

Base de données pour la spectroscopie des solides

Présentation du 26 Novembre 2007
par Bernard SCHMITT
et Véronique GOUANERE
Laboratoire Planétologie de Grenoble

- **Projet global**
- **Base spectroscopique en transmission**
- **Fonctionnalités**
- **Etapas du projet**
- **Structure de la base de données**
- **Evolution en Observatoire Virtuel**
- **Choix techniques**
- **Conclusion**

Bases de données spectroscopiques des matériaux solides d'intérêt planétologique

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

Matériaux planétaires solides

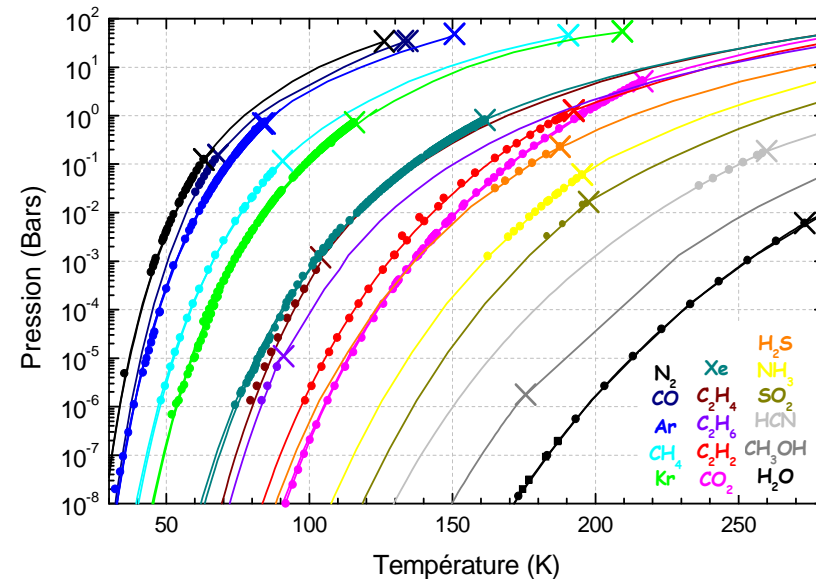
- Glaces, molécules volatiles, hydrates, clathrates, ...
- Organiques: simples, matériaux macromoléculaires, polymères,
- Roches, minéraux, sels, matériaux hydratés, ...
- Autres composés (composés Soufrés, ...)
- Echantillons naturels et Extraterrestres (météorites, IDP's, ...)
- Composants optiques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

- regrouperait les propriétés :
 - moléculaires,
 - cristallographiques,
 - optiques
 - thermodynamiques.
 - + données thermodynamiques expérimentales (LPG)



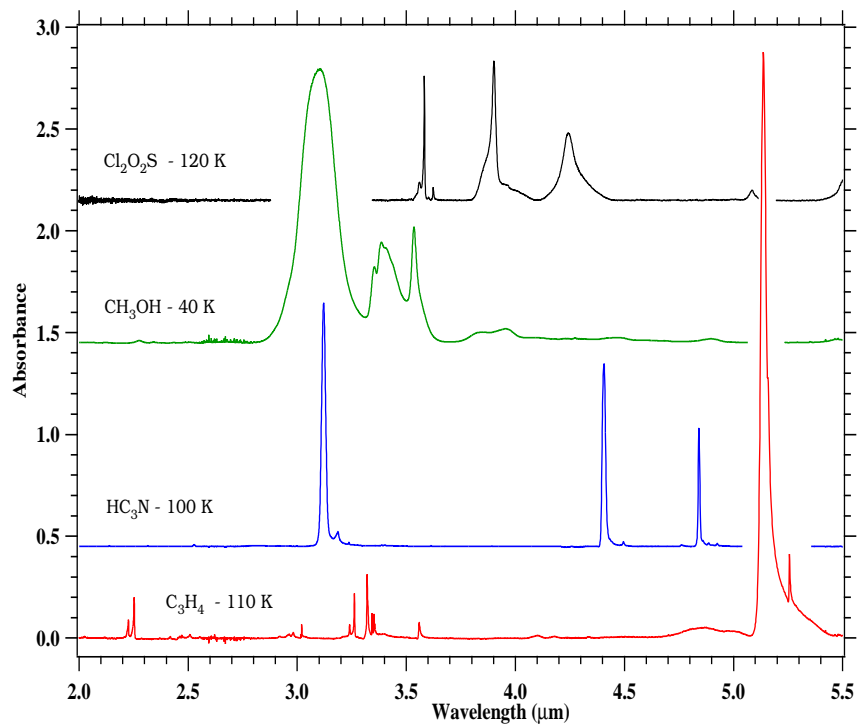
Compilation des Pressions de vapeur saturante des glaces

