

UFR SCIENCES & TECHNIQUES COTE BASQUE
Université de Pau et des Pays de l'Adour

Licence de Physique-Chimie

COMPLEXITE MOLECULAIRE DANS LE COEUR PROTO-STELLAIRE MASSIF DE W43-MM1

MAIOLO Aurélia

**Stage effectué du 02 Avril au 25 Mai 2018 au Laboratoire d'Astrophysique de Bordeaux,
Allée Geoffroy Saint-Hilaire, 33615 PESSAC CEDEX
sous la direction de Nathalie BROUILLET et Jordan MOLET.**



"Le présent rapport constitue un exercice pédagogique qui ne peut en aucun cas engager la responsabilité de l'Entreprise ou du Laboratoire d'accueil"

TABLE DES MATIERES

I – Introduction	3
1. Présentation du LAB	3
2. Contexte scientifique	4
3. Introduction à la spectroscopie de rotation	5
II – Outils utilisés	6
1. Cassis	6
2. Programme Superposition en python	9
3. Weeds sur Class	10
II – Analyse des résultats	11
1. Résultats globaux	11
2. Etude de cas : le formiate de méthyle CH_3OCHO	14
3. Seconde étude de cas : l'acétonitrile CH_3CN	16
Conclusion	19
Bibliographie	20
Annexes	23
Diagrammes de rotation	24
Superposition des raies	30

I - Introduction

1. Présentation du LAB

Le Laboratoire d'astrophysique de Bordeaux est un site de recherche situé sur l'allée Geoffroy Saint Hilare à Pessac depuis seulement quelques années, dirigé par M. BORDE Pascal. C'est une unité mixte de recherche (UMR) entre l'Université de Bordeaux et le Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS). C'est une composante de l'Observatoire Aquitain des Sciences de l'Univers (OASU). Ainsi, les principaux objectifs du laboratoire sont la recherche scientifique en astrophysique, la formation des étudiants et la diffusion des connaissances acquises au sein de l'établissement. Il est composé de cinq équipes de recherche :

- AMOR : Astrochimie moléculaire et origine des systèmes planétaires.
- ASP : Atmosphères et surfaces planétaires.
- ECLIPSE : Exoplanets, climates and planetary systems evolution.
- M2A : Métrologie de l'espace, astrodynamique, astrophysique.
- FS : Formation Stellaire.

C'est de cette dernière équipe dont font partie l'astronome adjointe Mme. BROUILLET Nathalie, et le doctorant M. MOLET Jordan qui m'ont supervisée durant mon stage.

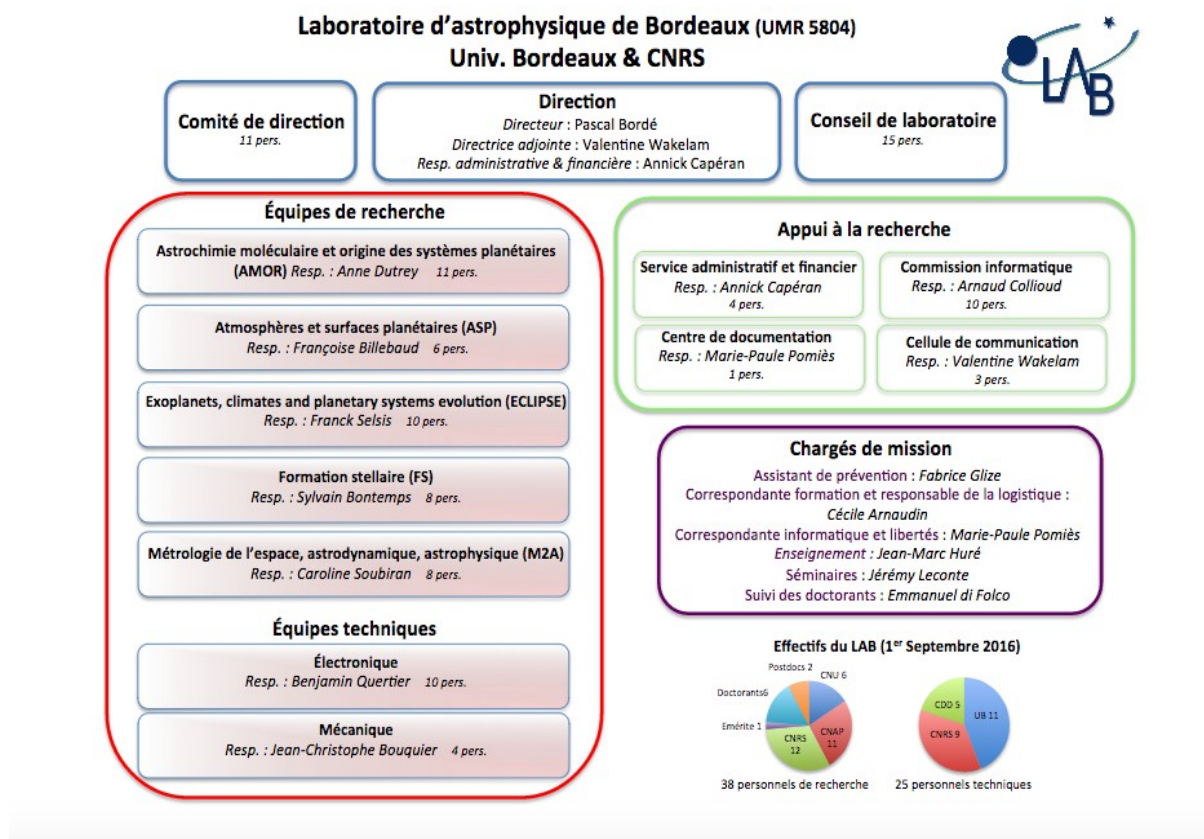


Figure 1: Organigramme du LAB (<http://astrophys.u-bordeaux.fr/presentation/>).

2. Contexte scientifique.

Déterminer les molécules présentes dans le milieu interstellaire est essentiel pour les chercheurs d'aujourd'hui car elles pourraient avoir un rôle primordial dans la formation des planètes et de l'apparition de la vie sur Terre. De nos jours, de nombreux nuages interstellaires sont étudiés dans le but de caractériser ces molécules et d'établir un lien avec les processus de formation.

Dans ce stage, je me suis consacrée à l'étude du contenu moléculaire¹ de la région W43 (Westerhout 43) de notre galaxie située dans la constellation de l'Aigle à environ 18 mille années lumière du Soleil, et plus particulièrement de W43-MM1, le fragment de ce nuage qui contient de nombreuses proto-étoiles massives. J'ai eu à ma disposition les données reçues par le radiotélescope de diamètre 30 m localisé en Espagne et appartenant à l'IRAM (Institut de Radioastronomie Millimétrique), à trois bandes de fréquence différentes : la première comprenant les fréquences entre 201 GHz et 272 GHz (longueur d'onde autour d'1mm) , la seconde entre 128 GHz et 177 GHz (longueur d'onde autour de 2mm) et la troisième 82 GHz et 117 GHz (longueur d'onde autour d'1mm) (voir figure 2). Le lobe de l'antenne dépend de la fréquence et la figure 5 présente la taille des lobes pour le nuage. Plusieurs sources d'émission continuum sont identiques et numérotées en fonction de leur intensité. J'ai donc traitées les différentes bandes sous forme de spectres¹ représentant l'intensité des raies (en K) en fonction de leur fréquence (GHz) (voir figures 4, 5, 6). Chacune des raies correspond à la transition d'une molécule, et mon travail a été d'identifier quelles sont ces molécules à l'aide de différents outils informatiques.

Dans ce rapport, je vais tout d'abord vous introduire la spectroscopie rotationnelle puis présenter les principaux outils que j'ai utilisé. Enfin, je vais exposer mes résultats globaux et rentrer dans les détails pour deux molécules, le formiate de méthyle et le CH₃CN.

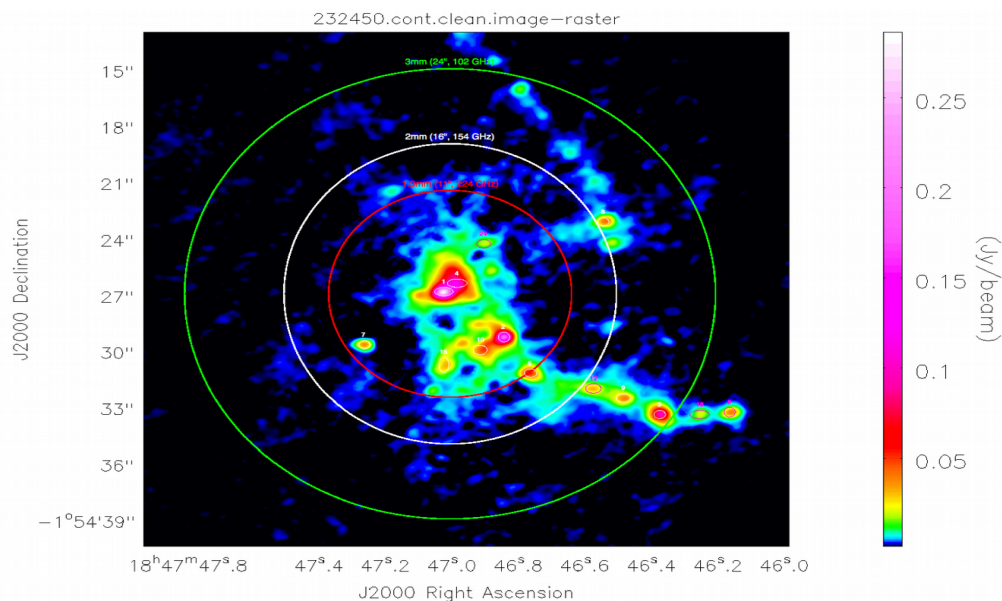


Figure 2: Carte représentant le nuage W43-MM1 et les lobes d'observations du télescope, d'après l'interféromètre ALMA. Les couleurs définissent le niveau de densité de flux (en Jy) par lobe. La taille des lobes a été déterminée d'après la relation HPBW (Half-Power Beam Width) [''] = $2460 / \text{freq [GHz]}$ (http://www.iram.es/IRAMES/telescope/telescopeSummary/telescope_summary.html).

1. À noter que sur les spectres ci-dessus, le signal est centré à zéro : l'émission continue spectralement du milieu interstellaire aussi appelée continuum a été soustraite. Je n'en ai donc pas tenu compte dans le déroulement de mon stage.

1.4 W43MM1 Unknown 30ME2----- 0:30-MAY-2017 R:17-APR-2018
 RA: 18:47:47.00 DEC: -01:54:27.0 Eq 2000.0 Rad. 0.0° Offse +0.0 +0.0
 Unknown tau: 0.090 Tsys: 270. Time: 2.16E+03min El: 23.9
 N: 359244 IQ: 47524.9 VQ: 98.00 Dv: -0.2784 LSR
 FQ: 210370.000 Df: 0.1954 Ff: 223012.988

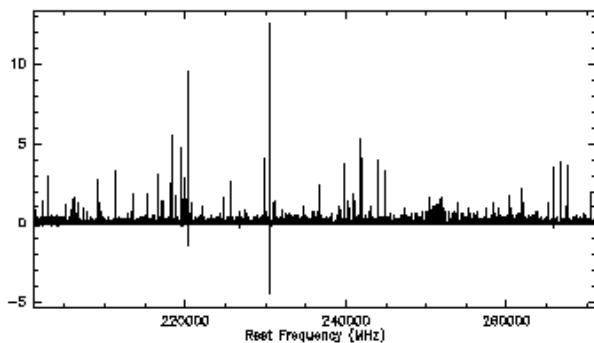


Figure 4: Spectre à 1 mm.

2.4 W43MM1 Unknown 30ME1----- 0:28-MAY-2017 R:17-APR-2018
 RA: 18:47:47.00 DEC: -01:54:27.0 Eq 2000.0 Rad. 0.0° Offse +0.0 +0.0
 Unknown tau: 0.101 Tsys: 161 Time: 2.44E+03min El: 29.1
 N: 247408 IQ: 27836.2 VQ: 98.00 Dv: -0.4388 LSR
 FQ: 133480.000 Df: 0.1954 Ff: 148072.318

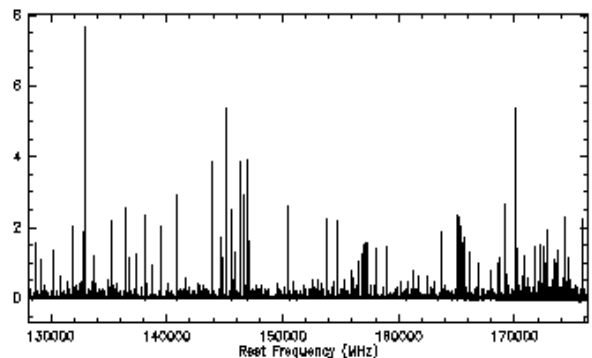


Figure 3: Spectre à 2 mm.

3.3 W43MM1 Unknown 30ME0-----FQ- 0:30-MAY-2017 R:17-APR-2018
 RA: 18:47:47.00 DEC: -01:54:27.0 Eq 2000.0 Rad. 0.0° Offse +0.0 +0.0
 Unknown tau: 0.054 Tsys: 110. Time: 1.23E+03min El: 43.9
 N: 179976 IQ: 27911.5 VQ: 98.00 Dv: -0.6658 LSR
 FQ: 87830.000 Df: 0.1954 Ff: 100380.148

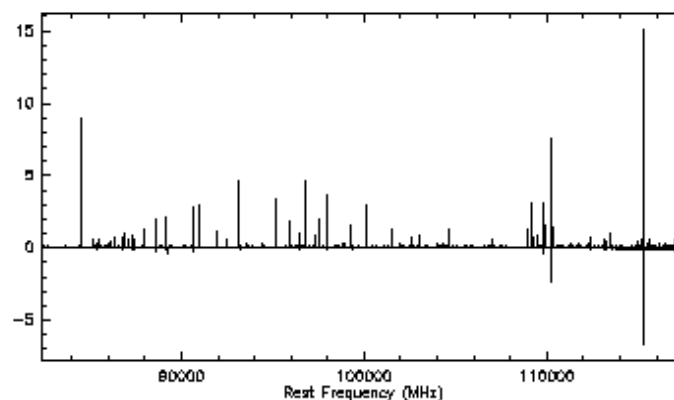


Figure 5: Spectre à 3 mm.

3. Introduction à la spectroscopie de rotation

Dans le milieu interstellaire, les molécules peuvent absorber ou émettre une onde électromagnétique et passer ainsi d'un niveau d'énergie de rotation (quantifié) à un autre, ce qui modifie leurs nombres quantiques de rotation. Ce sont ces transitions que l'on étudie dans la spectroscopie de rotation ici.

La spectroscopie de rotation nécessite qu'une molécule possède un moment dipolaire. L'énergie de rotation, et le moment angulaire de la molécule sont liés à son moment d'inertie. Pour une molécule quelconque, on définit trois moments d'inertie par rapport à trois axes orthogonaux. Selon les différentes structures des molécules, certaines classes sont définies, et deux

des trois moments d'inertie sont égaux pour chaque classe. Enfin, les nombres quantiques de rotation J et K sont associés respectivement à la projection du moment angulaire total de la molécule, et à celle du moment angulaire de l'axe ayant un moment d'inertie différent des autres.

Quelques autres termes propres à cette discipline doivent être mis à en place :

- Nous parlerons souvent du E_u , soit le niveau d'énergie supérieur des transitions (en K).
- Le A_{ij} est le coefficient d'Einstein, c'est un coefficient qui définit la probabilité pour que la transition se fasse d'un niveau d'énergie donné à un autre (en s^{-1}).
- La v_{lsr} correspond à la vitesse de la source (en km/s) par rapport à un référentiel suivant le mouvement moyen des étoiles au voisinage solaire.
- T_{ex} est la température d'excitation d'une molécule (en K).
- N caractérise la densité de colonne (en cm^{-2}) tandis que N_u la densité de colonne du niveau supérieur (en cm^{-2}).
- Enfin, g_u définit la dégénérescence d'un niveau.
- Toutes les mesures de taille se font en seconde d'arc (").

Lors des analyses, il faut prendre en compte la dilution dans le lobe, à chacune des bandes. On a considéré que la source d'émission moléculaire était plus grande que les lobes (30") et qu'il n'y avait pas d'effet de dilution.

II – Outils utilisés

Pour commencer, j'ai étudié la thèse de Sarah FECHTENBAUM sur l'Astrochimie de la protoétoile CygX-N63 (nuage situé dans la constellation du Cygne). Le début de ses travaux est similaire à ce que l'on cherchait à faire avec W43, et j'ai pris comme base la liste des molécules qu'elle a étudiées dans sa thèse. Je me suis ensuite servi du logiciel Cassis comme première approche pour la détection des raies.

1. CASSIS

Cassis (Centre d'Analyse Scientifique de Spectres Instrumentaux et Synthétiques) est un logiciel développé en 2005 par CESR/IRAP (<http://cassis.irap.omp.eu/>). Il est utilisé pour analyser des spectres donnés, trouver les molécules qui interviennent dans l'apparition des raies, déterminer les paramètres de la source étudiée, ou encore réaliser un spectre synthétique et le comparer au spectre initial. Cette dernière fonction est basée sur la supposition de l'équilibre thermodynamique local des molécules (LTE) d'après le code Radex. Je ne l'ai cependant pas utilisée pour des raisons de rapidité.

Dans le cadre du stage, j'ai pu utiliser l'onglet **Line Analysis** (voir figure 6). Après avoir indiqué le spectre à étudier ainsi que le télescope d'où il provient, cet onglet permet de choisir une molécule dans des bases de données spectroscopiques telles JPL (Jet Propulsion Laboratory) ou CDMS (Cologne Database for Molecular Spectroscopy), et de fixer certains paramètres : une bande d'énergie E_u , la vitesse de la source v_{lsr} , la bande de fréquence choisie, et d'autres que je n'ai pas eu à changer. Pour chacune des molécules, j'ai pris une v_{lsr} à 98 km/s et une bande d'énergie allant de 0 à 500 K estimant que le nuage était relativement froid. À partir de cela, Cassis pointe les raies attendues de la molécule et affiche l'onglet **Line Spectrum** (voir figure 7). Chacune des raies est identifiée selon l'algorithme de Cassis.

Il a fallu que je choisisse les raies les plus significatives une par une, et utilise la fonction

« fit » sur chacune d'entre elles (voir figure 8). Cassis réalise alors une gaussienne sur la raie, et récolte ses caractéristiques : sa largeur en vitesse à mi-hauteur FWHM, sa vitesse, son intensité ... Ces données sont stockées sur un fichier Excel pour toutes les raies (voir tableau 1).

La seconde étape a été le **Rotational Diagram** (voir figure 9). D'après l'hypothèse d'Equilibre Thermodynamique Local (ETL), Cassis trace un diagramme de rotation soit $\log(N_u/G_u)$ en fonction de E_u/k_B d'après les équations suivantes :

$$N_u = \frac{g_u e^{-\frac{E_u}{k_B T}}}{Q(T)} N_T \quad \text{avec } N_T \text{ la densité de colonne totale, } Q(T) \text{ la fonction de partition rotationnelle et } k_B.$$

$$\text{Ainsi : } \ln\left(\frac{N_u}{g_u}\right) = \frac{-E_u}{k_B T} + \ln\left(\frac{N_T}{Q(T)}\right)$$

À l'ETL, le diagramme doit être une droite de pente $-\frac{1}{T}$ et d'ordonnée à l'origine $\ln\left(\frac{N_T}{Q(T)}\right)$.

Un diagramme de rotation significatif est un diagramme avec des points plus ou moins alignés. Le « fit » réalise donc une tendance des points et estime la densité de colonne et la température de la molécule. Lorsque certains points se démarquent des autres, j'ai examiné leurs caractéristiques sur le fichier Excel et parfois je les ai supprimés s'ils avaient une intensité de raie, une température, une vitesse trop anormale par rapport aux autres ou encore un Aij très faible, signe que la raie appartient en fait à une autre molécule.

J'ai fait tout cela sur toutes les molécules proposées dans le catalogue de la thèse de Sarah FECHTENBAUM.

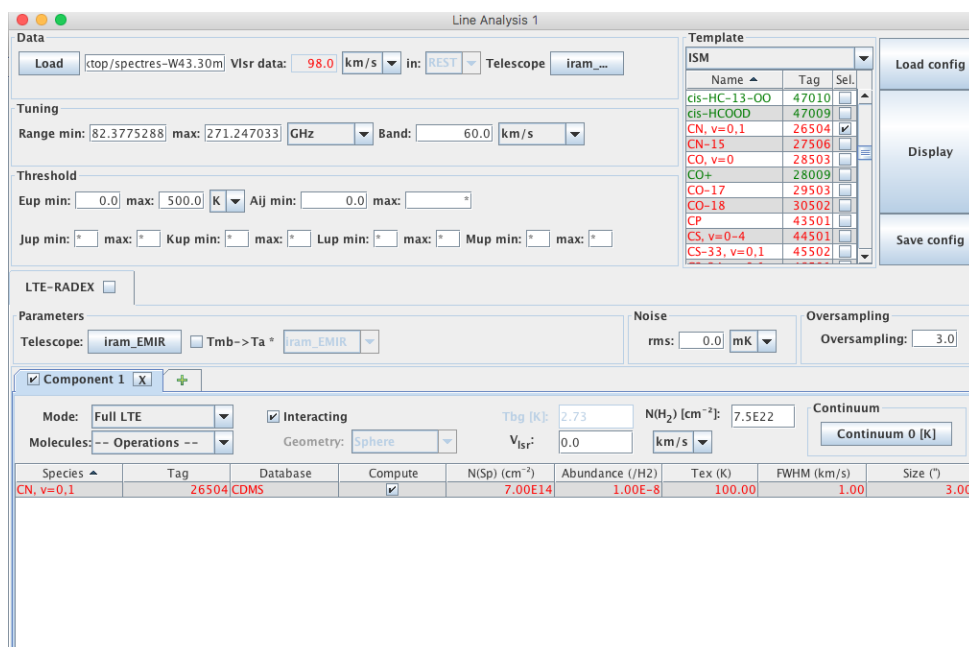


Figure 6: Line Analysis, Cassis.

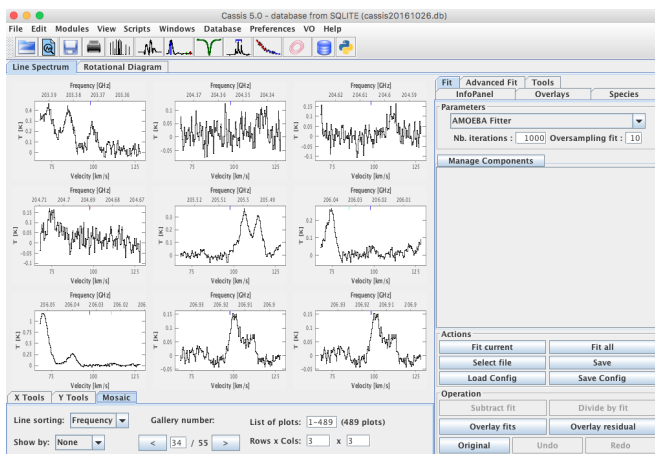


Figure 7: Line Spectrum, Cassis.

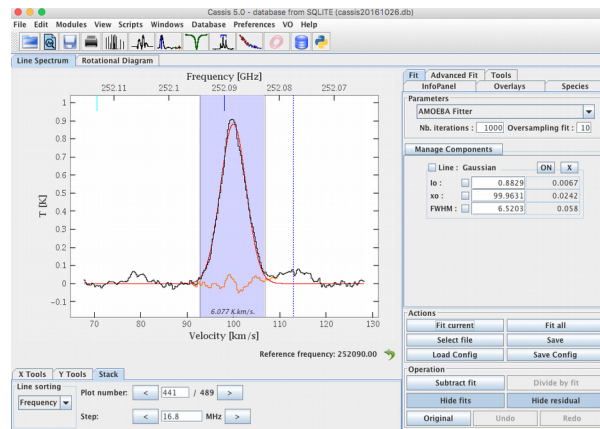


Figure 8: Line Spectrum et "fit", Cassis.

