



Bases de Données Spectroscopie et Thermodynamique des Solides en Planétologie et Astrophysique

Bernard Schmitt

Eric Quirico, Olivier Brissaud, Pierre Volcke

Sylvain Douté, Nicolas Fray, ...

Laboratoire de Planétologie de Grenoble

Buts généraux

Développer des bases de données des solides planéto/géo/astrophysiques (glaces, minéraux, matériaux organiques, ... naturels et synthétiques) :

Mesures spectroscopiques de laboratoire (en cours)

- Propriétés spectroscopiques UV-Vis-IR
- Réflectance bidirectionnelle de surfaces (UV-Vis-IR)
- Micro-spectrométries Raman et fluorescence
- Imagerie microscopique infrarouge

Compilation de données sur les propriétés physiques des solides moléculaires (en cours)

- Bibliographie, mesures, théorie) :
- Propriétés Moléculaires, Cristallographiques, Optiques, Thermodynamiques

Résultats d'analyse d'observations (futur)

- Cartes géo-référencées de surface (composition, température, granulométrie, ...)
(ex : Mars, Io, Titan, ...)
- Evolutions temporelles, ...

Service de simulation d'observations spectroscopiques (futur)

- Spectres et spectro-images de surfaces planétaires, milieu interstellaire, ...

Appliquées à:

- Planétologie, Astrophysique, Géophysique terrestre

Pour quelles études

➔ Analyse des observations (photo/radiométrie ou imagerie) spectroscopiques ou multi- spectrales

➔ Modélisation des échanges gaz - solides

des glaces, minéraux et de la matière organique :

- à la surface des objets du système solaire (sol, en orbite et in-situ)
 - Mars, Terre
 - Satellites Glacés, Titan, Pluton - Triton
 - Astéroïdes, Centaurs, Objets Trans-Neptuniens (> 1000 découverts), comètes
- dans les échantillons extraterrestres
 - météorites, grains cométaires
 - => Mars
- dans les grains inter- et circum-stellaires

Pour quelles observations

Missions spatiales :

- 5 missions passées (7 instruments concernés)
- 8 missions en cours (14 instruments)
- > 5 missions futures (> 13 instruments)

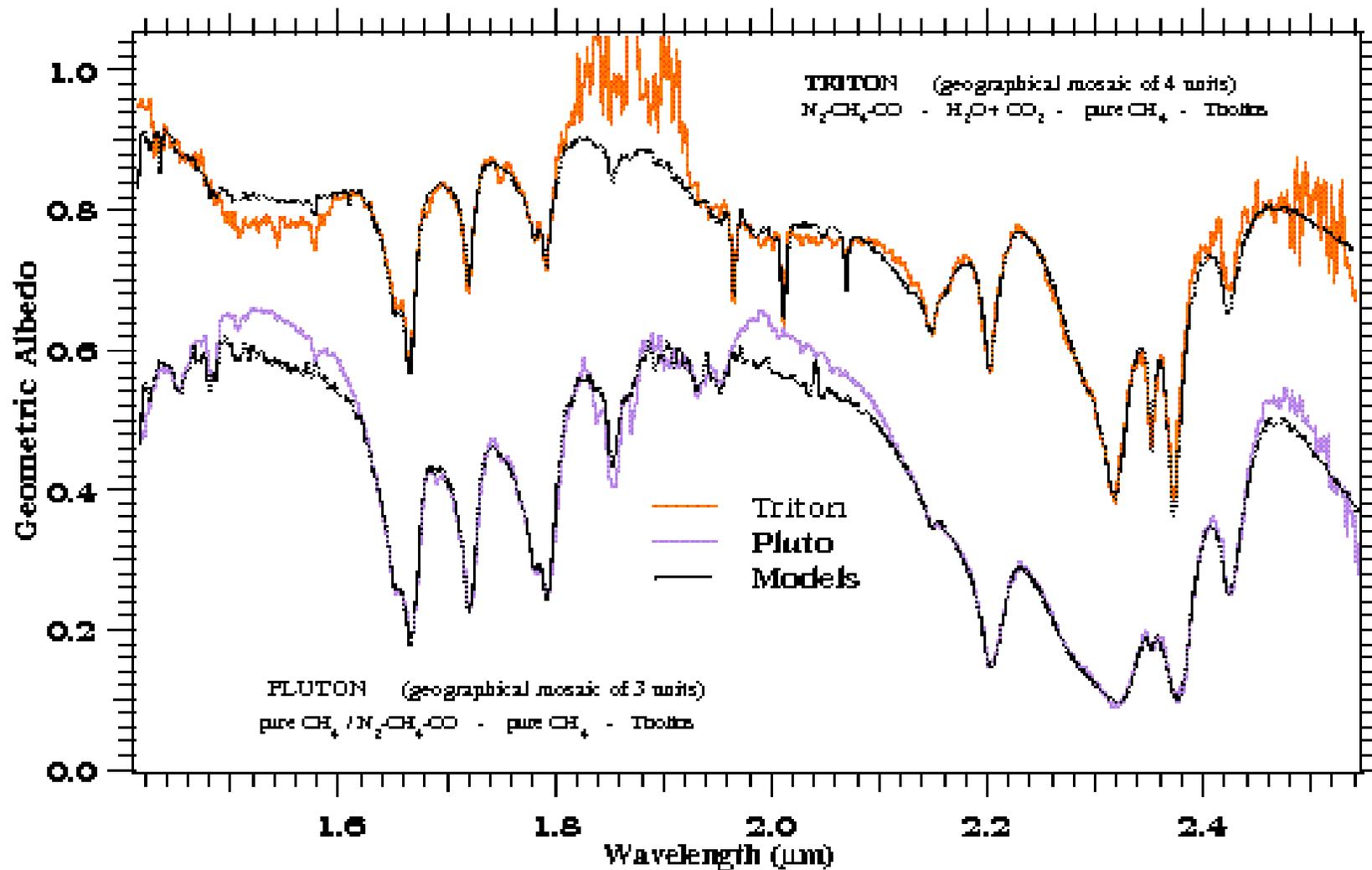
Observatoires sol :

