_\nu(T)$ et $J_\nu(T)$ par :

$$\frac{c^2}{2k\nu^2} * B_\nu(T) = J_\nu(T) \tag{37}$$

Ce qui permet d'écrire notre équation de transfert radiatif avec un paramètre *observable*, la température de radiation de la source T_R :

$$T_R = f[J_\nu(T_{ex}) - J_\nu(T_{fond})][1 - e^{-\tau_\nu}] \tag{38}$$

Où nous avons introduit un nouveau paramètre f , qui est une fraction du lobe de l'instrument utilisé pour observer la source, également appelé "facteur de dilution". Ce facteur est propre à chaque télescope et fréquence, défini comme :

$$f = \frac{\theta_{source}^2}{\theta_{lobe}^2 - \theta_{source}^2} \tag{39}$$

Où θ_{source} et θ_{lobe} sont respectivement la taille de la source observée depuis le télescope et la taille du lobe du télescope. θ_{lobe} se peut être calculé par :

$$\theta_{lobe} = 1.22 \frac{\lambda}{D} \tag{40}$$

Avec λ la longueur d'onde et D le diamètre de l'antenne.

2.3.6 Résoudre l'équation de transfert de rayonnement à l'ETL

La résolution de l'équation du transfert de rayonnement n'est pas chose facile, malgré les approximations possibles grâce à l'ETL. Il faut pouvoir déterminer les populations se trouvant dans les différents niveaux d'énergie. Lorsque plusieurs transitions d'une même molécule sont détectées, il est possible d'utiliser une technique de résolution appelée "analyse par diagramme rotationnel". Cela permet de déterminer une approximation de la température du gaz et une approximation de la densité de colonne de la molécule émetteuse. En plus de l'ETL, nous ferons l'hypothèse que les raies sont optiquement minces et que la différence d'énergie entre deux niveaux est $\Delta E = E_u - E_b$.

Pour se faire, on peut utiliser les équations dérivées précédemment pour retrouver la densité de colonne. En reprenant l'équation de la profondeur optique 11 et en y injectant l'épaisseur optique exprimée en fonction du coefficient d'Einstein A_{hb} défini dans l'équation 18 :

$$\tau_\nu = \int \tau_\nu d\nu = \frac{c^2}{8\pi\nu^2} \int A_{hb} n_h \left(1 - \frac{n_h g_b}{n_b g_h}\right) ds \int \phi(\nu) d\nu \quad (41)$$

En considérant un profil Gaussien pour la raie émise avec une FWHM $\Delta\nu$, on obtient :

$$\tau_\nu = \frac{c^2}{8\pi\nu^2 \Delta\nu} \int A_{hb} n_h \left(1 - \frac{n_h g_b}{n_b g_h}\right) ds \quad (42)$$

Les conditions d'ETL nous permettent d'utiliser la distribution de Boltzmann défini par l'équation 28 :

$$\tau_\nu = \frac{c^2}{8\pi\nu^2 \Delta\nu} \int A_{hb} n_h (e^{h\nu/kT} - 1) ds \quad (43)$$

Selon l'approximation de Rayleigh-Jeans définie dans l'équation 34, on peut écrire la température de brillance telle que :

$$T_B = \frac{hc^3}{8\pi\nu^2 \Delta\nu} \int A_{hb} n_h \left(\frac{1 - e^{-\tau}}{\tau}\right) ds \quad (44)$$

On définit l'intensité intégrée sur l'axe de vitesse, $W = \int T_B d\nu \sim T_B \Delta\nu$. Ce qui permet d'obtenir une expression pour la densité de colonne des molécules dans l'état excité h N_h en fonction de la température de brillance :

$$N_h = \frac{8\pi k\nu^2}{hc^3} \frac{W}{A_{hb}} \quad (45)$$

Cette équation nous donne la population dans le niveau d'énergie h, auquel il faut comparer à la population dans tous les niveaux d'énergie, que l'on notera N_{tot} . Sachant que $h\nu_{hb} = E_h - E_b$, nous avons :

$$\frac{n_h}{g_h} = \frac{n_{tot}}{Q(T)} e^{-E_h/kT} \quad (46)$$

Où $n_{tot} = \sum n_i$ avec i les niveaux disponibles, et $Q(T)$, la fonction de partition à la température T qui représente la somme statistique de tous les niveaux rotationnels disponibles tel que :

$$Q(T) = \sum_i g_i e^{\frac{E_i}{kT}} \quad (47)$$

Dans le cas d'une molécule linéaire diatomique, cette équation s'écrit :

$$Q(T_{rot}) = \frac{kT}{hB} \quad (48)$$

Où B est la constante de rotateur rigide. Les molécules à géométrie plus compliquée auront des équations bien plus complexes. En considérant que le nuage est isotherme et en intégrant le long de la LDV de telle sorte que $N_h = \int n_h ds$ et $N_{tot} = \int n_{tot} ds$, on peut réécrire l'équation 46 :

$$\frac{N_h}{g_h} = \frac{N_{tot}}{Q(T)} e^{E_h/kT} \quad (49)$$

Avec N_{tot} la densité de colonne totale de la molécule (toute transition confondue) sur la LDV. Cette méthode n'est cependant qu'applicable dans le cas où l'on est à l'ETL et où plusieurs transitions (optiquement minces) ont été observées.

Il est cependant possible d'aller plus loin dans l'analyse et de privilégier une approche plus réaliste, en prenant en compte par exemple l'excitation et la désexcitation local du milieu statistiquement (c'est le cas de la méthode "Large Velocity Gradient", décrite par exemple dans [Goldreich & Scoville \(1976\)](#)). Mais dans ces méthodes, il faut prendre en compte les données de collision moléculaires, qui ne sont pas disponibles pour la plupart des molécules. Cependant, si ces taux sont connus, il est possible de contraindre plusieurs paramètres physiques clefs, dont la densité de colonne.

2.3.7 Probabilité d'échappement

Une difficulté pour résoudre le transfert radiatif est le couplage entre l'équilibre statistique des atomes localement et l'intensité moyenne, c'est-à-dire le champ de radiation moyenné dans toutes les directions de l'espace. C'est encore plus difficile à découpler dans le cas de milieu inhomogène. Une approche du problème est de découpler ces équations en introduisant la probabilité β d'un photon à échapper du milieu dans lequel il a été émis. Cette probabilité d'échappement $\bar{J}_{\nu_{hb}}$ serait alors dépendante de l'épaisseur optique τ et serait liée à l'intensité dans le milieu, en ignorant la radiation de fond et/ou tout continuum local :

$$\bar{J}_{\nu_{hb}} = S_{\nu_{hb}}(1 - \beta) \quad (50)$$

Où $(1 - \beta)$ représente la proportion de photons qui ne s'échappent pas. β dépend de la géométrie du milieu et l'épaisseur optique, et non pas de l'intensité. En réalité, le photon pourrait s'échapper une première fois et être absorbé par la molécule ou atome suivante et être ré-émis plusieurs fois avant même de sortir du milieu. Elle permet d'obtenir des résultats en accord avec des méthodes plus élaborées de transfert radiatif.

2.3.8 RADEX

RADEX a été développé dans l'optique d'être une méthode "intermédiaire" de résolution de transfert radiatif : en prenant pour hypothèses que le milieu observé est homogène, il ne reste plus qu'à contraindre certains paramètres physiques facilement observables. Cette méthode est possible pour les molécules observées dont les taux sont disponibles. La sortie du programme est l'intensité de la raie dont le fond a été soustrait, en unité équivalente à la température de brillance dans la limite de Rayleigh-Jeans. La soustraction du fond est telle que :

$$T_B = \frac{c^2}{2k\nu^2} (I_\nu^{em} - I_\nu^{fnd}) \quad (51)$$

Où T_B peut être directement comparé à la température d’antenne observée. Ce qui permet de créer des intensités intégrées théoriques comparables aux observations et de réaliser un test de χ^2 afin d’obtenir la densité de colonne N_X (Jansen et al. 1995; Leurini et al. 2004). L’intensité intégrée d’une raie dépend des paramètres physiques du milieu et plusieurs combinaisons de ces derniers sont compatibles avec les observations. On a une dégénérescence des solutions. Il faut donc en fixer certains afin de lever cette dégénérescence. Pour cela, il nous fallait déduire les différents paramètres physiques présents dans chacune des sources afin d’ajouter des contraintes sur la densité de colonne. La manière dont varie ces paramètres ainsi que les cartes déduites ici seront décrites dans les chapitres sur les sources. Nous détaillerons seulement ici la méthode utilisées pour les obtenir. Les paramètres physiques concernés sont : les intensités de raies avec lequel on va comparer le modèle ; la largeur de ces mêmes raies, la température T , l’extinction visuelle A_v et la densité volumique de H_2 , n_{H_2} qui sont les paramètres physiques a priori quand on a qu’une seule raie par molécule ; et enfin la densité de colonne de H_2 N_{H_2} afin d’en déduire les abondances moléculaires.

2.4 Cartes de paramètres physiques

2.4.1 Carte d’intensité intégrée et dv

L’intensité intégrée d’une raie est tout simplement l’aire intégrée sous chaque raie détectée. L’intensité d’une raie permet de déduire la température de radiation de la transition. Cette quantité est égale à la température d’antenne du lobe principal dans le cas où le lobe est uniforme. Elle se déduit à chaque pixel et permet d’obtenir une information sur la cinématique des molécules. Les cartes d’intensité intégrée sont directement déduites des données 30m en construisant des cubes de données avec le package python Spectral Cube (Ginsburg et al. 2019). Afin de sélectionner les régions émettrices, nous appliquons un premier filtre à 3σ afin de ne garder que les régions où la transition est nettement détectée.

Pour déterminer la largeur de raie à chaque pixel pour chaque molécule, nous avons utilisé la méthode dérivée par Marchal et al. (2019)⁵. Cet algorithme permet de décomposer chaque spectre en une combinaison de Gaussiennes en utilisant une méthode des moindres carrés non-linéaire pour faire une régression. Pour chaque pixel, nous avons extrait un ajustement Gaussien du spectre et recréé ainsi une carte d’intensité “lissée”, sans le bruit de la ligne de base. Cette nouvelle carte ne montre que peu de différences comparées aux cartes d’intensité d’origine (de 0.1 à 0.3 km.s⁻¹ de différence) et produit des cartes moins bruitées. À chaque spectre lissé est extrait la largeur à mi-hauteur de la Gaussienne (ou la somme de ces largeurs dans le cas d’un pixel à plusieurs composantes). Cette méthode a permis en plus d’éviter des artefacts de bruits ou de valeurs anormales d’un pixel à l’autre.

2.4.2 Densité volumique et densité de colonne de H_2

Le nombre limité de raies détectées par espèces n’a pas permis de déterminer la densité volumique de H_2 locale à chaque pixel par transfert radiatif. Afin de déterminer la densité volumique, il fallait d’abord déterminer la densité de colonne de H_2 . Nous avons donc utilisé les cartes d’opacité de poussière obtenues avec *Herschel* et *Planck* décrites dans la section 2.2.1. Afin d’obtenir la conversion

5. <https://github.com/antoinemarchal/ROHSA/tree/master>

entre l'opacité et la densité de colonne. Pour se faire, nous avons utilisé la méthode décrite par [Zari et al. \(2016\)](#) et [Lombardi et al. \(2014\)](#). En partant de l'hypothèse que les nuages moléculaires ont des émissions optiquement minces en infrarouge, l'intensité de l'émission à la fréquence considérée est décrit par, lorsque $\tau \ll 1$:

$$I_\nu = B_\nu(T)[1 - e^{-\tau_\nu}] \simeq B_\nu(T)\tau_\nu \quad (52)$$

où τ_ν est l'épaisseur optique à la fréquence ν et $B_\nu(T)$ le modèle de corps noir à la température T. L'émission de corps noir est décrite par la fonction :

$$B_\nu(T) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1} \quad (53)$$

Pour la suite, nous utiliserons l'émission du corps noir modifié tel que κ_ν ($\text{cm}^2 \cdot \text{g}^{-1}$), l'opacité de la poussière, soit définie par :

$$\kappa_\nu = \kappa_{\nu_0} \left(\frac{\nu}{\nu_0 \text{ GHz}} \right)^\beta \quad (54)$$

Avec κ_{ν_0} , l'opacité de la poussière équivalente à une longueur d'onde mesurée (par exemple, κ_{353} à 353 GHz pour $\lambda = 850 \mu\text{m}$).

Afin de convertir l'extinction en densité de colonne, il serait possible d'obtenir la pente de la relation linéaire entre les deux en utilisant un modèle de grain tel que :

$$\tau_\nu = \kappa_\nu \Sigma_{\text{dust}} \quad (55)$$

Où Σ_{dust} est la densité surfacique de masse de la poussière, ν la fréquence et κ l'opacité de la poussière à la fréquence ν . Il est cependant très difficile de déterminer l'opacité de la poussière sans connaître les propriétés de la composition de la-dite poussière. Nous allons donc utiliser les valeurs dérivées par [Kramer et al. \(2010\)](#), et les références listées dedans) dans leur étude de la poussière dans l'ISM. On peut alors écrire l'équation 55 tel que :

$$\Sigma_{\text{dust}} = \frac{\tau_\nu}{\kappa_\nu} \quad (56)$$

En adoptant un rapport gaz-sur-poussière de 100, on peut obtenir Σ_{gas} (g par cm^2) avec :

$$\Sigma_{\text{gas}} = 100 \times \Sigma_{\text{dust}} \quad (57)$$

Enfin, nous pouvons convertir Σ_{gas} en N_{H_2} , la densité de colonne de H_2 , sachant que $m_{\text{H}_2} = 3.34 \times 10^{-24}$ g :

$$N_{\text{H}_2} = \frac{\Sigma_{\text{gas}}}{m_{\text{H}_2}} \quad (58)$$

Ce qui donne :

$$N_{\text{H}_2} = \frac{100}{\kappa_\nu \times 3.34 \times 10^{-24}} \times \tau_{353} \quad (59)$$

Dans la pratique, on construit un estimateur des observables de *Herschel* pour chaque fréquence du détecteur SPIRE. Puis on optimise les valeurs des paramètres (N_{H_2} et T) en fixant β à 2 par

minimisation de χ^2 pour chaque pixel de la carte. La quantité de flux observée par *Herschel*, S_ν (MJy/sr), se calcule par :

$$S_\nu = 2 m_p \kappa_{\nu_0} \frac{N_{H_2}}{GDR} \left(\frac{\nu}{\nu_0}\right)^\beta B_\nu(T) \quad (60)$$

Avec m_p la masse du proton (g), κ_{ν_0} et ν_0 l'opacité ($\text{cm}^2 \cdot \text{g}^{-1}$) et la fréquence (Hz) de la poussière équivalente à la longueur d'onde mesurée par *Herschel*, N_{H_2} la densité de colonne de H_2 (cm^{-2}), GDR le rapport gaz-sur-poussière, ν la fréquence (Hz) et B_ν le modèle de corps noir à la température T ($\text{Jy} \cdot \text{sr}^{-1}$). On effectue ensuite un test de χ^2 pour contraindre la densité de colonne de H_2 à chaque pixel sur la carte d'opacité d'*Herschel*, en ajustant en même temps T_{dust} et N_{H_2} .

Une fois ces cartes obtenues, nous avons pu utiliser la méthode décrite par [Bron et al. \(2018\)](#) qui permet de déduire la densité volumique de H_2 à partir de sa densité de colonne. Cette méthode est adaptée à des sources comme les nôtres étant donné qu'elle fait l'hypothèse d'un milieu isotrope et où la densité évolue de manière monotone, décroissante de l'intérieur vers l'extérieur. Il est alors possible d'estimer l'échelle de longueur typique l à un seuil de N_H dans les régions pour une densité de colonne x donnée en prenant la racine carrée de la surface projetée tel que $x > N_H$. On peut alors obtenir la densité volumique de H n_H en appliquant à chaque pixel du masque $n_H = N_H / l$. Cette méthode ne permet pas une estimation parfaite de la densité volumique mais une valeur statistiquement proche de ce qui est attendu. D'après les données des auteurs, une estimation avec un facteur linéaire l reste correct. Considérer une géométrie autre que sphérique ou même anisotropique reste trop compliquée et ne permet pas d'être facilement réutilisée. Dans notre cas, la comparaison avec les 2 sources nous montrent que cette estimation est valable, les valeurs obtenues sont proches de celles attendues dans des nuages denses froids d'évolution similaires. Faute de meilleure méthode, nous utiliserons ces valeurs pour la suite de la détermination des abondances moléculaires.

2.4.3 Extinction visuelle A_v

L'extinction visuelle A_v n'est pas utilisée dans la détermination de l'abondance des molécules mais est très importante dans la compréhension de la chimie du nuage. Plus l' A_v va être élevée, plus les couches internes du nuage sont protégées du rayonnement UV par la matière (gaz et surtout poussière) qui l'entoure, permettant moins de photodissociation des espèces qu'à l'extérieur du nuage. Afin de calculer l'extinction visuelle, il faut déterminer la densité de colonne de H_2 . Dans les nuages diffus, ces deux grandeurs sont reliées par la formule suivante ([Predehl & Schmitt 1995](#); [Ryter 1996](#); [Olofsson & Olofsson 2010](#)) :

$$A_v = \frac{N_H}{1.8 * 10^{21}} \quad (61)$$

L'unité d' A_v est mag. Sachant que la densité de colonne totale de l'hydrogène est définie : $N_{H,tot} = 2 N_{H_2} + N_H + N_{H^+}$, avec N_H et N_{H^+} négligeables pour des milieux moléculaires, on obtient l'équivalence $N_H = 2 N_{H_2}$. L'équation 61 est appliquée à chaque pixel des cartes de densité de colonne H_2 afin de déterminer l' A_v .

2.4.4 Température

La carte de température de poussière pour L429-C était déjà disponible grâce à [Sadavoy et al. \(2018\)](#) et nous avons pu les utiliser immédiatement. Pour L694, nous avons nous-même obtenu les

cartes de température et de N_{H_2} à partir de l’archive *Herschel*, avec les cartes SPIRE à 250, 350 et 500 μm , en utilisant un modèle d’émission de corps noir modifié. Nous avons, pour la dérivation de l’abondance, considéré $T_{\text{gaz}} = T_{\text{grain}}$.

2.4.5 Densité de colonne et abondance

Une fois tous les paramètres précédents contraints, il est possible de déterminer la densité de colonne. Pour ce faire, nous avons développé un code d’inversion du transfert radiatif RADEX (van der Tak et al. 2007) et le package python ndRADEX (Taniguchi 2020) pour dériver une grille d’intensité intégrée synthétique pour une ou plusieurs transitions (dans ce cas-là, une grille par transition). Les taux de collision utilisés sont : SO (Lique et al. 2005), CS (Lique et al. 2006), CN (Lique et al. 2010), CO (Yang et al. 2010), H_2S (Dubernet et al. 2009), CH_3OH (Rabli & Flower 2010), HC_3N (Faure et al. 2016), HNCO (Niedenhoff et al. 1995), enfin N_2H^+ et p- NH_2D (Müller et al. 2001).

Pour chaque paramètre physique, des grilles de paramètres (de 30 valeurs chacune, sauf pour les grilles de dv qui n’avaient que 5 valeurs) ont été créés afin d’englober la totalité des valeurs tracées par chaque carte. La densité de colonne étant inconnue, il s’agissait d’abord de tester des grilles à basses résolutions afin de contraindre l’intervalle sur lequel elle était définie, pour chaque molécule. Ce processus itératif a permis de converger vers un ensemble plus précis et dont le pas entre chaque membre de l’espace diminuait à chaque itération. Par exemple pour C^{18}O , les valeurs testées pour L429-C étaient comprises entre 10^{11} et 10^{18} cm^{-2} avec seulement 15 valeurs dans la grille, jusqu’à trouver des valeurs finales comprises entre 10^{12} et 10^{16} cm^{-2} avec 60 valeurs dans la grille. Les grilles RADEX finales contenaient 270 000 ($60 \times 30 \times 30 \times 5$) valeurs possibles. Nous aurions pu augmenter la taille des grilles associées afin de lisser les cartes de densité de colonne obtenue mais le temps de calcul aurait été très important et la résolution finale était convaincante. Il n’y avait pas de valeurs anormales ni d’artefacts. Une fois les grilles obtenues, nous fixons 3 valeurs (T_{kin} , n_{H_2} et dv) à chaque pixel afin d’éviter la dégénérescence entre les grilles de paramètres physiques prises en compte par RADEX. En utilisant une interpolation linéaire de l’intensité de chaque raie sur la grille de paramètres fixés. Le résultat est une intensité intégrée théorique I_{th} que nous avons en suite comparées avec les intensités des observations I_{obs} par un test de χ^2 :

$$\chi^2 = \left(\frac{I_{\text{th}} - I_{\text{obs}}}{\text{rms} \sqrt{dv/\Delta V}} \right)^2 \quad (62)$$

Avec rms le bruit associé à chaque intensité observée (pour chaque pixel) et ΔV représente la largeur d’un canal de vitesse. La fraction du bruit sur cette largeur permet d’estimer le bruit en aire intégrée et nous vérifions également que les tests de χ^2 bien à 3σ . Dans le cas de x transitions, ce test est réalisé x fois à la suite. Ce test permet de contraindre d’après les paramètres physiques à chaque pixel la densité de colonne la plus probable et permet de créer des cartes de densité de colonne pour chaque molécule. Les cartes d’abondance (par rapport à H_2) sont ensuite obtenues en divisant les cartes de densité de colonne de chaque molécule par celle de H_2 . Pour le cas de CO, nous avons utilisé son isotopologue le plus important, C^{18}O et avons multiplié la carte d’abondance par la valeur du rapport isotopique 557 (Wilson 1999). Nous avons également vérifié avec la valeur du rapport isotopique de C^{17}O , qui est de 2005 (Lodders 2003), et avons obtenu des valeurs très proches.

Pour les molécules qui n’ont pas été détecté à 3σ , nous avons calculé les limites hautes de détection. Pour se faire, il faut d’abord calculer les limites hautes W_{upp} des intensités intégrées “réelles” :

$$W_{upp} < 1.064 \times 3 \times \text{rms} \times dv$$

Où rms (en K) est le niveau de bruit à la position de densité maximale de la source observée, ces valeurs étant plus ou moins importantes selon la molécule observée. Nous avons pris comme hypothèse que le dv de ces molécules serait de 1 km.s^{-1} . Les fonctions de partitions sont interpolées à la température moyenne du nuage ($\sim 10 \text{ K}$). Et pour chaque molécule, nous calculons la limite haute de la densité de colonne en incluant la température de radiation du fond diffus cosmologique (Mangum & Shirley 2015), reprenant les équations de transfert radiative détaillées dans la Section 2.3 :

$$N_i = 8\pi k \times Q_i \times \nu_i^2 \times W_{upp} \times 10^5 \times \frac{e^{\frac{E_{h,i}}{T}}}{g_{h,i} \times h \times c^3 \times A_{hb,i}}$$

Dans L429-C, les limites hautes obtenues sont 2×10^{16} , 2×10^{13} , et $2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ pour c-C3H2 (95206.01 MHz), OCS (97301.20 MHz), et HNC0 (109905.60 MHz) respectivement.

Pour CCS et HC₃N, les taux de collisions n’étaient pas disponibles, nous avons donc calculé leur densité de colonne à l’ETL en utilisant la même formule que prédite précédemment mais en interpolant la température et l’intensité mesurées à chaque pixel avec la température cinétique et l’intensité intégrée théorique de la transition. Cela permet d’obtenir une densité de colonne à chaque pixel où la nouvelle intensité intégrée doit être supérieure à 3σ . On divise ensuite par la densité de colonne de H₂ afin d’obtenir les abondances comme pour les autres cartes.

2.5 Modèle chimique - Nautilus

Afin de comprendre et de contraindre les observations effectuées dans le gaz et dans la glace, nous utilisons des modèles chimiques. Ces modèles nous permettent de comprendre la formation de certaines molécules, de prédire leur évolution temporelle et plus particulièrement ici, comprendre les mécanismes qui mènent les espèces sur les surfaces à être libérées dans le gaz.

Dans le cadre de ce travail, nous avons utilisé Nautilus, développé par Ruaud et al. (2016) au Laboratoire d’Astrophysique de Bordeaux. Ce modèle est un modèle 3-phases qui permet d’étudier l’interaction entre le gaz, le manteau de glace et sa surface.

2.5.1 Fonctionnement général

Ce modèle reprend en grande partie les formalismes établis par Hasegawa & Herbst (1993a). Nautilus a d’abord été construit en tant que modèle 2-phases avec seulement une interaction entre le gaz et le grain. Ruaud et al. (2016) a introduit la troisième phase en considérant une séparation physique entre la surface de la glace et le manteau de glace lui-même, avec leurs propres propriétés physico-chimiques propres. Le manteau de glace dans ce modèle est considéré comme l’accumulation de mono-couches de glace isotropes formant un tout chimiquement actif et pouvant réagir avec la surface. La surface, elle, est représentée comme un réseau isotrope de sites d’adsorption potentiels des espèces se trouvant dans la phase gazeuse. Ces sites, ou puits de potentiels, sont des sites de physisorption.

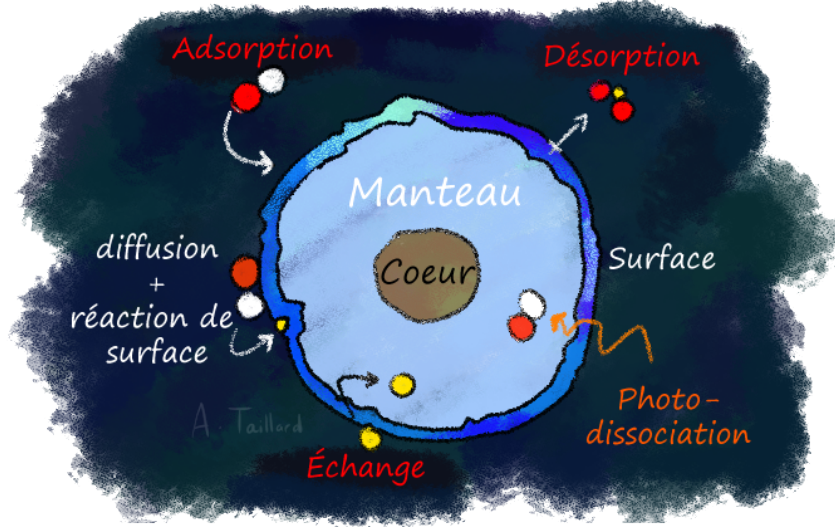


FIGURE 11 – Les 3 phases du modèle (gaz, manteau de glace et surface de la glace), les interactions entre les phases (en rouge) et quelques mécanismes de réactions.

Dans les modèles gaz-grain, les différentes réactions physico-chimiques sont reproduites par des équations différentielles (*rate equation*) en fonction du temps. L'avantage de cette approche permet d'avoir un temps de calcul très rapide (CPU time ~ 1 à 60 secondes) qui résout des milliers de réactions, à l'inverse de la méthode Monte Carlo, bien plus puissante pour reproduire la physique microscopique, mais avec une chimie beaucoup plus restreinte à cause des performances plus lentes (Cuppen & Herbst 2007; Cuppen et al. 2009; Lamberts et al. 2013).

À partir d'abondances atomiques observées, listées dans la Table 1 de Ruaud et al. (2016), et de paramètres physiques d'entrée, le modèle résout le système chimique des équations différentielles et permet de récupérer les abondances moléculaires de chaque phase en fonction du temps. Les réactions dans le gaz décrites dans le modèle proviennent du réseau chimique kida.uva.2014 (Wakelam et al. 2015) et sont listées dans Wakelam et al. (2019). Le réseau gaz-grain utilisé dans cette thèse possède près de 14 000 réactions chimiques (dans le gaz, à la surface, dans le manteau et aux interfaces gaz-grain et grain-manteau). La chimie des éléments suivant est considérée : H, He, C, N, O, Si, S, Fe, Na, Mg, Cl, P et F.

Les équations de cinétiques, qui gouvernent le modèle, tiennent compte de la formation et la destruction de cette espèce chimique en fonction des différents phénomènes se produisant dans chaque phase. Par exemple, la surface peut être soumise à plusieurs processus comme l'accrétion (ou adsorption), la désorption, la diffusion sur la surface, la photo-dissociation et les réactions chimiques. Les concentrations de l'espèce i dans la phases gazeuses $n(i)$, à la surface $n_s(i)$ et dans le manteau $n_m(i)$ (en cm^{-3}) sont définies comme suit :

$$\left. \frac{dn(i)}{dt} \right|_{\text{tot}} = \sum_l \sum_j k_{lj} n(l) n(j) + k_{diss}(j) n(j) + k_{des}(i) n_s(i) - k_{acc}(i) n(i) - k_{diss}(i) n(i) - n(i) \sum_l k_{ij} n(j) \quad (63)$$

$$\begin{aligned}
\left. \frac{dn_s(i)}{dt} \right|_{\text{tot}} &= \sum_l \sum_j k_{lj}^s n_s(l) n(j) + k_{diss}^s(j) n_s(j) + k_{acc}(i) n(i) \\
&\quad + k_{swap}^m(i) n_m(i) + \left. \frac{dn_m(i)}{dt} \right|_{m \rightarrow s} \\
&\quad - n_s(i) \sum_j k_{ij}^s n_s(j) - k_{des}(i) n_s(i) - k_{diss}^s(i) n_s(i) \\
&\quad - k_{swap}^s(i) n_s(i) - \left. \frac{dn_s(i)}{dt} \right|_{s \rightarrow m}
\end{aligned} \tag{64}$$

$$\begin{aligned}
\left. \frac{dn_m(i)}{dt} \right|_{\text{tot}} &= \sum_l \sum_j k_{lj}^m n_m(l) n_m(j) + k_{diss}^m(j) n_m(j) \\
&\quad + k_{swap}^m(i) n_s(i) + \left. \frac{dn_s(i)}{dt} \right|_{s \rightarrow m} \\
&\quad - n_m(i) \sum_j k_{ij}^m n_m(j) - k_{diss}^m(i) n_m(i) \\
&\quad - k_{swap}^m(i) n_m(i) - \left. \frac{dn_m(i)}{dt} \right|_{m \rightarrow s}
\end{aligned} \tag{65}$$

Avec les taux d'accrétion et de désorption (s^{-1}) k_{acc} et k_{des} (ce dernier pouvant être thermal ou non-thermal), k_{ij} , k_{ij}^s and k_{ij}^m ($\text{cm}^3 \text{s}^{-1}$) représentant les taux de réactions entre les espèces i et j respectivement dans la phase gazeuse, à la surface du grain et dans le manteau de glace. On définit k_{diss} comme le taux de réaction regroupant la dissociation via les photons UV générés par CR et les photons UV provenant du champ de rayonnement interstellaire moyen. Selon la direction, les taux d'échange entre le manteau et la surface sont définis par k_{swap}^m ou k_{swap}^s . Ils représentent la capacité d'une molécule à se déplacer entre la surface et dans le manteau de glace (et inversement selon sa position initiale). Ces taux dépendent du nombre de mono-couches constituant le manteau et du temps de diffusion thermique entre deux sites (dépendant de la température de la poussière et de l'énergie de diffusion de l'espèce i dans le manteau).

Les taux d'échange sont calculés comme :

$$\left. \frac{dn_s(i)}{dt} \right|_{s \rightarrow m} = \alpha_{\text{gain}} \frac{n_s(i)}{n_{s,\text{tot}}} \frac{dn_{s,\text{gain}}}{dt} \tag{66}$$

Avec :

$$\alpha_{\text{gain}} = \frac{\sum N_s(i)}{\beta N_{\text{sites}}} \tag{67}$$

Où N_{sites} est le nombre de sites à la surface et N_s est le nombre de particules d'espèces i avec $N_s(i) = n_s(i)/n_{\text{grain}}$, où n_s est la concentration de surface de l'espèce et n_{grain} la concentration des grains.

Le taux d'échange pour le manteau vers la surface est donné par :

$$\left. \frac{dn_m(i)}{dt} \right|_{m \rightarrow s} = \alpha_{perte} \frac{n_m(i)}{n_{m,tot}} \frac{dn_{s,perte}}{dt} \quad (68)$$

Où β est le nombre de mono-couches actives à la surface. Il est fixé à $\beta = 2$ pour prendre en compte la non-uniformité de la surface (Fayolle et al. 2011).

Avec :

$$\alpha_{loss} = \begin{cases} \frac{\sum_i N_m(i)}{\sum_i N_s(i)} & \text{si } \sum_i N_m(i) < \sum_i N_s(i) \\ 1 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (69)$$

Dans les équations 66 et 68, $\frac{dn_{s,gain}}{dt}$ et $\frac{dn_{s,perte}}{dt}$ représentent respectivement les taux globaux de gain et de perte à la surface du grain.

Ces équations permettent donc de sonder à chaque pas de temps t les espèces présentes sur la surface et dans le manteau. Dans ce travail, l'évolution est modélisée jusqu'à 1×10^7 yr (échelle de temps qui englobe la formation du cœur et sa stabilisation).

Une description bien plus complète du modèle peut être trouvée dans la thèse de Maxime Ruaud (2016). Nous allons cependant couvrir rapidement les réactions décrites dans le modèle ainsi que les différents mécanismes de désorption pris en compte par Nautilus, avec leurs quelques mises à jour provenant de Wakelam et al. (2021b).

2.5.2 Réactions dans Nautilus

Les différentes phases du modèle sont régies par des réactions différentes en fonction de paramètres physiques d'entrée. Nous allons ici rapidement détailler ces processus.

Réaction dans le gaz

Pour les gaz bi-moléculaires, les taux de réactions sont calculés en suivant une loi d'Arrhenius modifiée dépendante de la température. Les différents mécanismes incluent dans ces réactions sont les réactions chimiques bi-moléculaires (comprenant les réactions neutre-neutre et ion-neutre), l'ionisation ou la dissociation par CR, l'ionisation ou dissociation par photons UV, l'ionisation ou la dissociation par photons induits par les interactions CR-milieu et enfin les recombinaisons électroniques. Plus de détails sur l'efficacité de ces processus peuvent être trouvés dans Wakelam et al. (2012)

Gaz vers les surfaces Les espèces dans le gaz peuvent se physisorber à la surface des grains de poussières après collision avec ces derniers, les taux de réactions sont décrits de Hasegawa et al. (1992). Les taux de collage utilisés sont de 1 sauf pour H et H₂, qui possèdent des valeurs dépendantes de la température (basées sur les expériences en laboratoire de Matar et al. 2010; Chaabouni et al. 2012).

Surface et manteau Une fois les espèces formées ou physisorbées à la surface, ces espèces peuvent se déplacer via diffusion thermique ou diffusion par effet tunnel. Ce dernier mécanisme

permet à une molécule de franchir la barrière de potentiel dans laquelle elle est contenue, et est dépendante de la masse des espèces. L'équation qui décrit ce phénomène est l'Eq. (10) dans [Hasegawa et al. \(1992\)](#). Le manteau et la surface sont tous les deux capables de diffuser, avec une efficacité moins importante dans le manteau (un rapport E_{diff}^m/E_{des} de 0.8 pour ce dernier en comparaison de 0.4 pour les espèces à la surface). Une étude récente de [Watanabe & Tsuge \(2020\)](#) a cependant montré que l'hypothèse de la diffusion des espèces, comprenant H_2 ou même des radicaux, restait trop peu contrainte pour véritablement expliquer le déplacement des molécules à la surface. En effet, les expériences en laboratoire ayant mesuré les barrières de diffusion permettent d'obtenir une valeur moyenne pour ces barrières, alors qu'en réalité d'après l'étude, il serait plus judicieux d'utiliser des distributions de valeurs, puisque les barrières de diffusion dépendent de la nature de la surface. Les auteurs présentent donc de nouvelles expériences qui permettraient d'obtenir ces distributions d'énergie, qui pourront plus tard être implantées dans le modèle.

Les réactions de surface sont faites via des mécanismes de Langmuir-Hinshelwood. Ces réactions se déroulent en plusieurs étapes, avec 1) l'adsorption des deux réactifs à la surface, 2) la diffusion d'un ou des deux réactifs à la surface, 3) la rencontre puis possiblement réaction si les deux réactifs sont sur le même site d'adsorption. Ces réactions sont dépendantes de la diffusion des espèces (thermique et par effet tunnel). En plus de ces réactions, le modèle prend également en compte la dissociation des espèces par les photons UV (dans le manteau et à la surface) et par les photons produits par interaction avec les CR et le milieu.

Calcul des mono-couches

Afin de calculer le nombre de couches composant le manteau autour du grain, nous allons décrire plus en détails le grain lui-même. Dans la version utilisée ici, les grains sont supposés de taille constante égale à $0.1 \mu\text{m}$ et représentés chacun par une sphère de rayon r . Une étude approfondie de l'impact de la taille des grains dans Nautilus a été décrite dans [Iqbal & Wakelam \(2018\)](#). Ces grains sont principalement formés de silicates. L'abondance des grains X_{grain} en g.cm^{-3} dans Nautilus est calculée par :

$$X_{grain} = \frac{4 \pi \rho_{grain} r^3}{3 dtg m_H} \quad (70)$$

Avec ρ_{grain} la densité du grain en g.cm^{-3} , m_H en g et dtg le rapport en masse poussière-sur-gaz (*dust-to-gas*), qui ici est de 1 pour 100 ([Bohlin et al. 1978](#)). Le manteau est donc décrit par la somme de mono-couches formées au temps t . On calcule le nombre de mono-couche comme suit :

$$N_{mono} = \sum (X_{surf} + X_{mant}) * \frac{X_{grain}}{N_{sites}} \quad (71)$$

Avec (X_{surf} et X_{mant} les abondances de toutes les espèces à la surface et dans le manteau respectivement et N_{sites} le nombre de sites d'adsorption par grain (défini par la surface du grain multipliée par la densité surfacique de sites).

2.5.3 Mécanismes de désorption

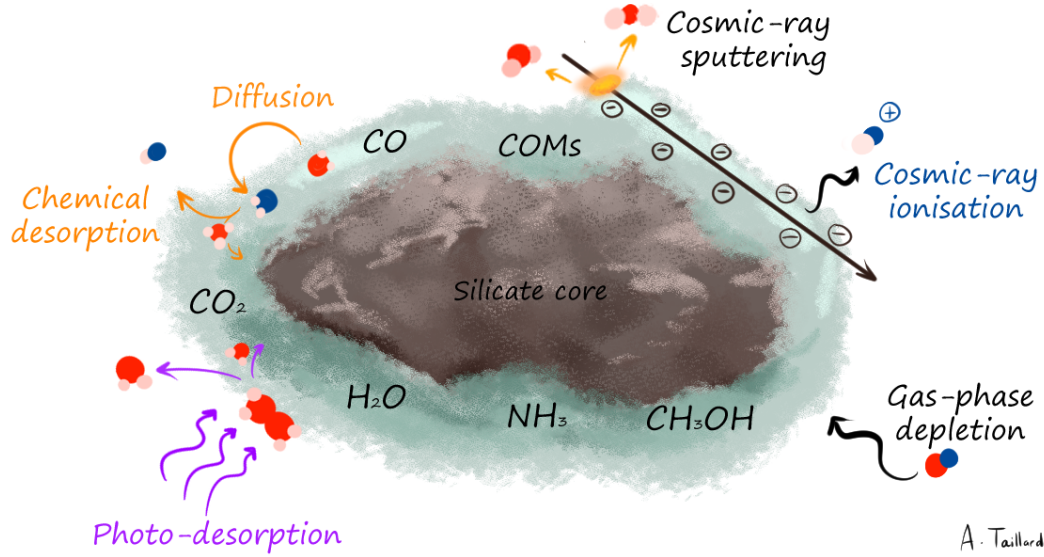


FIGURE 12 – Les différents mécanismes de désorption non-thermique décrits dans Nautilus.

Les mécanismes de désorption décrivent tous les processus permettant à une espèce se trouvant sur le grain, à la surface comme dans le manteau, d'être libérée vers la phase gazeuse. Ces mécanismes peuvent être thermiques ou non.

Désorption thermique

La désorption thermique se produit lorsque la température du grain T_{grain} (en K) est assez importante pour briser la liaison moléculaire de l'espèce i à la surface, représentée par $E_{des}(i)$ (en K). Ce taux $k_{des,th}$ (s^{-1}) est calculé par :

$$k_{des,th}(i) = \nu(i) e^{\frac{-E_{des}(i)}{T_{grain}}} \quad (72)$$

Où $\nu(i)$ est la fréquence caractéristique de vibration de l'espèce telle que :

$$\nu(i) = \sqrt{\frac{2n_{surf}E_{des}(i)}{\pi^2m(i)}} \quad (73)$$

Avec m la masse de l'espèce i , n_{surf} la densité de sites sur un grain. Cette fréquence est basée sur l'approximation (Tielens & Allamandola 1987) qui dit que la fréquence vibrationnelle perpendiculaire à la surface est égale à la fréquence de vibration parallèle à la surface. Cela mène à l'approximation que la liaison peut être représentée par un potentiel harmonique, malgré que ça ne soit pas une bonne approximation dans le cas d'une espèce physisorbée. L'énergie de liaison $E_{des}(i)$ et le taux de désorption thermique $k_{des,th}$ peuvent être obtenus par des expériences de laboratoire, en utilisant la méthode de TPD (Temperature Programmed Desorption). Ces expériences doivent être menées sous condition d'ultravide (avec des pressions inférieures à 10^{-9} mPa) avec un spectromètre de masse quadrupolaire. Il faut contrôler la température du substrat sur lequel seront déposées les molécules

cibles via un cryostat. On refroidit alors le substrat à une température constante et basse puis on dépose une quantité connue de molécules. Une fois les espèces déposées, on augmente la température jusqu'à pouvoir mesurer leur désorption via le spectromètre de masse. Selon le substrat utilisé (e.g., H₂O, ou surface de silicates, ou de carbone), l'énergie de liaison va dépendre de la quantité de molécules de l'espèce déposée à la surface et ce, de manière non-linéaire selon la géométrie de la molécule se trouvant à la surface. On obtient en laboratoire (Noble et al. 2012) des distributions d'énergie d'adsorption. Dans Nautilus, on fait l'approximation que ces valeurs d'énergie de liaison sont fixées pour celles pour une glace d'eau, et ne sont pas représentées par des distributions d'énergie mais par une valeur unique pour chaque molécule.

Désorption non-thermique - par réaction chimique

La désorption par réaction chimique (ou désorption chimique) se produit lorsque le produit d'une réaction est désorbé par un excès d'énergie de réaction, ou exothermicité. Garrod et al. (2006) a décrit ce phénomène en utilisant la théorie de Rice-Ramsperger-Kessel, selon une relation entre l'excès d'énergie produit et la probabilité de désorption P_{des} :

$$P_{des} = \left(1 - \frac{E_{des}}{\Delta E_{exo}}\right)^{s-1} \quad (74)$$

Avec ΔE_{exo} l'énergie libérée par la réaction exothermique et s le nombre de modes vibrationnels dans le système (molécule + liaison de surface). Pour les molécules diatomiques, $s = 2$ et pour toutes les autres, $s = 3N - 5$ où N est le nombre d'atomes dans la molécule, en prenant l'hypothèse qu'elle n'est pas linéaire et qu'elle forme une liaison supplémentaire à la surface. Dans Garrod et al. (2007), les auteurs ont fait la prescription supplémentaire sur la fraction f de réactions qui va désorber la molécule nouvellement produite, en prenant en compte la compétition entre le taux de désorption de l'espèce i et le taux de dissipation de l'énergie par le grain :

$$f = \frac{aP_{des}}{1 + aP_{des}} \quad (75)$$

Où $a = v(i)/v_{grain}$, rapport entre la fréquence caractéristique de l'espèce formée $v(i)$ et la fréquence à laquelle l'énergie est dissipée dans le grain v_{grain} . Ce facteur n'est généralement pas très bien contraint et varie entre 0.01 (le processus de désorption n'est pas très efficace) et 0.1 (désorption très efficace).

Plusieurs expériences de laboratoire ont eu pour but de contraindre l'efficacité de ces processus. Dans Dulieu et al. (2013), les auteurs ont mesuré la désorption chimique de plusieurs produits via l'hydrogénation successive de O₂ sur un silicate amorphe ou une surface de graphite. L'étude a montré qu'une fraction des espèces nouvellement formées sont désorbées en phase gazeuse et que certaines espèces sont sensibles au type de surface sur lequel la réaction se produit. Ils montrent d'ailleurs que c'est le cas pour les molécules d'eau formées, qui ne colleront pas à certaines surfaces puisque ces dernières ne présentent pas assez de sites de liaison pour les accueillir.

Cela a été confirmé par la suite (toujours pour O₂ et O₃) pour plusieurs températures de surface et plusieurs temps de déposition (Minissale & Dulieu 2014; Congiu et al. 2014; Minissale et al. 2015). A des températures plus basses et une couverture plus faible, les espèces chimiques n'ont pas le temps de réagir et 80% des espèces chimiques désorbées sont sous forme de O₂. Au contraire, si la

température de surface est suffisamment importante pour que les molécules puissent être mobiles, on observe que les molécules désorbées sont majoritairement O₃. Les auteurs soulignent cependant que pour ce système, le substrat composé de glace d'eau affecte l'efficacité de la désorption chimique dans la réaction O + O, puisque cette efficacité change lorsqu'ils ajoutent des molécules adsorbées de N₂ sur la surface.

Dans [Minissale et al. \(2016b\)](#), les auteurs ont étudié l'hydrogénation des espèces contenant du CO (CO, formaldéhyde H₂CO et méthanol) sur un substrat de HOPG ("*Highly Oriented Pyrolytic Graphite*") à 10 K. Ils ont obtenu des efficacités de désorption chimique faibles, proche du régime "moins d'une mono-couche" (avec des efficacités < 10%). Ils montrent également que l'efficacité de la désorption chimique est plus grande que l'hydrogénation et la formation de HCO ou H₂CO. Cette dernière molécule est fortement impactée par la compétition entre tous les processus de surface, sa désorption, les réactions d'addition de H menant à la création de CH₃OH et les réactions de soustraction de H qui mènent à la formation de CO. Dans ce papier, la limite d'efficacité de désorption chimique est peu contraignante (< 8%). En plus de cette étude, [Minissale et al. \(2016a\)](#) ont permis une nouvelle quantification du processus de désorption chimique en étudiant différents substrats, comme le graphite oxydé ou le silicate amorphe. Afin de reproduire les résultats obtenus en laboratoire, les auteurs ont fait l'hypothèse que l'énergie totale du système ΔH_R est partagée entre tous les degrés de liberté N, avec $N = 3 \times n_{\text{atomes}}$. De tous ces degrés de liberté, seulement l'énergie cinétique perpendiculaire à la surface permet aux nouvelles espèces formées de se désorber (si $E_{\text{kin}} > E_{\text{binding}}$). La fraction d'énergie gardée par le produit formé peut se traduire par :

$$\epsilon = \frac{(M - m)^2}{(M + m)^2} \quad (76)$$

Avec M la masse effective de la surface et m la masse du produit. La fraction d'énergie partagée dans le système est considérée comme diffusée sur tous les degrés de liberté tel que l'énergie totale disponible pour l'énergie cinétique perpendiculaire à la surface soit $\epsilon \Delta H_R / N$, avec ΔH_R l'énergie totale du système (eV) et $N = 3 \times n_{\text{atomes}}$ les degrés de liberté. En ajoutant l'hypothèse que seule la vitesse perpendiculaire à la surface correspond à une distribution en vitesse et température, on obtient $kT = \epsilon \Delta H_R / N$. La probabilité du produit d'avoir une énergie supérieure à l'énergie de liaison E_{des} peut alors s'écrire comme :

$$f = \exp\left(-\frac{\Delta E_{\text{des}}}{\epsilon \Delta H_R / N}\right) \quad (77)$$

Cette formule a donc été introduite dans la version de Nautilus utilisée pour cette thèse ([Wakelam et al. 2017](#)). Comme la désorption est dépendante de la surface, comme montré précédemment, et que la nature de la surface est mal contrainte, plusieurs hypothèses sont prises en compte : 1) la masse effective de la surface pour le grain nu est de 120 amu, 2) pour les 3 systèmes considérés dans l'étude, les valeurs implémentées dans le modèle sont : $f_{O+H} = 30\%$, $f_{OH+H} = 25\%$ et $f_{N+N} = 50\%$. Pour des surfaces d'eau, les f calculés sont divisés par 10 ([Minissale et al. 2016a](#)). L'une des principales conséquences de l'utilisation de ce formalisme mène a une désorption du méthanol (et autres espèces lourdes) moins importante qu'avec le formalisme utilisé par [Garrod et al. \(2007\)](#).

Désorption non-thermique - érosion par rayons cosmiques

Lorsqu'un CR provoque une collision avec un grain, l'impact va créer un transfert d'énergie et de mouvement menant à l'ionisation des électrons du grain. Par le transfert de mouvement, l'énergie va se propager dans le matériau et provoquer une ionisation des électrons secondaires (Leger et al. 1985). On a alors une trace d'ionisation formée à la surface (ou "sputtering"), sur plusieurs nanomètres, qui présente une structure de glace complètement amorphe. Dans le cas d'un solide infini, comme on les étudie en laboratoire, la température à l'impact augmente légèrement de l'ordre du mK. Mais si le solide est petit, comme c'est le cas dans l'ISM, selon l'énergie transmise et la capacité calorifique du grain, la température peut augmenter brutalement de l'ordre de 100 K. Si cette température est supérieure à la température de sublimation des espèces présentes dans la glace, ces dernières vont désorber n'importe où dans un rayon de 40 à 50 nm autour de la trace d'ionisation. Cette désorption permet l'évacuation de l'énergie transmise par le CR et le grain retourne progressivement à sa température initiale, c'est ce que l'on appelle le "whole grain heating" (Shen et al. 2004). La difficulté de quantifier l'efficacité de ces processus est qu'en laboratoire, il est difficile de mesurer la distribution d'énergie des électrons secondaires qui sont impactés. Le phénomène physique qui y est associé est la "thermalization", où une cascade d'énergie va tomber sur tous les degrés de liberté des molécules dans la glace et le grain. La majorité de l'énergie est transmise dans le grain (via les phonons) et la glace puis le reste vers l'extérieur (via la désorption des espèces sublimées), ce qui rend l'énergie disponible pour le chauffage total du grain très faible, l'énergie en excès est dissipée sur l'ensemble du grain, lors d'un chauffage local. La taille du grain et l'épaisseur de la glace sont également des facteurs à prendre en compte dans le calcul de cette efficacité, puisque l'érosion sera plus ou moins efficace selon la surface touchée.

Pour résumer, le processus complet se produisant par collision avec un CR peut donc se découper en deux temps : 1) l'érosion du grain, où un CR traverse la matière en laissant une trace d'ionisation (ou un cratère dans le cas de gros grain), 2) le chauffage du grain entier pour libérer l'énergie transférée par le CR. Les deux étapes permettent la désorption des molécules de surface, mais avec chacune une efficacité différente. Dans Nautilus, ces deux processus sont définis indépendamment l'un de l'autre. Nous commencerons ici par décrire l'érosion par les CR et le chauffage dans la partie suivante.

L'érosion causée par l'impact du CR est proportionnelle au carré de l'énergie de relaxation, ou de l'énergie perdue par unité d'épaisseur dE/dx (Dartois et al. 2015; Mejía et al. 2015). Les deux principaux contributeurs de ce processus sont les CR lourds et de basse énergie. Ce mécanisme a été ajouté dans Nautilus dans Wakelam et al. (2021a) en prenant l'hypothèse que la surface et les espèces du manteau peuvent être désorbées en même temps. La fragmentation des espèces chimiques n'est pas prise en compte même si on s'attendrait à en observer dans quelques cas. Le taux de désorption par érosion des CR est donné par :

$$k_{des,CR}(i) = (\zeta/3 \times 10^{-17}) \times Y_{eff} \times \pi \times r_{grain}^2 / N_{site} \quad (78)$$

Avec :

$$Y_{eff} = Y^\infty \times (1 - e^{(-N_{mono}/\beta)^\gamma}) \quad (79)$$

Où ζ est le taux d'ionisation de H_2 par les CR (s^{-1}), r_{grain} le rayon du grain et N_{sites} le nombre de site se trouvant sur un grain. Y_{eff} est l'efficacité de la désorption intégrée sur la distribution spectrale des CR, qui est une fonction du nombre de couches de glace N_{mono} (Dartois et al. 2018). Y^∞ est le taux d'érosion pour des glaces épaisses, β et γ sont deux paramètres associés à la nature

de la glace. Afin de définir les valeurs de ces derniers paramètres, on peut considérer deux cas de figure (les valeurs ont été déduites expérimentalement et proviennent respectivement de [Dartois et al. 2018](#); [Dartois et al. 2021](#)) : celui où les glaces d'eau dominant ($Y^\infty = 3.63$, $\beta = 3.25$ et $\gamma = 0.57$) et celui où les glaces de CO₂ dominant ($Y^\infty = 21.9$, $\beta = 56.3$ et $\gamma = 0.6$). L'érosion sur les glaces de CO₂ est beaucoup plus efficace que celle de l'eau comme le montre les valeurs de Y^∞ . Ce mécanisme doit être considéré dans le cas de grain de taille supérieure à 10 nm. A haute densité ($> 10^3 \text{ cm}^{-3}$), ce mécanisme de désorption est le plus efficace pour certaines espèces formées sur le grain (e.g., CH₃OH), comme montré dans [Wakelam et al. \(2021b\)](#).

Désorption non-thermique - chauffage stochastique par rayons cosmiques

[Hasegawa & Herbst \(1993a\)](#) a introduit un formalisme qui permet de calculer le taux de désorption par l'impact avec le CR en prenant en compte le temps de chauffage du grain, le taux d'évaporation thermique à cette température T_{pic} tel que :

$$k_{des,CR}(i) = f_{CR} \times k_{des,th}(T_{pic}) \quad (80)$$

Avec f_{CR} le rapport entre le temps de chauffage et le temps de refroidissement du grain. Les deux paramètres critiques ici sont f_{CR} et T_{pic} puisqu'ils dépendent de la taille du grain et de la nature de la surface ([Herbst & Cuppen 2006](#)). Le modèle prend actuellement les valeurs prescrites par [Hasegawa & Herbst \(1993a\)](#) qui sont $f_{CR} = 3.16 \times 10^{-19}$ et $T_{pic} = 70 \text{ K}$. Dans le modèle utilisé dans cette thèse, seulement une taille de grain ($r_{grain} = 0.1 \mu\text{m}$) est considérée, malgré les récentes études montrant l'importance de ce paramètre. Dans [Iqbal & Wakelam \(2018\)](#), les auteurs ont utilisé une distribution en taille de grains (de 0.005 à 0.25 μm) pour étudier l'impact sur les abondances modélisées. Ils ont confirmé que la déplétion des espèces en phase gazeuse à la surface dépend de la fréquence de collision entre les grains et ces espèces, elle-même proportionnelle à la section efficace des grains (i.e., leur taille) et la quantité de grains. Même si les petits grains sont moins sujets aux collisions, ils sont plus nombreux et permettent donc une déplétion plus importante que les gros grains. En coagulant, le nombre de petits grains diminue, entraînant également une baisse de régime de déplétion. Un autre impact sur la chimie est la température des grains : les gros grains auront une température moyenne plus basse que les petits. La température du grain entraîne donc une chimie légèrement différente, avec une diffusion plus efficace sur les petits grains. De même, l'efficacité de la désorption par interaction avec les CR sera différente : un petit grain sera sujet au *whole grain heating* et sublimera un grand nombre d'espèces gazeuses, là où les plus gros grains auront un chauffage local au point d'impact et seulement quelques molécules autour seront désorbées (un effet qui n'est pas encore dans Nautilus).

Désorption non-thermique - photodésorption

La photodésorption se produit lorsqu'un photon UV est absorbé par une espèce proche de la surface (dans une épaisseur de 2 à 5 mono-couches) et la libère vers la phase gazeuse. Ce photon doit avoir une énergie supérieure à l'énergie de liaison de la molécule pour produire sa désorption. Il est possible que cette énergie soit diffusée aux espèces voisines et permettent une désorption indirecte

d'autres espèces. Les espèces des couches sous la surface peuvent également être concernées, avec parfois l'absorption d'un photon qui mène à l'interaction avec les couches supérieures, la diffusion jusqu'à la surface et la désorption. Dans ce cas, il est possible que l'espèce décroche avec elle une espèce à la surface et la co-désorbe. Ce processus peut être très complexe et provoquer la fragmentation des espèces produites. C'est le cas du méthanol, où des expériences de laboratoire (Bertin et al. 2016; Cruz-Diaz et al. 2016) ont montré qu'après absorption d'un photon, il se brise et ses fragments (comme CO, CH₃, OH, H₂CO...) se désorbent. Ces fragments pourraient être recombinés dans le gaz où à la surface s'ils sont assez proches. Dans Nautilus, la dissociation et la désorption sont traitées individuellement. La photodésorption est dépendante de plusieurs paramètres. Les expériences de laboratoire (Bertin et al. 2012; Bertin et al. 2013) ont montré que l'énergie du rayonnement incident doit être suffisamment élevée pour séparer la molécule adsorbée de la surface (ces études se focalisaient sur CO et N₂ spécifiquement). En conséquence, la nature de la surface affecte, selon les énergies de liaison des molécules, l'efficacité de la désorption (par des processus indirectes ayant lieu dans les glaces pures et les mélanges). Par exemple, des glaces pures de CO sur une couche de glace d'eau seront plus efficacement désorbées qu'une glace où CO et H₂O sont mélangées. Mais dans le cas d'un mélange de CO et de N₂, la photodésorption de N₂ est bien plus efficace dans un mélange avec CO que dans une glace de N₂ pure. La recommandation de Bertin et al. (2013) est donc d'avoir un taux assez faible et identique pour toutes les espèces. Ainsi, Ruaud et al. (2016) a introduit le taux de désorption par photons UV pour toutes les espèces pour le champ de rayonnement interstellaire moyen comme :

$$k_{des, UV}(i) = \chi F_{UV} \exp(-2A_V Y_{pd} \frac{\pi r_{grain}^2}{N_{site}}) \quad (81)$$

Et pour les photons secondaires générés par les rayons cosmiques :

$$k_{des, UV-CR}(i) = F_{UV-CR} Y_{pd} \frac{\pi r_{grain}^2}{N_{site}} \quad (82)$$

Avec χ le facteur d'échelle pour le champ de rayonnement UV et son flux $F_{UV} = 1.0 \times 10^8$ photons.cm⁻².s⁻¹ (Öberg et al. 2007). Pour la deuxième équation, $F_{UV-CR} = 10^3$ photons.cm⁻².s⁻¹ pour le champ UV secondaire (induit par les CR). Y_{pd} donne l'efficacité de la photodésorption avec $Y_{pd} = 10^{-4}$ molécule/photon pour toutes les espèces (Andersson & van Dishoeck 2008). N_{site} est le nombre de sites d'adsorption du grain avec $N_{site} \sim 1.2 \times 10^6$ dans Nautilus. La force du champ de radiation UV induit par les CR est proportionnel à la valeur du taux d'ionisation des CR en paramètre d'entrée du modèle. Le facteur 2 de l'exponentielle de la première équation provient de la dépendance de l'extinction UV relative à A_V , prise de Roberge et al. (1991). Basé sur les recommandations de Bertin et al. (2013), nous utilisons un Y_{pd} de 10^{-4} (relativement faible) pour toutes les espèces.

2.5.4 Paramètres du modèle

Afin de reproduire les observations, nous avons créé des grilles de modèles à partir des paramètres physiques observés. Ces paramètres physiques sont les paramètres initiaux d'entrée du modèle, et dans cette étude, ils sont fixes dans le temps. Ces paramètres observés sont la température, la densité

d'hydrogène et l'Av.

Les grilles de paramètres seront détaillées dans les chapitres éponymes des cœurs denses. Nous allons cependant détailler ici le rôle de chaque paramètre dans Nautilus et la physico-chimie qui en découle.

Température

La température dans Nautilus concerne deux paramètres : celle du gaz T_{gaz} et celle du grain T_{grain} . Celles-ci vont avoir des conséquences sur la chimie des deux milieux. En effet, une température plus élevée dans le gaz ou dans le grain va permettre de former certaines molécules en permettant de sauter certaines barrières énergétiques de réaction. Cependant, dans le cas de certaines molécules, ces barrières sont trop élevées pour permettre leur formation. La température dans le grain a un impact beaucoup plus importante sur la chimie globale. Le grain servant de catalyseur, une température plus élevée va permettre de diffuser plus facilement les espèces les plus lourdes. Par exemple, l'oxygène atomique et le CO sont capables de diffuser sur la surface du grain à des températures supérieures à 12 K et vont donc pouvoir plus facilement former des glaces de CO₂ en rencontrant les atomes de carbone. Lorsque la température est plus faible, les atomes d'hydrogène, plus légers, pourront diffuser beaucoup plus rapidement et former des glaces de H₂O. La température du grain permet aussi de définir la capacité de certaines espèces dans le gaz à se coller à la surface, la diffusion de celles-ci à la surface et dans le manteau et leur désorption dans le gaz.

Il est possible d'utiliser la simple approximation de $T_{gaz} = T_{dust}$ mais nous avons ici adopté une approximation décrite par [Hocuk et al. \(2017\)](#) que nous appellerons dans la suite "température d'Hocuk". Ces paramètres sont basés sur des données observationnelles de température de poussière en fonction de l'Av. La température du gaz, elle, sera fixée selon les valeurs obtenues via *Herschel* (voir les sections pour chaque cœur dense). Cette approximation est permise puisque la température du gaz à haute densité est égale à celle de la température ; à plus basse densité, cette approximation n'est plus correcte mais la température adoptée (ici, celle d'*Herschel*). Que cette dernière fut été plus élevée ou plus basse que la véritable température du gaz, cela n'influerait de toute façon pas la chimie qui a lieu dans le gaz. Cette température se calcule comme suit :

$$T_{Hocuk} = [11 + 5.7 \tanh(0.61 - \log_{10}(Av))] \chi_{UV}^{1/5.9} \quad (83)$$

Où χ_{UV} est la force de champ UV de Draine ([Draine 1978](#)), dans notre cas, ce champ UV moyen est égal à 1. Ce choix de valeur est justifié par le fait que cette valeur représente le champ moyen dans la galaxie et que dans le cas de nos deux sources, aucune source UV n'a été identifiée proche de nos cœurs (pas de gaz émettant en H α ni de signature de PDR). Dans l'Appendix G.1. de [Hocuk et al. \(2017\)](#), les auteurs montrent qu'en effet, une valeur de 1 correspond à une température de poussière proche de 10 K, comme c'est le cas de nos sources. De plus, au vu de nos valeurs d'Av (> 5), le champ effectif $\chi_{UV,eff}$, avec $\chi_{UV,eff} = \chi_{UV,0} \exp^{-Av}$ et $\chi_{UV,0}$ le champ UV dans la source, devient négligeable.

Densité d'hydrogène

La densité d'hydrogène joue un rôle significatif dans la chimie. En effet, de plus hautes densités et de plus hauts Av permettent de faciliter la formation de la molécule la plus abondante de l'univers, H₂, en se formant à la surface des grains. L'augmentation de la densité permet aussi l'auto-écranage

et permet de supprimer la photodissociation de H_2 . Plus généralement, ces hautes densités vont favoriser la formation de molécules plus complexes à la surface du grain. Les glaces seront plus riches en COMs riches en hydrogène (eg. formaldéhyde (H_2CO), acide formique (H_2CO), méthanol (CH_3OH)). En conséquence, on observe le collage (accrétion) plus efficace du gaz sur les grains. Les surfaces deviendront riches en espèces chimiques, en comparaison aux régions peu denses et diffuses. Dans les grilles de modèles utilisées, cette densité de H (particule/ cm^{-3}) est obtenue par les cartes d'*Herschel* et la méthode de Bron (voir Section 2.4.2) et en utilisant simplement l'équivalence :

$$n(\text{H}) = 2 * n_{\text{H}_2} \quad (84)$$

Extinction visuelle A_v

L'extinction visuelle, A_v , représente la diminution du flux lumineux par l'absorption et la diffusion des poussières dans un milieu. L' A_v est très important pour la chimie en impactant les taux de photodésorption, notamment les réactions découlant de l'interaction avec les photons UV. Quand $A_v > 1$, on observe également moins l'ionisation du carbone sous forme atomique et une meilleure formation de CO dans le gaz et CO_2 sur le grain, H_2 est moins dissocié et l'hydrogène sur la surface augmente (Esplugues et al. 2016, observations dans les régions de photodissociation - PDR).

Ionisation par les rayons cosmiques

En plus des paramètres physiques déduits des différents cœurs observés dans ce travail, nous avons du ajouter des contraintes supplémentaires afin de comprendre l'impact des CR sur la désorption de certaines espèces chimiques.

Un paramètre supplémentaire dans nos grilles de modèle est le taux d'ionisation par les rayons cosmiques. Aux A_v aussi haut considérées dans ces régions (typiquement des $A_v > 5$), les CR sont les principaux moyens de ionisation des glaces. La valeur standard considérée dans les modèles gaz-grains est de $1.3 \times 10^{-17} \text{ s}^{-1}$ provenant de Prasad & Huntress (1980). Mais comme montré récemment dans Padovani et al. (2022), cette valeur est grandement affectée par la nature de l'environnement de la source observée. Dans ce papier, les auteurs font le bilan des observations sur lesquelles ils superposent un calcul basique de dépopulation et d'atténuation des CR par le gaz dans plusieurs milieux à densité de colonne de H_2 différentes. Même s'il manque des observations aux A_v considérés ici dans notre étude, il est possible de déduire une pente dans la figure de l'appendice C.1 de cet article. On peut alors prédire une valeur de $3 \times 10^{-17} \text{ s}^{-1}$ pour les $A_v > 30$. Nous avons donc considéré deux mesures possibles pour le taux d'ionisation par les CR : $3 \times 10^{-17} \text{ s}^{-1}$ pour modéliser les régions à faible A_v et $1 \times 10^{-17} \text{ s}^{-1}$ pour les régions à haut A_v .

