

Base de données pour la spectroscopie des solides

Présentation du 13 Décembre 2007
par Bernard SCHMITT
et Pierre Volcke

Laboratoire Planétologie de Grenoble

Bases de données spectroscopiques des matériaux solides d'intérêt planétologique

Pour l'analyse des observations spectroscopiques et en spectro-imagerie sol, in-situ et spatiales et l'étude de cosmo-matériaux en laboratoire

- **Spectroscopie Visible-IR lointain en transmission**
(spectres, constantes optiques, fréquences et modes de vibration, ...)
[Spectromètres à transformée de Fourier] => *en développement*
- **Spectroscopie vis-IR de surfaces en réflexion bidirectionnelle** (spectres bidirectionnels, fonctions de réflectance et paramètres de diffusion, ...)
[Spectro-gonio radiomètre] => *à développer + FP7 (JRA)*
- **Micro-spectrométries Raman et Fluorescence (excitatrices UV/vis)**
[Spectromètres Raman du LST (ENS-Lyon)] => *FP7 (JRA)*
- **Spectro-imagerie infrarouge microscopique**
[Microscope infrarouge] => *FP7 (JRA)*

Matériaux planétaires solides

- Glaces, molécules volatiles, hydrates, clathrates, ...
- Organiques: simples, matériaux macromoléculaires, polymères,
- Roches, minéraux, matériaux hydratés, ...
- Autres composés (Soufrés, ...)
- Echantillons naturels et Extraterrestres (météorites, IDP's, ...)
- Composants optiques du spatial (fenêtres, filtres, réflecteurs, ...)

- **Différents états physiques et texturaux :**
 - Compacts (roche, glace, ..)
 - Poudre (minéraux, neige, ...) : surface
 - Films minces
 - Grain, Monocristaux, section polie, ...
 - Mélanges, ...
 - Température : 10 K - 700 K

Base bibliographique sur les propriétés physiques des molécules condensées

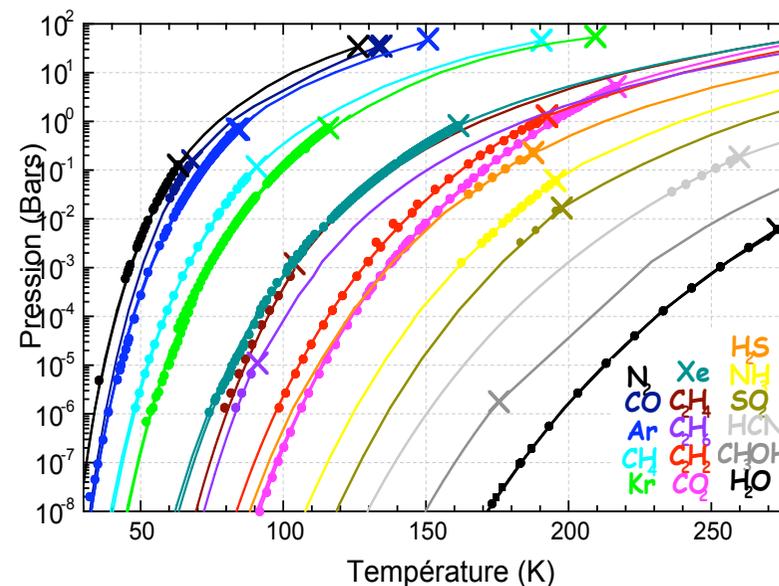
- Base des propriétés physiques et thermodynamiques des solides moléculaires

- analyse critique
- synthèse bibliographique,
- mesures en laboratoire,
- calculs théoriques

=> FP7 (JRA)

- regrouperait les propriétés :

- moléculaires,
- cristallographiques,
- optiques
- thermodynamiques.
- + données thermodynamiques expérimentales (LPG)