- > 7 Télescopes infrarouge (Spectroscopie, imagerie)

Instruments :

- Spectromètres-Imageurs (+ multi-angulaires)
- Spectromètres
- Radiomètres multi-spectraux
- Imageurs multi-spectraux
- Imageurs stéréo ou multi-angulaires

Modélisation des spectres (surface de Triton et Pluton)

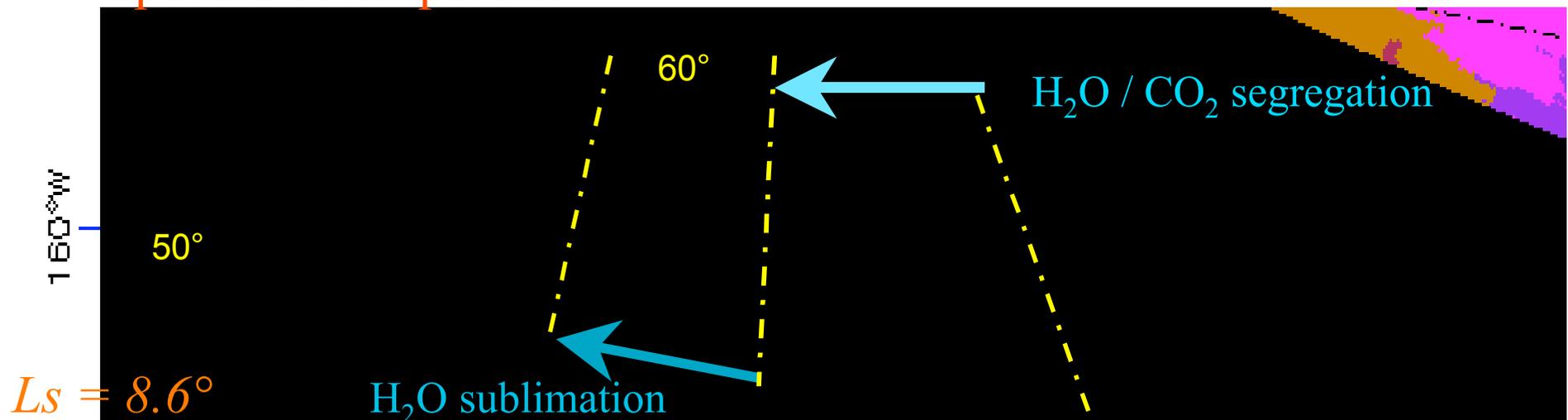
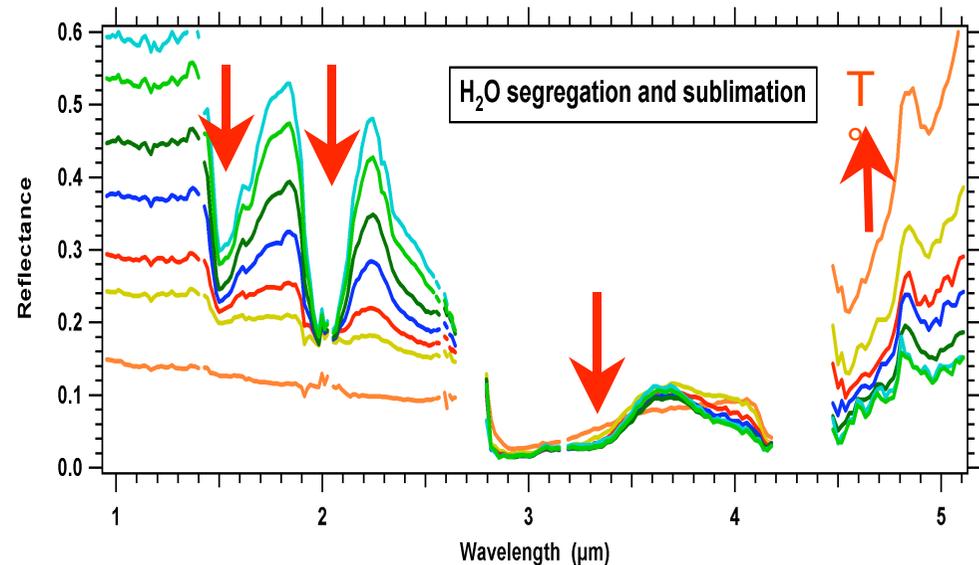


Identification et modélisation de composants de surface dans des spectro-images

- Evolution des condensats et hydratation Martiens avec latitude et saison

Modélisation / inversion des spectro-images :

=> quantification répartitions spatiale et temporelle



Imagerie microscopique infrarouge

Cartographie micrométrique de la liaison CN dans un échantillon de matière organique synthétique