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36	37	38	39
id	version	NumComp	Species	Quantum	Nu	Frequency	Eup	Gup	Aij	FitFreq	DeltaFitFreq	Vo	deltaVo	FWHM_G	deltaFWHM	FWHM_L	deltaFWHM	Intensity	deltaIntensity	FitFlux	deltaFitFlux	Freq.Intensity	V.Ir															
None	None	None	None	None	None	None	None	None	s-1	Hz	Hz	km/s	km/s	km/s	km/s	km/s	km/s	km/s	km/s	km/s	km/s	km/s	km/s															
4	60003	2	CH3OCHO	(7 2 6 0, 6 2	84454.754	18.9814		30	0.00000796	84454.216	0.025	99.908	0.0887	6.3007	0.2482	0	0	0.0824	0.0022	0.5526	0	0.84453.962	100															
5	60003	2	CH3OCHO	(7 2 6 1, 6 2	84449.169	18.9808		30	0.00000796	84448.684	0.0245	99.722	0.0868	6.3932	0.2442	0	0	0.0804	0.0022	0.5472	0	0.84448.882	99															
6	60003	2	CH3OCHO	(7 3 5 0, 6 3	86265.796	22.5116		30	0.00000757	86265.232	0.0267	99.962	0.0929	7.1577	0.3404	0	0	0.0684	0.0016	0.5214	0	0.86265.102	100															
7	60003	2	CH3OCHO	(7 3 5 1, 6 3	86268.739	22.5274		30	0.00000757	86268.139	0.048	100.083	0.1669	6.5298	0.5103	0	0	0.0697	0.0033	0.4846	0	0.86268.032	100															
8	60003	2	CH3OCHO	(8 2 6 0, 7 2	103478.663	24.633		34	0.0000152	103477.917	0.0148	100.123	0.0429	6.2827	0.1095	0	0	0.1246	0.0018	0.8336	0	0.103477.869	100															
9	60003	2	CH3OCHO	(8 2 6 2, 7 2	103466.572	24.6491		34	0.0000152	103465.917	0.0173	99.898	0.05	6.2176	0.1252	0	0	0.1217	0.002	0.8055	0	0.103466.757	100															
10	60003	2	CH3OCHO	(9 1 8 0, 8 1	111682.189	28.1222		38	0.0000198	111681.396	0.0215	100.129	0.0576	6.5483	0.1548	0	0	0.1521	0.0029	1.0601	0	0.111681.234	100															
11	60003	2	CH3OCHO	(9 1 8 2, 8 1	111674.131	28.139		38	0.0000198	111673.303	0.0195	100.223	0.0525	5.97	0.132	0	0	0.1553	0.0028	0.9866	0	0.111673.029	100															
12	60003	1	CH3OCHO	(10 2 8 0, 9 1	129310.166	36.4328		42	0.0000306	129309.102	0.024	100.466	0.0555	5.2324	0.1464	0	0	0.1856	0.0038	1.0337	0	0.129308.796	103															
13	60003	1	CH3OCHO	(10 2 8 2, 9 1	129296.357	36.4476		42	0.0000306	129295.314	0.0596	100.418	0.1381	7.0086	0.3548	0	0	0.1817	0.0054	1.3553	0	0.129295.121	100															
14	60003	1	CH3OCHO	(11 1 10 0, 1	132928.736	40.3789		46	0.0000336	132927.655	0.0211	100.437	0.0475	5.8631	0.1301	0	0	0.1968	0.0032	1.2285	0	0.132927.678	100															
15	60003	1	CH3OCHO	(11 2 10 0, 1	130016.79	40.6977		46	0.0000312	130015.764	0.0305	100.366	0.0702	5.5751	0.1896	0	0	0.1956	0.0045	1.161	0	0.130015.42	100															
16	60003	1	CH3OCHO	(11 2 10 1, 1	130010.105	40.7138		46	0.0000312	130008.96	0.0233	100.641	0.0538	5.5964	0.1409	0	0	0.1909	0.0035	1.137	0	0.130008.777	103															
17	60003	1	CH3OCHO	(11 2 9 0, 1	141667.012	43.2317		46	0.0000406	141665.763	0.0117	100.642	0.0247	5.3818	0.064	0	0	0.2199	0.0016	1.2597	0	0.141665.625	100															
18	60003	1	CH3OCHO	(11 2 9 2, 1	141652.995	43.246		46	0.0000406	141651.7	0.0162	100.74	0.0342	5.8474	0.0905	0	0	0.2293	0.002	1.4273	0	0.141652.757	100															
19	60003	1	CH3OCHO	(11 3 9 0, 1	135101.627	48.9556		46	0.0000337	135100.482	0.0253	100.541	0.0561	5.715	0.1392	0	0	0.2018	0.004	1.2276	0	0.135100.296	100															
20	60003	1	CH3OCHO	(11 3 9 1, 1	135091.835	48.9701		46	0.0000337	135090.645	0.0181	100.642	0.0401	5.6507	0.1119	0	0	0.1989	0.0028	1.1962	0	0.135090.333	103															
21	60003	1	CH3OCHO	(12 1 10 0, 1	143240.505	47.2535		50	0.0000423	143239.2	0.009	100.731	0.0189	5.3189	0.0532	0	0	0.2345	0.0015	1.3279	0	0.143239.264	100															
22	60003	1	CH3OCHO	(12 1 11 2, 1	143234.201	47.2691		50	0.0000422	143232.936	0.0208	100.648	0.0436	5.8314	0.1091	0	0	0.2259	0.0034	1.4025	0	0.143232.817	100															
23	60003	1	CH3OCHO	(12 2 1 0, 1	141044.354	47.4668		50	0.0000402	141043.079	0.0172	100.711	0.0366	5.1662	0.1018	0	0	0.2142	0.0029	1.1781	0	0.141043.202	100															
24	60003	1	CH3OCHO	(12 2 1 1, 1	141037.702	47.4825		50	0.0000401	141036.452	0.014	100.656	0.0298	5.219	0.0788	0	0	0.2171	0.0023	1.2063	0	0.141036.364	100															
25	60003	1	CH3OCHO	(12 2 10 0, 1	153566.92	50.6217		50	0.000052	153565.522	0.0159	100.728	0.031	5.9966	0.08	0	0	0.2332	0.0026	1.3995	0	0.153565.502	100															
26	60003	1	CH3OCHO	(12 2 10 2, 1	153553.231	50.6153		50	0.0000519	153551.768	0.0141	100.856	0.0275	5.1826	0.0734	0	0	0.2382	0.0022	1.3141	0	0.153551.632	103															
27	60003	1	CH3OCHO	(13 1 12 2, 1	149065.24	54.6365		54	0.0000523	149063.57	0.0347	101.359	0.0699	5.7501	0.1911	0	0	0.0438	0.0011	0.2683	0	0.149065.394	100															
28	60003	1	CH3OCHO	(13 2 12 0, 1	151956.625	54.7595		54	0.0000505	151955.204	0.0118	100.803	0.0232	5.3147	0.0714	0	0	0.2451	0.002	1.3863	0	0.151955.33	100															
29	60003	1	CH3OCHO	(11 5 7 1, 1	135942.98	55.6101		46	0.0000292	135941.65	0.0168	100.933	0.037	5.2345	0.1015	0	0	0.1576	0.0021	0.8783	0	0.135942.7	100															
30	60003	1	CH3OCHO	(11 5 6 2, 1	135948.977	55.6247		46	0.0000292	135947.678	0.0208	100.864	0.046	5.3389	0.1473	0	0	0.1516	0.0025	0.8616	0	0.135947.776	100															
31	60003	1	CH3OCHO	(12 4 9 0, 1	148805.941	56.8425		50	0.0000435	148804.538	0.0152	100.826	0.0305	5.6138	0.0852	0	0	0.2257	0.0022	1.3487	0	0.148804.34	100															
32	60003	1	CH3OCHO	(12 4 9 1, 1	148797.79	56.8548		50	0.0000435	148796.32	0.0265	100.962	0.0534	6.3938	0.1444	0	0	0.2311	0.0038	1.5731	0	0.148796.526	100															
33	60003	1	CH3OCHO	(13 2 11 0, 1	164968.638	58.519		54	0.0000546	164967.108	0.0292	100.78	0.053	5.6036	0.1289	0	0	0.2484	0.0048	1.482	0	0.164967.012	100															
34	60003	1	CH3OCHO	(13 2 11 2, 1	164955.703	58.532		54	0.0000546	164954.174	0.0159	100.779	0.029	5.1415	0.0749	0	0	0.2572	0.0029	1.4076	0	0.164954.118	100															
35	60003	1	CH3OCHO	(14 1 13 0, 1	163835.525	62.484		58	0.0000637	163833.955	0.018	100.872	0.033	5.4323	0.0991	0	0	0.2464	0.003	1.4249	0	0.163833.718	103															
36	60003	1	CH3OCHO	(14 1 13 2, 1	163829.677	62.4991		58	0.0000637	163828.106	0.0217	100.876	0.0397	5.6241	0.1209	0	0	0.2441	0.0033	1.4613	0	0.163827.857	103															
37	60003	1	CH3OCHO	(14 2 13 0, 1	162775.275	62.5714		58	0.0000624	162773.772	0.0167	100.769	0.0308	5.9173	0.0913	0	0	0.2898	0.003	1.8254	0	0.162773.49	100															
38	60003	1	CH3OCHO	(15 1 14 0, 1	174215.556	70.845		62	0.000077	174213.924	0.0245	100.808	0.0422	5.7407	0.1292	0	0	0.2806	0.0041	1.7147	0	0.174213.681	103															
39	60003	1	CH3OCHO	(15 1 14 2, 1	174209.795	70.8598		62	0.0000769	174208.024	0.0187	101.048	0.0322	4.9385	0.1212	0	0	0.2936	0.0035	1.5434	0	0.174207.82	100															

Tableau 1: Données Excel du formiate de méthyle.

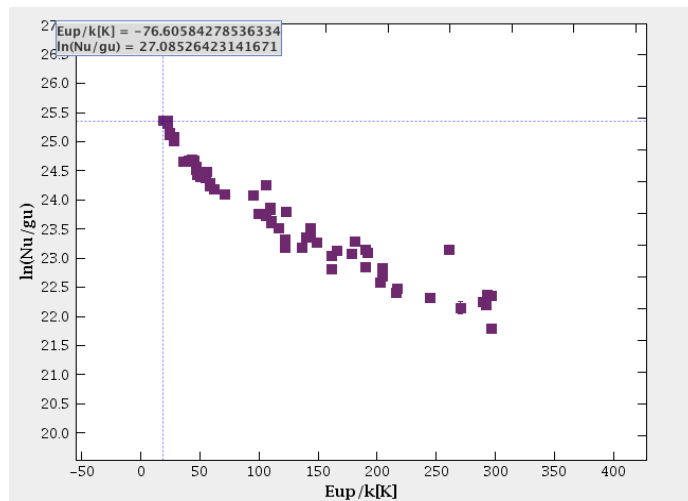


Figure 9: Exemple d'un diagramme de rotation réalisé sur Cassis (formiate de méthyle).

2. Programme Superposition en python

Ce programme a été écrit par Jordan Molet dans le but de pouvoir superposer toutes les raies correspondant à une molécule. J'ai utilisé la plateforme Spyder pour le lancer, et modifier certains paramètres.

Avant même de me servir sur le programme, j'ai ouvert le site Splatalogue, qui recueille des données spectroscopiques sur les molécules d'après les bases JPL, CDMS et bien d'autres. Pour une molécule donnée, j'ai récupéré les informations de chacune des raies attendues entre 82 000 MHz et 272 000 MHz sous forme d'un fichier que j'ai enregistré. Ce fichier correspond à la « database » que l'algorithme va utiliser pour sélectionner les raies sur les spectres à 1, 2 et 3 mm. J'ai ensuite modifié de nombreux paramètres tels que la bande d'énergie E_u , la vitesse des molécules par rapport à la source, le A_{ij} minimal des raies, et le nombre de canaux des raies.

Pour choisir la bonne vitesse correspondant à la molécule, je l'ai estimée d'après les données Excel récoltées grâce à Cassis.

Une fois tout cela fait, j'ai lancé le programme. Celui-ci normalise à 1 chacune des raies et les superpose entre elles. Il fait ensuite la somme des raies qu'il est possible d'afficher sur le graphique, et effectue un ajustement (« fit ») dessus, me fournissant ainsi la vitesse de la molécule et la largeur à mi-hauteur en vitesse des raies. L'utilité de l'algorithme est de vérifier le profil des raies. Si celles-ci se superposent entre elles, alors nous pouvons établir un profil correspondant à la molécule et valider les raies (voir figure 10). Sinon, les raies n'appartiennent probablement pas à la molécule étudiée mais à une autre : il s'agit de confusion.

L'objectif de cette partie était d'appliquer le programme pour toutes les molécules que j'avais étudiée sur Cassis, dans le but de comparer les résultats des diagrammes aux profils des raies. J'ai pu supprimer de nouveaux points anormaux sur le diagramme quand les raies ne se superposaient pas avec les autres sur le programme, et affiner un peu plus l'étude des molécules.

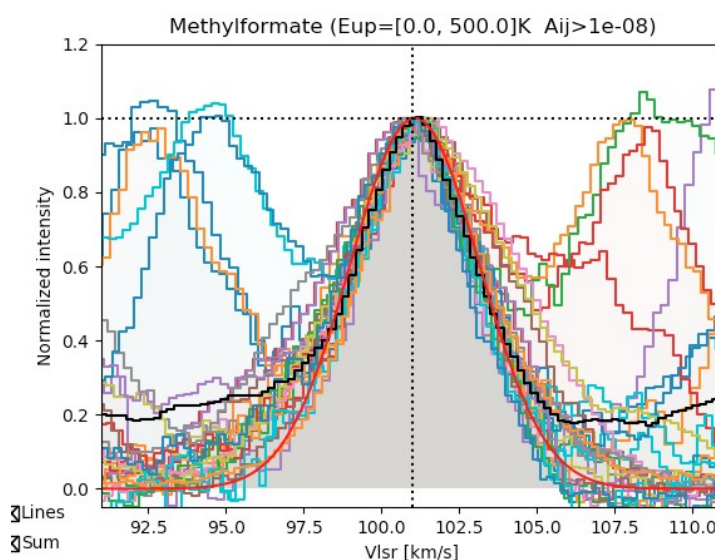


Figure 10: Exemple de superposition des raies avec le programme. La raie noire est la somme de toutes les raies, et la courbe rouge le « fit » que le programme réalise.

3. Weeds sur Class

Le dernier outil qui m'a été très utile est le package Weeds sur le logiciel Class de GILDAS développée par le laboratoire de Grenoble.

Class (Continuum and Line Analysis Single-dish Software) est un logiciel développé en 2006 permettant le traitement de données spectroscopique. Il a de nombreuses fonctionnalités, mais je me suis seulement servie de Weeds qui permet d'identifier les molécules et de réaliser des spectres synthétiques.

Tout d'abord, Class affiche le spectre donné. La fonction « **lid** » de Weeds permet d'identifier à quelle molécule est susceptible d'appartenir une raie. Avec « **lfind** » puis « **llist** » il est possible de déterminer toutes les raies appartenant à une seule molécule et de les lister selon certains critères (E_u , fréquence, A_{ij} ...). Cependant, j'avais déjà fait ce travail sur Cassis, ce ne sont donc pas les outils que j'ai principalement utilisés.

Mon intérêt s'est porté sur « **modsource** » et « **modshow** ». Le rôle de ces commandes est de tracer le spectre synthétique de chacune des molécules et de le superposer aux spectres recueillis par le radiotélescope de 30 m. Pour cela, j'ai créé un fichier « modèle » où j'ai indiqué le nom de la molécule à étudier pour chaque bande, sa densité de colonne et sa température d'après les données de Cassis, sa vitesse et sa largeur en vitesse d'après le programme de Superposition, et enfin la taille de la source (voir figure 11). À partir de ce fichier et d'une base de donnée (JPL, CDMS ...), **modsource** calcule le spectre synthétique de la molécule selon les paramètres du fichier. **modshow** l'affiche ensuite. Pour le superposer aux spectres du 30 m il faut en ouvrir un des trois, récupérer le spectre synthétique et le tracer avec la fonctionnalité « **spectrum** ».

Pour éviter de retaper les mêmes commandes pour chacune des molécules, j'ai utilisé deux programmes qui réalisent toutes ces manipulations pour une molécule donnée en changeant juste le nom de la molécule et le fichier modèle (voir figures 12, 13). J'ai défini des couleurs pour chacun des spectres synthétiques afin de pouvoir comparer les différents résultats.

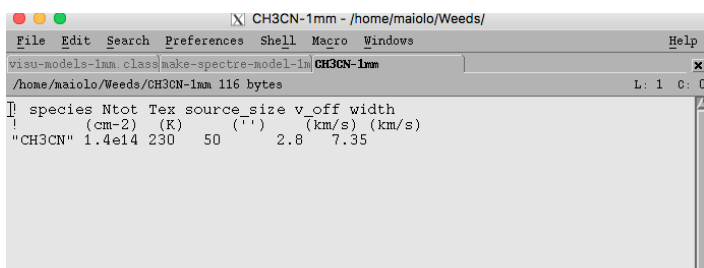


Figure 11: Fichier modèle du CH3CN.

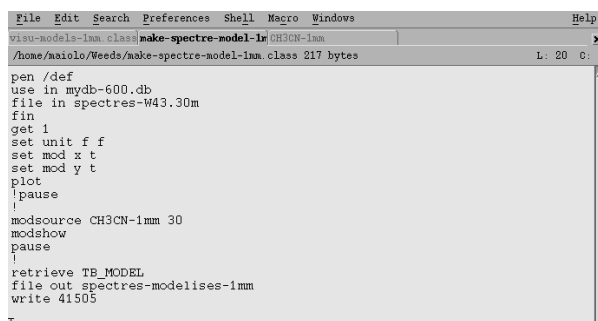


Figure 12: Programme réalisant les spectres synthétiques

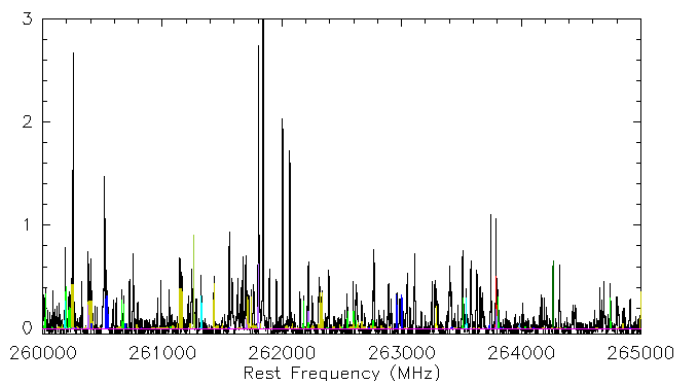


Figure 11: Superposition des spectres synthétiques sur une bande du spectre à 1 mm. Le spectre synthétique de chaque molécule est tracé dans une couleur différente.

```
File Edit Search Preferences Shell Macro Windows Help
visu-models-1mm.class make-spectre-model-1m CH3CN-1mm
/home/maio/Weeds/visu-models-1mm.class 816 bytes L: 12 C: 0

pen /def
lut penlutfile.zut /pen
set unit f f
file in spectres-W43.30m
fin
get 1
! set mod y t
set mod y -0.05 5
!set mod x 201000 272000
!set mod x 238000 240000 ! multiplet CH3CN 1mm
!set mod x 256000 258000 ! multiplet CH3CN 1mm
!set mod x 202000 204000 ! multiplet CH3CN 1mm
plot
!pause
file in spectres-modelises-1mm
fin
get 51501
pen /col 1
spectrum
```

Figure 12: Programme superposant les spectres synthétiques aux spectres du 30 m.

II – Analyse des résultats

1. Résultats globaux

Les diagrammes de rotation ont donnés plusieurs catégories de résultats différents :

Tout d'abord, le cas le plus récurrent et le moins intéressant est le nuage de points. Au lieu d'être alignés, on remarque que les points sont éparpillés sur tout le diagramme. C'est l'illustration de la confusion : la haute sensibilité du télescope entraine la détection d'un nombre élevé de molécules, il y a donc souvent confusion entre les raies. Le fichier Excel valide d'autant plus cette hypothèse car les vitesses observées sont très variables. En examinant le diagramme, nous pouvons en déduire que les points présents dans la partie haute avec un $\log(N_u/g_u)$ supérieur aux autres ne peuvent pas représenter la molécule étudiée. Ce phénomène intervient aussi pour de nombreux diagrammes qui présentent des points presque totalement alignés verticalement, ou bien d'autres avec des points alignés quasi-horizontalement. Pour ces types de diagramme, nous n'avons donc pas pu obtenir une densité de colonne et une température correctes. Nous avons vu cela pour l'acétone, le CH₂DOH, c-C₃H₇...

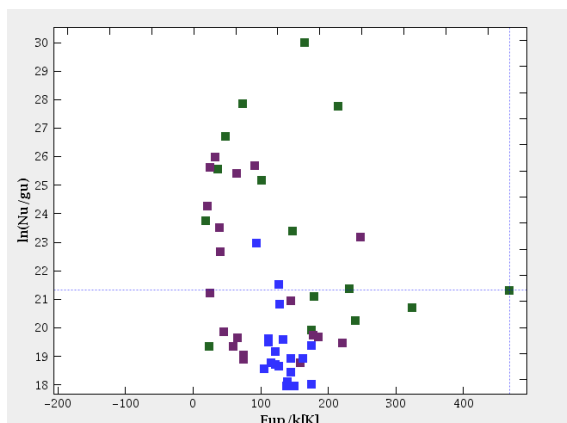


Figure 13: Diagramme de rotation du CH₃COCH₃.

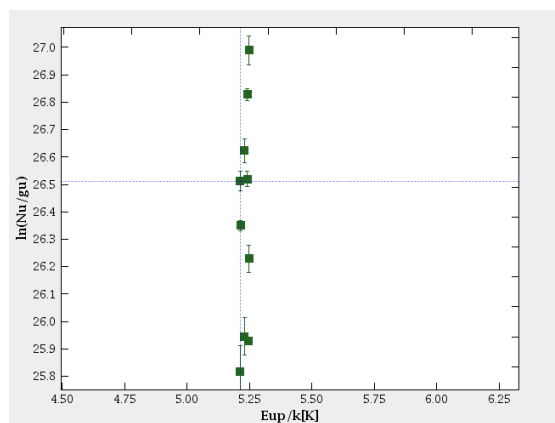


Figure 14: Diagramme de rotation du C-13-N

Pour d'autres molécules, le diagramme de rotation dessine deux pentes : les points correspondant au spectre à 3 mm forment une pente correspondant à une température relativement froide, tandis que les points à 2mm et 1mm une pente à une température d'excitation plus élevée. Cela peut s'expliquer par la présence de deux composantes d'une même molécule ; une enveloppe froide présente à 3 mm et un coeur chaud dans les lobes à 2 mm et 1 mm. Sur Excel, j'ai fait la médiane des vitesses des valeurs froides ainsi que celle des valeurs chaudes, et j'ai pu constater qu'elle était significativement plus élevée pour ces dernières. Au contraire la médiane des largeurs en vitesses est plus basse pour les données avec une forte température. J'ai retrouvé cette observation lorsque j'ai utilisé le programme de superposition : quand je changeais les bandes d'énergie (de 0-30 K et 30-500 K par exemple) j'ai pu voir qu'il y avait deux vitesses différentes lors de la superposition de ces raies.

C'est le cas pour le formiate de méthyle molécule très abondante dans le nuage, C₂H₅CN, ou CH₃CHO par exemple.