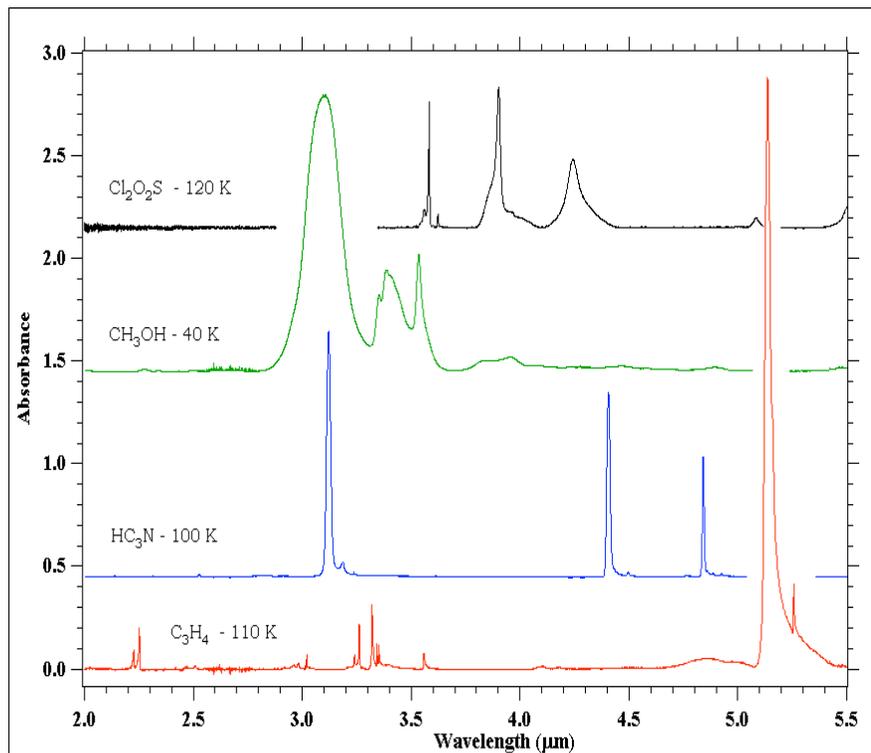
Compilation des Pressions de vapeur saturante des glaces

Propriétés Spectroscopiques Visible-Infrarouge

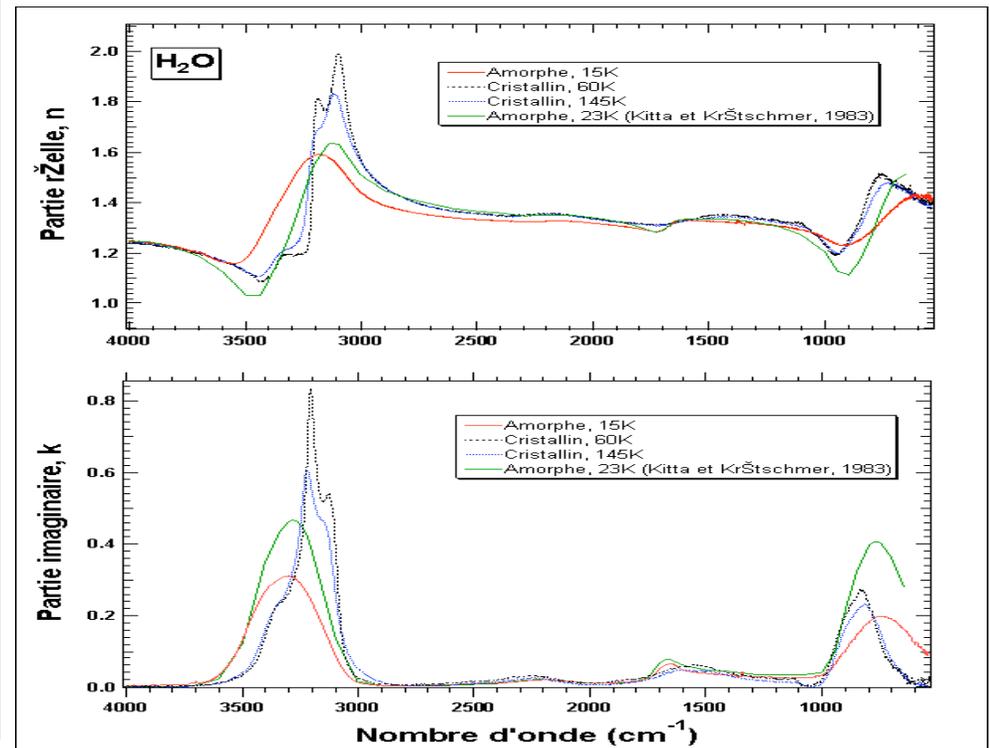
- Gamme spectrale : 0,3 - 200 μm
- Température : 10 K - 300 K

- Produits:
 - Spectres en transmission (niveau 1)
 - Spectres en absorbance normalisée (niveau 2)
 - Coefficients d'absorption (niveau 3)
 - Constantes optiques (niveau 4)
 - Tables: positions, attributions, paramètres de bandes

- Absorbance normalisée (niv. 2)



Constantes optiques (niv. 4)



Produits : Tables de bandes (positions, attributions, paramètres,...)