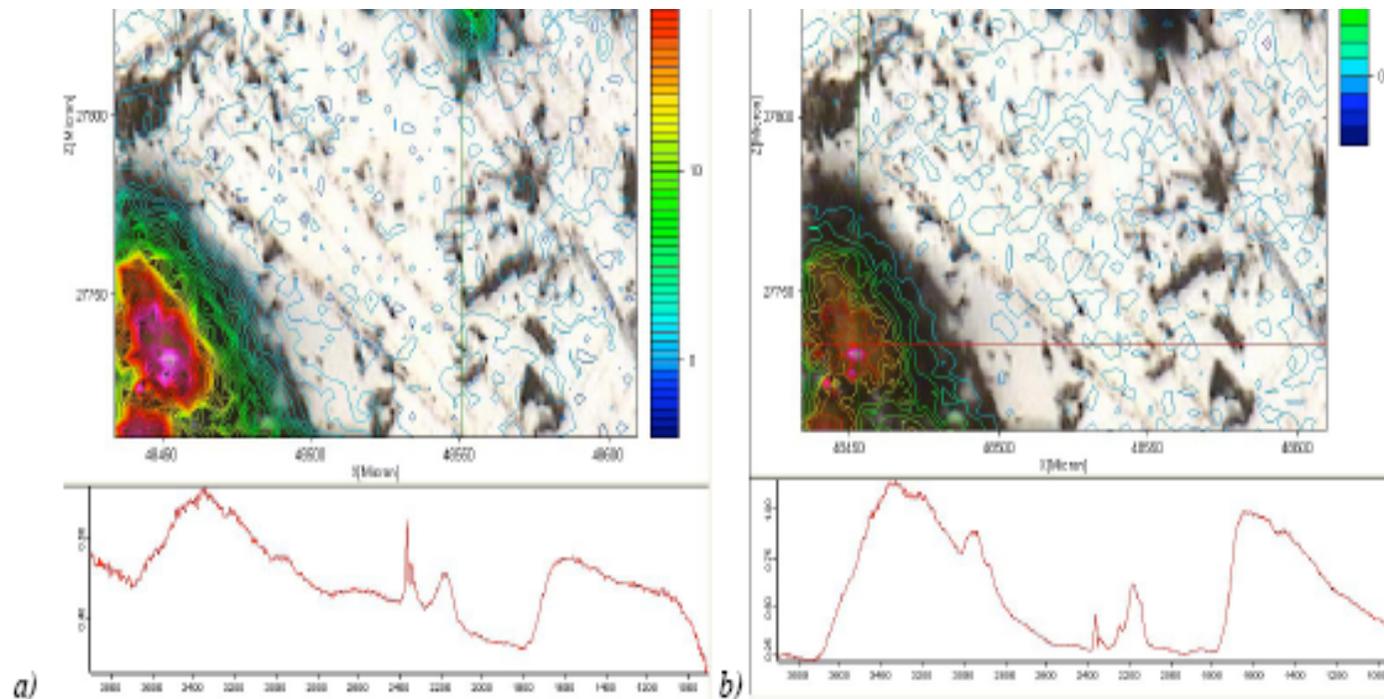


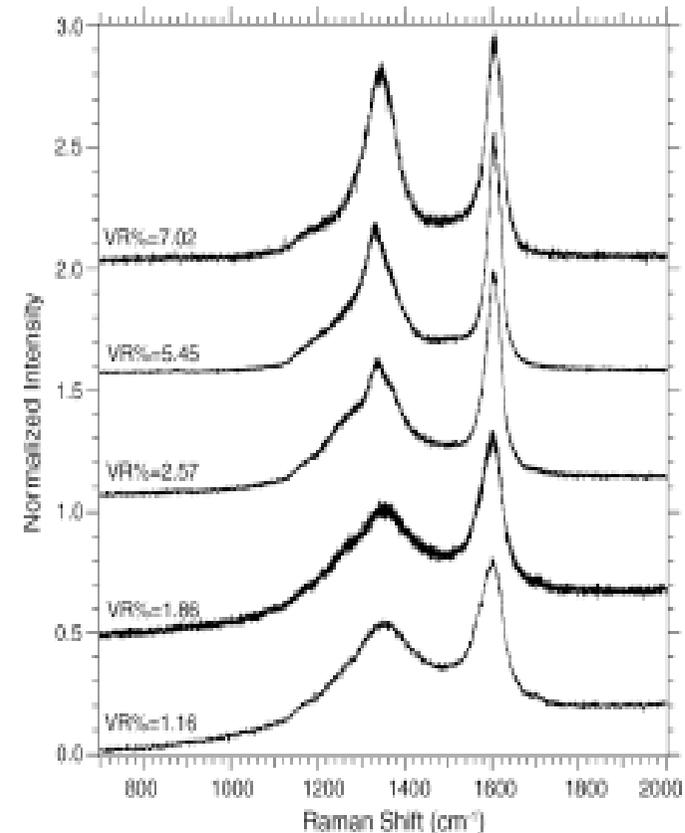
Figure 1: Cartographie d'absorption infrarouge en transmission de matière organique modèle des aérosols de Titan (tholins). La résolution spectrale est de 4 cm^{-1} , une moyenne est effectuée sur 100 scans, et l'acquisition a pris 5 minutes. Dans cette préparation, deux types de tholins sont présents et mélangés à l'échelle de la dizaine de microns. Il est possible de les discriminer par leurs propriétés spectrales. Les deux tholins possèdent une même bande d'adsorption vers $2100\text{-}2260 \text{ cm}^{-1}$ (liaison C-N) ce qui permet de les détecter (a). En revanche, ils diffèrent par la présence des modes aliphatiques $\text{CH}_2\text{-CH}_3$ vers $2800\text{-}3000 \text{ cm}^{-1}$ (b). Le rapport signal sur bruit de ces spectres est comparable à celui mesuré sur des échantillons macroscopiques par spectrométrie standard sur pastille.

Spectrométrie Raman :

Caractérisation du degré de métamorphisme des matériaux carbonés

Traceurs spectraux du métamorphisme de la matière organique des météorites

→ Analyse des échantillons extraterrestres (Stardust, ...)



Bilan utilisation actuelle des données spectroscopiques (transmission)

- ~ 300 papiers citant les 8 principaux articles de données de labo de spectroscopie du LPG
- ~ 200 (+ > 50) articles utilisant directement nos données de labo numériques (distribution manuelle et « de proche-en proche »)
- Utilisés par 90 laboratoires dans le monde
- Correspond seulement à < 10% de nos données spectroscopiques actuellement utilisables

Les Bases de Données

Glaces, minéraux, matériaux organiques, ...