Taux d'érosion par les CR

Dans la version de Nautilus que nous avons utilisé, nous avons ajouté un paramètre supplémentaire sur la nature de la surface à considérer : le taux d'érosion par les CR. Comme exploré plusieurs fois dans la littérature (Noble et al. 2013; Boogert et al. 2015), la composition de la glace va changer dans un même environnement selon l'avancement chimique de la source et/ou son extinction visuelle. En effet, l' A_v permet de protéger les espèces dans la phase solide de certains rayonnements

TABLE 1 – Sets of chemical models.

Number	Name	Sputtering yield	ζ (s ⁻¹)
Set 1	Low yield and CR	H ₂ O-rich ices	10 ⁻¹⁷
Set 2	Low yield and high CR	H ₂ O-rich ices	3 × 10 ⁻¹⁷
Set 3	High yield and low CR	CO ₂ -rich ices	10 ⁻¹⁷
Set 4	High yield and CR	CO ₂ -rich ices	3 × 10 ⁻¹⁷

qui pourraient les désorber (comme les rayons UV dans les disques protoplanétaires enfouis ou les rayons-cosmiques dans les cœurs denses). On peut également retrouver des glaces plus riches en CO₂ dans des cœurs où le *catastrophic freeze-out* a commencé, avec une déposition plus importante de CO sur les glaces qui va favoriser la formation du CO₂. Nautilus présente donc deux *sputtering yields* selon le scénario d'évolution chimique, un pour de l'eau pure et un pour une glace mixte.

Pour résumer, les différentes grilles de modèles sont trouvables dans la Table. 1.

2.5.5 Distance de désaccord

Une fois que les modèles ont tourné, on compare les abondances modélisées aux observations afin d'estimer l'écart entre les deux. Comme les abondances modélisées varient en fonction du temps, il faut déterminer à quel pas de temps précis les observations sont le mieux reproduites. Pour ce faire, on définit une fonction de distance de désaccord, décrite dans [Wakelam et al. \(2006\)](#), telle que :

$$d(t) = \frac{1}{N_i} \sum_i |\log(X_{\text{mod},i}(t)) - \log(X_{\text{obs},i})| \quad (85)$$

Où t est le temps (années), N_i le nombre d'espèce moléculaire participant à la comparaison, $X_{\text{mod},i}$ sont les abondances modélisées de l'espèce i au temps t et $X_{\text{obs},i}$ l'abondance moyenne observée de l'espèce i . Une distance de désaccord égale à 1 signifie que la différence moyenne entre l'abondance modélisée et l'abondance observée est d'un facteur 10. Le plus petit d représente alors le meilleur accord entre les deux et donc nous donne le meilleur temps t à utiliser.

3 | L429-C

La thèse a débuté dans un cadre de préparation aux données JWST. Le but premier fut de créer des cartes d’abondance de gaz afin de pouvoir les comparer avec les futures cartes de glace de certaines régions. Un cœur en particulier avait été ciblé par les proposals de cycle I du JWST : LDN 429-C, que l’on nommera par la suite L429-C. Ce cœur est le tout premier cœur où des glaces de méthanol ont été observées avec *Spitzer/Keck* (Boogert et al. 2011). Ma thèse a donc débuté au moment où les premiers proposals étaient sélectionnés et celui de L429-C, écrit en collaboration avec Jacqueline Keane et Adwin Boogert de l’Institute for Astronomy d’Hawai’i, n’a pas été retenu. Cependant, les observations de la phase gazeuse, avec NOEMA et le 30m de l’IRAM, ont elles été effectuées. Nous avons donc pu faire une étude inédite, bien que réduite à 4 observations de glace, de la désorption non-thermique du méthanol dans un cœur dense. Dans ce chapitre, nous allons présenter les résultats de cette étude publiés dans Taillard et al. (2023) (voir Chapitre 7), avec une description de la source, les molécules détectées dans la phase gazeuse, la dynamique dans le nuage, les abondances obtenues, les modèles chimiques reproduisant la source et enfin l’estimation de la désorption non-thermique du méthanol dans les glaces.

3.1 Description de la source

L429-C est un cœur dense ($N_{\text{H}_2} = 10^{22} \text{ cm}^{-2}$) froid ($T < 18 \text{ K}$) isolé, situé à 200 pc dans le Rift d’Aquila (Stutz et al. 2009). Il possède une extinction visuelle de plus de 35 mag au centre (Crapsi et al. 2005; Caselli et al. 2008), permettant le développement de glaces épaisses et chimiquement riche. Ce cœur présente un profil très avancé chimiquement et dynamiquement avec une possibilité d’effondrement très proche (Stutz et al. 2009). D’un point de vue chimique, il est caractérisé par un fort degré de déplétion de CO dans le centre du cœur, avec une baisse de l’abondance 15 à 20 fois moins importante que l’abondance canonique (i.e., l’abondance chimique maximale disponible dans le milieu interstellaire) (Bacmann et al. 2002; Caselli et al. 2008). Le fractionnement isotopique de l’azote présente également une déplétion de ^{15}N comme dans d’autres cœurs prestellaires comme L1544 (Redaelli et al. 2018). Plusieurs molécules ont été détectées dans ce cœur : HCO, H_2CO et CH_3OH (Bacmann et al. 2002, 2003; Bacmann & Faure 2016) avec le 30m de l’IRAM. Dynamiquement, Stutz et al. (2009) a proposé, en utilisant des observations à $70 \mu\text{m}$ avec *Spitzer*, que le cœur est sur le point de s’effondrer. Les arguments soulevés par les auteurs sont la température très froide dans le cœur ($< 12 \text{ K}$), une absorption à $70 \mu\text{m}$ exceptionnellement forte avec un profil très compact et un gradient de densité très abrupt. Ces dernières conditions extrêmes ne devraient plus permettre ni à la pression thermique, ni aux turbulences, de supporter le globule. Le champ magnétique requis pour compenser la pression nécessaire au maintien du cœur devrait être très importante. S’il existait, il serait observable grâce à la diffusion ambipolaire. Tous ces éléments semblent mener à un effondrement très proche. Lee et al. (2004) et Crapsi et al. (2005) ont positionné dans leurs études L429-C comme “possiblement en effondrement” grâce aux spectres de plusieurs transitions moléculaires. Cependant les auteurs ont soulevé la possibilité que les asymétries de raies pouvaient être dues à d’autres types de mouvements.

Enfin, comme énoncé précédemment, L429-C est le premier cœur dense où CH_3OH a été détecté

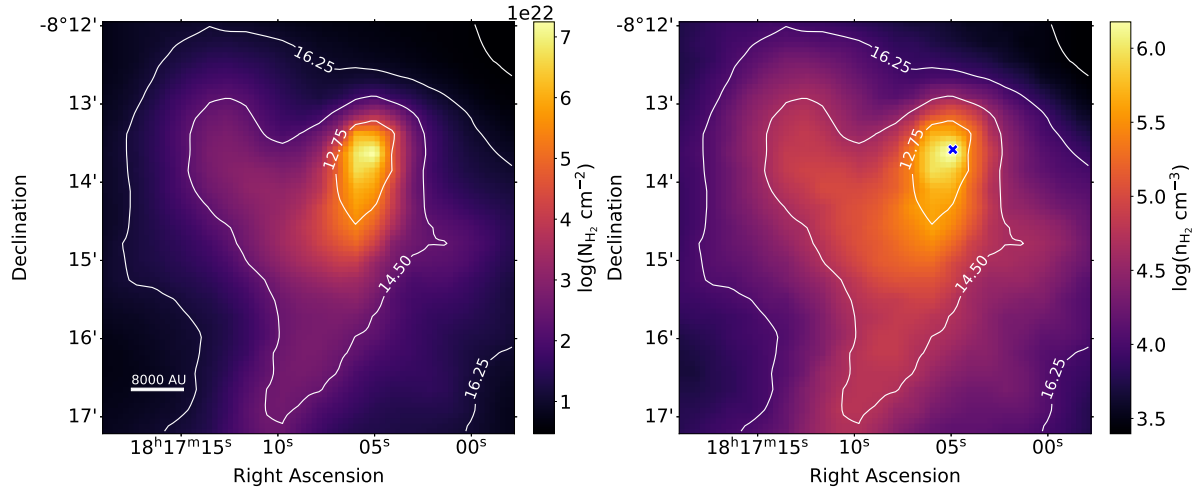


FIGURE 13 – Gauche : Densité de colonne de H_2 (N_{H_2} en cm^{-2}) dans L429-C calculée à partir des cartes d'épaisseurs optiques d'*Herschel*. La position du maximum de continuum est représentée par la croix bleu foncé. Les autres croix représentent les différentes positions où l'on a étudié les spectres d'émission moléculaire (voir la Figure 15). Droite : Carte de densité volumique de H_2 (n_{H_2} in cm^{-3}). Sur les deux cartes, les contours blancs représentent la température en Kelvin du cœur mesurée par *Herschel*.

dans les glaces par Boogert et al. (2011). Dans cette étude, sur 16 autres cœurs denses provenant du *survey c2d* (Evans et al. 2009), les auteurs ont observé 32 étoiles de fonds dans la gamme de 1 à 25 μm avec le télescope Keck et *Spitzer*. Ils ont pu identifier les bandes de H_2O , CO_2 et CH_3OH , NH_4^+ , HCOOH , CH_4 et NH_3 . Les densités de colonne obtenues pour l'eau varie entre 2.85 et 3.93 $\times 10^{18}$ cm^{-2} , avec des abondances de 43.12%, 6.13-9.08% et 6.34-11.58% pour CO_2 , NH_4^+ et CH_3OH respectivement par rapport à H_2O .

Dans la Figure 13 sont présentées les cartes de densité de colonne H_2 et celle de la densité volumique de H_2 , toutes deux avec les contours de température. Ce cœur dense a une forme allongée, avec la position du pic de continuum de poussière représenté par la croix bleu foncé.

3.2 Observations

Dans le cas de L429-C, nous avons utilisé le 30m de l'IRAM en *short-spacing*, couplé à NOEMA en mode mosaïque. Pour cette source, les observations ont eu lieu en hiver 2020, pendant 27 heures. Le mode mosaïque couvrait une région de $300'' \times 300''$ avec un lobe synthétique d'environ $7''$. Le mode mosaïque était centré sur la position R.A. = $18^{\text{h}}17^{\text{m}}08^{\text{s}}.00$, DEC. = $-8^{\circ}14'00$ (J2000). Les données ont été réduite en utilisant le logiciel CLIC, la procédure standard de l'IRAM pour créer des tables UV.

Les cartes de *short-spacing* sont légèrement plus grandes que celles de NOEMA, avec une taille de $360'' \times 360''$ et un lobe d'environ $25''$. Les canaux de vitesse sont de 0.2 km.s^{-1} , chaque cube de données en comprend 152 après avoir retiré le bruit. Le niveau de bruit (rms) varie entre 0.1 et 0.2 K selon les molécules. Les trois bandes de fréquence observées avec le 30m sont les suivantes : 94.5 - 102.2 GHz (E090), 109.8 - 117.8 GHz (E090) et 168 - 169.8 GHz (E150). Ces fréquences visaient en

priorité les molécules de méthanol, des isotopologues de CO (^{12}CO , ^{13}CO , C^{17}O et C^{18}O) ainsi que H_2S . La liste complète des molécules détectées se trouve dans la Table 2. Nous avons donc obtenu des cubes de données en 3 dimensions, dont deux dimensions spatiales et une dimension spectrale (la fréquence). Chaque cube possédait, après réduction, 79×79 pixels.

Les cubes de données de NOEMA n'ont révélé aucun signal sur aucune fréquence. Si ces données ne sont pas exploitables, elles nous ont cependant permis de déterminer qu'il n'y avait d'émission moléculaire (donc de sous-structure) en dessous de $\sim 30''$, révélant un cœur dense probablement loin d'être en effondrement. Ce point sera discuté dans la section suivante.

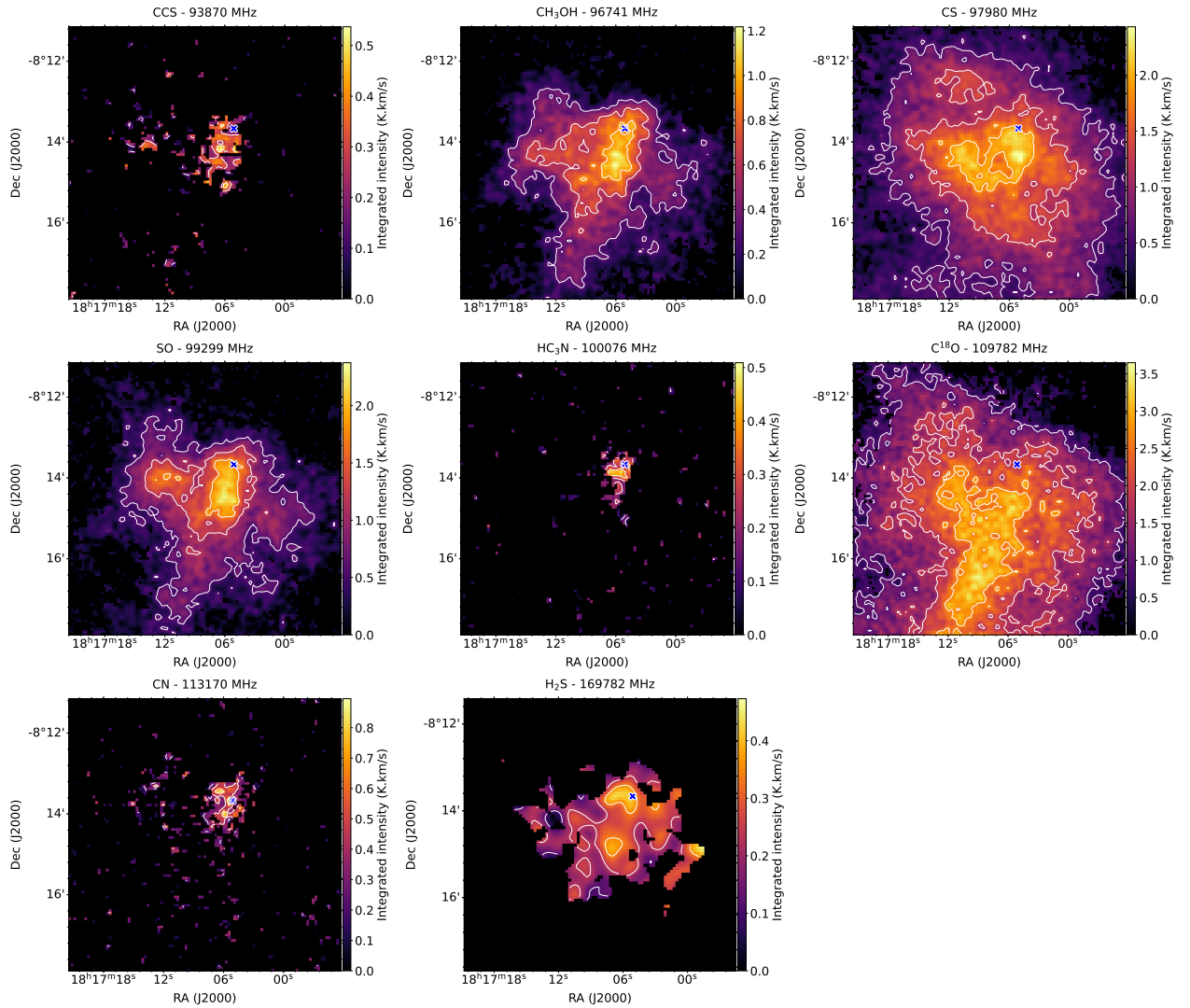


FIGURE 14 – Cartes d'intensité intégrée pour chaque molécule détectée. Dans le cas d'une molécule à plusieurs transitions, seule la transition la plus brillante est montrée. La croix bleu foncé représente le pic de continuum de poussière.

TABLE 2 – Liste des raies détectées et leurs paramètres spectroscopiques associées. E_{up} est l'énergie du niveau supérieur relative au niveau fondamental, g_{up} est la dégénérescence du niveau supérieur et A_{ij} est le coefficient d'Einstein de la transition (proviennent de [Schöier et al. \(2005\)](#)).

Molécule	Fréquence (MHz)	Transition	E_{up} (K)	g_{up}	A_{ij} (s^{-1})
CCS	93870.1	(6-7)	19.9	17	3.8×10^{-5}
CH ₃ OH	96739.3	(2-1)	12.5	5	2.55×10^{-6}
CH ₃ OH	96741.3	(2,0)-(1,0)	7	5	3.40×10^{-6}
CH ₃ OH	96744.5	(2,0)-(1,0)	20.1	5	3.40×10^{-6}
CS	97980.9	(2-1)	7.1	5	1.67×10^{-5}
SO	99299.8	(1-0)	9.2	7	1.12×10^{-5}
HC ₃ N	100076.5	(11-10)	28.81	69	0.77×10^{-4}
C ¹⁸ O	109782.1	(1-0)	5.27	3	6.26×10^{-8}
¹³ CO	110201.3	(1-0)	5.29	3	6.29×10^{-8}
C ¹⁷ O	112358.7	(1-0)	5.39	3	6.69×10^{-8}
CN	113144.1	(1.0,0.5,0.5)-(0.0,0.5,0.5)	5.43	2	0.10×10^{-4}
CN	113170.1	(1.0,0.5,1.5)-(0.0,0.5,0.5)	5.43	4	0.51×10^{-5}
CN	113488.1	(1.0,1.5,1.5)-(0.0,0.5,0.5)	5.43	4	0.67×10^{-5}
CN	113490.9	(1.0,1.5,1.5)-(0.0,0.5,0.5)	5.44	6	0.11×10^{-4}
CN	113499.6	(1.0,1.5,0.5)-(0.0,0.5,0.5)	5.44	2	0.10×10^{-4}
CN	113508.8	(1.0,1.5,1.5)-(0.0,0.5,0.5)	5.44	4	0.51×10^{-5}
CN	113520.4	(1.0,1.5,0.5)-(0.0,0.5,1.5)	5.44	2	0.13×10^{-5}
¹² CO	115271.2	(1-0)	5.53	3	7.20×10^{-8}
H ₂ S	168762.7	(1,1,0)-(1,0,1)	27.9	9	2.65×10^{-5}

3.3 Résultats

3.3.1 Transitions moléculaires et cartes d'intensité intégrée

Le nombre total de molécules détectées s'élève à 11 pour 18 raies différentes, avec un pic d'intensité supérieur à 3 fois le bruit local de chaque cube de données. Les molécules (et transitions associées) n'ayant pas été détectées et qu'on aurait pu attendre sont les suivantes : OCS (9-8), HNCO (4,0-4,4), et c-C₃H₂ (4,3-1,0). Pour les molécules détectées, la plupart des émissions sont étendues et ne sont pas centrées sur le maximum du continuum de poussière. C¹⁸O, SO, CS et CH₃OH présentent une émission en forme de cœur, semblable à l'émission de H₂ (voir la Figure 13). Leur pic d'émission intégrée se trouve dans la partie droite supérieure du cœur, sous le pic de continuum de poussière qui est représenté par la croix bleu marine sur la figure. Les autres molécules (CCS, HC₃N, H₂S, et CN) ont des émissions plus faibles mais localisées sur ce maximum de continuum. Ces cartes sont présentées dans la Figure 14.

3.3.2 Analyse de la cinématique

L'analyse de la cinématique de cette source se fait au travers des raies d'émission : leur largeur, leur apparence et leur déplacement par rapport à leur fréquence de laboratoire. Par exemple, dans

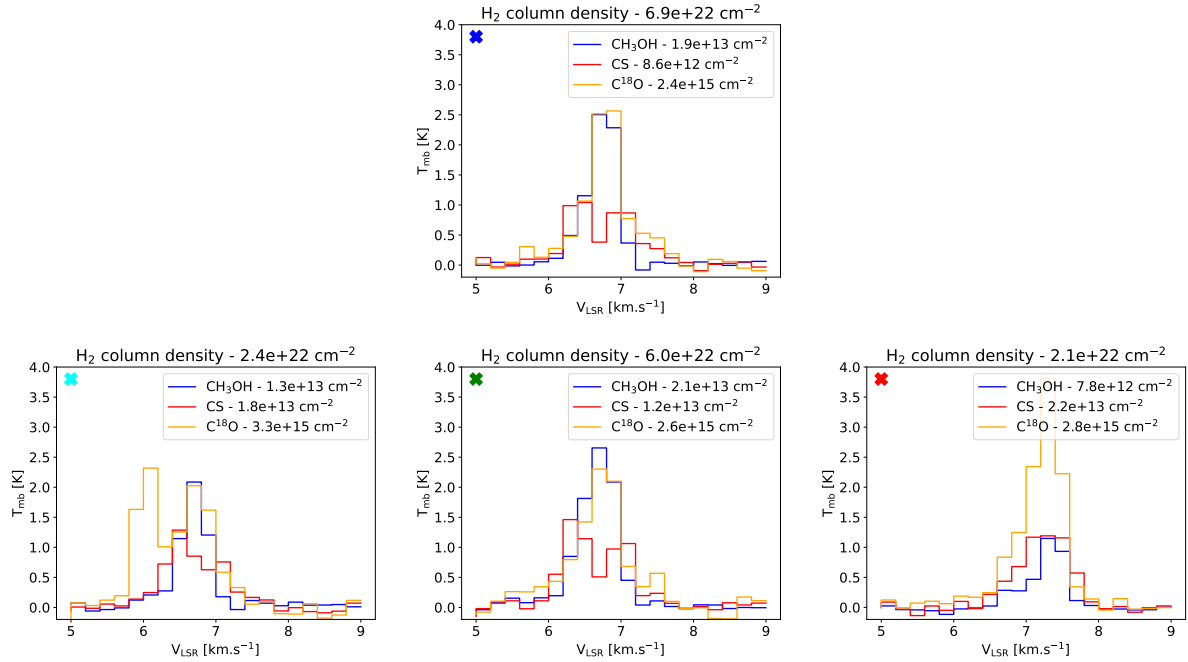


FIGURE 15 – Spectres de CS à 97.980 GHz (rouge), de CH₃OH à 96.741 GHz (bleu) et C¹⁸O à 109.782 GHz (jaune) aux quatre positions indiquées par des croix de couleurs dans la Figure 13. Les positions de chaque spectre sont indiquées par les croix colorées dans le coin en haut à gauche de chaque case. Les densités de colonne de chaque molécule à la position, en plus de la densité de colonne de H₂ en titre de chaque case, sont indiquées.

la Figure 15, nous présentons les spectres de C¹⁸O, CS, and CH₃OH à 4 positions, indiquées par les croix de couleur dans la Figure 13.

Dans le cas des molécules détectées dans ce nuage, toutes présentent un profil de vitesse complexe qui varie avec leur localisation spatiale. On présente les cartes en canal de vitesse de 4 molécules différentes dans les Figures. 16 et 17, respectivement le couple C¹⁸O et SO et le couple CS et CH₃OH.

On s'est intéressé en particulier à C¹⁸O qui possède un profil particulier et dont la transition est optiquement mince. Cette transition permet donc de sonder les structures en vitesse. Le spectre présente trois composantes en vitesse, qui peuvent chacune être ajustée avec une Gaussienne. La composante 1 se trouve entre 5.95 et 6.25 km.s⁻¹, la composante 2 entre 6.25 et 7 km.s⁻¹ et la composante 3 entre 7 et 7.6 km.s⁻¹. La composante 1 présente la largeur la plus grande mais l'intensité la moins forte. La composante 2 correspond à la v_{LSR} du nuage, à 6.7 km.s⁻¹ (voir Spezzano et al. 2020) et trace bien la densité de colonne de H₂. Afin de mieux visualiser la distribution spatiale de l'émission, nous avons intégré le signal sur les 3 différents intervalles de vitesse. Dans la Figure 18, les contours résultants de cette intégration sont montrés (avec la carte de moment 1, qui correspond à la distribution en vitesse). La composante basse (bleue) et la composante haute (rouge) sont seulement localisées sur les parties à gauche et à droite de la carte respectivement, alors que la composante centrale se propage sur toute la carte, se superposant même sur les émissions bleue et rouge. Les autres molécules présentent également des structures en vitesse mais moins évidentes. En par-

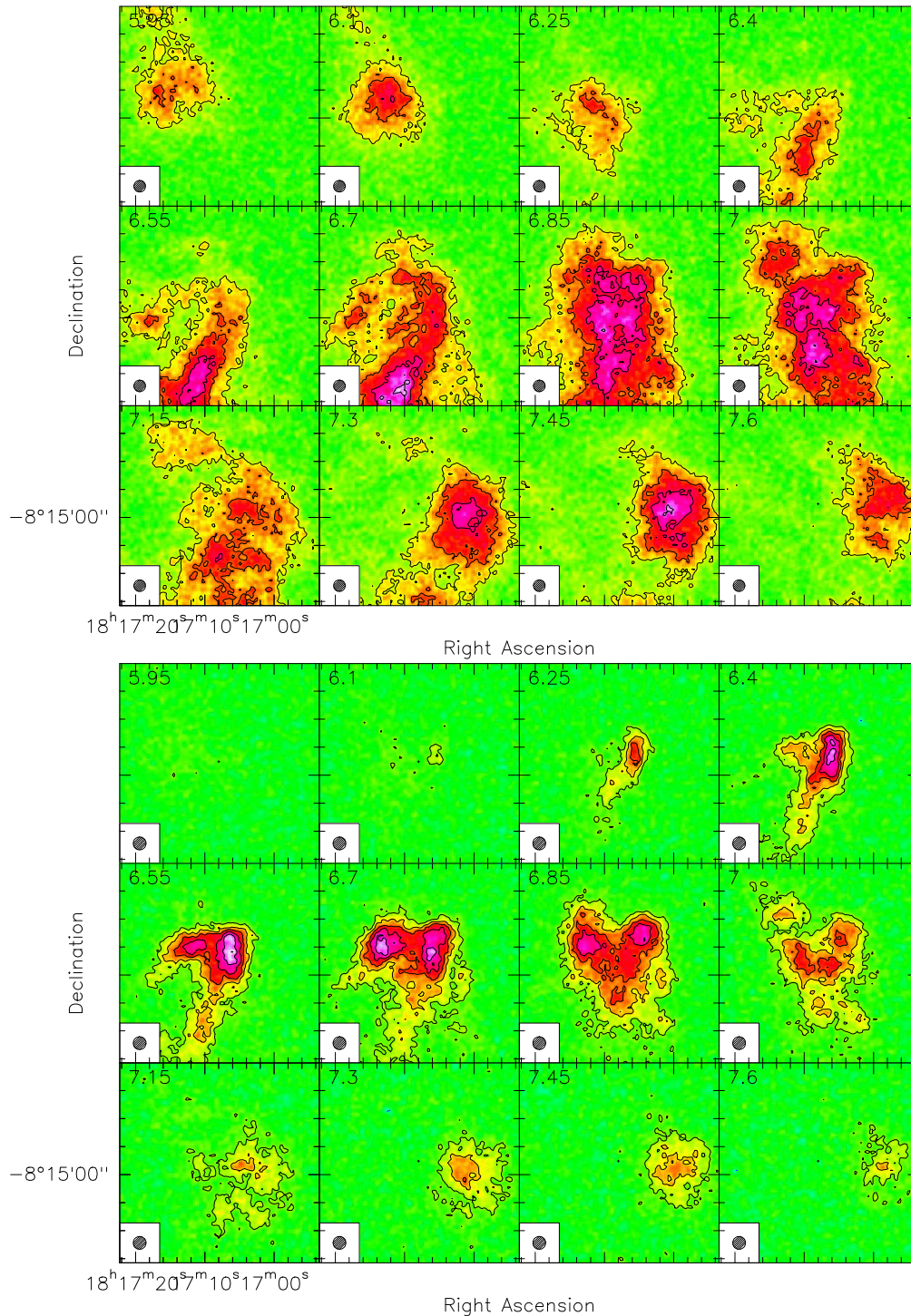


FIGURE 16 – Carte en canal de vitesse de $C^{18}O$ (109782 MHz) (haut) et SO (99299 MHz) (bas). Le lobe du télescope est indiqué en hachuré en bas de chaque case. Les contours représentent 25, 50 et 75% de l'intensité (contours extérieurs vers intérieurs). Le code couleur est en K.

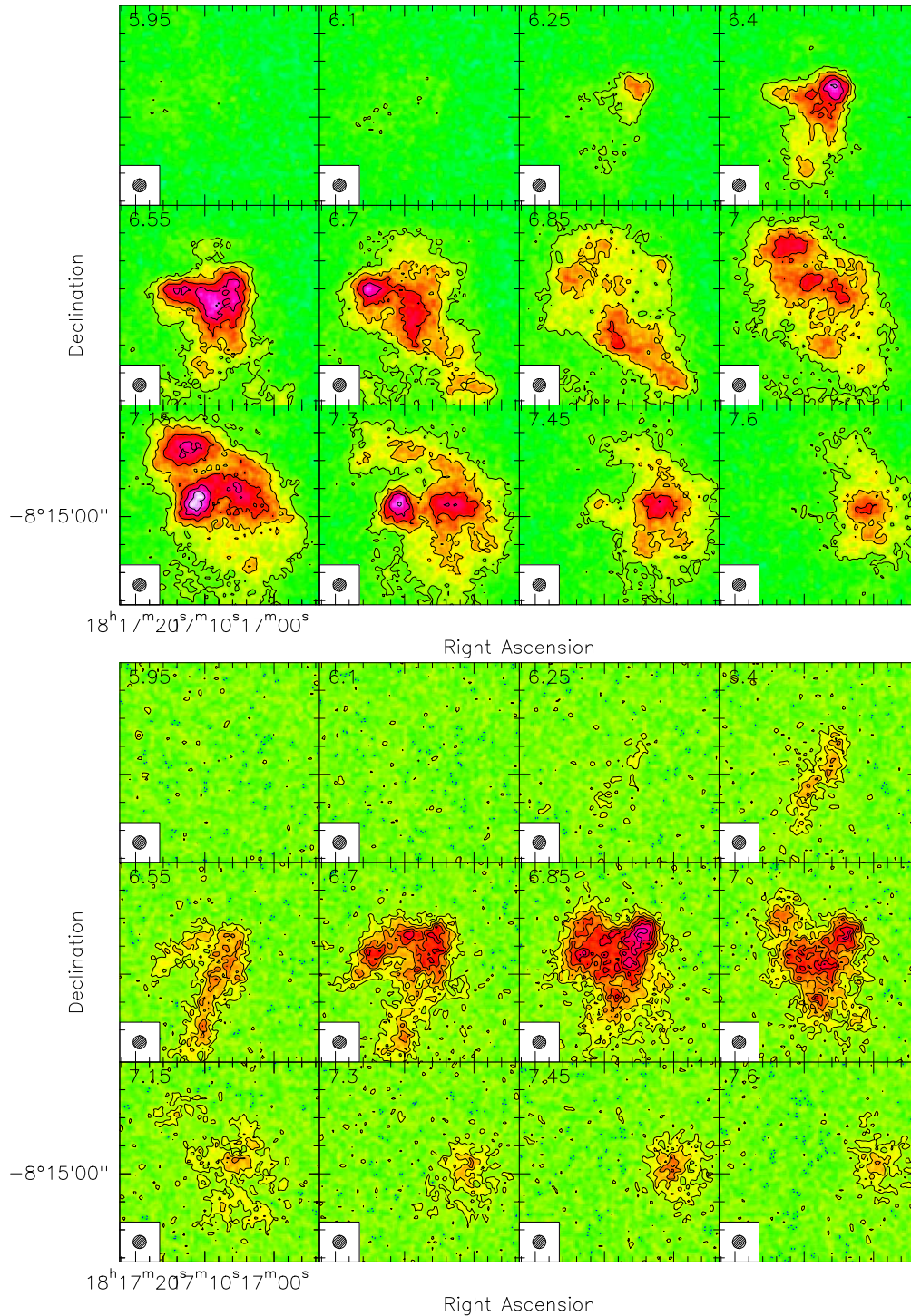


FIGURE 17 – Carte similaire à la Figure 16 mais pour CS (97980 MHz) (haut) et CH₃OH (96741 MHz) (bas)

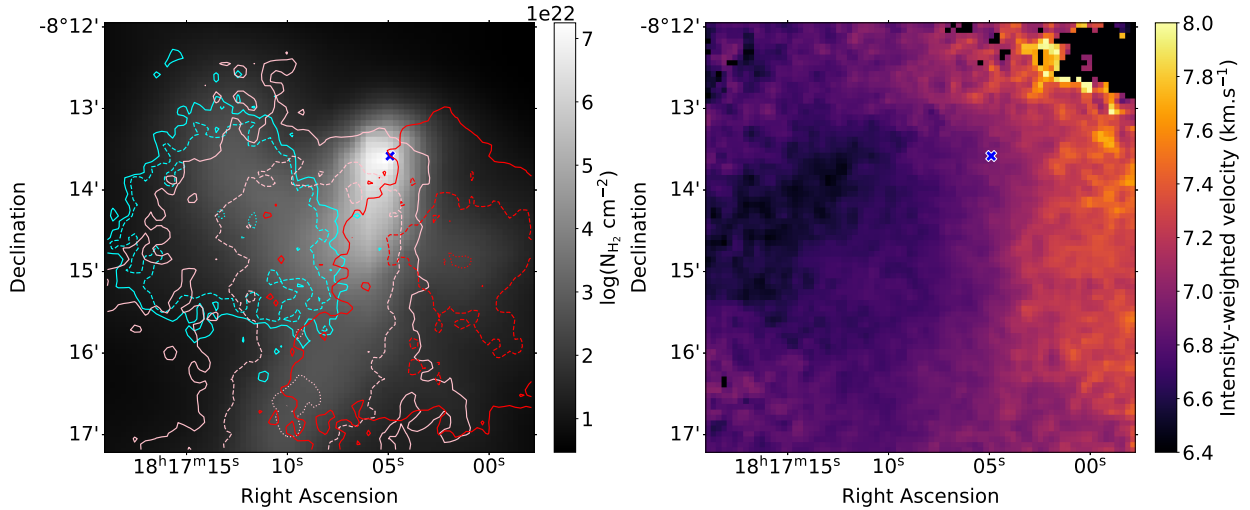


FIGURE 18 – Distribution en vitesse du nuage. Gauche : Intensité intégrée de $C^{18}O$ superposés à la carte de N_{H_2} d’*Herschel* (en niveaux de gris). Les contours montrent les trois composantes en vitesses détaillées dans le texte. Cyan : $5.95 - 6.25 \text{ km.s}^{-1}$ (avec les niveaux d’intensités comme suit : en pointillés à 0.4 K , en tirets à 0.5 K et en ligne pleine à 1 K), rose : $6.25 - 7 \text{ km.s}^{-1}$ (en pointillés à 1 K , en tirets à 1.5 K et en ligne pleine à 2.4 K), rouge : $7 - 7.6 \text{ km.s}^{-1}$ (en pointillés 1 K , en tirets à 1.5 K et en ligne pleine à 2 K). Droite : Carte de vitesse (moment 1) du $C^{18}O$, la croix bleu foncé représente le pic de continuum de poussière.

ticulier SO qui ne possède pas la composante 1 mais possède bien les composantes 2 et 3 (avec l’émission la plus forte sur la composante 2, comme on peut le voir sur la Figure 16 en bas). CS possède une composante faible qui pourrait être interprétée comme la composante 1, entre 5.2 et 6.1 km.s^{-1} . Pour CS, la composante 2 est la plus intense (voir la Figure 17, haut). La plupart de l’émission de méthanol peut être ajustée à une simple composante (la 2) mais à droite de la carte, une composante 3 très faible peut être aperçue (voir la Figure 17, bas). Enfin, les autres molécules présentent des émissions faibles à la composante 2. Cette structure en vitesse que l’on peut apercevoir sur les émissions les plus fortes et les plus étendues semble être ce que [Lee et al. \(2004\)](#) et [Crapsi et al. \(2005\)](#) attribuaient à la signature d’un effondrement “probable”. Seulement, les auteurs dans ces études n’avaient qu’un spectre à la position du pic de continuum pour [Lee et al. \(2004\)](#) et qu’une petite carte autour pour [Crapsi et al. \(2005\)](#). Cela ne représentait donc pas la totalité de la structure en vitesse et ne suffisait donc pas à en déduire un effondrement en cours. [Crapsi et al. \(2005\)](#) relevait une possible émission en double pics dans la transition de N_2H^+ (1-0) vers la position du cœur. Cependant, ce spectre ne présentait pas d’asymétrie dans l’aile bleue, signature particulière et attendue d’un effondrement en cours. [Redaelli et al. \(2018\)](#) ont relevé une largeur de raie anormale dans les spectres de N_2H^+ . Les auteurs proposent que cela peut être du à des effets environnementaux (turbulences fortes par exemple) ou simplement la présence d’objet diffus sur la LDV. En rejoignant la conclusion de [Crapsi et al. \(2005\)](#), cette asymétrie semble donc mener vers la piste des composants multiples plutôt que sur un mouvement fort associé à l’effondrement.

Nous avons donc enquêté sur la possibilité que L429-C puisse être le résultat d’une collision dite “nuage HI - nuage”. En ne se concentrant que strictement sur le point de vue dynamique, les com-

posantes multiples sur les spectres peuvent être dus à un mouvement de matière convergent plutôt qu'à de la turbulence. Dans un scénario de collision de nuage, l'un des nuages est en mouvement vers l'observateur (bleu) et l'autre s'en éloigne (rouge), convergent alors vers le pic de continuum de poussière, entraînant la formation d'une région bien plus dense. Dans [Bonne et al. \(2020\)](#), les auteurs ont étudié la formation du filament de Musca et de son origine à partir d'une collision de nuage : un nuage HI qui aurait rencontré une région bien plus dense. Cette hypothèse est soutenue par plusieurs arguments, notamment que le résultat d'une telle collision formerait un filament dense avec l'apparition de CO, en conséquence des chocs de matière. Cette émission de CO serait alors décalée vers le bleu en comparaison de l'émission HI. Un résultat clef est que la matière glisserait alors vers le cœur, sous l'action d'un champ magnétique courbé qui accélérerait la matière. Cela se manifesterait dans le diagramme PV du CO (comme montré dans [Arzoumanian et al. \(2018\)](#)), avec l'apparition d'un "V" dans le diagramme de vitesse. La courbure du champ magnétique peut être observé grâce au satellite *Planck*. Dans le cas du filament de Musca, les lignes de champ magnétique apparaissent perpendiculaires au filament et étant courbées par ce dernier.

Dans le cas de L429-C, grâce aux données de [Planck Collaboration et al. \(2020a,b\)](#), nous avons pu voir que les lignes de champ magnétique sont orientées perpendiculairement à l'axe haut-droit du nuage. Cependant, en regardant la direction générale du champ magnétique, nous ne pouvons pas dire si ces lignes sont courbées par le cœur. En effet, la résolution des données de *Planck* à 353 GHz ([Aghanim et al. 2020](#)) est trop faible en comparaison de la taille du cœur et ne permettent pas d'observer une courbure. On peut cependant se pencher sur l'apparition ou non de la signature en V dans le diagramme PV du CO. Dans la [Figure 19](#), nous ne voyons pas cette signature mais plutôt deux composantes qui convergent vers la position du cœur. Nous n'observons pas non plus une augmentation de la température qui pourrait être due à des chocs. Nous pouvons conclure que des données de champs magnétiques à une résolution plus fine permettraient d'avoir une précision sur les possibles effets dynamiques forts, comme des mouvements convergents. Nous ne pouvons donc pas non plus en déduire si le cœur dense est le résultat d'une collision avec un nuage et nuage HI. L'analyse cinématique semble tout de même nous indiquer des mouvements à grande échelle du gaz.

Pour conclure cette partie analysant la cinématique du nuage, il est important d'insister sur la nécessité d'étudier les profils de raie des molécules observées. La formation des étoiles est fortement influencée par ces mouvements internes et il se pourrait très bien que L429-C ne forme jamais d'étoile malgré les conditions réunies. De plus, dans le cas de notre méthode pour déduire l'abondance, nous faisons l'hypothèse que les raies analysées sont optiquement minces. Pour L429-C, nous avons vérifié que c'était le cas via les cartes d'opacité optique en sortie de RADEX. Aux vues des résultats, notre hypothèse est donc valide pour les molécules présentées ici. Nous avons également considéré que toutes les composantes en vitesse présentées précédemment font bien partie du même nuage, vu que les vitesses centrales de chacune des composantes ne sont pas assez éloignées de la v_{lsr} du système. Nos profils de raie ne semblent pas non plus présenter des profils d'auto-absorption, ce qui veut dire que l'intensité intégrée de chaque composante est utilisée dans notre calcul d'abondance sans avoir de perte de signal.

3.3.3 Abondances moléculaires observées

La méthode pour obtenir les abondances moléculaires peut être trouvée dans le [Chapitre 2.4](#). La position du pic de continuum de poussière est caractérisée par une baisse d'abondance dans la plupart des molécules observées (voir les [Figures 20](#) et [21](#)). Nous obtenons une abondance en CO

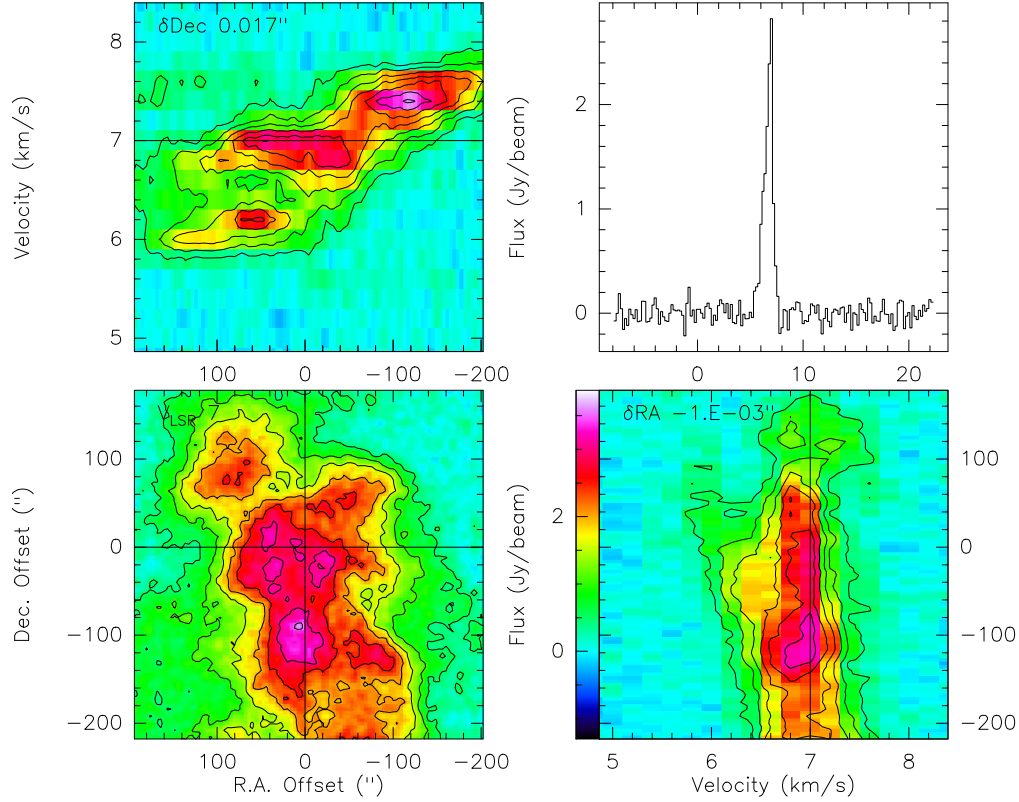


FIGURE 19 – En bas à gauche : l’intensité intégrée de $C^{18}O$. En haut à gauche : le diagramme PV obtenu en intégrant les vitesses selon l’axe horizontal. En bas à droite : le diagramme PV obtenu en intégrant les vitesses selon l’axe vertical. En haut à droite : le spectres associé au croisement des deux axes.

(par rapport à H_2) jusqu’à 10^{-4} dans les parties extérieures de la carte et environ 1.7×10^{-5} sur le continuum de poussière. Cette abondance est calculée à partir de l’abondance de $C^{18}O$ (multipliée par un facteur 557 (Wilson 1999)), optiquement fine. On calcule un facteur de déplétion f , $f = f(X_{\text{can}}/X_{^{12}CO})$ avec $X_{\text{can}} = 8.5 \times 10^{-5}$ l’abondance canonique de ^{12}CO , déterminée par Frerking et al. (1982). À la position du pic de continuum, on trouve un facteur de déplétion de $f^{^{12}CO} = 4.91$, montrant une sous-estimation de l’abondance en comparaison de l’abondance canonique. Ce qui est presque trois fois plus petit que le facteur obtenu par Bacmann et al. (2002), où les auteurs ont trouvé une valeur de $f^{^{12}CO} = 15.5$ dans L429-C. Cette différence peut être expliquée par la différence de température utilisée pour déterminer la densité de colonne de CO et/ou de la densité de H_2 choisie. En utilisant une température de ~ 11 K, les auteurs ont trouvé $f = 5$ (et pour ~ 7 K, $f = 3$), plus proche de notre valeur. La densité de colonne de H_2 qu’ils ont utilisé est plus élevée de $1.4 \times 10^{23} \text{ cm}^{-2}$ (la nôtre est de $N_{H_2} = 7.2 \times 10^{22} \text{ cm}^{-2}$), produisant donc une abondance de ^{12}CO plus basse que la nôtre.

CS semble dépléter sur l’entièreté de la structure en densité, en forme de cœur. Son abondance maximale peut être trouvée en haut de la carte, avec une valeur maximum de 1.1×10^{-8} , alors que l’abondance au pic de densité est de 1.5×10^{-10} , soit presque 75 fois plus basse.

SO présente un profil similaire, bien que son maximum d'abondance se situe dans la partie gauche de la carte, avec une différence de 7.5 entre le maximum d'abondance (2.5×10^{-9}) et pic de densité (3.3×10^{-10}).

L'intensité de H_2S étant très faible, les valeurs d'abondance trouvées ici sont moins fiables que celles des autres molécules. Le maximum est obtenu au bord de la carte, environ 3.5×10^{-9} , alors que le pic de continuum présente une abondance de 4.9×10^{-11} .

Comparée aux autres espèces, la carte de CH_3OH est bien plus intéressante. Son abondance est homogène dans l'entièreté du nuage. On trouve le maximum d'abondance dans la partie gauche de la carte (mais pas au bord), avec une valeur d'environ 8.5×10^{-10} . L'abondance au pic de poussière est cependant inférieure à deux fois cette valeur, à environ 4.2×10^{-10} .

La carte de CN a été calculée à partir de plusieurs raies détectées mais seulement sur une petite région autour du cœur. On remarque tout de même une déplétion sur le pic de continuum avec une abondance d'environ 2.9×10^{-12} , alors que son maximum se trouve juste en-dessous du cœur, avec une valeur de 1.3×10^{-11} .

L'abondance de CCS est maximum sur la partie gauche de sa carte, dans l'une des trois régions tracées par l'intensité, avec une valeur de 6.1×10^{-11} . Sur le pic de continuum de poussière, l'abondance est d'environ 4.5×10^{-11} . On remarque tout de même que CCS ne présente pas de déplétion et son abondance est pratiquement constante.

HC_3N montre peu de variation dans son abondance, avec une abondance maximum de 4.4×10^{-12} , proche de la valeur obtenue au pic de continuum, avec une valeur d'environ 2.3×10^{-12} .

3.3.4 Abondances moléculaires en fonction des paramètres physiques

Les Figures 22 et 23 montrent l'abondance de chaque molécule à chaque pixel comme fonction de trois paramètres physiques (température, densité et extinction visuelle). Les abondances de CO, CS, SO et H_2S décroissent avec la densité, l'extinction visuelle et la température, comme attendu puisque ces trois paramètres sont liés. Les valeurs d'abondance plus basses pour ces quatre molécules sont observées sur le pic de continuum, là où la densité est la plus forte. La pente qui décroît le plus vite est celle de H_2S , qui baisse de 3 ordres de grandeur sur l'intervalle de 3×10^4 à 10^6 cm^{-3} . CO a la variation la plus basse parmi ces quatre molécules avec une différence de moins d'un ordre de grandeur entre le maximum et le minimum. Pour CCS, CN et HC_3N , les abondances semblent constantes mais fautes d'un manque de point sur toute la gamme de densité, il n'est pas possible de les comparer aux autres molécules. Il est à noter que l'abondance de CN présente trois groupes de valeur, montrant un faible intervalle de densité, qui est causé par l'échantillonnage des grilles théoriques de RADEX.

3.4 Modèles chimiques

Le modèle chimique utilisé, Nautilus, est décrit dans le Chapitre 2.5.

3.4.1 Paramètres du modèle

Pour comparer les observations et leurs paramètres physiques, nous avons créé des grilles de modèles permettant de les reproduire au mieux. Dans la Figure 24, nous montrons la relation observée entre la densité de colonne de H_2 , la température et l'extinction visuelle, toutes déterminées des données d'*Herschel*. À noter que les valeurs présentées ici sont plus étendues que la région couverte

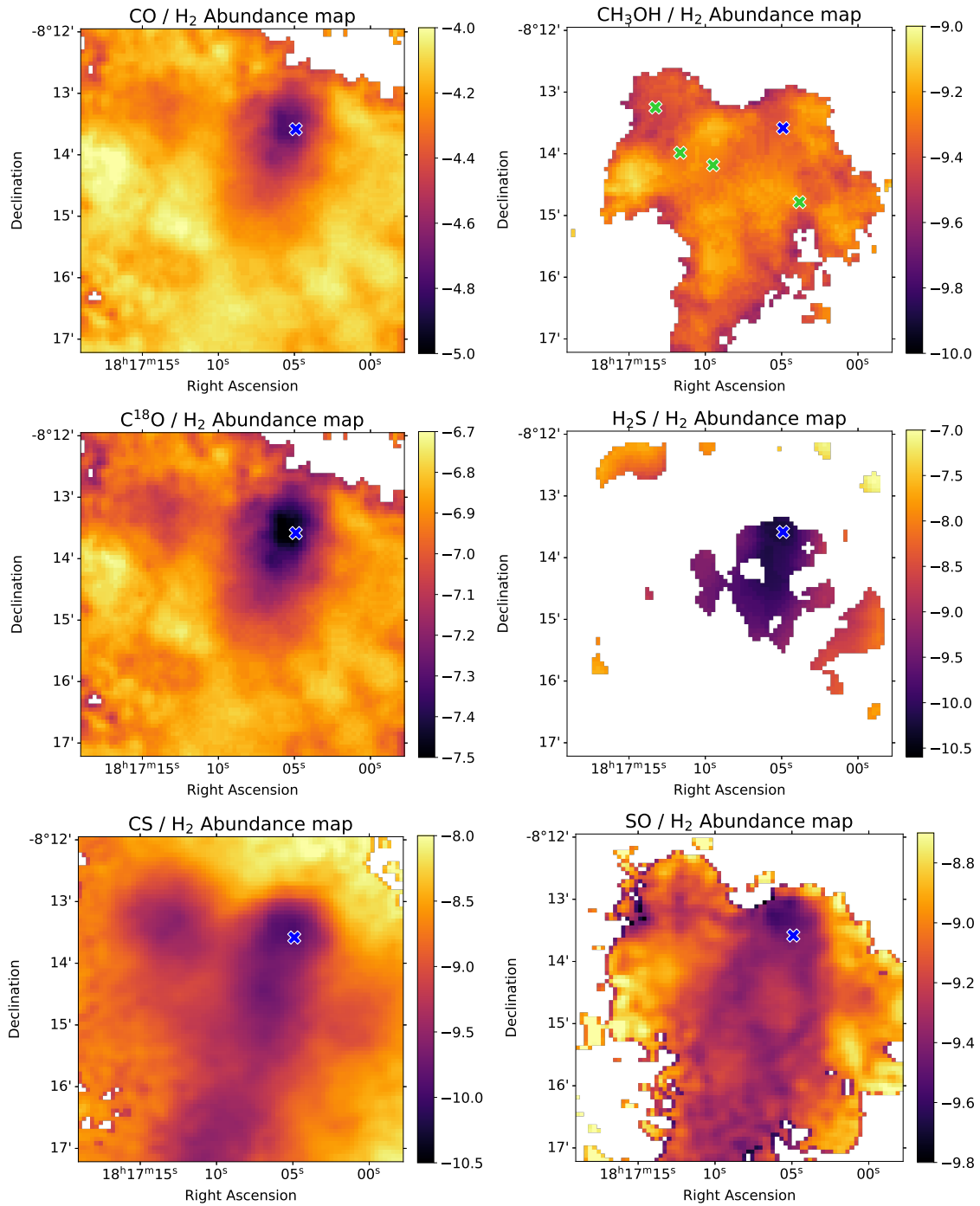
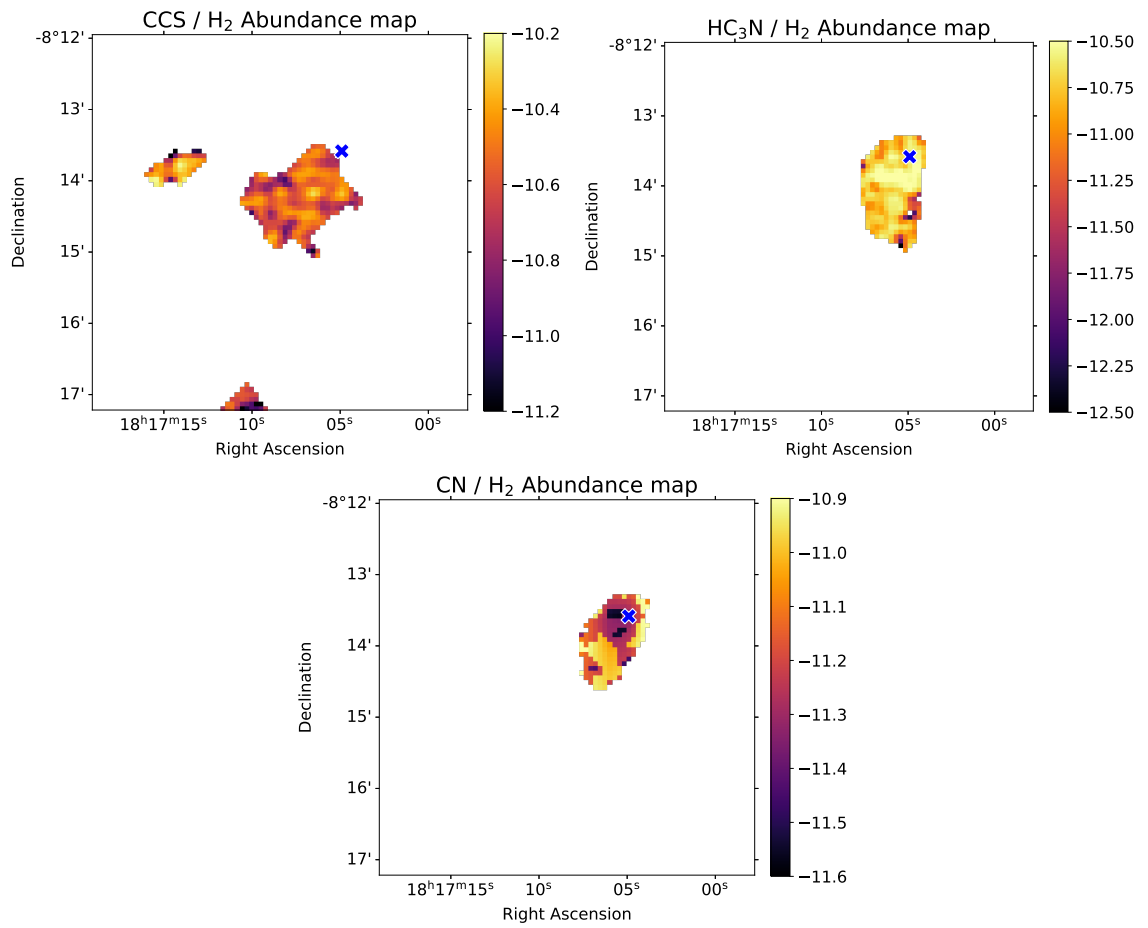


FIGURE 20 – En échelle logarithmique, les abondances en phase gazeuse des molécules observées par rapport à H_2 . Les croix vertes sur la carte du méthanol correspondent aux positions des observations de glace effectuées par [Boogert et al. \(2011\)](#). La croix bleu foncé représente le pic de continuum de poussière. À noter que la croix blanche dans H_2S est un trou dans les données.

FIGURE 21 – Même description que la Figure 20, mais montrant les cartes de CCS, HC₃N et CN.

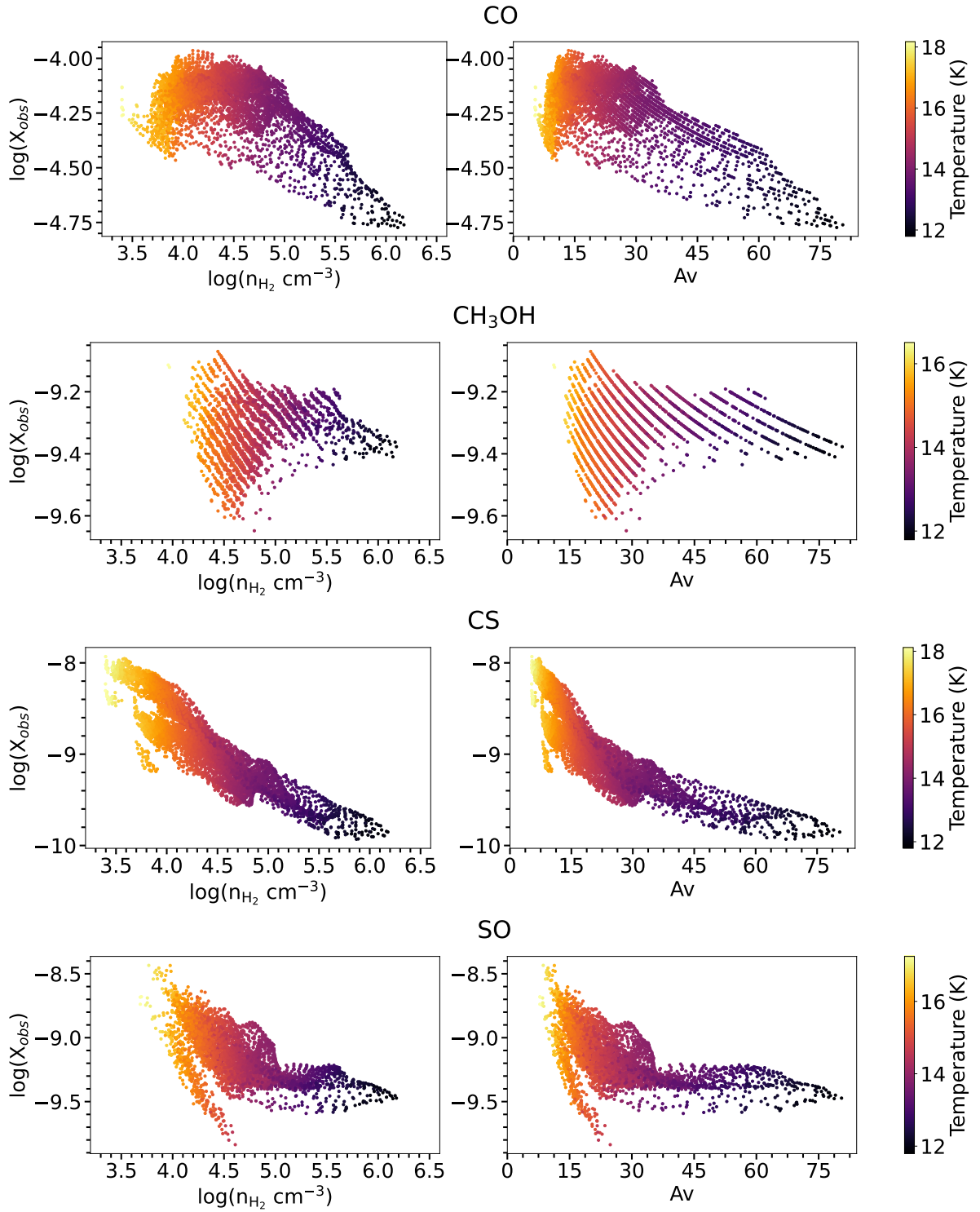
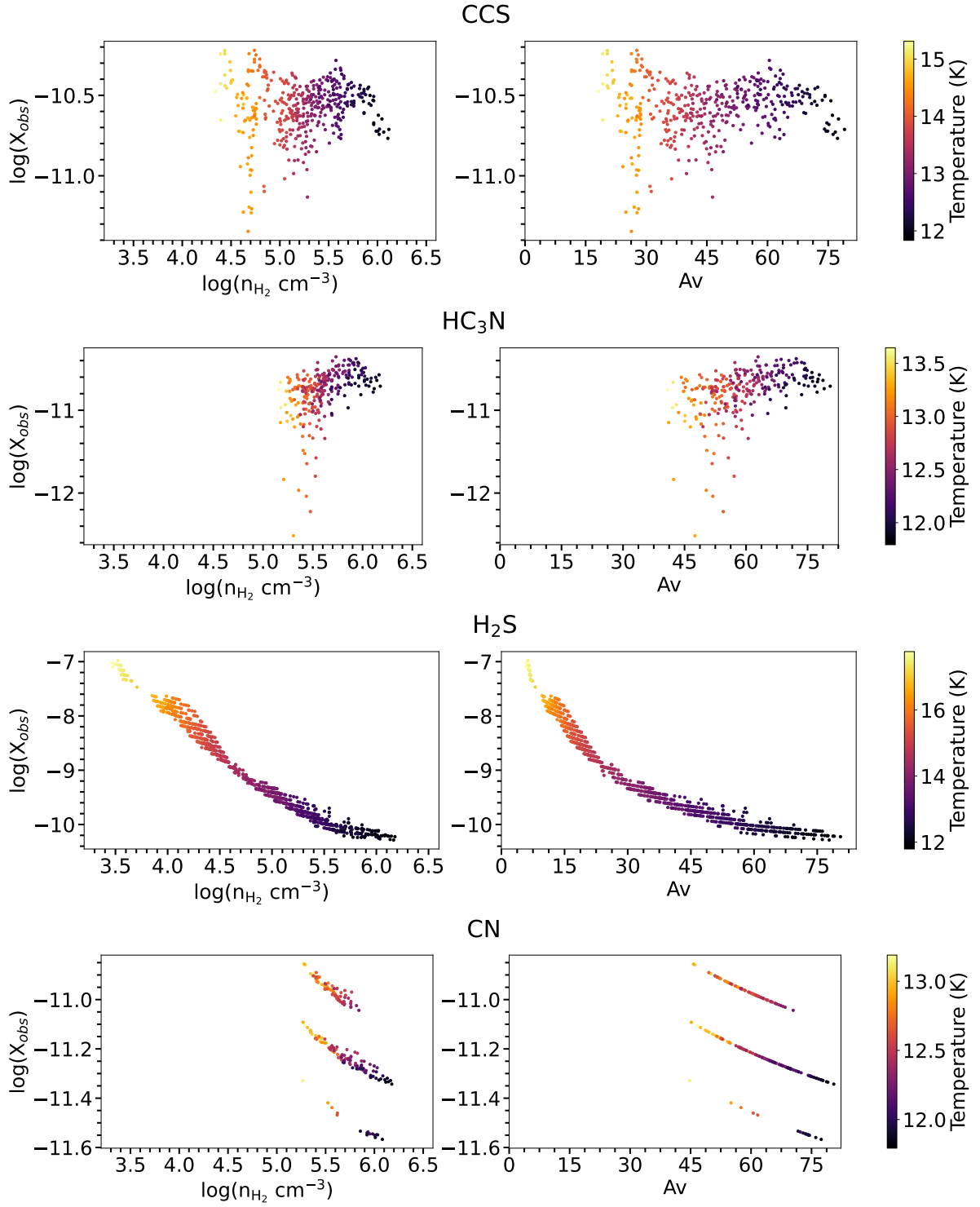


FIGURE 22 – À gauche, les abondances en fonction de la densité volumique (en logarithme). À droite, l'abondance en fonction de l'extinction visuelle A_v .

FIGURE 23 – Môme description que la Figure 22, mais pour CCS, HC₃N, H₂S et CN.

par l'abondance de méthanol. Nous faisons donc le choix de créer des grilles de paramètres qui permettent de couvrir ces valeurs afin de pouvoir étudier au mieux la désorption non-thermique de cette molécule. Nous avons donc créé une grille de 8 valeurs dans un espace logarithmique pour la densité de H_2 , variant de 3×10^4 à 10^6 cm^{-3} . Pour ces 8 densités de colonne, nous y associons la température du gaz et de la poussière, l'extinction visuelle. S'ajoutent deux valeurs différentes pour les taux d'érosion par les CR et deux valeurs pour le taux d'ionisation par les CR, ζ . En se basant donc sur la région où est détecté le méthanol, l'extinction visuelle varie de 15.2 à 77.7 et les températures de 11.8 à 15.7 K. Comme la température de gaz n'a pas pu être déterminé via l'analyse de raie spectrale, nous utiliserons la valeur déduite des données d'*Herschel*. Là où une incertitude de quelques Kelvin ne fait pas une grande différence dans la modélisation chimique du gaz, c'est le cas pour la chimie des grains. Cependant la température déduite des données d'*Herschel* est toujours $> 11 \text{ K}$, même aux Av les plus élevées. Or, il est courant que les estimations de température par les émissions FIR surestiment très souvent la vraie température des gros grains, car l'émission des grains plus chauds et plus petits dans les enveloppes diffuses peut être mélangées dans le lobe d'observation (Marsh et al. 2015). Nous utilisons donc le formalisme introduit par Hocuk et al. (2017) pour la température des grains en fonction de l'Av (voir Chapitre 2, Section 2.5.4). Les températures de grain obtenues avec ce formalisme varient entre 6.1 et 7.4 K.

TABLE 3 – Sets of chemical models.

Number	Name	Sputtering yield	$\zeta \text{ (s}^{-1}\text{)}$
Set 1	Low yield and CR	$\text{H}_2\text{O-rich ices}$	10^{-17}
Set 2	Low yield and high CR	$\text{H}_2\text{O-rich ices}$	3×10^{-17}
Set 3	High yield and low CR	$\text{CO}_2\text{-rich ices}$	10^{-17}
Set 4	High yield and CR	$\text{CO}_2\text{-rich ices}$	3×10^{-17}

Pour les taux d'ionisation par les CR, les valeurs employées sont 10^{-17} s^{-1} (faible ionisation) et $3 \times 10^{-17} \text{ s}^{-1}$ (forte ionisation), comme expliqué dans le Chapitre 2, Section 2.5.4.