Bandes de
la glace de CH₄

Frequencies and Absorption Coefficients for Selected CH₄-Ice I Absorption Maxima at 30 and 90 K

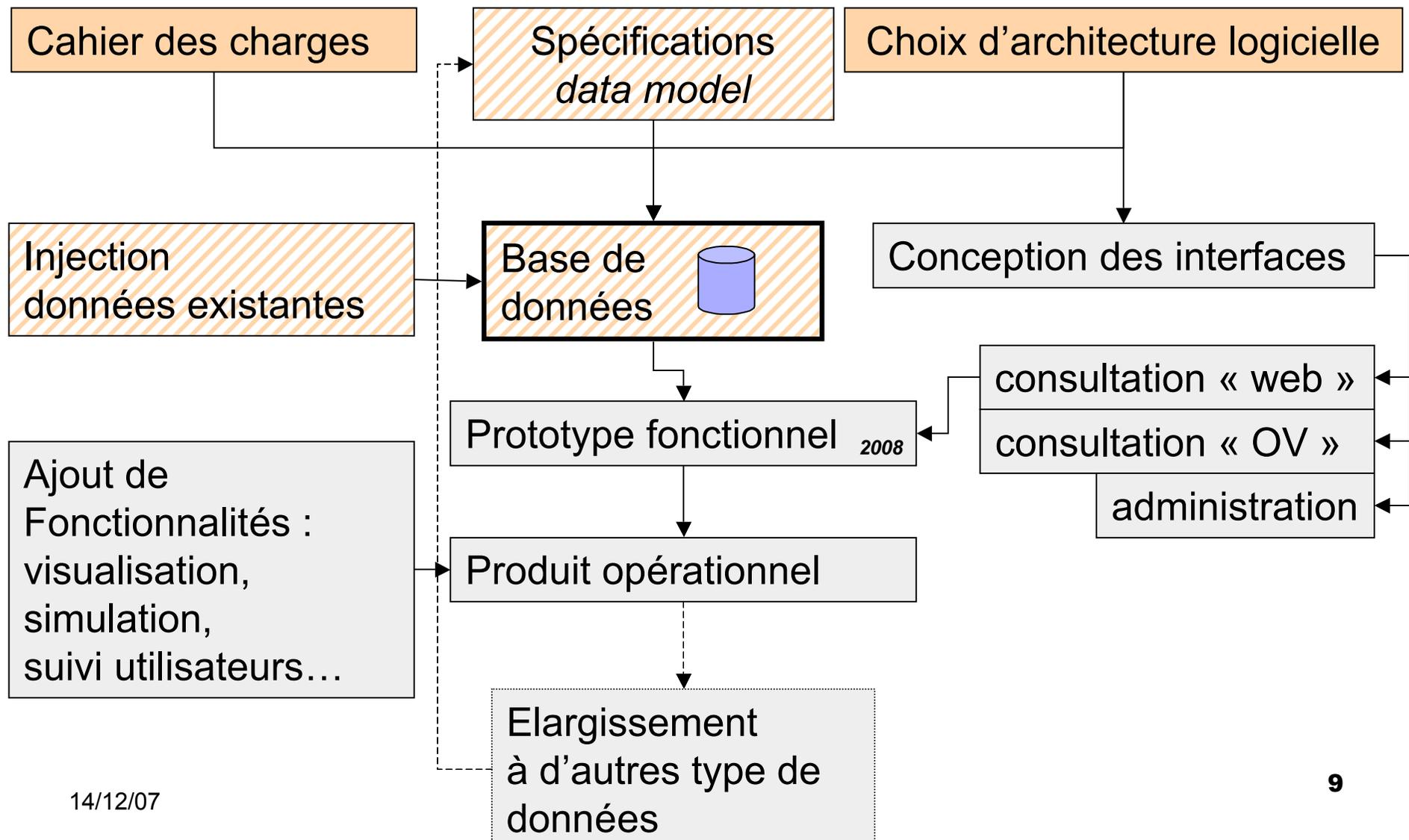
Transition	Reference ^a	30 K		90 K	
		$\bar{\nu}$ (cm ⁻¹)	α (cm ⁻¹)	$\bar{\nu}$ (cm ⁻¹)	α (cm ⁻¹)
ν_1 (CH ₃ D)	new band	2193 ± 1	4.48 × 10 ⁻¹	2194 ± 3	2.03 × 10 ⁻¹
2 ν_{4b} (CH ₃ D)	new band	2305 ± 1	1.27 × 10 ⁻¹	2308 ± 5	8.08 × 10 ⁻²
2 ν_4	C89	2598 ± 2	2.48 × 10 ⁺¹	2607 ± 5	1.05 × 10 ⁺¹
$\nu_2 + \nu_4$	C89	2819 ± 2	1.33 × 10 ⁺²	2821 ± 5	6.85 × 10 ⁺¹
ν_3	E64	(ν ₃ band at 3010 cm ⁻¹ is saturated in our data)			
3 ν_4	C89	3846 ± 1	4.84 × 10 ⁺¹	3847 ± 2	2.00 × 10 ⁺¹
3 ν_4	reassigned	3897 ± 4	3.39 × 10 ⁺⁰	—	—
$\nu_2 + 2\nu_4$	C92	4116 ± 1	9.59 × 10 ⁺⁰	4118 ± 2	5.37 × 10 ⁺⁰
$\nu_1 + \nu_4$	K90	4203 ± 1	5.15 × 10 ⁺²	4204 ± 1	1.88 × 10 ⁺²
$\nu_3 + \nu_4$	K90	4304 ± 1	2.67 × 10 ⁺²	4307 ± 2	1.18 × 10 ⁺²
$\nu_2 + \nu_3$	K90	4530 ± 1	4.13 × 10 ⁺¹	4526 ± 2	2.24 × 10 ⁺¹
4 ν_4	C92	5114 ± 1	1.90 × 10 ⁻¹	5113 ± 2	1.14 × 10 ⁻¹
4 ν_4	C92	5162 ± 1	3.35 × 10 ⁻¹	5167 ± 2	1.56 × 10 ⁻¹
$\nu_2 + 3\nu_4$	reassigned	5384 ± 1	1.43 × 10 ⁺⁰	5386 ± 3	6.12 × 10 ⁻¹
$\nu_3 + 2\nu_4$	C92	5566 ± 2	1.16 × 10 ⁺¹	5567 ± 3	5.92 × 10 ⁺⁰
2 $\nu_2 + 2\nu_4$	reassigned	5596 ± 2	5.70 × 10 ⁺⁰	5593 ± 3	4.34 × 10 ⁺⁰
$\nu_2 + \nu_3 + \nu_4$	C92	5800 ± 1	1.48 × 10 ⁺¹	5800 ± 2	7.50 × 10 ⁺⁰
$\nu_1 + \nu_3$	C92	5919 ± 1	2.54 × 10 ⁺⁰	—	—
2 ν_3	Q97a	5990 ± 1	2.70 × 10 ⁺¹	5991 ± 2	1.47 × 10 ⁺¹
2 $\nu_2 + \nu_3$	Q97a	6034 ± 2	7.59 × 10 ⁺⁰	—	—
$\nu_2 + 4\nu_4$	new band	6616 ± 2	3.00 × 10 ⁻²	—	—