* Bases de données expérimentales

- Spectroscopie visible-IR (0,3-200 μ m) en transmission
- Spectroscopie visible-proche IR en réflexion
- Micro-spectroscopies Raman et Fluorescence
- Micro-spectroscopie IR (images)

* Base de compilation de données (biblio, mesures, théorie)

- Propriétés Physico-chimiques

* Base de résultats d'analyses d'observations (futur)

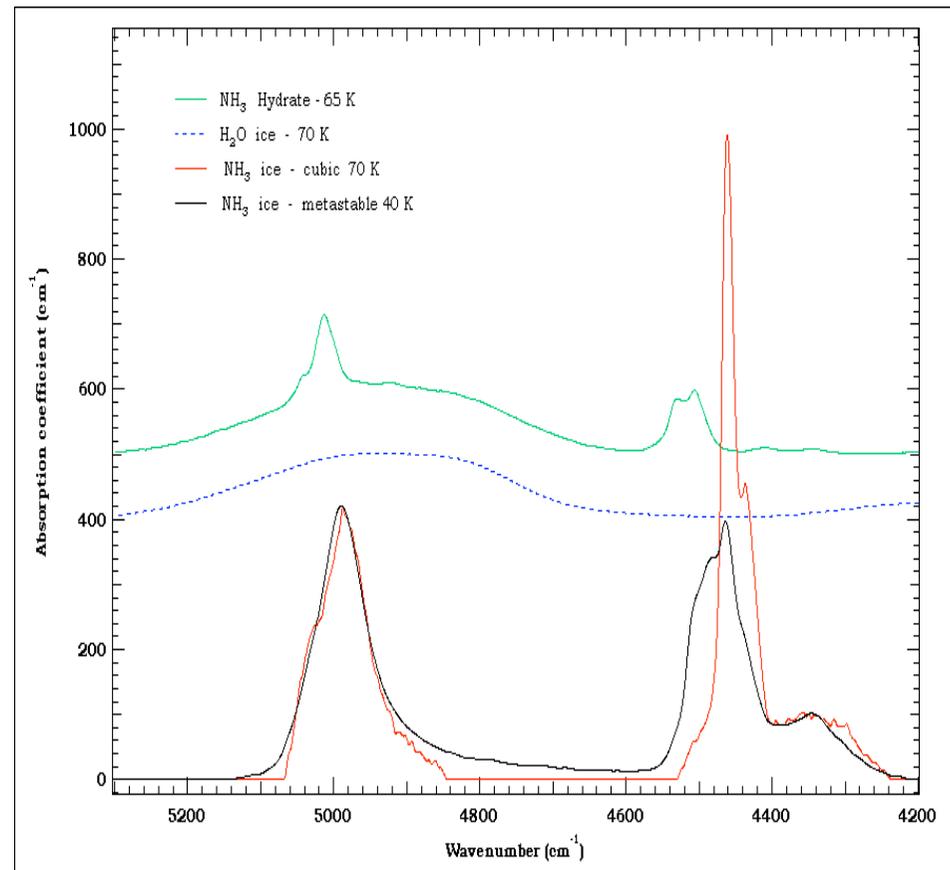
- NIMS/Galileo, DISR/Huygens, VIRTIS/Rosetta, ...
OMEGA / Mars Express

Bases de Données Expérimentales

Propriétés Spectroscopiques Visible-Infrarouge

- **Matériaux:** Glaces et solides moléculaires

- Corps purs
- Mélanges
- Composés
- Phase
- Température (20-300K)
- Histoire thermique