Des études récentes (Cabedo et al. 2023) ont montré que le taux d'ionisation par les CR, au sein d'un même nuage, peut en effet varier avec la densité (de plusieurs ordres de grandeur). Ainsi, il serait attendu que les valeurs observées évoluent selon nos densités d'entrée et constitue donc une limitation dans nos modèles. Néanmoins, en suivant les valeurs obtenues par Padovani et al. (2022) présentées dans leur Figure C.1., nous allons considérer ici que la variation en densité dans le coeur n'est pas assez forte pour véritablement changer le taux d'ionisation par les CR. Cela ajoute tout de même une incertitude d'un facteur 2 ou 3 sur notre taux. Dans nos futures études de coeurs denses, nous essaierons de prendre en compte cette atténuation.

Les différents modèles, que nous appellerons "Set" par la suite sont résumés dans la Table 6.

3.4.2 Comparaison entre les abondances modélisées et observées dans le gaz

Comme détaillé dans le Chapitre 2.5.5, nous avons fait tourner les modèles sur des temps allant jusqu'à 10^7 années (temps moyen d'évolution d'un coeur dense, Plume et al. (1997)) et avons sélectionné pour chaque modèle le temps qui reproduit le mieux les observations.

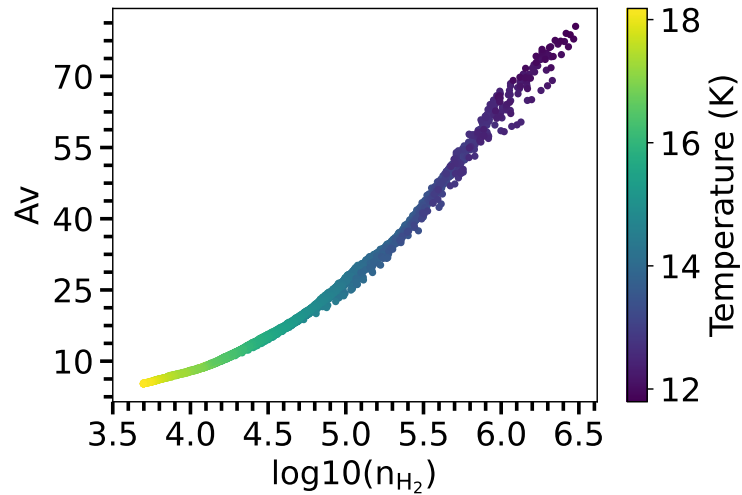


FIGURE 24 – A_v en fonction de n_{H_2} (cm^{-3}) et de la température (K) observée dans L429-C. Tous ces paramètres sont calculés à partir des données d'*Herschel*.

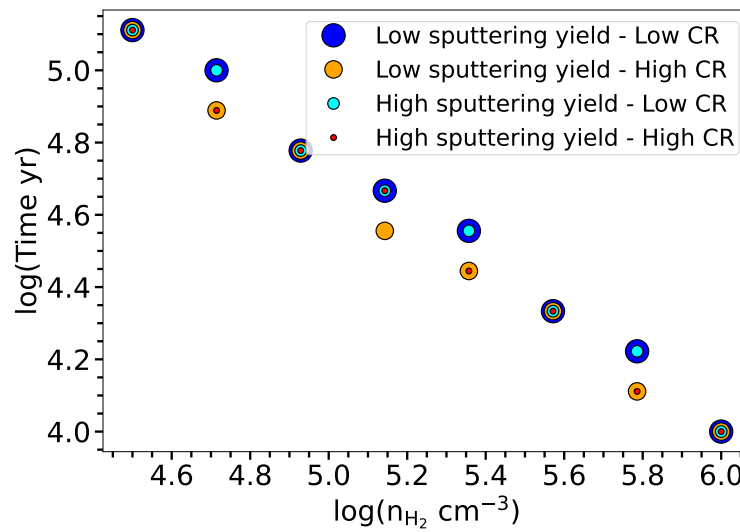


FIGURE 25 – Meilleurs temps obtenus en utilisant la distance de désaccord des quatre molécules suivantes, CO, CS, H_2S et CH_3OH , en fonction de la densité.

Le choix des espèces considérées dans cette fonction sont les espèces dont l'émission couvre la plus grande gamme de densité. Comme certaines espèces n'apparaissent que dans certaines régions des cœurs observés, elles ne sont pas prises en compte dans ce calcul. En plus de cet argument, toutes les espèces ne sont pas bien reproduites par le modèle, c'est le cas du SO (produit de la chimie du soufre complexe et mal contrainte). Les molécules sélectionnées pour calculer la distance de désaccord sont CO, CS, H₂S et CH₃OH. Le meilleur temps obtenu, soit le temps d'intégration le plus court pour reproduire les observations et la distance de désaccord la plus faible, est similaire pour tous les modèles et décroît avec la densité (voir la Figure 25). Par exemple pour le modèle du Set 1 (Faible taux d'érosion CR, faible ionisation CR), on obtient un meilleur temps de 1.9×10^5 années pour une densité de $3.2 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$ et ce temps diminue jusqu'à 1.0×10^4 années pour une densité de $1.0 \times 10^6 \text{ cm}^{-3}$. Autrement dit, pour une densité plus élevée, les abondances observées sont reproduites dans des temps d'intégration plus court. D'après nos tests, la contrainte la plus forte sur le temps est donnée par l'abondance du CO, qui dans le modèle a une courbe d'abondance simple. Cette molécule est progressivement formée dans la phase gazeuse avec des réactions dans le gaz. L'abondance atteint ensuite un maximum qui dépend de la densité, puis décroît en déplaçant sur les grains (se transformant en méthanol et autres espèces) (voir la discussion dans la section 3 de Wakelam et al. 2021b). Dans nos observations, l'abondance de CO dans le gaz varie de moins d'un facteur 10 alors que la densité varie de plusieurs ordres de grandeur. Cela montre donc que l'abondance observée à forte densité ne peut pas être atteinte dans sur la même période de temps que les densités plus basses. À travers le modèle chimique, on peut évaluer l'évolution dynamique de la région.

3.4.3 Qualité de l'ajustement

Dans les Figures 27 et 28, nous traçons le rapport entre les abondances modélisées au meilleur temps et les abondances observées dans le gaz, respectivement avec les molécules utilisées pour déterminer la distance de désaccord, afin de quantifier la qualité de nos modèles. Globalement, les abondances des molécules de la Figure 27 sont bien reproduites (i.e. la différence entre les abondances modélisées et observées est inférieure à un facteur 10). CH₃OH est moins bien reproduit à densité élevée si l'on prend un faible taux d'érosion par CR et à faible densité si le taux est plus fort. Dans la Figure 28, les abondances de HC₃N, SO et CN sont sur-estimées par les modèles à n'importe quelle densité. CCS est sous-estimé par le modèle mais avec à haute densité, un accord de moins d'un facteur 10.

En vérifiant les limites hautes sur les abondances de OCS, HNCO and c-C₃H₂ qui ne sont pas détectées avec nos meilleurs modèles, nous reproduisons bien celles de OCS et c-C₃H₂. HNCO est sur-produit dans le modèle par un facteur d'au moins 10 à toute densité. Nous avons aussi vérifié quelles abondances le modèle prédisait pour les molécules suivantes qui n'ont pas été détecté : O₂ avec une abondance de $< 2 \times 10^{-6}$ et CH₃O avec une abondance de $< 4.8 \times 10^{-12}$, qui avaient été mesuré sur le pic de continuum par Wirström et al. (2016) et Bacmann & Faure (2016). Ces limites sont bien en accord avec les prédictions du modèle.

3.5 Contraindre la désorption non-thermique du méthanol

En combinant les observations de la phase gazeuse avec les observations de glace obtenues par Boogert et al. (2011), nous pouvons obtenir des contraintes sur l'efficacité de la désorption non-thermique du méthanol. La Figure 29 montre le rapport entre les densités de colonne observées

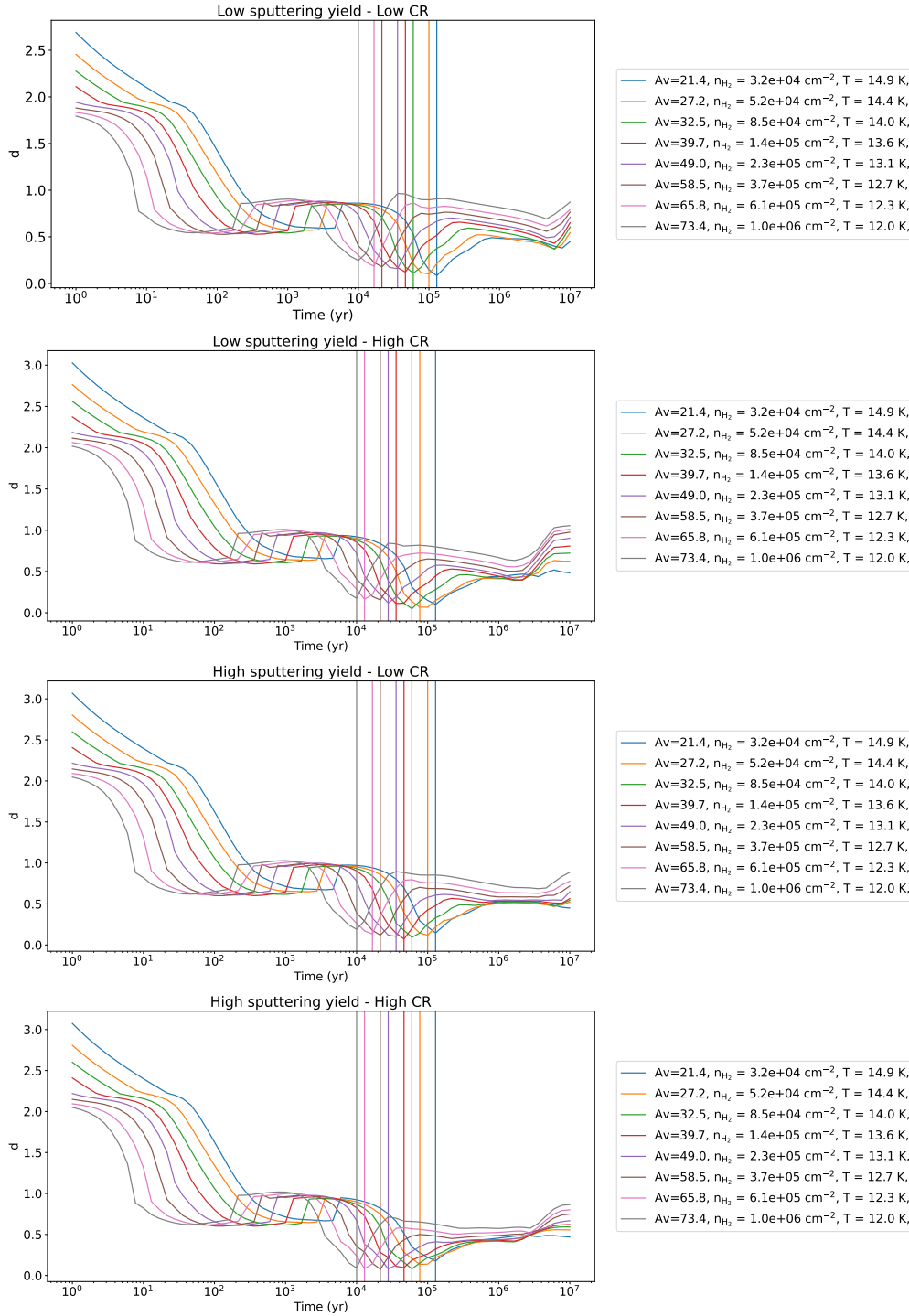


FIGURE 26 – Distance de désaccord d pour les 8 modèles en fonction du temps. Chaque figure représente le résultat d'un jeu de modèle. La légende donne les paramètres physiques associés aux modèles montrés ici. Les lignes verticales représentent la plus petite distance de désaccord et le temps qui y est associé.

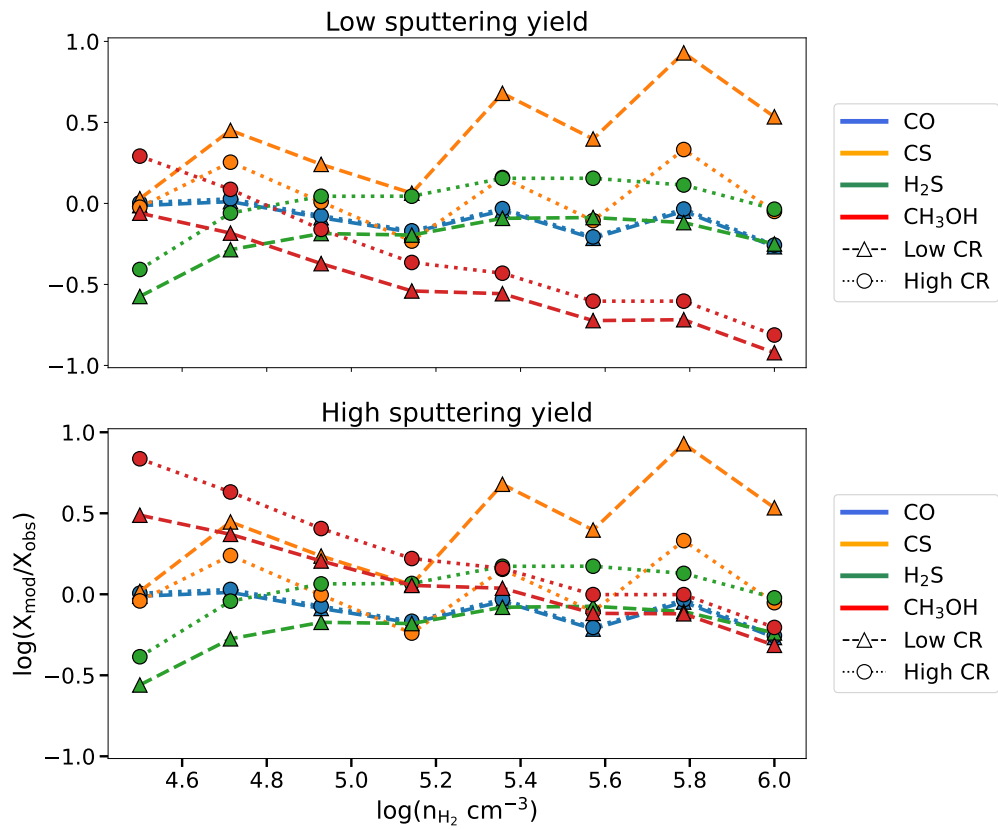
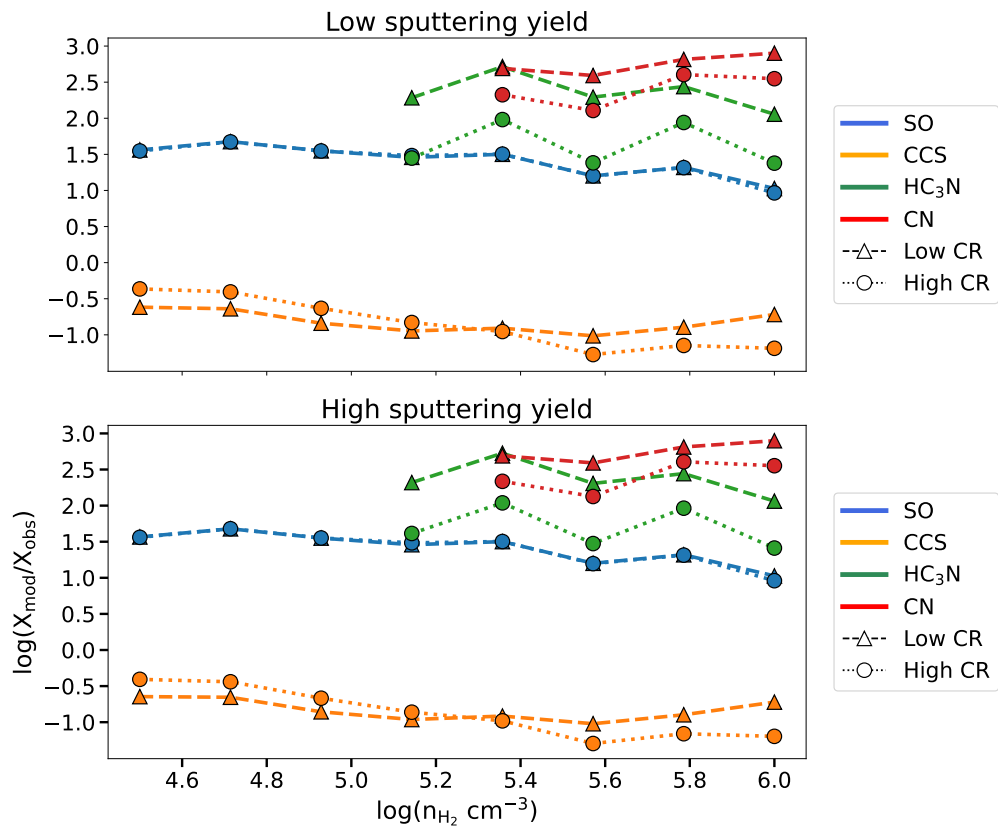


FIGURE 27 – Rapport entre les abondances modélisées (X_{mod}) et les abondances observées (X_{obs}) dans le gaz pour CO, CS, CH₃OH, et H₂S en fonction de la densité et à chaque meilleur temps pour les 4 jeux de modèles.

FIGURE 28 – Semblable à la Figure 27 mais pour CCS, HC₃N, SO et CN.

de CH₃OH dans le gaz et dans la glace (points noirs sur le graphique du bas). Pour les 4 étoiles observées dans L429-C, les données observées sont résumées dans la Table. 4 et leurs positions sont indiquées par les croix vertes dans la Figure 20. Les densités de colonne dans le gaz sont celles obtenues pendant notre étude. Sur la même figure se trouve les résultats du modèle obtenus pour chaque densité. Comme attendu, le réservoir principal du méthanol se trouve dans les glaces. L’abondance de la phase gazeuse est inférieure à l’abondance de la phase solide de plusieurs ordres de grandeurs (Drozdovskaya et al. 2016). À partir des observations, nous pouvons calculer l’efficacité de la désorption non-thermique des glaces de CH₃OH comme $\frac{N_{\text{gas}}}{N_{\text{ice}}} \times 100$ et nous obtenons une efficacité variant entre 0.002% (à basse densité $\sim 2.4 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$) et 0.09% (à densité élevée $\sim 2.2 \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$). Malgré que nous n’ayons que quatre observations, ces dernières semblent indiquer que l’efficacité de ce mécanisme augmente avec la densité. L’abondance de la phase gazeuse à ces quatre positions ne varie que très peu (4.0 à 6.4×10^{-10}) mais l’abondance de la glace diminue d’un facteur supérieur à deux avec la densité. Donc à fortes densités, afin de maintenir une abondance de gaz comparable, la désorption doit être plus efficace d’un facteur 45. Nos modèles reproduisent les densités de colonne de glace observées pour le méthanol avec moins d’un facteur 2 pour les Sets 2 et 4 ($\zeta = 3 \times 10^{-17} \text{ s}^{-1}$) et dans un facteur 3 pour les Sets 1 et 3 ($\zeta = 10^{-17} \text{ s}^{-1}$) à basse densité. Quand la densité augmente, les modèles prédisent une densité de colonne similaire à celles observées. Les observations et les modèles semblent tous deux indiquer une décroissance de la densité de colonne quand la densité augmente.

TABLE 4 – Densités de colonne des glaces détectées dans L429-C provenant de l’étude de Boogert et al. (2011). Les “...” signifient qu’il n’y a pas de détection confirmée (si la bande a pu être observée).

Position de la source 2MASS J	Type spectral	N(H ₂ O)		N(CO ₂)		N(CH ₃ OH)	
		10 ¹⁷ cm ⁻²	10 ¹⁷ cm ⁻²	% H ₂ O	10 ¹⁷ cm ⁻²	% H ₂ O	
18170470-0814495	M0	3.93 (0.44)	2.49 (0.6)	6.34 (1.69)	
18170957-0814136	M1	2.85 (0.31)	12.29 (1.29)	43.12	2.69 (0.58)	9.46 (2.30)	
18170470-0814495	K7	3.81 (0.42)	4.42 (0.86)	11.58 (2.60)	
18170470-0814495	K7	3.40 (0.38)	3.48 (0.86)	10.24 (2.78)	

Nos différents jeux de modèles produisent un rapport gaz-sur-glace qui décroît avec la densité (contrairement aux observations), mais ces valeurs changent en suivant les paramètres utilisés. Lorsque le taux d’érosion par CR est élevé, ce rapport augmente. C’est également le cas pour un taux d’ionisation plus élevé. Les Sets 1 et 2 (pour des glaces d’eau) donnent un rapport proche des observations à basse densité tandis que les Sets 3 et 4 (pour des glaces de CO₂) donnent un rapport plus proche des observations à densité élevée. Aucun des modèles ne semble pouvoir reproduire la plus faible densité mieux qu’avec un facteur 3.5. Globalement, en considérant les incertitudes des observations (dans les deux phases), dans la détermination de la densité et dans le modèle chimique

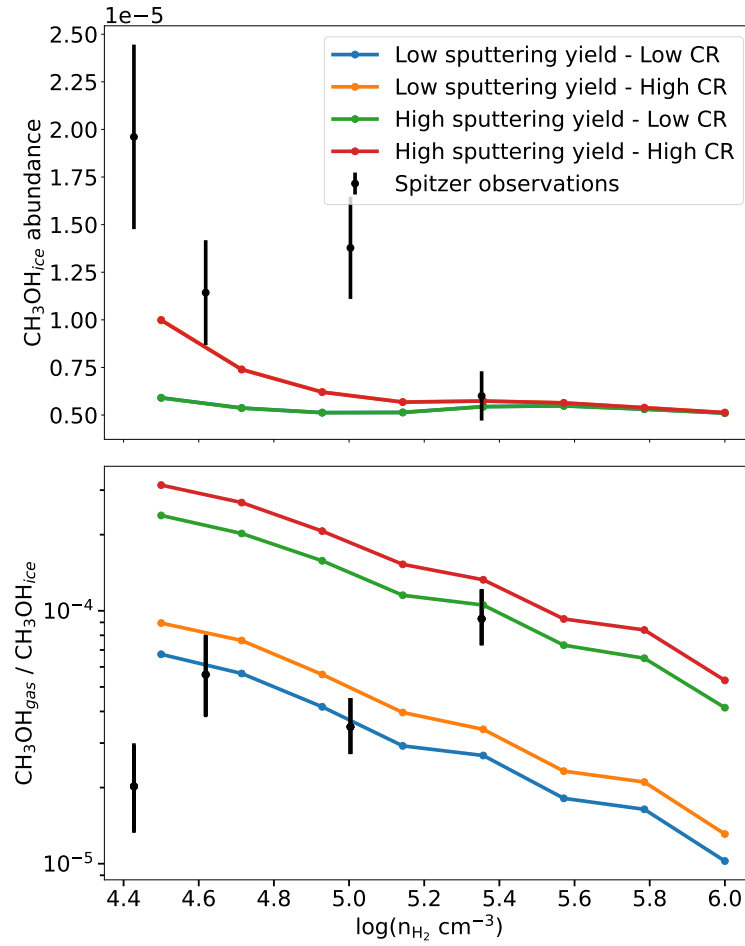


FIGURE 29 – Haut : Abondances de glace du méthanol obtenues via Nautilus en fonction de la densité. Les points noirs (avec les barres d'incertitude) sont les données relevées par [Boogert et al. \(2011\)](#) aux quatre positions observées. À noter que les courbes rouge et orange se superposent, comme les courbe bleue et verte. Bas : Rapport de l'abondance gaz-sur-glace du méthanol, en fonction de la densité, pour les différents jeux de modèles au meilleur temps et les observations (points noirs).

lui-même, nous trouvons ces valeurs satisfaisantes. Cependant, dans le cas où l’augmentation de l’efficacité de la désorption du méthanol avec la densité est vraie, alors nos modèles ne peuvent pas expliquer ce changement, sauf en considérant un changement de composition de la glace. Si une glace majoritairement composée d’eau se transforme en un mélange où la désorption non-thermique (comme l’érosion par CR) est plus efficace, alors nous obtiendrons une tendance similaire à celle observée. Un tel changement en composition peut se produire lors du *catastrophic CO freeze-out* dans les cœurs denses (Qasim et al. 2018). Ce qui pourrait être le cas puisque nos observations en phase gazeuse sont pratiquement diminuées d’un facteur 10 entre la basse et la forte densité. Le rapport gaz-sur-glace de CH₃OH observé pourrait donc être une indication que L429-C subit un changement dans la composition de sa glace, comme suggéré par Navarro-Almaida et al. (2020) avec H₂S dans les cœurs denses. Les auteurs ont cependant étudié dans ce papier l’efficacité de la désorption chimique.

En comparaison, Perotti et al. (2020) a étudié la région dense de formation d’étoiles, dans l’amas Serpens SVS 4, en utilisant des observations effectuées avec le SubMillimeter Array, l’Atacama Pathfinder EXperiment et le Very Large Telescope observations. Les auteurs ont estimé une densité de colonne de méthanol d’approximativement 10^{14} cm⁻² dans le gaz et 0.8×10^{18} cm⁻² dans la glace. Ils ont donc obtenu un rapport gaz-sur-glace variant de 1.4×10^{-4} and 3.7×10^{-3} , qui sont supérieurs aux nôtres. Cependant, les auteurs n’ont pas fourni d’informations sur la densité dans cette région. Leur rapport gaz-sur-glace ne montre pas de tendance avec la densité de colonne de H₂. De plus, ils ont estimé leur densité de colonne de gaz à l’ETL, avec une température moyenne de 15 K et en utilisant une transition à haute énergie pour le méthanol. Il serait donc possible que le système soit dans un régime d’excitation sub-thermique et qu’ils surestimeraient donc les densités de colonne obtenues. Dans ce cas, leurs rapports gaz-sur-glace seraient plus faibles.

Dans les autres espèces étudiées ici, H₂S est une molécule intéressante, puisqu’elle est associée à une formation principalement sur les grains avec une efficacité de formation très faible dans le gaz (Vidal et al. 2017). Ayant un rôle similaire aux atomes d’oxygène dans la formation de l’eau, les modèles prédisent que le soufre atomique du gaz se colle aux grains à basse température et peut facilement s’hydrogéner pour former H₂S. Les modèles chimiques prédisent donc de grandes quantités de H₂S dans les glaces mais cette molécule n’a pas encore été observée dans la phase solide (Smith 1991; Boogert et al. 2015; McClure et al. 2023). Pourtant, cette molécule serait l’espèce souffrée dominante dans les glaces des comètes (Calmonte et al. 2016). Contrairement à CH₃OH, on trouve dans la phase gazeuse une abondance sévèrement déplétée à forte densité. Ce qui signifie que l’efficacité de la désorption non-thermique de H₂S serait moins grande que celle du méthanol. Une explication serait que le H₂S formé sur les grains à haute densité est ensuite transformé en une autre molécule qui n’a toujours pas été identifiée. Cela expliquerait la non-détection de cette molécule. Dans nos modèles, nous sommes capables de reproduire l’abondance de H₂S observée (voir la Figure 23) puisque nous utilisons de base une abondance élémentaire du soufre déplétée.

4 | L694

À la suite de l'étude sur L429-C, nous avons décidé d'étudier un cœur dense plus avancé afin de comprendre comment la chimie pouvait évoluer. Plusieurs candidats ont été sélectionnés et le choix final s'est porté sur LDN 694 (L694 par la suite). Nous l'avons choisi toujours dans le contexte de préparation aux cartes de glace du JWST. En effet, L694 était l'une des cibles principales d'un GTO (*Guaranteed Time Observation*) en cycle I "Extinction mapping of Pre-stellar cores" (PI : K. Hodapp). Les observations étant récentes, les données prises par le JWST dans ce nuage ne sont pas encore disponibles. Trois cœurs denses en effondrement ont été observés en septembre 2022 : B335, B68 et L694. Nous avons décidé de retenir ce dernier puisque des données *Herschel* étaient disponibles et que des glaces de méthanol ont été détectées sur une ligne-de-visée en direction de ce cœur (Chu et al. 2020) depuis le sol. Comme pour L429-C, nous avons fait une demande d'observation radio avec le télescope 30m de l'IRAM afin de pouvoir couvrir la région autour du cœur dense ainsi que la source elle-même. Ainsi, nous pouvons comparer les deux cœurs ensemble et évaluer l'évolution chimique du gaz et des glaces pendant l'effondrement d'un cœur. Ce chapitre est un travail en cours et représente donc l'ébauche du futur article qui sera dédié à L694. Nous allons d'abord présenter les observations en phase gazeuse, puis les cartes d'abondance et enfin la comparaison aux modèles chimiques.

4.1 Description de la source

L694 est un cœur dense ($N_{\text{H}_2} > 10^{22} \text{ cm}^{-2}$) et froid ($T < 18 \text{ K}$), isolé et se situant dans l'Aquila Rift, à une distance d'environ 205 pc (Kim et al. 2022). Il présente une structure allongée comme on peut le voir sur la Figure 30. Le cœur est supposé en effondrement, comme semble l'indiquer certaines transitions moléculaires présentant des profils de raies d'auto-absorption, décalées vers le rouge (Lee et al. 2001). D'autres raies montrent également des gradients de profil en vitesse forts avec peut être de la rotation (Lee et al. 2004) et des mouvements d'effondrement rapides avec des vitesses supersoniques (Lee et al. 2007; Seo et al. 2013). Les deux études précédentes observent également un décalage vers le bleu des spectres de N_2H^+ , CS et DCO^+ , appuyant la thèse d'un effondrement. La source est centrée autour d'un cœur d'une masse estimée à $1 M_{\odot}$ (Lee et al. 2001). Aucune observation de source radio n'a été confirmée (Harvey et al. 2002) et le cœur présente un gradient de densité très abrupt, qui chute brutalement lorsque l'on quitte la structure allongée du cœur (Chu & Hodapp 2021; Kim et al. 2022). Au vu de la densité et des mouvements internes rapides et supersoniques, il devrait pouvoir se former une proto-étoile dans quelques 10^4 années (Visser et al. 2002; Williams et al. 2006). L'émission de N_2H^+ révèle une extinction visuelle de plus de 30 mag au centre (Crapsi et al. 2005; Chu et al. 2020). La température du cœur lui-même semble très basse, variant entre 8 et 14 K selon l'étude (Harvey et al. 2003; Williams et al. 2006; Seo et al. 2013; Chu & Hodapp 2021). Nous utiliserons cependant les valeurs de *Herschel*, donnant une température $\sim 9.3 \text{ K}$.

Le cœur présente une chimie très avancée : on y a observé une forte densité de colonne de ortho- N_2D^+ (Caselli et al. 2008, $3.2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$) avec une forte deutération (Crapsi et al. 2005). Une étude sur C^{34}S de Kim et al. (2022) indique que l'émission n'est pas piquée sur la source et semble

montrer une forte déplétion dans la région la plus dense. Crapsi et al. (2005) ont aussi calculé une forte déplétion de CO, avec un facteur de déplétion de 11 à 16 sur le cœur. Enfin, Chu et al. (2020) ont observé trois étoiles de fond, avec le NASA IRTF, dans la bande de 2 à 5 μm , avec la présence d'une forte absorption de CH_3OH à une distance de 0.1 pc du pic de densité vers l'étoile L694-B2. La position des deux autres étoiles se trouvent en dehors de la partie la plus dense du nuage, expliquant en partie la non-détection du méthanol. L694-B2 se trouve en bordure du cœur dense lui-même. Les auteurs ont trouvé un rapport de glace de $\text{CH}_3\text{OH}/\text{H}_2\text{O}$ de 14.7% (un rapport plus élevé que dans L429-C). Il semble en plus que seulement une petite fraction de CO se trouve sur les grains (moins de 15% par rapport à H_2O) mais que environ $\sim 30\%$ de CO est mélangé avec le méthanol, un rapport très élevé par rapport aux autres cœurs étudiés. Ce mélange semble pouvoir tracer la partie la plus dense du cœur et dans Chu & Hodapp (2021), les auteurs proposent que moins de 2% du volume de L694 serait assez dense pour que la formation du méthanol puisse se produire sur les grains de façon efficace.

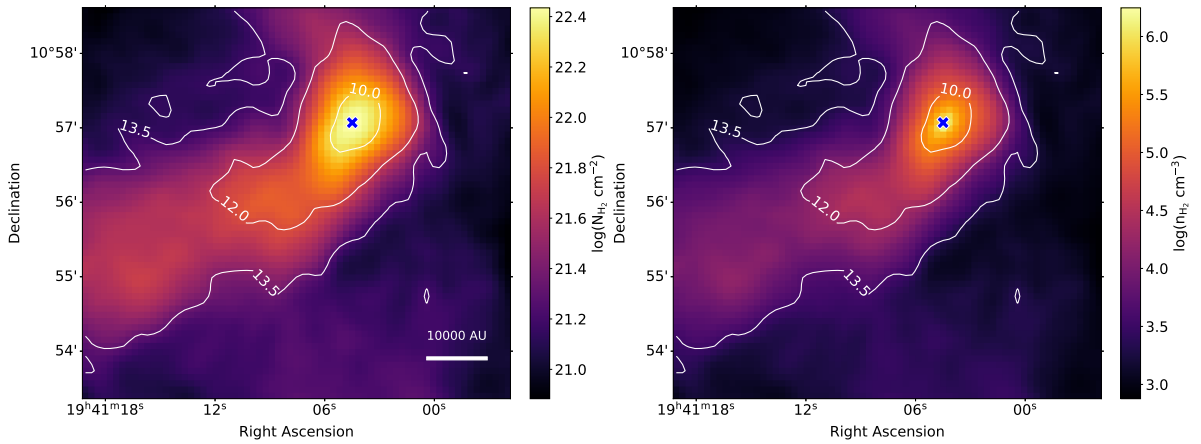


FIGURE 30 – Gauche : densité de colonne de H_2 (N_{H_2} en cm^{-2}) dans L694 calculée à partir des cartes d'épaisseurs optiques d'*Herschel* que nous avons calculé. La position du maximum de continuum est représentée par la croix bleu foncé. Droite : carte de densité volumique de H_2 (n_{H_2} en cm^{-3}) obtenue par notre méthode. Sur les deux cartes, les contours blancs représentent la température en Kelvin.

4.2 Observations millimétriques avec le télescope 30m de l'IRAM

Dans ce cœur (R.A. = $19^{\text{h}}41^{\text{m}}04^{\text{s}}$, DEC. = $+10^{\circ}57'04$ (J2000)), les observations ont eu lieu en hiver 2021, pendant 23 heures, couvrant une région de $300'' \times 300''$ avec un lobe d'environ $28.5''$. Les canaux de vitesse sont de 0.15 km.s^{-1} , chaque cube de données en comprenant 70. Le bruit varie de 0.15 à 0.3 K selon la molécule. Les bandes de fréquence observées sont les suivantes : 93.0 - 94.8 GHz, 96.2 - 98.1 GHz, 108.6 - 110.4 GHz et 111.9 - 113.7 GHz. La liste des molécules détectées peut être trouvée dans la Table 5

TABLE 5 – Liste des raies détectées et leurs paramètres spectroscopiques associés.

Molécule	Fréquence (MHz)	Transition	E_{up} (K)	g_{up}	A_{ij} (s^{-1})
N_2H^+	93173.9	(1-0)	4.47	15	3.62×10^{-5}
CH_3OH	96739.3	(2-1)	12.5	5	2.55×10^{-6}
CH_3OH	96741.3	(2,0)-(1,0)	7	5	3.40×10^{-6}
^{34}SO	97715.3	(2,3)-(1,2)	9.1	7	1.07×10^{-5}
CS	97980.9	(2-1)	7.1	5	1.67×10^{-5}
SO	109252.2	(3,2)-(2-1)	21.1	5	1.08×10^{-5}
C^{18}O	109782.1	(1-0)	5.27	3	6.26×10^{-8}
HNCO	109905.7	(5,0,5)-(4,0,4)	15.82	11	1.80×10^{-8}
NH_2D	109782.1	(1-0)	5.27	3	6.26×10^{-8}
^{13}CO	110201.3	(1-0)	5.29	3	6.29×10^{-8}
C^{17}O	112358.7	(1-0)	5.39	3	6.69×10^{-8}

4.3 Résultats

4.3.1 Transitions moléculaires et cartes d'intensité intégrée

Dans L694, nous avons détecté 10 molécules pour 11 transitions différentes avec un pic d'intensité 3 fois supérieur au bruit moyen de chaque cube de données. Plusieurs molécules ont été observées mais ne présentent pas un signal $> 3\sigma$: CCS (6-7) à 93870 MHz, S^{18}O (1-2) à 93267 MHz, OCS (8-7) à 97301 MHz, C^{34}S (2-1) à 96412 MHz. L'émission des molécules détectées peut être divisée en deux catégories, la première étant les molécules détectées sur l'ensemble du filament (C^{18}O , ^{34}SO , CH_3OH , CS) et la seconde étant les molécules dont l'émission est centrée sur la source (HNCO, NH_2D , N_2H^+ , SO). Les cartes d'intensité intégrée de chaque molécule sont illustrées dans la Figure 33 dont la position du pic de continuum de poussière est représentée par la croix bleu marine.

4.3.2 Analyse de la cinématique

Comparé à L429-C, L694 est bien plus avancé dynamiquement, en raison de son effondrement en cours. Cependant les profils de vitesse sont bien moins complexes. La plupart des molécules présentent des profils simples d'émission, pouvant être ajustés avec une seule Gaussienne. C^{18}O présente un profil Gaussien sur toute la carte avec une intensité la plus forte le long du filament, hors de la position du pic de continuum. L'aile rouge est légèrement plus forte que la composante bleue en bord sud de nuage mais on observe un changement dans la zone autour de la source. Le profil Gaussien s'aplatit un peu et la composante bleue devient plus forte. Dans la Figure 31, on peut voir un trou dans l'intensité à la position du pic de continuum qui reflète ce changement. Cela pourrait être lié à la déplétion du gaz sur les grains comme nous le verrons dans les sections suivantes. Une seule molécule présente 2 composantes dans son spectre, il s'agit de CS (visible dans la Figure 34) La première composante varie entre 8.9 et 9.6 km.s^{-1} et la deuxième entre 9.6 et 10.4 km.s^{-1} . La première composante trace en particulier le cœur et ses alentours tandis que la deuxième est plus diffuse sur l'ensemble du nuage, avec une intensité plus importante à l'est du nuage, où l'on voit l'apparition d'un deuxième pic d'intensité sur la Figure 32. Cette deuxième

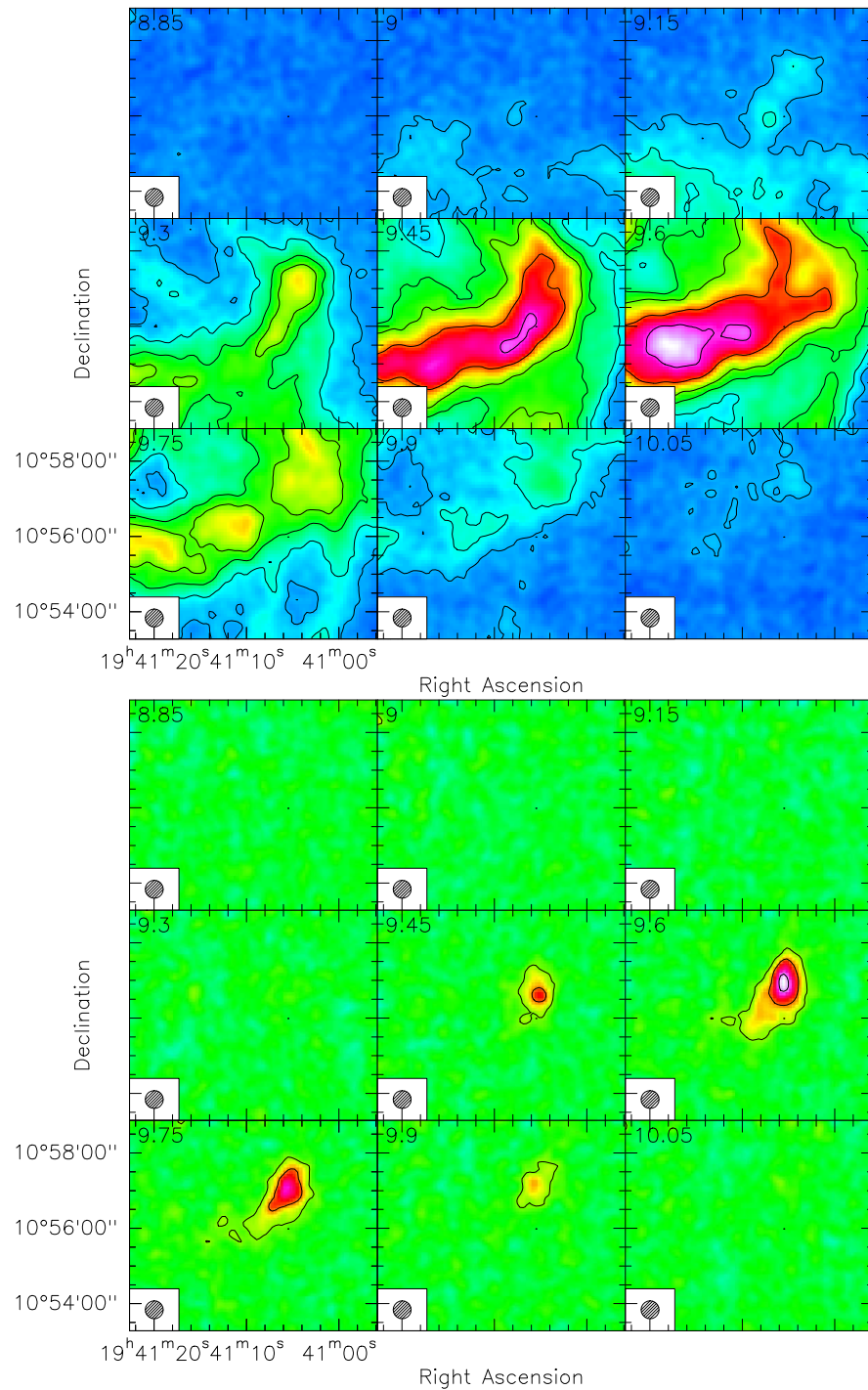


FIGURE 31 – Carte en canal de vitesse de $C^{18}O$ (109782 MHz) (haut) et SO (99299 MHz) (bas). Le lobe du télescope est indiqué en hachuré en bas de chaque case. Les contours représentent 0.2, 0.5, 1, 1.5, 2.5, 3.5 K (T_A^*) (contours extérieurs vers intérieurs). Le code couleur est en K.

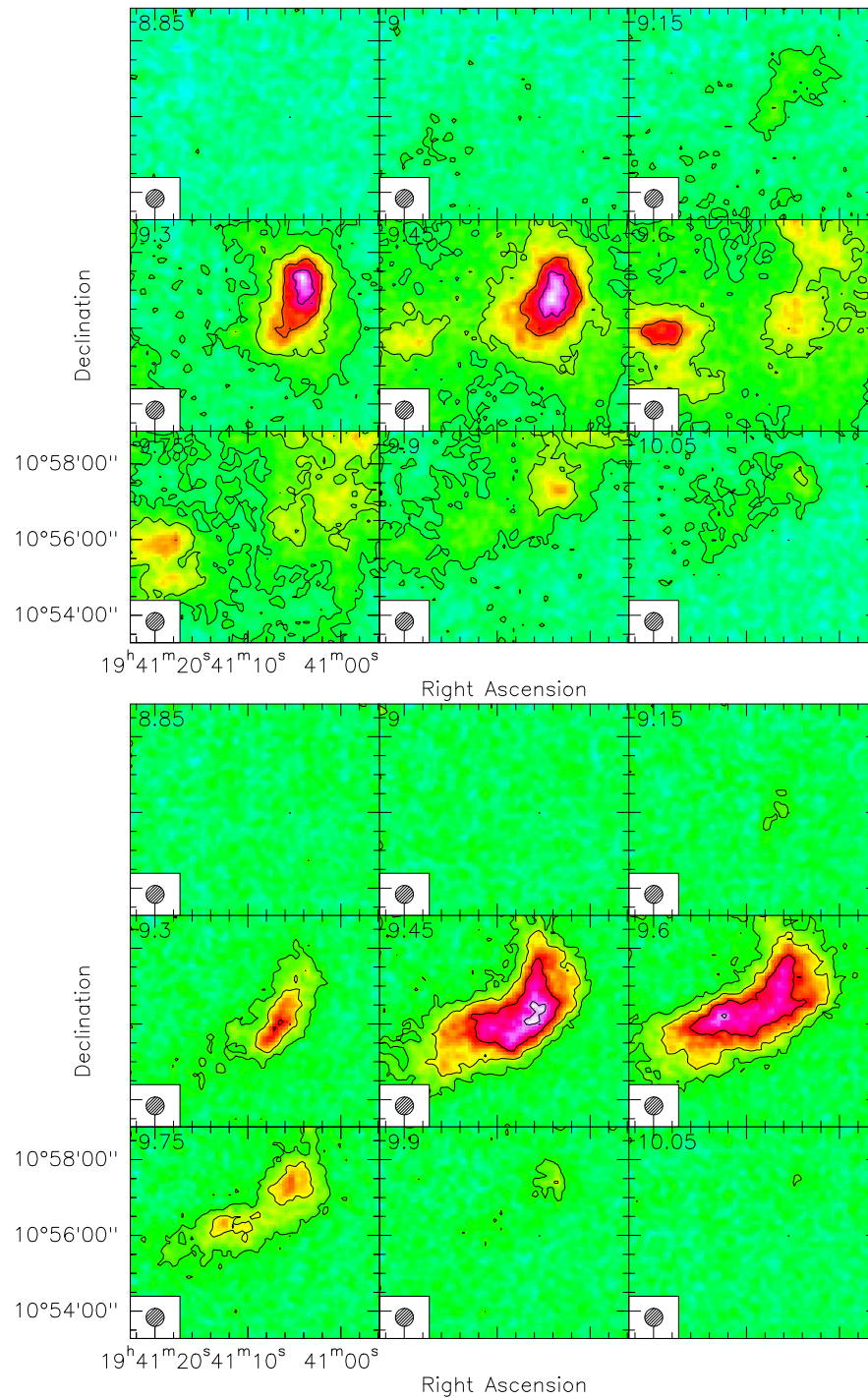


FIGURE 32 – Carte similaire à Figure 31 mais pour CS (97980 MHz) (haut) et CH₃OH (96741 MHz) (bas)

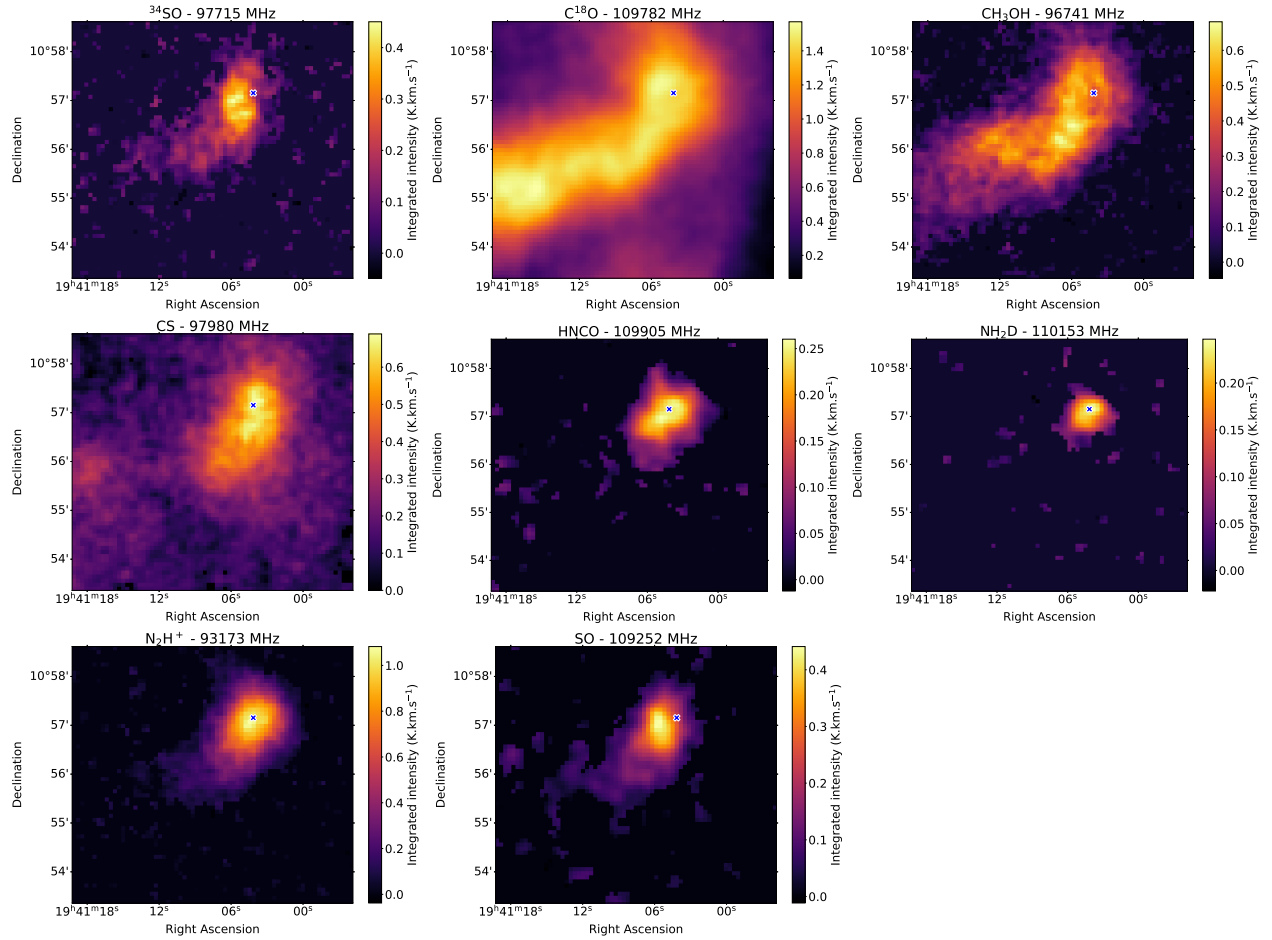


FIGURE 33 – Cartes d'intensité intégrée pour chaque molécule détectée. Dans le cas d'une molécule à plusieurs transitions, seule la transition la plus brillante est montrée.

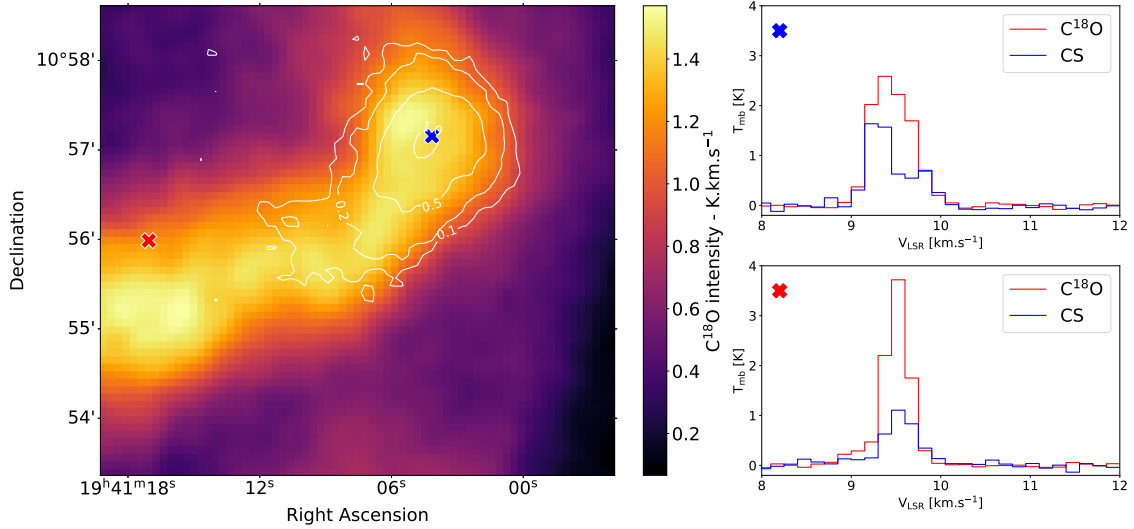


FIGURE 34 – Gauche : Carte d’intensité de C¹⁸O (109782 MHz) avec en contours les intensités de N₂H⁺ (T_A^* en K). Droite, haut : Spectre des molécules C¹⁸O, N₂H⁺ et CS à la position du cœur, représenté par la croix bleue. Droite, bas : Spectre des molécules précédentes à la position représentée par la croix rouge.

composante est également présente, moins intense, sur la position de la source. En regardant en particulier les spectres sur la source, on peut voir la présence d’un double pic, avec la composante bleue plus intense que la composante rouge. Cela rejoint l’hypothèse de l’effondrement. D’autres cœurs denses en effondrement confirmé présentent également cette structure, comme L1544 (Tafalla et al. 1998). Les auteurs ont proposé que cette signature est due aux mouvements vers l’intérieur du cœur. Cette signature a été plus tard observée dans une région de formation similaire, Taurus par Lee et al. (2001). Dans Lee et al. (2004), les auteurs ont observé une épaule rouge dans le spectre de la transition (3-2) du CS, à 146.96 GHz. Cette signature particulière avait placé L694 dans la catégorie “*strong infall candidate*”. Les auteurs des études précédentes ont également lié l’émission de N₂H⁺ comme traceur du mouvement interne sur des régions plus petites que celles tracées par CS. L’émission que l’on observe pour N₂H⁺ est la plus forte sur le cœur de la source, rejoignant cette hypothèse (voir la Figure 33). Keto et al. (2015) indiquent qu’avec leur modèle, dans une sphère Bonnor-Ebert soumise à des mouvements internes, les molécules à transition optiquement fine comme C¹⁸O vont voir leurs spectres élargis et les molécules avec des transitions optiquement épaisses vont voir apparaître une asymétrie due à la *self-absorption*, comme pour le CS (2-1).

4.3.3 Abondances moléculaires observées

Nous avons appliqué la même méthode que pour L429-C pour obtenir les cartes d’abondance par rapport à H₂ (Chapitre 2.4). Toutes les molécules présentent une déplétion sur la position du pic de continuum, représenté par la croix bleue dans les Figures 35 et 36. CO présente une forte déplétion avec une abondance au pic de continuum d’environ 3.8×10^{-5} et une abondance maximale de 4×10^{-4} . On peut calculer comme pour L429-C le facteur de déplétion à la source $f_{\text{CO}} = f(X_{\text{can}}/X_{12\text{CO}})$

avec $X_{\text{can}} = 8.5 \times 10^{-5}$ l'abondance canonique de ^{12}CO , déterminée par [Frerking et al. \(1982\)](#). Ce qui nous donne $f_{\text{CO}} = 2.23$. Ce qui est bien inférieur à la valeur trouvée de [Crapsi et al. \(2005\)](#) qui avait trouvé en utilisant la même valeur canonique, dans leur modèle, une déplétion attendue de 16 sur la position de la source. Malheureusement la carte utilisée dans l'article n'a pas été publiée et nous ne pouvons donc pas comparer la densité de colonne qu'ils ont utilisé. Cette abondance canonique correspond à une abondance déterminée dans deux nuages (Taurus et ρ Oph). Au vu de l'ancienneté de cette valeur, on peut utiliser une abondance canonique calculé de 1.7×10^{-4} par rapport à H dans un nuage dense (abondance de C^+ observée dans le nuage diffus ζ Oph) provenant de [Jenkins \(2009\)](#). Avec cette valeur $f_{\text{CO}} \simeq 4.47$, le facteur est toujours moins important que celui déterminé par [Crapsi et al. \(2005\)](#). On peut refaire le calcul pour L429-C avec la valeur de [Jenkins \(2009\)](#). Dans ce cœur, l'abondance de CO au pic de continuum était de 1.7×10^{-5} , ce qui donne une facteur de déplétion $f_{\text{CO,L429-C}} \simeq 10$. Ce qui est plus proche que ce que trouvait [Crapsi et al. \(2005\)](#) pour cette source (~ 15.5).

Pour CS, la molécule présente des raies optiquement épaisses d'après nos résultats obtenus avec RADEX, ce qui signifie que l'abondance que nous déterminons est en-deçà de ce qu'elle est réellement. Ce sont donc les “*upper-limits*” qui sont présentées ici. L'abondance de CS est étendue sur l'ensemble du nuage, avec un gradient de déplétion important le long du filament jusqu'à une abondance minimale sur la position du pic de continuum, avec une valeur de 1.6×10^{-10} . La valeur maximale se trouve à droite de la source, avec une valeur de 1.7×10^{-7} , soit une différence de trois ordres de grandeur entre cette valeur et celle au pic de continuum. N_2H^+ étant un cas particulier présentant une structure hyperfine avec 3 pics bien distincts. Ces transitions tracent cependant toutes les trois la même région (voir la Figure 34). Dans ce cas spécifique, nous avons déduit les densités de colonne de N_2H^+ en intégrant seulement sur la composante du milieu, après avoir vérifié que toutes les composantes hyperfines sont bien optiquement minces. N_2H^+ est seulement présent autour du pic de continuum et présente un gradient de déplétion sur toute cette zone. On peut voir une abondance maximale sur les bords du filament avec une valeur maximale de 7.7×10^{-10} et une valeur minimale sur la position de la source avec une valeur de 5.5×10^{-11} . SO est présent sur une zone encore plus petite que N_2H^+ et présente une abondance maximale à gauche de la source, d'une valeur de 4.8×10^{-8} . Son abondance minimale est sur la position du pic de continuum avec une valeur de 9.7×10^{-10} . HNCO et NH_2D ne sont détectées que sur de petites régions autour du cœur. Les deux molécules présentent une dynamique de valeurs plus faible que les autres molécules. Pour HNCO, la valeur au continuum de poussière est de 1.4×10^{-10} et un maximum à gauche de cette position (au même endroit que SO), d'une valeur de 3.2×10^{-10} . Pour NH_2D , la valeur maximale est juste à côté de la position du pic de continuum (avec une valeur de 1.5×10^{-10}) et vaut 5.6×10^{-10} . Pour CH_3OH , l'abondance est la plus forte sur la gauche du pic de continuum de poussière avec un maximum à 9.8×10^{-9} (même position que SO et HNCO) et la valeur minimale est sur la source avec une abondance de 5.2×10^{-10} . Contrairement à L429-C, nous observons bien une déplétion sur la position du cœur pour le méthanol.

Nous n'avons pas pu calculer l'abondance de ^{34}SO , faute de l'absence de données de collisions pour RADEX.

4.3.4 Abondances moléculaires en fonction des paramètres physiques

L694 possède une température sur la source plus froide que le cœur précédent, descendant jusqu'à 9.3 K (contre ~ 11.8 K au minimum). Leur densité est semblable ($\sim 1.7 \times 10^6 \text{ cm}^{-3}$) mais un Av

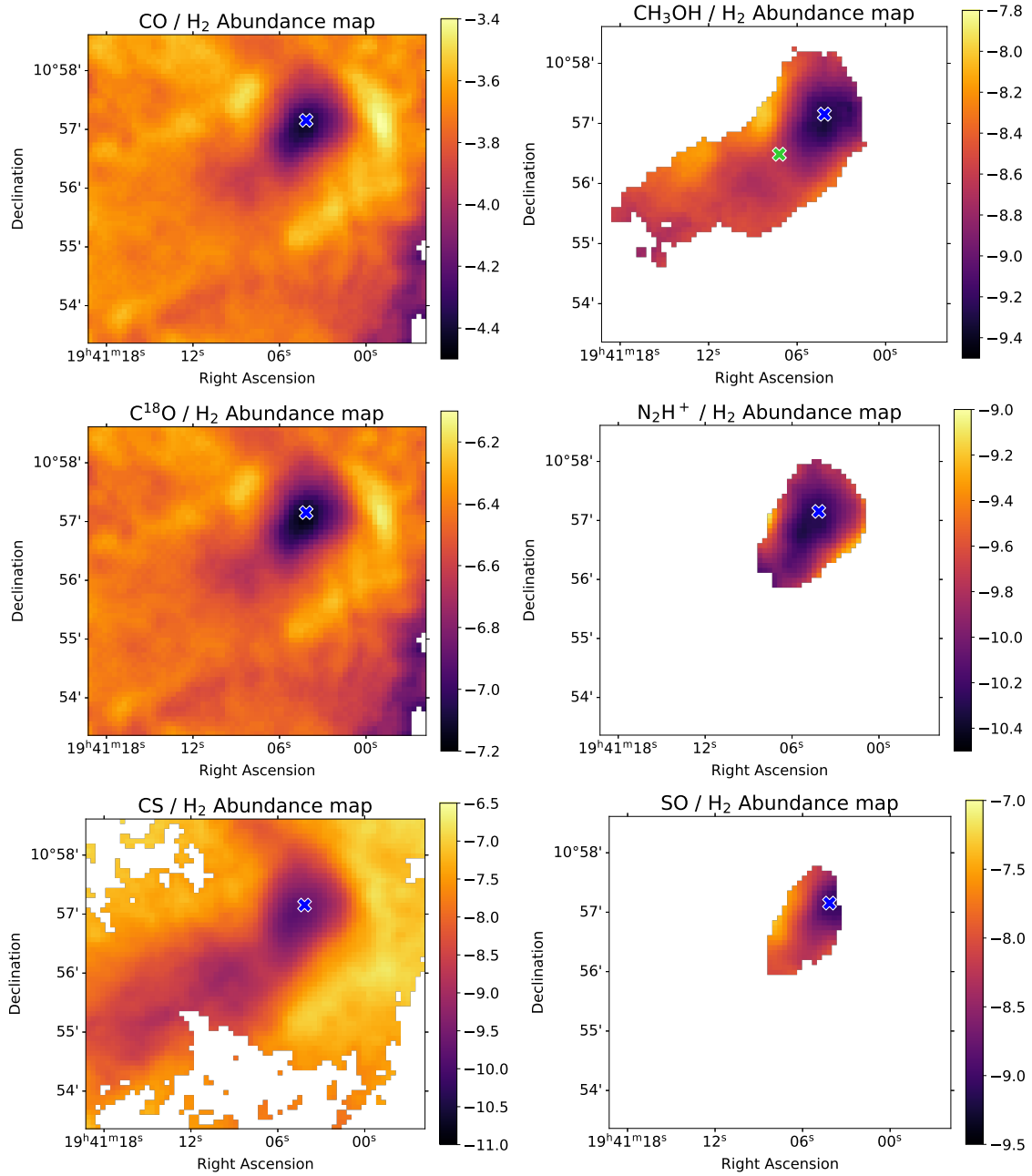


FIGURE 35 – En échelle logarithmique, les abondances en phase gaz des molécules observées par rapport à H_2 . La croix verte dans la carte de méthanol correspond à la position de l'étoile de fond observée par [Chu et al. \(2020\)](#). La croix bleue représente le maximum du continuum de poussière.

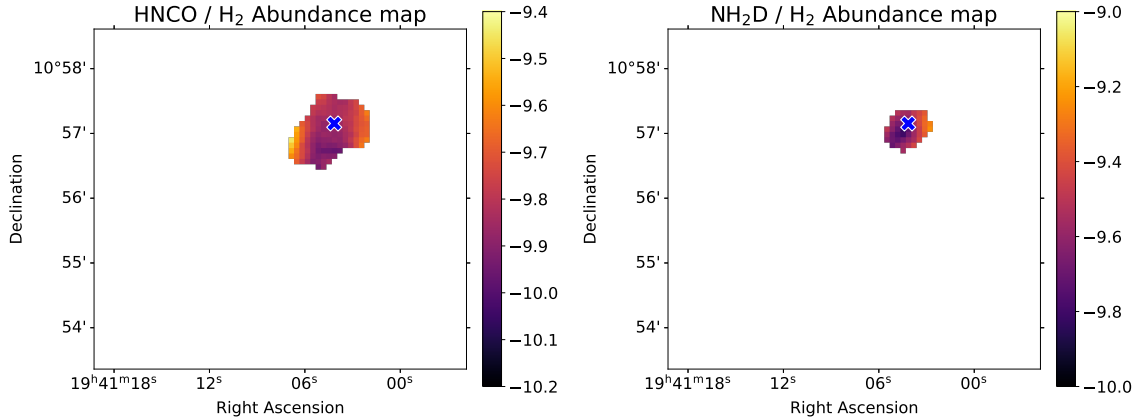


FIGURE 36 – Même description que la Figure 35, mais montrant les cartes de HNCO et NH₂D.

calculé plus faible : la valeur maximale dans L694 est ~ 25 contre ~ 77 pour L429-C. Les paramètres physiques sont visibles dans la Figure 39.

Comme pour L429-C, nous allons comparer les paramètres physiques de la source avec les abondances calculées, comme montré dans les Figures. 37 et 36. Toutes les molécules décroissent avec la densité et l'extinction visuelle. CO montre un gradient de déplétion fort avec un facteur 10 entre les deux extrema de densité. C'est la seule molécules qui est détectée sur l'entièreté de la carte, avec une exception pour CS qui trace une grande partie du nuage. On observe donc des abondances assez hautes à des densités très faibles en dehors du filament, comme on peut le voir sur la carte de la Figure 35. Un point très intéressant dans le cas de CO est ici que l'on peut voir qu'à basse densité, l'abondance observée s'écrase et n'augmente plus. On semble avoir atteint une certaine saturation proche de l'abondance canonique du CO. Une piste intéressante à poursuivre serait de voir si nous pourrions déduire l'abondance de C dans le gaz, puisque CO en est le principal réservoir, en vérifiant cette hypothèse dans les modèles. De cette manière, nous pourrions vérifier si l'abondance élémentaire de C utilisée dans les modèles chimiques ou en général est proche de ce que nous trouvons. Si c'est le cas, peut être que nous pourrions également obtenir une information sur l'oxygène restant dans le gaz.