Propriétés Spectroscopiques Visible-Infrarouge

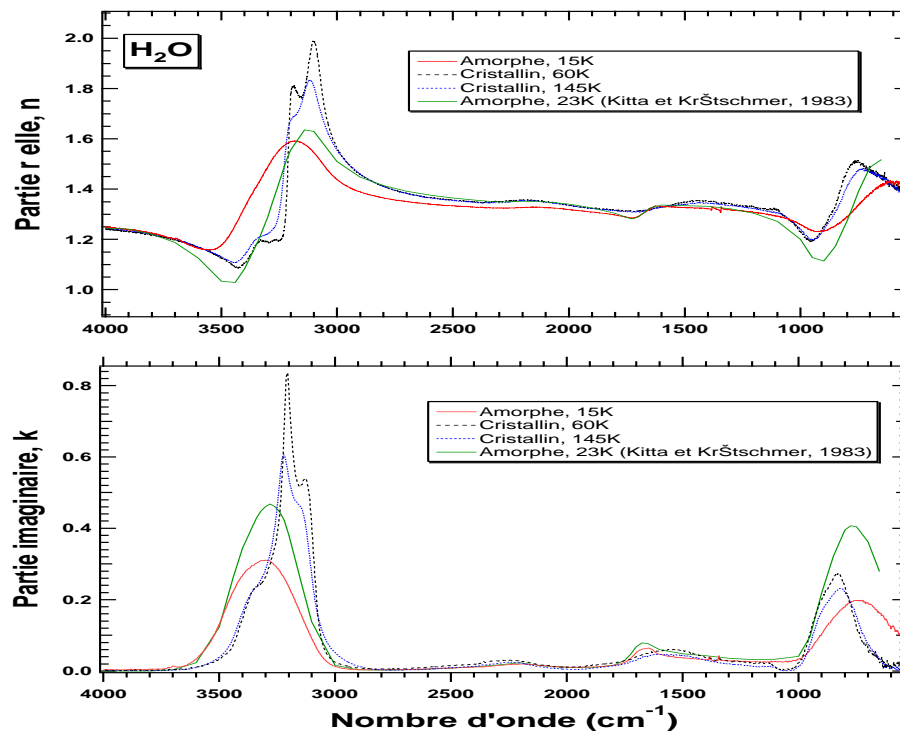
- **Gamme spectrale** : 0,3 - 200 μm
- **Température** : 10 K - 300 K

- **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,...)

TABLE I
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
$2\nu_{4b}$ (CH ₃ D)	new band	2305 ± 1	1.27 × 10 ⁻¹	2308 ± 5	8.08 × 10 ⁻²
$2\nu_4$	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)			
$3\nu_4$	C89	3846 ± 1	4.84 × 10 ⁺¹	3847 ± 2	2.00 × 10 ⁺¹
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
$4\nu_4$	C92	5114 ± 1	1.90 × 10 ⁻¹	5113 ± 2	1.14 × 10 ⁻¹
$4\nu_4$	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	—	—
$2\nu_3$	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	—	—