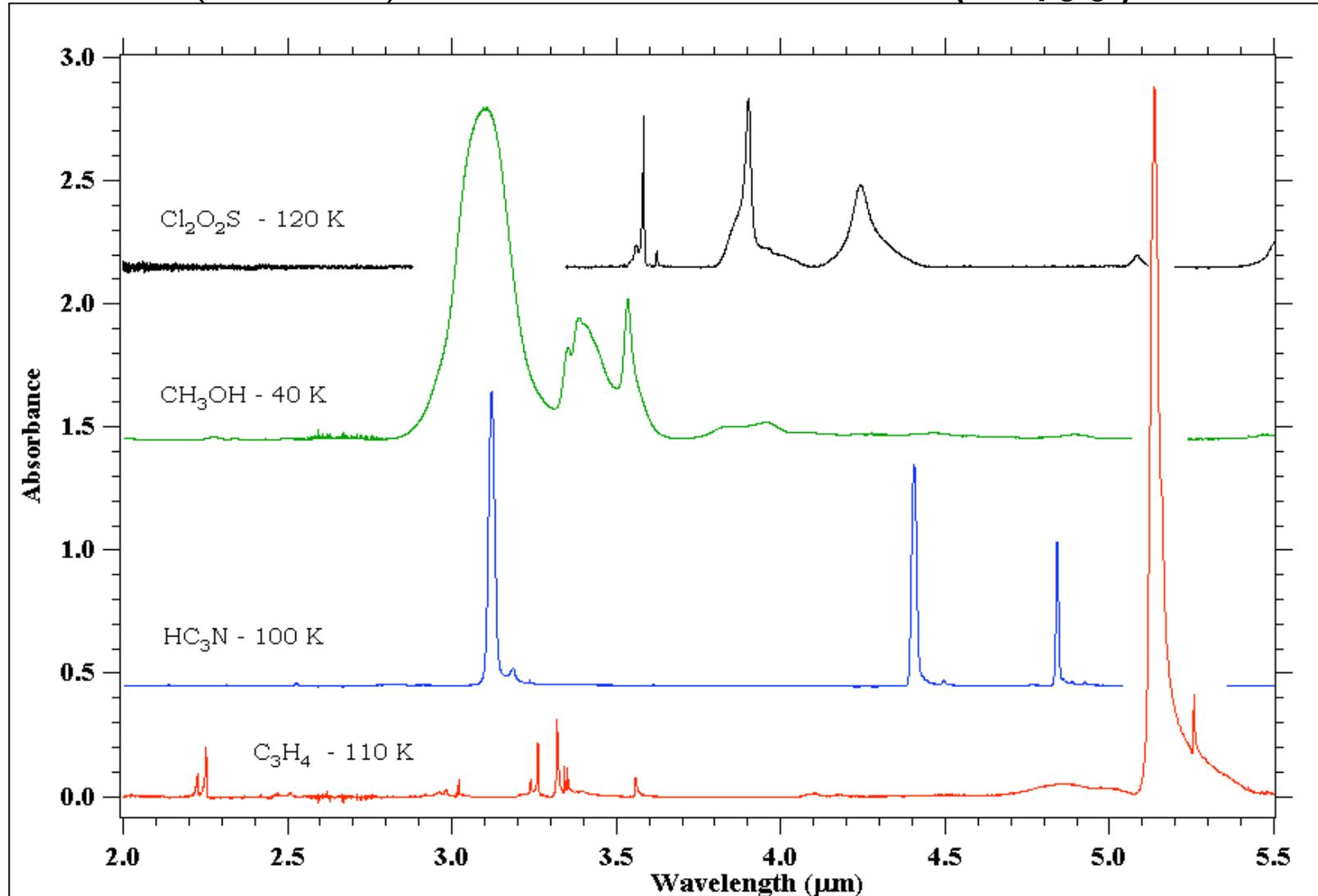


Propriétés Spectroscopiques Visible-Infrarouge

- Gamme spectrale : 0,3 - 200 μm
- Produits:
 - Spectres en transmission (niveau 1)
 - Spectres en absorbance normalisée (niveau 2)
 - Coefficients d'absorption (niveau 3)
 - Constantes optiques (niveau 3+)
 - Tables des positions et attributions des bandes

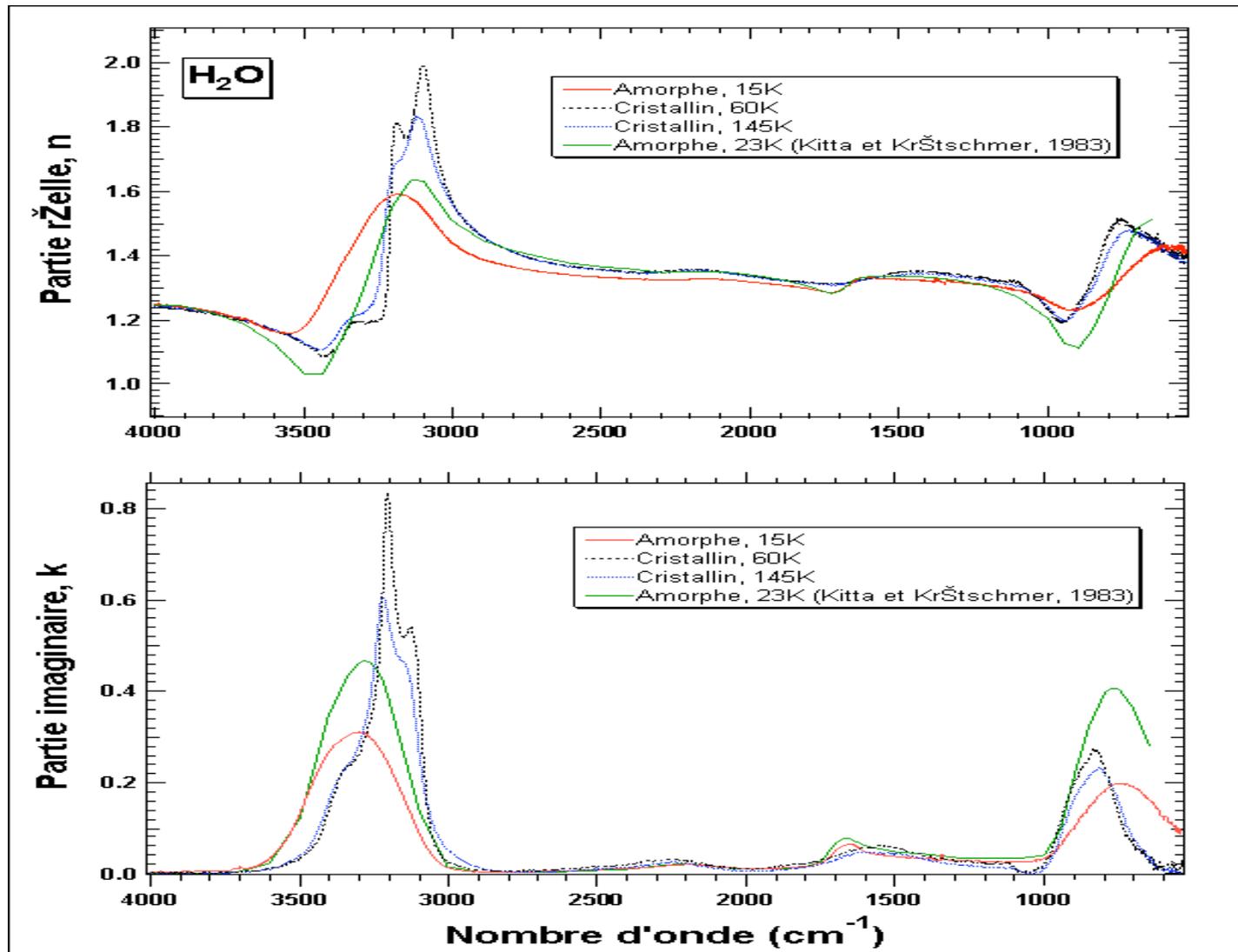
Spectres en transmission
(niveau 1)
(~ 5000)

Spectres en absorbance
normalisée (niveau 2)
(~ 400)



Constantes optiques (niveau 3+)

(~ 60)