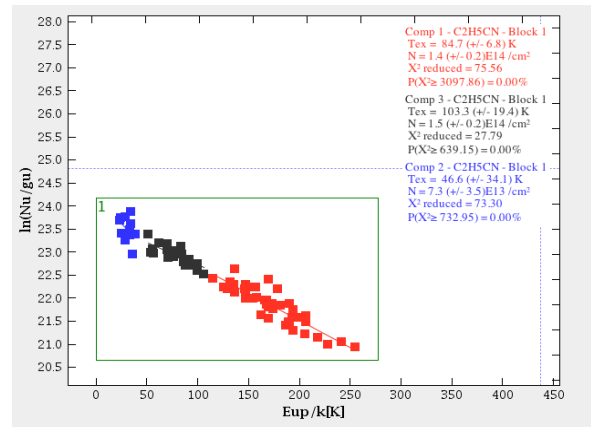


Figure 15: Diagramme de rotation du C₂H₅CN. Les composantes 1, 2 et 3 représentent respectivement les points des bandes à 1, 2 et 3 mm.

Ici, la pente à 3 mm ne paraît pas adaptée à la tendance des points, la température obtenue semble plus élevée qu'elle ne devrait être.

En ce qui concerne une majorité de molécules pas très abondantes comme les isotopes, on remarque que le diagramme présente quelques points (3 à 4 points) alignés avec une pente caractérisant une température très faible en 5 et 20 K. Dans ces cas là, souvent les raies des spectres 1,2,3 mm observées sur le programme de superposition sont décalées en largeur en vitesse (voir figure 19). Celles à 3 mm ont une largeur en vitesse plus élevée qu'à 2mm, et celles à 2mm supérieure à 1mm. Cela se justifie par la taille des différents lobes. Par exemple, le lobe à 3 mm étant plus grand capte plus de molécules avec des vitesses plus faibles. On voit cela pour le HCO-18+, HC-13-O+, HCN-15 ...

Enfin, nous avons une dernière tendance de pente, pour quelques molécules comme le CH₂CO, CH₃CCH, t-HCOOH, les températures avoisinent les 40-60 K (figure 21).

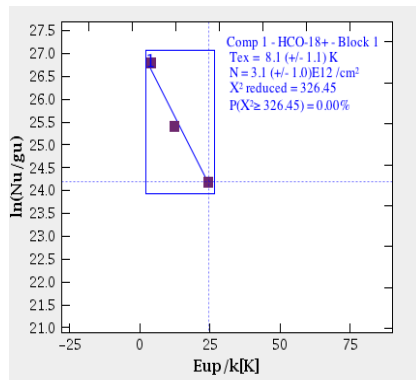


Figure 16: Diagramme de rotation du HCO-18+.

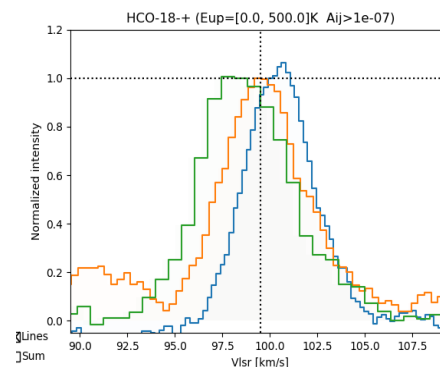


Figure 17: Superposition des raies du HCO-18+.

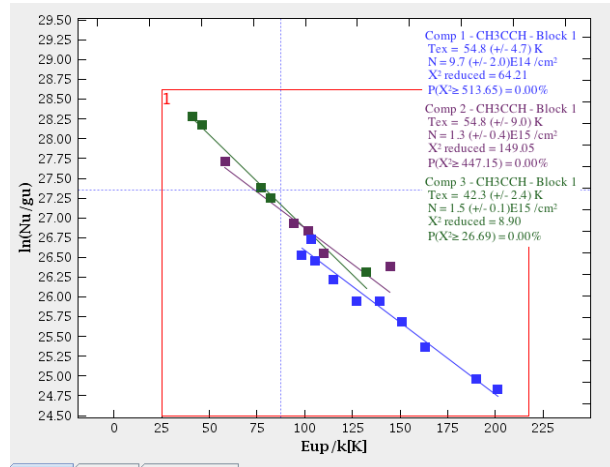


Figure 18: Diagramme de rotation du CH₃CCH, les composantes 1, 2 et 3 représentent respectivement les points des bandes à 1, 2 et 3 mm.

Au final, nous pouvons dire que les molécules observées sont relativement froides. Pour la plupart des cas, le programme de superposition confirme les diagrammes de rotation mais il arrive souvent aussi que les raies ne se superposent pas vraiment. Lorsque les raies sont contaminées, c'est à dire quand une autre molécule intervient dans une même raie, le profil de la raie est affecté, de même lorsqu'il y a beaucoup de confusion.

Je n'ai pas pu traiter des molécules à cause du bruit (rayonnement parasite dû à l'atmosphère et à la chaîne de réception), d'un manque de raies, ou encore de la procédure d'observation (HCN et HCO⁺ par exemple).

Sur Weeds, les diagrammes synthétiques sont globalement bien alignés en vitesse aux spectres du 30m.

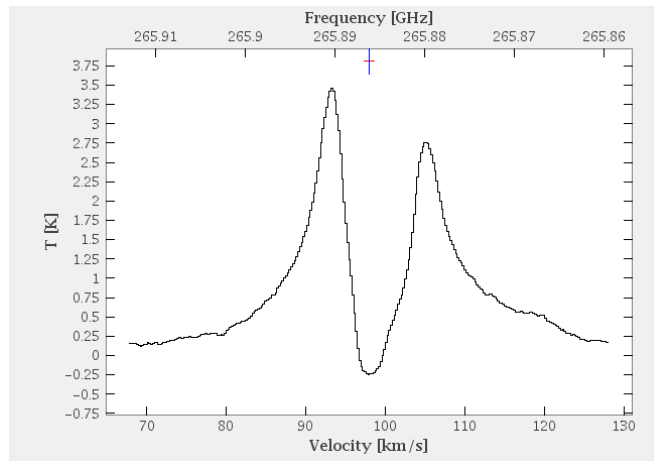


Figure 19: Raie du HCN, l'écart entre les deux pics est manifeste de la procédure d'observation qui n'est pas adapté aux molécules les plus abondantes.

Le tableau 2 présente les température et densité de colonne obtenues pour toutes les molécules étudiées en fonction des bandes de fréquence.

Tag	Molécule	Tex (K)			N (cm ⁻²)			vitesse (km/s)			largeur en vitesse (km/s)		
		1mm	2mm	3mm	1mm	2mm	3mm	1mm	2mm	3mm	1mm	2mm	3mm
42002	CH ₂ CO	69,1	71,9	67,3	1,30E+14	2,10E+14	2,50E+14	99,55	99,71	99,28	6,76	5,71	6,65
51501	HC ₃ N	65,5	33	30,1	4,40E+13	9,60E+13	8,60E+13	99,99	99,22	98,43	6,32	5,13	5,22
75503	HCSN	X	X	13,1	X	X	9,10E+13	X	X	101,66	X	X	4,01
31001	HCO-18+	8,1	8,1	8,1	3,10E+12	3,10E+12	3,10E+12	100,32	99,38	98,1	4,05	5,03	6,18
30002	HC-13-O+	9,9	9,9	9,9	9,00E+12	9,00E+12	9,00E+12	99,3	98,91	98,06	5,28	7,78	8,87
25001	CCH	7,3	7,3	7,3	9,90E+14	9,90E+14	9,90E+14	97,98	98,89	98,26	7,18	5,99	5,62
30005	H ₂ CO	126,6	126,6	X	1,70E+15	1,70E+15	X	101,39	100,46	100,16	5,3	6,73	7,33
40001	CH ₃ CCH	54,8	54,8	42,3	9,70E+14	1,30E+15	1,50E+15	99,74	99,39	99,02	5,19	4,7	5,01
26501	CDD	13,8	13,8	13,8	3,10E+13	3,10E+13	3,10E+13	X	X	X	X	X	X
31003	HDCO	19,5	19,5	X	1,10E+13	1,10E+13	X	99,91	98,46	X	4,83	4,81	X
45005	HCS+	19,8	19,8	X	1,30E+13	1,30E+13	X	99,79	99,35	X	4,62	4,98	X
45003	NH ₂ CHO	49,6	34,3	21,4	3,20E+13	3,30E+13	3,20E+13	101,28	100,78	100,9	5,81	6,69	6,72
19002	HDO	220	X	X	4,60E+14	X	X	101,32	101,31	X	5,18	4,7	X
28005	HNC-13	6,6	6,6	6,6	1,40E+13	1,40E+13	1,40E+13	98,37	98,06	97,83	4,53	6,09	6,03
28002	HC-13-N	14,7	14,7	14,7	8,30E+12	8,30E+12	8,30E+12	X	X	X	X	X	X
28004	DNC	10,9	10,9	X	1,20E+13	1,20E+13	X	X	X	X	X	X	X
29003	CH ₂ NH	56,4	83,7	59,8	1,00E+14	1,50E+14	1,80E+14	99,63	100,43	100,25	6,19	8,51	8,13
31583	p-H ₂ C-13-O	53,9	53,9	X	1,70E+13	1,70E+13	X	X	X	X	X	X	X
31593	o-H ₂ C-13-O	13,9	13,9	X	2,00E+13	2,00E+13	X	X	X	X	X	X	X
60003	CH ₃ OCHO	90,9	90,9	24,3	1,80E+15	1,80E+15	7,40E+14	101,08	100,83	100,49	4,89	4,99	6,06
32504	CH ₃ OH	138,6	229,2	94,1	9,20E+15	2,20E+16	6,80E+16	101,02	101	100,96	6,22	5,75	6,22
43510	HOCN	18,8	18,8	18,8	9,80E+11	9,80E+11	9,80E+11	98,96	98,96	98,96	7,34	7,34	7,34
28003	HCN-15	12,7	12,7	12,7	4,50E+12	4,50E+12	4,50E+12	99,99	99,99	99,99	15,78	15,78	15,78
46506	t-HCOOH	X	46,6	38,7	X	1,10E+14	1,30E+14	X	99,14	98,81	X	5,48	5,07
52509	HC-13-CCN	X	38,3	15,7	X	2,80E+12	5,20E+12	X	98,48	99,02	X	6,64	5,33
55001	C ₂ H ₅ CN	88,8	124,9	57,4	1,20E+14	1,40E+14	5,70E+13	101,26	100,98	100,82	4,15	5,34	5,98
44003	CH ₃ CHO	45,7	23,5	9,3	1,90E+14	2,40E+14	1,60E+14	100,34	99,08	98,85	5,52	5,38	5,3
45001	C-13-S	18	18	18	3,50E+13	3,50E+13	3,50E+13	99,56	99,56	99,56	9,15	9,15	9,15
45002	Si-29-O	7,9	7,9	7,9	3,20E+12	3,20E+12	3,20E+12	97,95	97,95	97,95	9,85	9,85	9,85
44504	Ethylene oxide	50	50	50	4,50E+13	4,50E+13	4,50E+13	100,5	100,5	100,5	6	6	6
45010	HOCO+	27,1	32,6	12,4	1,40E+13	2,30E+13	1,60E+13	X	98,95	98,55		4,93	5,87
45502	CS-33	19,3	19,3	19,3	1,70E+13	1,70E+13	1,70E+13	99	99,53	99,55	5,74	6,9	7,04
46001	CS-34	15,2	15,2	15,2	5,80E+13	5,80E+13	5,80E+13	98,75	99,39	99,58	8,04	6,96	5,59

Tableau 2: Données caractéristiques de chacune des molécules étudiées.

2. Première étude de cas : le formiate de méthyle CH₃OCHO

Le formiate de méthyle est une molécule complexe et relativement abondante dans le milieu interstellaire. C'est pourquoi il s'agit de la première molécule que j'ai traitée dans ce stage. Cassis a détecté 5664 (en plus des 1300 qu'il n'a pas réussi à lire) raies au total dans les spectres du 30 m et je n'ai gardé qu'un total de 92 points sur le diagramme.

J'ai tout d'abord procédé de la même manière que pour les autres molécules, j'ai effectué un **Line Analysis** et **Line Spectrum** sur chacune des raies qui me paraissaient significatives, puis j'ai fait le diagramme de rotation. Le nombre très élevé des raies a pourtant joué en ma défaveur car mon diagramme de rotation était dans un premier temps très confus. J'ai alors recommencé le travail, mais cette fois en sélectionnant seulement les doublets, pour être sûr de traiter des raies appartenant au formiate de méthyle. En effet, la particularité du formiate de méthyle est qu'il présente deux formes a et e. Ainsi lorsqu'une raie d'une des deux formes s'affiche sur le spectre, la raie de l'autre est présente à une fréquence très proche de la première et il apparaît comme un doublet. On reconnaît donc bien cette molécule grâce à ses doublets. Le diagramme obtenu avec seulement les doublets est beaucoup plus significatif, mais les raies ne vont pas au-delà de 200 K, ce qui n'est pas une habitude du formiate de méthyle qui se crée plutôt majoritairement en milieu

chaud. C'est pourquoi, j'ai rajouté les raies à fort E_u pour compléter le diagramme, ce qui nous donne le diagramme final (voir figure 20), avec ses 92 points.

Sur ce diagramme, on remarque que les points dessinent deux pentes principales : la première pente qui a une température à 24 K contient tous les points à 3 mm et la seconde tous les points à 1 et 2 mm. Nous sommes donc dans le second cas que nous avons étudié dans les résultats globaux. On remarque de plus que le profil des raies est différent lorsque le E_u est faible ou plutôt élevé. Pour l'un ou l'autre, la raie a une forme gaussienne sur un côté et une forme bombée du côté des plus faibles vitesses, indiquant la présence d'une 2ème composante en vitesse (voir figures 23, 24). Après toutes ces études, j'ai réalisé le spectre synthétique de la molécule sur Weeds qui paraissait très correct par rapport aux spectres du télescope.

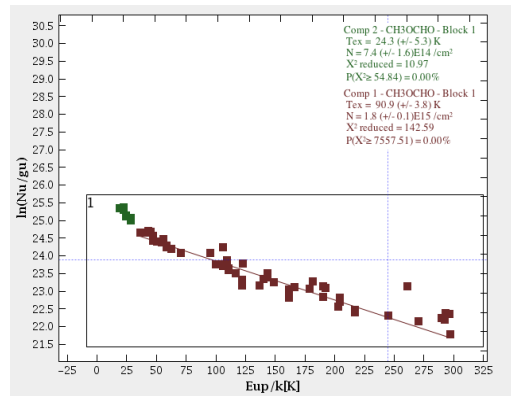


Figure 20: Diagramme de rotation du formiate de méthyle.

Tex (K)	24,3	90,9
Vo (km/s)	100,0	101,0
FWHM (km/s)	6,4	5,2

Tableau 3: Médianes des vitesses et largeurs en vitesse pour les points appartenant aux deux températures.

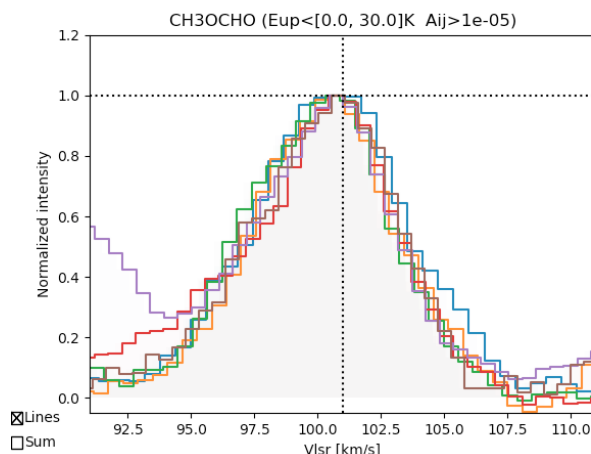


Figure 22: Superposition des raies du formiate de méthyle entre 0 et 30 K.

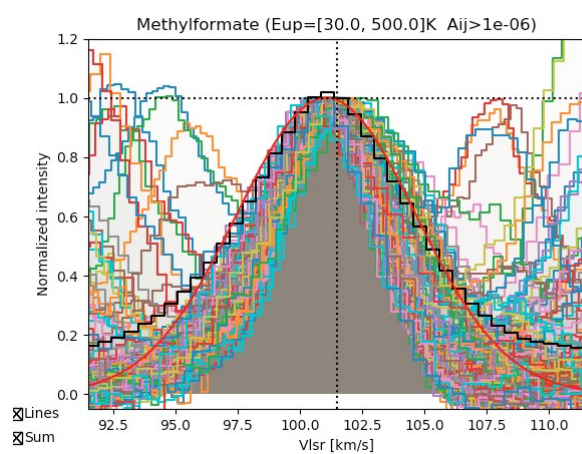


Figure 21: Superposition des raies du formiate de méthyle de 30 à 500 K.

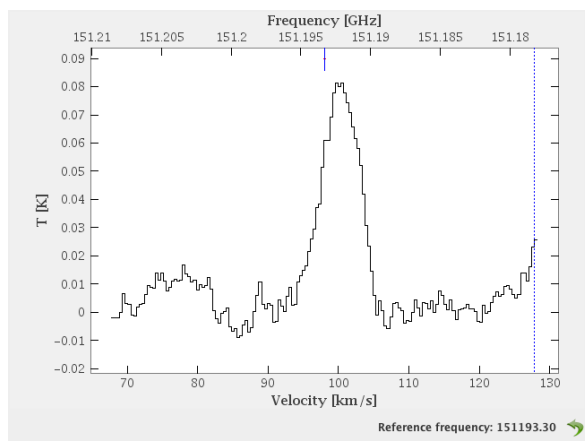


Figure 23 : Raie du formiate de méthyle présente à 241 K

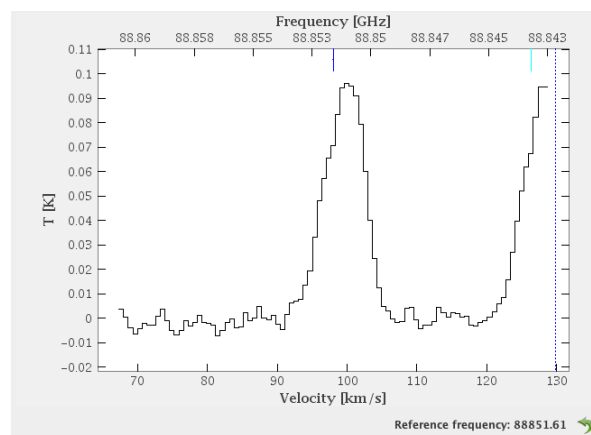


Figure 24 : Raie du formiate de méthyle présente à 17 K

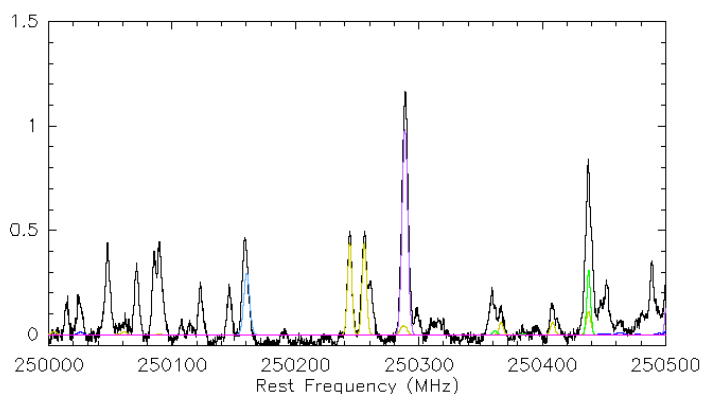


Figure 23: Spectres synthétiques superposés au spectre à 1 mm entre 250 000 MHz et 250 500 MHz. Le formiate de méthyle est représentée en vert pomme.

3. Seconde étude de cas : l'acétonitrile CH3CN

J'ai décidé de parler du CH3CN car c'est une molécule qui nous a beaucoup posé problème. Tout d'abord, lorsque j'ai analysé les raies sur Cassis, j'ai pu observer des multiplets sur le spectre et plus particulièrement des sextuplets. Cependant c'est en traçant le diagramme de rotation que la molécule a attiré notre attention. Effectivement, les points s'alignent mais forment 6 pentes différentes (voir figure 26). Pour essayer d'expliquer le diagramme, je me suis concentrée sur l'étude des vitesses et largeurs en vitesse de chacune des pentes. Sur une feuille à part, j'ai noté toutes ces données en différenciant les points des différentes pentes ainsi que les bandes à 1mm, 2mm et 3mm. En fonction des pentes, les vitesses moyennes sont très variables (voir tableau 4). De même en utilisant le programme de superposition on remarque que les raies se superposent pour différentes vitesses (voir figures 27, 28, 29).

L'explication de ce diagramme reste encore un peu flou, mais nous nous sommes aperçus que les points du diagramme de rotation changent de nombre quantique K (± 1) quand l'on passe d'une pente à une autre. L'hypothèse principale est que cela est dû à la structure de la molécule qui

est aussi liée à l'apparition des sextuplets.

J'ai isolé l'une des pentes, la troisième, et j'ai effectué un fit pour obtenir des valeurs de température et densité de colonne. Nous avons ajusté les valeurs aux spectres. À 230 K et à $1,4 \cdot 10^{14}\text{ cm}^{-2}$, le spectre synthétique est plutôt correct, même si selon les multiplets certaines raies restent trop intenses (figure 32)

Cette molécule est bien représentative des difficultés que l'on peut rencontrer dans le domaine de la recherche. Tous les résultats n'ont pas toujours une interprétation claire, et certains méritent une étude bien précise. Mon travail s'est pourtant arrêté ici pour cette étude de cas faute de temps et de connaissances.

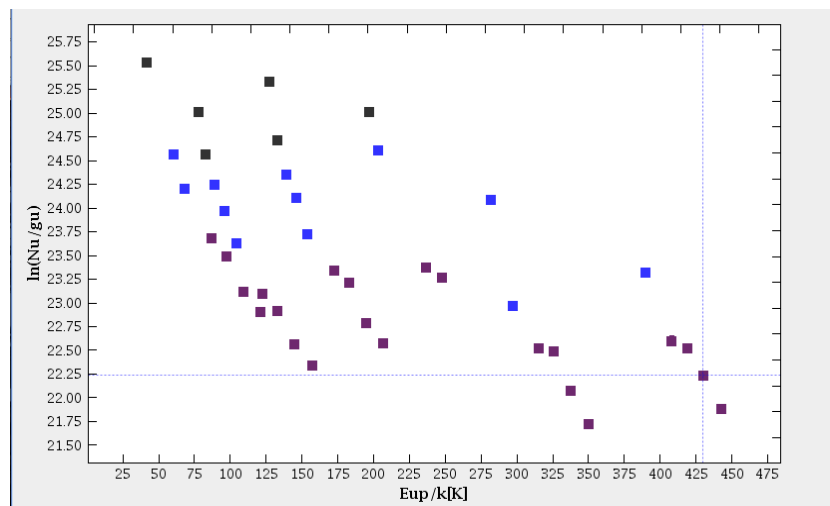


Figure 24: Diagramme de rotation du CH_3CN , le noir est associé aux points à 3 mm, le bleu à 2mm et le rouge à 1 mm.

	1ère pente		2ème pente		3ème pente		4ème pente		5ème pente		6ème pente	
	Vitesse (km/s)	FWHM M (km/s)	Vitesse (km/s)	FWHM (km/s)	Vitesse (km/s)	FWHM (km/s)	Vitesse (km/s)	FWHM (km/s)	Vitesse (km/s)	FWHM (km/s)	Vitesse (km/s)	FWHM (km/s)
1mm	99,8	7	99,35	8,1	100,75	7,7	101,65	9,2	100,7	7,2	101,33	6,3
	100,2	7,1	99,4	7,2	100,6	7,4	101,8	8,9	101	8	101,36	5,6
	100,3	7,5			100,8	7,3			100,6	8,2	101,4	5,8
	100,3	7,2			100,9	6,8			100,8	6,9	101	5,8
	100,3	7,6										
	100,5	7,3										
2mm	99,6	6,9	99,5	7,1	100,2	7,3	101,7	9,3	100,8	7,1	100,8	6,9
	99,7	6,5	99,7	6,9	100,2	7,5			101	6,5		
			99,9	7	100,6	7,1						
3mm	99,1	7,3	100	7,1	100,3	9,7	101,4	8,5				
			100,2	7,2	100,3	7,9						

Tableau 4: Etude des vitesses et largeurs en vitesse de chaque point selon les différentes pentes et bandes.