CH₃OH présente une forte déplétion variant de 10^{-8} à 1.7×10^{-9} entre des densités de 3×10^3 et 10^6 cm^{-3} . CH₃OH est détecté à des $A_v > 10$, concordant aux A_v permettant la formation de l'espèce sur les glaces. CS trace pratiquement tout le filament et montre le profil de déplétion le plus forte de toutes les molécules de l'étude, avec une abondance variant de 9×10^{-6} jusqu'à $\sim 3 \times 10^{-9}$, soit un facteur 3000. SO montre un profil similaire à CH₃OH avec une très forte pente entre 10^4 et 10^6 cm^{-3} , avec une abondance variant de $\sim 3 \times 10^{-7}$ à 3×10^{-9} , soit un facteur 100. Malgré la détection sur une petite région de la carte, les molécules de HNCO et NH₂D présentent toutes deux des profils de déplétion variant de moins d'un ordre de grandeur en abondance. Enfin, N₂H⁺ présente un profil d'abondance de déplétion variant d'un facteur 10 entre 10^4 et 10^6 cm^{-3} .

4.4 Modèles chimiques pour L694

Comme pour L429-C, nous avons modélisé L694 avec Nautilus afin de comprendre les observations gazeuse obtenue. La contrainte de désorption non-thermique du méthanol sera ici limitée à un seul

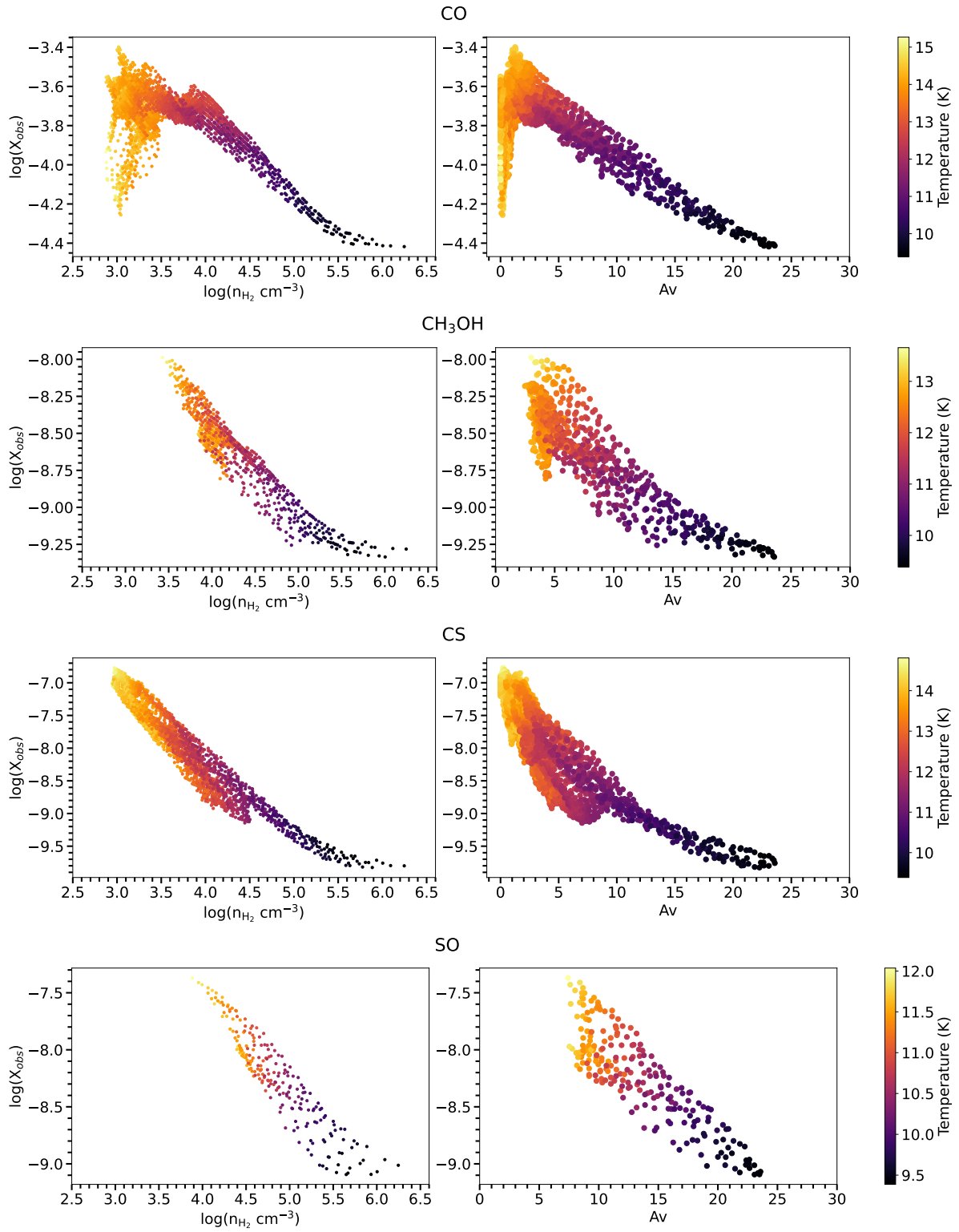


FIGURE 37 – À gauche, les abondances en fonction de la densité volumique (en logarithme). À droite, l'abondance en fonction de l'extinction visuelle A_v .

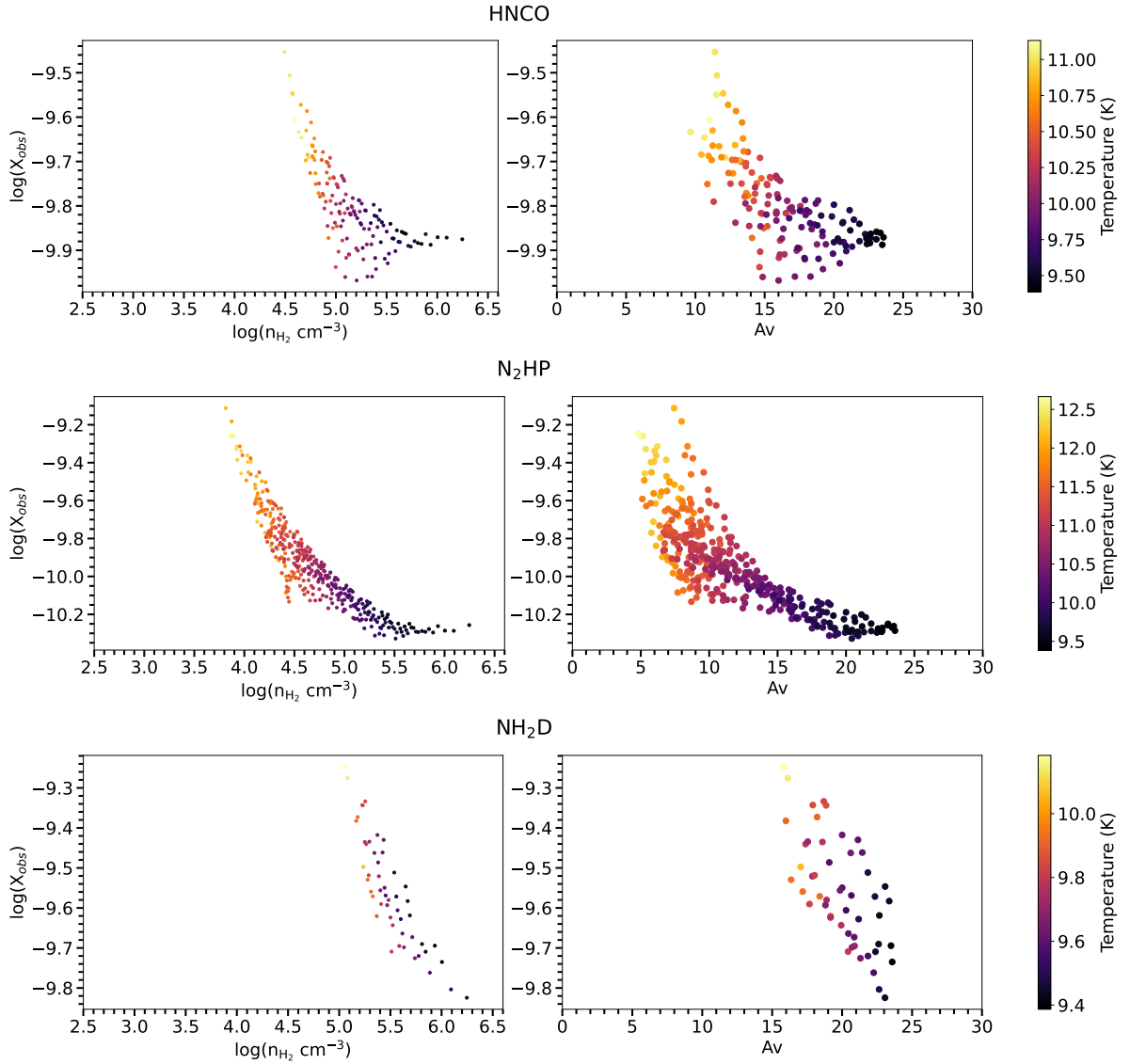


FIGURE 38 – Môme description que la Figure 37, mais pour HNC, N_2H^+ , NH_2D .

point (dont les densités de colonne observées sont données dans la Table 7). Ces prédictions nous seront utiles lorsque les données JWST du nuage seront disponibles.

4.4.1 Paramètres du modèle

Les grilles de modèles utilisées pour L694 sont basées sur les paramètres physiques dérivés avec les mesures d'*Herschel*, présentés dans la Figure 39. Les valeurs limites de ces grilles de paramètres sont basées sur la fenêtre d'observation de CH_3OH . Ce dernier ayant été observé sur une large gamme de densités, nous avons créé un espace logarithmique de 7 valeurs, variant entre 10^4 et $2.5 \times 10^6 \text{ cm}^{-3}$. Comme pour L429-C, la température du gaz n'a pas été déduite de l'analyse spectrale

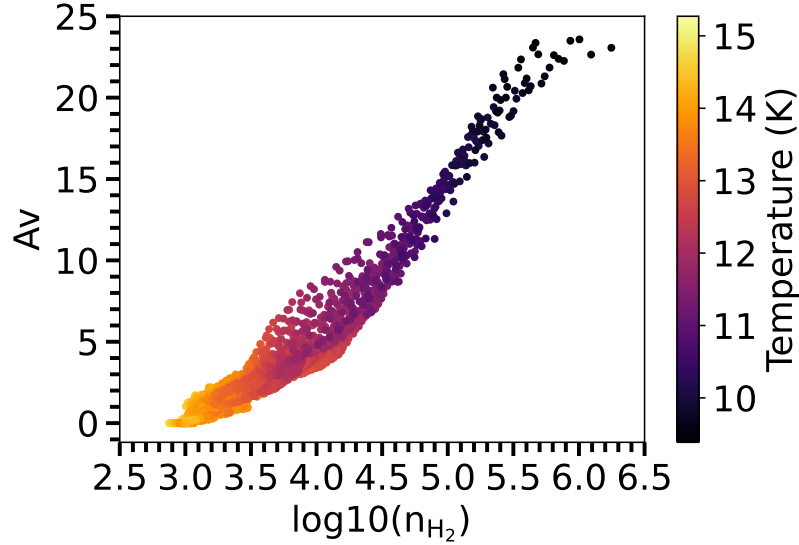


FIGURE 39 – A_V en fonction de n_{H_2} (cm^{-3}) et de la température (K) en échelle de couleur. Tous ces paramètres ont été déduits des observations de *Herschel*.

et est donc égale aux températures mesurées par *Herschel*. Elle varie dans un espace linéaire de 9.4 à 12.5 K. L’extinction visuelle varie entre 4.6 et 30. Comme pour L429-C, nous faisons également varier deux paramètres physiques : le taux d’ionisation par CR (10^{-17} s^{-1} pour la faible ionisation et $3 \times 10^{-17} \text{ s}^{-1}$ pour la forte ionisation) et le taux d’érosion par CR (pour une glace d’eau ou de CO_2). Cela fait donc un total de 4 grilles de 7 modèles. La température des grains est calculée avec la formule dérivée de [Hocuk et al. \(2017\)](#), dépendante de l’ A_V .

TABLE 6 – Sets des modèles chimiques.

Number	Name	Sputtering yield	ζ (s^{-1})
Set 1	Low yield and CR	H_2O -rich ices	10^{-17}
Set 2	Low yield and high CR	H_2O -rich ices	3×10^{-17}
Set 3	High yield and low CR	CO_2 -rich ices	10^{-17}
Set 4	High yield and CR	CO_2 -rich ices	3×10^{-17}

4.4.2 Comparaison entre les abondances modélisées et observées dans le gaz

Comme décrit dans le Chapitre 2.5.5, nous faisons tourner les modèles jusqu’à 10^7 années et vérifions quel pas de temps dans Nautilus est optimal pour reproduire les observations en phase gazeuse. Dans le cas de L694, seules quelques molécules sont détectées sur une assez grande gamme de densité pour être prise en compte dans l’obtention de la distance de désaccord. Il s’agit de CO, CS, SO et CH_3OH . Pour les mêmes raisons que L429-C, SO n’est pas considéré dans le calcul faute d’une chimie pas assez bien contrainte. Les temps reproduits ont une tendance similaire avec L429-

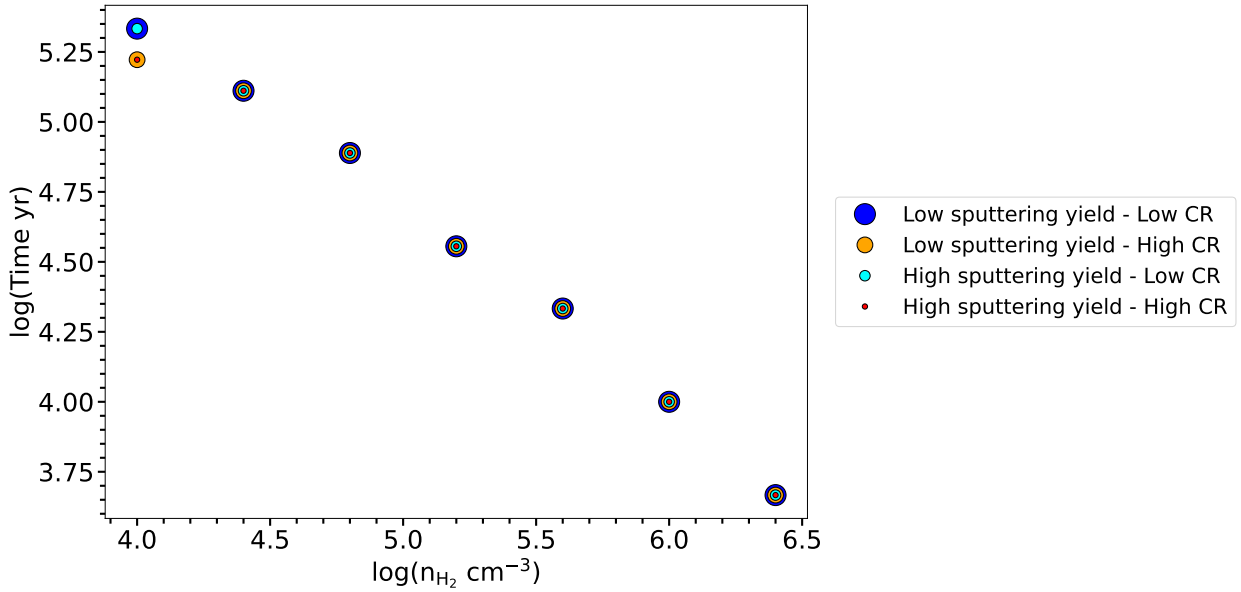


FIGURE 40 – Meilleurs temps obtenus en utilisant la distance de désaccord des trois molécules suivantes, CO, CS et CH_3OH , en fonction de la densité.

C : le temps nécessaire pour reproduire les observations devient de plus en plus court quand la densité augmente. Tous les jeux de modèles suivent cette tendance, variant de 1.7×10^5 années à 10^4 cm^{-3} jusqu'à 5.6×10^3 années à $2.5 \times 10^6 \text{ cm}^{-3}$. Dans tous les modèles, la distance de désaccord est contrainte majoritairement par le CO. L'abondance de la molécule de gaz augmente petit à petit jusqu'à atteindre une abondance maximum, puis subit une forte déplétion de plusieurs ordres de grandeur jusqu'à se stabiliser à une certaine valeur. L'explication serait la même que celle décrite dans le Chapitre 3 Section. 3.4.2.

4.4.3 Qualité de l'ajustement

Dans les Figures 42 et 43, nous comparons la qualité de l'ajustement du modèle avec les observations en gaz que nous avons effectué en traçant le rapport entre abondances modélisées et abondances observées. Les abondances sont globalement reproduites à moins d'un facteur 10 pour toutes les molécules sauf HNCO, qui est reproduit avec moins d'un facteur 20. En regardant dans un premier temps la première figure, on peut voir que le CO est bien reproduit jusqu'à $\sim 5 \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$ dans les quatre sets. À plus haute densité, l'abondance est sous-produite d'un facteur 2. Le CS présente un comportement similaire pour la faible ionisation des CR, sauf qu'il est au contraire sur-produit d'un facteur 2. Dans le cas de la forte ionisation par les CR, il est très bien reproduit. Le méthanol, dans le cas du Set 1 est bien reproduit à basse densité mais son abondance est sous-produite jusqu'à un facteur 10 à haute densité. Pour le Set 2, il est également sous-produit sur la totalité de la gamme de densité. Pour les Set 3 et 4, il est sur-produit à basse densité, atteint un accord avec les observations à $\sim 5 \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$ puis est sous-produit d'un facteur 2. La Figure 43 nous permet de regarder les molécules de HNCO, SO et N_2H^+ . Dans le cas de SO, il est sur-produit sur pratiquement la totalité de la gamme de densité, avec une sous-production à la densité à la plus

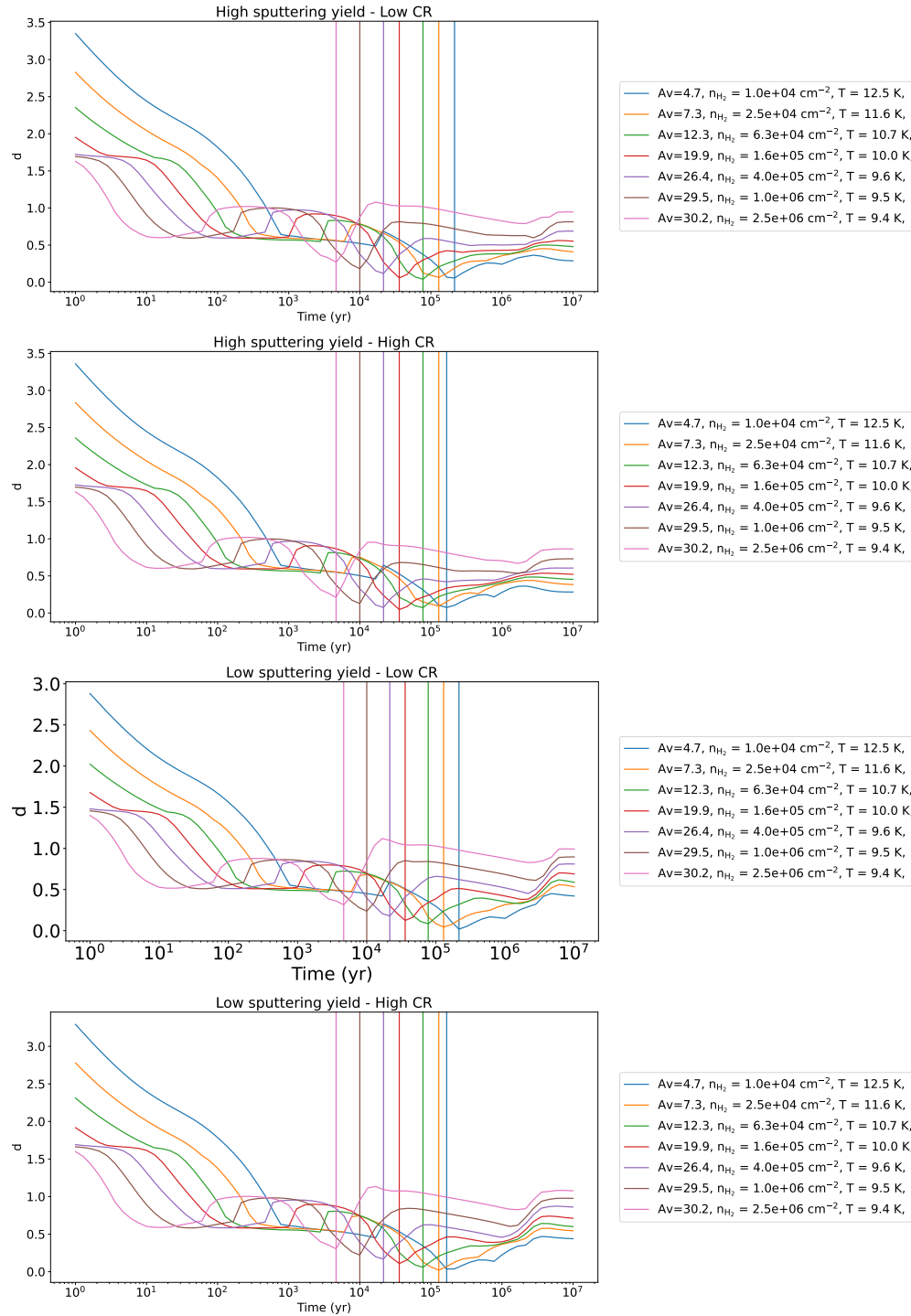


FIGURE 41 – Distance de désaccord d pour les 7 modèles en fonction du temps pour chaque set. Chaque figure représente le résultat d'un set de modèles. La légende donne les paramètres physiques associés aux modèles montrés ici. Les lignes verticales représentent la plus petite distance de désaccord et le temps qui y est associé.

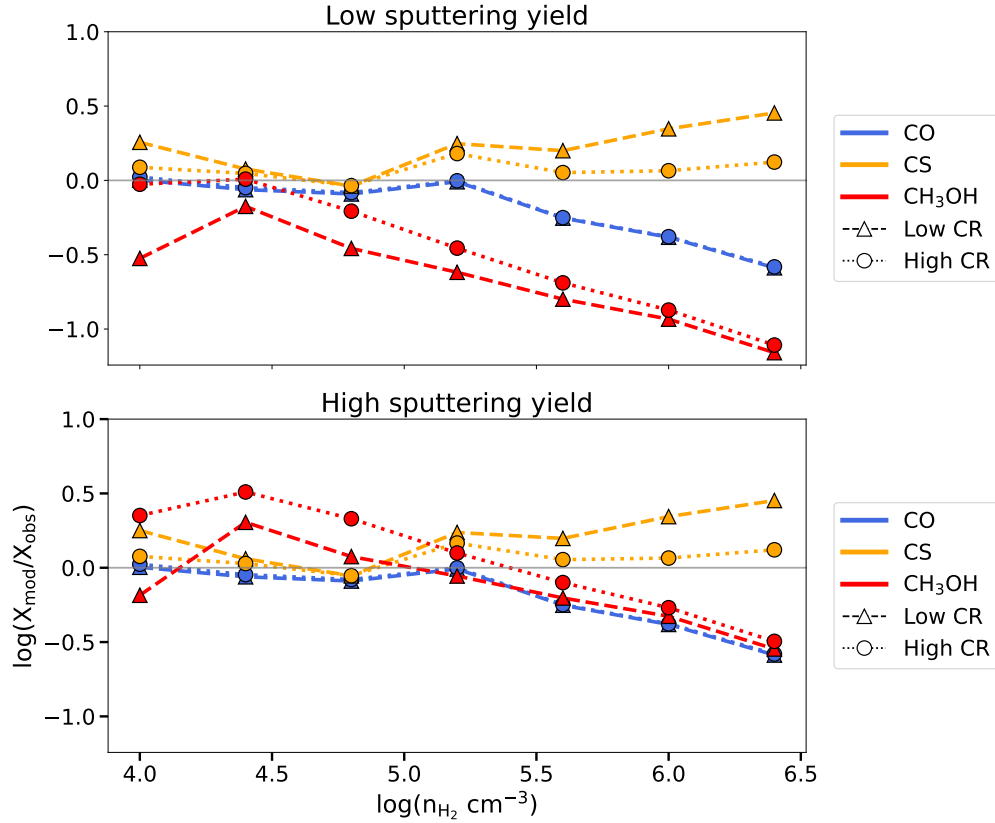
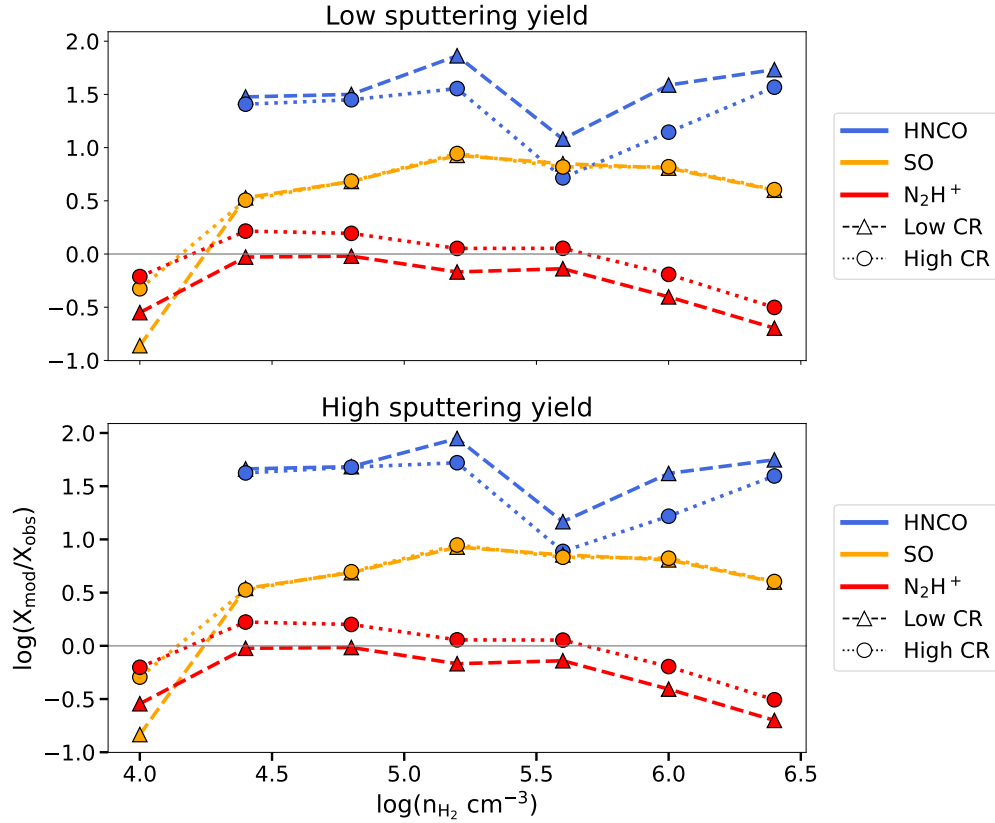


FIGURE 42 – Rapports entre les abondances modélisées (X_{mod}) et les abondances observées (X_{obs}) dans le gaz pour CO, CS, CH₃OH, et H₂S en fonction de la densité et à chaque meilleur temps pour les 4 jeux de modèles.

basse. N₂H⁺ est plutôt bien reproduit sur la totalité de la gamme de densité. HNCO est la molécule la moins bien reproduite, avec une sur-production bien plus importante que les autres molécules sur la gamme de densité sur lequel il est observé. Les deux meilleurs sets semblent être les Sets 3 et 4 (glaces de CO₂), avec des prédictions très proches. Le Set 3 reproduit mieux le CS alors que le Set 4 reproduit mieux le méthanol.

Dans [Wirström et al. \(2016\)](#), les auteurs ont observé des abondances de O₂ dans L694 de l'ordre de $< 1.6 \times 10^{-7}$ sur le pic de continuum. Nautilus prédit une abondance de $\sim 5 \times 10^{-7}$ pour l'abondance la plus haute (similaire pour tous les sets de modèles), ce qui est sur-produit d'un facteur 3 par rapport aux observations des auteurs.

La glace de CO ayant été observée par [Chu et al. \(2020\)](#) et dont la valeur est reportée dans la Table 7, nous pouvons la comparer avec les modèles. L'abondance obtenue à cette position en utilisant notre carte de N_{H2} est de $\sim 3.3 \times 10^{-5}$. Les modèles produisent une abondance de CO croissante avec la densité, comme on peut le voir dans la Figure 44. La valeur observée est pratiquement parfaitement reproduite par les modèles à faible ionisation par les CR (modèles bleu et vert dans la figure).

FIGURE 43 – Semblable à la Figure 42 mais pour HNCO, SO et N₂H⁺.

4.5 Contraindre la désorption non-thermique du méthanol dans L694

Source Position 2MASS J	Star Type	N(H ₂ O)	N(CO)		N(CH ₃ OH)	
		10 ¹⁸ cm ⁻²	10 ¹⁷ cm ⁻²	% H ₂ O	10 ¹⁷ cm ⁻²	% H ₂ O
19405855+1054527	M5.5III	< 0.17	< 1.1
19410754+1056277	M2III	2.10 (0.24)	11.13 (0.51)	53.0 (6.5)	2.98 (0.12)	14.2 (1.70)
19411163+1054416	K3.5III	0.46 (0.07)	0.52 (0.26)	11.3 (5.8)

TABLE 7 – Densités de colonne des glaces détectées dans L694 provenant de l'étude de [Chu et al. \(2020\)](#). Les “...” signifient qu'il n'y a pas de détection confirmée.

Avec seulement une observation de glace de méthanol dans L694, l'étude va être un peu plus courte qu'avec L429-C, ne permettant pas non plus de discuter d'une éventuelle évolution avec la densité. En attendant les résultats des observations JWST de la source, nous pouvons quand même nous intéresser à la reproduction de ces données par les modèles. La région dans laquelle la glace est

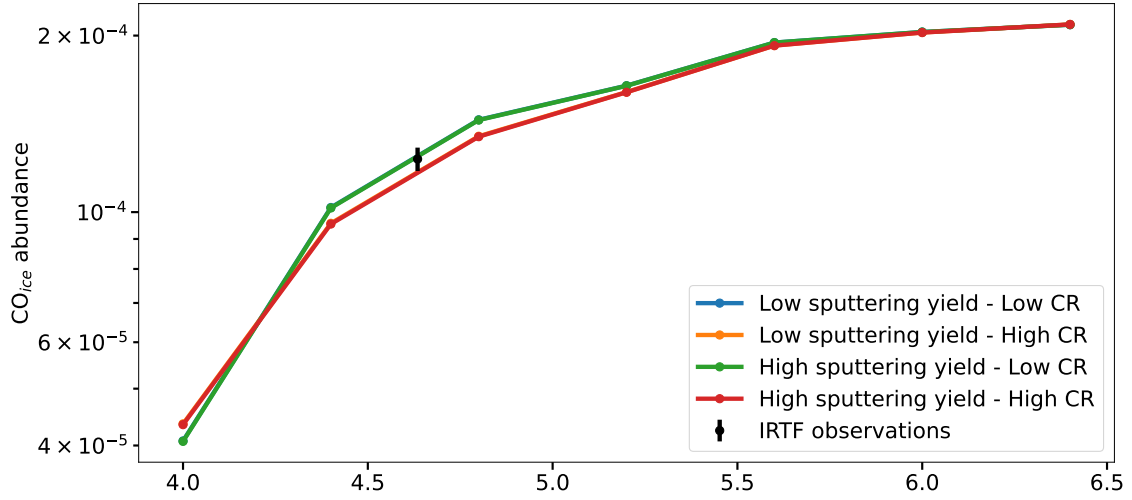


FIGURE 44 – Abondance du CO dans les glaces pour les différents modèles et l’observation effectuée par [Chu et al. \(2020\)](#) en fonction de la densité. Les modèles rouge et oranges se superposent et les modèles bleu et vert également.

observée est représentée par la croix verte dans la Figure 35. Comme pour L429-C, le réservoir de méthanol se trouve dans les glaces, autant dans les observations que dans les simulations.

La valeur observée dans ce nuage est semblable à celles observées dans L429-C, autour de $\sim 3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ (voir la Table 7). Le modèle sous-estime cette valeur d’un facteur ~ 2 pour les modèles à haute ionisation par les CR et d’un facteur ~ 3 pour les modèles à faible ionisation.

Lorsque nous nous tournons vers la désorption non-thermique du méthanol, nous pouvons déduire un rapport de gaz-sur-glace pour les observations de l’ordre de $\sim 0.0054\%$ à une densité de $\sim 4.3 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$. Comme pour le nuage précédent, cette efficacité dans les modèles décroît avec la densité. Les modèles de glaces d’eau ont des rapports plus faibles que les modèles de glaces de CO_2 . Pour le Set 1, ce rapport varie de 0.0071% (10^4 cm^{-3}) jusqu’à 0.0008% ($3.1 \times 10^6 \text{ cm}^{-3}$), de 0.017% à 0.0010% pour le Set 2, de 0.015% à 0.0036% pour le Set 3 et enfin de 0.04% à 0.0066% pour le Set 4. Les valeurs à la densité de 10^4 cm^{-3} pour les modèles à faible ionisation des CR sont légèrement inférieures aux valeurs suivantes en densité. Cela semble provenir de l’efficacité du mécanisme de désorption par les CR, puisque les abondances de méthanol dans les glaces sont les mêmes que pour les modèles à forte ionisation par les CR (pour le même type de glace). Ce mécanisme semble légèrement moins efficace à faible densité. Si l’on considère les incertitudes dans les deux phases observées, notre résultat modélisé est très satisfaisant. Le meilleur set de modèles qui reproduit ce rapport est donc le Set 1 (glaces d’ H_2O et faible ionisation par les CR).

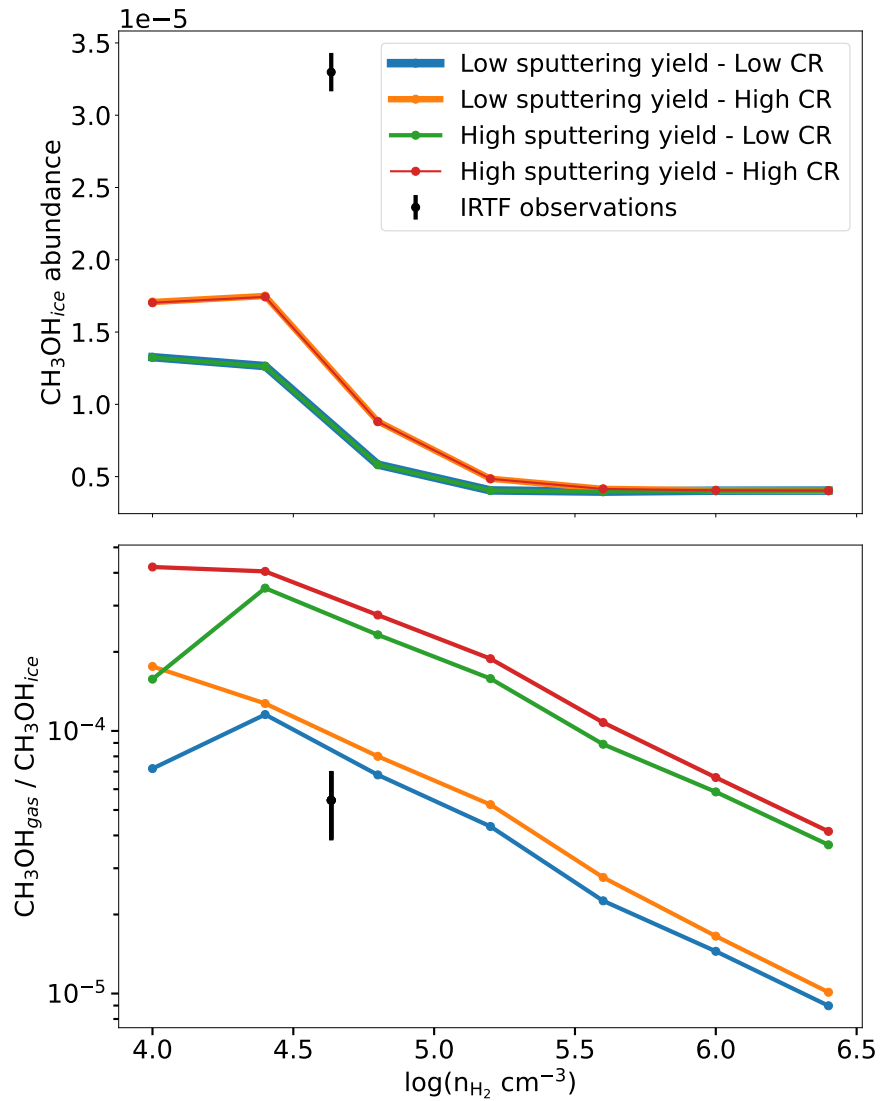


FIGURE 45 – Haut : Abondances de glace du méthanol obtenues via Nautilus en fonction de la densité. Le point noir (avec la barre d’incertitude) correspond à l’observation de [Chu et al. \(2020\)](#) à la position observée. À noter que les courbes rouge et orange se superposent. Bas : Rapport de l’abondance gaz-sur-glace du méthanol, en fonction de la densité, pour les différents jeux de modèles au meilleur temps et les observations (points noirs) avec leurs incertitudes (barre noire).

5 | SynthIceSpec

Dans le cadre de cette thèse, j’ai pu rejoindre le consortium Early Research Science (ERS) IceAge (ERS#1509, PI : M. McClure) qui a pu profiter des premières observations du JWST. Cet ERS a pour but d’étudier les premières étapes de la formation des étoiles et comprendre la formation des premières glaces jusqu’aux molécules dites prébiotiques. L’ERS a également été construit afin de fournir un aperçu des capacités du JWST dans la précision des spectres et dans l’obtention des densités de colonne des molécules à la surface des grains. La région cible de cette étude est Chameleon I, un nuage moléculaire possédant un éventail surprenant d’éléments appartenant au cycle de formation des étoiles avec la présence d’un supposé cœur dense, une proto-étoile de classe 0 et une proto-étoile de classe I. Les premiers résultats de l’étude de [McClure et al. \(2023\)](#) se sont basés sur l’observation de deux étoiles de fond et ont pu produire deux spectres d’une complexité et d’une résolution jamais atteintes auparavant. La richesse des détails obtenus nous apprend énormément de choses sur la chimie du milieu mais nous donne également des informations essentielles sur la structure de la glace. Le traitement de ces deux spectres (publiés comme tels dans l’étude, retravaillé depuis) a pris plus de six mois. Seulement, le JWST nous promet des dizaines de ligne de visée pour une seule région. Il est donc inimaginable d’avoir une analyse aussi longue pour chaque étoile observée. Ainsi, dans le cadre de cet ERS et plus généralement dans les nouvelles observations attendues par le JWST, nous avons travaillé sur un outil de prédiction et d’aide à l’analyse de ces futures données. Ce projet se nomme SynthIceSpec (pour *Synthetic Ice Spectra*) et a pour but de créer des observations synthétiques de spectres de glace, en se basant sur la capacité des instruments, les prédictions de notre modèle chimique mais également les contributions spectrales des étoiles de fond.

Nous allons détailler dans ce chapitre le développement de cet outil, son fonctionnement de base, les instruments reproduits et enfin les contributions en plus des molécules (rougissement, spectre d’étoile de fond et contribution des silicates).

5.1 James Webb Space Telescope

Lancé en décembre 2021 après plus de 15 ans de construction, le James Webb Space Telescope (JWST) a enfin commencé à observer en juillet 2022. Ce télescope spatial gigantesque de 6 tonnes a pris la suite du satellite *Hubble* dans la quête d’imager l’univers dans une partie du visible mais surtout dans l’infrarouge. Son domaine de longueur d’onde d’observation est compris entre 0.6 et 28 μm , soit du orange à l’infrarouge moyen. Doté de 18 segments hexagonaux de 1.3 m de côté chacun (soit un diamètre de 6.5 m) arrangés en une structure en nid d’abeilles qui forment le miroir principal. Cette structure pouvait ainsi être “articulée” de telle sorte que le télescope tout entier puisse être inséré dans la coiffe de la fusée Ariane 5 qui a permis de mettre le JWST en orbite au point Lagrange L_2 du système Soleil-Terre. Sa résolution angulaire inégalée pour un télescope de ce type est de 0.1 seconde d’arc, pour une longueur de 2 μm . Comme *Herschel*, le bon fonctionnement des instruments opérant en infrarouge doit être assuré par une température très faible. Mais contrairement à *Herschel*, les instruments ne sont pas refroidis à l’hélium liquide. Afin de répondre à ce besoin, le JWST est équipé d’un bouclier thermique déployable, de 22 x 12 m. Quatre instruments ont été montés avec

le télescope, permettant une grande diversité d'études dans plusieurs longueurs d'onde clés et avec chacun sa spécificité instrumentale (résumées selon les modes d'observation dans la Figure 46).

NIRCam : *Near Infrared Camera* est l'imageur principal du JWST, opérant entre 0.6 et 5 μm . Il permet de faire de l'imagerie, mais également de la coronagraphie (qui permet de détecter des objets cachés en orbite autour d'objets plus lumineux, comme les exoplanètes en formation par exemple), de la spectroscopie et permet l'alignement des miroirs principaux. NIRCam permet de détecter la lumière des premières étoiles et des galaxies en formation, mais également d'étoiles en formation. Son pouvoir de résolution angulaire est de 0.07 seconde d'arc à 2 μm . NIRCam possède deux modules, un couvrant les ondes courtes (0.6 à 2.3 μm), l'autre les ondes longues (2.4 à 5 μm). Leur champ optique est de 2,2' x 2,2' chacun et ont une résolution spatiale de 0.03" et 0.06" respectivement.

MIRI : *Mid InfraRed Instrument* est le seul instrument qui permet d'observer dans l'infrarouge moyen, allant de 5 à 28 μm . Il peut fournir des images, de la coronagraphie, de la spectroscopie à basse résolution et de la spectroscopie à champ intégral à moyenne résolution. Il a été conçu pour permettre d'étudier la formation et évolution des galaxies à haut redshift mais permet aussi d'étudier la formation des étoiles et des planètes, les disques protoplanétaires et la nucléosynthèse des éléments lourds. MIRI possède une fenêtre très intéressantes de longueur d'ondes qui va permettre la détection et l'étude des mécanismes de formation des COMs sur les grains de poussière.

NIRSpec : *Near Infrared Spectrograph* (0.6 et 5 μm , comme NIRCam), a trois modes de fonctionnement principaux : fente fixe, champ intégral et Micro-Shutter Assembly (MSA). Ce dernier permet l'observation simultanée de plus de 100 sources sur un champ 3.6' x 3.6'. Ce mode d'opération, dit mode multi-objets, fonctionne grâce à une matrice de micro-obturbateurs, qui s'ouvrent et se ferment selon la position dans le champ. Cet instrument permet de sonder un domaine de 1 à 5 μm à sa résolution la plus basse (mode "PRISM"). Le mode champ intégral permet de sonder un champ optique de 3 x 3 secondes d'arc, avec une résolution spectrale pouvant être de 100, 1000 et 2700.

NIRISS/FGS : *Near Infrared Imager and Slitless Spectrograph* est un spectrographe grand-champ avec réseau-prisme (permettant de disperser la lumière sans bouger le chemin optique), couplé à la caméra de guidage fin (FGS). Cette dernière permet de trouver les étoiles de fonds à imager et mais aussi de détecter les erreurs de pointage. NIRISS est le seul instrument à être équipé d'un masque d'ouverture : l'interféromètre par masquage non-redondant (NRM) permet de cibler les objets uniques très brillants avec une meilleure résolution angulaire que les autres instruments du JWST. NIRISS opère sur les mêmes longueurs d'ondes que NIRCam et NIRSpec, de 1 à 5 μm .

5.2 Description de SynthIceSpec

SynthIceSpec prend en entrée les densités de colonne des molécules présentes dans la glace, le type spectral de l'étoile considérée dans l'observation (avec ses paramètres intrinsèques T_{eff} , $\log(g)$ et Z) et la quantité de silicates attendues. Les densités de colonne peuvent être injectées manuellement ou calculées à partir de Nautilus. Nous allons décrire ici le fonctionnement du code.

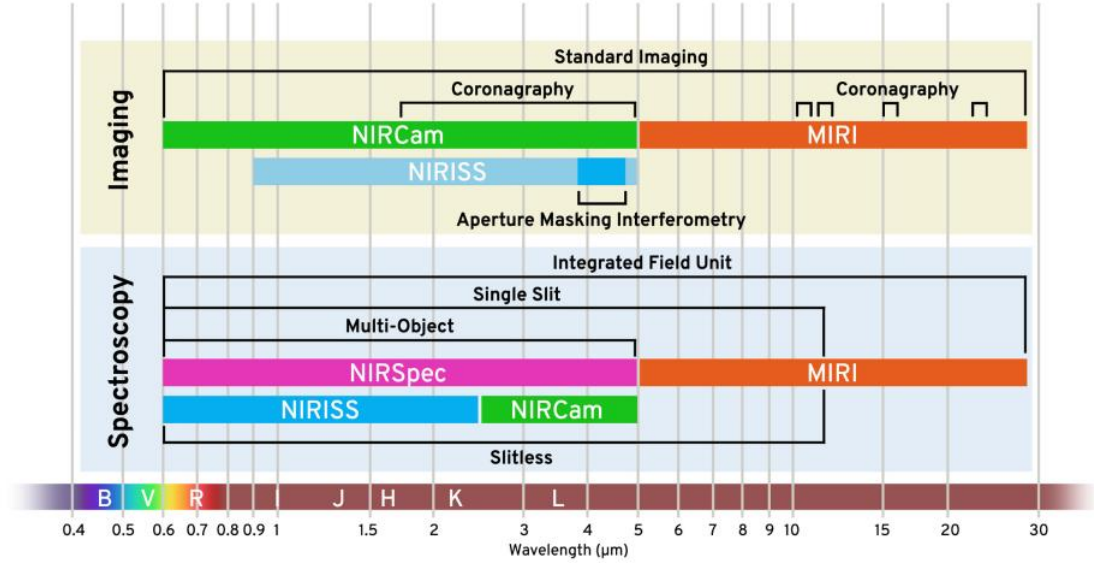


FIGURE 46 – Les différents modes d’observation du JWST pour chaque instrument et leur domaine en longueur d’onde. Crédits : Space Telescope Science Institute.

5.2.1 Molécules et calcul des densités de colonne

Nous avons d’abord commencé par les espèces dominantes (H_2O , CO , $\text{CO}_2\dots$) et quelques espèces plus complexes (H_2CO , CH_3OH , $\text{HCOOH}\dots$). Comme les espèces chimiques possèdent plusieurs groupes fonctionnels, certaines molécules peuvent participer au spectre à plusieurs positions en longueur d’onde. Ces modes de vibration sont donc dépendants de la géométrie de la molécule et peuvent être des vibrations d’élongations, de déformation angulaire, de libration. L’intensité de la bande est dépendant du moment de transition, qui est lui-même dépendant entre-autre, de l’activation du moment dipolaire de la molécule par excitation du mode, ainsi qu’à sa concentration dans le milieu. La largeur de la bande et sa géométrie sont modifiées par les interactions intermoléculaires, du milieu et de la structure du grain sur lequel elles se trouvent et du grossissement des grains (Dartois et al. 2022). D’autres mécanismes comme la diffusion ou le chauffage peuvent intervenir dans la déformation des bandes.

Afin de simplifier au mieux les spectres et le traitement de chaque molécule et leurs vibrations, chaque mode de vibration des glaces est représenté par une Gaussienne ou une somme de Gaussiennes (ceci est valide avec un axe des x en fréquence/énergie, usuellement en cm^{-1} , $\bar{\nu}$), l’axe en microns s’obtenant par $10^4/\bar{\nu}$. Le lien entre la densité de colonne d’une molécule et l’épaisseur optique pour l’une des bandes correspondant à un mode de vibration est au premier ordre, en adoptant un profil Gaussien :

$$\tau(\bar{\nu}) = \tau_{\max} \exp\left(-\frac{4 \ln(2)(\bar{\nu} - \bar{\nu}_0)^2}{\Delta_{\bar{\nu}}^2}\right) \quad (86)$$

$$\tau_{\max} = N \times A_{\text{mode}} \times \frac{2\sqrt{\ln(2)}}{\Delta_{\bar{\nu}}\sqrt{\pi}} \quad (87)$$

Avec $\bar{\nu}_0$ la fréquence de vibration, N la densité de colonne de l'espèce considérée, $\Delta_{\bar{\nu}}$ largeur totale à mi-hauteur et A_{mode} la force de la bande. Le spectre en absorption est obtenu en prenant $\exp(-\tau(\bar{\nu}))$.

Pour l'opération inverse de déduire la densité de colonne à partir du spectre on peut utiliser :

$$N = \int \frac{\tau(\bar{\nu})d\bar{\nu}}{A_{mode}}$$

5.2.2 Instruments

Les caractéristiques de NIRC*am*, NIR*Spec* et MIRI ont été ajoutées dans SynthIceSpec avec plusieurs modes d'observations possibles. Comme décrit dans la section précédente, les instruments ont chacun un pouvoir de résolution et un intervalle d'observation de longueur d'onde propre. C'est également le cas de leur différent mode d'observation et filtre utilisé (qui ici, ne seront pas traités). Les résolutions varient elles-mêmes avec la longueur d'onde. Ces paramètres sont disponibles depuis les tests techniques effectués en Juillet 2022 sur le site du Space Telescope Science Institute (ST*ScI*)⁶ et sont en cours de modification pour chaque instrument et mode d'observation. Malheureusement, dans le cas de MIRI qui a subi des problèmes techniques dès le lancement, les informations techniques ne sont toujours pas disponibles et dans ce cas particulier, nous avons pris une valeur moyenne de la résolution pour toute la gamme de longueur d'onde. Les paramètres exactes seront ajoutés dans SynthIceSpec dès leur apparition sur le site du ST*ScI*. Dans la Figure 47, on peut voir les différents pouvoirs de résolutions pour le mode PRISM et les réseaux de diffraction (*gratings*) à haute et moyenne résolution (dénoté par la lettre H ou M dans le nom).

L'utilisateur a donc le choix de l'instrument ainsi que le mode d'observation qu'il veut utiliser dans SynthIceSpec. Ce paramètre est pris en entrée du programme et peut combiner plusieurs instruments ensemble (comme par exemple, NIRC*am* + MIRI) afin de couvrir une large gamme de longueur d'onde. Le code va ensuite faire une convolution entre la résolution de l'instrument choisi et le spectre synthétique.

5.2.3 Silicates

Les silicates ont une place importante dans les spectres de glace puisqu'ils participent à une forte absorption sur certaines bandes (par exemple, la bande dominante autour de 9.7 μm). [Draine & Lee \(1984\)](#) ont défini les propriétés optiques des grains de silicate, aussi appelés "astro-silicates", en se basant sur les modèles MRN ([Mathis et al. 1977](#)). Ces modèles reproduisent bien les extinctions observées en IR et ont donc permis de contraindre la contribution des silicates dans les spectres. Pour ajouter cette contribution importante, nous avons ajouté un spectre de silicate produit par un modèle de transfert de rayonnement (E. Dartois, communication privée). Le fichier d'entrée se présente comme un coefficient d'extinction massique (en $\text{cm}^2.\text{g}^{-1}$) pour un grain sphérique de silicates purs, calculé via les constantes optiques de [Draine \(Draine & Lee 1984\)](#), pour un grain de rayon 0.1 μm . Pour comparer aux observation, il faut donc fabriquer l'épaisseur optique τ :

$$\tau = (\kappa_{abs} + \kappa_{sca}) \times N_{grains} \times m_{grain} \quad (88)$$

Avec κ_{abs} et κ_{sca} (en $\text{cm}^2.\text{g}^{-1}$) respectivement les coefficient d'absorption et de diffusion, N_{grains} la densité de colonne de grain (cm^{-2}) et m_{grain} la masse des grains. Dans le cas d'une extinction pure,

6. <https://jwst-docs.stsci.edu/>

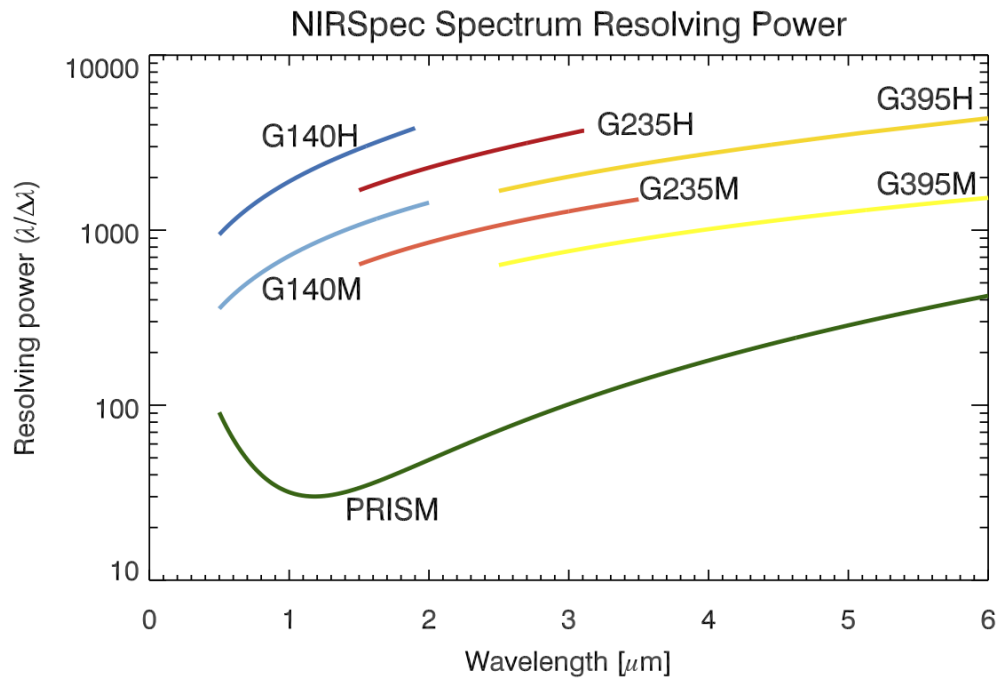


FIGURE 47 – Les différents pouvoirs de résolution du prisme (PRISM) et des réseaux de diffraction (les courbes notées “G” + le chiffre désignant le pic de la bande observée + “M” ou “H” pour les modes “Moyenne” et “Haute” résolution) de NIRSpec, en fonction de la longueur d’onde. Le pouvoir de résolution est calculé en supposant la résolution spectrale d’un élément de taille de 2.2 pixels (typiquement pour une fente complètement illuminée). Crédits : STScI

l'observation est donc donnée par $\exp(-\tau)$. Autrement dit, on peut calculer le spectre résultant de l'absorption des glaces et des silicates avec une approximation de premier ordre avec $\exp(\tau + \tau_{ice})$. Pour déterminer le nombre de grains sur la LDV, nous utilisons une approximation dépendante de la densité de colonne d'hydrogène telle que $N_{grains} = N_H / GTD$ avec GTD le rapport gaz-sur-grain. La contribution des silicates peut être facilement modifiée par l'utilisateur, en entrée du code.

Pour le moment, SynthIceSpec ne contient qu'un seul fichier pour un seul type de silicates. L'ajout de nouveaux spectres fait partie des contributions futures dans le code.

5.2.4 Bruit

Des premières données obtenues par le JWST sur des spectres de glaces (McClure et al. 2023), nous avons pu extraire un niveau de bruit moyen sur tout le spectre. Nous ajoutons artificiellement une valeur (de l'ordre de 10^{-3} mJy) à l'ensemble du spectre afin d'ajouter un degré de réalisme sur les observations attendues.

5.3 Extinction et spectres d'étoiles

Dans cette section, nous allons détailler comment nous ajoutons une étoile de fond et le coefficient d'extinction qui s'applique afin d'obtenir un spectre aussi réaliste que possible.

5.3.1 Système photométrique

En astronomie, le système photométrique désigne l'ensemble des bandes optiques (ou filtres) ayant chacun une bande spectrale définie et couvrant un domaine spécifique du spectre électromagnétique. Le système photométrique de Johnson-Morgan Johnson & Morgan (1953) est utilisé pour désigner par des lettres les différents filtres (U pour Ultraviolet, B pour bleu, V pour visuel, R pour rouge et I pour infrarouge). L'infrarouge a cependant été défini plus en profondeur en suivant les fenêtres de transparence de l'atmosphère (bandes J, H, K L, M). Ces filtres sont utilisés en observation infrarouge pour désigner les longueurs d'ondes d'observation de certains instruments que nous utiliserons par la suite et sont décrits dans la Table 8.

5.3.2 Spectres d'étoiles

Les observations de glaces par absorption devant une étoile de fond, comme expliqué dans la méthodologie, apportent des éléments en plus sur les spectres : ce sont les raies photosphériques. Ces raies sont dues à l'absorption de la lumière émise par l'étoile par une partie de son atmosphère (la photosphère). La photosphère est une région de quelques centaines de kilomètres, assez large pour absorber certains photons émis par l'étoile. Les propriétés d'absorption de la photosphère sont liées en partie à la température de surface de l'étoile (qui peut varier de plusieurs milliers de Kelvins) la gravité de surface et la métallicité de l'étoile. La gravité de surface est l'intensité du champ gravitationnel à la surface de l'objet et la métallicité décrit la quantité d'éléments (autres que l'hydrogène et l'hélium) contenue par une étoile. La température effective détermine le type spectral de l'étoile et permettent de classer les étoiles.

Pour modéliser la contribution des étoiles dans SynthIceSpec, nous utilisons le modèle PHOENIX ainsi que sa base de données (Allard & Hauschildt 1995; Hauschildt et al. 1999; Gustafsson et al. 2008; Husser et al. 2013). Nous avons utilisé la librairie python PySynphot qui permet d'accéder au

Bande λ	Longueur d'onde (nm)	A_λ/A_V
U	360	1.531
B	450	1.324
V	550	1.000
R	660	0.748
I	800	0.482
J	1250	0.282
H	1650	0.175
K	2200	0.112
L	3500	0.058
M	4800	0.023

TABLE 8 – Système photométrique de Johnson-Morgan. La première colonne est le nom donné au filtre, la deuxième colonne correspond au pic de longueur d'onde dans lequel le filtre absorbe le plus et la troisième correspond au rapport de la bande considérée par rapport à la bande visuelle V.

catalogue de spectres.⁷ Ce modèle permet la production de spectres synthétiques de photosphères stellaires selon trois paramètres : la température effective de l'étoile (T_{eff}), la gravité de surface ($\log(g)$) et la métallicité ($[M]/[H]$). SynthIceSpec peut donc prendre en entrée n'importe quel type d'étoile et leurs paramètres associés afin d'ajouter au spectre de base la contribution des raies photosphériques. Les spectres de PHOENIX étant d'une excellente résolution, nous avons pu faire en sorte que leur résolution corresponde à celle de l'instrument choisi. Ainsi, nous avons la possibilité de superposer les deux.

Le JWST pouvant observer des dizaines d'étoiles à la fois, leur type spectral est rarement connu à l'avance, malgré les grands *surveys* effectués par exemple par *GAIA*, avec souvent des étoiles rouges qui ne sont pas détectables par *GAIA* dans le visible. Cependant, l'implémentation de ce module dans SynthIceSpec permet en partie de montrer l'impact du type d'étoile observé sur la détection de certaines bandes. C'est par exemple le cas du “*dangling bond*” O-H, qui se trouve entre 2.6 et 2.8 μm et qui, de sa faible force de bande, peut être recouvert par les raies photosphériques, le rendant bien plus difficile à détecter (voir Section 5.4).

5.3.3 Extinction

L'observation par étoiles de fond nécessite de prendre en compte non seulement la contribution spectrale de l'étoile, mais également l'extinction de la lumière émise par cette dernière par le milieu se trouvant devant. Les grains étant très petits, la poussière va préférentiellement diffuser et absorber la lumière bleue par rapport à la lumière rouge dans le spectre optique à travers l'infrarouge. L'extinction en fonction de la longueur d'onde qui en résulte est appelée courbe d'extinction de la poussière (Draine 2003). Fitzpatrick & Massa (1986, 1988) ont pu calculer les paramètres effectifs de l'extinction en UV et en optique. Ce qui a permis à Cardelli et al. (1989), en étudiant les bandes IR (J, H et K) de spectres stellaires, de montrer que l'extinction totale par rapport à la bande considérée pouvait se résoudre à un paramètre de variation R :

7. <https://pysynphot.readthedocs.io/>

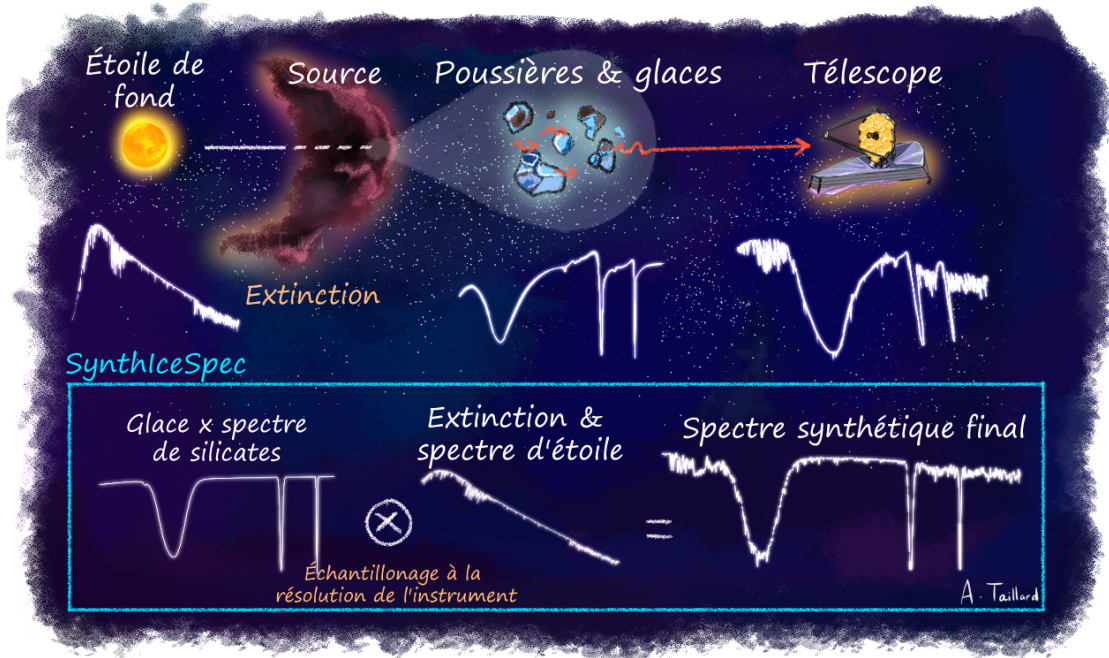


FIGURE 48 – Illustration d’une véritable observation effectuée par JWST en comparaison au fonctionnement de SynthIceSpec.

$$R(V) = \frac{A(V)}{E(B-V)} \quad (89)$$

Avec $A(V)$ l’extinction visuelle et $E(B-V)$ le rougissement de la bande bleue (B) par rapport à la bande visuelle (V). Cette courbe d’extinction permet d’en apprendre davantage sur les propriétés physiques de la poussière, notamment la distribution en taille de grain mais également à la formation des glaces sur les grains ou l’accrétion des grains dans les environnements denses pour $E(B-V) > 1$ (Whittet et al. 1988; Ysard et al. 2013).

Cependant, ces informations sur les bandes ne sont pas toujours disponibles et encore moins prévisibles dans le cadre de prédictions de spectres. Mais comme montré, l’extinction est directement liée à l’ A_V , qui peut être déduite en amont du futur milieu observé ou mise en entrée de Nautilus. Afin d’ajouter une loi d’extinction dans SynthIceSpec, nous avons utilisé le formalisme décrit dans Boogert et al. (2011) pour décrire l’extinction du continuum que l’on peut trouver dans les étoiles de fond. En connaissant le type spectral de l’étoile et les positions des bandes de glace, on peut en extraire la courbe d’extinction seule et l’ajouter. Dans cette étude, les auteurs ont trouvé que la courbe d’extinction peut être décrite par :

$$A_\lambda = -2.5 \log (F_\lambda(obs)/F_\lambda(model)) \quad (90)$$

Où $F_\lambda(obs)$ et $F_\lambda(model)$ sont respectivement le flux de l’étoile observée et le modèle d’étoile appliqué dessus. Dans le cas où les étoiles sont observées, $F_\lambda(model)$ est inconnu, car il n’y a pas de mesure de distance (dans SynthIceSpec, c’est $F_\lambda(obs)$ qui est inconnu, et sa distance également).

Afin de palier à ce problème, le modèle se voit appliquer un facteur tel que l'extinction A_λ obtenue suit une loi d'extinction de proche infrarouge (i.e., $A_\lambda \propto \lambda^{-1.8}$). Les auteurs ont pu ensuite séparer le continuum des bandes d'absorption en ajoutant un spectre de glace d'eau et un modèle de spectre de silicate à une région sans absorption grâce à un ajustement polynomial :

$$P = \log(A_\lambda/A_K) = \sum_{i=0}^8 a_i \log(\lambda)^i \quad (91)$$

Avec λ en μm , A_λ en magnitude et où les coefficients du polynôme peuvent être trouvés dans la Table 4 de l'article [Boogert et al. \(2011\)](#).

Afin d'ajouter l'équation dans SynthIceSpec, nous employons le processus inverse. Ici nous connaissons déjà le type spectral de l'étoile (entré par l'utilisateur), le flux de l'étoile modélisée et l' A_v de la région. Comme nous n'avons pas d'information sur la bande K, on calcule A_K via le rapport reporté dans la Table 8 avec $A(K) = 0.112 \times A_v$, où A_v est donné par l'utilisateur ou en entrée de Nautilus. On échantillonne ensuite le spectre modélisé de PHOENIX avec le spectre à la résolution de l'instrument choisi. Puis on calcule le coefficient d'extinction en appliquant le polynôme P à l' $A(K)$ calculé via A_v .

$$A_{\lambda,ext} = 0.112 \times A_v \times 10^P \quad (92)$$

Enfin on calcule le flux de l'étoile observée via l'équation 90 en l'isolant :

$$F_\lambda(obs) = F_\lambda(mod) \times \exp(-A_{\lambda,ext}/2.5) \quad (93)$$

On applique alors au spectre synthétique de glace avec l'étoile choisie avec PHOENIX, à la résolution de l'instrument, un coefficient d'extinction.