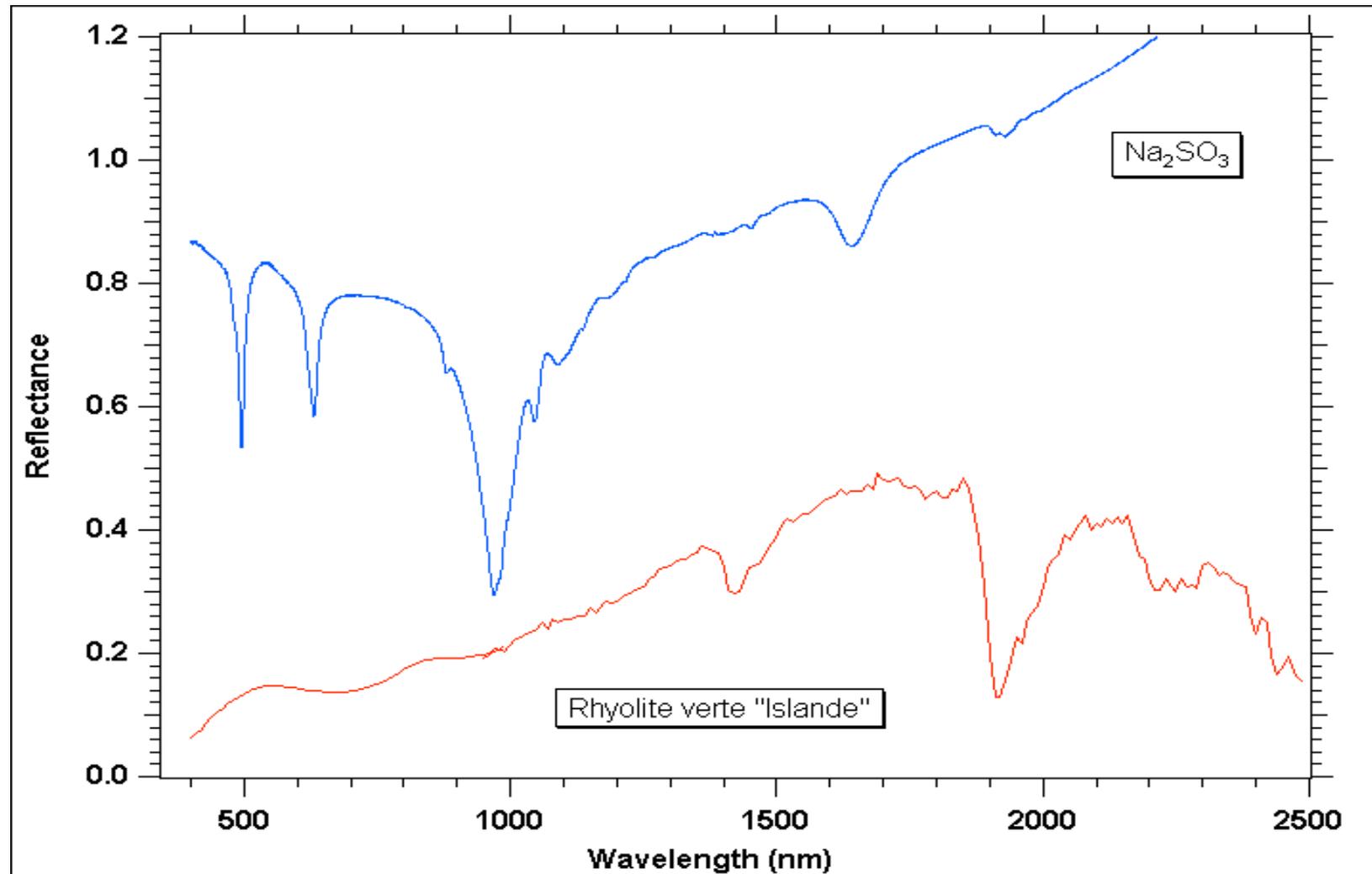


Bases de Données Expérimentales

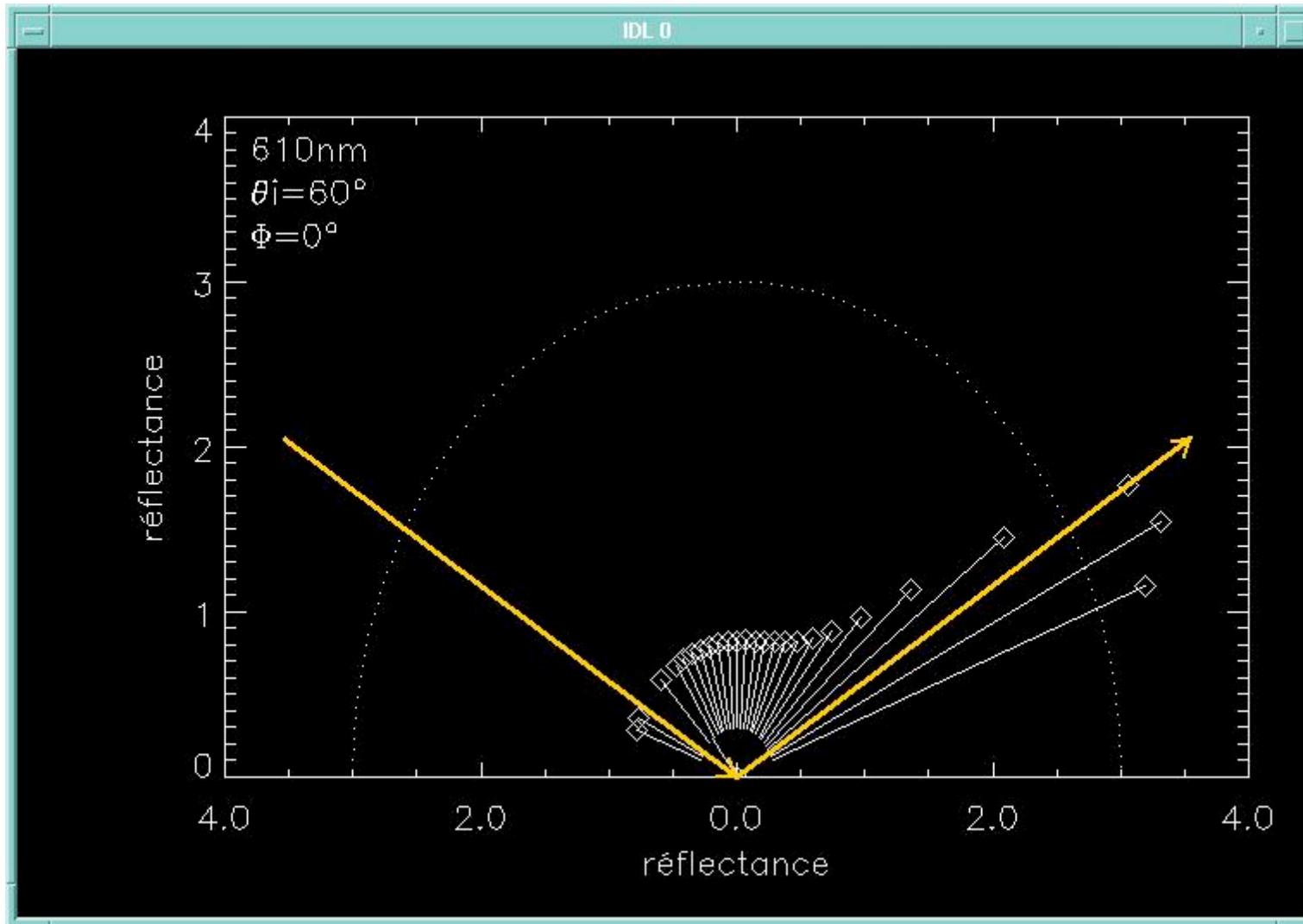
Spectroscopie en Réflexion Visible-Infrarouge