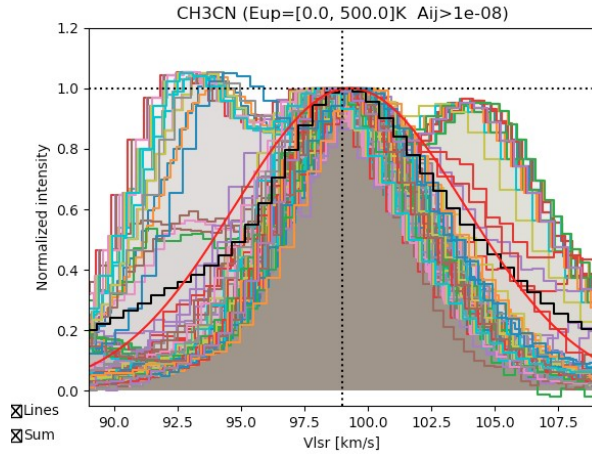


Figure 25: Superposition des raies du CH₃CN à environ 99 km/s.

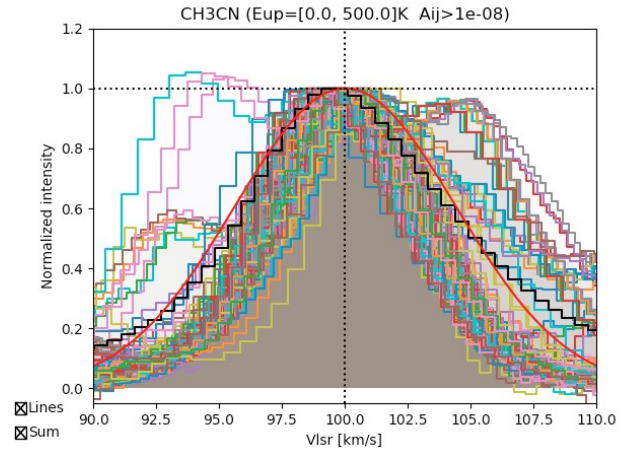


Figure 26: Superposition des raies du CH₃CN à environ 100 km/s.

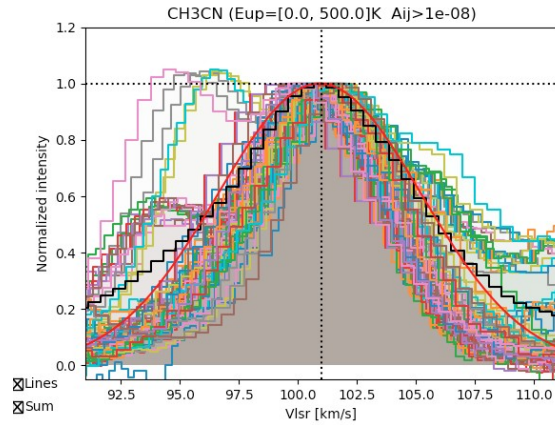


Figure 29 : Superposition des raies du CH₃CN à environ 101 km/s

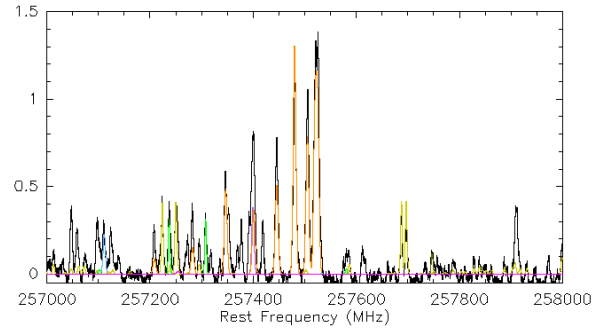


Figure 30 : Spectres synthétiques superposés au spectre du 30 m entre 257 GHz et 258 GHz. Les multiplets du CH₃CN sont en orange.

Conclusion

Lors de ce stage, j'ai pu étudier les caractéristiques de nombreuses molécules à partir des spectres du 30 m. On constate qu'il y a de nombreux résultats similaires et cohérents entre eux, mais beaucoup de mes analyses n'ont pas abouti à cause de la confusion, du bruit, de problèmes d'observation ... Nous pouvons discuter sur la fiabilité de certains résultats, et il faudrait réaliser un examen plus précis de quelques diagrammes de rotation, par exemple ceux qui ont beaucoup de points éparpillés. De plus, mon travail sur Cassis a été assez limité car j'ai choisi les raies très significatives. Une étude faite par quelqu'un de spécialisé dans le domaine aurait peut-être produit des diagrammes avec plus de points, et donc une analyse plus précise.

Même si mon stage se termine, mon travail ne l'est pas du tout. Toutes les raies des spectres n'ont pas été identifiées, des résultats restent encore à expliquer, et des ajustement à faire au niveau des données récoltées (température, densité de colonne, vitesse et largeur en vitesse ...) pour obtenir des spectres synthétiques qui collent parfaitement aux spectres du 30 m. Pour faire un bilan approximatif des raies découvertes, sur Weeds j'ai pu évaluer une proportion d'identification d'environ 35 % au total, il reste donc beaucoup de molécules à trouver.

Mon stage fut très enrichissant pour de nombreuses raisons. J'ai bien sûr acquis de nouvelles connaissances d'un point de vue scientifique et astrophysique, mais j'ai surtout appris des méthodes de travail qu'utilisent les chercheurs pour le traitement de données et dans l'utilisation de certains logiciels. Par exemple, Weeds nécessitait une certaine familiarité avec le terminal de l'ordinateur que j'ai obtenue au fil des jours. Au delà de ça, être dans un laboratoire pendant huit semaines m'a permis de mieux comprendre le milieu du métier associé, et les organisations qui s'en dégagent. J'ai pu échanger avec de nombreux chercheurs, mais aussi des doctorants et des stagiaires de tous niveaux, ce qui m'a permis d'éclaircir les différentes disciplines de la recherche en astrophysique ainsi que les études à poursuivre pour faire ce métier en laboratoire.

Bibliographie :

- *Conditions initiales de la formation des étoiles massives : Astrochimie de la protoétoile CygX-N63* 2015, thèse présentée par Sarah FECHTENBAUM
- *Radioastronomie* 2015, article écrit par François BIRAUD null NGUYEN-QUANG-RIEU
- <https://www.iram.fr/IRAMFR/GILDAS/>
- <http://cassis.irap.omp.eu/>
- https://fr.wikipedia.org/wiki/Spectroscopie_rotationnelle
- <https://www.cv.nrao.edu/php/splat/>
- <http://astrophysics.u-bordeaux.fr/>

Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier Nathalie BROUILLET pour m'avoir guidée dès le début du stage et ce jusqu'à la fin, avec toujours beaucoup de patience à mon égard. Merci aussi à Jordan MOLET pour ses nombreux conseils qui m'ont énormément aidée. Enfin, je remercie tous les autres membres du laboratoire avec qui j'ai eu de nombreuses discussions très instructives autant sur mon stage que sur mon orientation, les autres chercheurs, les stagiaires et les doctorants.

Résumé :

Mon stage s'est déroulé dans le Laboratoire d'astrophysique de Bordeaux (LAB), sous la direction de Nathalie BROUILLET et Jordan MOLET. J'ai étudié la complexité moléculaire du nuage W43-MM1 à partir de trois spectres avec des bandes de fréquences différentes, d'après les observations du radio-télescope de l'IRAM. Le but était de déterminer à quelles molécules appartiennent toutes les raies des spectres.

Dans un premier temps, j'ai identifié chacune des molécules sur les spectres et réalisé des diagrammes de rotation qui m'ont donné la densité de colonne d'une molécule donnée et à sa température d'excitation. J'ai de plus étudié le profil de vitesse de chaque molécule en superposant leur raie. Ainsi, j'ai pu comparer les raies superposées aux points du diagramme de rotation, et finalement accéder à la vitesse de la molécule et à sa largeur en vitesse à mi-hauteur. À partir de ces résultats, j'ai tracé les spectres synthétiques de toutes les molécules étudiées sur les spectres initiaux pour faire la comparaison.

Mes recherches m'ont permis d'identifier différents types de résultats et de comprendre les principaux obstacles du traitement de données radio-spectroscopiques. Enfin, j'ai beaucoup appris dans les démarches de la recherche dans le laboratoire et dans le fonctionnement lui-même de l'établissement.

Mots clefs : complexité moléculaire, spectres, radio-télescope, diagramme de rotation, densité de colonne, température d'excitation, vitesse, largeur en vitesse à mi-hauteur.

Abstract :

My internship in the Laboratoire d'Astrophysique de Bordeaux (LAB) was under the supervision of Nathalie BROUILLET and Jordan MOLET. I studied the molecular complexity of the W43-MM1 cloud with the data coming from the 30 m radio-telescope of the IRAM. I worked on three spectra with different frequency ranges, and I wanted to know what molecule a band belong to and properties of all molecules.

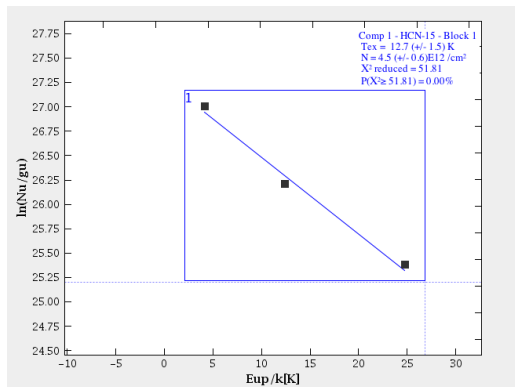
First of all, for each molecule, I identified its bands and made a rotational diagram which gave me the excitation temperature and the column density of the molecule. Then, I studied the profile of bands by overlaying them and I compared this with the points of the rotational diagram. The overlay enabled me to have the speed of the molecule, the half middle speed width, and with these data I plotted the synthetic spectrum of the molecule on the 30 m spectra.

When I did my researches, I faced to different results and to main hurdles of the radio spectroscopy data processing. Finally, I learned a lot about research procedures and the functioning of the laboratory.

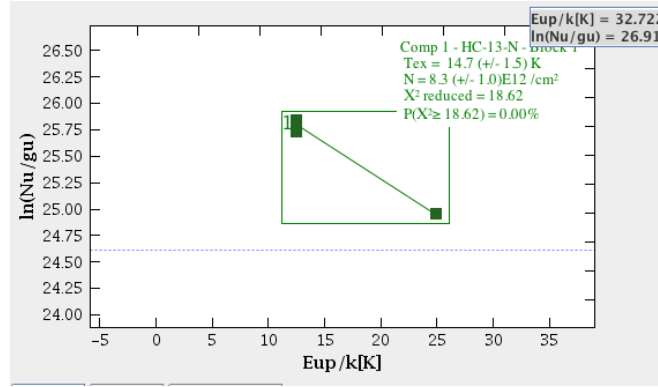
Key words : molecular complexity, three spectra, radio-telescope, rotationnal diagram, excitation temperature, column density, speed, half middle speed width.

Annexes

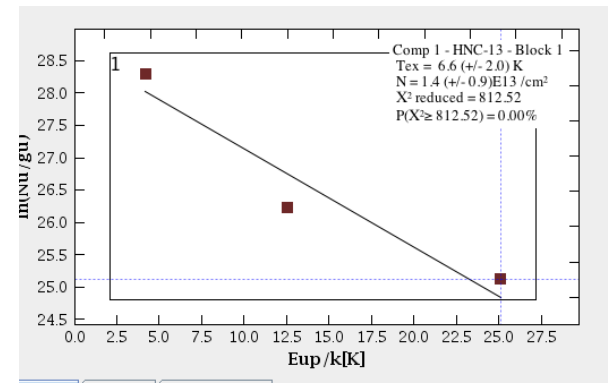
Diagrammes de rotation et
superposition des raies