Le polynôme dérivé par [Boogert et al. \(2011\)](#) semble bien convenir aux faibles longueurs d'ondes mais mène à une extinction bien plus forte lorsque l'on dépasse les $\sim 7 \mu\text{m}$ (avec une convergence vers $-\infty$). Cette extinction augmente encore plus la contribution des silicates à $9.7 \mu\text{m}$ et n'est donc plus appropriée. Les études récentes confirment que la taille des grains jouent un rôle important dans l'extinction générée par les silicates dans les spectres étudiés ([Boogert et al. 2011](#); [Xue et al. 2016](#)) : la courbe d'extinction à IR moyen est aplatie, avec une variation difficile à déduire entre les milieux diffus et denses. Dans le futur, il serait intéressant de comparer avec des lois d'extinctions obtenues récemment (ou en cours de production avec les données JWST GTO Project "Icy Dust in Nearby Molecular Cores", PI : K. Hodapp) et de les appliquer à différentes régions du spectre, surtout sur la bande des silicates, afin de tester au mieux cet impact sur les spectres observés. Cela pourrait se coupler à de nouveaux modèles de silicates que nos collaborateurs pourraient apporter.

5.3.4 Sorties de Nautilus

SynthIceSpec est suffisamment souple pour que l'utilisateur utilise ses propres valeurs d'entrée pour les densités de colonnes des glaces. Cependant, cet outil a été pensé comme un outil de prédiction de spectres de glace à utiliser en amont d'observations et dans les proposals JWST. Nous avons donc ajouté la possibilité de lier les sorties de Nautilus, à savoir les abondances en fonction du temps, aux entrées de SynthIceSpec, soit les densités de colonne. L'utilisateur peut alors accéder à une évolution temporelle de ses spectres et voir l'évolution possible de la composition des glaces. Les

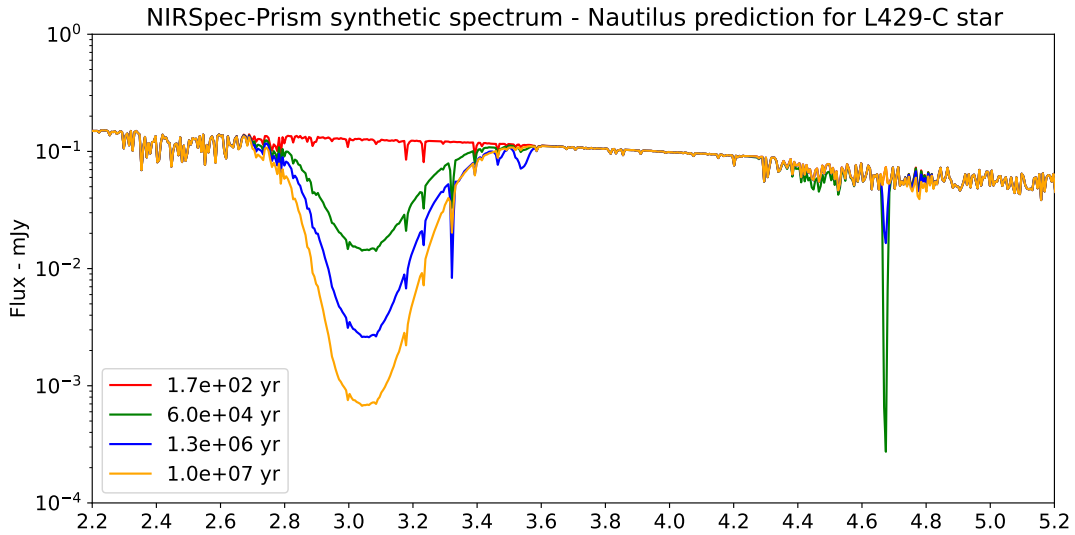


FIGURE 49 – Spectres synthétiques obtenus via Nautilus pour 4 temps différents, sur la même étoile de fond 2MASSJ 18170470-0814495 (type K7), avec les mêmes paramètres physiques ($A_v = 24.2$, $T_{gaz} = 14.5$ K, $N_H = 4.2 \times 10^{22}$ cm $^{-3}$, $\zeta = 3 \times 10^{-17}$ s $^{-1}$).

paramètres physiques de la région observée doivent être entrés en amont dans Nautilus (température, A_v , densité volumique d'hydrogène, densité de colonne d'hydrogène, taux d'ionisation des CR et tout autre paramètre ou processus physique nécessitant d'être changé). Le fichier de sortie de Nautilus étant des abondances, on transforme ces dernières en densité de colonne en les multipliant par la densité de colonne d'hydrogène d'entrée de Nautilus.

Dans la Figure 49, nous avons fait tourner un modèle avec les paramètres physiques suivants : $A_v = 24.2$, $T_{gaz} = 14.5$ K, $N_H = 4.2 \times 10^{22}$ cm $^{-3}$, $\zeta = 3 \times 10^{-17}$ s $^{-1}$. L'étoile choisie est une des étoiles observée par *Spitzer* dans L429-C. Cet exemple dépeint bien le changement de composition qui peut se produire pour une même observation à des temps très différents. On remarque que dans le temps le plus tardif (1×10^7 années), en orange, la bande d'eau à $3 \mu\text{m}$ est la plus profonde et la bande de CO à $4.7 \mu\text{m}$ n'est pas visible. Cela montre que l'eau se forme majoritairement par rapport à CO à des temps plus longs. On remarque également à $3.3 \mu\text{m}$ la bande du méthanol (étirement OH) qui est la plus importante à un temps de 1.3×10^6 années en bleu, au temps le plus évolué. Cet exemple montre l'importance de l'évolution chimique de la source et cette information temporelle est facilement changeable dans SynthIceSpec. On remarque également l'absence de bande de CO $_2$ à $4.2 \mu\text{m}$, provenant de la prédiction de Nautilus, qui à des $T_{grain} > 12$ K, ne forme pas assez de cette molécule. On peut voir également l'apport du spectre d'étoile de fond, notamment sur le spectre rouge qui n'a pas encore formé de molécules en assez grande quantité. On voit donc en particulier les raies photosphériques qui contribuent également aux autres spectres (par exemple les deux à ~ 3.15 et $3.2 \mu\text{m}$).

5.3.5 Spectre final

La sortie de SynthIceSpec est donc un spectre à la résolution et intervalle de longueurs d'ondes de l'instrument désiré, combiné à un spectre de silicate, multiplié par un spectre d'étoile auquel est appliqué une extinction. Tous les paramètres décrits auparavant peuvent avoir une contribution plus ou moins importantes et sont donnés en amont par l'utilisateur, en plus des densités de colonne de chaque molécule (manuellement ou via les sorties de Nautilus). Cela peut permettre d'avoir une idée du minimum de densité de colonne requis pour détecter une molécule dans des conditions physiques connues mais sans contrainte sur l'âge de l'objet. En résumé, voici la décomposition obtenue simplifiée, illustrée dans la Figure 50 :

- Spectre généré à partir de la base de données de propriétés des bandes des molécules mises en entrée à la résolution de l'instrument
- Spectre de photosphère de l'étoile observée, modélisé par PHOENIX
- Combinaison finale des spectres
- Ajout du bruit

5.4 Étude de cas - Dangling OH

La liaison pendante O-H, que l'on nommera par la suite *dangling bond*, est une bande très importante pour les astrophysiciens, dont la détection n'a pas été encore confirmée avec les observations de glace. La glace amorphe d'eau présente une structure poreuse (Rowland et al. 1991) et dans ces pores se trouvent des *dangling bond*. Ces *dangling bond* sont sensibles à l'adsorption des molécules de gaz, qui peuvent s'y accrocher. La détection du *dangling bond* permettrait donc de confirmer la nature poreuse de certaines glaces et de comprendre plus en profondeur la chimie de surface qui en découle. En laboratoire, la porosité de la glace d'eau dépend des conditions d'expérimentations : la température, le substrat, la vitesse de déposition (e.g., Hagen et al. 1983; Jenniskens & Blake 1994). La glace d'eau amorphe présente plusieurs bandes d'absorption à 3300 cm^{-1} ($3.03\ \mu\text{m}$, modes étirements O-H symétrique et anti-symétrique), 2205 cm^{-1} ($4.53\ \mu\text{m}$, mode de combinaison), 1650 cm^{-1} ($6.06\ \mu\text{m}$, mode harmonique de libration et de pliage) et à 803 cm^{-1} ($12.4\ \mu\text{m}$, mode de libration). On trouve également une autre contribution, du côté des longueurs d'ondes plus courtes du mode d'étirement O-H, dû au *dangling bond*. Dans la glace d'eau amorphe pure, cette contribution se traduit par deux bandes à 3720 cm^{-1} et 3696 cm^{-1} . Le *dangling bond* en particulier est très sensible à la température de la glace et de la présence de d'autres espèces (encore plus dans le cas d'un mélange. La Figure 51 montre la position et la morphologie du *dangling bond* pour l'eau pure et plusieurs mélanges. Or, si l'on prend un mélange d' H_2O et de CO_2 , la position et la forme du *dangling bond* va varier, avec les deux bandes se déplaçant à ~ 3695 et $\sim 3650\text{ cm}^{-1}$, avec une absorbance plus importante. Le *dangling bond* pourra même être complètement modifié si l'on prend un mélange $\text{H}_2\text{O}:\text{CO}$, avec les deux bandes qui se superposent en une seule composante.

Dans le cas de la glace d'eau interstellaire, on ne connaît malheureusement que peu de choses sur sa morphologie, mais on suppose qu'au vu de sa formation à partir de 10 K, elle devrait être amorphe (Hagen et al. 1981). Au vu de la quantité de glace d'eau à la surface des grains, la détection du *dangling bond* aurait du être détectée (Keane et al. 2001). Sa non-détection peut être due à plusieurs choses : la nature de la glace (à savoir le mélange et la structure de la matrice de glace) montre une différence notable dans la position et la force de la bande, la sensibilité des instruments, le bruit et la superposition des raies photosphériques dans la région où se trouve le *dangling bond*. Plusieurs

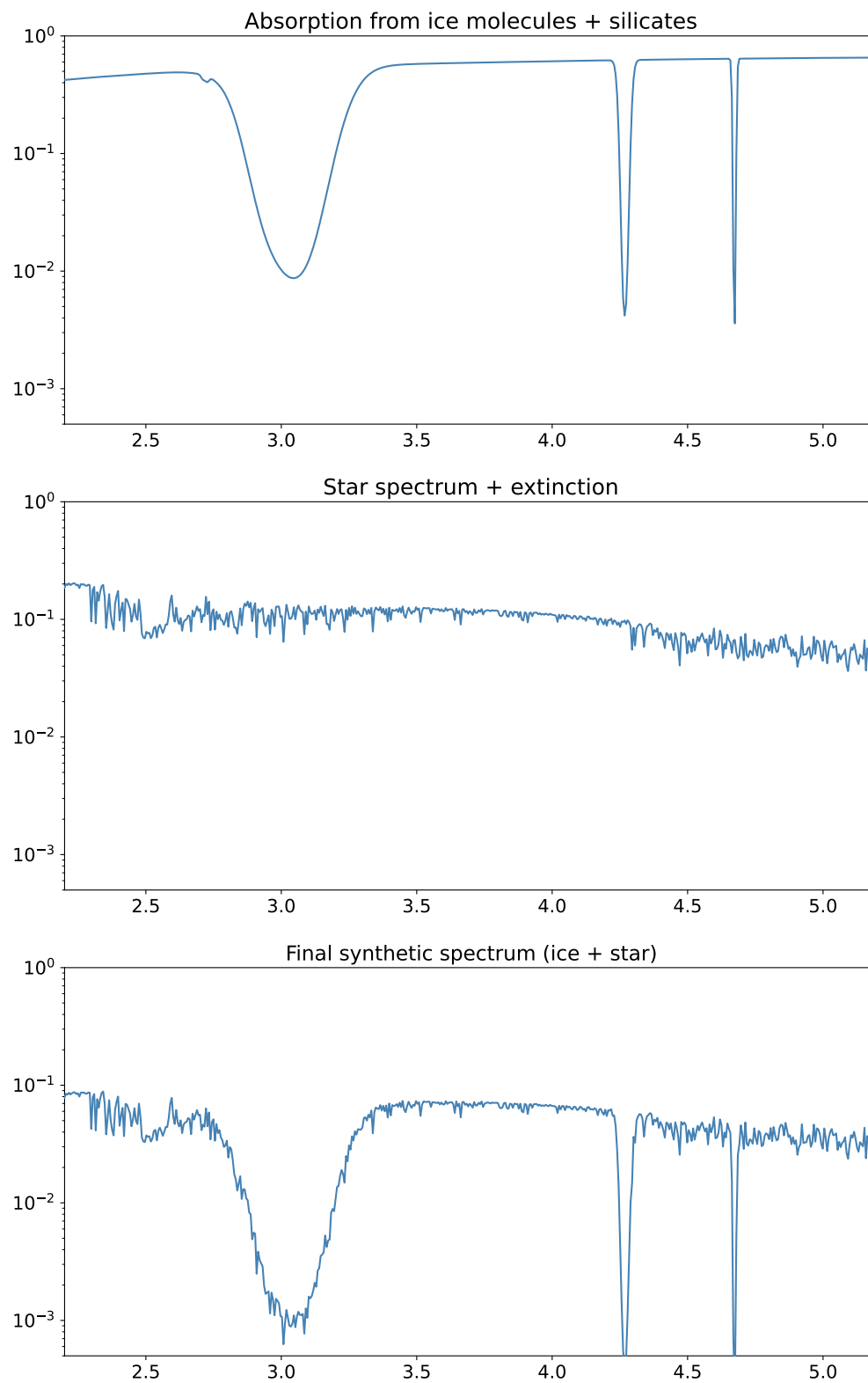


FIGURE 50 – Décomposition du spectre synthétique final attendu avec SynthIceSpec.

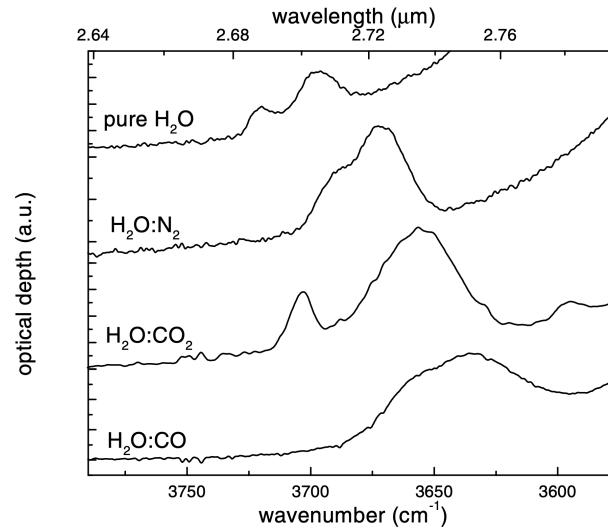


FIGURE 51 – Figure tirée de l'article de Palumbo (2005), montrant la position et la forme du *dangling bond* O-H dans différents types de glace.

études (e.g., Sandford et al. 1988) ont montré que lorsque le CO est mélangé à l'eau, une bande apparaît à 2152 cm^{-1} dû à l'interaction entre le monoxyde de carbone et les *dangling bond*. Encore une fois, cette bande spécifique n'a pas été trouvée montrant que les glaces interstellaires de CO n'interagiraient peut-être pas avec les *dangling bond* de l'eau solide (Fraser et al. 2004). Dans les premiers résultats d'observations avec le JWST sur des glaces de (McClure et al. 2023), les auteurs ont peut-être une détection du *dangling bond* à 3664 cm^{-1} sur l'une des deux étoiles étudiées mais les données photométriques n'ayant pas été obtenues à ce jour, il est difficile de dire si cette détection est véritable ou non. Une confirmation sur d'autres spectres est nécessaire afin de valider ou non cette détection. Si la détection est confirmée, cela voudrait dire que la glace d'eau dans ces grains serait poreuse ou mélangée avec d'autres espèces. Une étude approfondie sur la taille des grains, la structure et forme de la glace est en cours de publication (Dartois et al. *in prep*).

5.4.1 Ajout du *dangling* dans SynthIceSpec

Au vu de l'importance de la détection du *dangling bond* dans les glaces, nos collaborateurs à Hawaï nous ont proposé d'ajouter la bande dans SynthIceSpec afin de déterminer la quantité d'eau nécessaire pour affirmer sa présence dans les glaces. Comme montré précédemment, la position et forme du *dangling bond* varie selon la composition de la glace. Nous avons donc pris tout d'abord le cas le plus simple : de la glace d'eau pure. Depuis la Leiden Ice Database for Astrochemistry (IceDB⁸), nous avons exporté le spectre de laboratoire de H₂O pure (de 10 000 mono-couches) mesuré par Öberg et al. (2007). Ce spectre est mesuré pour une densité de colonne d'environ $1 \times 10^{18}\text{ cm}^{-2}$. Il s'agissait alors d'extraire le *dangling bond* afin de l'insérer dans la base de données de SynthIceSpec. Cependant un premier problème s'est présenté : la bande principale de l'eau n'est pas parfaitement Gaussienne. Nous avons donc du modifier en conséquence notre base de données. En ajustant trois Gaussiennes pour la raie principale (Components 2, 3 et 4 dans la Figure 52, respectivement à 3300,

8. <https://icedb.strw.leidenuniv.nl/>

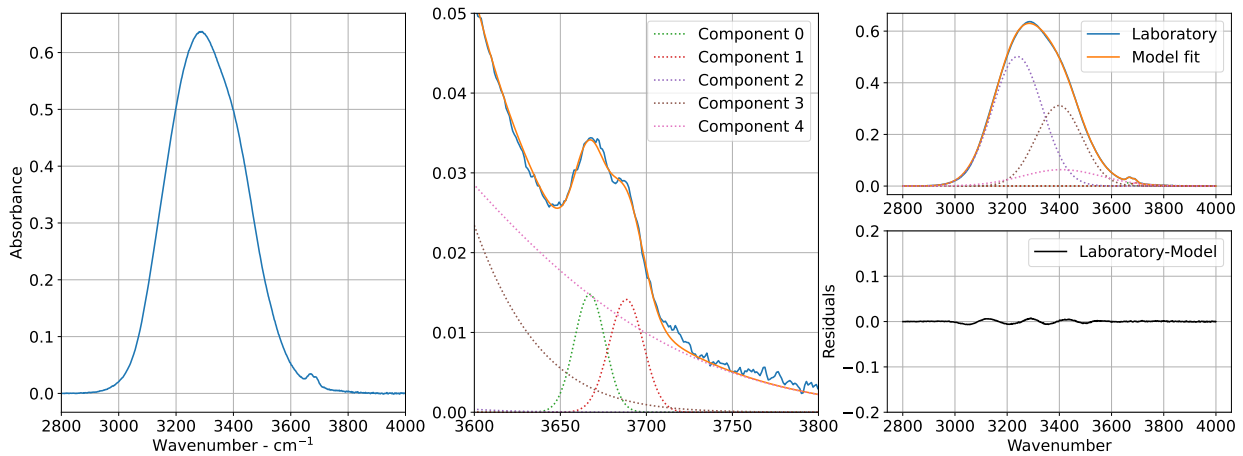


FIGURE 52 – De gauche à droite, en x : le nombre d’onde en cm^{-1} , en y : l’absorbance. Gauche : Le spectre d’eau pure mesuré par Öberg et al. (2007). Centre : L’ajustement du spectre d’eau pure, composé de 3 composantes pour la bande principale à 3300 cm^{-1} et de deux composantes pour le *dangling bond* à 3670 cm^{-1} . Droite, haut : En orange le spectre modélisé résultant de l’ajustement global des 5 composantes, superposé sur le spectre de laboratoire en bleu. Droite, bas : Les résidus de (spectre de laboratoire - spectre modélisé)

3400 et 3350 cm^{-1}), nous avons pu reproduire presque parfaitement l’asymétrie de la raie.

Dans un deuxième temps, nous avons introduit ajuster trois Gaussiennes afin de reproduire les deux contributions du *dangling bond*, la première à 3663 cm^{-1} (Component 0 dans la Figure 52) et à 3694 cm^{-1} (Component 1 dans la Figure 52). La somme totale des contributions de l’eau (bande principale + *dangling bond*) est représentée en orange dans le graphique le plus à droite de la Figure 52. La force de la bande de chaque contribution est calculée depuis la contribution principale, le *dangling bond* étant environ 40 fois moins forte que la bande principale. Cet ajustement a ensuite été ajouté dans SynthIceSpec avec chaque nouvelle contribution de l’eau. Le résultat est très satisfaisant puisque le résidu de (*model* – *observation*) obtenu sur la figure est globalement inférieur à 0.01 mJy .

5.4.2 Discussion sur les mélanges

Le *dangling bond* soulève cependant une limitation pour notre outil : les mélanges modifient les emplacements, forces et structures des bandes. Dans le cas de SynthIceSpec, le programme a été pensé pour créer des Gaussiennes pour chaque contribution de molécule. Cela ne permet donc pas de pouvoir modifier la forme des raies dans le cas d’un mélange précis. La présence même d’une molécule devrait changer l’emplacement de certaines bandes. Nous avons présenté l’exemple du CO_2 dont la contribution peut recouvrir le *dangling bond*, mais dans un exemple plus large, une bande de CO dans une glace simple contenant H_2O et CO_2 subit 5 phénomènes physiques différents (vibration de base du CO, interaction avec l’eau, interaction avec CO_2 , diffusion, taille du grain) qui modifient sa largeur, sa forme et sa profondeur.

De plus, comme expliqué précédemment, l’ajout de certaines bandes rares comme le *dangling bond* ont été faite via un seul spectre (ici d’eau pure).

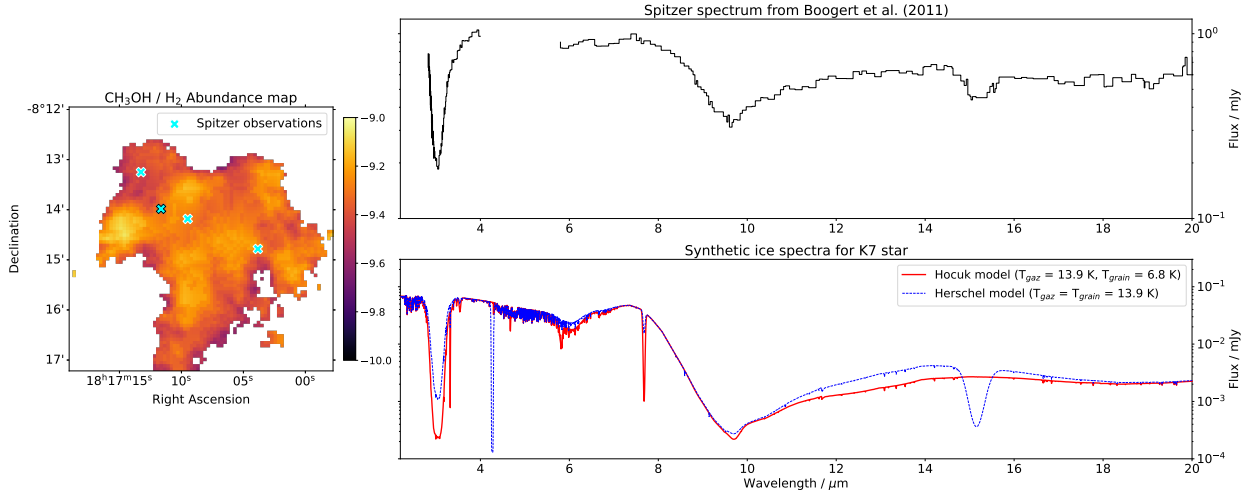


FIGURE 53 – A gauche, la carte d’abondance du méthanol par rapport à H_2 obtenue pendant cette thèse, avec en cyan les quatre positions observées par [Boogert et al. \(2011\)](#). La croix surlignée en noir est la position sur laquelle le spectre de Keck/*Spitzer* (graphique de droite, en haut) est obtenu. Le graphique du dessous sont les 2 spectres synthétiques obtenus avec Nautilus, selon deux températures différentes : en rouge un modèle où la température du grain suit une loi proposée par [Hocuk et al. \(2017\)](#) (voir Chapitre 2, Section 2.5.4), en bleu, un modèle où la température du grain est mesurée par *Herschel*.

SynthIceSpec ayant été conçu pour ne produire des spectres qu’à partir de Gaussiennes, il nous faut cependant rechercher une solution. Si les phénomènes qui font bouger les positions des bandes et leurs largeurs pouvaient être quantifiés, nous pourrions ajouter des paramètres supplémentaires dans notre base de données (en plus de la position et force de bande). Cela permettrait alors de paramétriser les bandes selon une position initiale (le spectre de la glace pure) et d’ajouter un déplacement ou une déformation en fonction de la présence ou non d’autres molécules. Les paramètres Gaussiens seraient donc encodés de telle sorte que l’on puisse quantifier le mouvement des bandes avec une fonction prenant le rapport molécule A / molécule B, en utilisant un polynôme par exemple, pour contrôler le degré de déformation.

5.5 Prédiction - L429-C

Deux proposals JWST (cycle I et II, PI : J. Keane) ont été soumis pour sonder l’évolution de la glace dans L429-C, malheureusement, aucun des deux n’a été retenu. Afin de préparer la soumission en cycle III, nous avons travaillé sur des prédictions avec SynthIceSpec.

Cette région, comme présentée dans le Chapitre 3, est très intéressante d’un point de vue de l’évolution stellaire. En effet le cœur est proche de l’effondrement et présente donc un avancement chimique important. Dans cette région, nous avons déterminé plus de 180 étoiles de fond couvrant des A_v de 0 à $> 50 A_v$ et une densité de 10^3 à 10^6 cm^{-3} . Des observations de glace avaient déjà été effectuées avec Keck et *Spitzer* ([Boogert et al. 2011](#)) et nous pouvons donc déjà comparer les prédictions obtenues avec Nautilus avec les spectres de glace observés.

Dans la Figure 53, on peut comparer directement l’observation effectuée par ([Boogert et al. 2011](#)),

dont le continuum a été soustrait, à des spectres synthétiques obtenus en utilisant les prédictions de Nautilus. On notera cependant que le traitement du continuum effectué sur les spectres observés diffère de celui effectué sur les spectres synthétiques et induit une certaine différence dans le flux. Le spectre de Keck/*Spitzer* ne couvre pas la région de 4 à 6 μm puisque cette partie du spectre coïncide avec une fenêtre atmosphérique (et cette gamme de longueurs d'onde n'est pas couverte par *Spitzer*). Ce qui nous fait perdre une information très importante sur la présence ou non de la bande de CO_2 à 4.2 μm et la bande de CO à 4.9 μm . Cependant, les observations détectent bien une bande profonde de l'eau à 3 μm et à 6 μm , une bande de CH_3OH à 3.53 et 9.7 μm , une importante absorption due à la présence de silicate à 9.7 μm et une bande de CO_2 à 15 μm . Cette dernière nous confirme donc bien la présence de CO_2 sur les glaces. D'autres bandes sont couvertes mais ne sont pas détectées : les bandes de HCOOH à 5.85 et 7.25 μm , la bande de NH_4^+ à 6.8 μm , la bande de CH_4 à 7.68 μm , la bande de NH_3 à 8.9 μm . Globalement, ces glaces sont donc riches en eau et en CO_2 . Maintenant, les prédictions de Nautilus sont basées sur le meilleur modèle, calculé via la distance de désaccord pour l'étoile 2MASS J18170957-0814136. Cette étoile est notée comme étant de type K7 par les auteurs des observations et sera donc utilisée comme tel dans le modèle PHOENIX. La quantité de silicate est calculée à partir de la densité de colonne de H_2 ($\sim 10^{22}$) et l' A_V est celui trouvé à la position de l'étoile ($A_V = 14$). Les deux modèles employés présentent pour seule différence la température des grains. Le spectre en rouge possède une température de grain obtenu en utilisant la prescription décrite par Hocuk et al. (2017, voir Chapitre 2, Section 2.5.4) ($T_{\text{gaz}} = 13.9$ K et $T_{\text{grain}} = 6.8$ K) et celui en bleu, prend pour température de grain ($T_{\text{gaz}} = T_{\text{grain}} = 13.9$ K), celle dérivée des mesures d'*Herschel*.

On peut voir dans un premier temps avec le modèle en rouge, celui où la température des grains suit la prescription de Hocuk, que la présence d'une bande à ~ 7.8 μm qui n'est pas présente dans le spectre observé. Cette bande correspond à la molécule de CH_4 , dont la limite supérieure a été déterminée dans L429-C mais à des quantités bien inférieures ($\sim 3 \times 10^{17} \text{cm}^{-2}$) à ce que prédit Nautilus ($\sim 4.5 \times 10^{18} \text{cm}^{-2}$). Cette raie de CH_4 se retrouve également dans la bande l'eau, environ vers 3.4 μm . Dans le modèle Nautilus, CH_4 est rapidement produit par hydrogénation du carbone atomique et n'est pas détruit efficacement par les UV parce que les régions sont écrantées du rayonnement UV extérieur. De meilleures contraintes sur la fraction de CH_4 permettra de mieux contraindre le modèle. Une meilleure prise en compte de la dynamique du nuage ou une prise en compte de la distribution en taille des grains (et donc une meilleure estimation de la température des grains) pourrait impacter les prédictions du modèle.

On note également l'absence de bande de CO_2 à 15.2 μm qui est dû à la température trop froide prédite par la loi d'Hocuk qui est pourtant observée. Cette prédiction est attendue puisqu'il existe un seuil de température à > 12 K, qui correspond, dans Nautilus (et à des températures similaires dans les autres modèles chimiques) à la température minimum nécessaire pour que l'oxygène atomique puisse se diffuser sur le grain (Congiu et al. 2014). L'oxygène ayant une énergie de liaison trop importante, il ne peut donc pas se déplacer aussi facilement que des molécules ou atome plus légers comme H_2 ou tout simplement H atomique qui formeront plus majoritairement H_2O . La densité de colonne de H_2O que l'on obtient est de $\sim 1.1 \times 10^{19} \text{cm}^{-2}$ par rapport aux observations qui sont de $\sim 2.8 \times 10^{18} \text{cm}^{-2}$. Le modèle rouge ne reproduit donc pas bien les observations obtenues avec Keck/*Spitzer*.

Dans le cas du modèle bleu, la température du grain (> 12 K) permet la diffusion de l'oxygène atomique et de CO , on peut donc noter dans un premier temps la présence de CO_2 à 4.2 et 15.2 μm . Dans notre cas, le CO_2 est produit à une densité de colonne de $\sim 4 \times 10^{18} \text{cm}^{-2}$ contre une densité de

colonne estimée à $\sim 1.2 \times 10^{18} \text{cm}^{-2}$. En conséquence, H_2O est moins produite ($\sim 6.3 \times 10^{18} \text{cm}^{-2}$) mais plus proche de la valeur trouvée dans les observations. Le CO, lui, n'est pas produit. Nous avons globalement une très bonne prédiction des glaces attendues à cette position, avec une forte présence de glace de CO_2 ($\sim 43.1\%$ par rapport à H_2O).

Les spectres observés des trois autres positions sont similaires malgré l'absence de la région de longueur d'onde $> 14 \mu\text{m}$ (la raie de CO_2 n'ayant été observée que sur la position présentée précédemment). Les densités de colonne des autres molécules dérivées sont cependant assez similaires à la position présentée ici, notamment pour l'eau.

Cette étude montre en partie la dépendance très importante de la composition des glaces à la température des grains. Si nous avons présenté plusieurs fois que les températures d'*Herschel* surestimaient les valeurs attendues dans les cœurs denses, on a cependant ici la meilleure prédiction avec la température de grain égale à la température du gaz, $> 12 \text{K}$. On s'attendrait donc dans cette région à avoir une température suffisamment grande pour permettre la diffusion de l'oxygène dans les glaces.

5.6 Comparaison - Cham I

Chameleon I est la région observée dans l'ERS IceAge, se trouvant à 192 pc (Dzib et al. 2018). Les premières observations effectuées sont celles de deux étoiles dans une région à $A_v > 50$, à l'extérieur de l'enveloppe de la protoétoile de class 0, Cha MMS1 dans la région de formation d'étoile à faible masse. Ces deux étoiles sont respectivement NIR38 (J2000 11 :06 :25.57 -77 :23 :54.12) et SSTSL2J110621.63-772354.1 (que l'on nommera "J110621", J2000 11 :06 :21.63 -77 :23 :54.1). Les deux spectres présentés dans le graphique du haut de la Figure 54 ont été obtenus avec NIRSPec en mode Fente Fixe (*FS*, résolution ~ 2600 , 2.7 - 5.3 μ), avec NIRCcam en mode Spectrographie Grand Champ Sans Fente (*WFSS*), résolution ~ 1600 , 2.7 - 5.0 μ) et avec MIRI en Spectre à Basse Résolution (*LRS*), résolution ~ 100 , 5.0 - 14.0 μ). Les rapports de signal-sur-bruit pour NIR38 et J110621 sont respectivement de 210 et 150 à 4 μm et de 455 et 165 à 7.5 μm . Ces spectres, de leur résolution et leur signal-sur-bruit exceptionnels, ont permis l'observation de bandes nouvellement détectées dans les nuages moléculaires. Les densités de colonne présentées dans McClure et al. (2023) ont été obtenues en ajustant plusieurs bandes ensemble grâce au programme ENIIGMA (Rocha et al. 2021) et les plus petites signatures ont été ajustées à la main. Les densités de colonne ont été dérivées pour les bandes les plus importantes en utilisant des ajustements locaux. Les molécules détectées et leur densité de colonne associée sont listées dans les Tables 1 et 2 respectivement de McClure et al. (2023).

Les glaces observées montrent un environnement chimique riche en glace d'eau et de CO_2 , permettant via des réactions d'addition et d'abstraction d'hydrogène, la formation de NH_3 , CH_4 et les espèces subsidiaires. Comme on s'y attendrait dans une région à haut A_v , on a également une chimie riche en CO qui permet la formation de COMs. On peut voir sur les bandes de l'eau, du CO_2 et de CO une distorsion des profils de raies, avec des asymétries qui seraient dû aux grossissements des grains. La partie décalée vers le rouge des bandes d'absorption de l'eau et du CO_2 , en plus de la partie décalée vers le bleu des raies d'émission de $^{12}\text{CO}_2$ et ^{12}CO , sont la signature d'effets de diffusion provenant du grossissement des grains à des tailles proches de la longueur d'onde à laquelle on les détecte, i.e. quelques microns. Dans le cas des bandes présentes sur ces spectres, les prédictions de grossissement de grain seraient de l'ordre de $\sim 1 \mu\text{m}$ (Galametz et al. 2019; Valdivia et al. 2019; Silsbee et al. 2020). Si ce grossissement est relativement modeste, il se fait au détriment des plus

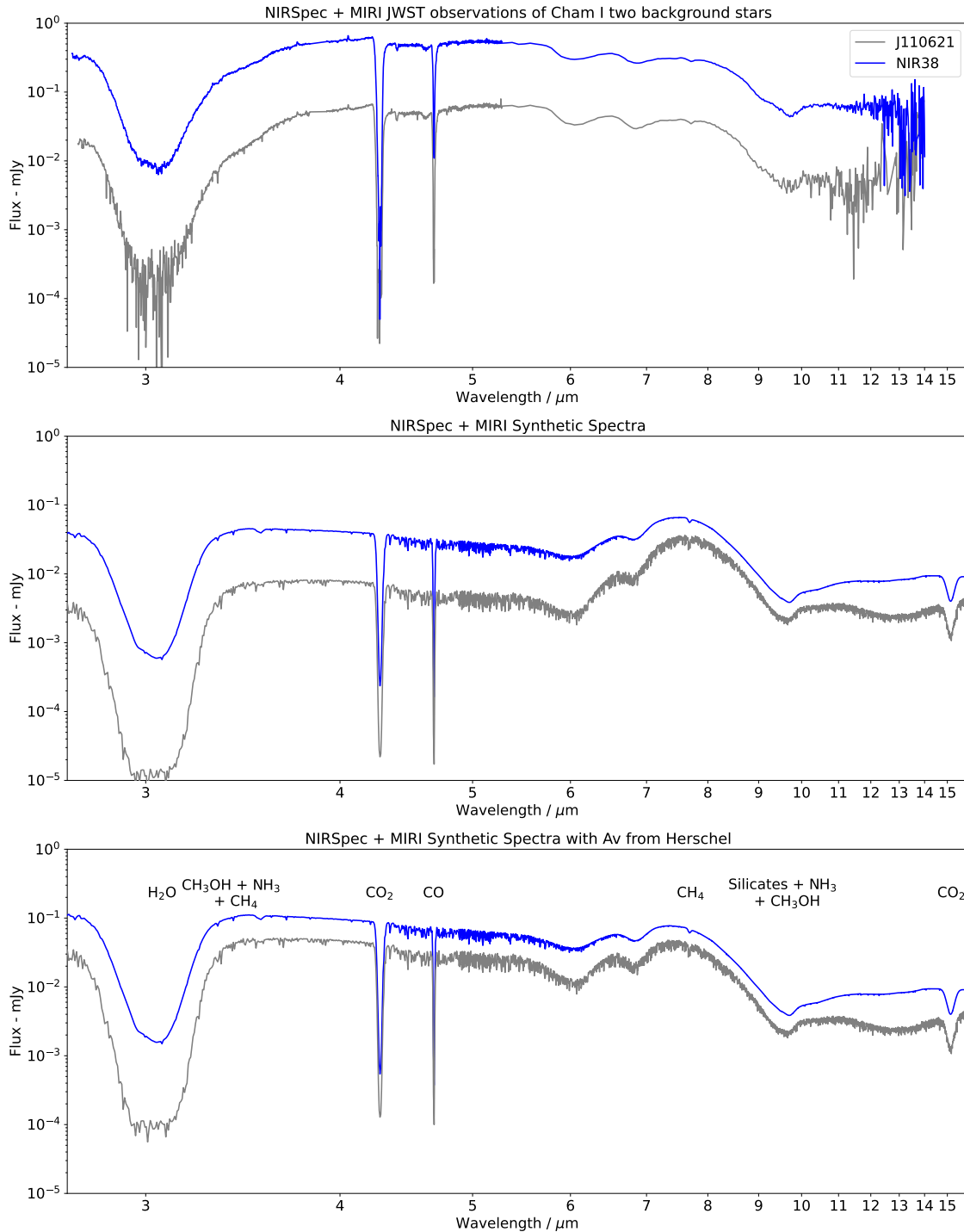


FIGURE 54 – Comparaison entre les spectres obtenus des premières observations du JWST (McClure et al. 2023) et les spectres synthétiques obtenus avec les densités de colonne tirées des observations. Les deux spectres synthétiques ont été tracés jusqu'à $15.5 \mu\text{m}$ afin de montrer la bande de CO_2 attendue, celui du bas a été tracé avec les A_v prédits par Herschel, $A_v = 35.8$ et 42.5 respectivement pour NIR38 et J110621, prédisant un flux plus haut que les spectres du milieu.

petits grains, qui sont déplétés. Les auteurs de McClure et al. (2023) proposent que ce changement de taille dans la distribution globale des grains pourraient impacter l’extinction visuelle, mais également la surface totale disponible pour les espèces chimiques. Si la tentative de détection du *dangling bond* O-H est validée, les glaces observées seraient donc poreuses ou mélangées à d’autres glaces. Dans ce cas, les pores à la surface pourraient permettre de nouveaux sites de réactions.

Les données des deux étoiles observées dans Cham I étant disponibles au sein du consortium IceAge, nous pouvons comparer directement les observations avec les spectres synthétiques obtenus par SynthIceSpec dans la Figure 54. Les densités de colonne observées en entrée sont celles tirées de l’étude de McClure et al. (2023). L’aspect global du spectre est retrouvé, avec cependant la région couverte par MIRI moins bien reproduites. Ceci est en partie dû au fait que peu de bandes sont enregistrées dans la base de données pour ces longueurs d’ondes et que la loi d’extinction ne s’applique pas bien à cette région. Ce dernier point provient du polynôme que nous avons utilisé pour simuler l’extinction, qui à des longueurs d’ondes $> 7.5 \mu\text{m}$ va décroître brutalement, appliquant une déformation trop forte au spectre. Il est également à noter que n’ayant pas d’information sur la quantité de silicates (que l’on peut obtenir via le rapport gaz-sur-grain de l’hydrogène), il est difficile de bien calibrer cette contribution qui joue en partie sur la profondeur de la bande à $9.3 \mu\text{m}$. Une meilleure estimation de cette quantité permettra un meilleur ajustement. Cela peut se faire en contraignant la densité de colonne de l’hydrogène (ou l’ A_v) et la rapport gaz-sur-poussière de la région. Un élément qui n’est pas reproduit est celui décrit précédemment, à savoir le grossissement des grains. On ne reproduit pas les asymétries de raie de la bande de H_2O à $3.3 \mu\text{m}$, ni celles de la bande de CO_2 et de CO à respectivement à $4.27 \mu\text{m}$ et $4.67 \mu\text{m}$. Le type d’étoile mis dans le spectre synthétique (respectivement une K2 et M5) est complètement arbitraire car le type d’étoile n’a pas encore été identifié dans les spectres publiés dans McClure et al. (2023). Cependant, il a été choisi deux types d’étoiles relativement brillantes pour permettre ces observations en milieu aussi dense. Cela rend l’identification du *dangling bond* discutable dans nos spectres synthétiques et montre que sa détection dépend grandement du type d’étoile sélectionné. Une différence notable entre les spectres observés et synthétiques dans la gamme de longueurs d’onde pour MIRI ($5.5 - 15 \mu\text{m}$) est la contribution des raies photosphériques dans nos spectres synthétiques. C’est en partie expliqué par le fait que les observations ont été produite via un filtre basse-résolution, qui ne permet pas de les distinguer comme nous le faisons sur le spectre synthétique (ce filtre n’ayant pas été encore ajouté dans SynthIceSpec) et du choix arbitraire d’étoile de fond dans SynthIceSpec. Une étoile à encore plus haute température aurait des raies photosphériques encore plus fine.

Un point intéressant ici est la différence de flux entre les observations et les spectres synthétiques, illustré par la différence entre les spectres du milieu et dus bas dans la Figure 54. La profondeur des absorptions est grandement dépendante de l’ A_v utilisé dans le calcul de l’extinction. Un point intéressant ici est qu’en prenant les valeurs d’ A_v déterminés par McClure et al. (2023) pour les étoiles NIR38 et J110621, respectivement $A_v = 60$ et $A_v = 95$, le flux synthétique obtenu est environ dix fois moins important que le flux observé. Si l’on change ces A_v à des valeurs plus faibles, comme celles déterminées en utilisant la même méthode que celles employées pour L429-C et L694 avec les données *Herschel* disponibles (spectre du bas dans la Figure 54), on se rapproche des valeurs de flux observées. En utilisant les valeurs d’*Herschel* pour l’étoile NIR38, on obtient $A_v = 35.8$ et pour J110621, $A_v = 42.5$. Cela représente presque un facteur 2 entre les A_v déterminées par l’équipe IceAge et ceux prédites par les données d’*Herschel*.

Un autre paramètre difficile à contraindre et qui agit sur l’intensité du flux est la distance à l’étoile choisie dans le modèle PHOENIX. Nous avons mis arbitrairement 1 kpc pour les deux étoiles. Sans

mesure de distance précise, il est difficile de prévoir où se trouveraient ces étoiles, à part en essayant plusieurs itérations de distance et voir laquelle permettrait de remonter aux observations. Mais dans le cas où de nombreux autres paramètres ne sont pas contraints, il est difficile de prédire si cela est complètement juste. La détermination de la distance est donc très importante puisqu'elle est quasiment dégénérée avec l'Av.

Remerciements

Je tiens à remercier nos collègues français Jennifer Noble et Emmanuel Dartois pour leur aide sur la conception et la discussion scientifique autour de SynthIceSpec et leur contribution à son évolution. Je remercie également nos collègues d'Hawai'i, Jacqueline Keane et Adwin Boogert, ont été d'une aide précieuse quant à l'ajout de la photométrie dans SynthIceSpec et de leur expertise sur les glaces.

6 | Perspectives & Conclusions

6.1 Conclusions

6.1.1 L429-C

Les observations conduites avec NOEMA et le 30m de l'IRAM nous ont permis d'obtenir des cartes de $300'' \times 300''$ avec la détection de 11 molécules différentes. Nous avons déterminé les abondances en phase gazeuse de ces espèces sur toutes les cartes, en contraignant les densités de colonne avec la température déterminée avec *Herschel*, la densité via la méthode de [Bron et al. \(2018\)](#), la largeur des raies avec la méthode ROHSA de [Marchal et al. \(2019\)](#). Tous ces paramètres ont été interpolés avec les intensités intégrées théoriques obtenues avec RADEX. Après une coupe à 3σ , nous avons calculé la densité de colonne avec un test de χ_2 . Nous avons ensuite divisé les densités de colonne obtenues avec la carte de densité N_{H_2} pour obtenir les abondances. Enfin, nous avons comparé les observations avec les sorties du modèle Nautilus.

- Le *short-spacing* de NOEMA n'a montré aucun signal, impliquant qu'il n'y a pas d'émission plus petite que approximativement $30''$. C'est aussi une indication qu'il n'y a pas encore de proto-étoile formée et pas non plus d'effondrement en cours.
- Nous avons étudié la dynamique du nuage et nous avons montré que les spectres présentaient plusieurs composantes en vitesse (jusqu'à 3). Nous n'avons pas déterminé si l'origine de ces composantes étaient dues à des turbulences ou à des restes d'une collision de nuage. Des cartes de champ magnétique à meilleure résolution permettrait d'éclaircir ce dernier point. En considérant que ces composantes sont présentes sur de larges échelles spatiales, cela ne semble pas indiquer un effondrement au maximum de densité, comme ça a pu être pensé dans les études précédentes se basant sur des observations ponctuelles.
- Le pic de continuum de poussière est caractérisé par la déplétion de la plupart des molécules observées dans la phase gazeuse, à l'exception du méthanol, qui présente une abondance ne variant que très peu sur toute la carte. Le facteur de déplétion du CO obtenu est de $f = f(X_{\text{can}}/X_{12\text{CO}}) = 4.91$ à la densité la plus haute.
- Les observations du méthanol nous permettent d'obtenir un rapport d'abondance gaz-sur-glace augmentant avec la densité, de 0.002% à $2.4 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$ jusqu'à 0.09% à $2.2 \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$. Ces valeurs sont raisonnablement bien reproduites par nos modèles, cependant ils reproduisent la tendance inverse et ce rapport décroît avec la densité.
- Le rapport gaz-sur-glace modélisé pour le méthanol dépend de deux facteurs : le taux d'érosion par les CR et le taux d'ionisation par les CR, ces derniers étant les plus efficaces pour désorber le méthanol dans nos modèles. La pente observée dans le rapport gaz-sur-glace pourrait indiquer une augmentation de l'efficacité de l'érosion par les CR avec la densité, qui résulterait d'un changement dans la composition des glaces (de glaces dominées d'eau vers des compositions mixtes).
- Dans nos observations, nous détectons H_2S dans la phase gazeuse. Vu que cette molécule est aussi formée sur les surfaces des grains, son abondance dans le gaz devrait être une indication de la désorption non-thermique des grains. Contrairement à CH_3OH , cette abondance décroît de plusieurs ordres de grandeur dans notre intervalle de densité observée. Cela indiquerait

une efficacité du processus de désorption différente du méthanol et qui serait moins efficace à plus forte densité. Une autre possibilité sera que le réservoir de H_2S dans les grains décroîtrait avec la densité en se transformant en une autre espèce chimique. Cette dernière hypothèse pourrait expliquer pourquoi le H_2S n’a toujours pas été détectée dans les glaces interstellaires.

6.1.2 L694

Nous avons conduit des observations du cœur dense L694 avec le 30m de l’IRAM dans le but de cartographier ($300'' \times 300''$) les abondances des molécules présentes en prévision d’observations de glace avec le JWST. Nous avons détecté 10 molécules pour 11 transitions, dont CH_3OH et les isotopologues de CO. En utilisant la même méthode que celle utilisée sur L429-C, nous avons pu obtenir les abondances moléculaires de toutes les espèces. Nous avons ensuite comparé ces observations aux sorties du modèle chimique Nautilus.

En résumé, nous avons montré :

- Les spectres des molécules détectées ont tous une structure en vitesse simple, sauf pour CS (2-1) qui présente deux composantes. Cela concorde avec les observations d’auto-absorption se produisant lors d’un effondrement gravitationnel, comme suggéré par plusieurs études (Tafalla et al. 1998; Lee et al. 2004; Kim et al. 2022). On retrouve également l’émission de N_2H^+ la plus forte sur la région la plus dense du cœur et les spectres d’émission de C^{18}O s’élargissant sur cette même région, comme observé par Keto et al. (2015), renforçant les arguments que le cœur serait en effondrement.
- Toutes les molécules présentent un profil de déplétion fort sur le pic de continuum de poussière, montrant une région chimiquement et dynamiquement évolué. Nous obtenons un facteur de déplétion de CO de $f_{\text{CO}} = f(X_{\text{can}}/X_{12\text{CO}})$ de 4.47 à la position du pic de continuum.
- En comparant nos observations avec le modèle chimique Nautilus, nous avons montré que les temps nécessaires pour reproduire les observations diminuaient avec la densité, avec un facteur de ~ 30 entre la densité la plus basse et la plus haute. Les abondances reproduites par le modèle sont satisfaisantes : nous avons moins d’un facteur 10 en moyenne entre les observations et les prédictions.
- Nous avons observé un rapport gaz-sur-glace pour le méthanol de $\sim 0.0054\%$ à une densité de $\sim 4.3 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$. Par manque de valeurs observées pour les glaces, nous ne pouvons confirmer la tendance observée dans L429-C avec la densité. Cette valeur est reproduite d’un facteur < 2 par le modèle le plus proche (glaces d’eau et faible taux d’ionisation par les CR).
- Notre rapport gaz-sur-glace pour le méthanol prédit par Nautilus dépend du taux d’ionisation par les CR et du taux d’érosion par les CR, ce dernier étant le mécanisme le plus efficace dans le modèle. Nous observons la même tendance que dans L429-C, avec un rapport gaz-sur-glace qui décroît avec la densité.
- Les temps estimés par le modèle sont comparables à ceux estimés pour L429-C. Les paramètres physiques des deux nuages sont semblables et les abondances de CO (et méthanol) étant proches (d’un facteur 3), les estimations de Nautilus se trouvent dans les incertitudes des observations. Un pas de temps plus petit permettrait peut-être de gagner en précision et de pouvoir obtenir une chimie légèrement différente.

Dans l’attente des observations effectuées par le JWST, notre étude a permis de préparer le terrain pour l’analyse des futures données. Nous pourrions rapidement étudier les changements de composition de glaces au cœur du nuage et ainsi pouvoir contraindre au mieux les processus prenant

place à l'interface gaz/glace. Nous espérons également pouvoir refaire des modèles avec des pas de temps plus courts et tester notre méthode avec des données physiques différentes, obtenues par l'observation du continuum dans les spectres des étoiles de fond, que nous a fourni L. Chu. Cela nous permettra de tester les limites de notre méthode et de vérifier les prédictions du modèle pour des températures et densité d'hydrogène différentes.

6.1.3 Comparaison des deux nuages

À première vue, les sources semblent dans un stade d'évolution différents qui pourrait impacter leur chimie. L429-C semble être un cœur dense évolué mais n'étant toujours pas en effondrement, alors que L694 semble avoir débuté son effondrement. Au moment des observations, nous nous attendions à trouver une chimie suffisamment différente pour que les modèles ne reproduisent pas les mêmes résultats. Or, au vu des temps reproduits dans les Figures 25 et 40, les pentes observées sont très similaires avec pratiquement les mêmes temps d'intégration pour les densités reproduites. En regardant en détails les paramètres physiques, l'Av est assez différente d'un nuage à l'autre : on a un facteur > 2 entre les densités très hautes. Sauf qu'à Av de 30 ou de 70, la chimie dans le modèle ne change pas. La température est légèrement plus froide dans L694 que dans L429-C mais dans la même gamme, avec des valeurs < 12 K sur la région la plus dense. Nous avons donc essayé de comprendre comment nous pouvions obtenir des modèles chimiques aussi proches, en commençant par les observations, comme reportées dans la Figure 55. Les abondances observées ont des tendances différentes : on observe bien une déplétion du méthanol dans le cas de L694, plus avancé dynamiquement. Cependant lorsque l'on compare les deux nuages, les abondances se superposent à haute densité. La valeur moyenne des deux nuages sur la gamme de densité où ils sont tous les deux détectés varie d'un facteur ~ 3 . Pour le CO, comme on peut le voir dans la Figure 56, l'abondance déterminée pour L429-C est un peu plus incertaine que celle de L694. Mais globalement, les valeurs moyennes obtenues sur la même gamme de densité sont également différentes d'un facteur ~ 3 . Ce facteur est important puisqu'il entre dans le facteur d'incertitude du modèle. Si les paramètres physiques sont pratiquement les mêmes et que CO est la principale contrainte de détermination du temps, il est donc normal que l'on retombe sur des temps de reproduction des observations presque identiques à L429-C. Le modèle manque donc de précision sur la contrainte temporelle. On pourrait alors imaginer que des pas de temps plus courts définis dans Nautilus nous permettraient de véritablement sonder la chimie de L694.

6.2 Perspectives

Les perspectives de ce travail sont nombreuses et celles qui m'intéressent le plus sont celles convergent vers l'utilisation du JWST. Si ce travail a permis une étude approfondie de la phase gazeuse lors des phases pré-stellaires, il est désormais possible d'obtenir des études tout aussi détaillées sur la phase solide. Les implications de ces observations nouvelles sont multiples. Nous allons pouvoir contraindre une chimie des solides qui fut autre fois basée sur l'observation de quelques lignes de visée dans quelques objets (comme par exemple, seulement 4 étoiles de fond dans L429-C et 1 dans L694). Le JWST va nous permettre d'observer des dizaines d'étoiles de fond pour une seule source et nous permettre une cartographie complète des glaces dans ces régions. S'il est désormais bien connu que les réservoirs des espèces volatiles se trouvent dans les glaces, il est toujours très difficile de quantifier l'efficacité des processus de désorption non-thermiques. Nul doute que les observations

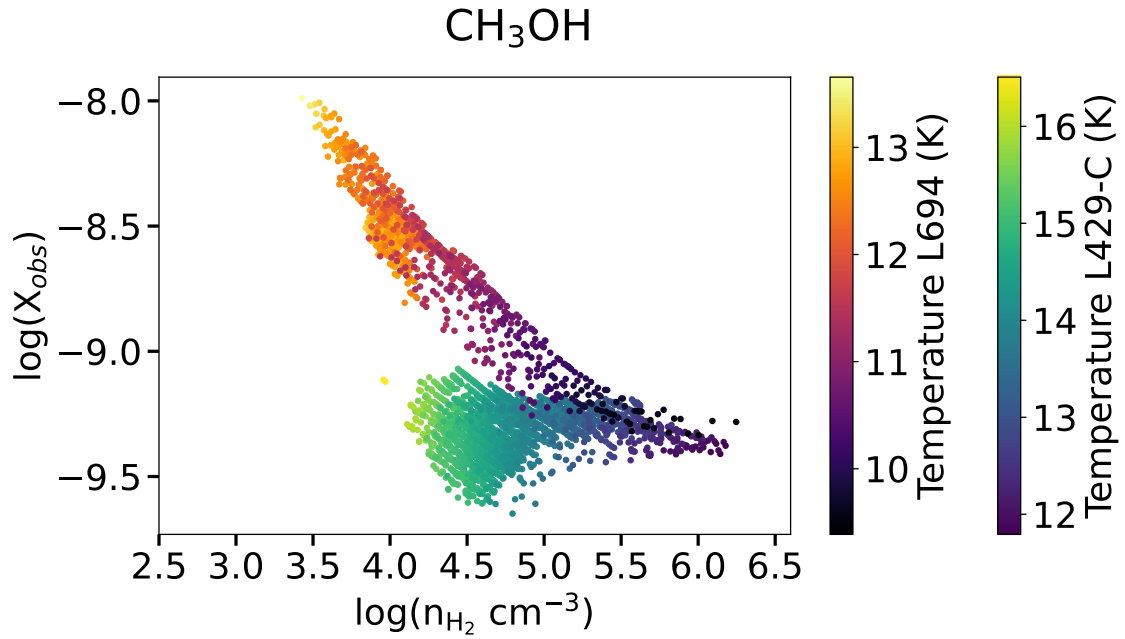


FIGURE 55 – Abondance de CH₃OH dans L694 (orange-violet) et dans L429-C (jaune-vert) en fonction de la gamme de densité sur laquelle ils sont observés respectivement.

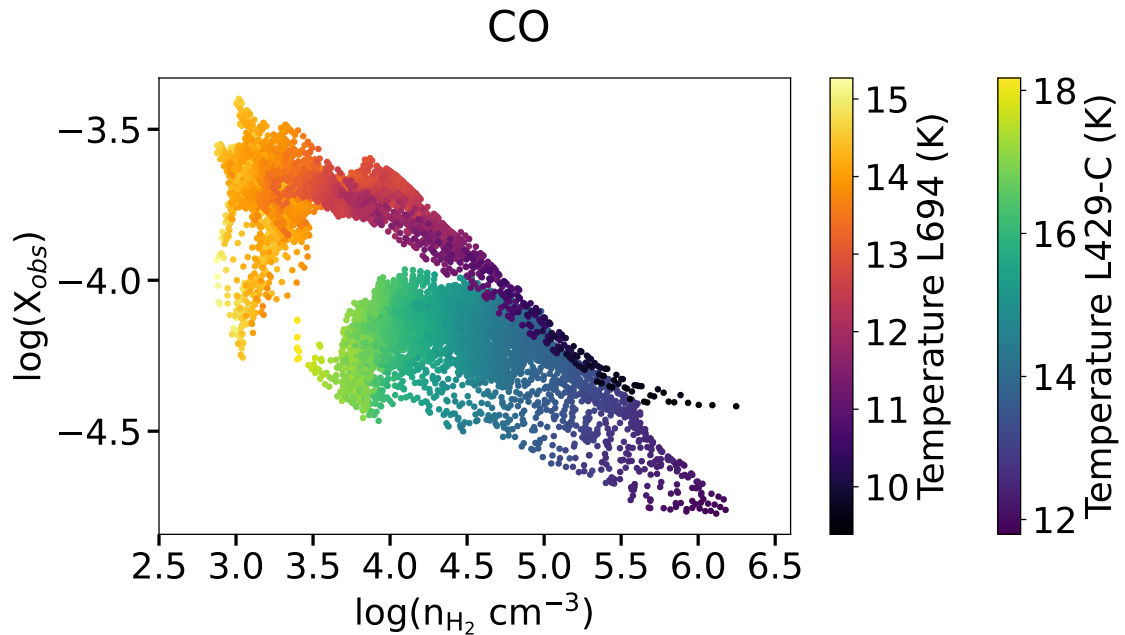


FIGURE 56 – Abondance de CO dans L694 (orange-violet) et dans L429-C (jaune-vert) en fonction de la gamme de densité sur laquelle ils sont observés respectivement.

des glaces vont soulever des divergences avec les modèles chimiques. Mais ces divergences sont nécessaires pour comprendre cette chimie et vont permettre de questionner des hypothèses jusque-là suffisantes pour expliquer les quelques observations de la phase solide.

Les perspectives de mon projet scientifique se feraient donc en deux temps, d’abord sur la partie observationnelle apportée par le JWST, puis sur la partie de modélisation, accessible avec Nautilus.

6.2.1 Observations avec le JWST & analyse

Au delà de l’accès aux données de l’ERS IceAge et grâce à mes collaborateurs, à des données de Cycle I, j’ai participé pendant ma thèse à la soumission de 3 proposals d’observations. De ces trois proposals, un seul a été accepté, ce qui est très satisfaisant au vu du facteur de pression des demandes JWST. Ce proposal s’intitule “iCe astroCHemistry at the EdgE of a staR-formIng cLOud (CHEERIO) : Cha I”. S’il a fallu une gymnastique mentale pour trouver l’acronyme, il a été plus facile d’en définir les objectifs. En utilisant NIRCcam en mode WFSS, les observations couvriront 2 régions en bord de nuage de Chameleon I, la source observée par IceAge. Cela permettra l’observation de plus de 600 objets de fond dont une centaine dans des régions de photo-dissociation (PDR). La couverture spectrale attendue de NIRCcam est de 2.4 à 5 μm et permettra donc l’observation de quatre molécules clefs dont l’importance a déjà été soulevée dans ce travail : H_2O , CO , CO_2 et CH_3OH . Ce proposal a pour but principal de déterminer dans quelles conditions, à des $A_v < 2$, pouvons nous détecter la signature la plus faible de glace et permettre en parallèle l’observation d’étoiles de fond sans glace, afin d’en extraire la SED (*spectral energy distribution*) pour de futures études. Cela facilitera par exemple la soustraction de la contribution des raies photosphériques dans les observations de glaces. Cela représente une montagne de données à analyser, comprendre et interpréter. Si je regrette que le proposal de L429-C ne soit pas passé, je me réjouis tout de même de pouvoir mettre les mains dans des observations JWST. Nous pourrions soumettre en conséquence un proposal ALMA (à faible résolution, avec l’Atacama Compact Array (ACA)), au vu de la position basse de Cham I dans l’hémisphère nord. Cela permettra de sonder la phase gazeuse et essayer de comprendre le rôle des sources externes (présences d’étoiles massives proches de la zone) dans la désorption, mais également les différences entre les régions en bordure de nuage et dans le nuage. Cela permettra une étude complète du gaz et de la glace à des A_v très différents.

Il reste dans mon intérêt de re-soumettre le proposal pour L429-C, en Cycle III, et d’aller chercher les longueurs d’onde de MIRI pour obtenir plus d’informations sur les mélanges de glace que nous nous attendons à voir. Nous avons déjà une étude robuste dans le gaz et en modélisation qui semble pointer vers ce changement de composition dans la glace. Cela permettrait une bien meilleure contrainte sur les mécanismes de désorption non-thermiques, surtout pour le méthanol. Pour le moment, je me contenterai de belles observations d’une région riche en objets pré-stellaires et plus avancés.

Mais comme explicité auparavant, ces données devront être interprétées et nous pourrions les utiliser pour tester les limites de SynthIceSpec, afin de l’améliorer pour reproduire au mieux aux données réelles et d’aider à l’analyse. Les observations d’étoiles de fond sans trace de glace seront très importantes pour incorporer des lois d’extinctions bien plus réalistes. Si pour le moment nous n’entrevoyons pas la possibilité d’inverser les spectres dans l’état actuel de SynthIceSpec, nous pourrions toujours travailler à le rendre plus réaliste. Mais plus important encore, SynthIceSpec peut être utilisé en sortie de Nautilus, et selon les avancées sur ce dernier, nous pourrions avoir un outil puissant qui a déjà fait ses preuves. C’est dans le proposal CHEERIO que SynthIceSpec a officiellement

fait ses débuts (sans même la contribution des étoiles, qui n'était pas encore implémentée!). Alors il est très important de travailler en parallèle sur les sorties du modèle afin d'aider à comprendre les observations grâce à SynthIceSpec.

6.2.2 Futures contributions dans Nautilus

Nautilus, comme les autres modèles chimiques, possède des limites qui pourraient impacter la chimie plus ou moins fortement. Les pistes à explorer sont nombreuses mais celles que je vais explorer ici découlent des conclusions tirées de mes articles, de ce que j'ai pu identifier comme manquant dans la modélisation des glaces et de mes nombreuses discussions avec mes collaborateurs proches (notamment Jennifer Noble dans le cadre d'un projet postdoctoral CNES). Si Nautilus est très robuste pour reproduire les observations en phase gaz de cœurs très connus (Ruaud et al. 2016), les observations en phase gazeuse ne permettent pas de prédire les abondances canoniques. Les réservoirs de certaines espèces se trouvent sous phase solide et jusqu'à présent, très peu de contraintes observationnelles étaient disponibles. Les modèles chimiques se basent sur les expériences de laboratoire et les calculs *ab initio* : les expériences ne permettent cependant pas de reproduire exactement tous les éléments présents dans ces milieux et les calculs théoriques ne peuvent que se focaliser sur quelques mécanismes à cause du temps de calcul pouvant être croissant avec la complexité des systèmes étudiés. Ainsi, les modèles chimiques utilisent de nombreuses approximations qui ne permettent pas de reproduire parfaitement les observations.

Ce n'est évidemment pas une fatalité. L'astrochimie est une itération des trois domaines qui la composent (expériences de laboratoire, observations, modèles) et peut donc évoluer grâce aux avancées qui se font dans chacun. Les développements numériques que l'on peut apporter à Nautilus proviennent de nouveaux calculs théoriques et nouvelles expériences de laboratoire. Nous allons ici en citer quelques unes que j'ai envisagé dans mes projets de postdoctorat.

Énergie de liaison

Les énergies de liaison (en anglais, "*binding energies*") sont d'une grande importance en chimie. En effet, ces énergies caractérisent la capacité d'une espèce à s'adsorber/se désorber d'une surface et définissent la mobilité des espèces chimiques (bien que cela soit aussi une approximation). Cela agit en partie sur l'efficacité des mécanismes non-thermiques de désorption et donc de la composition des molécules dans le gaz et en surface. Dans Noble et al. (2012), les auteurs ont effectué des expériences montrant que l'efficacité d'adsorption de certaines espèces étaient directement impactées par la nature de la surface de grain sur laquelle elles sont déposées (i.e., les énergies de liaison). Le régime d'adsorption est changé selon la quantité de molécules déposées à la surface, comme le montre la Figure 57, où l'on a la distribution d'énergie modélisée obtenue par TPD en fonction du recouvrement. Plusieurs substrats sont étudiés : $\text{H}_2\text{O}_{(c)}$ (eau cristalline), $\text{H}_2\text{O}_{(np)}$ (eau non-poreuse) et SiO_x (silicates). Trois cas de régimes de désorption apparaissent alors :

1. Le cas où l'énergie disponibles sur les multi-couches ($\text{Exposure}/N_{mono} > 1$ sur la figure) est plus importante que celle disponible sur un substrat recouvert de moins d'1 ML ($\text{Exposure}/N_{mono} < 1$). C'est le cas pour le CO déposé sur une surface d' $\text{H}_2\text{O}_{(c)}$ (ligne solide en rouge) par exemple. Les molécules s'adsorberont plus facilement sur le substrat à des faibles recouvrement plutôt que de former une nouvelle couche.