- **Matériaux:** Glaces, sels, minéraux, organiques...
- **Gamme spectrale :** 0,3 - 5 μm
- **Gammes angulaires:** $\Theta_i=0-80^\circ$, $\Theta_r=0-80^\circ$, $\Omega=0-180^\circ$
- **Produits:**
 - Spectres en réflexion (niveau 1)
 - Fonction de réflectance bidirectionnelle (niveau 2)
 - Paramètres de diffusion (niveau 3)
 - Tables des positions et attributions des bandes

Spectres en réflexion (niveau 1)



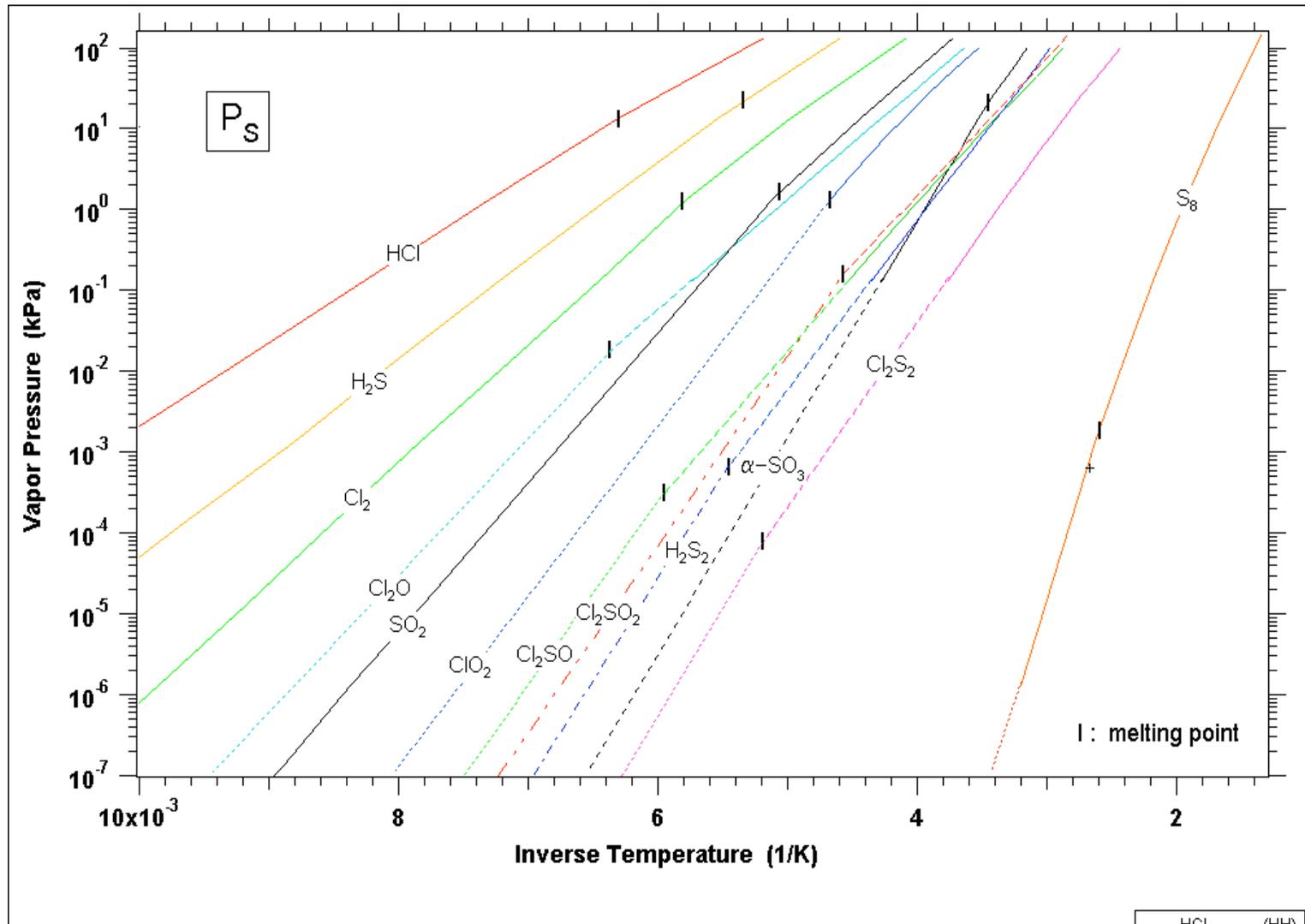
Fonction de réflectance bidirectionnelle (niveau 2)



Bases de Données Propriétés Physiques

- Molécules
 - masse molaire,
 - isotopes
- Cristallographie
 - phases, densité, ...
- Propriétés optiques
 - spectroscopie UV-IR
 - constantes optiques, indices
- Thermodynamiques
 - diagramme de phase
 - pression de vapeur
 - chaleur latente, capacité
 - conductivité thermique, ...
- Observations Planétaires
 - identifications
- Références