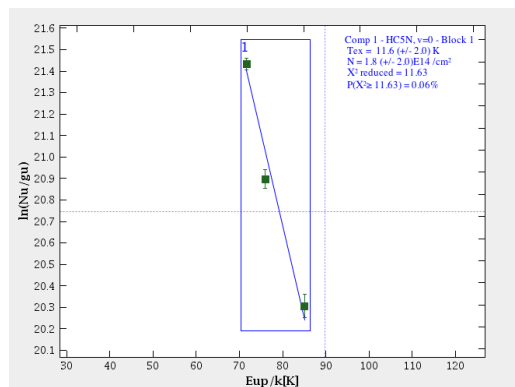
HCN-15



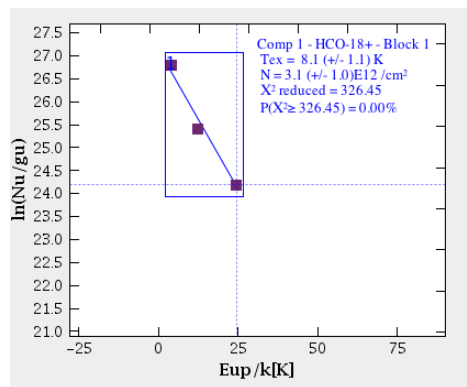
HC-13-N



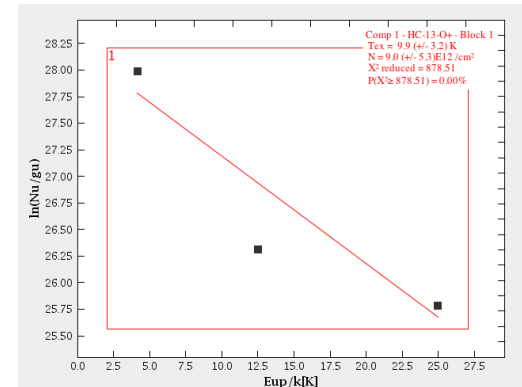
HNC-13



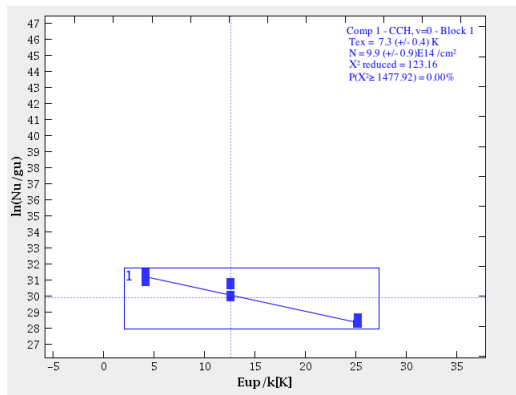
HC5N



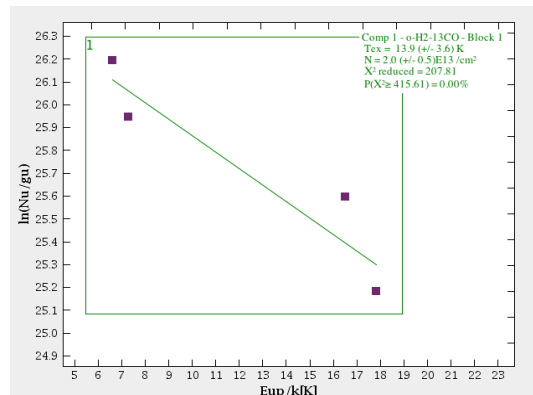
HCO-18+



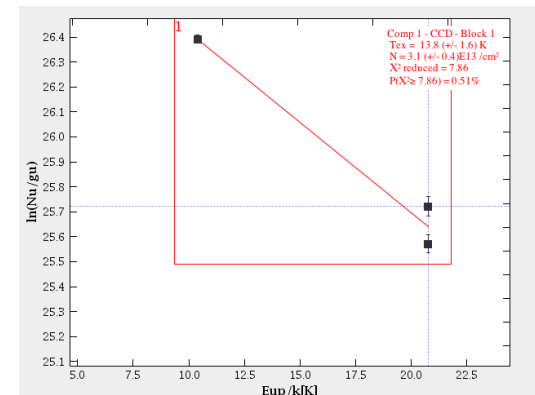
HC-13-O+



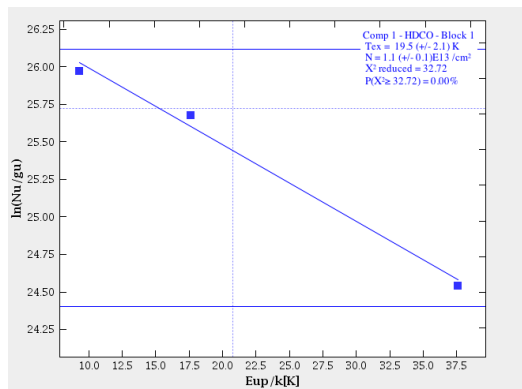
CCH



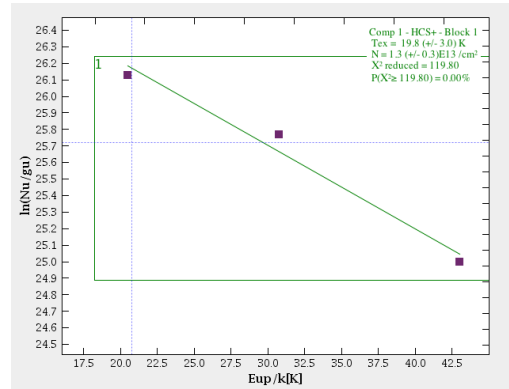
o-H2C-13-O



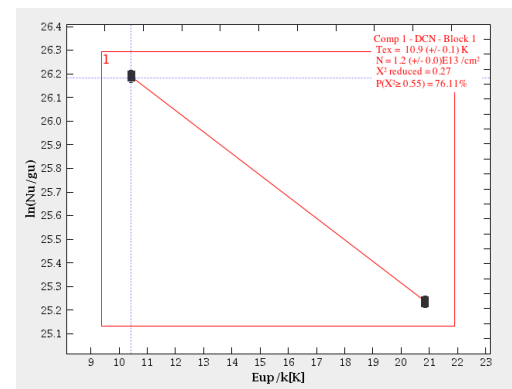
CCD



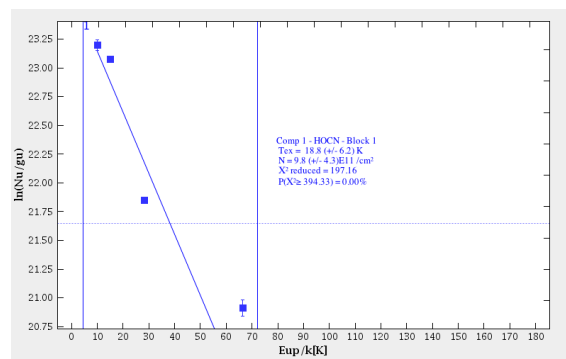
HDCO



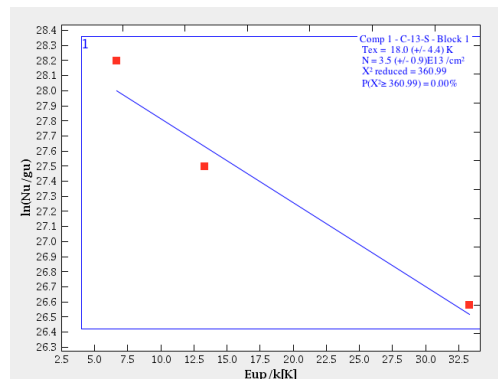
HCS+



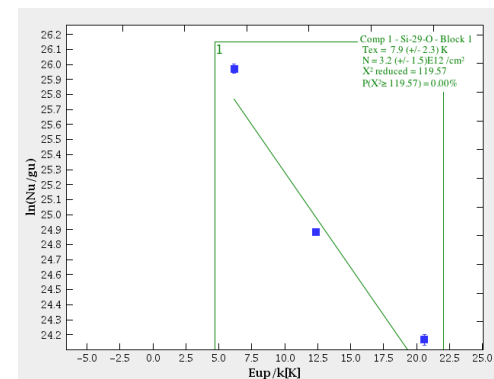
DNC



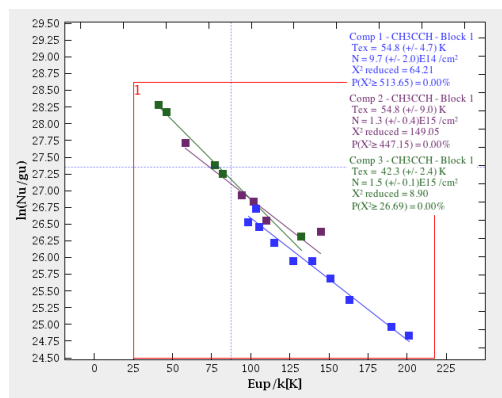
HOCN



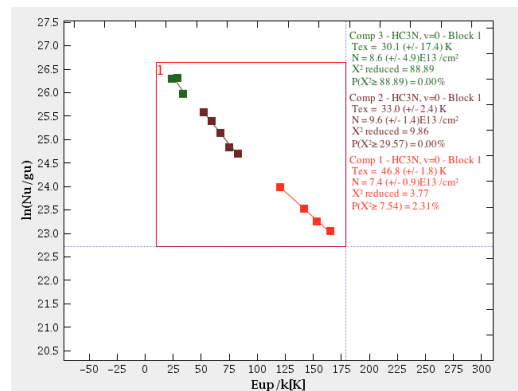
C-13-S



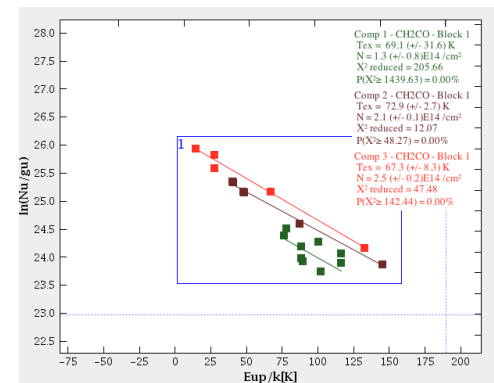
Si-29-O



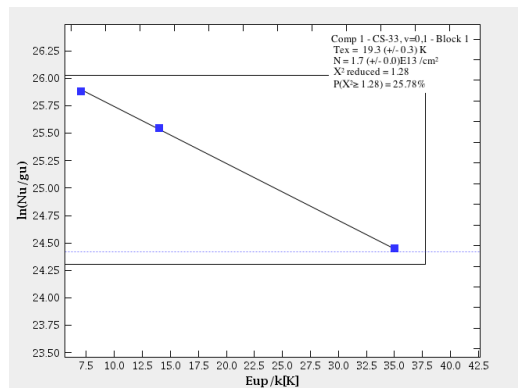
CH3CCH



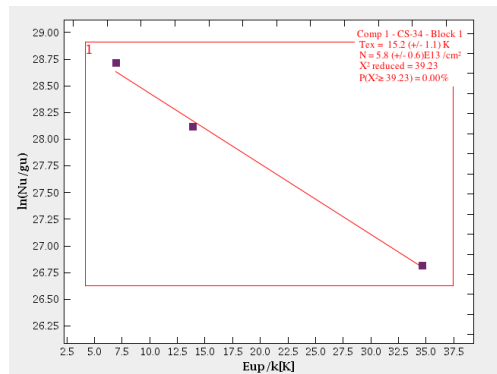
HC3N



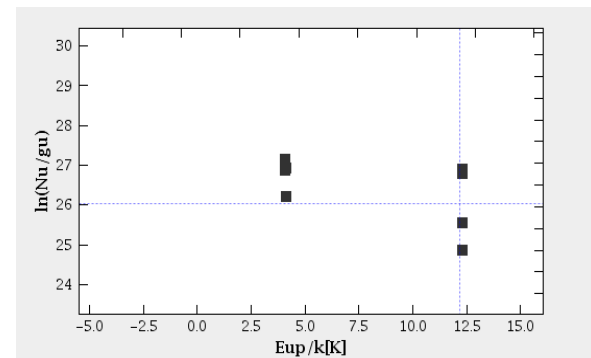
CH2CO



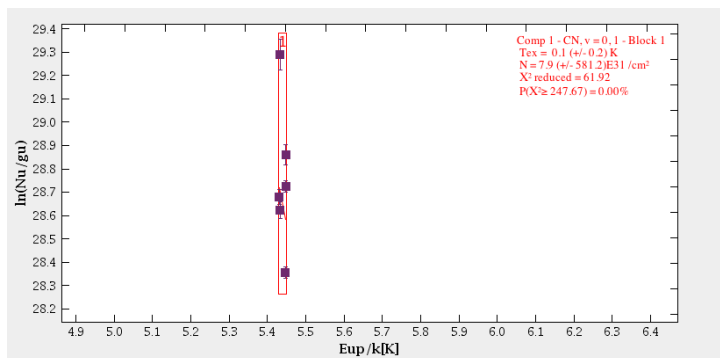
CS-33



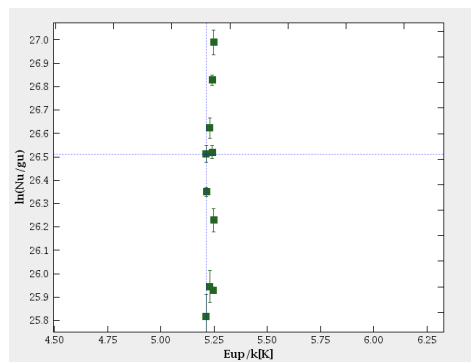
CS-34



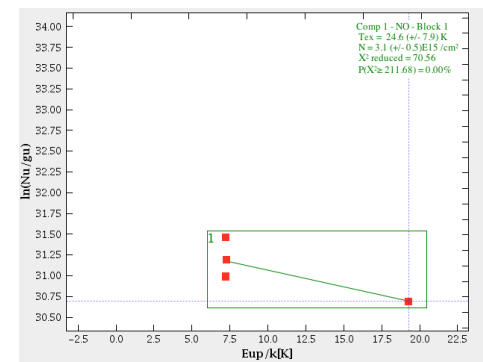
CC-13-H



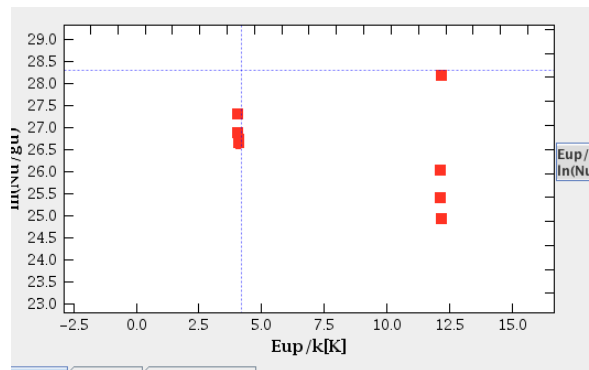
CN



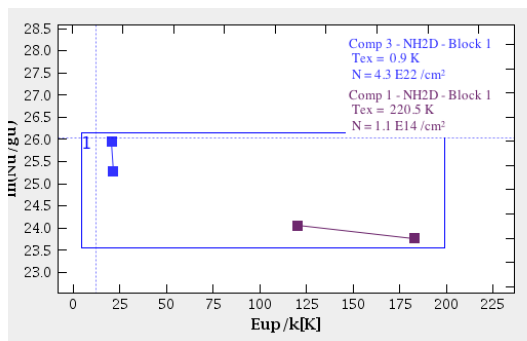
CN



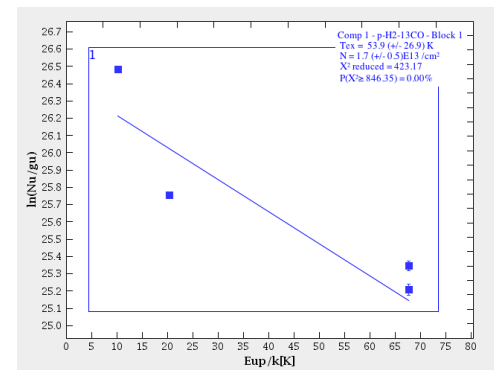
NO



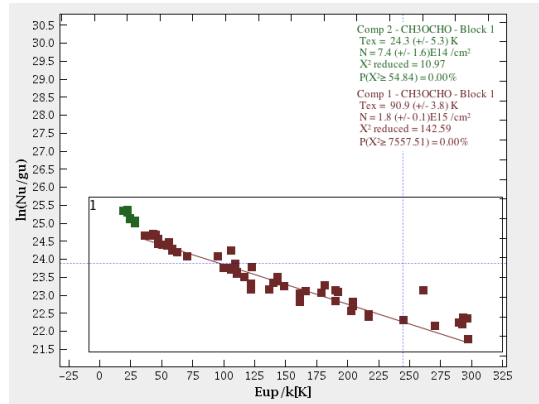
C-13-CH



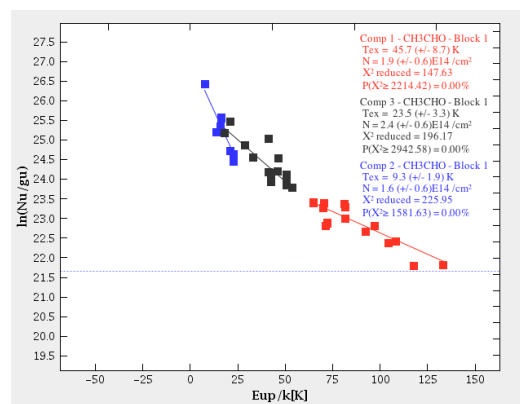
NH2D



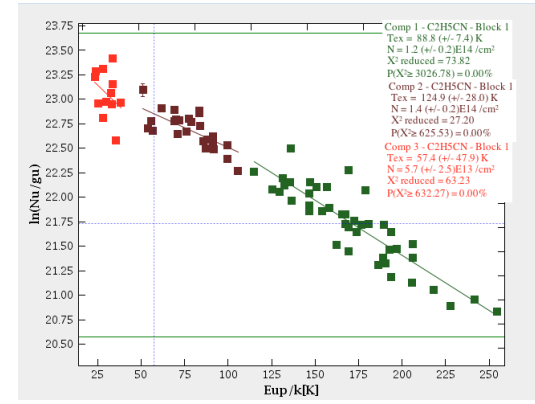
p-H2C-13-O



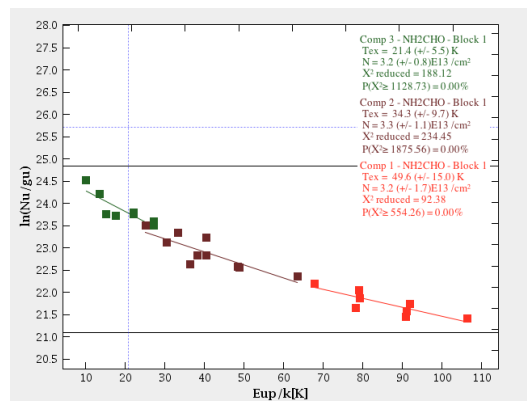
Méthylformate



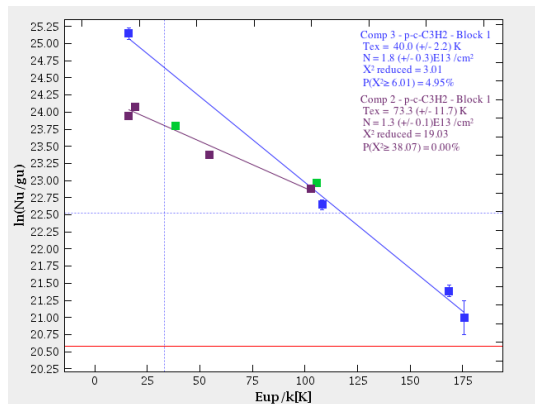
CH₃CHO



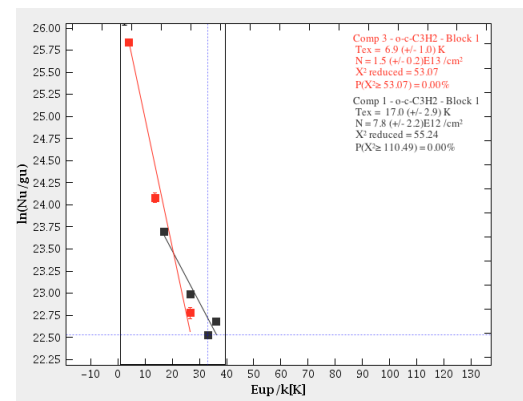
C₂H₅CN



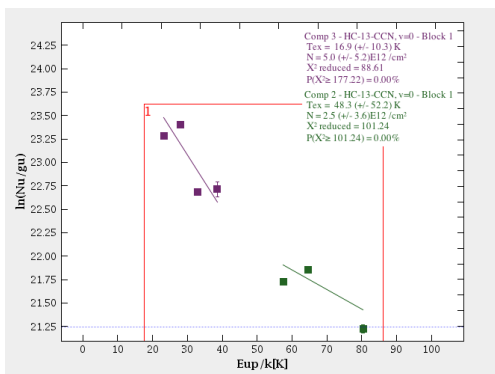
NH₂CHO



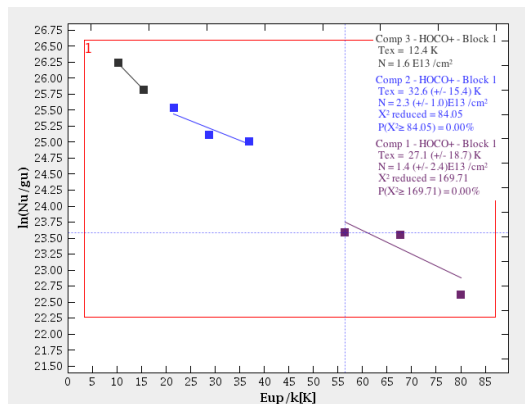
p-c-C₃H₂



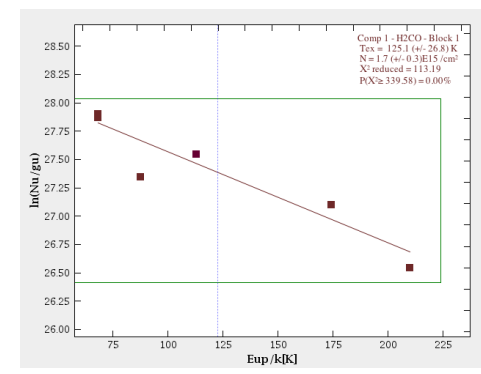
o-c-C₃H₂



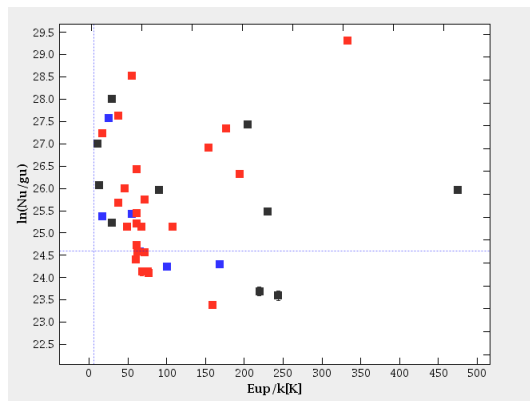
HC-13-CCN



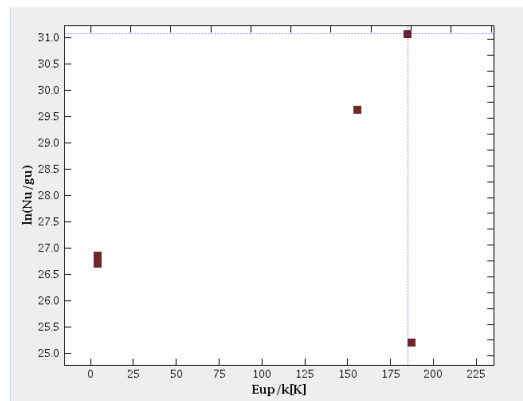
HOCO+



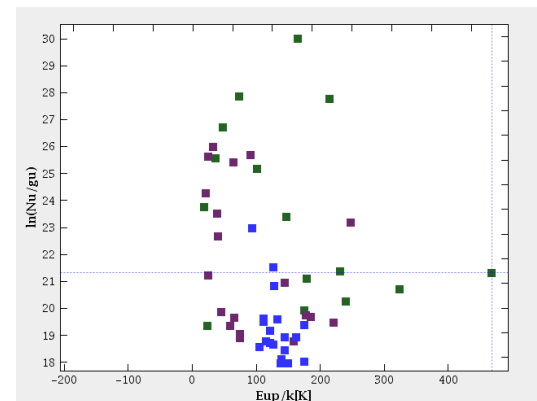
H₂CO



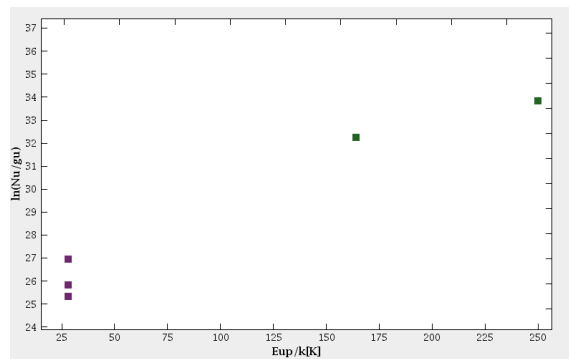
CH₂DOH



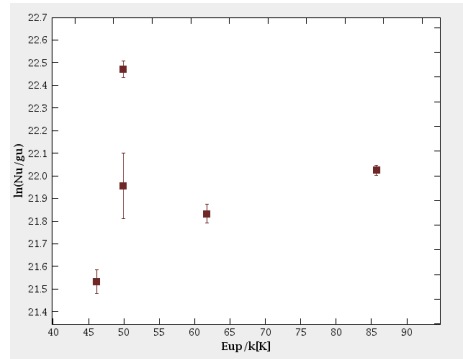
HCO



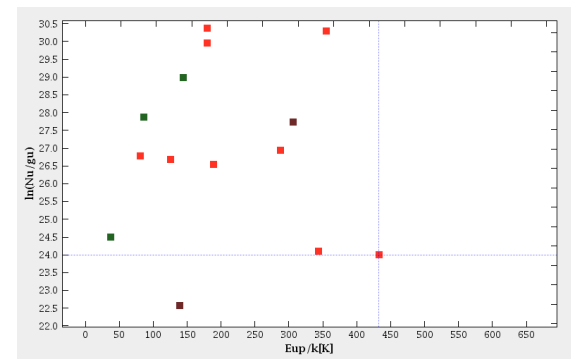
CH₃COCH₃



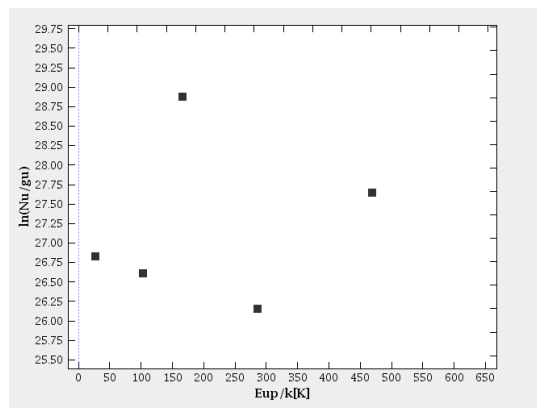
H₂S-33



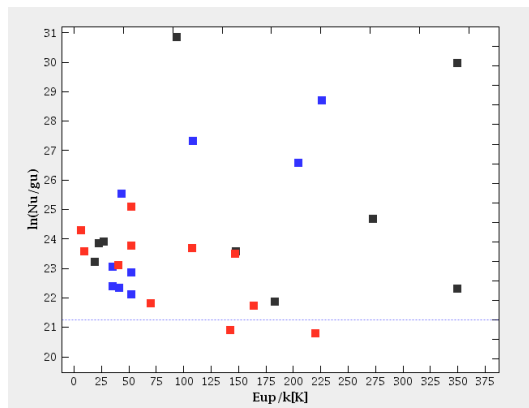
c-CH₃



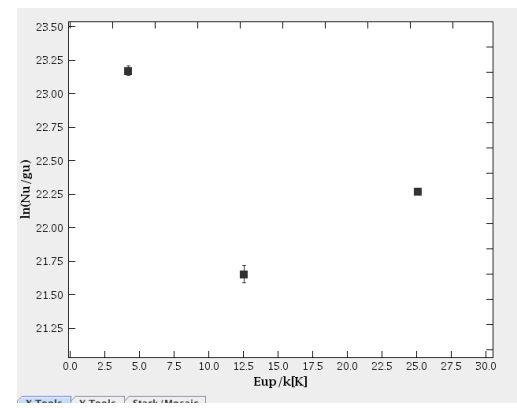
c-C₃HD



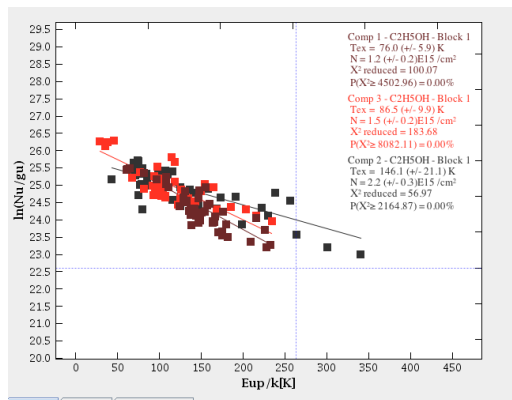
CH₂DCCH



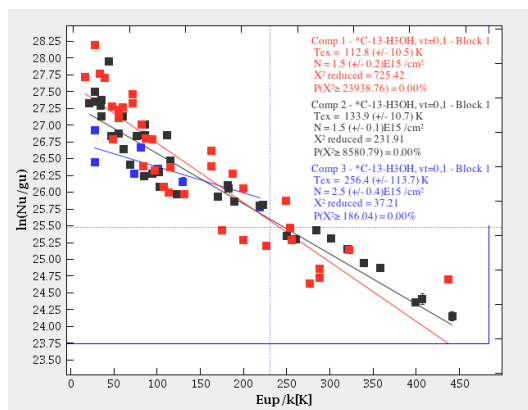
Ethylene oxide



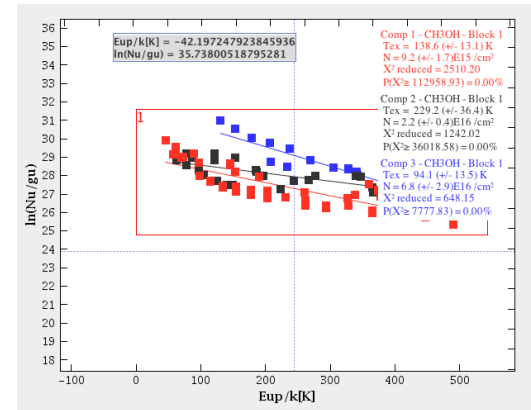
HCO-17+



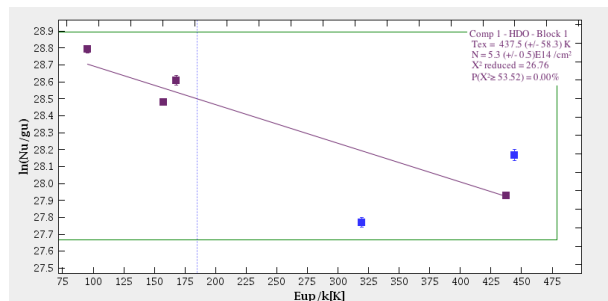
C2H5OH



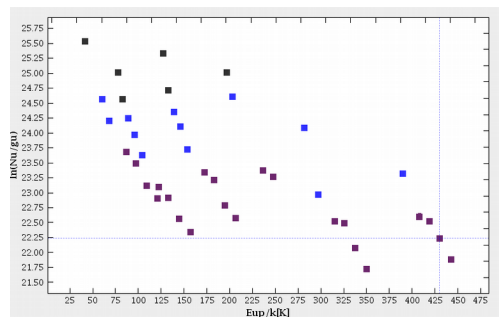
13-CH3OH