$\nu_1 + 3\nu_4$	C92	6735 ± 1	6.49 × 10 ⁻¹	6738 ± 2	2.62 × 10 ⁻¹
$\nu_3 + 3\nu_4$	C92	6858 ± 3	2.59 × 10 ⁻¹	—	—
2 $\nu_2 + 3\nu_4$	reassigned	6882 ± 3	2.86 × 10 ⁻¹	—	—
$\nu_1 + \nu_2 + 2\nu_4$	new band	6999 ± 2	3.12 × 10 ⁻¹	—	—
2 $\nu_1 + \nu_4$	Q97a	7066 ± 2	2.83 × 10 ⁺⁰	7066 ± 4	1.91 × 10 ⁺⁰
$\nu_2 + \nu_3 + 2\nu_4$	reassigned	7084 ± 2	2.88 × 10 ⁺⁰	7085 ± 6	1.85 × 10 ⁺⁰
$\nu_1 + \nu_3 + \nu_4$	C92	7130 ± 2	3.71 × 10 ⁺⁰	7127 ± 4	2.15 × 10 ⁺⁰
$\nu_1 + 2\nu_2 + \nu_4$	C92	7195 ± 3	1.15 × 10 ⁺⁰	—	—
3 $\nu_2 + 2\nu_4$	reassigned	7233 ± 2	1.83 × 10 ⁺⁰	7230 ± 3	1.54 × 10 ⁺⁰
2 $\nu_3 + \nu_4$	C92	7279 ± 3	2.28 × 10 ⁺⁰	—	—
2 $\nu_2 + \nu_3 + \nu_4$	reassigned	7303 ± 3	2.61 × 10 ⁺⁰	—	—

- Interfaces avec la base de données
 - du côté « client »
 - Interface web type client léger (navigateur)
 - Interface vers l'OV (interopérabilité)
 - du côté « administrateur »
 - Interface web pour saisie de nouvelles données, corrections, mises à jour

- Suivi des utilisateurs
 - enregistrement des utilisateurs de la base de données
 - suivi des mises à jour, alertes, nouveautés, ...

- Système de livraison électronique
 - fonctionnalité « panier d'achat »
 - livraison de fichiers produits, tables (complets, partiels), figures (choix d'unités...)
 - livraison des références associées (*bibtex*, *endnote*, *ascii*)

Le projet en étapes



A propos de l'interface avec l'OV Planeto

Nécessite un effort commun de
spécifications :

- Protocole d'interrogation (*PDAP?*)
- Protocole d'échange des données
 - une extension de VOTable ?
 - PDS/PSA + meta-données ?