Pressions de vapeur saturante



Travail réalisé en 2006

- Définition la structuration scientifique du service et de ses « bases de données en planétologie »
 - Base de « données expérimentales en spectroscopies des solides »
(contient cinq sous-bases correspondant à des techniques différentes)
 - Base de « données des propriétés physiques des molécules condensées ».
- Développement / mise en place prototype informatique (sous SPIP/mSQL) du service de bases de données Web (démonstrateur : <http://stsp.obs.ujf-grenoble.fr>)
- Rédaction et intégration dans la base :
 - documents généraux des bases
 - liste du contenu potentiel.
- Validation et intégration dans la base:
 - données pour quelques matériaux pour chaque type de base et de propriétés
 - + l'ensemble des informations disponibles (meta-données)

Etat actuel

- Démonstrateur mis en ligne restreinte
(commissions OSUG/INSU/OV/IDIS/PNP/PCMI, utilisateurs test)
- Mise en ligne publique : début 2007
- OSUG : labellisation locale du service (octobre06)
- EuroPlaNet : soutient le service (case studies)
- INSU : demande de labellisation (proposé par OSUG)
- PNP, PN-PCMI : demandes d'avis / crédits
- ➔ PF7 (EuroPlaNet): projet de fédération de bases de données de spectroscopie de laboratoire (JRA)

Travail à réaliser

- **Développement structure informatique** et charte graphique du service et bases
 - outils de gestion des bases de données
 - recherche et accès aux données sur mots clefs ou critères
 - recherche/identification de bandes de longueur d'onde donnée
 - visualisation interactive des données
 - *suivi des clients utilisateurs de la base de données (suivi des mises à jour, ...)*
- **Mise en forme des données et méta-données** (format compatible OV : PDS ?)
 - Spectres, Tables, Images spectrales, MetaData, barres d'erreur, ...
- **Entrée données** dans les 2 bases de jeux de données scientifiques déjà validées (IR, Raman, compilation pressions de saturation, ...)
- **Validation des données** et des produits d'analyse issus de ces données
- Développement **d'outils en ligne de simulations** d'observations spectrales
- Développement de **l'interface de dialogue avec l'OV** de Planétologie « IDIS »

Questions

Définitions/développements communs à la planétologie :

- Formats et modèles de données (solides):
 - PDS ! (?) : Spectres (simples, bidirectionnels, ...), Constantes optiques, Tables de données (band lines, ...), Images spectrales, ...
 - Définition de « Data Models » ?
- Logiciels Bdd, couche OV, ...
 - SPIP adapté ?, SITools ?, ...
- Visualisation, recherches
 - au niveau de la base ou des OV ?
- OV Planétologie : ESA, IDIS, OV-France, rôle du CNES, ...

Développement des bases et services → LPG

- Formation OV de personnels
- Moyens humains !
 - Développement informatique (ingénieur)
 - Alimentation des bases (scientifiques)

Missions spatiales et instruments

Missions passées :

- ISO
 - SWS (Near-IR spectrometer)
 - LWS (Mid-IR + Far-IR spectrometer)
- Galileo (Jupiter system – 1995-2003)
 - NIMS (Near-IR mapping spectrometer)
 - SSI (multi-spectral Vis+Near-IR camera)
 - PPR (Vis photopolarimeter + Vis photometer + IR radiometer)
- Deep Space 1 (Comet – 1999-2001)
 - MICAS (2 cameras + IR mapping spectrometer)
- Huygens (Titan – 2004) :
 - DISR (3 cameras + 2 Vis-IR spectrometers)
- Stardust (Asteroid, Comet – 2000-2006)
 - Cometary dust collection for analysis
 - Vis-IR microscopic imaging-spectrometry
 - Raman imaging-spectroscopy
 - Fluorescence imaging-spectroscopy
 - ...

Missions en cours :

- **Mars Global Surveyor** (Mars - 1997-...)
 - TES (thermal IR emission spectrometer + Vis-IR radiometer)
 - MOC (Vis broadband camera)
- **Mars Odyssey 2001** (Mars - 2001-...)
 - THEMIS (multi-spectral vis-IR radiometer (15))
- **Mars Express** (Mars - 2004-...)
 - OMEGA (Vis-IR mapping spectrometer)
 - SPICAM (UV, IR spectrometer)
 - PFS (IR spectrometer)
- **Mars Exploration Rovers** (Mars - 2004-...)
 - Mini-TES (thermal IR emission spectrometer)
- **Mars Reconnaissance Orbiter** (Mars - 2006-...)
 - CRISM (multi-angular IR mapping spectrometer)
 - MCS (multi-spectral IR radiometer)
- **Cassini/Huygens** (Saturn system, Titan – 2004 - ...)
 - VIMS (Vis-IR mapping spectrometer)
 - CIRS (thermal IR emission spectrometer)
 - ISS (2 multi-spectral UV + Near-IR cameras)
- **Spitzer** (Observatoire spatial, 2003-2006-...)
 - IRS (Camera, mapping spectrometer)
- **Astro-F** (Observatoire spatial, 2006-2008)
 - IRC (Camera, mapping spectrometer)

Future missions :

- **Phoenix** (Mars - 2008-2009)
 - SSI (stereo multi-spectral Vis-NIR cameras)
- **Rosetta** (Asteroids, comets – 2007-2014)
 - VIRTIS (Vis-IR mapping spectrometer)
 - OSIRIS (2 multi-spectral UV-Vis-NIR cameras)
 - CIVA (7 Vis cameras + IR microscopic imaging-spectrometer)
 - ROLIS (Vis multi-bands Camera)
- **Dawn** (Asteroids – 2010 ?)
 - Vis-IR mapping spectrometer
 - multi-spectral Vis camera
- **Mars Science Laboratory + Aurora + ...** (Mars - 2010-...)
 - Vis-IR spectrometers
 - Stereo Multi-spectral Cameras
 - Raman spectroscopy
 - Microscope camera
 - ...
- **New Horizons** (Pluto + TNO – 2015-2020-...)
 - LEISA (Vis-IR mapping spectrometer)
 - MVIC (multi-spectral Vis camera)