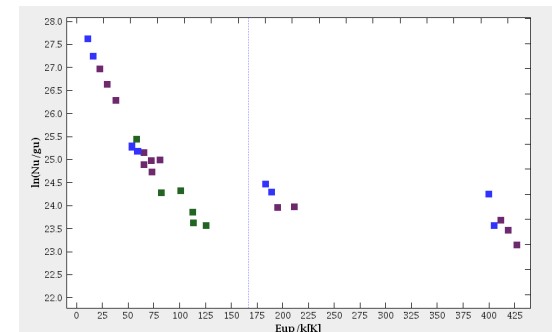
Méthanol



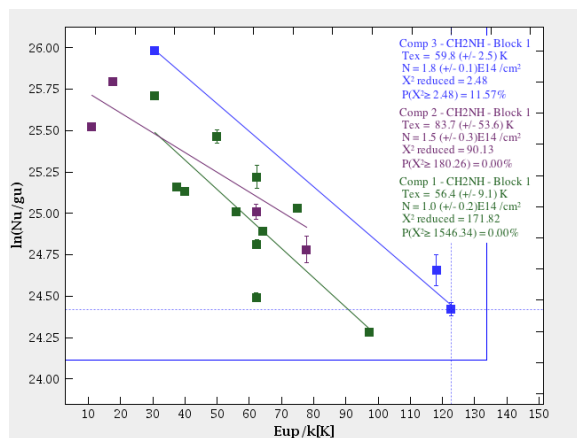
HDO



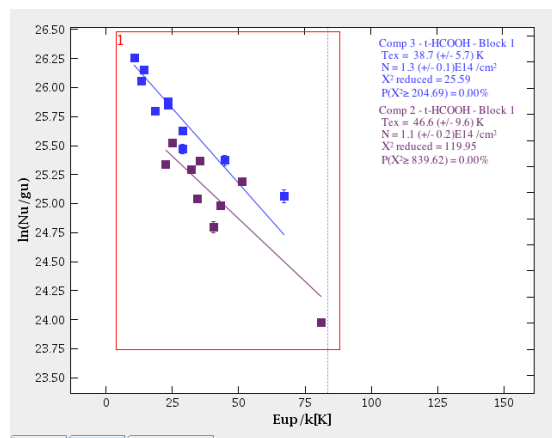
CH3CN



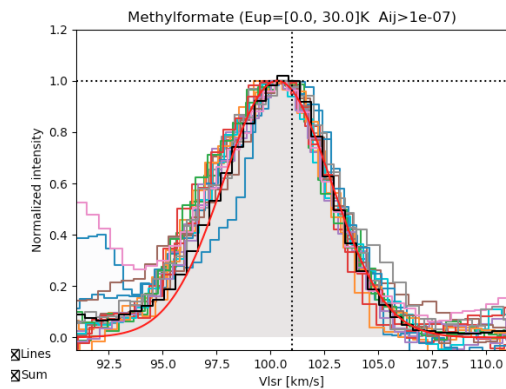
HNCO



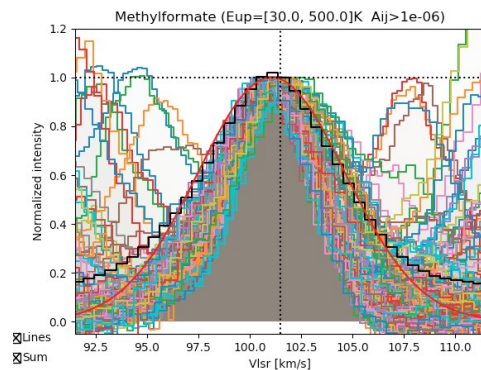
CH2NH



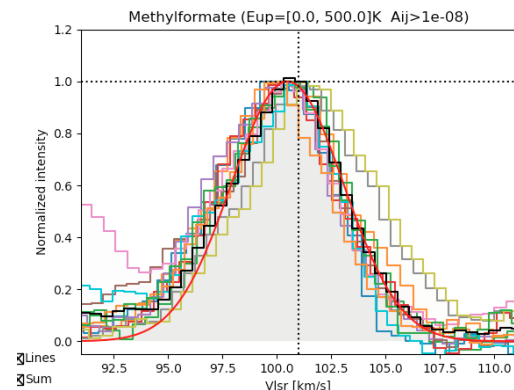
t-HCOOH



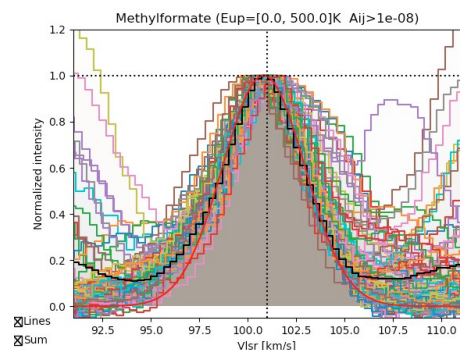
CH₃OCHO à 1, 2, 3 mm



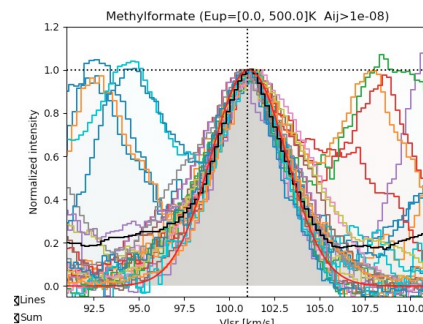
CH₃OCHO à 1, 2, 3 mm



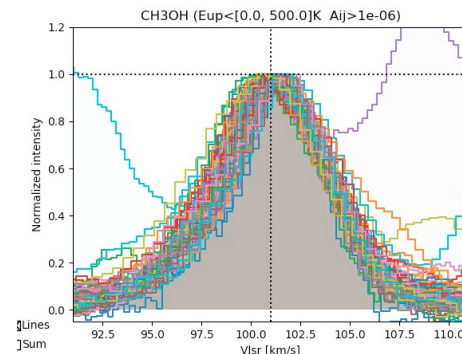
CH₃OCHO 3mm



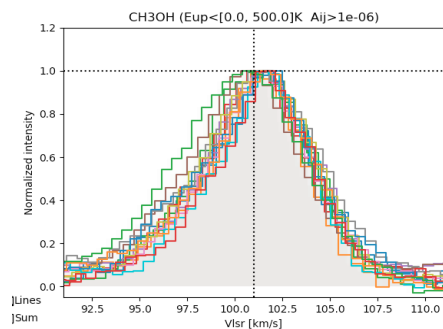
CH₃OCHO 2 mm



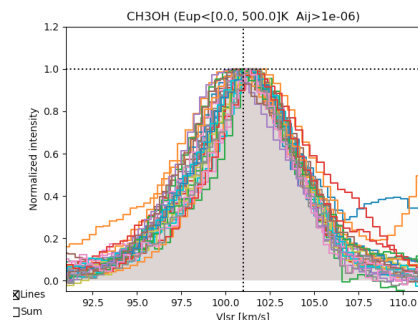
CH₃OCHO 1 mm



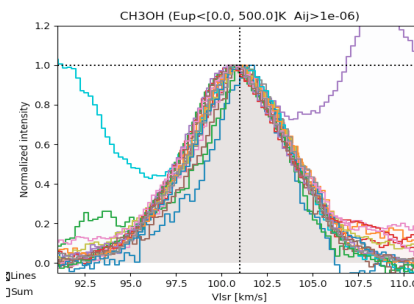
CH₃OH 1, 2, 3 mm



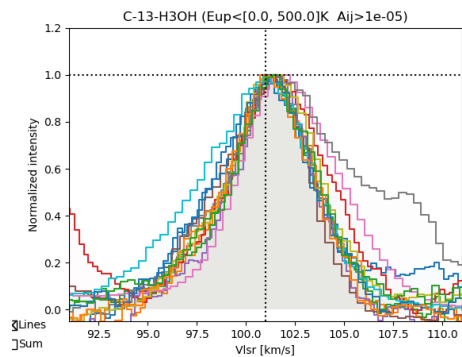
CH₃OH 3 mm



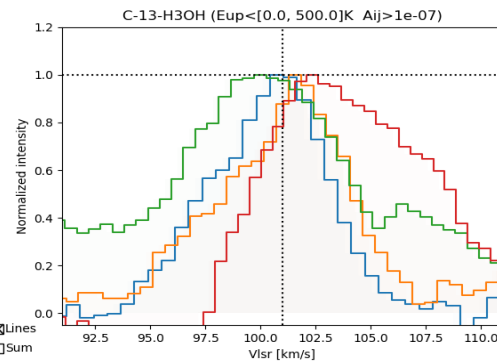
CH₃OH 2 mm



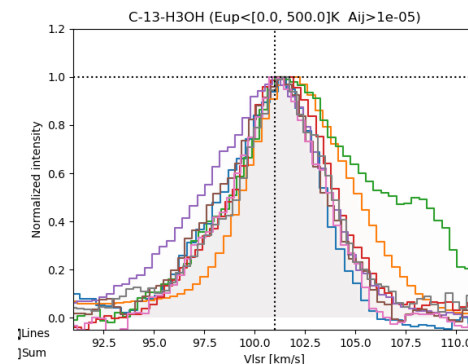
CH₃OH 1mm



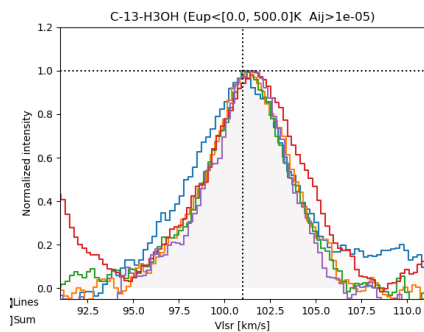
13-CH₃OH 1, 2, 3 mm



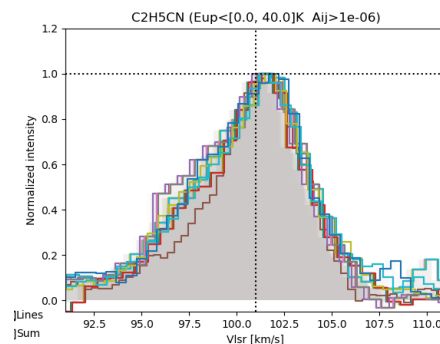
13-CH₃OH 3 mm



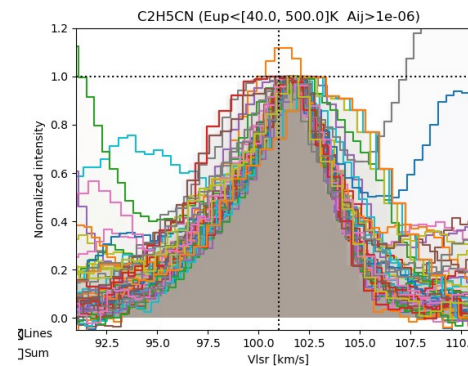
13-CH₃OH 2 mm



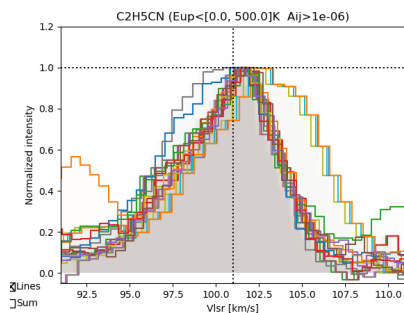
13-CH₃OH 1 mm



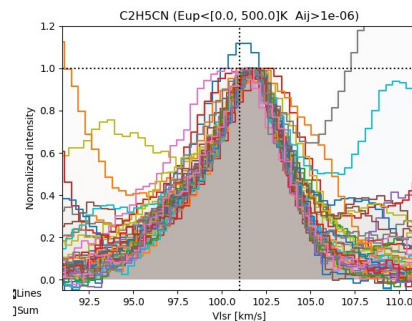
C₂H₅CN 1, 2, 3 mm



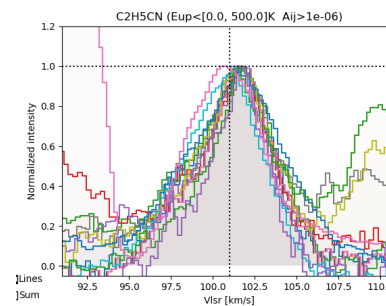
C₂H₅CN 1, 2, 3 mm



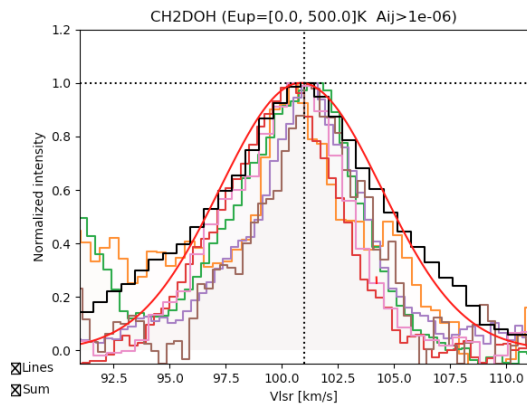
C₂H₅CN 3 mm



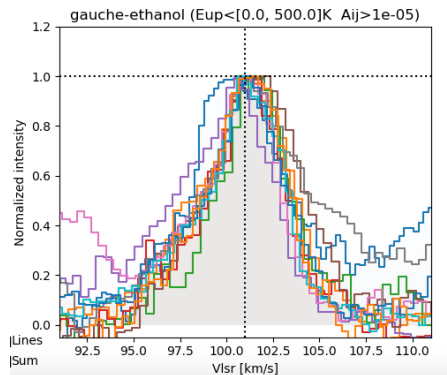
C₂H₅CN 2 mm



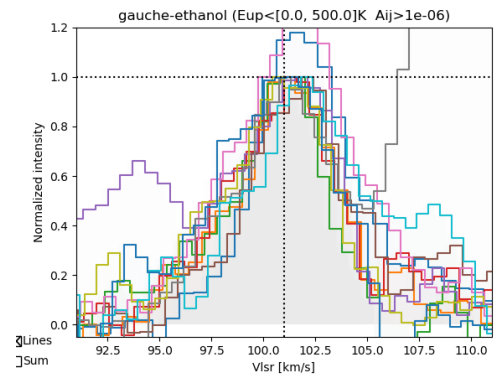
C₂H₅CN 1 mm



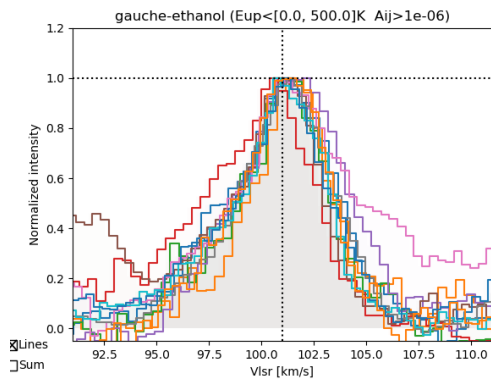
CH₂DOH 1, 2, 3 mm



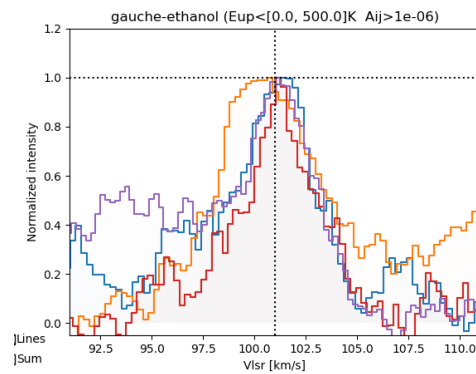
Gauche-éthanol 1, 2, 3 mm



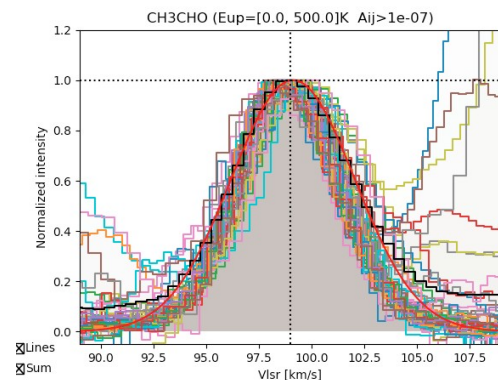
Gauche-éthanol 3 mm



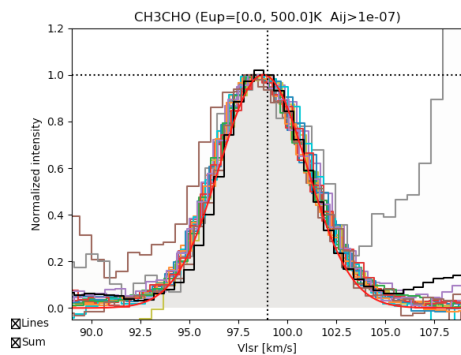
Gauche-éthanol 2 mm



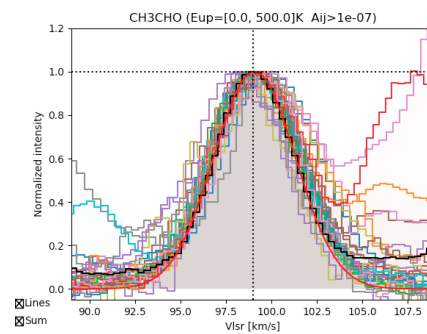
Gauche-éthanol 3 mm



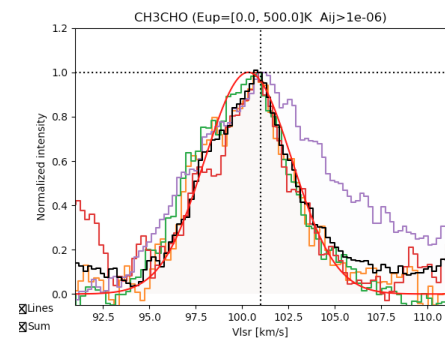
CH₃CHO 1, 2, 3 mm



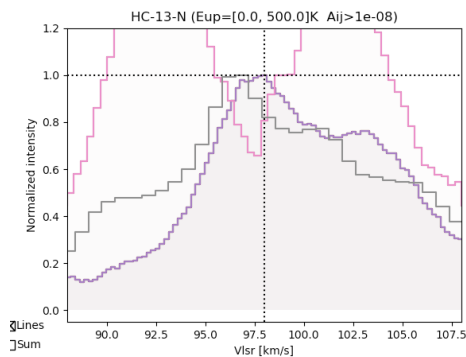
CH₃CHO 3 mm



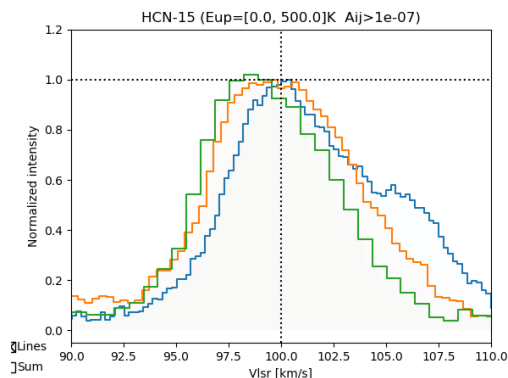
CH₃CHO 2 mm



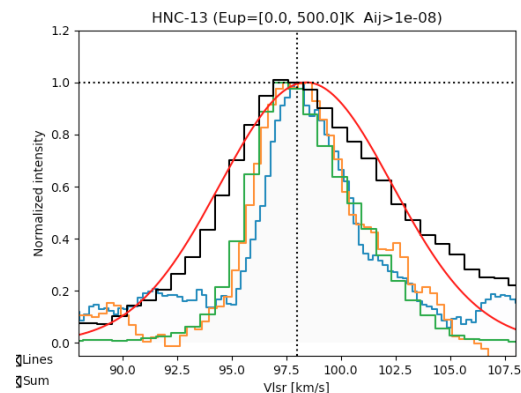
CH₃CHO 1 mm



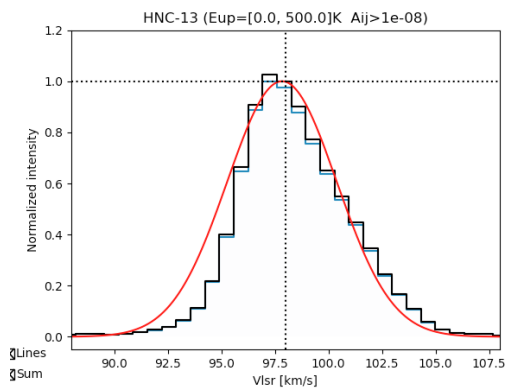
HC-13-N 1, 2, 3 mm



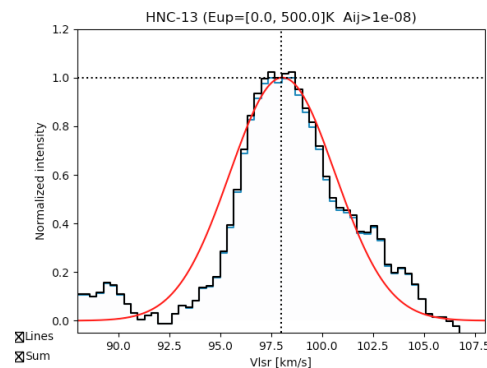
HCN-15 1, 2, 3 mm



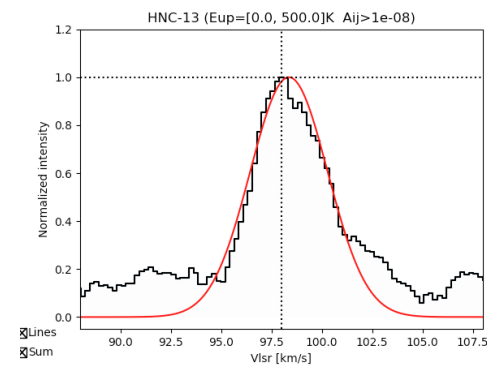
HNC-13 1, 2, 3 mm



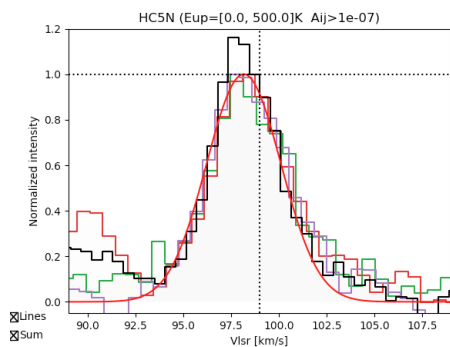
HNC-13 3 mm



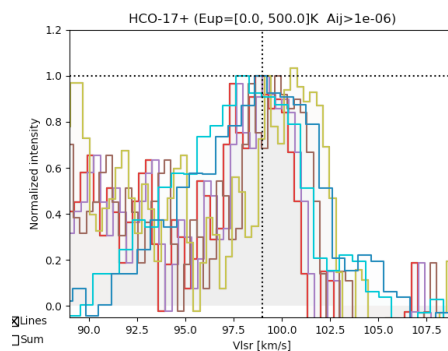
HNC-13 2 mm



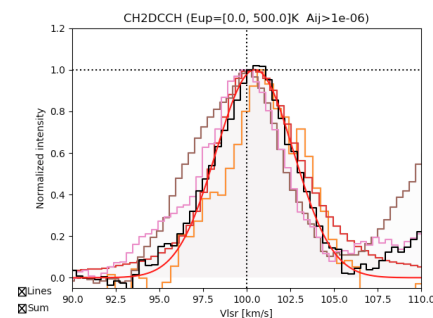
HNC-13 1 mm



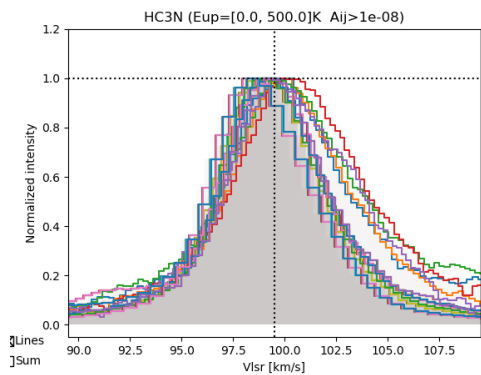
HC5N 1, 2, 3 mm



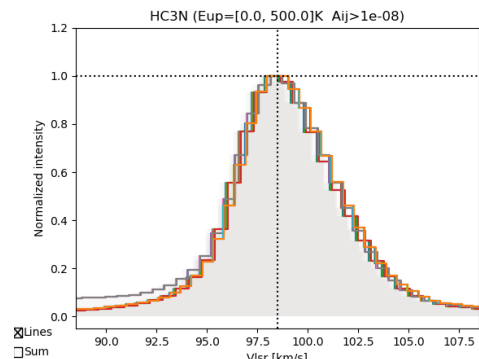
HCO-17+ 1, 2, 3 mm