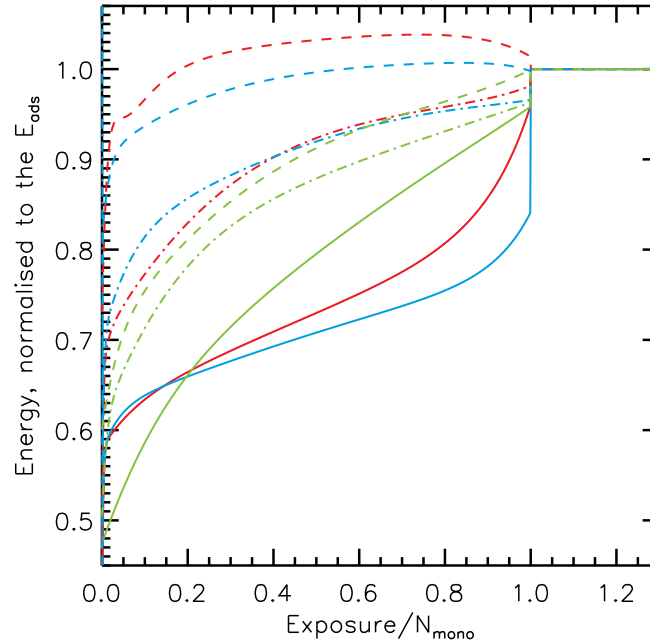


FIGURE 57 – Figure 4 de [Noble et al. \(2012\)](#), montrant l'énergie totale modélisée en fonction de l'exposition (i.e., nombre de mono-couches déposées sur la surface) pour toutes les combinaisons d'espèces déposées (en pointillés) sur les surfaces (traits pleins) possibles. Cela montre les différences notables d'énergie de liaison pour quelques espèces chimiques, on voit par exemple que l'énergie de liaison du CO est inférieure d'un facteur 2 à celles du CO₂ pour une même exposition. Les courbes sont les suivantes : O₂ en pointillés-tirés, CO en ligne solide, CO₂ en tiré, H₂O_(np) en rouge, H₂O_c en bleu, SiO_x en vert.

2. Le cas où l'énergie du recouvrement multi-couches est plus basse que l'énergie d'un recouvrement de moins d'1 ML, comme c'est le cas pour le CO₂ déposé sur un substrat d'H₂O_{np}. Les molécules ici se déposeront facilement et formeront des amas, ne couvrant pas la surface de façon homogène, avant même d'atteindre 1 ML.
3. Enfin, on a un régime intermédiaire où les molécules se déposeront d'abord sur les sites d'adsorption à faible énergie puis se déposeront en multi-couches sur la ML déjà nouvellement formée, avant même que le substrat ne soit recouvert entièrement.

Alors qu'elles jouent un rôle important dans les modèles chimiques, les valeurs des énergies de liaison sont réduites à des valeurs uniques, plutôt incertaines, au lieu d'une distribution, pour quelques espèces chimiques. Schématiquement, dans la Figure 57, les modèles prennent en entrée pour la plupart des espèces chimiques les énergies constantes obtenues après une exposition suffisamment longue > 1 (normalisée dans cette figure). Il est en effet difficile d'obtenir les distributions réelles en laboratoire. Ce traitement assez simple de ces énergies impacte la diffusion à la surface et donc les produits résultants des réactions chimiques. En réalité, il est attendu que les énergies de liaison ne soient pas simplement une valeur mais plutôt une distribution d'énergie qui varie pour chaque espèce en fonction de la nature de la surface. Dans [Penteado et al. \(2017\)](#), les auteurs ont montré

que même pour la molécule la plus simple, mais la plus abondance, H_2 , cela a des conséquences non-négligeables. En augmentant simplement son énergie de liaison, le réseau de réaction serait grandement impacté : on aurait alors une chimie riche en méthane qui permettrait la formation d'espèces complètement différentes. Ajouter une distribution d'énergie de liaison en fonction de la nature de la surface permettrait en outre de considérer un réseau chimique plus large et avec toutes sortes de réactions disponibles.

Interactions avec les CR

Grâce aux récentes expériences en laboratoire de [Dartois et al. \(2020\)](#), un nouveau processus très efficace a été introduit dans nos modèles : la désorption directe des glaces par impact avec des CR. Ce processus a été une véritable avancée dans nos modèles, nous permettant de reproduire bien mieux les observations. Dans cette étude, les auteurs ont montré que la présence de méthanol sur une matrice de CO a un impact sur l'efficacité de désorption par les CR. En irradiant une surface fine d'un mélange de glace (CO_2 et CH_3OH) avec des ions rapides lourds pour simuler les CR, les auteurs ont mesuré l'évolution du spectre IR ainsi que les espèces éjectées dans le gaz avec un spectre de masse. Ils ont montré que lorsque le méthanol se trouve dans un manteau riche en CO_2 exposé aux CR, une fraction importante (pour eux, 0.2 -0.3) est éjectée dans le gaz, sans fragmentation de la molécule. Cette fraction évolue en fonction de la composition du manteau dans le temps, qui évolue à cause de l'érosion par CR. Ils ont montré que le taux d'efficacité des CR pour du méthanol dans une glace de CO_2 devenait donc plus important que dans une matrice d'eau, d'un facteur 6. En conséquence, une meilleure prescription se basant sur la nature de la surface sera ajoutée dans Nautilus, comme déjà entamé dans les deux études des cœurs denses.

Dissipation de l'énergie

Certains des processus simulés dans le modèle produisent de l'énergie. En réalité, cette énergie impacte la chimie lorsqu'elle est dissipée dans le grain, par voie thermique. Cela peut également mener à la restructuration des glaces. Pour le moment, Nautilus ne calcule pas cette énergie en surplus qui est produite par de telles phénomènes. La dissipation de l'énergie sur des surfaces d'eau cristalline a été étudié par [Fredon et al. \(2017\)](#) en utilisant des calculs de Dynamique Moléculaire ("MD"). Les auteurs ont montré qu'une partie de l'exothermicité se retrouvait transformée en énergie cinétique. Ils ont donc introduit un concept de diffusion non-thermique qui peut influencer la chimie de surface. En débloquent certaines molécules de leurs sites d'adsorption, elles peuvent se diffuser à la surface et réagir avec les autres espèces. Ils ont dérivé une formule de probabilité qu'une molécule rencontre une autre espèce sur le grain en diffusant. Cette formule pourrait être ajoutée à Nautilus et permettre une restructuration de la surface.

Dans [Clément et al. \(2023\)](#), nous avons également montré que la température du grain impactait grandement la formation de certaines molécules, notamment à 12 K. Nautilus ne peut pour le moment pas reproduire les abondances observées dans les glaces : ajouter la dissipation de l'énergie pourrait régler en partie le problème de la diffusion du carbone sur les surfaces. Cela impacterait en conséquence tout le réseau chimique qui en découle.

Composition des glaces

Ce point rejoint le précédent, qui affecte activement la composition de la surface. Nous avons identifié dans l'article sur L429-C que le modèle avait des difficultés à reproduire la tendance observée du rapport des abondances glace-sur-gaz. En effet, il semble qu'une explication possible soit que la composition de la glace change avec la densité, avec une glace de H₂O pure se transformant en un mélange à plus haute densité, produisant une désorption plus efficace. Le *catastrophic freeze-out* du CO pourrait être en grande partie responsable de ce changement. Dans Nautilus, l'efficacité de l'érosion par les comiques est changée à la main, soit aux valeurs expérimentales pour une glace d'eau ou de CO₂. Une solution serait donc de pouvoir changer cela en une fonction dépendant du temps et de l'espèce majoritaire formée sur les surfaces. Des expériences de laboratoire seraient nécessaires pour mesurer l'efficacité de la désorption par CR pour des glaces de CO₂. Un autre point qui pourrait être abordé dans un futur plus lointain serait une caractérisation précise du type de glace. En effet, la diffusion sur les grains (Oba et al. 2009; Congiu et al. 2014) et l'énergie de liaison (Cuppen & Garrod 2011) sont directement liées au type de glace. Cela change considérablement la distribution des sites d'adsorption et donc en conséquence de toute la chimie de surface et de la désorption qui s'y produit. Mais ajouter une paramétrisation des glaces de ce type se ferait dans un premier temps uniquement pour une glace d'eau et nécessiterait des données expérimentales et théoriques supplémentaires.

Distribution de la taille des grains et grossissements

De nombreuses études (e.g. Ysard et al. 2016; Dartois et al. 2022; McClure et al. 2023) ont mis en évidence le grossissement des grains dans les observations et les ont reproduit avec des modèles. L'impact sur la chimie est multiple. Par exemple, les petits grains seront moins sujets aux collisions (proportionnelles à la section efficace des grains), mais leur grand nombre permet tout de même la déplétion des espèces gazeuses à leur surface. Cependant, lorsque les grains se collent entre eux, le nombre global de petits grains va diminuer et le taux de collision va chuter, entraînant une diminution de la déplétion. La distribution en taille de grains est donc un paramètre capital. De plus, la température moyenne des gros grains est plus froide que celle des petits, impliquant une chimie de surface très différentes et plus lente là où les petits grains pourront former plus facilement des COMs. L'érosion et l'ionisation sont plus efficaces pour les petits grains mais statistiquement plus rare. En conséquence, les espèces chimiques de surface pourraient être bien différentes et donc mener à différentes espèces chimiques désorbées. Un autre élément à considérer en prenant en compte la surface des grains est leur structure. Dans des modèles d'agrégation (Ormel et al. 2009), les grains en grossissant deviendraient plus poreux avant de se stabiliser puis de devenir plus compact. Certains grains présenteraient alors une structure plus creuse (*"fluffy"*), impactant grandement la surface disponible.

Comme expliqué dans le Chapitre 2 Section 2.5.3, une distribution en taille de grains a déjà été incluse dans Nautilus (Iqbal & Wakelam 2018). Cet ajout pourrait être réactivé dans le futur avec quelques mises à jour dans le code.

Nous pourrions également envisager d'ajouter le grossissement des grains. En effet, on pourrait ajouter une fonction variant dans le temps permettant de définir la capacité d'un grain à se coller à d'autres, permettant ainsi la diffusion de nouvelles espèces d'un grain à l'autre. En considérant la différence de faune chimique entre les petits et les gros grains, nous pourrions observer une évolution très différente sur certains grains, avec une stratification plus claire de l'évolution d'un nuage dense vers un cœur dense.

Ajouts dans SynthIceSpec

SynthIceSpec a de nombreux axes d'évolution qui peuvent également rejoindre les évolutions de Nautilus. En utilisant les résultats plus réalistes du modèle, les prédictions de glace seront meilleurs. De simples ajouts sont à prévoir, comme certaines molécules dans la base de données : en allant vers des molécules plus complexes, en ajoutant les contributions des molécules sur la bande de MIRI qui est très mal définie pour le moment, ou en ajoutant les autres contributions des molécules déjà existantes dans la base de données.

Des modifications plus complexes sont à prévoir, comme sur les spectres d'étoiles. En effet, la loi d'extinction utilisée est pour le moment trop simple et se base sur des observations effectuées avec *Spitzer* et Keck. Nous pourrions attendre les nouveaux spectres d'étoiles obtenus avec le JWST ainsi que les lois d'extinction qui suivront et les ajouter dans le code. Nous pourrions également tester l'ajout d'un continuum extrait par les observateurs et tester la différence obtenue avec des spectres déjà connus et les prédictions de SynthIceSpec.

Nous pourrions également réfléchir à l'implémentation d'un module se basant sur le BGM (Besançon Galactic Model) (Lagarde et al. 2017). Ce modèle permet d'obtenir une statistique détaillée du type d'étoiles se trouvant dans une direction donnée du ciel, avec lorsqu'elle est disponible, une information sur la distance à l'astre. Cela permettrait en partie d'obtenir une distribution conjointe du type spectral et de la distance pour déterminer le spectre d'étoile utiliser pour l'ajout des raies photosphériques.

Un autre aspect important que l'on commence à très bien observer, comme vu dans l'article de McClure et al. (2023) et beaucoup étudié par nos collègues français est le grossissement des grains. Il serait intéressant de pouvoir paramétrer ce grossissement dans les spectres afin d'ajouter, en fonction de la quantité de molécules entrée par l'utilisateur ou en sortie de Nautilus, une déformation de certaines raies (H_2O , CO ou CO_2). Il doit pouvoir être possible d'obtenir une approximation des fonctions de grossissement grâce aux modèles d'Emmanuel Dartois (Dartois et al, 2023 *in prep*). Cet aspect pourrait aider grandement à l'analyse de données et pouvoir permettre de remonter plus facilement à la composition de la glace.

Une autre utilisation de SynthIceSpec pourrait être étudiée : essayer de comprendre comment la distribution de molécules sur la ligne de visée affecte l'aspect général des spectres pour un même nuage. Si l'on compare avec Nautilus, on considère une ligne de visée dont la densité de colonne serait homogène tout le long. Le problème est plus facile à envisager dans le cas de l'observation de disque proto-planétaire : lorsque l'on regarde ces disques par la tranche (*edge-on*), on sonde l'entièreté du disque sur tout son diamètre. Mais lorsque ces disques sont inclinés de manière à ce qu'on les observe de face, on ne peut sonder qu'une infime partie du disque d'accrétion, on peut obtenir une information spatiale plus fine et donc une composition à un point précis du disque. Ce qui peut s'avérer très important dans l'étude par exemple des *snow-lines*. Une idée pour tester cet impact serait d'utiliser les modélisations dynamiques en 3D, avec une stratification claire de la structure d'un nuage.

Dans tous les cas, seule la comparaison directe entre les observations et SynthIceSpec nous permettra de mettre en lumière les éléments manquants dans le code. J'espère pouvoir très bientôt comparer les spectres synthétiques avec de véritables données, en espérant que dans un futur proche, ces données soient les miennes.

7 | Appendix - Articles

Article attaché :

Taillard, A., Wakelam, V., Gratier, P., Dartois, E., Chabot, M., Noble, J. A., Keane, J. V., Boogert, A. C. A., Harsono, D., "Constraints on the non-thermal desorption of methanol in the cold core LDN 429-C", *Astronomy & Astrophysics*, 670, A141, 2023

Publications :

Clément, A., **Taillard, A.**, Wakelam, V., Gratier, P., Loison, J. -C., Dartois, E., Dulieu, F., Noble, J. A., Chabot, M., "Astrochemical models of interstellar ices : history matters", submitted in *Astronomy & Astrophysics*

Dartois, E., Noble, J. A., Caselli, P., Fraser, H. J., Jiménez-Serra, I., Maté, B., McClure, M. K., Melnick, G. J., Pendleton, Y. J., Shimonishi, T., Smith, Z. L., Sturm, J., **Taillard, A.**, Wakelam, V., Boogert, A. C. A., Drozdovskaya, M. N., Erkal, J., Harsono, D., Herrero, V. J., Ioppolo, S., Linnartz, H., McGuire, B. A., Perotti, G., Qasim, D., and Rocha, W. R. M., "Spectroscopic sizing of interstellar icy grains with JWST", *in press*.

Constraints on the non-thermal desorption of methanol in the cold core LDN 429-C[★]

A. Taillard¹, V. Wakelam¹, P. Gratier¹, E. Dartois², M. Chabot³, J. A. Noble⁴, J. V. Keane⁵,
A. C. A. Boogert⁵, and D. Harsono⁶

¹ Laboratoire d'Astrophysique de Bordeaux (LAB), Univ. Bordeaux, CNRS, B18N, allée Geoffroy Saint-Hilaire, 33615 Pessac, France
e-mail: angele.taillard@u-bordeaux.fr

² Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay, CNRS, Université Paris-Saclay, Bât. 520, Rue André Rivière, 91405 Orsay, France

³ Université Paris-Saclay, CNRS/IN2P3, IJCLab, 91405 Orsay, France

⁴ Physique des Interactions Ioniques et Moléculaires, CNRS, Aix-Marseille Univ., 13397 Marseille, France

⁵ Institute for Astronomy, 2680 Woodlawn Drive, Honolulu, HI 96822-1897, USA

⁶ Institute of Astronomy, Department of Physics, National Tsing Hua University, Hsinchu, Taiwan

Received 6 October 2022 / Accepted 14 December 2022

ABSTRACT

Context. Cold cores are one of the first steps of star formation, characterized by densities of a few 10^4 – 10^5 cm⁻³, low temperatures (15 K and below), and very low external UV radiation. In these dense environments, a rich chemistry takes place on the surfaces of dust grains. Understanding the physico-chemical processes at play in these environments is essential to tracing the origin of molecules that are predominantly formed via reactions on dust grain surfaces.

Aims. We observed the cold core LDN 429-C (hereafter L429-C) with the NOEMA interferometer and the IRAM 30 m single dish telescope in order to obtain the gas-phase abundances of key species, including CO and CH₃OH. Comparing the data for methanol to the methanol ice abundance previously observed with *Spitzer* allows us to put quantitative constraints on the efficiency of the non-thermal desorption of this species.

Methods. With physical parameters determined from available *Herschel* data, we computed abundance maps of 11 detected molecules with a non-local thermal equilibrium (LTE) radiative transfer model. These observations allowed us to probe the molecular abundances as a function of density (ranging from a few 10^3 to a few 10^6 cm⁻³) and visual extinction (ranging from 7 to over 75), with the variation in temperature being restrained between 12 and 18 K. We then compared the observed abundances to the predictions of the Nautilus astrochemical model.

Results. We find that all molecules have lower abundances at high densities and visual extinctions with respect to lower density regions, except for methanol, whose abundance remains around 4.5×10^{-10} with respect to H₂. The CO abundance spreads over a factor of 10 (from an abundance of 10^{-4} with respect to H₂ at low density to 1.8×10^{-5} at high density) while the CS, SO, and H₂S abundances vary by several orders of magnitude. No conclusion can be drawn for CCS, HC₃N, and CN because of the lack of detections at low densities. Comparing these observations with a grid of chemical models based on the local physical conditions, we were able to reproduce these observations, allowing only the parameter time to vary. Higher density regions require shorter times than lower density regions. This result can provide insights on the timescale of the dynamical evolution of this region. The increase in density up to a few 10^4 cm⁻³ may have taken approximately 10^5 yr, while the increase to 10^6 cm⁻³ occurs over a much shorter time span (10^4 yr). Comparing the observed gas-phase abundance of methanol with previous measurements of the methanol ice, we estimate a non-thermal desorption efficiency between 0.002 and 0.09%, increasing with density. The apparent increase in the desorption efficiency cannot be reproduced by our model unless the yield of cosmic-ray sputtering is altered due to the ice composition varying as a function of density.

Key words. astrochemistry – ISM: abundances – ISM: clouds – ISM: individual objects: LDN 429-C – ISM: molecules

1. Introduction

In the last 20 years, our understanding of the overall process of star formation has improved substantially (Jørgensen et al. 2020). The interplay of turbulence, magnetic field, and gravity in the interstellar medium (ISM) leads to the formation of cold cores ($n_{\text{H}_2} > 10^4$ cm⁻², $T \sim 10$ K), which are the sites of rich chemical processes. The dust grains contained in these cores provide a catalytic surface where complex molecules (COMs,

as defined by Herbst & van Dishoeck 2009) are formed, the simplest of which is CH₃OH. The icy mantles (on top of these grains) are mostly made of H₂O, CO, and CO₂, with CH₃OH (Boogert et al. 2015, and references therein). Among these molecules, methanol is a key species as it is predominantly formed on dust grain surfaces, but commonly observed in the gas phase in cold cores (Dartois et al. 1999; Dartois 2005; Pontoppidan et al. 2004). On the grains, methanol can be efficiently formed by the hydrogenation of CO (itself formed in the gas-phase and adsorbed on the grains). The reaction barrier for two key hydrogenation steps (H + CO and H + H₂CO) is significant for CH₃OH formation (Fuchs et al. 2009). The presence of methanol in the gas-phase of cold cores, even at

[★] This work is based on observations carried out under project number 079-20 and ID 111-21 with the IRAM NOEMA Interferometer and 30 m telescope. IRAM is supported by INSU/CNRS (France), MPG (Germany) and IGN (Spain).

low abundance, is a clear indicator that non-thermal desorption mechanisms are efficient in terms of releasing molecules from the surface of the grains in regions where simple thermal desorption are not (Garrod et al. 2007; Ioppolo et al. 2011).

In cold cores, where the temperature is typically ~ 10 K in the absence of any heating source, thermal desorption of methanol is not possible and different desorption mechanisms must be considered. These mechanisms can include chemical desorption (Dulieu et al. 2013; Minissale et al. 2016; Wakelam et al. 2017), UV-induced photodesorption and photolysis (Öberg et al. 2007; Bertin et al. 2016; Cruz-Díaz et al. 2016), and grain sputtering induced by cosmic-ray (CR) impacts (Dartois et al. 2019, 2020). These mechanisms may be partly destructive, thereby releasing intact methanol along with fragments of methanol, which may themselves participate in subsequent chemical processes to reform methanol. The efficiency of non-thermal desorption is not well known, but is regularly investigated in laboratory experiments. Using an astrochemical model, Wakelam et al. (2021b) showed that the intrinsic efficiency of these mechanisms depends on the local physical conditions: moving inward into a cold core (with an increasing density, increasing visual extinction, and decreasing temperature), the initially efficient photo-desorption will first be replaced by chemical desorption, before cosmic-ray induced sputtering becomes the majority process at the highest densities. With the increased sensitivity of the new generation of telescopes and instruments, it is now possible to efficiently detect methanol ice from the ground (Chu et al. 2020; Goto et al. 2021) and from space (Dartois et al. 1999; Pontoppidan et al. 2003, 2004; Boogert et al. 2015; Shimonishi et al. 2016) using IR absorption spectroscopy along the lines of sight toward background sources. Comparing these ice observations to gas-phase methanol observations helps to assess the efficiency of non-thermal desorption of this molecule.

In this article, we present observations of a number of molecules in the cold core L429-C obtained with the IRAM 30 m single dish telescope and the NOEMA interferometer. This source is one of the few cores where CH₃OH has been detected in the solid phase and it is an obvious benchmark for gas-grain models. We focus in particular on gas-phase methanol in order to compare its abundance with ice abundances of methanol obtained with *Spitzer* by Boogert et al. (2011) in the same region, as well as to constrain the efficiency of non-thermal desorption of this molecule from the grains.

The paper is organized as follows. Current knowledge of the source properties and a description of our observations are given in Sects. 2 and 3. A description of the observed integrated intensity maps and a kinematic analysis of the observations is presented in Sect. 4. From these observations, we compute abundance maps for all detected molecules in Sect. 5 and compare these results with the predictions of the Nautilus astrochemical model in Sect. 6. Our conclusions are summarized in the final section.

2. Observed source: LDN 429-C

LDN 429-C (hereafter L429-C) is a cold ($T < 18$ K) and dense (column density $N_{\text{H}} \sim 10^{22}$ cm⁻²) core (Stutz et al. 2009) located in the Aquila Rift (~ 200 pc away), with a visual extinction larger than 35 mag at the center (Crapsi et al. 2005; Caselli et al. 2008). This core is characterized by high degrees of CO depletion (15–20 times with respect to the canonical abundance at the center (Bacmann et al. 2002; Caselli et al. 2008) and of deuteration (Bacmann & Faure 2016; Crapsi et al. 2005; Caselli et al. 2008). The isotopic fractionation of nitrogen

presents a depletion of ¹⁵N, as in other prestellar cores (Redaelli et al. 2018). HCO, H₂CO, and CH₃OH have been detected by Bacmann et al. (2002, 2003); Bacmann & Faure (2016) toward this source using the IRAM 30 m telescope, while CH₃O (Bacmann & Faure 2016) and O₂ (Würström et al. 2016) were searched for unsuccessfully. The source has been proposed to be on the verge of collapsing by Stutz et al. (2009), based on 70 μ m observations with *Spitzer*. Based on observed molecular line profiles, both Lee et al. (2004) and Crapsi et al. (2005) classified this source under a possible “infall” category, although the authors also discussed the possibility that the line asymmetry could be due to other types of motion.

Herschel observations of this cold core are available from the *Herschel* database¹. We used the temperature and optical depth maps at 353 GHz (τ_{353}) derived by Sadavoy et al. (2018) from SPIRE 250, 350 and 500 μ m and PACS 160 μ m, with a resolution of 36″. Those authors fitted spectral energy distributions to these maps in order to obtain temperature and τ maps on more than 50 globules. To obtain the temperature maps, they averaged the dust temperature along the line of sight. The dust temperature, within an extended map around L429-C, varies between 10 and 18 K and the optical depth from 0.0001 to 0.001. We derived a column density of H₂ from the τ map following the method described in Appendix A. The H₂ column density map is shown in Fig. 1 (left panel) together with the published *Herschel* dust temperature.

Lastly, L429-C is one of the first cold cores where the signature of CH₃OH ice was unambiguously detected with *Spitzer*. In a survey of 16 isolated dense cores chosen from the c2d legacy targets (Evans et al. 2009), Boogert et al. (2011) observed a sample of 32 background stars in the 1–25 μ m wavelength range to determine the solid-phase molecular composition of dense cores. They identified and used four background stars in the L429-C region. The authors were able to measure the H₂O, CO₂, and CH₃OH ice column densities, as well as a detection attributed to NH₄⁺. They found a H₂O ice column density up to 3.93×10^{18} cm⁻² in the cloud with abundances of 43.12%, 6.13–9.08%, and 6.34–11.58% for CO₂, NH₄⁺, and CH₃OH respectively, with respect to water. Recently, two more methanol ice detections in other cold cores have been reported using the NASA Infrared Telescope Facility (IRTF). Chu et al. (2020) and Goto et al. (2021) found CH₃OH ice abundances relative to water of around 14.2 and 10.6% towards L694 and L1544, respectively. As L429-C is one of the few cores to have multiple clear CH₃OH detections in the solid phase, it is an obvious benchmark for gas-grain modeling.

3. Observations

The NOEMA observations were conducted during summer 2020 using the mosaic mode, with additional IRAM 30m short spacing observations being made in winter 2020. The mosaic phase center is RA = 18^h17^m08^s.00, Dec = -8°14′00″ (J2000). The size of the mosaic is 300″ × 300″ with a synthesized beam of 7″. The short spacing maps are 360″ × 360″, slightly larger than the NOEMA mosaic, and have a beam of ~ 25 ″. Velocity channels were 0.2 km s⁻¹ and each cube contained 152 of them. The rms sensitivity was, on average, between 0.10 and 0.20 K, depending on the molecule at 7″.

We observed three frequency bands with IRAM 30 m: 94.5–102.2 GHz, 109.8–117.8 GHz, and 168–169.8 GHz. These setups were made to focus on specific molecules such as methanol,

¹ <http://archives.esac.esa.int/hsa/whsa/>

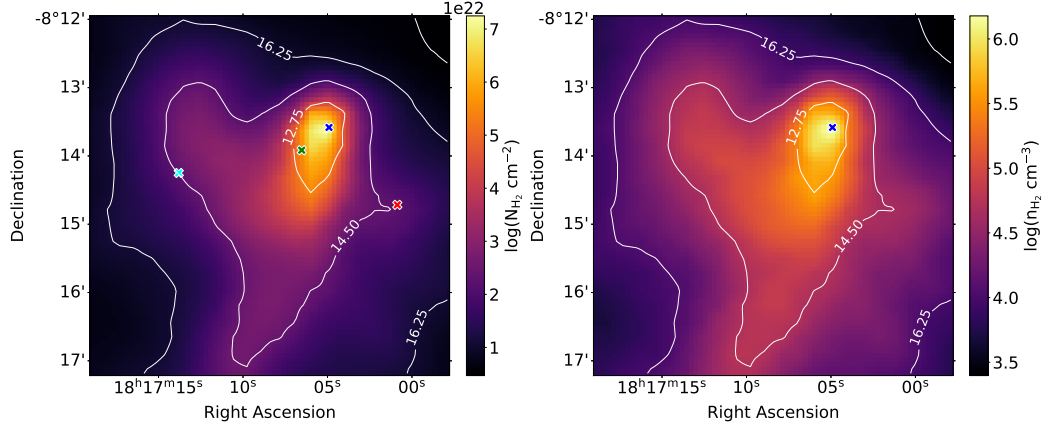


Fig. 1. Physical parameter maps of L429-C. Left: H_2 column density (N_{H_2} in cm^{-2}) in L429-C computed from the *Herschel* optical depth map. The position of maximum continuum is represented by the dark blue cross. The other crosses represent different positions where the spectra were studied (see Fig. 2). Right: computed molecular hydrogen density (n_{H_2} in cm^{-3}) map. On both maps, the white contours are the dust temperatures.

Table 1. Detected lines and associated spectroscopic information.

Molecule	Frequency (MHz)	Transition	E_{up} (K)	g_{up}	A_{ij} (s^{-1})
CCS	93 870.1	(6–7)	19.9	17	3.8×10^{-5}
CH ₃ OH	96 739.3	(2–1)	12.5	5	2.55×10^{-6}
CH ₃ OH	96 741.3	(2,0)–(1,0)	7	5	3.40×10^{-6}
CH ₃ OH	96 744.5	(2,0)–(1,0)	20.1	5	3.40×10^{-6}
CS	97 980.9	(2–1)	7.1	5	1.67×10^{-5}
SO	99 299.8	(1–0)	9.2	7	1.12×10^{-5}
HC ₃ N	100 076.5	(11–10)	28.81	69	0.77×10^{-4}
C ¹⁸ O	109 782.1	(1–0)	5.27	3	6.26×10^{-8}
¹³ CO	110 201.3	(1–0)	5.29	3	6.29×10^{-8}
C ¹⁷ O	112 358.7	(1–0)	5.39	3	6.69×10^{-8}
CN	113 144.1	(1,0,0.5,0.5)–(0,0,0.5,0.5)	5.43	2	0.10×10^{-4}
CN	113 170.1	(1,0,0.5,1.5)–(0,0,0.5,0.5)	5.43	4	0.51×10^{-5}
CN	113 488.1	(1,0,1.5,1.5)–(0,0,0.5,0.5)	5.43	4	0.67×10^{-5}
CN	113 490.9	(1,0,1.5,1.5)–(0,0,0.5,0.5)	5.44	6	0.11×10^{-4}
CN	113 499.6	(1,0,1.5,0.5)–(0,0,0.5,0.5)	5.44	2	0.10×10^{-4}
CN	113 508.8	(1,0,1.5,1.5)–(0,0,0.5,0.5)	5.44	4	0.51×10^{-5}
CN	113 520.4	(1,0,1.5,0.5)–(0,0,0.5,1.5)	5.44	2	0.13×10^{-5}
¹² CO	115 271.2	(1–0)	5.53	3	7.20×10^{-8}
H ₂ S	168 762.7	(1,1,0)–(1,0,1)	27.9	9	2.65×10^{-5}

Notes. The most relevant non-detections are discussed in Appendix E.

CO isotopologues (¹²CO, ¹³CO, C¹⁷O, and C¹⁸O), and H₂S. The full list of molecules and detected lines is given in Table 1. The data reduction was performed using the Gildas package CLASS². The line identification was done with the help of the Cologne Database for Molecular Spectroscopy³ (CDMS; Müller et al. 2001) and the Jet Propulsion Laboratory catalog⁴ (JPL, Pickett et al. 1998), coupled with CLASS. The NOEMA data reduction was performed using the Gildas package CLIC, the standard pipeline provided by IRAM, to create the UV tables. We then used MAPPING to produce the data cubes, using a natural weighting for the synthesized beam. Residuals of the cleaning

residuals were systematically checked. The rms sensitivity on these maps was on average between 0.15 and 0.25 K.

The NOEMA data cube does not show any signal at any frequency. This indicates that there is a spatial filtering with no molecular emission smaller than approximately 30". Merging the two sets thus only ended up adding noise to the maps. We decided to use the single dish observations only and all molecular emission maps have resolutions between 25" and 28".

4. Observational results

4.1. Molecular transitions and integrated intensity maps

Among the targeted molecules, we detected 19 lines (listed in Table 1), corresponding to 11 different molecules, with a

² <http://www.iram.fr/IRAMFR/GILDAS>

³ <https://cdms.astro.uni-koeln.de/classic/>

⁴ <https://spec.jpl.nasa.gov>

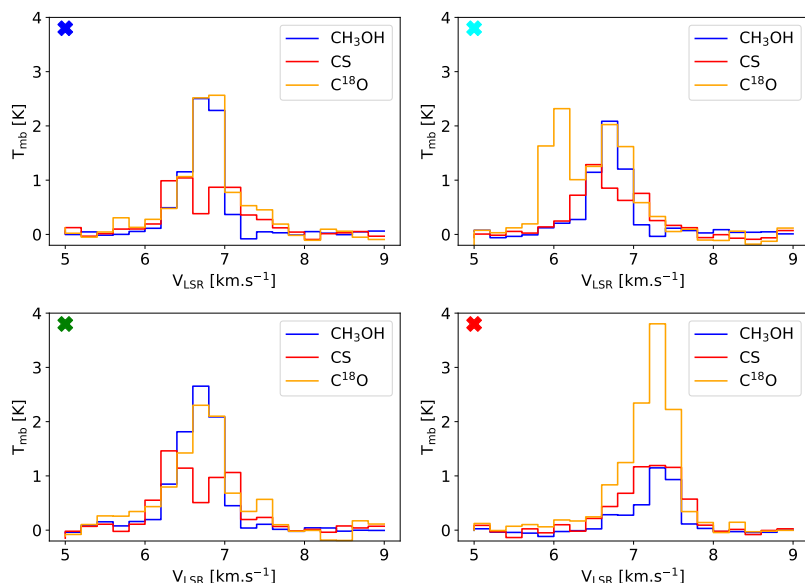


Fig. 2. Spectra of CS (red line), CH₃OH 96.741 GHz (blue line) and C¹⁸O (yellow line) for the four positions indicated as crosses in Fig. 1. The colored crosses are shown in the upper left corner of each panel.

peak intensity greater than three times the local rms. The integrated intensity maps have been constructed from the data cubes with the Spectral Cube python package (Ginsburg et al. 2019). In Fig. B.1, we present the integrated intensity maps of all detected molecules; when several lines were observed, we only show the most intense ones. The molecules (and transitions) in the following list were targeted but not detected: OCS (9–8), HNC(4,0–4,4), and *c*-C₃H₂ (4,3–1,0). These non-detections are discussed in Appendix E.

Concerning the detected lines, most of the emissions are extended and not centered on the maximum continuum position: C¹⁸O, SO, CS, and CH₃OH exhibit “heart-shaped” emission, namely, it is similar to the H₂ column density (see Fig. 1). Their integrated intensities peak in the upper-right part of the heart, just below the dust maximum position (dark-blue cross).

The other molecules (CCS, HC₃N, H₂S, and CN) show a weak and more localized emission close to the maximum dust emission. The maps can be found in Appendix B.

4.2. Kinematic analysis

The line profiles of all detected molecules present a complex velocity structure that varies with their spatial location. As an example, in Fig. 2, we show the spectra of C¹⁸O, CS, and CH₃OH at four positions indicated by colored crosses in Fig. 1. Velocity channels maps are shown in Appendix C. The C¹⁸O molecule presents three velocity components, each of which can be fitted with a Gaussian. The first component is between 5.95 and 6.25 km s⁻¹ (component 1), the second is between 6.25 and 7 km s⁻¹ (component 2), while the higher velocity component is between 7 and 7.6 km s⁻¹ (component 3, see Fig. C.1). Component 1 is the broadest feature with lowest peak intensity. Component 2 corresponds to the v_{LSR} of the cloud at 6.7 km s⁻¹ (see also Spezzano et al. 2020). To better visualize the spatial distribution of the emission, we integrated the signal over the three ranges of velocities. In Fig. 3, we show the resulting contours (together with the first-moment map, corresponding to the velocity distribution of C¹⁸O). The lower (blue) and higher (red)

velocity components are only located in the left and right parts of the map, respectively, while the central velocity component is widely spread across the entire map and even superimposes upon the red and blue emissions.

The other molecules also have multi-velocity components but with less clear signatures. In particular, SO does not exhibit component 1 but does have components 2 and 3 (with the strongest emission coming from component 2, see also Fig. C.2); CS has a weak intensity component, possibly interpreted as component 1, between 5.2 and 6.1 km s⁻¹. As for SO, component 2 is the most intense (see also Fig. C.3). Most of the methanol emission can be fitted with one single component (component 2), but in the right part of the map, a weak component 3 can be found (see also Fig. C.4). The other molecules are weak and only present emission at the velocity of component 2. This velocity structure observed on the line profiles at large spatial scale is very likely what Lee et al. (2004) and Crapsi et al. (2005) attributed to infall, as they had only the spectra on the dust peak position for Lee et al. (2004) and a very small map around it for Crapsi et al. (2005).

We investigated the possibility that L429-C could be the result of a H I cloud-cloud collision. Looking strictly from a dynamical point of view, as discussed previously, we have multiple velocity components in our spectra, possibly showing convergent flows rather than turbulence. In the cloud-cloud collision scenario, we would have two components, one moving towards (blue) and one moving away (red) from us, converging to the dust peak position and resulting in the formation of a denser region. In Bonne et al. (2020), the authors studied the formation of the Musca filament and its origin from a cloud-cloud region collision: a H I cloud colliding with a denser region. In the multiple arguments in support of this hypothesis, they showed that the result from such a collision would be a dense filament with the apparition of CO from the resulting shocks. The CO emission would therefore be blue-shifted in comparison to the H I emission. A key result would be that the matter would slide to the core by the action of a curved magnetic field, thus becoming accelerated. This would be manifested in the PV-diagram (shown

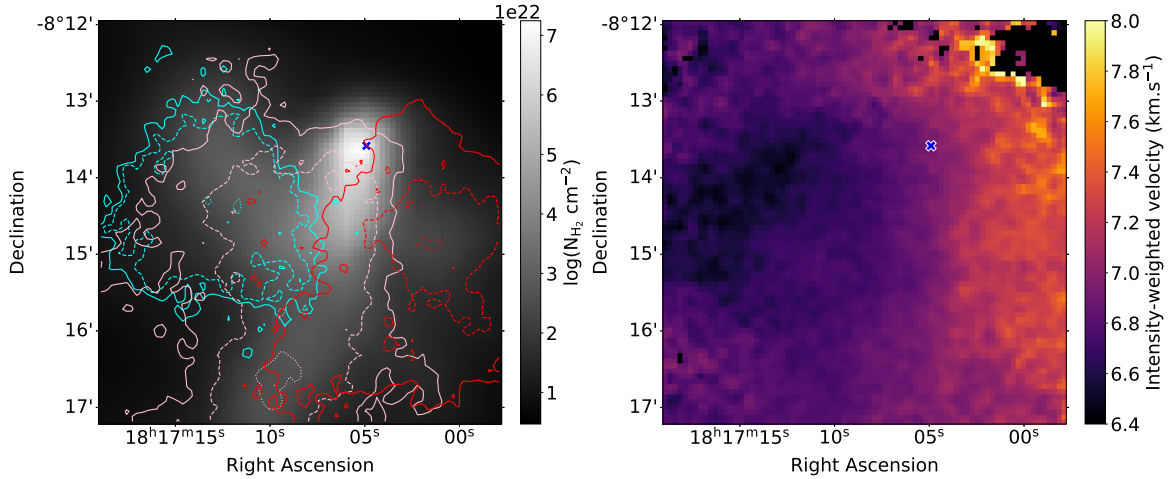


Fig. 3. Velocity distribution in the cloud. C^{18}O integrated intensity contours overlaid on the N_{H_2} *Herschel* map (gray color). Contours are shown for the three velocity components detailed in the text (left). Cyan: 5.95–6.25 km s^{-1} (with intensity levels as follows: dotted is 0.4 K, dashed is 0.5 K and solid line is 1 K), pink: 6.25–7 km s^{-1} (with dotted as 1 K, dashed is 1.5 K and solid line is 2.4 K), red: 7–7.6 km s^{-1} (with dotted as 1 K, dashed as 1.5 K and solid line as 2 K). Velocity (first-moment) map (right). The dark blue cross shows the position of the continuum peak.

in Arzoumanian et al. 2018) of CO, for example, and show a “V-shaped” velocity diagram. Such a curved magnetic field is observable with the *Planck* telescope: they observed magnetic field lines arriving perpendicular to the filament and becoming curved by going through the filament.

In the case of L429-C, from Planck Collaboration I (2020); Planck Collaboration III (2020) released data, we can observe magnetic field lines oriented perpendicularly to the cloud along the top-right axis. By looking at the general direction of the field, we cannot say if the lines are bent by the core’s presence. The *Planck* resolution at 353 GHz (Planck Collaboration I 2020) is too large compared to the size of cloud to observe any bending of these lines. Thus, we are not able to confirm a similar effect as that observed in Musca. We do observe CO in our cloud, with a very dense profile and an asymmetry in our velocity profile. However, we do not observe the “V-shaped” signature found by Arzoumanian et al. (2018) in our PV diagram (see Fig. D.1) – rather, we simply have two components converging toward the core position. Nor do we see any temperature rise that could result from shocks. We conclude that higher resolution magnetic field data would be needed to conclude anything other than that the region is going through dynamical behavior that more so appears to resemble convergent flows. We cannot make other assumptions on a possible HI cloud-cloud collision at this time.

5. Observed molecular abundances

5.1. Method

For all detected molecules, when the collisional rate coefficients were available in the LAMDA database⁵ (Schöier et al. 2005), we estimated the observed column density with an inversion procedure and the RADEX radiative transfer code (van der Tak et al. 2007). We first computed a theoretical grid of line integrated intensities, using external constraints on the temperature, line width, and H_2 density. Then, comparing this grid of theoretical values with our observed ones through a χ^2 minimization,

we constrained the molecular column densities at each pixel. We assumed a gas temperature equal to that determined from *Herschel* observations (see Fig. 1). The resolution of the *Herschel* observations (36” resolution, from Sadavoy et al. 2018) is similar to our 30 m data (23–26.5”) The line widths were taken from each spectrum from a Gaussian fitting (see Sect. 5.1.1), while the H_2 density was derived from the *Herschel* data with a method described below (Sect. 5.1.2).

5.1.1. Determining the line width and integrated intensities at each pixel

The non-LTE RADEX code requires the line width at each spectrum in each pixel. The full width at half maximum (FWHM) of the lines ($d\nu$) was obtained using the ROHSA method from Marchal et al. (2019). The authors developed a Gaussian decomposition algorithm using a nonlinear least-squares criterion to perform a regression analysis. For each pixel, we computed the Gaussian fits of the extracted spectra and computed the width and the integral under the curve of this fit. We also compared the difference between the intensity map obtained by ROHSA and ours. It showed little variation (from 0.1 to 0.3 km s^{-1} width) between both models and so, we assumed that the $d\nu$ value obtained from the Gaussian fit is good enough to be used in our program. For the case of a molecule with multiple components, we fit ROHSA with two Gaussian identifications and made sure to sum the two widths for our final $d\nu$. It is also feasible as all of our molecules present optically thin emission. It was more accurate to use ROHSA’s new computed intensity as it gives us a better signal-to-noise level and also takes into account the possibility that some of the baselines are not completely centered at 0. In the case of two velocity components, the integrated intensities obtained with the two fitted Gaussian are also summed.

5.1.2. Determining the H_2 density at each pixel

The number of detected lines per species was not enough to determine the local volume density at each pixel from a radiative transfer analysis. We therefore used the method described in

⁵ <https://home.strw.leidenuniv.nl/~moldata/>

Bron et al. (2018), which estimates the H_2 volume density from the H_2 column density (obtained from *Herschel* and described in Appendix A). This method is particularly well adapted for simple sources such as ours as it makes the assumption that the medium is isotropic and that the density is smoothly increasing from outer to inner regions of the cloud. It also assumes that there is no preferential direction for the spatial density. It then estimates the typical length scale l of the cloud, knowing the column density N_{H_2} . Finally, n_{H_2} is given simply by dividing N_{H_2} by l . The values obtained for n_{H_2} ranges from 3×10^3 to 10^6 cm^{-3} and the obtained density map is shown in Fig. 1.

5.1.3. χ^2 comparison with RADEX

We then used the non-LTE radiative transfer code RADEX (van der Tak et al. 2007), with the LAMDA database to obtain a grid of integrated intensities for one or multiple transitions per molecule (for the latter, a grid was computed for each line). Collision rates used are: SO from Lique et al. (2005), CS from Lique et al. (2006), CN from Lique et al. (2010), CO from Yang et al. (2010), H_2S from Dubernet et al. (2009), CH_3OH from Rabli & Flower (2010), and HC_3N from Faure et al. (2016).

We first made low-resolution grids using RADEX to estimate the value ranges of the unknown parameters; the grids were wide at first then narrowed by iteration. This process refines the grids to avoid saturation on the extrema and smoothed the maps (for example, starting with values for the column densities between 10^{11} and 10^{18} cm^{-2} before refining to values between 10^{12} and 10^{16} cm^{-2}). The theoretical integrated intensity grid was computed for H_2 density values between 10^3 and 10^7 cm^{-3} (30 values in logarithmic space), temperatures between 11 and 18.5 K (30 values in linear space), 5 values of dv (in linear space), between the minimum and maximum value, of each Gaussian file of the molecules obtained by ROHSA. For the molecular column density, we ran multiple tests to calibrate it for each molecule, with a logarithm space of 60 values and the lowest input being 10^{12} cm^{-2} and the maximum 10^{18} cm^{-2} . Once we ran the tests, we adjusted the values to be the closest to the minimum and maximum values obtained on the column densities maps (see next steps). The final grid contains 270 000 values.

To circumvent the degeneracies between the RADEX input parameters, we chose to fix most of the values (T_{kin} , n_{H_2} , dv) to those we determined independently for each pixel from the methods described in previous sections. This is done by interpolating linearly on the intensity grid using the independently derived parameters. The interpolated theoretical integrated intensities are then compared to the observed ones, through χ^2 minimization, to determine the best molecular column density.

Lastly, we created abundance maps by dividing the molecular column densities by the H_2 column densities for each pixel. These maps of the abundances with respect to H_2 are shown in Figs. 4 and 5. For CO, we computed the main isotopologue abundance from the $C^{18}O$ abundance multiplied by 557 (Wilson 1999). We also computed it from the $C^{17}O$ abundance multiplied by 2005 (Lodders 2003) and obtained the same abundance of the main isotopologue. The maps of CCS and HC_3N were computed at LTE because no collisional coefficients are available. Similar to CN, the lines are only detected in a small portion of the map. For the non-detected molecules, we computed upper limits on their column densities (given in Appendix E).

Finally, the optical depth for each detected molecule (that has an entry in the LAMDA collisional database) was computed. To do so, we used the four positions shown in Fig. 1 and for each associated pixel, we collected the kinetic temperature, the

H_2 density, the line width, and the column density. We used RADEX to compute τ for each position and each molecule. For all molecules, we found τ values inferior to 1, indicating that the emission averaged within the beam is optically thin.

5.2. Results

5.2.1. Abundance maps

The position of the dust peak is characterized by a decrease in the abundance of most of the observed molecules (see Figs. 4 and 5). We obtained a CO abundance (with respect to H_2) up to 10^{-4} in the outer parts of the maps, whereas it is around 1.7×10^{-5} at the dust peak. We computed a depletion factor of $f = f(X_{\text{can}}/X_{^{12}\text{CO}})$, with $X_{\text{can}} = 8.5 \times 10^{-5}$ being the ‘‘canonical’’ abundance of ^{12}CO determined by (Frerking et al. 1982), from the $^{12}\text{CO}/H_2$ abundance map. At the position of the dust peak, we find a CO abundance of 1.7×10^{-5} , which gives us $f^{^{12}\text{CO}} = 4.91$, showing an underestimation of the abundance in comparison to the canonical one. This is almost three times smaller than Bacmann et al. (2002), where the authors found a depletion factor of 15.5 in L429-C. This discrepancy can be explained by a difference in the adopted temperature used to determine the CO column density and in the adopted H_2 column density. By using a lower temperature for ~ 7 K, the authors found $f = 5$ (and for ~ 11 K, $f = 3$), which is closer to our value. They also used a higher H_2 column density of $1.4 \times 10^{23} \text{ cm}^{-2}$ (we used $N_{H_2} = 7.2 \times 10^{22} \text{ cm}^{-2}$), which produces a lower ^{12}CO abundance compared to us.

We note that CS seems to be depleted over the entire ‘‘heart-shaped’’ density structure. Its highest abundance is in the top of the map (with a maximum value of 1.1×10^{-8}), while the abundance at the dust peak is 1.5×10^{-10} , that is, almost 75 times lower; SO presents a similar behavior, although its maximum abundance is in the left part of the map, with a difference of 7.5 between the maximum (2.5×10^{-9}) and the dust peak (3.3×10^{-10}) abundances. The H_2S intensity is weak so the values derived here have to be considered with less robustness than for the other species. The maximum abundance is obtained on the border of the map, around 3.5×10^{-9} , while it is 4.9×10^{-11} at the continuum peak position.

Compared to the other species, the CH_3OH abundance is more homogeneous across the cloud. Its maximum abundance is in the left part of the map (although not on the border of the map) and is around 8.5×10^{-10} , while its abundance on the dust peak is about two times lower, being around 4.2×10^{-10} . The CN map was computed using several lines detected only in a small area of the region. This results in a source-focused area with a visible depletion on the continuum peak. The maximum abundance is found to be just below the dust peak at 1.3×10^{-11} and its minimum at 2.9×10^{-12} on the dust peak. CCS presents three peaks, with its maximum in the left part of the map, where the peak abundance is 6.1×10^{-11} . The abundance on the dust peak is around 4.5×10^{-11} . In the wider region probed here, CCS is constant and there is no evidence for depletion. HC_3N shows little to no variation in its abundance. The maximum abundance (4.4×10^{-12}) is found close to the dust peak position (with an abundance of 2.3×10^{-12}).

5.2.2. Abundances as a function of the physical parameters

In Figs. 6 and 7, we show the abundances (with respect to H_2) of each molecule for all pixels as a function of the three physical parameters (temperature, density, and visual extinction). The

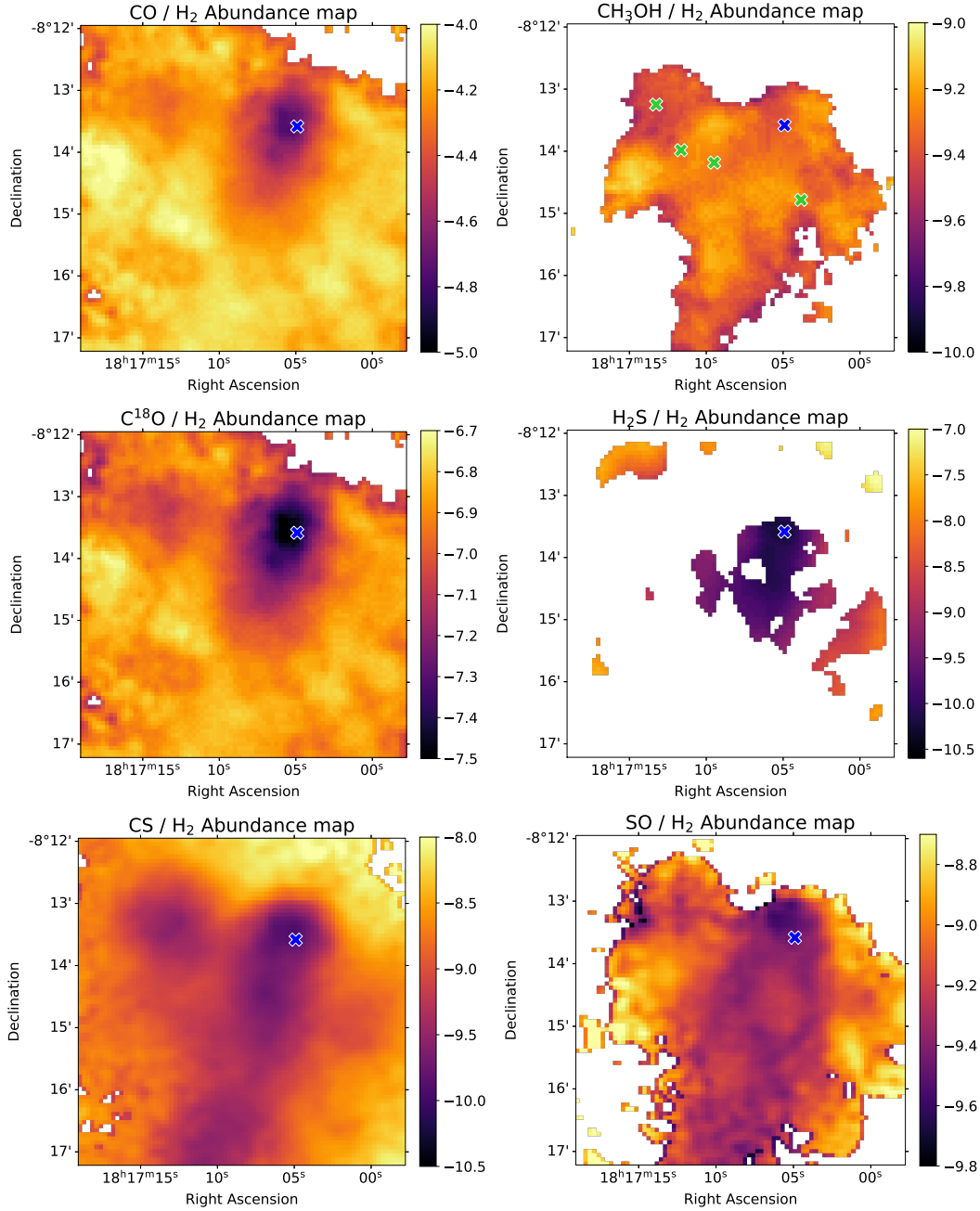


Fig. 4. On a logarithmic scale, observed gas-phase abundance maps with respect to H₂. The green crosses on the methanol map correspond to the positions of the methanol ice observations reported by [Boogert et al. \(2011\)](#). The dark blue cross is the continuum peak. We note that the white cross on H₂S/H₂ represents a gap in the data.

CO, CS, SO, and H₂S abundances decrease with density, as well as with temperature and visual extinction, as these three parameters are linked. The lower molecular abundances of CO, CS, SO, and H₂S seen on the continuum peak position are indeed explained by a higher density there. The slope of the decrease is the strongest for H₂S, which decreases by three orders of

magnitude when the density goes from 3×10^4 to 10^6 cm⁻³. Then, CO has the smallest variation among these molecules with a less than one order of magnitude decrease. The methanol abundance is nearly flat. For the CCS, CN, and HC₃N molecules, the abundances also seem flat, but they are only observed at high density, so they are not fully comparable with the other

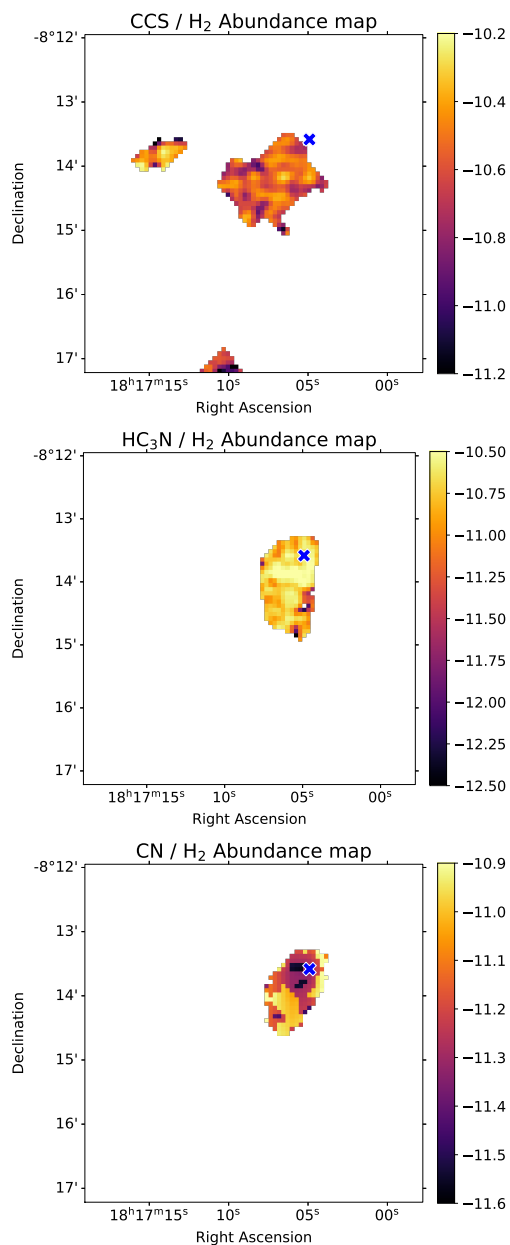


Fig. 5. On a logarithmic scale, observed gas-phase abundance maps with respect to H_2 for CCS, HC_3N , and CN. The dark blue cross is the continuum peak.

molecules. They also present a larger spread of values at a specific density (or visual extinction), especially for lower densities (or visual extinctions) and probably reflecting a larger uncertainty in their computed abundances (due to lower line intensities). We note that the CN abundance is varying over such a small range of values that the distribution of the computed abundances (forming three groups) reflects the sampling of the RADEX theoretical grid.

6. Chemical modeling of the region

To understand the trends in molecular abundances observed in L429-C, we ran a suite of chemical models accounting for the cloud's physical conditions.

6.1. Model description

We used the chemical model Nautilus developed by [Ruaud et al. \(2016\)](#). Nautilus is a three-phase gas-grain model that computes the gas and ice abundances of molecules under ISM conditions. All gas-phase chemical reactions are considered, based on updates of the `kida.uva.2014` chemical network ([Wakelam et al. 2015](#)), as listed in [Wakelam et al. \(2019\)](#). The gas and grain network used for these simulations contain more than 14 000 chemical reactions (in the gas-phase, at the surface of the grains, in the bulk, and at the interface between gas and grains, and surface and bulk). Chemistry of the following elements is considered: H, He, C, N, O, Si, S, Fe, Na, Mg, Cl, P, and F. In the model, species from the gas-phase can stick to interstellar grains upon collision, through physisorption processes. They can then diffuse and react. The thermal evaporation of adsorbed species as well as a number of non-thermal desorption mechanisms are included. Under the shielded and cold conditions of L429-C, two non-thermal desorption processes are particularly important: (1) chemical desorption, for which we adopted the formalism of [Minissale et al. \(2016\)](#) for water ices, and (2) sputtering by cosmic-rays ([Dartois et al. 2018](#)). As shown in [Wakelam et al. \(2021a\)](#), this latter process is the most efficient for releasing icy molecules, in particular methanol, into the gas-phase under dense conditions. [Dartois et al. \(2021\)](#) presented two yields for this process, depending on the nature of the main constituent of the ices: either water or CO_2 , with the latter being more efficient than the former. In this work, we tested both yields: a “low sputtering yield” derived from data on pure H_2O pure ices and a “high sputtering yield” derived from data on pure CO_2 pure ices. In each case, we apply one yield to all species in the model, which means that all species (both on the surface and in the bulk) desorb with the same yield. We note that the fraction of CO_2 to H_2O ice observed in L429-C by [Boogert et al. \(2011\)](#) was as high as 43%, although this was only for one line of sight. Our model also includes the non-thermal desorption of surface species due to the heating of the entire grain by cosmic-rays (as presented in [Wakelam et al. 2021a](#)). This process was shown to be important for some gas-phase species (such as CS, HC_3N , and HCO^+) because of the efficient desorption of CH_4 at high density $> 2 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$). A more detailed description of the model is given in [Wakelam et al. \(2021a\)](#).

6.2. Model parameters

To compare our model results with our observed abundances, we ran a grid of chemical models covering the observed physical conditions (temperature, density, and visual extinction). In Appendix F, we show the observed relationship between the H_2 density, the visual extinction, and the temperature determined from *Herschel* data. We note that the range of physical conditions in that case is larger than the one probed by the methanol lines because methanol was not detected throughout. We first created a grid of eight H_2 densities from 3×10^4 to 10^6 cm^{-3} in a logarithm space. For each of the eight H_2 densities (with associated derived dust and gas temperatures, and visual extinctions), we considered two different CR sputtering yields and two different values of the ionization rate ζ . Using the grid defined by

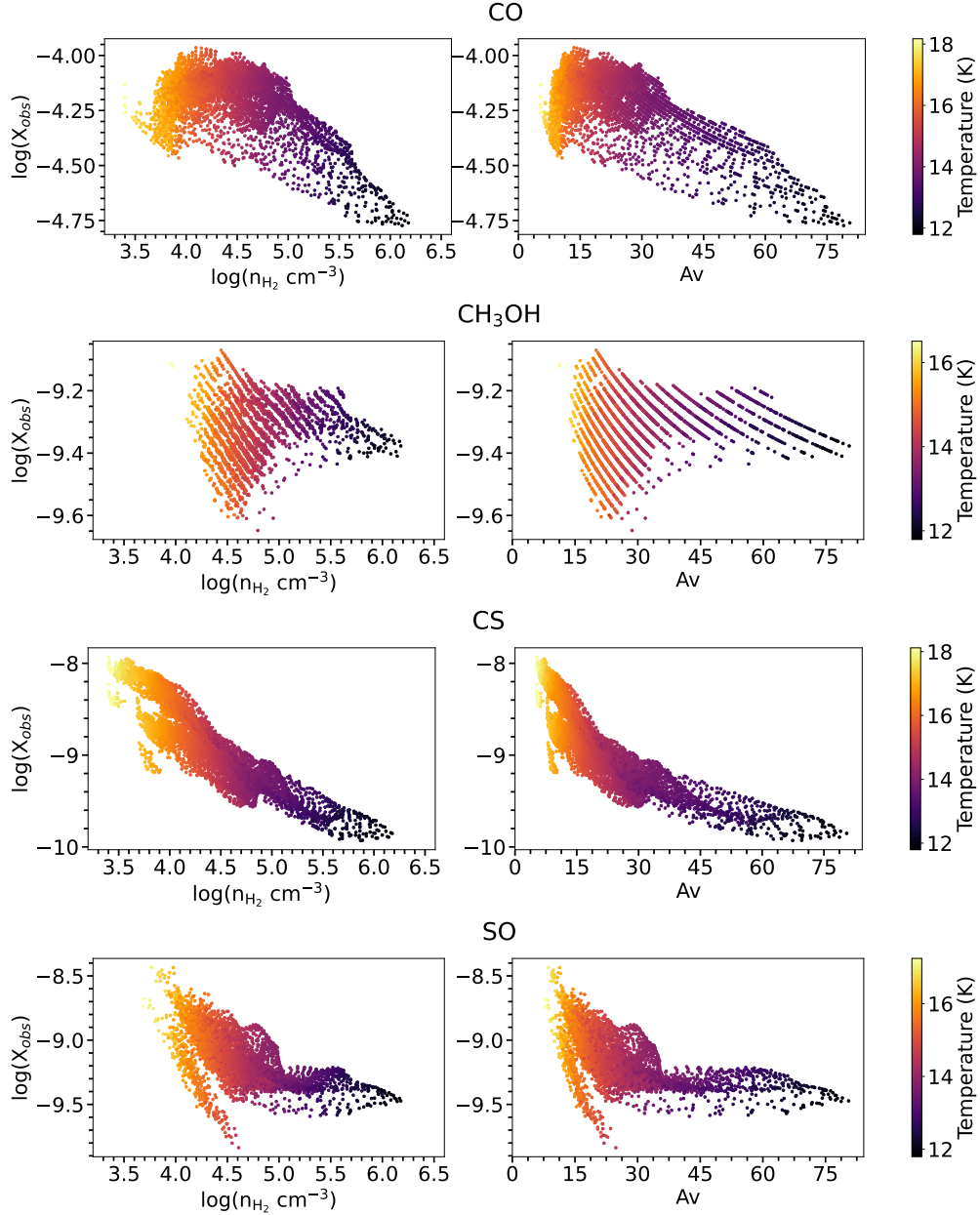


Fig. 6. Abundance as a function of the logarithm of the volume density (right) and of the visual extinction, A_v , (left).

the methanol detection, associated visual extinctions vary from 15.2 to 77.7 while the temperatures vary from 11.8 to 15.7 K. We note that we cover the values of densities where methanol was detected and not the full range of some of the other molecules such as CO. Since we were unable to determine the gas temperature from our line analysis, for the model, we assume the gas temperature as the measurement determined from *Herschel* data. While an uncertainty of a few Kelvin in the gas temperature has little impact on the chemical modeling results, the ice abundances can be strongly influenced by such a difference

in the dust temperature. The dust temperatures retrieved from *Herschel* observations are all above 11 K – even for the highest A_v . Dust temperatures derived for FIR emission tend to be overestimates of the true large grain temperature inside the cores because emission from warmer dust of the diffuse envelope can be mixed in the observing beam (Marsh et al. 2015). For the dust temperature, we therefore used the parametric expression for the dust temperature as a function of visual extinction from Hocuk et al. (2017). This easy-to-handle parametrization was obtained by semi-analytically solving the dust thermal balance

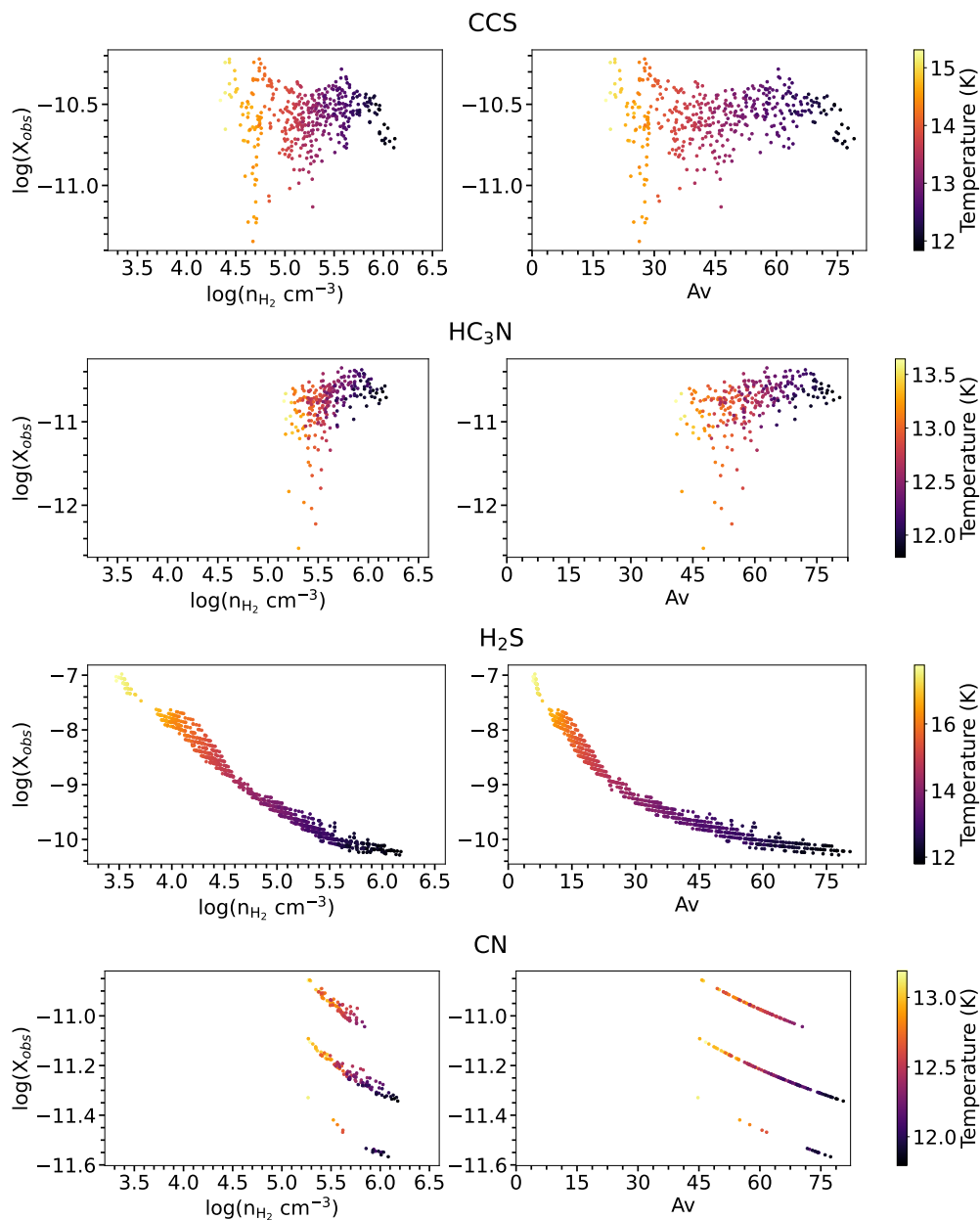


Fig. 7. Abundance as a function of the logarithm of the volume density (right) and of the visual extinction, A_v (left) for CCS, HC₃N, H₂S, and CN.

for different types of grains and comparing to a collection of observational measurements.