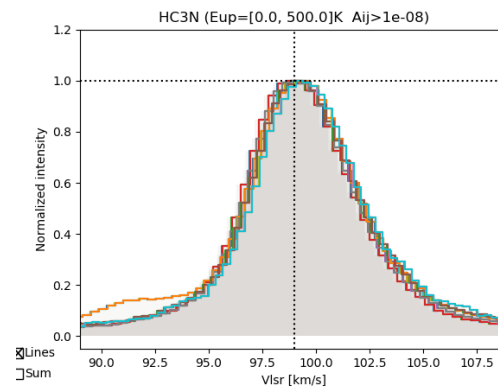
CH2DCCH 1, 2, 3 mm



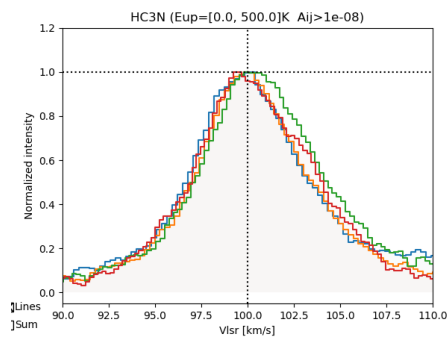
HC3N 1, 2, 3 mm



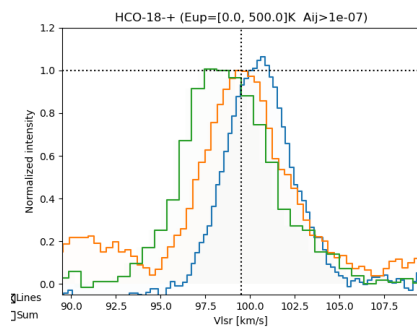
HC3N 3mm



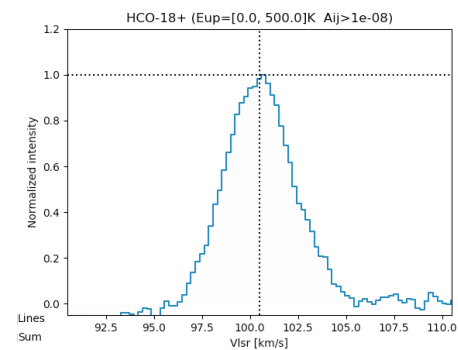
HC3N 2mm



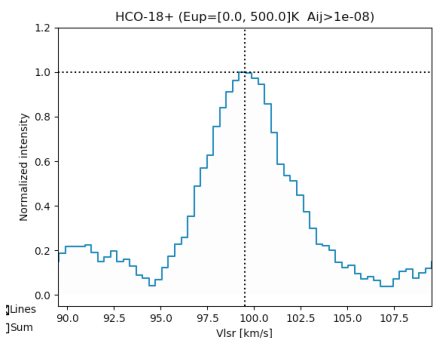
HC3N 3mm



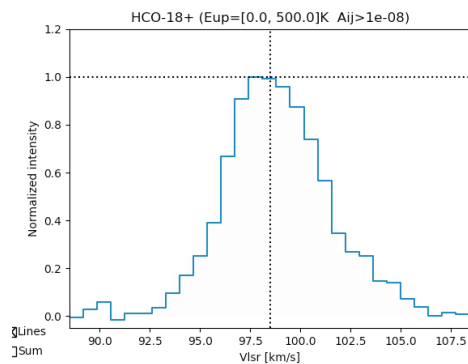
HCO-18+ 1, 2, 3mm



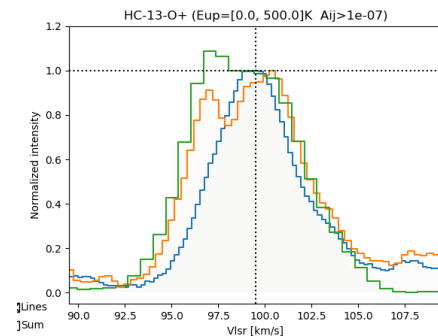
HCO-18+ 1 mm



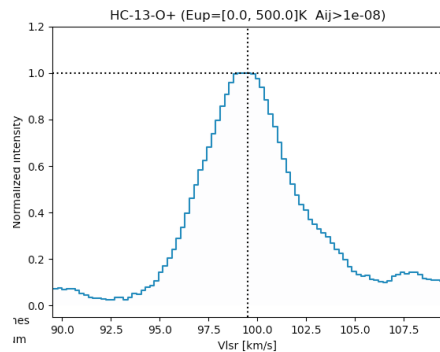
HC3N 2 mm



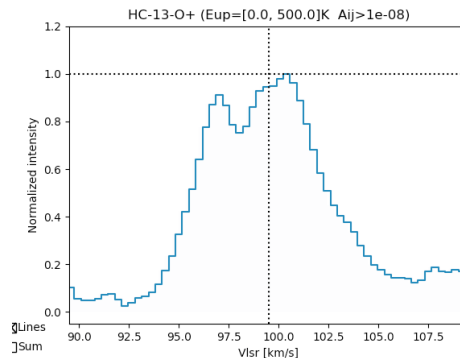
HC3N 3 mm



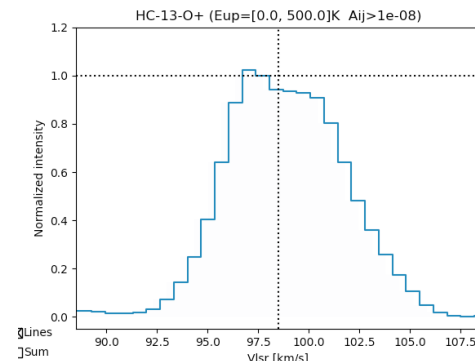
HC-13-O+ 1, 2, 3 mm



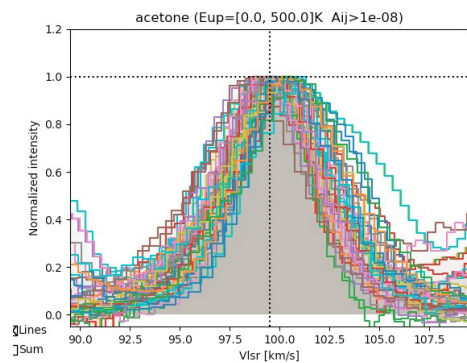
HC-13-O+ 1 mm



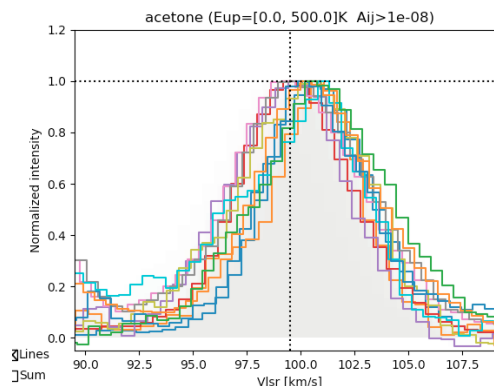
HC-13-O+ 2 mm



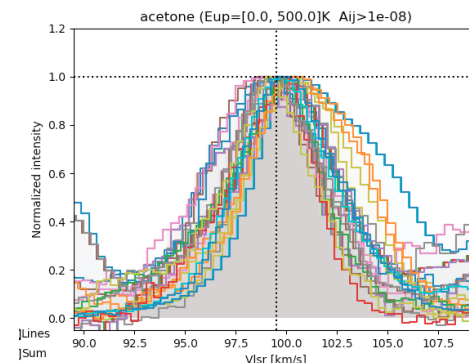
HC-13-O+ 3 mm



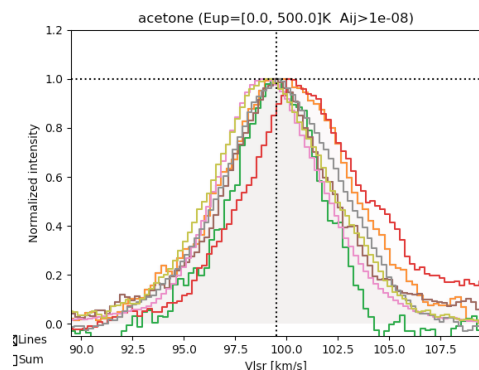
CH3COCH3 1, 2, 3 mm



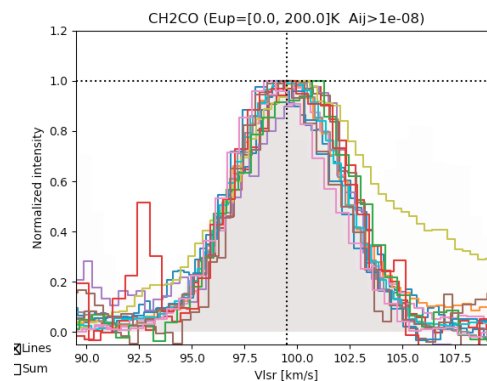
CH3COCH3 3 mm



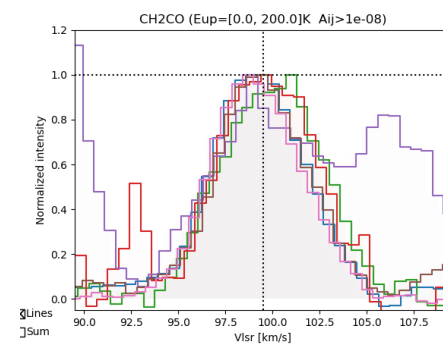
CH3COCH3 2 mm



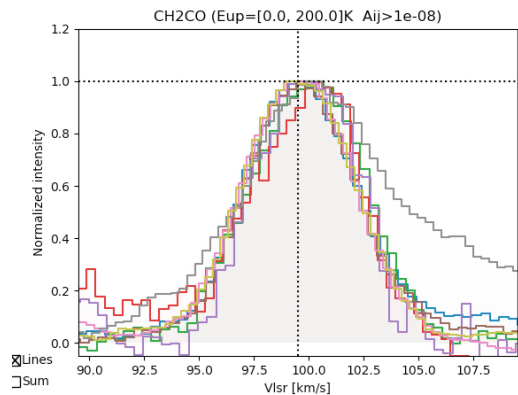
CH3COCH3 1 mm



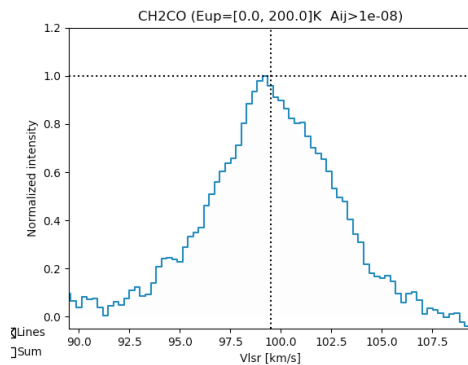
CH2CO 1,2, 3 mm



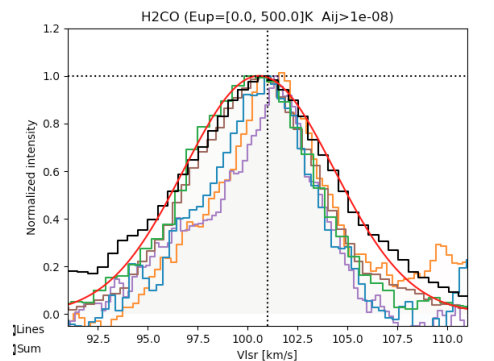
CH2CO 3 mm



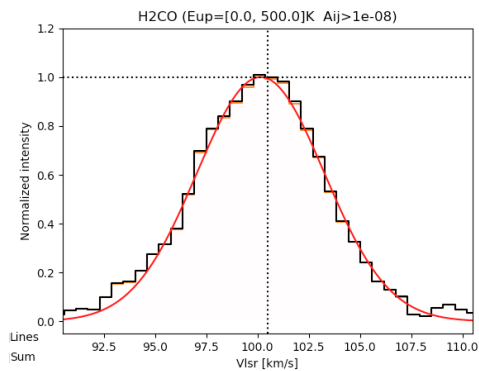
CH2CO 2 mm



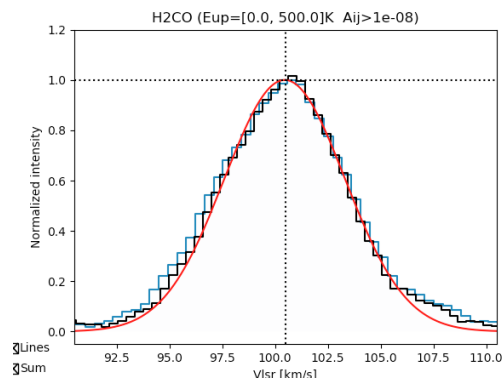
CH2CO 1 mm



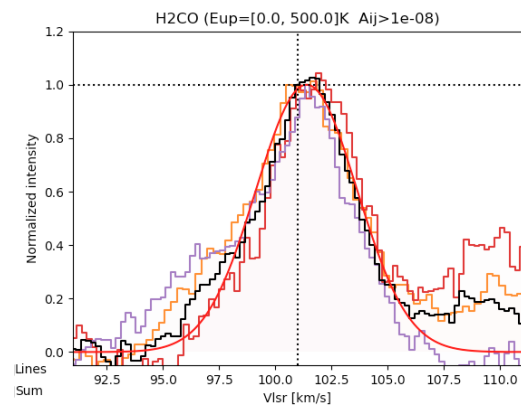
H2CO 1. 2. 3 mm



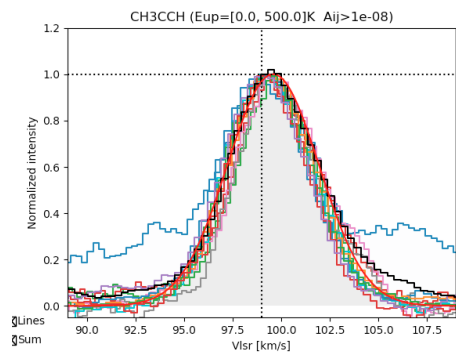
H2CO 3 mm



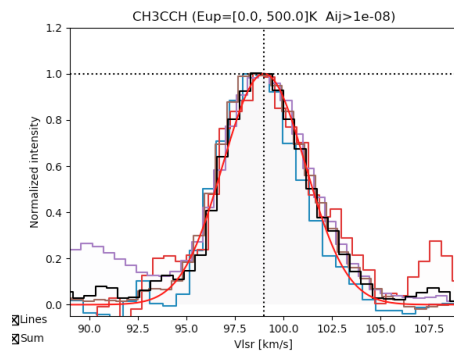
H2CO 2 mm



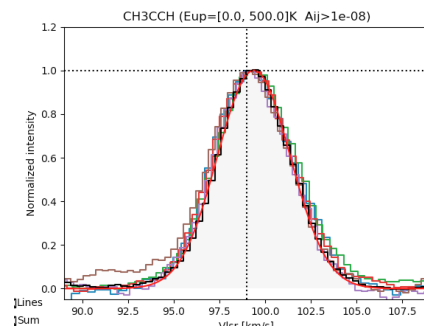
H2CO 1 mm



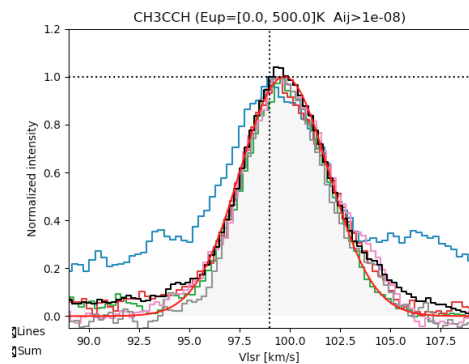
CH3CCH 1, 2, 3 mm



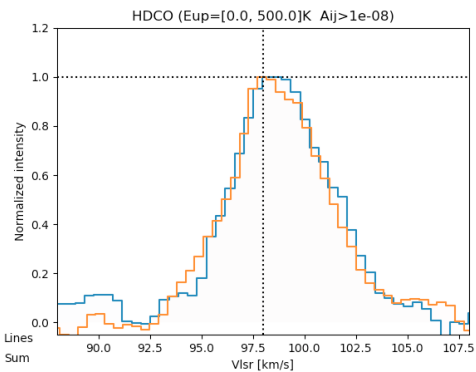
CH3CCH 3 mm



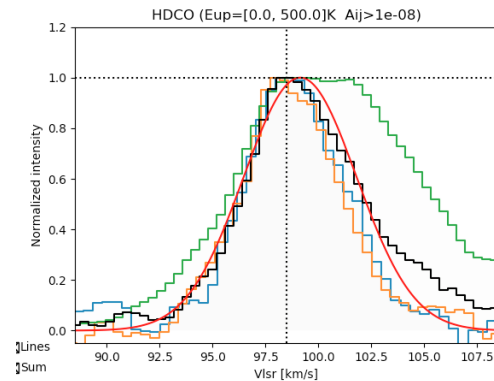
CH3CCH 2 mm



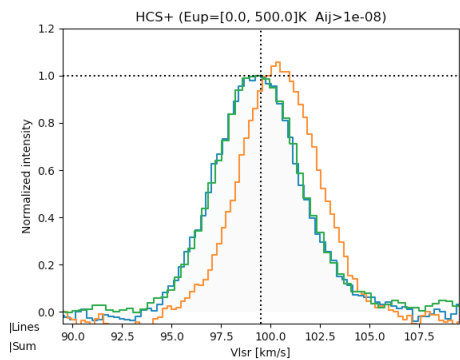
CH3CCH 1 mm



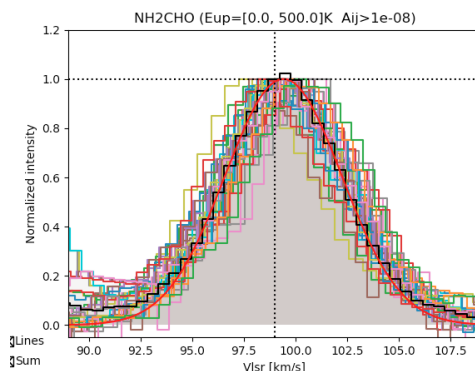
HDCO 1. 2. 3 mm



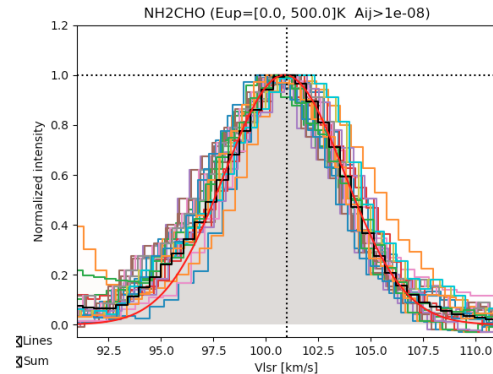
HDCO 2 mm



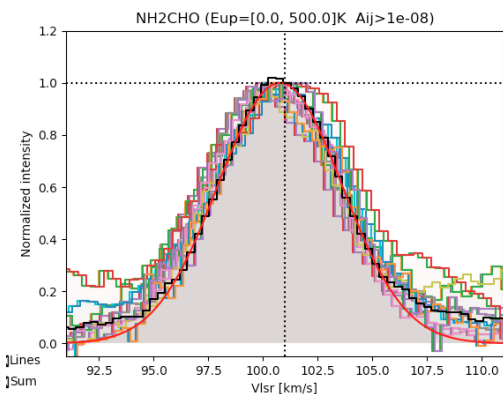
HCS+ 1, 2, 3 mm



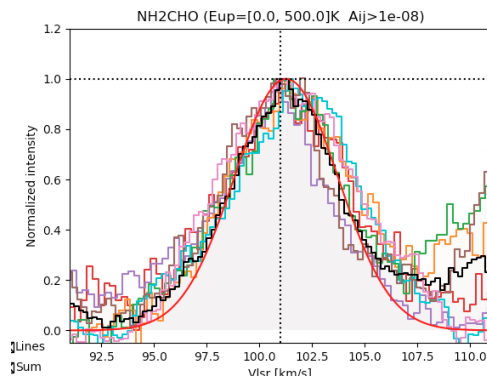
NH2CHO 1, 2, 3 mm



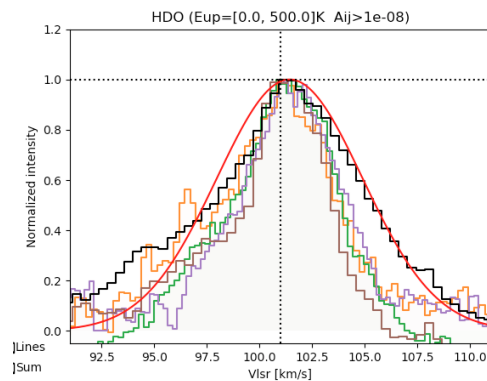
NH2CHO 3 mm



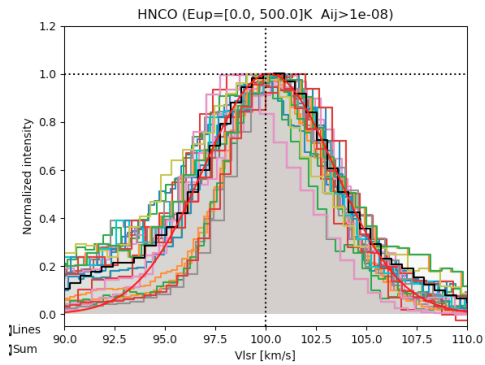
NH2CHO 2 mm



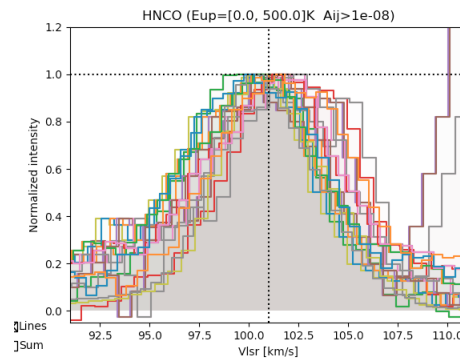
NH2CHO 1 mm



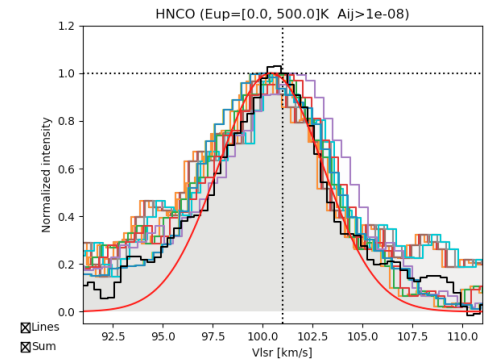
HDO 1, 2, 3 mm



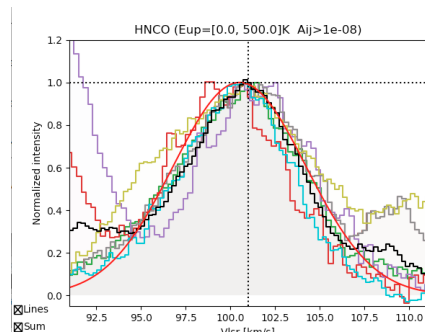
HNC0 1, 2, 3 mm



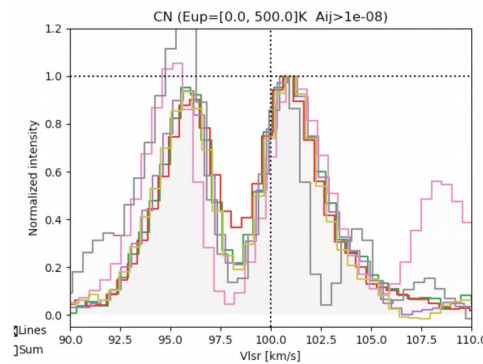
HNC0 3 mm



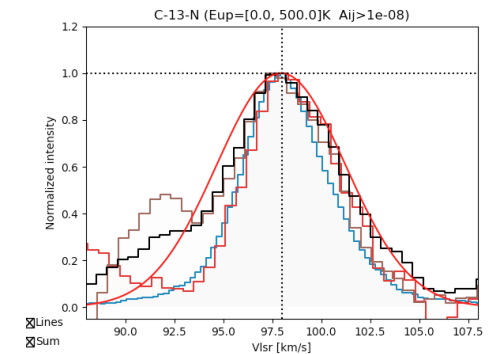
HNC0 2 mm



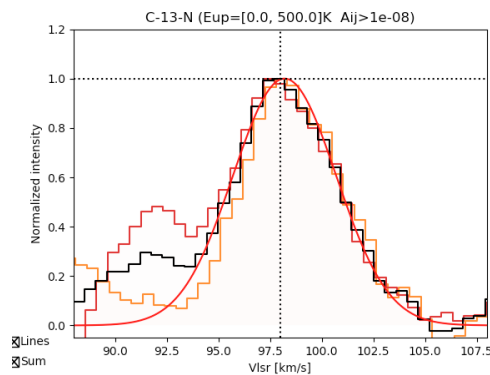
HNC0 1 mm



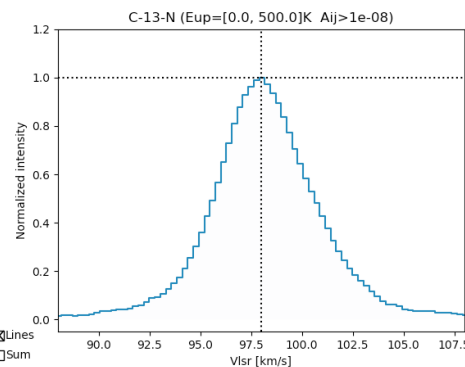
CN 1, 2, 3 mm