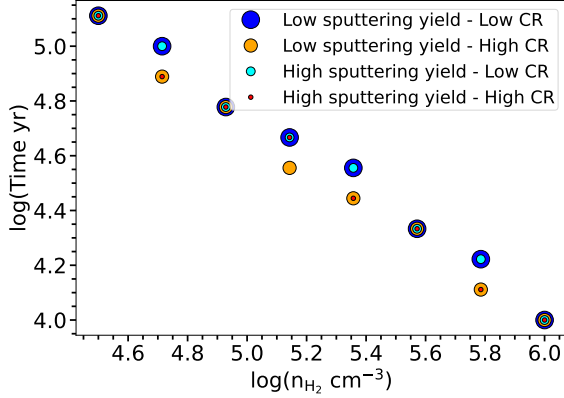
In addition to the density, the dust and gas temperatures, and the visual extinction, we considered two different values of the ionization rate ζ : 10^{-17} s^{-1} (low ionization) and $3 \times 10^{-17} \text{ s}^{-1}$ (high ionization). These two values cover the observational range of ζ at high visual extinction (A_v , e.g. Padovani et al. 2022, Fig. C1). We note that extending the first order function to describe the ionization attenuation with A_v that is valid for

translucent clouds to moderate A_v – as used in Wakelam et al. (2021b) – to such high A_v would predict too low ($<10^{-18} \text{ s}^{-1}$) ionization rates.

In our simulations, we started from atoms (with abundance values similar to those of Table 1 in Ruaud et al. 2016), with the exception of hydrogen, which is assumed to be in molecular form. In total, we have four sets of eight models as a function of time. For the first two sets, we used the yield of sputtering for water-rich ices (low sputtering yield) with two values of

Table 2. Sets of chemical models.

Name	Sputtering yield	ζ (s ⁻¹)
Low yield and CR	H ₂ O-rich ices	10 ⁻¹⁷
Low yield and high CR	H ₂ O-rich ices	3 × 10 ⁻¹⁷
High yield and low CR	CO ₂ -rich ices	10 ⁻¹⁷
High yield and CR	CO ₂ -rich ices	3 × 10 ⁻¹⁷


Fig. 8. Best time obtained from the comparison between modeled and observed abundances of CO, CS, H₂S, and CH₃OH as a function of density.

ζ (10⁻¹⁷ and 3 × 10⁻¹⁷ s⁻¹), while for the other two sets we use the yield for CO₂-rich ices (high sputtering yield) and the same two values of ζ (Table 2).

6.3. Comparison between modeled and observed gas-phase abundances

In these simulations, the abundances are computed as a function of time. To quantify the agreement between model and observations, we computed the distance of disagreement, d , as described in Wakelam et al. (2006):

$$d(t) = \frac{1}{N_i} \sum_i |\log(X_{\text{mod},i}(t)) - \log(X_{\text{obs},i})|, \quad (1)$$

with t as the time, N_i the number of molecular species (four in our case: CO, CS, H₂S, and CH₃OH) used in the comparison, $X_{\text{mod},i}$ the modeled abundance of species i at time, t , and $X_{\text{obs},i}$ as the mean observed abundance of species i . A value of 1 for d means that the mean difference between modeled and observed abundance is a factor of 10. The smallest d value represents the best agreement and, thus, the best time. Figure 8 shows the obtained best time as a function of density for the four sets of models. Density is a fixed value during the time evolution of the model. In Fig. H.1, we show $d(t)$ as a function of time for all eight models in each of the four model sets.

The best time, namely, the integration time used in the model that best reproduces the observations – is similar for all sets of models and decreases with density (see Fig. 8). The fact that some of the models show a best agreement for exactly the same time is a result of the sampling of the modeling time chosen to get the model output and the small sensitivity of the agreement for each model. For the models in Set 1, for instance (see

Table 2), the best time is 1.9 × 10⁵ yr at a density of 3.2 × 10⁴ cm⁻³ and down to 1.0 × 10⁴ yr at a density of 1.0 × 10⁶ cm⁻³. In other words, at a higher density, the observed abundances can be achieved for a shorter integration time. The main constraint on the time is given by the observed CO abundance. According to the model, CO has a “simple” abundance curve with respect to time. The molecule is progressively formed in the gas-phase through gas-phase reactions. Its abundance reaches a peak at a time that depends on density before decreasing as it is depleted onto the grains and transformed into methanol and other species (see also the discussion in Sect. 3 in Wakelam et al. 2021b). In our observations, the CO gas-phase abundance varies by less than a factor of 10, while the density varies over several orders of magnitude. As a result, the observed abundance at high density cannot be achieved on the same timescale as that at lower densities. Through our chemical modeling, we are able to evaluate the dynamical evolution of this region.

We previously indicated that the number of molecular species considered in the determination of the best evolutionary time was four, namely CO, CS, H₂S, and CH₃OH. We did not use CCS, HC₃N, and CN because they were detected only on a small fraction of the map. The SO molecule was detected everywhere but was not reproduced by the model at a sufficient level.

6.4. Goodness of fit

In Fig. 9, we plot the ratio between the modeled abundances (at the best time for each condition) and the observed abundances for the species used to determine the best times (CO, CS, CH₃OH, and H₂S) to quantify the robustness of our models. Overall, the abundances of these molecules are well reproduced (i.e., within a factor of 10). CH₃OH is not as well reproduced at high density if low sputtering yield is assumed and at low density if a higher sputtering yield is assumed. The ratio for the other species (SO, HC₃N, CN, and CCS) is shown in Fig. G.1. Specifically, SO, HC₃N, and CN are overestimated by the model at all densities; CCS is underestimated by the model, with an agreement in excess of a factor of 10 at high density. We cross-checked the upper limits derived for OCS, HNCO, and c-C₃H₂ with our best models (see Appendix E). Upper limits on OCS and c-C₃H₂ are in agreement with our predictions, while HNCO is overproduced by the model by at least a factor of 10 at all densities. We also compared our model predictions to the non-detections of O₂ (with an abundance <2 × 10⁻⁶) and CH₃O (<4.8 × 10⁻¹²) reported at the continuum position by Wirstrom et al. (2016) and Bacmann & Faure (2016), respectively. These upper limits are in agreement with our model results.

7. Constraining the non-thermal desorption of methanol

Combining our gas-phase abundances of methanol with the ice observations of Boogert et al. (2011), we can offer constraints on the efficiency of non-thermal desorption of methanol. Figure 10 shows the ratio between the observed gas and ice column densities of methanol (black dots on the lower panel). The four points represent the four positions reported by Boogert et al. (2011, namely, in Table 6 of their paper) and shown in green crosses in Fig. 4. The observed gas-phase column densities are the ones derived in our study. On the same figure, we show our model results (methanol gas-to-ice abundance ratios) obtained at the best times for each density. As expected, the main reservoir of methanol (empirically and theoretically) is in the ices. The

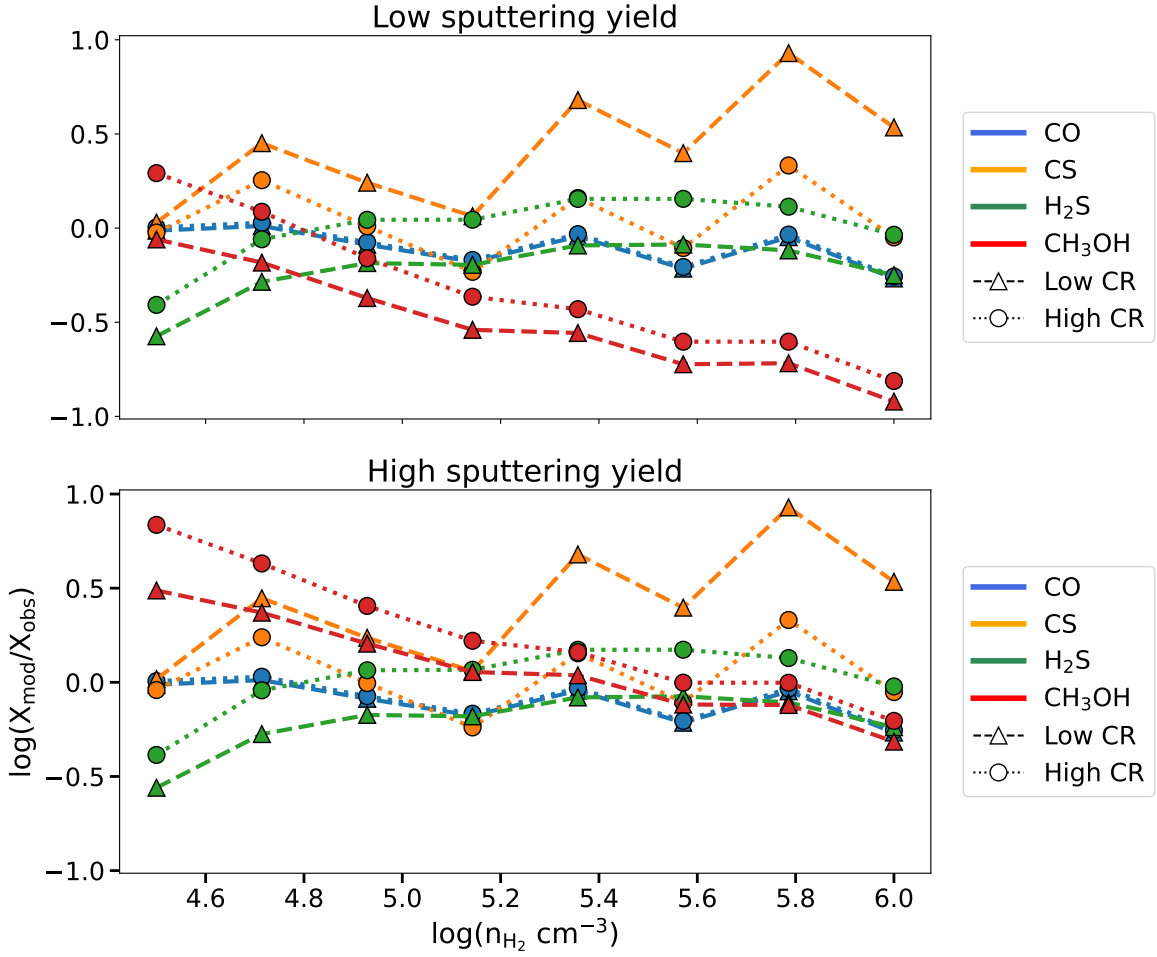


Fig. 9. Ratio between the modeled (X_{mod}) and observed gas-phase abundances (X_{obs}) of CO, CS, CH₃OH, and H₂S as a function of the density for the best times of the four sets of models.

gas-phase abundance is several orders of magnitude lower than the solid abundance (Drozdovskaya et al. 2016). From the observations, we computed the efficiency of non-thermal desorption of CH₃OH ices as $\frac{N_{\text{gas}}}{N_{\text{ice}}} \times 100$ and we obtained a desorption efficiency between 0.002% (at low density $\sim 2.4 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$) and 0.09% (at high density $\sim 2.2 \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$). Although we have only four points, the observations seem to indicate that the efficiency of non-thermal desorption increases with density. The gas-phase abundance at these positions does not vary much ($4.0\text{--}6.4 \times 10^{-10}$), but the ice abundances (as shown in the upper panel of Fig. 10) decrease by more than a factor of 2 with density. So at high density, to maintain the same gas-phase abundance, the desorption needs to be more efficient by a factor of 45. Our models reproduce the observed ice column density of methanol (see top Fig. 10) within less than a factor of 2 for sets 2 and 4 ($\zeta = 3 \times 10^{-17} \text{ s}^{-1}$) and within a factor of 3 for sets 1 and 3 ($\zeta = 10^{-17} \text{ s}^{-1}$) at low density. At a higher density, all models are in agreement with the CH₃OH ice abundance. Both the observations and the models seem to indicate a lower ice abundance with increasing density.

Our different sets of models produce a gas-to-ice ratio that decreases with density (contrary to the observations) but give different values depending on the model parameters. The higher cosmic ray sputtering yield produces a large ratio as does the higher cosmic-ray ionization rate. Sets 1 and 2 (for water ices) give a ratio closer to the observations at low density, while sets 3 and 4 (CO₂ ices) give a ratio closer to the observations at high density. None of the models seem to reproduce the lower density point better than a factor of 3.5. Overall, and considering all the uncertainties in the observations (both the ices and the gas), in the density determination, and in the chemical model, we find this agreement satisfactory. However, if the observed increase in desorption efficiency of methanol with density is true, then this cannot be explained by our model unless we change the ice composition. If the ice composition changes from a water dominated ice to a mixture where non-thermal desorption (such as the cosmic-ray sputtering) is more efficient, then we can obtain the same trend as the observations. Such change in the ice composition could occur during the catastrophic CO freeze out in cold cores (Qasim et al. 2018). In fact, in our observations, the

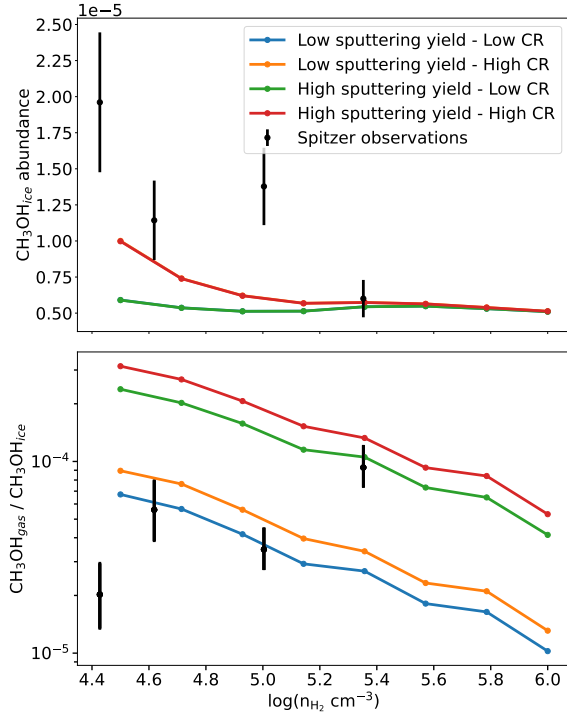


Fig. 10. Comparison between modeled and observed methanol. Upper panel: abundance of methanol ices obtained by our chemical model as a function of density (solid lines; see text and Table 2 for details on the model sets). The black points (with uncertainties) are the observed values at the four positions probed by Boogert et al. (2011). Red and orange curves overlap as well as the green and blue curves. Lower panel: gas-to-ice abundance ratios of methanol as a function of density obtained by the different sets of models for the best times (solid lines) and the four observation points (black dots).

CO abundance in the gas-phase is nearly decreased by a factor of 10 from low to high density. The gas-to-ice CH_3OH ratio that we observe in L429-C may be an indication of a change in the ice composition, as suggested by Navarro-Almaida et al. (2020), for H_2S in cold cores; although we note that paper’s focus was the chemical desorption.

In comparison, Perotti et al. (2020) studied a dense star-forming region, in the Serpens SVS 4 cluster, using the SubMillimeter Array, Atacama Pathfinder EXperiment and Very Large Telescope observations. They estimated a CH_3OH column density of approximately 10^{14} cm^{-2} in the gas-phase and $0.8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-2}$ in the solid phase. They thus obtained a gas-to-ice ratio varying between 1.4×10^{-4} and 3.7×10^{-3} , which is higher than in our findings. However, they do not provide information on the densities within the region. Their gas-to-ice CH_3OH ratio does not show any trend with H_2 column density. In addition, they estimated the column densities of methanol in the gas-phase at LTE, with a mean temperature of 15 K and using a high energy transition of methanol. It is possible that they are in the sub-thermal excitation regime and would thus overestimate the column densities, meaning they would actually have a lower gas-to-ice ratio.

Among the other species studied here, H_2S molecule is an interesting case to highlight, as it is generally assumed that

it must be formed on the grains since there is no efficient gas-phase pathway (Vidal et al. 2017). Similar to the role oxygen atoms play in the formation of water, models predict that atomic sulfur from the gas sticks onto the grains at low temperature and is easily hydrogenated to form H_2S . As such, large amounts of H_2S ice are predicted by chemical models but the molecule has never been found in interstellar ices (Smith 1991; Boogert et al. 2015). This molecule is the dominant S specie sink in cometary ices (Calmonte et al. 2016). Contrary to methanol, we found the gas-phase abundance of H_2S severely depleted at high density. This means that the non-thermal desorption of H_2S is much less efficient at high density compared to methanol. One explanation could be that the H_2S formed on the grains at high density is subsequently transformed into another product that still needs to be identified. This could explain why H_2S has not yet been detected in ices. In our models, we were able to reproduce the observed H_2S because we had already adopted a depleted elemental abundance of sulfur.

8. Conclusions

In this paper, we conducted observations of the cold core L429-C with NOEMA and IRAM 30 m telescopes (maps of $300'' \times 300''$). We detected 11 molecules, including methanol and isotopologues of CO. We determined the gas-phase abundances of these species across the entire maps, constraining the column density with temperature determined from *Herschel*, density with the Bron et al. (2018) method, line widths with the ROHSA method from Marchal et al. (2019). We interpolated these three parameters with the theoretical integrated intensity from RADEX. After a 3σ cut, we computed the column density with a χ^2 test. We divided the obtained column density with the n_{H_2} density to derive abundances. CCS, H_2S , and HC_3N abundance maps were obtained from upper limits computation. We compared our observations with the outputs of the Nautilus chemical model.

We summarize our main findings below:

- The interferometric data from NOEMA alone do not show any signal, implying that there is no molecular emission smaller than approximately $30''$. This also indicates that there is no protostar formed yet, nor is the core at an advanced state of infall.
- We studied the cloud dynamics and showed that there were multiple components (up to three) in the spectra. We did not determine if the origin of the components was due to turbulence or remnants of a cloud-cloud collision since observations of the magnetic field coupled with higher resolution maps would be required. Considering that these velocity components are seen at large spatial scales, this does not seem to indicate any collapse at the maximum peak density, as was previously proposed based only on single-point or spatially limited observations.
- The dust peak is characterized by a depletion in most of our observed molecular species in the gas-phase, except for methanol which has a fairly constant abundance along the density range. We obtained a CO depletion factor $f = f(X_{\text{can}}/X_{12\text{CO}})$ of 4.91 at the densest position.
- While comparing our observations with the Nautilus chemical model, we show that not all regions of the cloud can be reproduced by the same cloud age. Higher density regions seem to be younger by a factor of 10 compared to lower density regions. The measured chemical abundances give an indication of the dynamical evolution of the region. In other

words, the increase of density up to a few 10^4 cm^{-3} may have taken approximately 10^5 yr while the increase to 10^6 cm^{-3} happens over a much shorter time (10^4 yr).

- We observe that the methanol gas-to-ice ratio increases with density, from 0.002% at $2.4 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$ to 0.09% at $2.2 \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$. These values are reasonably well reproduced by our models, although our model shows an overall trend of decrease in the ratio with density.
- Our predicted methanol gas-to-ice ratio depends on both the yield of cosmic-ray sputtering and the cosmic-ray ionization, as the former process is the most efficient in releasing methanol into the gas-phase in our model. The observed slope of the gas-to-ice ratio could be an indication of an increase in efficiency of cosmic-ray sputtering with density, which may result from a change in the ice composition (from water-dominated ices to a mixed composition).
- In our observations, we detected H_2S in the gas-phase. Since this molecule is also formed only at the surface of the grains, its gas-phase abundance should be an indication of non-thermal desorption from the grains. Contrary to CH_3OH , its abundance decreases by several orders of magnitude within our observed range of densities. This result could indicate that the non-thermal desorption process of H_2S is different from that of methanol and that its efficiency decreases with density. Another possible explanation would be that the reservoir of H_2S on the grains decreases with density as it is transformed in other chemical species. This last hypothesis could also explain the non detection of H_2S ices in interstellar environments.

We expect the *James Webb* Space Telescope to provide additional data on the interstellar ice composition thanks to its unprecedented resolution and sensitivity. In particular, JWST will increase in a statistical way our knowledge of the ice composition, probing a larger range of physical conditions. With these data, we would be able to apply our methodology to many other regions and better constrain the non-thermal desorption of molecules formed at the surface of the grains.

Acknowledgements. A.T., V.W., P.G., J.N., E.D., and M.C. acknowledge the CNRS program “Physique et Chimie du Milieu Interstellaire” (PCMI) co-funded by the Centre National d’Etudes Spatiales (CNES). We would like to thank Lars Bonne and Sylvain Bontemps for their help on the dynamical study and for sharing with us *Planck* data of the cloud. D.H. is supported by Center for Informatics and Computation in Astronomy (CICA) grant and grant number 110J035319 from the Ministry of Education of Taiwan. D.H. also acknowledges support from the National Science and Technology Council of Taiwan through grant number 111B3005191.

References

- Arzoumanian, D., Shimajiri, Y., Inutsuka, S.-I., Inoue, T., & Tachihara, K. 2018, *PASJ*, 70, 96
- Bacmann, A., & Faure, A. 2016, *A&A*, 587, A130
- Bacmann, A., Lefloch, B., Ceccarelli, C., et al. 2002, *A&A*, 389, L6
- Bacmann, A., Lefloch, B., Ceccarelli, C., et al. 2003, *ApJ*, 585, L55
- Bertin, M., Romanzin, C., Doronin, M., et al. 2016, *ApJ*, 817, L12
- Bonne, L., Bontemps, S., Schneider, N., et al. 2020, *A&A*, 644, A27
- Boogert, A., Gerakines, P., & Whittet, D. 2015, *Ann. Rev. Astron. Astrophys.*, 53, 541
- Boogert, A. C. A., Huard, T. L., Cook, A. M., et al. 2011, *ApJ*, 729, 92
- Bron, E., Daudon, C., Pety, J., et al. 2018, *A&A*, 610, A12
- Calmonte, U., Altwegg, K., Balsiger, H., et al. 2016, *MNRAS*, 462, S253
- Caselli, P., Vastel, C., Ceccarelli, C., et al. 2008, *A&A*, 492, 703
- Chu, L. E. U., Hodapp, K., & Boogert, A. 2020, *ApJ*, 904, 86
- Crapsi, A., Caselli, P., Walmsley, C. M., et al. 2005, *ApJ*, 619, 379
- Cruz-Díaz, G. A., Martín-Doménech, R., Muñoz Caro, G. M., & Chen, Y.-J. 2016, *A&A*, 592, A68
- Dartois, E. 2005, *Space Sci. Rev.*, 119, 293
- Dartois, E., Demyk, K., d’Hendecourt, L., & Ehrenfreund, P. 1999, *A&A*, 351, 1066
- Dartois, E., Chabot, M., Id Barkach, T., et al. 2018, *A&A*, 618, A173
- Dartois, E., Chabot, M., Barkach, T. I., et al. 2019, *A&A*, 627, A55
- Dartois, E., Chabot, M., Bacmann, A., et al. 2020, *A&A*, 634, A103
- Dartois, E., Chabot, M., Id Barkach, T., et al. 2021, *A&A*, 647, A177
- Drozdovskaya, M. N., Walsh, C., van Dishoeck, E. F., et al. 2016, *MNRAS*, 462, 977
- Dubernet, M.-L., Daniel, F., Grosjean, A., & Lin, C. Y. 2009, *A&A*, 497, 911
- Dulieu, F., Congiu, E., Noble, J., et al. 2013, *Sci. Rep.*, 3, 1338
- Endrik Kruegel 2003, *Phys. Today*, 57, 53
- Evans, N. J., Dunham, M. M., Jørgensen, J. K., et al. 2009, *ApJS*, 181, 321
- Faure, A., Lique, F., & Wiesenfeld, L. 2016, *MNRAS*, 460, 2103
- Frerking, M. A., Langer, W. D., & Wilson, R. W. 1982, *ApJ*, 262, 590
- Fuchs, G. W., Cuppen, H. M., Ioppolo, S., et al. 2009, *A&A*, 505, 629
- Garrod, R. T., Wakelam, V., & Herbst, E. 2007, *A&A*, 467, 1103
- Ginsburg, A., Koch, E., Robitaille, T., et al. 2019, <https://doi.org/10.5281/zenodo.2573901>
- Goto, M., Vasyunin, A. I., Giuliano, B. M., et al. 2021, *A&A*, 651, A53
- Herbst, E., & van Dishoeck, E. F. 2009, *Ann. Rev. Astron. Astrophys.*, 47, 427
- Hocuk, S., Szűcs, L., Caselli, P., et al. 2017, *A&A*, 604, A58
- Ioppolo, S., Cuppen, H. M., & Linnartz, H. 2011, *Rendiconti Lincei*, 22, 211
- Jørgensen, J. K., Belloche, A., & Garrod, R. T. 2020, *ARA&A*, 58, 727
- Kramer, C., Buchbender, C., Xilouris, E. M., et al. 2010, *A&A*, 518, L67
- Lee, C. W., Myers, P. C., & Plume, R. 2004, *ApJS*, 153, 523
- Lique, F., Spielfeldel, A., Dubernet, M.-L., & Feautrier, N. 2005, *J. Chem. Phys.*, 123, 134316
- Lique, F., Spielfeldel, A., & Cernicharo, J. 2006, *A&A*, 451, 1125
- Lique, F., Spielfeldel, A., Feautrier, N., et al. 2010, *J. Chem. Phys.*, 132, 024303
- Lodders, K. 2003, *ApJ*, 591, 1220
- Mangum, J. G., & Shirley, Y. L. 2015, *PASP*, 127, 266
- Marchal, A., Miville-Deschênes, M.-A., Orioux, F., et al. 2019, *A&A*, 626, A101
- Marsh, K. A., Whitworth, A. P., & Lomax, O. 2015, *MNRAS*, 454, 4282
- Minissale, M., Dulieu, F., Cazaux, S., & Hocuk, S. 2016, *A&A*, 585, A24
- Müller, H. S. P., Thorwirth, S., Roth, D. A., & Winnewisser, G. 2001, *A&A*, 370, L49
- Navarro-Almaida, D., Le Gal, R., Fuente, A., et al. 2020, *A&A*, 637, A39
- Öberg, K. I., Fuchs, G. W., Awad, Z., et al. 2007, *ApJ*, 662, L23
- Padovani, M., Bialy, S., Galli, D., et al. 2022, *A&A*, 658, A189
- Perotti, G., Rocha, W. R. M., Jørgensen, J. K., et al. 2020, *A&A*, 643, A48
- Pickett, H. M., Poynter, R. L., Cohen, E. A., et al. 1998, *J. Quant. Spectr. Rad. Transf.*, 60, 883
- Planck Collaboration I. 2020, *A&A*, 641, A1
- Planck Collaboration III. 2020, *A&A*, 641, A3
- Pontoppidan, K. M., Fraser, H. J., & Dartois, E. et al. 2003, *A&A*, 408, 981
- Pontoppidan, K. M., Dishoeck, E. F. v., & Dartois, E. 2004, *A&A*, 426, 925
- Qasim, D., Chuang, K.-J., Fedoseev, G., et al. 2018, *A&A*, 612, A83
- Rabli, D., & Flower, D. R. 2010, *MNRAS*, 406, 95
- Redaelli, E., Bizzocchi, L., Caselli, P., et al. 2018, *A&A*, 617, A7
- Ruaud, M., Wakelam, V., & Hersant, F. 2016, *MNRAS*, 459, 3756
- Sadavoy, S. I., Keto, E., Bourke, T. L., et al. 2018, *ApJ*, 852, 102
- Schöier, F. L., van der Tak, F. F. S., van Dishoeck, E. F., & Black, J. H. 2005, *A&A*, 432, 369
- Shimonishi, T., Dartois, E., Onaka, T., & Boulanger, F. 2016, *A&A*, 585, A107
- Siebenmorgen, R., & Efstathiou, A. 2001, *ApJ*, 376, L35
- Smith, R. G. 1991, *MNRAS*, 249, 172
- Spezzano, S., Caselli, P., Pineda, J. E., et al. 2020, *A&A*, 643, A60
- Stutz, A. M., Bourke, T. L., Rieke, G. H., et al. 2009, *ApJ*, 690, L35
- van der Tak, F. F. S., Black, J. H., Schöier, F. L., Jansen, D. J., & van Dishoeck, E. F. 2007, *A&A*, 468, 627
- Vidal, T. H. G., Loison, J.-C., Jaziri, A. Y., et al. 2017, *MNRAS*, 469, 435
- Wakelam, V., Herbst, E., & Selsis, F. 2006, *A&A*, 451, 551
- Wakelam, V., Loison, J. C., Herbst, E., et al. 2015, *ApJS*, 217, 20
- Wakelam, V., Loison, J.-C., Mereau, R., & Ruaud, M. 2017, *Mol. Astrophys.*, 6, 22
- Wakelam, V., Ruaud, M., Gratier, P., & Bonnell, I. A. 2019, *MNRAS*, 486, 4198
- Wakelam, V., Dartois, E., Chabot, M., et al. 2021a, *A&A*, 652, A63
- Wakelam, V., Gratier, P., Ruaud, M., et al. 2021b, *A&A*, 647, A172
- Wilson, T. L. 1999, *Rep. Prog. Phys.*, 62, 143
- Wirström, E. S., Charnley, S. B., Cordiner, M. A., & Ceccarelli, C. 2016, *ApJ*, 830, 102
- Yang, B., Stancil, P. C., Balakrishnan, N., & Forrey, R. C. 2010, *ApJ*, 718, 1062

Appendix A: Computation of the N_{H_2} density

We computed the H_2 column density from the dust opacity map τ_{350} obtained from the *Herschel* data at the frequency of $\nu = 350$ GHz (Sadavoy et al. 2018):

$$N_{\text{H}_2} = \frac{\Sigma_{\text{gas}}}{m_{\text{H}_2}}, \quad (\text{A.1})$$

where Σ_{gas} is the surface density of gas (in unit g cm^{-2}) and m_{H_2} the mass of molecular hydrogen (3.34×10^{-24} g). The surface density of gas can be computed by:

$$\Sigma_{\text{gas}} = \text{dtg} \times \Sigma_{\text{dust}}, \quad (\text{A.2})$$

where dtg is the dust to gas mass ratio (100 in our case) and Σ_{dust} the surface density of dust. Σ_{dust} can be computed from the dust

opacity:

$$\Sigma_{\text{dust}} = \frac{\tau_{350}}{\kappa_{350}} \text{ with } \kappa_{350} = 0.4 \times \left(\frac{\nu}{250\text{GHz}}\right)^2 = 0.8 \text{ cm}^2 \text{ g}^{-1}$$

(Endrik Kruegel 2003; Siebenmorgen & Efstathiou 2001; Kramer et al. 2010).

Appendix B: Integrated intensity maps

The integrated intensity maps of each molecule were obtained by integrating the peak of emission across different velocity channels for each of them. It contains both red-shifted and blue-shifted peaks for all. A 3σ noise cut has been applied. The contour levels account for 90%, 70%, and 50% of the emission peak value. The obtained maps are shown in Fig. B.1. The maps shown in the figure contains a sample of molecules with only the brightest transition when multiple ones were detected.

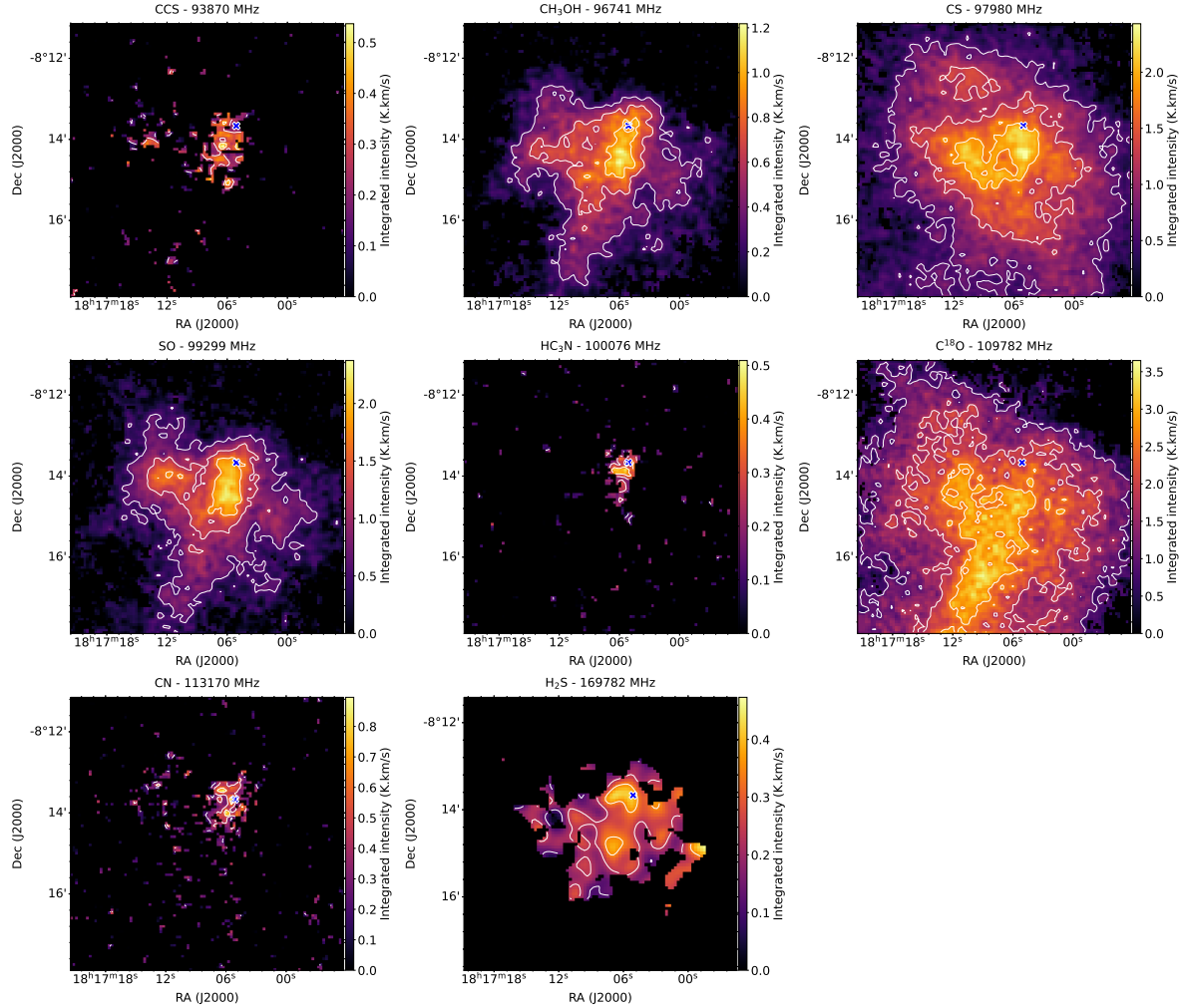


Fig. B.1: Integrated intensity map for each detected molecule (brightest transition is shown when more than one was detected).

Appendix C: Channel velocity maps

In Figs. C.1 to C.4, we show the velocity channel maps for $C^{18}O$, SO, CS, and CH_3OH (at 96741 MHz).

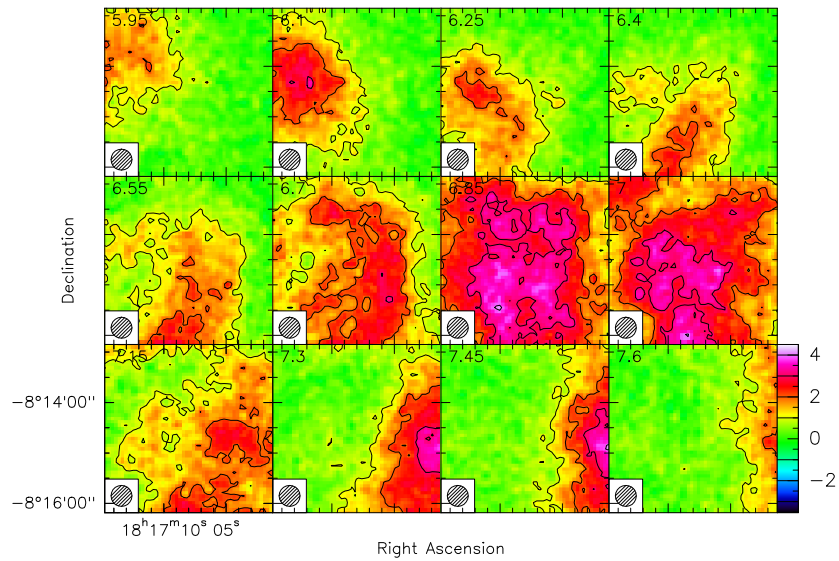


Fig. C.1: $C^{18}O$ (109782 MHz) velocity channel map. The telescope beam is indicated on the lower side of each panel. Contours show 25, 50, and 75% of the intensity (outer to inner contours). Color coding is in K.

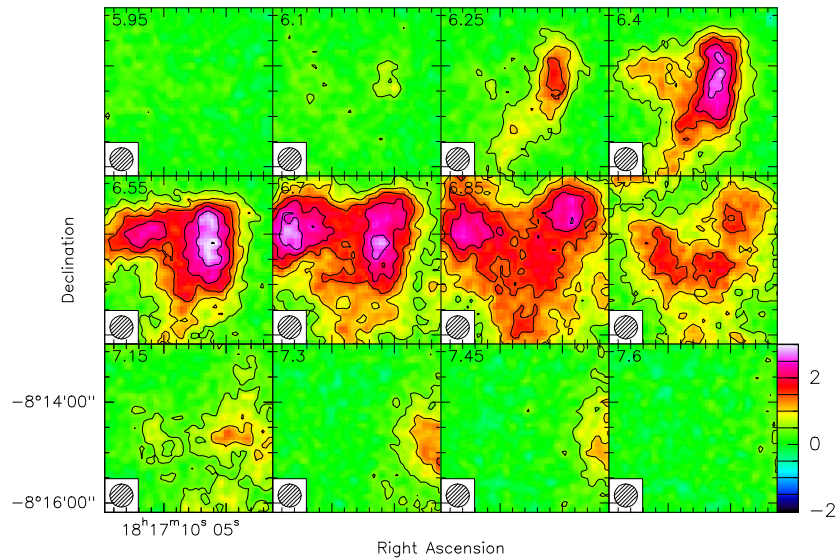


Fig. C.2: SO (99299 MHz) velocity channel map. The telescope beam is indicated on the lower side of each panel. Contours show 25, 50, and 75% of the intensity (outer to inner contours). Color coding is in K.

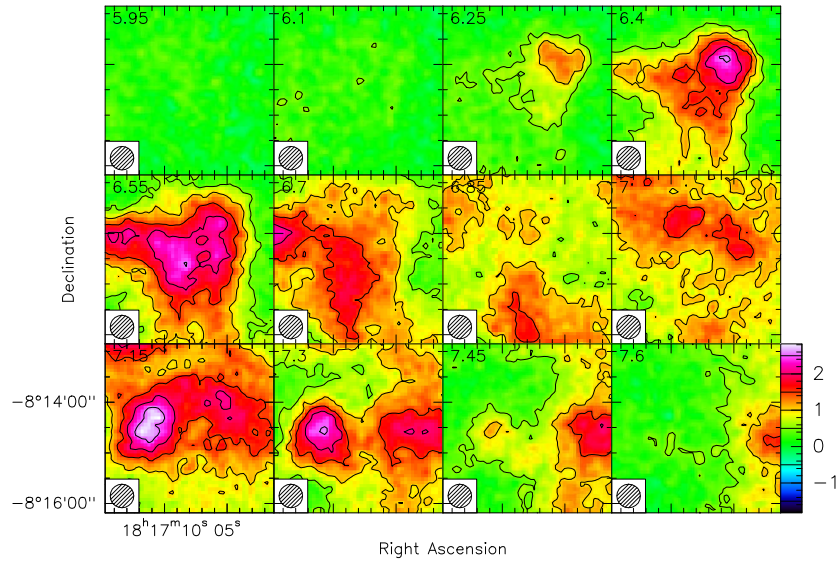


Fig. C.3: CS (97980 MHz) velocity channel map. The telescope beam is indicated on the lower side of each panel. Contours show 25, 50, and 75% of the intensity (outer to inner contours). Color coding is in K.

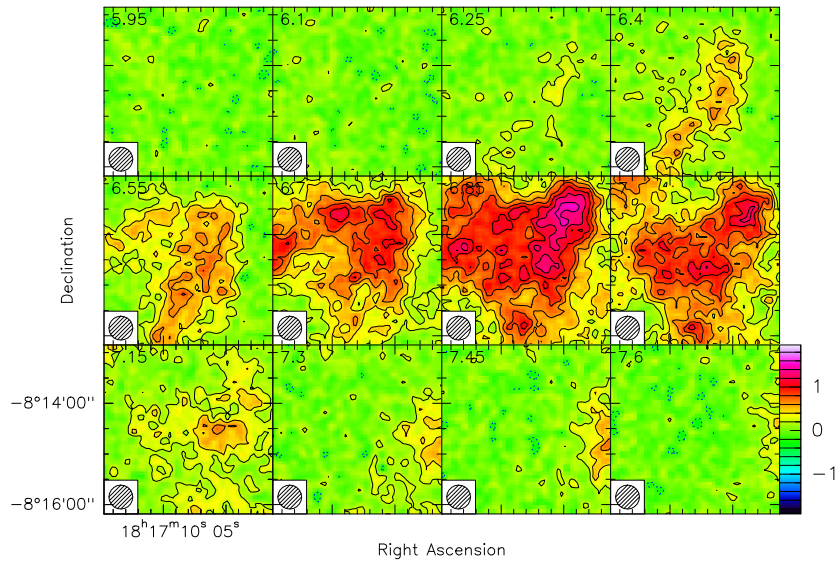


Fig. C.4: CH₃OH (96741 MHz) velocity channel map. The telescope beam is indicated on the lower side of each panel. Contours show 25, 50, and 75% of the intensity (outer to inner contours). Color coding is in K.

Appendix D: Position-velocity (PV) diagram

The PV diagram was obtained by integrating the velocity components through the two vertical and horizontal axis. Here, C¹⁸O shows multiple component on the horizontal axis of integration and a simple gradient in the vertical axis. None of the PV diagrams shows the expected "V" shape found by [Planck Collaboration I \(2020\)](#).

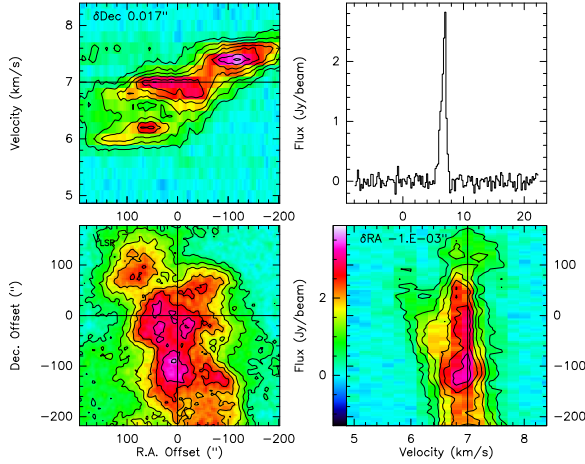


Fig. D.1: PV diagram of C¹⁸O. Bottom-left: Integrated intensity of C¹⁸O. Top-left: PV diagram obtained by integrating the velocity along the horizontal axis. Bottom-right: PV diagram obtained by integrating the velocity along the vertical axis. Top right: Spectra associated with the crossing of the two axes.

Appendix E: Upper limits on the column densities for non-detected molecules

To obtain upper limits on the abundance of non detected molecules, we first computed the upper limits, W_{upp} , of the integrated intensities :

$$W_{\text{upp}} < 1.064 \times 3 \times \text{rms} \times \text{dv},$$

where the rms (in K) is the noise level at the dust maximum position. The values are around 0.06 to ~ 0.2 K depending on the molecule. We assumed a line width FWHM (dv) of 1 km s^{-1} . The partition functions, provided by CDMS and JPL, are interpolated for the temperature of the cloud (10 K). For each species, we computed the upper limit of the column density following [Mangum & Shirley \(2015\)](#) and including the cosmological background radiation temperature :

$$N_i = 8\pi k \times Q_i \times f_i^2 \times W_{\text{upp}} \times 10^5 \times \frac{e^{-\frac{E_{\text{up},i}}{T}}}{g_{\text{up},i} \times h \times c^3 \times A_{\text{ul},i}},$$

where Q_i is the partition function of species i , k is the Boltzmann constant, f_i is the frequency of the transition (MHz), E_{up} is the upper energy state of the transition, $g_{\text{up},i}$ is the upper state degeneracy, T is the temperature of the cloud, h is the Planck constant, c is the speed of light, and $A_{\text{ul},i}$ is the Einstein coefficient of the transition. The obtained upper limits are 2×10^{16} , 2×10^{13} , and $2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ for c-C₃H₂ (95206.01 MHz), OCS (97301.20 MHz), and HNCO (109905.60 MHz), respectively.

Converted into abundances with the H₂ column density at the continuum peak, it gives 2.8×10^{-7} , 2.8×10^{-10} , and 2.8×10^{-10} , respectively.

Appendix F: Observed physical parameters

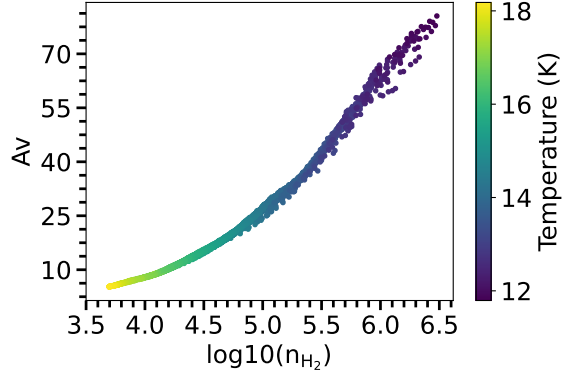


Fig. F.1: A_v as a function of n_{H_2} (cm^{-3}) and temperature (K) observed in L429-C. All these parameters have been computed from the *Herschel* observations (see text).

In this section, we compare the different physical parameters observed in L429-C. Figure F.1 shows the visual extinction as a function of n_{H_2} (cm^{-3}) and temperature (K) observed in L429-C. The visual extinctions range from less than 10 to more than 80, the H₂ density from 5×10^3 to $3 \times 10^6 \text{ cm}^{-3}$, and the temperature from approximately 12 up to 18 K.

Appendix G: Goodness of fit for SO, CCS, HC₃N, and CN

Figure G.1 shows the ratio between the modeled and observed gas-phase abundances of SO, CCS, HC₃N, and CN as a function of the density for the best times of the four sets of models (see Section 6.4 and Table 2) .

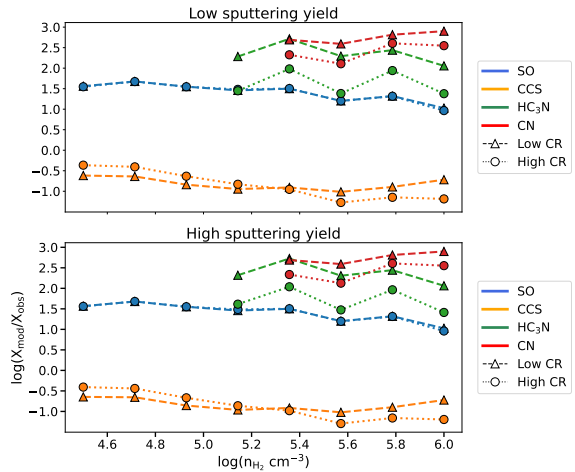


Fig. G.1: Ratio between the modeled (X_{mod}) and observed gas-phase abundances (X_{obs}) of SO, CCS, HC₃N, and CN as a function of the density for the best times of the four sets of models.

Appendix H: Best time determination for each Av

The best time is determined by the lowest distance of disagreement, d , defined in Section 6.3. Each figure represents the results

of one set of models. We can see that the higher the density, the lower the time. The eight best times are illustrated in Fig. 8.

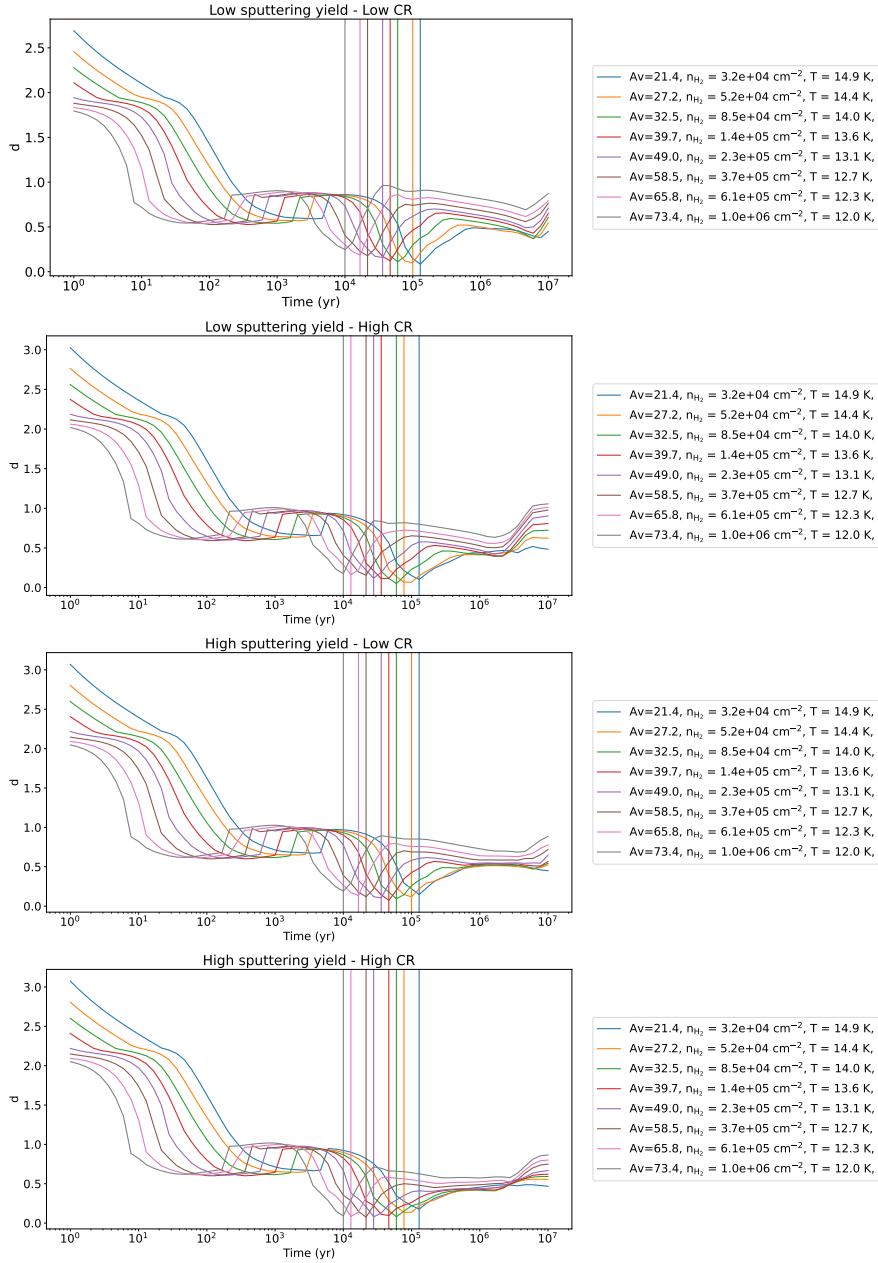


Fig. H.1: Distance of disagreement d for all eight models as a function of time. Each figure represents the result of a set of model as defined in Table 2. The legend gives each physical parameters associated for the model shown. Each vertical line represents the lowest disagreement distance associated with each grid of parameters.

8 | Appendix - Données spectrales pour SynthIceSpec

Molécule	Longueur d'onde (cm ⁻¹)	Largeur (cm ⁻¹)	Force de bande (cm)	Référence
H ₂ O	3239.8	222.9	1.2E-16	Öberg et al. (2007)
H ₂ O	3398.6	207.9	6.9E-17	Ajustement à la main
H ₂ O	3408.4	355.3	2.4E-17	Ajustement à la main
H ₂ O	3667.0	20.9	3.3E-19	Ajustement à la main
H ₂ O	3688.0	23.5	3.3E-19	Ajustement à la main
H ₂ O	1660.0	160.0	1.0E-17	Ajustement à la main
H ₂ O	760.0	240.0	3.0E-17	Öberg et al. (2007)
CO	2140.0	5.0	1.1E-17	Gerakines et al. (1995)
CO ₂	2343.0	18.0	7.6E-17	Gerakines et al. (1995)
CO ₂	660.0	18.0	1.2E-17	Gerakines et al. (1995)
CH ₄	3010.0	7.0	7.0E-18	Gerakines et al. (1995)
CH ₄	1302.0	8.0	7.0E-18	Gerakines et al. (1995)
CH ₃ OH	3250.0	235.0	1.1E-16	Carrascosa et al. (2023)
CH ₃ OH	2982.0	100.0	2.1E-17	Carrascosa et al. (2023)
CH ₃ OH	2828.0	30.0	8.0E-18	Carrascosa et al. (2023)
CH ₃ OH	1460.0	90.0	1.0E-17	Carrascosa et al. (2023)
CH ₃ OH	1130.0	34.0	1.4E-18	Carrascosa et al. (2023)
CH ₃ OH	1030.0	29.0	1.4E-17	Carrascosa et al. (2023)
CH ₃ OH	700.0	200.0	1.6E-17	Carrascosa et al. (2023)
NH ₃	3375.0	45.0	2.3E-17	Noble et al. (2013)
NH ₃	1630.0	60.0	5.0E-18	Noble et al. (2013)
NH ₃	1070.0	70.0	1.7E-17	Noble et al. (2013)
HCOOH	1714.0	45.0	6.7E-17	Bouilloud et al. (2015)
HCOOH	1650.0	69.0	6.7E-17	Bouilloud et al. (2015)
HCOOH	1387.0	37.0	3.6E-17	Bouilloud et al. (2015)
HCOOH	1211.0	64.0	2.8E-18	Bouilloud et al. (2015)

TABLE 9 – Table des paramètres spectroscopiques utilisés dans SynthIceSpec

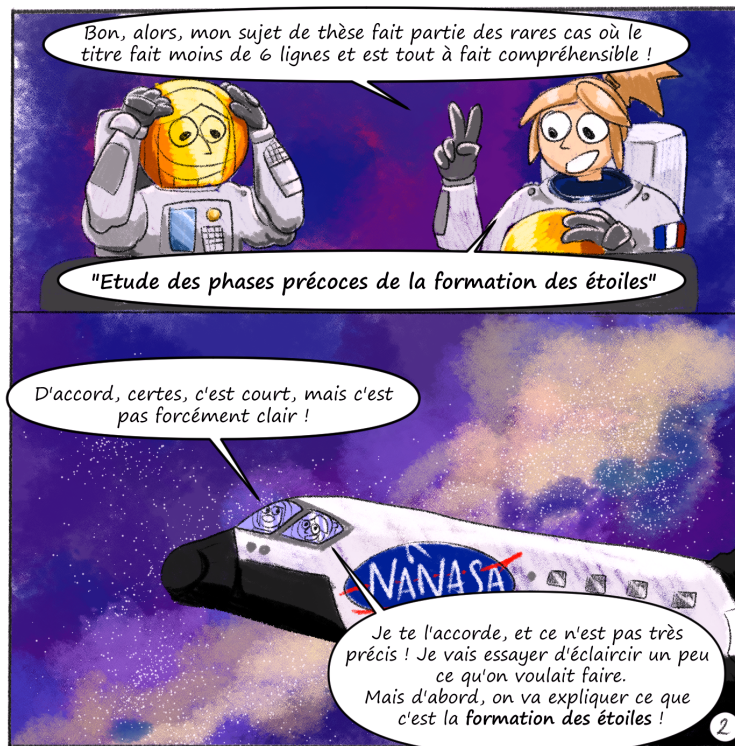
Molécule	Longueur d'onde (cm ⁻¹)	Largeur (cm ⁻¹)	Force de bande (cm)	Référence
HNCO	2240.0	56.0	7.8E-17	Fedoseev et al. (2016)
HCN	2092.5	20.0	1.12E-17	Gerakines et al. (2022)
H ₂ CO	1494.0	15.0	1.0E-18	Bouilloud et al. (2015)
H ₂ CO	1720.0	20.0	9.6E-18	Bouilloud et al. (2015)
H ₂ CO	2819.0	28.0	3.7E-18	Bouilloud et al. (2015)
H ₂ CO	2881.0	21.0	2.7E-18	Bouilloud et al. (2015)
H ₂ CO	2992.0	17.0	1.2E-18	Bouilloud et al. (2015)
NH ₂ CH ₂ OH	1610.0	45.0	4.6E-18	Bossa et al. (2009)
NH ₂ CH ₂ OH	1470.0	40.0	7.0E-18	Bossa et al. (2009)
NH ₂ CH ₂ OH	1390.0	15.0	2.5E-18	Bossa et al. (2009)
NH ₂ CH ₂ OH	1007.0	145.0	3.5E-17	Bossa et al. (2009)
HDO	2457.0	120.7	4.3E-17	Aikawa et al. (2012)
¹³ CO	2092.0	1.5	1.1E-17	Boogert et al. (2002)
CH ₃ CHO	1715.0	5.8	1.3E-17	Schutte et al. (1999)
CH ₃ CHO	1350.0	7.4	1.5E-17	Schutte et al. (1999)
H ₂ S	2545.0	45.0	3.0E-17	Jiménez-Escobar & Muñoz Caro (2011)
OCS	514.0	18.2	1.8E-18	Hudgins et al. (1993)
OCS	2025.0	22.5	1.5E-16	Hudgins et al. (1993)
SO ₂	1339.0	9.8	1.47E-17	Garozzo et al. (2008)
SO ₂	1149.0	8.7	2.2E-18	Garozzo et al. (2008)
SO	1130.0	4.3	2.2E-18	Garozzo et al. (2008)
OCN ⁻	2175.0	20.0	1.3E-16	McClure et al. (2023)
NH ₄ ⁺	1459.0	64.0	4.4E-17	Schutte & Khanna (2003)
CH ₃ CN	2252.0	1.0	1.9E-18	McClure et al. (2023)
HCOO ⁻	1580.0	6.3	1.0E-16	Schutte et al. (1999)
HCOO ⁻	1380.0	7.3	8.0E-18	Schutte et al. (1999)
HCOO ⁻	1350.0	7.4	1.7E-18	Schutte et al. (1999)
HCONH ₂	1690.0	5.9	3.3E-17	Schutte et al. (1999)
HCONH ₂	1385.0	7.2	3.2E-17	Schutte et al. (1999)

TABLE 10 – Suite.

9 | Appendix - Ma thèse illustrée dans “Lune et l’autre”

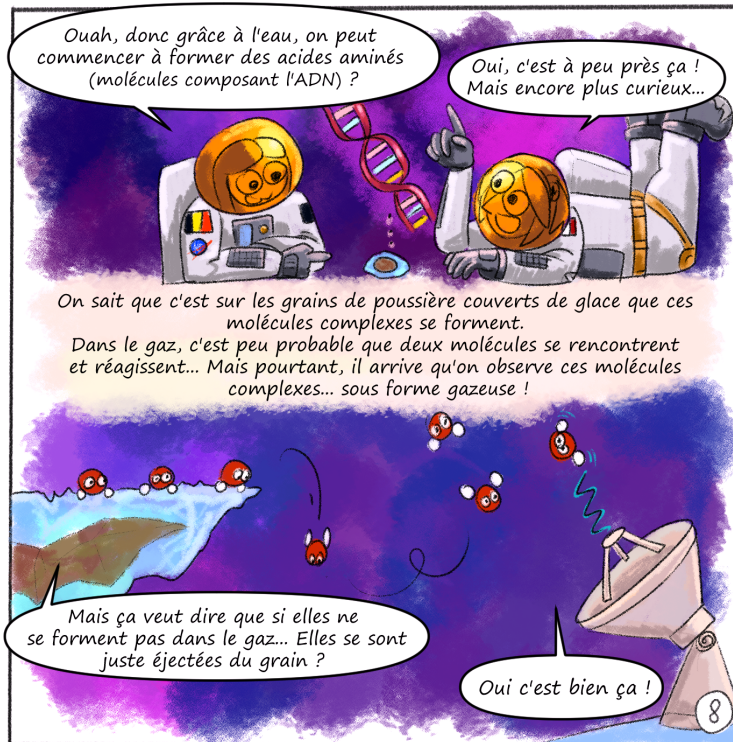
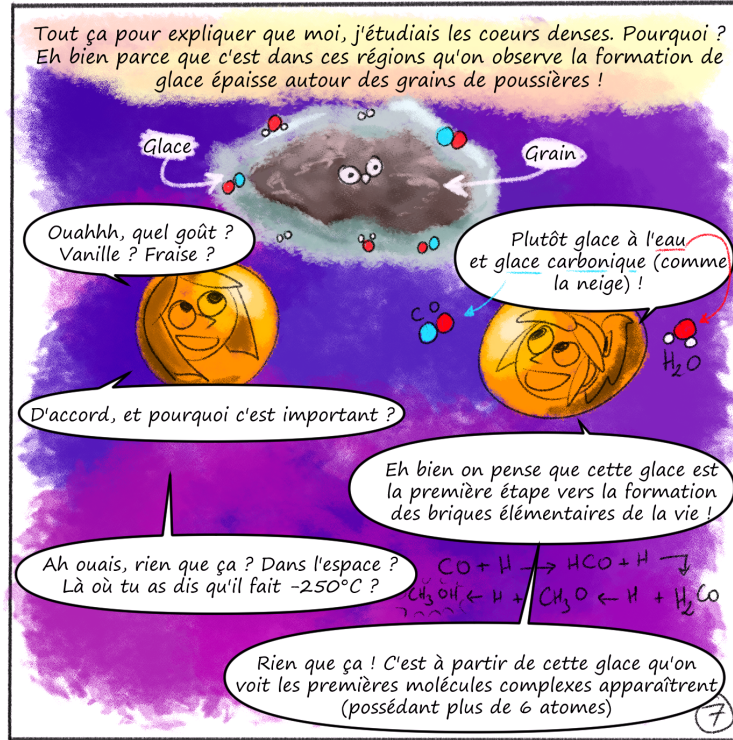
Durant la thèse, Sarah Joiret et moi-même avons décidé d’unir nos forces pour créer une bande-dessinée de vulgarisation scientifique sur le thème général de l’astronomie. D’abord en expliquant quelques actualités, puis en contant également notre recherche et la vie de doctorant. Ce projet s’appelle “Lune et l’autre” et peut être trouvé sur Instagram (seulement, pour le moment) à @lune_et_l_autre. Sarah est à l’écriture et moi au dessin (les illustrations présentes dans ce manuscrit ont été réalisé par mes soins). C’est un projet qui me tient beaucoup à cœur puisque cela me permet d’exprimer deux de mes passions, le dessin et l’astronomie.

Les planches suivantes ont été réalisées pour illustrer mon sujet de thèse et n’ont pas vocation d’aller dans les détails, seulement de faire comprendre au plus grand nombre.











10 | Memorandum (English)

10.1 Chapter I - Introduction

The thesis is a preparatory work to the *James Webb Space Telescope* (JWST) data that are just now being publicly released. Before this telescope was put into orbit, very few observations of interstellar ices were done and the study of the solid phase was limited to a couple of line-of-sight in a few sources. With the JWST launched, a new chapter of astrochemistry is being written.