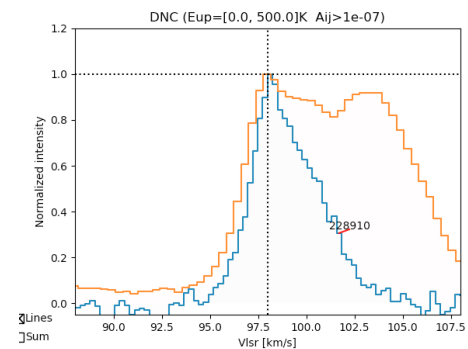
C-13-N 1, 2, 3 mm



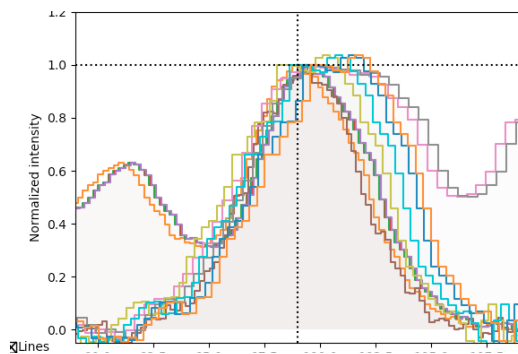
C-13-N 3 mm



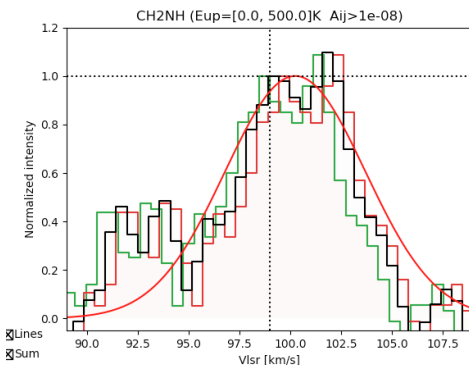
C-13-N 1 mm



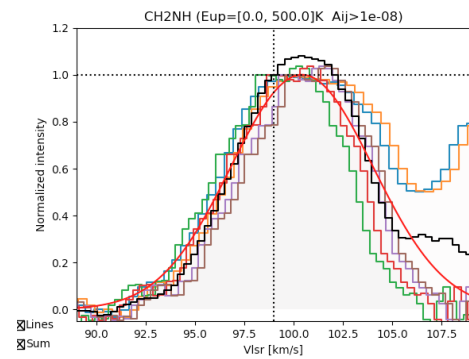
DNC 1, 2, 3 mm



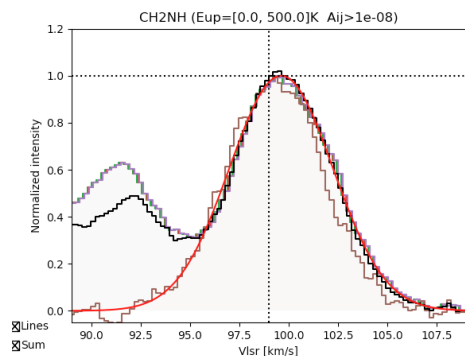
CH2NH 1, 2, 3 mm



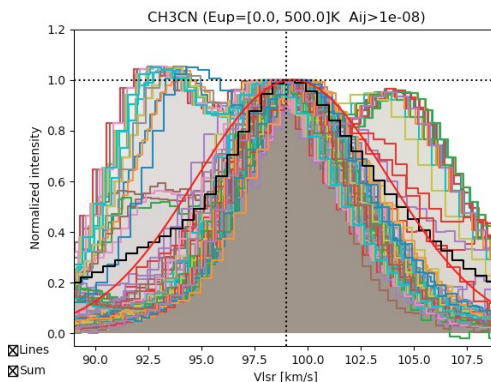
CH2NH 3 mm



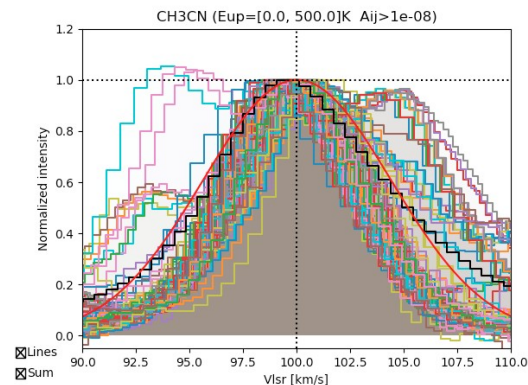
CH2NH 2 mm



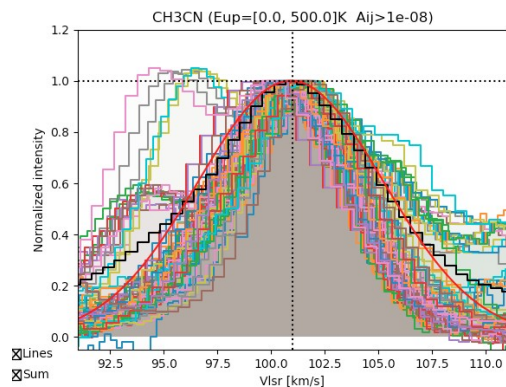
CH2NH 1 mm



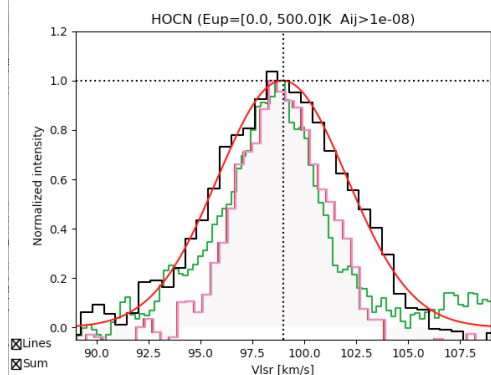
CH3CN 1, 2, 3 mm



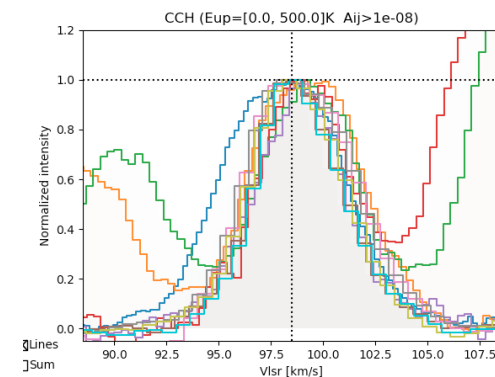
CH3CN 1, 2, 3 mm



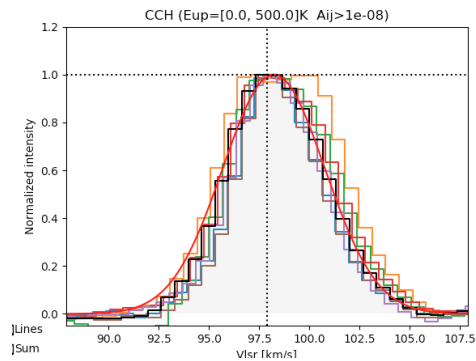
CH3CN 1, 2, 3 mm



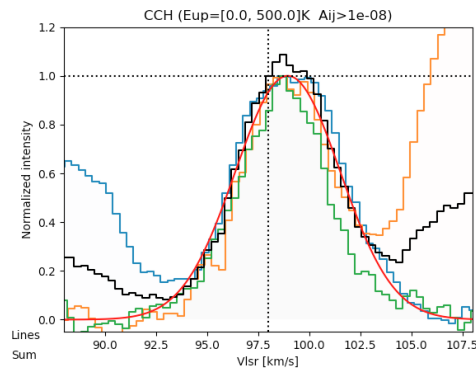
HOCN 1, 2, 3 mm



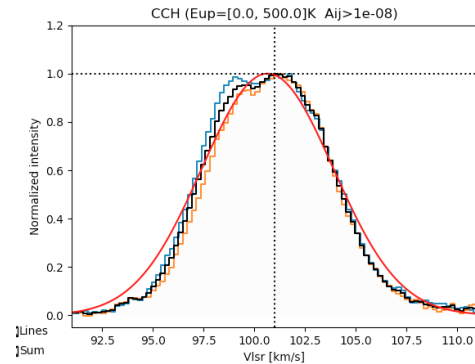
CCH 1, 2, 3 mm



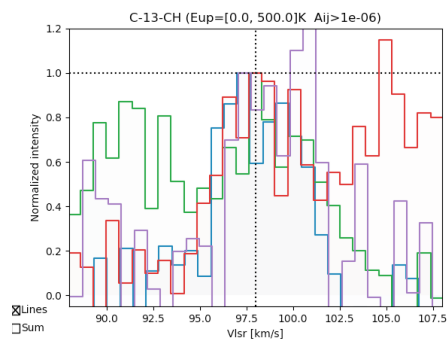
CCH 3 mm



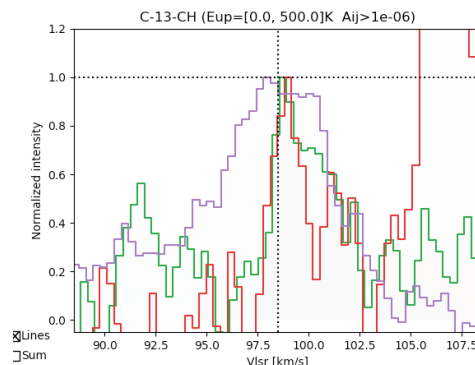
CCH 2 mm



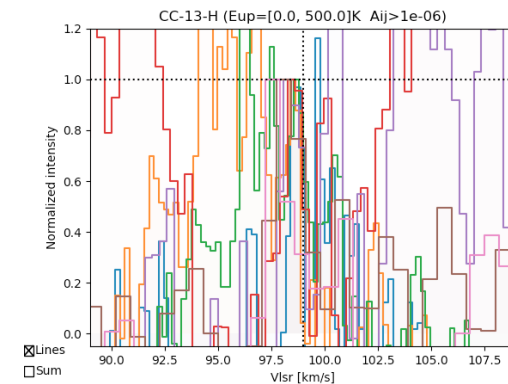
CCH 1 mm



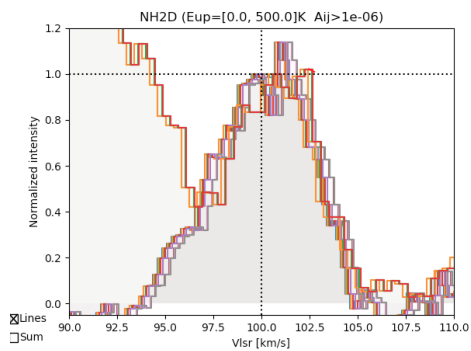
C-13-CH 3 mm



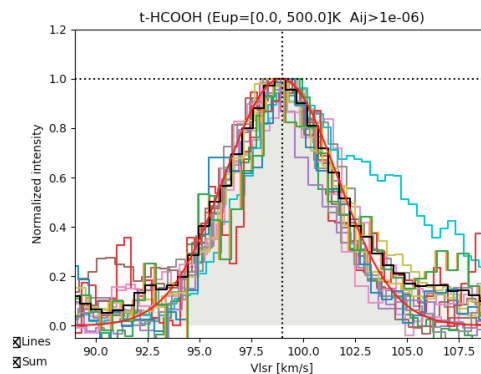
C-13-CH 2 mm



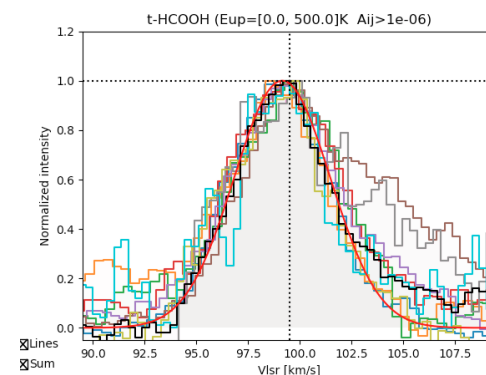
CC-13-H 1, 2, 3 mm



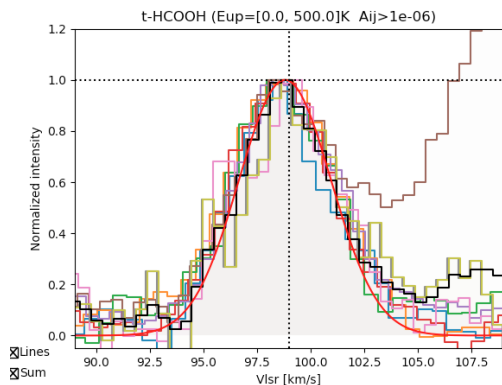
NH2D 1, 2, 3 mm



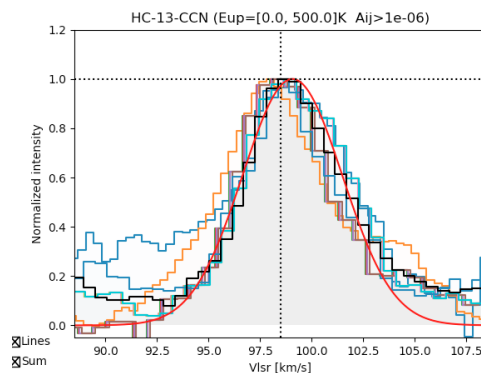
t-HCOOH 1, 2, 3 mm



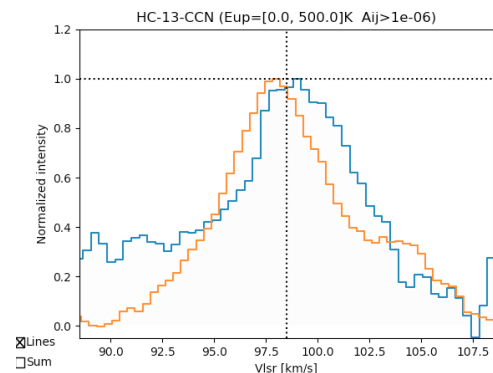
t-HCOOH 2 mm



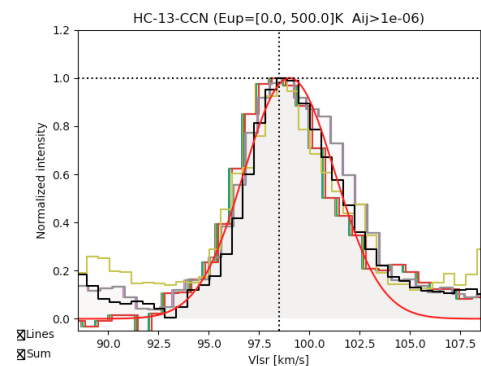
t-HCOOH 3 mm



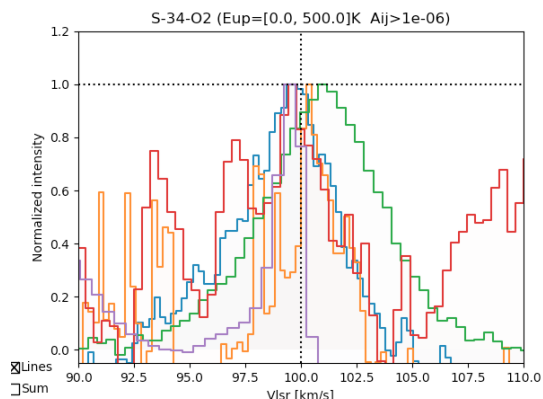
HC-13-CCN 1, 2, 3 mm



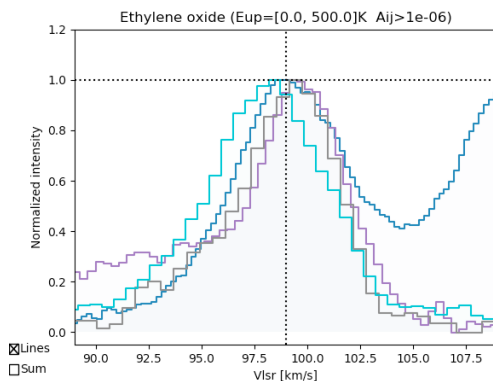
HC-13-CCN 2 mm



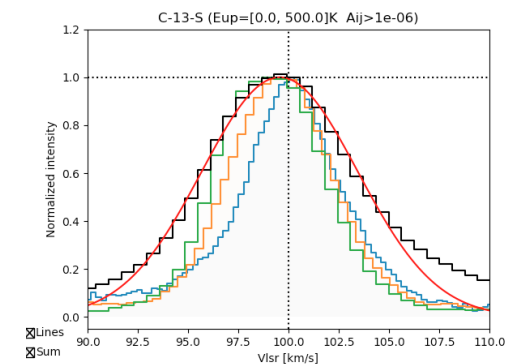
HC-13-CCN 3 mm



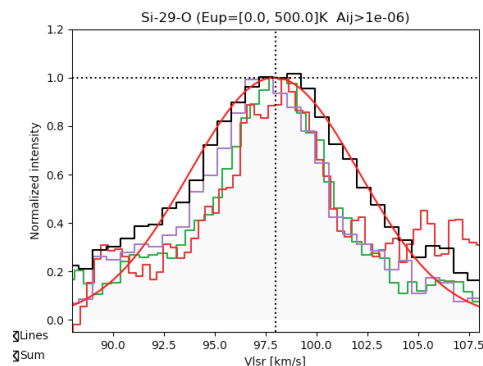
S-34-O2 1, 2, 3 mm



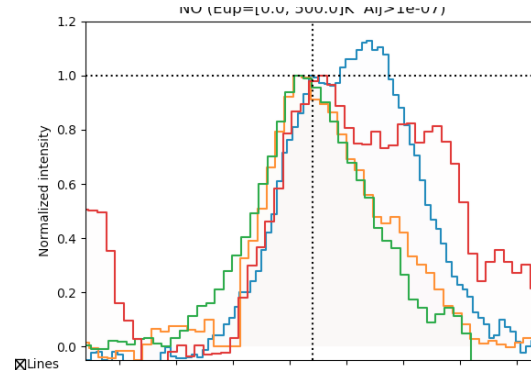
Ethylene oxide 1, 2, 3 mm



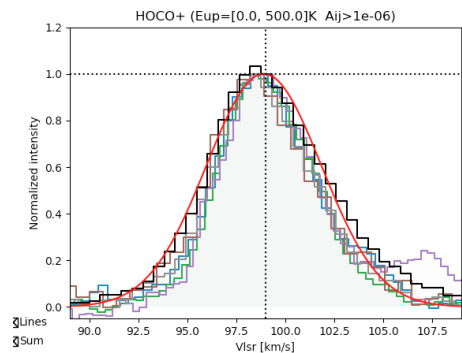
C-13-S 1, 2, 3 mm



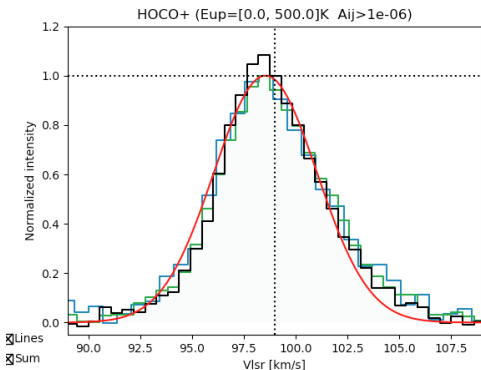
Si-29-O 1, 2, 3 mm



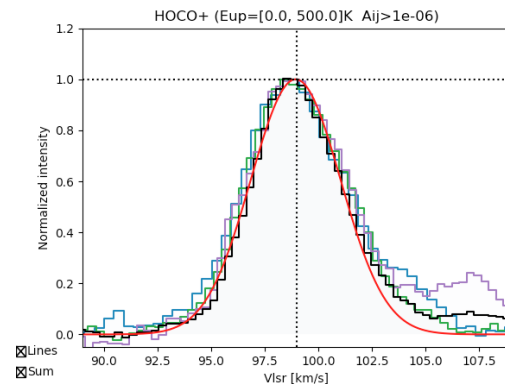
NO 1, 2, 3 mm



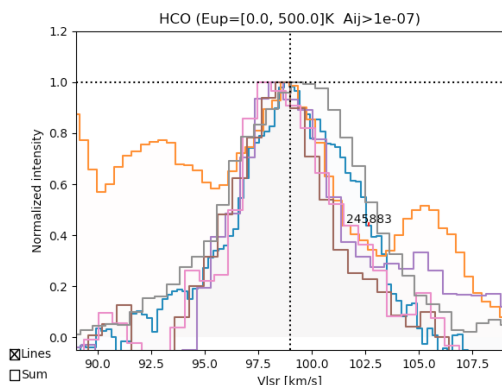
HOCO+ 1, 2, 3 mm



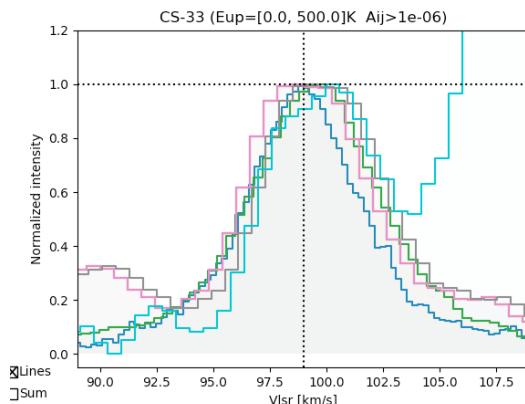
HOCO+ 3 mm



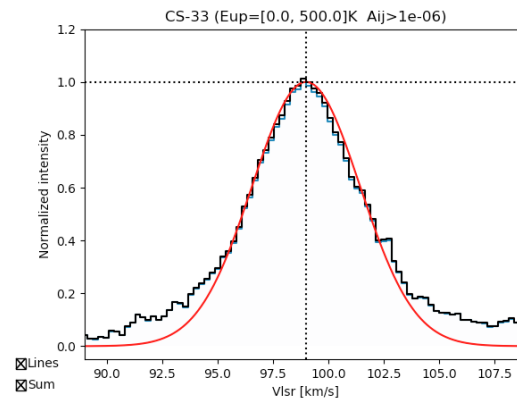
HOCO+ 2 mm



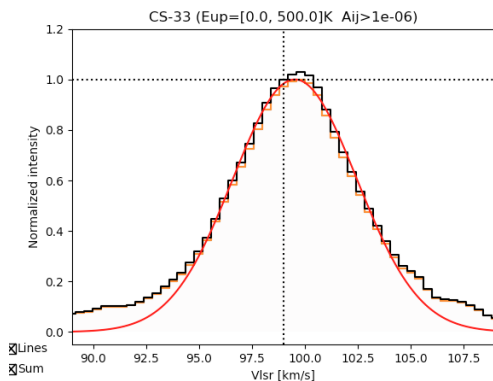
HCO 1, 2, 3 mm



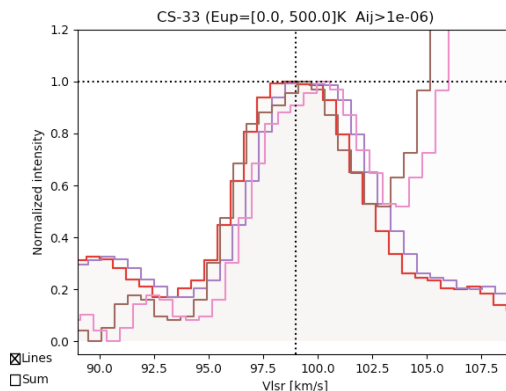
CS-33 1, 2, 3 mm



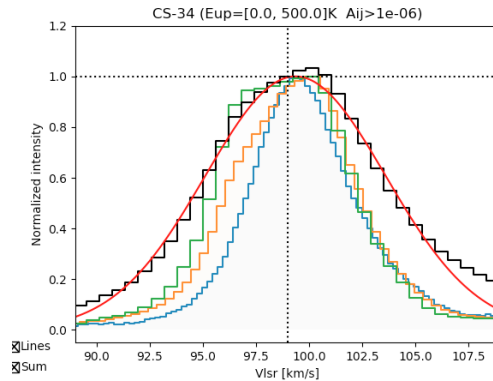
CS-33 1 mm



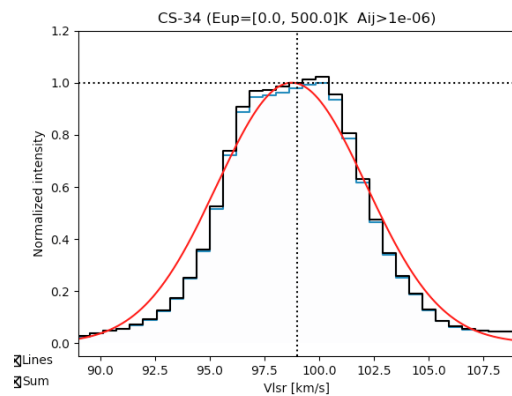
CS-33 2 mm



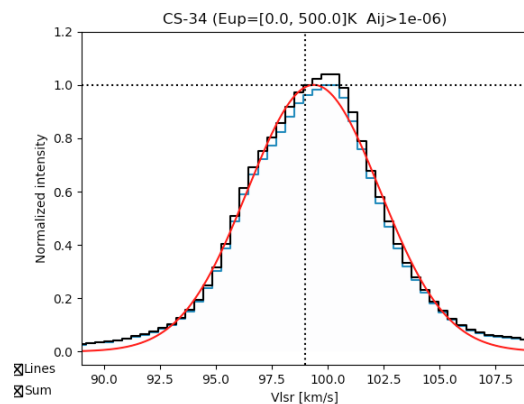
CS-33 2 mm



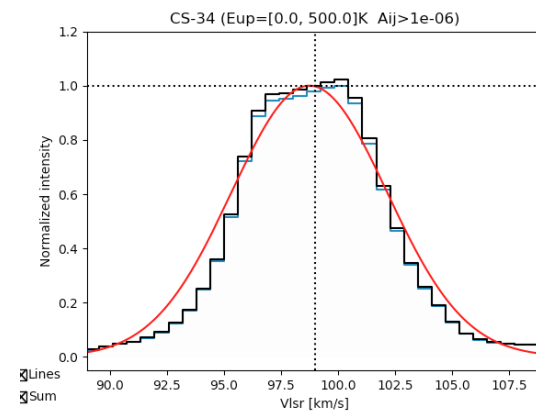
CS-34 1, 2, 3 mm



CS-34 1 mm



CS-34 2 mm



CS-34 3 mm