The introduction chapter starts with star formation, which is presented extensively, from molecular clouds, to cold cores, to proto-stars and finally stellar systems. It introduces the concept of interstellar medium and explains how molecules get more complex by each step of the star formation. It also presents dust and ices, how they form and interact with the interstellar medium. More importantly, ices are presented to be formed at certain conditions in the interstellar medium and how reservoirs in the ices allow the formation of more complex molecules at the surface of the grains. It then presents shortly how each phase (gas and ice) is observed and with which method.

The thesis presented here covers the following problematic : during the star formation, certain molecules are only formed at the surface of the grains, yet are being observed in the gas-phase. In cold cores, the temperature is so low that thermal desorption is not possible, but some mechanisms at play still allow the solid molecules to be released in the gas. These phenomenon are called non-thermal desorption mechanisms, with the four most efficient being chemical desorption, photodesorption, cosmic-ray (CR) sputtering and cosmic-ray ionisation, which are described in details in the introduction.

An extensive state-of-the-art lists the history of interstellar molecule observations, concepts introduced with astrochemistry (such as grain-driven chemistry and complex organic molecules in the interstellar medium). Methanol (CH_3OH) is then studied in details, from its formation following hydrogenation of CO and other less efficient ways of forming it, to the up-to-date data we have for its desorption mechanisms.

The problematic is presented : studying the efficiency of these mechanisms by using infrared data and interferometry, understanding the interface between ice and gas, and more precisely the methanol molecule.

The thesis is divided in six chapters. The first chapter is an introduction to astrochemistry with a the state of the art. The second chapter describes the methodology used, from observations techniques to chemical models, covering radiative transfer and physical parameters calculation. The third chapter covers the content of [Taillard et al. \(2023\)](#), with a study of the cold core L429-C. The fourth chapter covers the study of the infalling cold core L694 and its chemistry. The fifth chapter is the description of a tool developed during the thesis, allowing to create synthetic ice spectra that are expected from the James Webb Space Telescope. Finally, the sixth chapter are the conclusions and perspectives of this work.

10.2 Chapter II - Methodology

This chapter described the different methods used during the thesis. It first describes the observational methods used to observe gas and ices (radio and infrared astronomy) and the associated

telescopes used to study the non-thermal desorption (*Spitzer*, *JWST*, IRAM 30m, NOEMA). It is then followed by an entire section describing in details radiative transfer, going through the fundamental principles, Einstein coefficient, column densities, non-ETL critical density, excitation temperature, solving the radiative transfer equation (ETL and non-ETL), escape probabilities and presenting the RADEX program ([van der Tak et al. 2007](#)). Radiative transfer was used in order to determine the column densities and abundances of observed molecules in the gas-phase. In parallel, it is necessary to derive the physical parameters associated to the radiative transfer :

1. Integrated intensity and FWHM were obtained directly from the data cube of the gas-phase observation, made with the IRAM 30m telescope
2. The temperature, both in grain and gas, is based on *Herschel* data
3. The volumic density and column density of H₂ was done using a modified blackbody model, and then using [Bron et al. \(2018\)](#) method
4. The visual extinction was derived from the H₂ column density maps

This allow to solve the radiative transfer equation.

Then in an extensive description, Nautilus gas-grain model ([Ruaud et al. 2016](#)) is presented. This is the astrochemical model used during the thesis to compare with observations. The description covers in details the basic fundamentals of the code, and then describe one by one how the model treats each thermal and non-thermal desorption mechanisms, listing both the studies it is based on and the equations used in the code. It also presents the physical parameters used in the models, their impact on the chemistry and how the code is used to compare with observations.

10.3 Chapter III – L429-C

This chapter covers the content of the published article [Taillard et al. \(2023\)](#). This is the study of the cold core L429-C which was the first ever core where methanol ices has been observed, with *Spitzer*.

First, it describes the source itself, found in the literature, then it goes through the observations made with the IRAM 30m telescope to study the gas-phase. This is followed by a study of the kinematic of the core and shows the gas-phase abundances behavior, and how CH₃OH is the only molecule not showing depletion. Then an extensive study of the non-thermal desorption of methanol is described, comparing the observations of ice and gas with models, showing that the ratio of ice-over-gas is increasing with density, whereas for models, it is the opposite trend. This shows that the models do not cover sufficiently enough the possible change in ice composition that happen during the so-called “catastrophic CO freeze-out”. The study showed that the most efficient non-thermal mechanism in the model was the cosmic-ray sputtering. With only four positions observed for solid-phase, it is still difficult to say if the trend is real or not, and data from the JWST would be necessary to study thoroughly the non-thermal mechanisms.

10.4 Chapter IV – L694

This chapter covers the content of [Taillard et al. \(in prep\)](#), studying the infalling cold core L694. In this chapter, a similar study of L429-C is conducted : the source and observations are presented, with the gas-phase abundance maps obtained in the source, showing that this time, all molecules present a depletion profile. It is followed by a short study of the kinematics and then a comparison

between models and observations. This core only had one ice observation prior to *JWST* data (not presented in the manuscript) and is therefore shorter to analyze. The chemical models however show similar behavior to L429-C's and the efficiency of the non-thermal desorption mechanisms do decrease with density.

10.5 Chapter V - SynthIceSpec

In this chapter, a tool developed during the PhD is presented. This tool allows to create synthetic ice spectra that reproduced *JWST* observations. The *JWST* is first presented and described in order to understand how the tool works, with the principles of background star observations. Then the tool is described; by using a Gaussian approximation on ice bands identified through laboratory data, an ice spectrum is produced, then a stellar spectrum and its extinction are applied to the ices, adjusted to the instruments resolution. The output is then compared to actual *JWST* data obtained through the IceAge consortium. An example is taken to explain how the tool could be used to predict the dangling-OH bond of the H₂O molecule, since it is of a big interest in astrochemistry. It is then studied how mixing could affect the spectra and how rare features could be difficult to detect based on the ice nature. It is discussed how spectrum inversion is seemingly too hard and unrealistic, but shows that SynthIceSpec can still be used for proposal and prediction purposes.

10.6 Chapter VI – Conclusions and Perspectives

This chapter is the summary of the different conclusions to each chapter, covering the main results and providing leads to explore further the problematic, since now the *JWST* data is available. The main questions are answered and shows that there are still a lot of adjustments in models to reproduce observations, with an emphasis on how this changes could change the chemistry drastically and how urgent they are to compare them with the incredible amount of data coming. The main conclusions are listed for each source.

10.6.1 L429-C

The source was observed with both NOEMA and the IRAM 30m telescope. It allowed us to detect 11 molecules in 300" x 300" maps. Using the method described to obtain abundances, we studied the effect of physical parameters on the molecular behavior in the cloud. We then compared the observations to Nautilus models, computing the ice-to-gas ratio from *Spitzer* observations and our radio-observations.

1. NOEMA short-spacing did not show any signal, implying that there is no emission smaller than a $\sim 30''$ scale. It also shows that a proto-star has not yet formed and that the core is not in an infalling state.
2. We studied the kinematics of the cloud and showed that the spectra are complex, with up to three different velocity components. We could not determine the origin of these components, as it could be from turbulences, rotation or from the results of a cloud-cloud collision. We however make the hypothesis that it could simply be different part of the cloud overlapping in the line-of-sight, and that considering the small velocity variation between each components, they are part of the same cloud and can be used to determine the gas-phase abundance.

3. Depletion of gas-phase molecule is maximum at the dust continuum peak for all molecules, except for methanol. The CO depletion factor $f = f(X_{can}/X_{12CO}) = 4.91$ at the highest density, with X_{can} being the CO canonical abundance and X_{12CO} our gas-phase abundance.
4. Methanol observations allowed us to compute a gas-to-ice ratio increasing with density, from 0.002% at $2.4 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$ to 0.09% at $2.2 \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$. These values are reasonably well reproduced in our model. However, the models show an opposite trend, with the ratio decreasing with density.
5. The methanol gas-to-ice ratio in the models depends on two parameters : the CR sputtering and the CR ionisation yields, with these two mechanisms being the most efficient in our model (Wakelam et al. 2021a). The trend found in the ratio could then hint at an increasing efficiency of CR sputtering with density, possibly caused by the change of ice composition (from water dominated ices to mixed ices).
6. H_2S in the gas-phase is detected, which is a molecule of interest since it is also formed only at the grain surface and should be a tracer of the non-thermal desorption mechanisms. Contrary to methanol, H_2S abundance decreases by a few orders of magnitude with density increasing. This seems to hint that the desorption process is different than methanol, it being less efficient at higher densities. Another possibility is that H_2S reservoir is transformed into other molecules, perhaps explaining why it has not been solidly detected yet in interstellar ices (McClure et al. 2023).

10.6.2 L694

The source was observed with the IRAM 30m telescope. It allowed us to detect 10 molecules in $300'' \times 300''$ maps, in prediction of *JWST* observations that have been conducted in September 2022. Similarly to L429-C, we studied the gas-phase abundance, focusing on methanol and CO and its isotopologues. All species in this core present depletion profiles on the dust continuum peak, including methanol. We compare these abundances to Nautilus model outputs, including the ice abundance obtained from Chu et al. (2020) with one position where methanol ices were observed (using Keck and *Spitzer*).

1. All molecules detected in these observations present simple velocity structure, with single peak, except for CS (2-1) with two components. It confirms previous observations of the core, showing that it might be in an infalling state (Tafalla et al. 1998; Lee et al. 2004). We also find out that N_2H^+ emission is the strongest where C^{18}O spectra gets wider, on the dust continuum peak region, just like it was observed in other infalling cores (Keto et al. 2015).
2. All the molecules show depletion profiles on the dust continuum peak, showing that this source is more dynamically and chemically more involved than L429-C. We get a CO depletion factor of $f = f(X_{can}/X_{12CO}) = 4.47$ at the highest density.
3. Comparing our observations with our model outputs, we were able to show that the evolutionary time needed to reproduce the observations decreases with density. Abundances are reproduced within a factor 10 at worst, showing good agreements between our predictions and the observations.
4. With only one methanol ice observation, we computed a gas-to-ice ratio of 0.0054% at $4.3 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$. With only one measure, it is not possible to confirm the trend observed in L429-

- C. Our models however reproduce this value by a factor 2 at best (rich-H₂O ice with low CR ionisation yield).
5. Our modeled methanol gas-to-ice ratio have the same trend as seen in L429-C.
 6. The evolutionary time computed with the models are almost identical to the ones estimated in L429-C. The physical parameters used in the models are very similar, with CO (and methanol) abundances really close at high densities, within a factor 3. This shows that Nautilus predictions are within the observational uncertainties but that the model is not able to completely differentiate the two cores.

10.6.3 Comparing both cores

L429-C and L694 seem to at quite different evolutionary time, with the second one being seemingly in the infalling phase, which should be impacting their chemistry. We were expecting clear difference between the two, with our models predicting two different chemistry. However, the predictions ; both time-wise and abundance-wise, are very similar. We show that the physical parameters of the two clouds are very close, evolving on similar densities, but with an A_v twice bigger in L429-C. However, it should not impact the chemistry as the A_v is > 5 in both regions (which a lower A_v would then present an UV irradiation in the cores). Temperature are also both < 12 K at the core positions, which is a big hint that the chemistry will not be driven by diffusion of CO and O atom, but rather H₂O ices, but with a rich CO-chemistry as both cores undergo the catastrophic CO freeze-out. The main difference we see is that methanol is not depleting in L429-C, yet, at higher densities, the gas-phase abundances are very close, within a factor 3. CO abundance is also globally the same within a factor 3 as well. This factor 3 is important since it is within the observations and models uncertainties. Additionally, CO is the main time constrain in our model, so it would be expected to get similar evolutionary time in both core, since they present similar physical parameters and CO abundance at higher densities. Nautilus shows a lack of precision in its prediction, but it is still predicting well within uncertainties.

10.7 Perspectives

With the *JWST* incoming data, it is now expected to obtain as precise and extensive studies as the gas-phase ones we showed in this work. It will now be more then ever possible to constrain the solid-phase chemistry. We expect strong differences between *JWST* observations and our model predictions, which are necessary in order to improve our models more than ever. I present here the perspective from an observational point of view and a modeling point of view.

10.7.1 JWST observations and analysis

During this thesis, I was allowed to participate to the analysis of Cycle I data, with 3 proposals submitted at the Cycle II called. Only one of them was accepted, which is highly appreciated since the pression factor is so high. The proposal is called “iCe astrocHemistry at the EdgE of a staR-formIng clOud (CHEERIO) : Cham - I ”. This extensive name is quite explicit, we aim at using NIRC*am* WFSS mode to cover two regions in Cham-I cloud edge. This represents more than 600 background objects observations, with more than a hundred in a photo-dissociation region. It will focus on H₂O, CO, CO₂ and CH₃OH. The goal is to constrain chemistry at $A_v < 2$, in order to determine the

ice formation threshold. SED from background observations without ices will be extracted in order to prepare, analyse and subtract SEDs from future ice observations. Additionally, this could be coupled to gas-phase observations of the regions, using ALMA in the lower resolution setting (ACA).

In parallel, we will re-submit our L429-C proposal for the cycle III. This study would be then perfect to constrain the gas/ice interface and extensively study the non-thermal desorption mechanisms.

10.7.2 Nautilus - Future contributions

Nautilus has proven, like the other astrochemical models, having multiple and strong limitations. Its predicting power is big but could get even better with new implementations. Models can be improved drastically with advances in the two other astrochemical domains (observations and laboratory work) and with the upcoming *JWST* observations, there is no doubt that this will change a lot of things in our models. Laboratory experiments already showed that a few parameters and paradigms can be changed in Nautilus, and I have identified a few :

1. **Binding energies (BE)** : BE are extremely important in chemistry, as they change completely the molecular behavior in different environments. It characterised how easily a molecule can desorb/adsorb from a given surface, which affects the non-thermal desorption mechanisms yields. [Noble et al. \(2012\)](#) has showed that it is not realistic to consider BE as a single value (as it is the case in Nautilus right now), but as a distribution of energy. [Penteado et al. \(2017\)](#) has proved that even for the simplest molecule, H₂, the energy distribution impacts strongly the surface chemistry. It is then important to consider implementing BE in the code.
2. **CR interactions** : Recent laboratory experiments ([Dartois et al. 2020](#)) have shown that CR desorption is the most efficient non-thermal mechanism in ices. We implemented the CR interaction in Nautilus, allowing us to get better predictions in cold cores. However, the author showed that the yield is changing with the ice mantle composition, increasing by more than a factor 6 the methanol desorption efficiency in a pure CO₂ ice. Better prescription based on the surface nature would then make a more realistic approach, that could explain partly how we could not reproduce observed gas-to-ice ratio trend in our two cores.
3. **Energy dissipation** : Some mechanisms in the model are producing extra energy. This energy can impact the chemistry when it is dissipated in the grain, by thermalisation, or even lead to ice restructuration. However, it is not taken into account in Nautilus. [Fredon et al. \(2017\)](#) has shown that using Molecular Dynamics, exothermicity could be transformed into kinetic energy, allowing non-thermal diffusion and inducing chemical reactions. They have derived a formula that could be implemented in Nautilus.
4. **Ice composition** : We have showed in our two cold core studies that ice composition is leading to different non-thermal desorption regime. However, in Nautilus, only two options can be taken as CR sputtering yield, either H₂O rich ices or mixed, CO₂ rich ices. This is not realistic, as we know that catastrophic CO freeze-out induces a CO-driven chemistry at the surface of the grain. We then would need to adapt Nautilus to take into account this ice composition change, with a CR sputtering regime evolving with the species abundances.
5. **Grain size distribution and grain growth** : The version we used in Nautilus can only take into account one grain size. [Iqbal & Wakelam \(2018\)](#) introduced a grain distribution in

Nautilus, with a more realistic approach. It however does not take into account grain growth, as it is expected that grain size distribution changes with time. This could be explored as a future update in Nautilus, since it is very important for the chemistry taking place in grains. Indeed, smaller grains are warmer, with a more CO₂-driven chemistry, whereas bigger, colder grains are more H₂O-driven. Additionally, the decrease of smaller grain in bigger ones will affect the depletion regime, which will impact the formation of COMs. These two parameters are then crucial to be included in future version of Nautilus.

10.7.3 SynthIceSpec updates

SynthIceSpec could go up multiple routes, following Nautilus updates as well. Using more realistic model results, the ice prediction will only be better. Simple updates could be made, firstly by simply increasing the number of molecules in the database, with MIRI bands that are not well defined.

More complex modifications are expected :

1. **Spectral contribution** : The actual extinction law used in SynthIceSpec is not well defined for $\lambda > 5 \mu\text{m}$. *JWST* data are expected to bring new extinction law that could be implemented in our tool.
2. **Predicting star distances** : A parameter affecting strongly our predictions is the distance to the star observed. We could imagine using the Besançon Galactic Model ([Lagarde et al. 2017](#)) to help us determine the most probable distance to the star (or even get the actual distance if it has been measured), and if it has been observed, the actual star type for photospheric contributions.
3. **Grain growth** : It was observed recently ([McClure et al. 2023](#)) and is widely studied by our French colleagues. It would be interesting to see if we can parametrise the grain growth, with possibly inducing band deformation (as expected in H₂O, CO₂ or CO for example). It would be very useful to then compare the predictions with the actual observed spectra.
4. **Line-of-sight contribution** An interesting thing to study would see how much the line-of-sight contribution (saying, H₂ column densities for example) could affect the overall spectra, with extinction or silicates feature. This would be of great interest for proto-disk observations, where we could perhaps predict the snow-line more precisely in disks facing us. Testing SynthIceSpec with 3D dynamic modeling might be interesting to show how much the line-of-sight could change our spectra, inside the same region.

In any way, direct comparison between SynthIceSpec and actual *JWST* observations would help us identify which elements are missing in the code (and even in Nautilus to some extent). I hope to be able to work on all of these soon enough.

10.8 Appendix

The appendix lists the publications released during the thesis.

Attached :

Taillard, A., Wakelam, V., Gratier, P., Dartois, E., Chabot, M., Noble, J. A., Keane, J. V., Boogert, A. C. A., Harsono, D., "Constraints on the non-thermal desorption of methanol in the cold core LDN 429-C", *Astronomy & Astrophysics*, 670, A141, 2023

Publications :

Clément, A., **Taillard, A.**, Wakelam, V., Gratier, P., Loison, J. -C., Dartois, E., Dulieu, F., Noble, J. A., Chabot, M., "Astrochemical models of interstellar ices : history matters", submitted in *Astronomy & Astrophysics*

Dartois, E., Noble, J. A., Caselli, P., Fraser, H. J., Jiménez-Serra, I., Maté, B., McClure, M. K., Melnick, G. J., Pendleton, Y. J., Shimonishi, T., Smith, Z. L., Sturm, J., **Taillard, A.**, Wakelam, V., Boogert, A. C. A., Drozdovskaya, M. N., Erkal, J., Harsono, D., Herrero, V. J., Ioppolo, S., Linnartz, H., McGuire, B. A., Perotti, G., Qasim, D., and Rocha, W. R. M., "Spectroscopic sizing of interstellar icy grains with JWST", *in press*.

The second appendix lists the spectroscopic parameters used in SynthIceSpec.

Références

- Adams, N. G., Smith, D., & Clary, D. C. 1985, , 296, L31
- Aghanim, N., Akrami, Y., Arroja, F., et al. 2020, A&A, 641, A1, publisher : EDP Sciences
- Aikawa, Y., Kamuro, D., Sakon, I., et al. 2012, , 538, A57
- Allard, F. & Hauschildt, P. H. 1995, , 445, 433
- Andersson, S. & van Dishoeck, E. F. 2008, , 491, 907
- Andre, P., Ward-Thompson, D., & Barsony, M. 2000, in Protostars and Planets IV, ed. V. Mannings, A. P. Boss, & S. S. Russell, 59
- Arons, J. & Max, C. E. 1975, , 196, L77
- Arzoumanian, D., Shimajiri, Y., Inutsuka, S.-i., Inoue, T., & Tachihara, K. 2018, Publications of the Astronomical Society of Japan, 70, arXiv :1807.08968 [astro-ph]
- Bachiller, R. & Pérez Gutiérrez, M. 1997, , 487, L93
- Bacmann, A. & Faure, A. 2016, A&A, 587, A130
- Bacmann, A., Lefloch, B., Ceccarelli, C., et al. 2002, A&A, 389, L6, arXiv : astro-ph/0205154
- Bacmann, A., Lefloch, B., Ceccarelli, C., et al. 2003, The Astrophysical Journal, 585, L55
- Bacmann, A., Taquet, V., Faure, A., Kahane, C., & Ceccarelli, C. 2012, A&A, 541, L12, publisher : EDP Sciences
- Bates, D. R. & Spitzer, Lyman, J. 1951, , 113, 441
- Bell, M. B., Feldman, P. A., Travers, M. J., et al. 1997, , 483, L61
- Berné, O., Mulas, G., & Joblin, C. 2013, , 550, L4
- Bertin, M., Fayolle, E. C., Romanzin, C., et al. 2013, , 779, 120
- Bertin, M., Fayolle, E. C., Romanzin, C., et al. 2012, Phys. Chem. Chem. Phys., 14, 9929, publisher : The Royal Society of Chemistry
- Bertin, M., Romanzin, C., Doronin, M., et al. 2016, ApJ, 817, L12
- Bohlin, R. C., Savage, B. D., & Drake, J. F. 1978, , 224, 132
- Bonne, L., Bontemps, S., Schneider, N., et al. 2020, A&A, 644, A27
- Boogert, A., Gerakines, P., & Whittet, D. 2015, Annu. Rev. Astron. Astrophys., 53, 541, arXiv :1501.05317 [astro-ph]

- Boogert, A. C. A., Blake, G. A., & Tielens, A. G. G. M. 2002, , 577, 271
- Boogert, A. C. A., Chiar, J. E., Knez, C., et al. 2013, , 777, 73
- Boogert, A. C. A., Huard, T. L., Cook, A. M., et al. 2011, *The Astrophysical Journal*, 729, 92
- Bossa, J. B., Theule, P., Duvernay, F., & Chiavassa, T. 2009, , 707, 1524
- Bottinelli, S., Boogert, A. C. A., Bouwman, J., et al. 2010, , 718, 1100
- Bouilloud, M., Fray, N., Bénilan, Y., et al. 2015, , 451, 2145
- Bourke, T. L., Hyland, A. R., & Robinson, G. 1995, , 276, 1052
- Bron, E., Daudon, C., Pety, J., et al. 2018, *A&A*, 610, A12
- Cabedo, V., Maury, A., Girart, J. M., et al. 2023, , 669, A90
- Calmonte, U., Altwegg, K., Balsiger, H., et al. 2016, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 462, S253
- Cami, J., Bernard-Salas, J., Peeters, E., & Malek, S. E. 2010, *Science*, 329, 1180
- Campbell, E. K., Holz, M., Gerlich, D., & Maier, J. P. 2015, , 523, 322
- Cardelli, J. A., Clayton, G. C., & Mathis, J. S. 1989, , 345, 245
- Carrascosa, H., Satorre, M. Á., Escribano, B., Martín-Doménech, R., & Muñoz Caro, G. M. 2023, , 525, 2690
- Carter, M., Lazareff, B., Maier, D., et al. 2012, , 538, A89
- Caselli, P., Hasegawa, T. I., & Herbst, E. 1993, , 408, 548
- Caselli, P., Vastel, C., Ceccarelli, C., et al. 2008, , 492, 703
- Caselli, P., Vastel, C., Ceccarelli, C., et al. 2008, *A&A*, 492, 703
- Chaabouni, H., Bergeron, H., Baouche, S., et al. 2012, , 538, A128
- Charnley, S. B., Tielens, A. G. G. M., & Millar, T. J. 1992, , 399, L71
- Cheung, A. C., Rank, D. M., Townes, C. H., Knowles, S. H., & Sullivan, W. T., I. 1969, , 157, L13
- Cheung, A. C., Rank, D. M., Townes, C. H., Thornton, D. D., & Welch, W. J. 1968, , 21, 1701
- Chiar, J. E., Adamson, A. J., Kerr, T. H., & Whittet, D. C. B. 1995, , 455, 234
- Chiar, J. E., Pendleton, Y. J., Allamandola, L. J., et al. 2011, , 731, 9
- Chu, L. E. U., Hodapp, K., & Boogert, A. 2020, *The Astrophysical Journal*, 904, 86
- Chu, L. E. U. & Hodapp, K. W. 2021, arXiv :2106.08333 [astro-ph]

- Chuang, K. J., Fedoseev, G., Ioppolo, S., van Dishoeck, E. F., & Linnartz, H. 2016, , 455, 1702
- Chuang, K. J., Fedoseev, G., Qasim, D., et al. 2018, , 853, 102
- Clément, A., Taillard, A., Wakelam, V., et al. 2023, arXiv e-prints, arXiv :2306.08346
- Congiu, E., Minissale, M., Baouche, S., et al. 2014, Faraday Discussions, 168, 151
- Crapsi, A., Caselli, P., Walmsley, C. M., et al. 2005, The Astrophysical Journal, 619, 379
- Cruz-Diaz, G. A., Martín-Doménech, R., Muñoz Caro, G. M., & Chen, Y.-J. 2016, A&A, 592, A68
- Cuppen, H. M. & Garrod, R. T. 2011, , 529, A151
- Cuppen, H. M. & Herbst, E. 2007, , 668, 294
- Cuppen, H. M., Penteadó, E. M., Isokoski, K., van der Marel, N., & Linnartz, H. 2011, , 417, 2809
- Cuppen, H. M., van Dishoeck, E. F., Herbst, E., & Tielens, A. G. G. M. 2009, , 508, 275
- Dartois, E., Augé, B., Boduch, P., et al. 2015, , 576, A125
- Dartois, E., Chabot, M., Bacmann, A., et al. 2020, Astronomy & Astrophysics, 634, A103
- Dartois, E., Chabot, M., Barkach, T. I., et al. 2018, Astronomy & Astrophysics, 618, A173
- Dartois, E., Chabot, M., Id Barkach, T., et al. 2021, , 647, A177
- Dartois, E., Noble, J. A., Ysard, N., Demyk, K., & Chabot, M. 2022, Astronomy and Astrophysics, 666, A153
- Di Francesco, J., Myers, P. C., Wilner, D. J., Ohashi, N., & Mardones, D. 2001, , 562, 770
- Dickman, R. L. 1975, , 202, 50
- Douglas, A. E. & Herzberg, G. 1941, , 94, 381
- Draine, B. T. 1978, ApJS, 36, 595
- Draine, B. T. 2003, , 598, 1017
- Draine, B. T. 2011, Physics of the Interstellar and Intergalactic Medium
- Draine, B. T. & Lee, H. M. 1984, , 285, 89
- Drozdovskaya, M. N., Walsh, C., van Dishoeck, E. F., et al. 2016, Mon. Not. R. Astron. Soc., 462, 977
- Dubernet, M.-L., Daniel, F., Grosjean, A., & Lin, C. Y. 2009, A&A, 497, 911
- Dulieu, F., Congiu, E., Noble, J., et al. 2013, Sci Rep, 3, 1338, number : 1 Publisher : Nature Publishing Group
- Dzib, S. A., Loinard, L., Ortiz-León, G. N., Rodríguez, L. F., & Galli, P. A. B. 2018, , 867, 151

- Ehrenfreund, P. & Charnley, S. B. 2000, , 38, 427
- Elsila, J. E., Glavin, D. P., & Dworkin, J. P. 2009, , 44, 1323
- Esplugues, G. B., Cazaux, S., Meijerink, R., Spaans, M., & Caselli, P. 2016, *A&A*, 591, A52
- Evans, N. J. 1999, *Annu. Rev. Astron. Astrophys.*, 37, 311, arXiv : astro-ph/9905050 version : 1
- Evans, N. J., Dunham, M. M., Jørgensen, J. K., et al. 2009, *ApJS*, 181, 321
- Faure, A., Lique, F., & Wiesenfeld, L. 2016, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 460, 2103
- Fayolle, E. C., Bertin, M., Romanzin, C., et al. 2011, , 739, L36
- Fedoseev, G., Chuang, K. J., van Dishoeck, E. F., Ioppolo, S., & Linnartz, H. 2016, , 460, 4297
- Fitzpatrick, E. L. & Massa, D. 1986, , 307, 286
- Fitzpatrick, E. L. & Massa, D. 1988, , 328, 734
- Fraser, H. J., Collings, M. P., Dever, J. W., & McCoustra, M. R. S. 2004, , 353, 59
- Fredon, A., Lamberts, T., & Cuppen, H. M. 2017, , 849, 125
- Frerking, M. A., Langer, W. D., & Wilson, R. W. 1982, *ApJ*, 262, 590
- Fuchs, G. W., Cuppen, H. M., Ioppolo, S., et al. 2009, , 505, 629
- Galametz, M., Maury, A. J., Valdivia, V., et al. 2019, , 632, A5
- Garozzo, M., Fulvio, D., Gomis, O., Palumbo, M. E., & Strazzulla, G. 2008, , 56, 1300
- Garrod, R., Park, I. H., Caselli, P., & Herbst, E. 2006, *Faraday Discussions*, 133, 51
- Garrod, R. T. 2013, , 765, 60
- Garrod, R. T., Wakelam, V., & Herbst, E. 2007, *Astronomy & Astrophysics*, 467, 1103
- Gerakines, P. A., Schutte, W. A., Greenberg, J. M., & van Dishoeck, E. F. 1995, , 296, 810
- Gerakines, P. A., Yarnall, Y. Y., & Hudson, R. L. 2022, , 509, 3515
- Ginsburg, A., Koch, E., Robitaille, T., et al. 2019, *Zenodo*
- Goldreich, P. & Scoville, N. 1976, , 205, 144
- Gredel, R., Lepp, S., Dalgarno, A., & Herbst, E. 1989, , 347, 289
- Green, S., Montgomery, J. A., J., & Thaddeus, P. 1974, , 193, L89
- Greve, A., Kramer, C., & Wild, W. 1998, , 133, 271
- Greve, A., Panis, J. F., & Thum, C. 1996, , 115, 379

- Guélin, M. & Cernicharo, J. 2022, *Frontiers in Astronomy and Space Sciences*, 9, 787567
- Guelin, M., Green, S., & Thaddeus, P. 1978, , 224, L27
- Guelin, M., Langer, W. D., Snell, R. L., & Wootten, H. A. 1977, , 217, L165
- Gustafsson, B., Edvardsson, B., Eriksson, K., et al. 2008, , 486, 951
- Hagen, W., Tielens, A. G. G. M., & Greenberg, J. M. 1981, *Chemical Physics*, 56, 367
- Hagen, W., Tielens, A. G. G. M., & Greenberg, J. M. 1983, , 51, 389
- Harvey, D. W. A., Wilner, D. J., Di Francesco, J., et al. 2002, , 123, 3325
- Harvey, D. W. A., Wilner, D. J., Myers, P. C., & Tafalla, M. 2003, *ApJ*, 597, 424
- Hasegawa, T. I. & Herbst, E. 1993a, , 261, 83
- Hasegawa, T. I. & Herbst, E. 1993b, , 263, 589
- Hasegawa, T. I., Herbst, E., & Leung, C. M. 1992, , 82, 167
- Hauschildt, P. H., Allard, F., & Baron, E. 1999, , 512, 377
- Herbst, E. & Cuppen, H. M. 2006, *Proceedings of the National Academy of Science*, 103, 12257
- Herbst, E. & Klemperer, W. 1973, , 185, 505
- Herbst, E. & Klemperer, W. 1974, , 188, 255
- Herbst, E. & Leung, C. M. 1986, , 222, 689
- Herbst, E. & van Dishoeck, E. F. 2009, *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, 47, 427
- Hidaka, H., Watanabe, M., Kouchi, A., & Watanabe, N. 2009, , 702, 291
- Hocuk, S., Szűcs, L., Caselli, P., et al. 2017, *A&A*, 604, A58
- Hollenbach, D., Kaufman, M. J., Bergin, E. A., & Melnick, G. J. 2009, , 690, 1497
- Hosokawa, T. & Omukai, K. 2009, , 691, 823
- Hudgins, D. M., Sandford, S. A., Allamandola, L. J., & Tielens, A. G. G. M. 1993, , 86, 713
- Hudson, R. L. & Moore, M. H. 1999, , 140, 451
- Husser, T. O., Wende-von Berg, S., Dreizler, S., et al. 2013, , 553, A6
- Iqbal, W. & Wakelam, V. 2018, *Astronomy & Astrophysics*, 615, A20
- Jansen, D. J., van Dishoeck, E. F., Black, J. H., Spaans, M., & Sosin, C. 1995, , 302, 223
- Jenkins, E. B. 2009, *The Astrophysical Journal*, 700, 1299
- Jenniskens, P. & Blake, D. F. 1994, *Science*, 265, 753

- Jiménez-Escobar, A. & Muñoz Caro, G. M. 2011, , 536, A91
- Johnson, H. L. & Morgan, W. W. 1953, , 117, 313
- Kane, B. D., Clemens, D. P., & Myers, P. C. 1994, , 433, L49
- Keane, J. V., Tielens, A. G. G. M., Boogert, A. C. A., Schutte, W. A., & Whittet, D. C. B. 2001, , 376, 254
- Keene, J. 1981, , 245, 115
- Keto, E., Caselli, P., & Rawlings, J. 2015, , 446, 3731
- Kim, S., Lee, C. W., Tafalla, M., et al. 2022, ApJ, 940, 112, publisher : The American Astronomical Society
- Kramer, C., Buchbender, C., Xilouris, E. M., et al. 2010, A&A, 518, L67
- Krim, L., Jonusas, M., Guillemin, J.-C., Yáñez, M., & Lamsabhi, A. M. 2018, Physical Chemistry Chemical Physics (Incorporating Faraday Transactions), 20, 19971
- Kvenvolden, K., Lawless, J., Pering, K., et al. 1970, , 228, 923
- Lagarde, N., Robin, A. C., Reylé, C., & Nasello, G. 2017, , 601, A27
- Lamberts, T., Cuppen, H. M., Ioppolo, S., & Linnartz, H. 2013, Physical Chemistry Chemical Physics (Incorporating Faraday Transactions), 15, 8287
- Lee, C. W., Myers, P. C., & Plume, R. 2004, The Astrophysical Journal Supplement Series, 153, 523
- Lee, C. W., Myers, P. C., & Tafalla, M. 2001, ASTROPHYS J SUPPL S, 136, 703, arXiv : astro-ph/0105515
- Lee, S. H., Park, Y.-S., Sohn, J., Lee, C. W., & Lee, H. M. 2007, , 660, 1326
- Leger, A., Jura, M., & Omont, A. 1985, , 144, 147
- Leung, C. M. & Brown, R. L. 1977, , 214, L73
- Leurini, S., Schilke, P., Menten, K. M., et al. 2004, , 422, 573
- Lindblad, B. 1935, , 135, 133
- Lique, F., Spielfiedel, A., & Cernicharo, J. 2006, A&A, 451, 1125
- Lique, F., Spielfiedel, A., Dubernet, M.-L., & Feautrier, N. 2005, The Journal of Chemical Physics, 123, 134316
- Lique, F., Spielfiedel, A., Feautrier, N., et al. 2010, The Journal of Chemical Physics, 132, 024303
- Lodders, K. 2003, ApJ, 591, 1220
- Lombardi, M., Bouy, H., Alves, J., & Lada, C. 2014, Astronomy & Astrophysics, 566, A45

- Lucas, R. 1976, , 46, 473
- Mangum, J. G. & Shirley, Y. L. 2015, Publications of the Astronomical Society of the Pacific, 127, 266, arXiv : 1501.01703
- Marchal, A., Miville-Deschênes, M.-A., Orieux, F., et al. 2019, A&A, 626, A101
- Marsh, K. A., Whitworth, A. P., & Lomax, O. 2015, , 454, 4282
- Masunaga, H. & Inutsuka, S.-i. 2000, , 536, 406
- Matar, E., Bergeron, H., Dulieu, F., et al. 2010, , 133, 104507
- Mathis, J. S., Rumpl, W., & Nordsieck, K. H. 1977, , 217, 425
- Mathis, J. S. & Whiffen, G. 1989, , 341, 808
- McClure, M. K., Rocha, W. R. M., Pontoppidan, K. M., et al. 2023, Nat Astron, 7, 431, arXiv :2301.09140 [astro-ph]
- McKee, C. F. & Ostriker, E. C. 2007, , 45, 565
- McKellar, A. 1940, , 52, 187
- McLean, I. S., Becklin, E. E., Bendiksen, O., et al. 1998, in Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference Series, Vol. 3354, Infrared Astronomical Instrumentation, ed. A. M. Fowler, 566–578
- Mejía, C., Bender, M., Severin, D., et al. 2015, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, 365, 477
- Minissale, M. & Dulieu, F. 2014, The Journal of Chemical Physics, 141, 014304
- Minissale, M., Dulieu, F., Cazaux, S., & Hocuk, S. 2015, Astronomy & Astrophysics, 585, A24
- Minissale, M., Dulieu, F., Cazaux, S., & Hocuk, S. 2016, Astronomy & Astrophysics, 585, A24
- Minissale, M., Dulieu, F., Cazaux, S., & Hocuk, S. 2016a, , 585, A24
- Minissale, M., Moudens, A., Baouche, S., Chaabouni, H., & Dulieu, F. 2016b, , 458, 2953
- Motte, F., Bontemps, S., & Louvet, F. 2018, , 56, 41
- Motte, F., Bontemps, S., Schilke, P., et al. 2007, , 476, 1243
- Myers, P. C. 2005, , 623, 280
- Myers, P. C., Evans, N. J., I., & Ohashi, N. 2000, in Protostars and Planets IV, ed. V. Mannings, A. P. Boss, & S. S. Russell, 217
- Müller, H. S. P., Thorwirth, S., Roth, D. A., & Winnewisser, G. 2001, Astronomy & Astrophysics, 370, L49

- Navarro-Almaida, D., Le Gal, R., Fuente, A., et al. 2020, *A&A*, 637, A39
- Niedenhoff, M., Yamada, K. M. T., Belov, S. P., & Winnemisser, G. 1995, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 174, 151
- Noble, J. A., Congiu, E., Dulieu, F., & Fraser, H. J. 2012, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, no
- Noble, J. A., Fraser, H. J., Aikawa, Y., Pontoppidan, K. M., & Sakon, I. 2013, *ApJ*, 775, 85, arXiv :1307.1527 [astro-ph]
- Noble, J. A., Theule, P., Borget, F., et al. 2013, , 428, 3262
- Nony, T., Galván-Madrid, R., Motte, F., et al. 2023, , 674, A75
- Oba, Y., Miyauchi, N., Hidaka, H., et al. 2009, , 701, 464
- Öberg, K. I., Bottinelli, S., Jørgensen, J. K., & van Dishoeck, E. F. 2010, , 716, 825
- Öberg, K. I., Fraser, H. J., Boogert, A. C. A., et al. 2007, , 462, 1187
- Olofsson, S. & Olofsson, G. 2010, *A&A*, 522, A84, publisher : EDP Sciences
- Onishi, T., Mizuno, A., Kawamura, A., Ogawa, H., & Fukui, Y. 1998, , 502, 296
- Ormel, C. W., Paszun, D., Dominik, C., & Tielens, A. G. G. M. 2009, , 502, 845
- Padovani, M., Bialy, S., Galli, D., et al. 2022, *A&A*, 658, A189
- Palumbo, M. E. 2005, *J. Phys. : Conf. Ser.*, 6, 211
- Penteado, E. M., Walsh, C., & Cuppen, H. M. 2017, , 844, 71
- Perotti, G., Rocha, W. R. M., Jørgensen, J. K., et al. 2020, *A&A*, 643, A48
- Pineda, J. E., Maury, A. J., Fuller, G. A., et al. 2012, , 544, L7
- Planck Collaboration, Abergel, A., Ade, P. A. R., et al. 2011, *A&A*, 536, A25
- Planck Collaboration, Aghanim, N., Akrami, Y., et al. 2020a, *A&A*, 641, A1
- Planck Collaboration, Aghanim, N., Akrami, Y., et al. 2020b, *A&A*, 641, A3
- Plume, R., Jaffe, D. T., II, N. J. E., Martin-Pintado, J., & Gomez-Gonzalez, J. 1997, *ApJ*, 476, 730, publisher : American Astronomical Society
- Pontoppidan, K. M. 2006, *Astronomy & Astrophysics*, 453, L47
- Pontoppidan, K. M., Dishoeck, E. F. v., & Dartois, E. 2004, *Astronomy & Astrophysics*, 426, 925
- Prasad, S. S. & Huntress, W. T., J. 1980, , 43, 1
- Predehl, P. & Schmitt, J. H. M. M. 1995, *Astronomy and Astrophysics*, 293, 889, aDS Bibcode : 1995A&A...293..889P

- Qasim, D., Chuang, K.-J., Fedoseev, G., et al. 2018, *A&A*, 612, A83
- Rabli, D. & Flower, D. R. 2010, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 406, 95
- Redaelli, E., Bizzocchi, L., Caselli, P., et al. 2018, *A&A*, 617, A7
- Roberge, W. G., Jones, D., Lepp, S., & Dalgarno, A. 1991, , 77, 287
- Rocha, W. R. M., Perotti, G., Kristensen, L. E., & Jørgensen, J. K. 2021, , 654, A158
- Rowland, B., Fisher, M., & Devlin, J. P. 1991, , 95, 1378
- Ruaud, M., Wakelam, V., & Hersant, F. 2016, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 459, 3756
- Ryter, C. E. 1996, *Astrophysics and Space Science*, 236, 285, aDS Bibcode : 1996Ap&SS.236..285R
- Sadavoy, S. I., Keto, E., Bourke, T. L., et al. 2018, *The Astrophysical Journal*, 852, 102
- Salpeter, E. E. 1955, , 121, 161
- Sandford, S. A., Allamandola, L. J., Tielens, A. G. G. M., & Valero, G. J. 1988, , 329, 498
- Schutte, W. A., Boogert, A. C. A., Tielens, A. G. G. M., et al. 1999, , 343, 966
- Schutte, W. A. & Khanna, R. K. 2003, , 398, 1049
- Schutte, W. A., Tielens, A. G. G. M., & Allamandola, L. J. 1993, , 415, 397
- Schöier, F. L., van der Tak, F. F. S., van Dishoeck, E. F., & Black, J. H. 2005, *A&A*, 432, 369
- Seo, Y. M., Hong, S. S., & Shirley, Y. L. 2013, , 769, 50
- Seo, Y. M., Hong, S. S., & Shirley, Y. L. 2013, *ApJ*, 769, 50, publisher : American Astronomical Society
- Shen, C. J., Greenberg, J. M., Schutte, W. A., & van Dishoeck, E. F. 2004, , 415, 203
- Silsbee, K., Ivlev, A. V., Sipilä, O., Caselli, P., & Zhao, B. 2020, , 641, A39
- Smith, R. G. 1991, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 249, 172
- Spezzano, S., Caselli, P., Pineda, J. E., et al. 2020, *A&A*, 643, A60
- Spitzer, L. 1978, *Physical processes in the interstellar medium*
- Stutz, A. M., Bourke, T. L., Rieke, G. H., et al. 2009, *The Astrophysical Journal*, 690, L35
- Swings, P. & Rosenfeld, L. 1937, , 86, 483
- Tafalla, M., Mardones, D., Myers, P. C., et al. 1998, , 504, 900
- Taillard, A., Wakelam, V., Gratier, P., et al. 2023, , 670, A141

- Taniguchi, A. 2020, *astropenguin/ndradex* : Bug-fix release
- Theulé, P., Duvernay, F., Danger, G., et al. 2013, *Advances in Space Research*, 52, 1567
- Tielens, A. G. G. M. 2005, *The Physics and Chemistry of the Interstellar Medium*
- Tielens, A. G. G. M. & Allamandola, L. J. 1987, in *Interstellar Processes*, ed. D. J. Hollenbach & J. Thronson, Harley A., Vol. 134, 397
- Tielens, A. G. G. M. & Hagen, W. 1982, , 114, 245
- Tucker, K. D., Kutner, M. L., & Thaddeus, P. 1974, , 193, L115
- Valdivia, V., Maury, A., Brauer, R., et al. 2019, , 488, 4897
- van de Hulst, H. C. 1946, *Recherches Astronomiques de l'Observatoire d'Utrecht*, 11, 2.i
- van der Tak, F. F. S., Black, J. H., Schöier, F. L., Jansen, D. J., & van Dishoeck, E. F. 2007, *A&A*, 468, 627
- van Dishoeck, E. F., Herbst, E., & Neufeld, D. A. 2013, *Chemical Reviews*, 113, 9043
- Vidal, T. H. G., Loison, J.-C., Jaziri, A. Y., et al. 2017, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 469, 435
- Visser, A. E., Richer, J. S., & Chandler, C. J. 2002, , 124, 2756
- Wakelam, V., Dartois, E., Chabot, M., et al. 2021a, *A&A*, 652, A63
- Wakelam, V., Gratier, P., Ruaud, M., et al. 2021b, *Astronomy & Astrophysics*, Volume 647, id.A172, <NUMPAGES>28</NUMPAGES> pp., 647, A172
- Wakelam, V., Herbst, E., Loison, J. C., et al. 2012, , 199, 21
- Wakelam, V., Herbst, E., & Selsis, F. 2006, *A&A*, 451, 551
- Wakelam, V., Loison, J.-C., Herbst, E., et al. 2015, *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 217, 20
- Wakelam, V., Loison, J. C., Mereau, R., & Ruaud, M. 2017, *Molecular Astrophysics*, 6, 22
- Wakelam, V., Ruaud, M., Gratier, P., & Bonnell, I. A. 2019, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 486, 4198
- Watanabe, N. & Kouchi, A. 2002, , 567, 651
- Watanabe, N. & Tsuge, M. 2020, *Journal of the Physical Society of Japan*, 89, 051015
- Watson, W. D. 1974, , 188, 35
- Watson, W. D. & Salpeter, E. E. 1972, , 174, 321
- Whittet, D. C. B., Bode, M. F., Longmore, A. J., et al. 1988, , 233, 321

- Whittet, D. C. B., Cook, A. M., Herbst, E., Chiar, J. E., & Shenoy, S. S. 2011, , 742, 28
- Whittet, D. C. B., Gerakines, P. A., Hough, J. H., & Shenoy, S. S. 2001, , 547, 872
- Whittet, D. C. B., Poteet, C. A., Chiar, J. E., et al. 2013, , 774, 102
- Whittet, D. C. B., Shenoy, S. S., Bergin, E. A., et al. 2007, , 655, 332
- Williams, J. P., Lee, C. W., & Myers, P. C. 2006, ApJ, 636, 952
- Wilson, R. W., Jefferts, K. B., & Penzias, A. A. 1970, , 161, L43
- Wilson, T. L. 1999, Reports on Progress in Physics, 62, 143
- Wilson, T. L., Rohlf, K., & Hüttemeister, S. 2009, Tools of Radio Astronomy
- Wirström, E. S., Charnley, S. B., Cordiner, M. A., & Ceccarelli, C. 2016, The Astrophysical Journal, 830, 102
- Xue, M., Jiang, B. W., Gao, J., et al. 2016, , 224, 23
- Yang, B., Stancil, P. C., Balakrishnan, N., & Forrey, R. C. 2010, The Astrophysical Journal, 718, 1062
- Ysard, N., Abergel, A., Ristorcelli, I., et al. 2013, , 559, A133
- Ysard, N., Köhler, M., Jones, A., et al. 2016, , 588, A44
- Zari, E., Lombardi, M., Alves, J., Lada, C. J., & Bouy, H. 2016, A&A, 587, A106, arXiv : 1511.08503
- Öberg, K. I., Fraser, H. J., Boogert, A. C. A., et al. 2007, Astronomy & Astrophysics, 462, 1187

Table des figures

1	Chameleon I, nuage moléculaire sombre observé avec NIRC <i>am</i> par le <i>James Webb Space Telescope</i> . Cette région de formation d'étoiles est l'une des premières cibles de ce nouveau télescope. La partie la plus froide du nuage (en bleu au centre) est illuminé en infrarouge par la proto-étoile Ced 110 IRS 4 (en orange, en haut à gauche). On peut apercevoir de nombreuses galaxies en fond, un jet de matière au centre de l'image par une étoile en formation et de nombreuses étoiles se trouvant derrière le nuage. Crédits : NASA, ESA, CSA, and M. Zamani (ESA/Webb) ; Science : F. Sun (Steward Observatory), Z. Smith (Open University), and the Ice Age ERS Team.	27
2	Le nuage sombre Barnard 68, observé dans deux longueurs d'onde différentes. A gauche, le nuage vu dans le visible, ne laissant passer aucune lumière des étoiles de fond. A droite, la même région en infrarouge. On peut observer les étoiles derrière le nuage et y sonder la composition de B68. Crédit : ESO/VLT	29
3	Cycle de formation des étoiles, résumé en quelques étapes clefs. Un nuage moléculaire va se densifier en formant des cœurs denses. Ces derniers vont subir un effondrement gravitationnel menant à la formation d'une proto-étoile. Le proto-disque va se dissiper avec le temps en formant des planétésimaux et autres corps en orbite avant d'enfin former un système stellaire.	32
4	Figure extraite de Boogert et al. (2015). Relation entre les densités de colonne de H ₂ O (en noir), CO (en vert), CO ₂ (en rouge) et CH ₃ OH (en bleu) et de l'extinction visuelle pour les lignes-de-visée observées dans les nuages froids et cœurs denses. Les limites hautes sont représentées par les symboles ouverts. Les lignes représentent les tendances pour les détections observées. Pour H ₂ O, les données proviennent de Taurus (rond et ligne solide), Lupus IV (astérisques et tirets-pointillés), L183 (triangles et tirets) et IC 5146 (carré et pointillés). Pour CO et CO ₂ , les données proviennent de Taurus seulement et pour CH ₃ OH, de multiples cœurs denses. Les données ont été tiré de Chiar et al. (1995); Whittet et al. (2007); Boogert et al. (2011); Chiar et al. (2011); Whittet et al. (2013); Boogert et al. (2013)	34
5	Antenne 30m de l'IRAM, au Pico Veleta en Espagne. Avec ses 800 tonnes, l'antenne peut opérer 24 heures sur 24, tous les jours de l'année. Plus de 250 astronomes viennent chaque année utiliser le télescope pour leurs projets scientifiques. Crédits : K. Zacher	43
6	Illustration du principe d'interférométrie par les taches d'Airy. De gauche à droite, on perd le pouvoir de résolution des deux taches mais on gagne en intensité de signal. .	45
7	Le champ d'antennes qui constitue NOEMA, avec 12 antennes de 15 m de diamètre et 125 tonnes, à 2550 m d'altitude sur le Plateau de Bure. Comme le 30m, NOEMA peut fonctionner de jour comme de nuit et tourne en permanence toute l'année, avec une petite équipe d'astronomes et techniciens pour veiller au bon fonctionnement des antennes et leur sécurité. Crédits : IRAM	45

8	Plans d'Herschel, l'axe X est l'axe optique du télescope, qui est tourné vers la cible à observer. Les axes X et Z forment un plan perpendiculaire qui fait face au Soleil, protégeant le télescope et récoltant les photons dans les panneaux solaires. Crédits : ESA	47
9	Schématiquement, l'observation par étoile de fond permet d'observer les espèces chimiques présentes sur les grains de poussière, trop petits pour être observés directement. Le spectre de l'étoile de fond (avec certaines absorptions intrinsèques à ce spectre, repassées en bleu) va se superposer sur le spectre des grains de poussière (avec certains éléments propres à la structure des grains en rouge) afin de former le spectre final, reçu par le télescope (les éléments rouges et bleus sont superposés sur le spectre final).	49
10	Les trois processus de transitions radiatives entre deux niveaux d'énergie dégénérés. E_b et E_h sont respectivement le niveau d'énergie bas et le niveau d'énergie haut, avec $E_b < E_h$	52
11	Les 3 phases du modèle (gaz, manteau de glace et surface de la glace), les interactions entre les phases (en rouge) et quelques mécanismes de réactions.	64
12	Les différents mécanismes de désorption non-thermique décrits dans Nautilus.	68
13	Gauche : Densité de colonne de H_2 (N_{H_2} en cm^{-2}) dans L429-C calculée à partir des cartes d'épaisseurs optiques d' <i>Herschel</i> . La position du maximum de continuum est représentée par la croix bleu foncé. Les autres croix représentent les différentes positions où l'on a étudié les spectres d'émission moléculaire (voir la Figure 15). Droite : Carte de densité volumique de H_2 (n_{H_2} in cm^{-3}). Sur les deux cartes, les contours blancs représentent la température en Kelvin du cœur mesurée par <i>Herschel</i>	78
14	Cartes d'intensité intégrée pour chaque molécule détectée. Dans le cas d'une molécule à plusieurs transitions, seule la transition la plus brillante est montrée. La croix bleu foncé représente le pic de continuum de poussière.	79
15	Spectres de CS à 97.980 GHz (rouge), de CH_3OH à 96.741 GHz (bleu) et $C^{18}O$ à 109.782 GHz (jaune) aux quatre positions indiquées par des croix de couleurs dans la Figure 13. Les positions de chaque spectre sont indiquées par les croix colorées dans le coin en haut à gauche de chaque case. Les densités de colonne de chaque molécule à la position, en plus de la densité de colonne de H_2 en titre de chaque case, sont indiquées.	81
16	Carte en canal de vitesse de $C^{18}O$ (109782 MHz) (haut) et SO (99299 MHz) (bas). Le lobe du télescope est indiqué en hachuré en bas de chaque case. Les contours représentent 25, 50 et 75% de l'intensité (contours extérieurs vers intérieurs). Le code couleur est en K.	82
17	Carte similaire à la Figure 16 mais pour CS (97980 MHz) (haut) et CH_3OH (96741 MHz) (bas)	83

18	Distribution en vitesse du nuage. Gauche : Intensité intégrée de C ¹⁸ O superposés à la carte de N _{H2} d' <i>Herschel</i> (en niveaux de gris). Les contours montrent les trois composantes en vitesses détaillées dans le texte. Cyan : 5.95 - 6.25 km.s ⁻¹ (avec les niveaux d'intensités comme suit : en pointillés à 0.4 K, en tirets à 0.5 K et en ligne pleine à 1 K), rose : 6.25 - 7 km.s ⁻¹ (en pointillés à 1 K, en tirés à 1.5 K et en ligne pleine à 2.4 K), rouge : 7 - 7.6 km.s ⁻¹ (en pointillés 1 K, en tirets à 1.5 K et en ligne pleine à 2 K). Droite : Carte de vitesse (moment 1) du C ¹⁸ O, la croix bleu foncé représente le pic de continuum de poussière.	84
19	En bas à gauche : l'intensité intégrée de C ¹⁸ O. En haut à gauche : le diagramme PV obtenu en intégrant les vitesses selon l'axe horizontal. En bas à droite : le diagramme PV obtenu en intégrant les vitesses selon l'axe vertical. En haut à droite : le spectres associé au croisement des deux axes.	86
20	En échelle logarithmique, les abondances en phase gazeuse des molécules observées par rapport à H ₂ . Les croix vertes sur la carte du méthanol correspondent aux positions des observations de glace effectuées par Boogert et al. (2011). La croix bleu foncé représente le pic de continuum de poussière. À noter que la croix blanche dans H ₂ S est un trou dans les données.	88
21	Même description que la Figure 20, mais montrant les cartes de CCS, HC ₃ N et CN.	89
22	À gauche, les abondances en fonction de la densité volumique (en logarithme). À droite, l'abondance en fonction de l'extinction visuelle Av.	90
23	Même description que la Figure 22, mais pour CCS, HC ₃ N, H ₂ S et CN.	91
24	Av en fonction de n _{H2} (cm ⁻³) et de la température (K) observée dans L429-C. Tous ces paramètres sont calculés à partir des données d' <i>Herschel</i>	93
25	Meilleurs temps obtenus en utilisant la distance de désaccord des quatre molécules suivantes, CO, CS, H ₂ S et CH ₃ OH, en fonction de la densité.	93
26	Distance de désaccord d pour les 8 modèles en fonction du temps. Chaque figure représente le résultat d'un jeu de modèle. La légende donne les paramètres physiques associés aux modèles montrés ici. Les lignes verticales représentent la plus petite distance de désaccord et le temps qui y est associé.	95
27	Rapport entre les abondances modélisées (X _{mod}) et les abondances observées (X _{obs}) dans le gaz pour CO, CS, CH ₃ OH, et H ₂ S en fonction de la densité et à chaque meilleur temps pour les 4 jeux de modèles.	96
28	Semblable à la Figure 27 mais pour CCS, HC ₃ N, SO et CN.	97
29	Haut : Abondances de glace du méthanol obtenues via Nautilus en fonction de la densité. Les points noirs (avec les barres d'incertitude) sont les données relevées par Boogert et al. (2011) aux quatre positions observées. À noter que les courbes rouge et orange se superposent, comme les courbe bleue et verte. Bas : Rapport de l'abondance gaz-sur-glace du méthanol, en fonction de la densité, pour les différents jeux de modèles au meilleur temps et les observations (points noirs).	99
30	Gauche : densité de colonne de H ₂ (N _{H2} en cm ⁻²) dans L694 calculée à partir des cartes d'épaisseurs optiques d' <i>Herschel</i> que nous avons calculé. La position du maximum de continuum est représentée par la croix bleu foncé. Droite : carte de densité volumique de H ₂ (n _{H2} en cm ⁻³) obtenue par notre méthode. Sur les deux cartes, les contours blancs représentent la température en Kelvin.	102

31	Carte en canal de vitesse de C ¹⁸ O (109782 MHz) (haut) et SO (99299 MHz) (bas). Le lobe du télescope est indiqué en hachuré en bas de chaque case. Les contours représentent 0.2, 0.5, 1, 1.5, 2.5, 3.5 K (T _A [*]) (contours extérieurs vers intérieurs). Le code couleur est en K.	104
32	Carte similaire à Figure 31 mais pour CS (97980 MHz) (haut) et CH ₃ OH (96741 MHz) (bas)	105
33	Cartes d'intensité intégrée pour chaque molécule détectée. Dans le cas d'une molécule à plusieurs transitions, seule la transition la plus brillante est montrée.	106
34	Gauche : Carte d'intensité de C ¹⁸ O (109782 MHz) avec en contours les intensités de N ₂ H ⁺ (T _A [*] en K). Droite, haut : Spectre des molécules C ¹⁸ O, N ₂ H ⁺ et CS à la position du cœur, représenté par la croix bleue. Droite, bas : Spectre des molécules précédentes à la position représentée par la croix rouge.	107
35	En échelle logarithmique, les abondances en phase gaz des molécules observées par rapport à H ₂ . La croix verte dans la carte de méthanol correspond à la position de l'étoile de fond observée par Chu et al. (2020). La croix bleue représente le maximum du continuum de poussière.	109
36	Même description que la Figure 35, mais montrant les cartes de HNCO et NH ₂ D.	110
37	À gauche, les abondances en fonction de la densité volumique (en logarithme). À droite, l'abondance en fonction de l'extinction visuelle A _v	111
38	Même description que la Figure 37, mais pour HNCO, N ₂ H ⁺ , NH ₂ D.	112
39	A _v en fonction de n _{H₂} (cm ⁻³) et de la température (K) en échelle de couleur. Tous ces paramètres ont été déduits des observations de <i>Herschel</i>	113
40	Meilleurs temps obtenus en utilisant la distance de désaccord des trois molécules suivantes, CO, CS et CH ₃ OH, en fonction de la densité.	114
41	Distance de désaccord d pour les 7 modèles en fonction du temps pour chaque set. Chaque figure représente le résultat d'un set de modèles. La légende donne les paramètres physiques associés aux modèles montrés ici. Les lignes verticales représentent la plus petite distance de désaccord et le temps qui y est associé.	115
42	Rapports entre les abondances modélisées (X _{mod}) et les abondances observées (X _{obs}) dans le gaz pour CO, CS, CH ₃ OH, et H ₂ S en fonction de la densité et à chaque meilleur temps pour les 4 jeux de modèles.	116
43	Semblable à la Figure 42 mais pour HNCO, SO et N ₂ H ⁺	117
44	Abondance du CO dans les glaces pour les différents modèles et l'observation effectuée par Chu et al. (2020) en fonction de la densité. Les modèles rouge et oranges se superposent et les modèles bleu et vert également.	118
45	Haut : Abondances de glace du méthanol obtenues via Nautilus en fonction de la densité. Le point noir (avec la barre d'incertitude) correspond à l'observation de Chu et al. (2020) à la position observée. À noter que les courbes rouge et orange se superposent. Bas : Rapport de l'abondance gaz-sur-glace du méthanol, en fonction de la densité, pour les différents jeux de modèles au meilleur temps et les observations (points noirs) avec leurs incertitudes (barre noire).	119
46	Les différents modes d'observation du JWST pour chaque instrument et leur domaine en longueur d'onde. Crédits : Space Telescope Science Institute.	122

47	Les différents pouvoirs de résolution du prisme (PRISM) et des réseaux de diffraction (les courbes notées “G” + le chiffre désignant le pic de la bande observée + “M” ou “H” pour les modes “Moyenne” et “Haute” résolution) de NIRSpec, en fonction de la longueur d’onde. Le pouvoir de résolution est calculé en supposant la résolution spectrale d’un élément de taille de 2.2 pixels (typiquement pour une fente complètement illuminée). Crédits : STScI	124
48	Illustration d’une véritable observation effectuée par JWST en comparaison au fonctionnement de SynthIceSpec.	127
49	Spectres synthétiques obtenus via Nautilus pour 4 temps différents, sur la même étoile de fond 2MASSJ 18170470-0814495 (type K7), avec les mêmes paramètres physiques ($A_v = 24.2$, $T_{gaz} = 14.5$ K, $N_H = 4.2 \times 10^{22}$ cm $^{-3}$, $\zeta = 3 \times 10^{-17}$ s $^{-1}$).	129
50	Décomposition du spectre synthétique final attendu avec SynthIceSpec.	131
51	Figure tirée de l’article de Palumbo (2005), montrant la position et la forme du <i>dangling bond</i> O-H dans différents types de glace.	132
52	De gauche à droite, en x : le nombre d’onde en cm $^{-1}$, en y : l’absorbance. Gauche : Le spectre d’eau pure mesuré par Öberg et al. (2007). Centre : L’ajustement du spectre d’eau pure, composé de 3 composantes pour la bande principale à 3300 cm $^{-1}$ et de deux composantes pour le <i>dangling bond</i> à 3670 cm $^{-1}$. Droite, haut : En orange le spectre modélisé résultant de l’ajustement global des 5 composantes, superposé sur le spectre de laboratoire en bleu. Droite, bas : Les résidus de (spectre de laboratoire - spectre modélisé)	133
53	A gauche, la carte d’abondance du méthanol par rapport à H $_2$ obtenue pendant cette thèse, avec en cyan les quatre positions observées par Boogert et al. (2011). La croix surlignée en noir est la position sur laquelle le spectre de Keck/ <i>Spitzer</i> (graphique de droite, en haut) est obtenu. Le graphique du dessous sont les 2 spectres synthétiques obtenus avec Nautilus, selon deux températures différentes : en rouge un modèle où la température du grain suit une loi proposée par Hocuk et al. (2017) (voir Chapitre 2, Section 2.5.4), en bleu, un modèle où la température du grain est mesurée par <i>Herschel</i>	134
54	Comparaison entre les spectres obtenus des premières observations du JWST (McClure et al. 2023) et les spectres synthétiques obtenus avec les densités de colonne tirées des observations. Les deux spectres synthétiques ont été tracés jusqu’à 15.5 μ m afin de montrer la bande de CO $_2$ attendue, celui du bas a été tracé avec les A_v prédits par <i>Herschel</i> , $A_v = 35.8$ et 42.5 respectivement pour NIR38 et J110621, prédisant un flux plus haut que les spectres du milieu.	137
55	Abondance de CH $_3$ OH dans L694 (orange-violet) et dans L429-C (jaune-vert) en fonction de la gamme de densité sur laquelle ils sont observés respectivement.	143
56	Abondance de CO dans L694 (orange-violet) et dans L429-C (jaune-vert) en fonction de la gamme de densité sur laquelle ils sont observés respectivement.	143

57	Figure 4 de Noble et al. (2012), montrant l'énergie totale modélisée en fonction de l'exposition (i.e., nombre de mono-couches déposées sur la surface) pour toutes les combinaisons d'espèces déposées (en pointillés) sur les surfaces (traits pleins) possibles. Cela montre les différences notables d'énergie de liaison pour quelques espèces chimiques, on voit par exemple que l'énergie de liaison du CO est inférieure d'un facteur 2 à celles du CO ₂ pour une même exposition. Les courbes sont les suivantes : O ₂ en pointillés-tirés, CO en ligne solide, CO ₂ en tiré, H ₂ O _(np) en rouge, H ₂ O _c en bleu, SiO _x en vert.	146
----	---	-----

Liste des tableaux

1	Sets of chemical models.	76
2	Liste des raies détectées et leurs paramètres spectroscopiques associées. E_{up} est l'énergie du niveau supérieur relative au niveau fondamental, g_{up} est la dégénérescence du niveau supérieur et A_{ij} est le coefficient d'Einstein de la transition (proviennent de Schöier et al. (2005)).	80
3	Sets of chemical models.	92
4	Densités de colonne des glaces détectées dans L429-C provenant de l'étude de Boogert et al. (2011). Les “...” signifient qu'il n'y a pas de détection confirmée (si la bande a pu être observée).	98
5	Liste des raies détectées et leurs paramètres spectroscopiques associés.	103
6	Sets des modèles chimiques.	113
7	Densités de colonne des glaces détectées dans L694 provenant de l'étude de Chu et al. (2020). Les “...” signifient qu'il n'y a pas de détection confirmée.	117
8	Système photométrique de Johnson-Morgan. La première colonne est le nom donné au filtre, la deuxième colonne correspond au pic de longueur d'onde dans lequel le filtre absorbe le plus et la troisième correspond au rapport de la bande considérée par rapport à la bande visuelle V.	126
9	Table des paramètres spectroscopiques utilisés dans SynthIceSpec	171
10	Suite.	172