Bandes de la glace de CH₄

$2\nu_2 + 3\nu_4$	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	—	—
$\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$	Q97a	7351 ± 3	2.77 × 10 ⁺⁰	7340 ± 5	1.83 × 10 ⁺⁰
$\nu_2 + 2\nu_3$	C92	7488 ± 1	5.23 × 10 ⁺⁰	7487 ± 2	2.71 × 10 ⁺⁰
$\nu_1 + 4\nu_4$	new band	8045 ± 1	4.63 × 10 ⁻²	8050 ± 2	2.25 × 10 ⁻²
$\nu_3 + 4\nu_4$	new band	8087 ± 1	4.94 × 10 ⁻²	8090 ± 2	3.22 × 10 ⁻²
$\nu_1 + \nu_2 + 3\nu_4$	new band	8257 ± 2	8.85 × 10 ⁻²	—	—
$\nu_2 + \nu_3 + 3\nu_4$	reassigned	8307 ± 1	3.60 × 10 ⁻¹	8311 ± 2	1.84 × 10 ⁻¹
$2\nu_1 + 2\nu_4$	C92	8389 ± 1	8.87 × 10 ⁻¹	—	—
$\nu_1 + \nu_3 + 2\nu_4$	reassigned	8409 ± 1	8.29 × 10 ⁻¹	8408 ± 2	5.33 × 10 ⁻¹
$2\nu_3 + \nu_4$	reassigned	8542 ± 5	1.39 × 10 ⁺⁰	—	—
$2\nu_1 + \nu_2 + \nu_4$	reassigned	8587 ± 1	4.77 × 10 ⁺⁰	8583 ± 2	2.85 × 10 ⁺⁰
$2\nu_1 + \nu_3$	C92	8758 ± 2	1.09 × 10 ⁺⁰	—	—
$\nu_2 + 2\nu_3 + \nu_4$	C92	8782 ± 1	2.59 × 10 ⁺⁰	8782 ± 2	1.29 × 10 ⁺⁰
$\nu_1 + 2\nu_3$	C92	8881 ± 1	9.55 × 10 ⁻¹	8875 ± 3	5.42 × 10 ⁻¹
$3\nu_3$	C92	9021 ± 2	1.09 × 10 ⁻¹	9016 ± 3	7.10 × 10 ⁻²
$\nu_1 + \nu_3 + 3\nu_4$	C92	9734 ± 1	3.17 × 10 ⁻²	9734 ± 3	3.01 × 10 ⁻²
$2\nu_3 + 3\nu_4$	C92	9855 ± 2	2.06 × 10 ⁻¹	9855 ± 4	1.31 × 10 ⁻¹
$3\nu_1 + \nu_4$	C92	9980 ± 1	1.43 × 10 ⁻¹	9981 ± 2	1.11 × 10 ⁻¹
$2\nu_1 + \nu_3 + \nu_4$	C92	10014 ± 4	8.36 × 10 ⁻²	—	—
$\nu_1 + 2\nu_3 + \nu_4$	C92	10081 ± 2	2.52 × 10 ⁻¹	10080 ± 4	1.55 × 10 ⁻¹
$3\nu_3 + \nu_4$	C92	10270 ± 2	1.14 × 10 ⁻¹	10263 ± 4	7.35 × 10 ⁻²
$\nu_2 + 3\nu_3$	new band	10466 ± 4	3.06 × 10 ⁻³	—	—
$3\nu_2 + 2\nu_3$	new band	10514 ± 3	4.98 × 10 ⁻³	—	—
$2\nu_3 + 4\nu_4$	C92	11088 ± 1	1.82 × 10 ⁻¹	11092 ± 3	1.24 × 10 ⁻¹

- Recherche :
 - recherche conditionnelle (mots clefs, paramètres) et accès à toutes données
 - recherche conditionnelle des molécules de la base sur formule (ex: « C_xH_yO_z »)
 - recherche de bandes comprises dans une fourchette spectrale donnée pour les molécules type « C_xH_yO_z » (à partir de tableaux de positions)

- Opérations :
 - convolution des spectres à différentes résolutions
 - changements d'unités spectrales

- Visualisation :
 - visualisation interactive des spectres (zoom, ...) et des barres d'erreur
 - comparaison de spectres, label des pics, ...

- Outils
 - simulation de spectres en transmission
 - intégration du logiciel de simulation de spectres en réflexion (LPG)

- Système de livraison :
 - des fichiers produits, tables (complets, partiels), figures (choix d'unités...)
 - de références associées dans formats standards (bibtex, endnote, ascii)
 - d'un fichier annexe (conditions d'utilisation + référence de la Base)
 - fonctionnalité panier d'achat

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

- Alimentation de la base
 - interface pour alimenter la base : fichiers, meta-données, tableaux, ...

Etapes du projet (1)

Etape 1 (Faite)

- Cahier des charges pour analyser le besoin.
- Elaboration d'un dictionnaire.
- Architecture logiciel : parcours des choix techniques (outils de modélisation, cadre de développement).

Étapes du projet (2)

Étape 2

- Elaboration des jeux de données :
fichier texte répertoriant tous les cas de mesures et de données qui pourraient être produites.
- Modélisation de la base de données (en cours).

Étape 3

- Création de la base de données à partir de la modélisation.
- Ajout automatiques des données dans la base à partir des fichiers existants (bin,ascii).

Etapes du projet (3)

Etape 4

- Elaboration architecture logicielle : modélisation UML.

Etape 5

- Interface front-end : interface WEB pour utilisateur (formulaires, graphes, référence bibliographique).

Etape 6

- Interface back-end : interface WEB pour l'administration de la base de données.
- Authentification pour déterminer profil : administrateur ou utilisateur.

Etapes du projet (4)

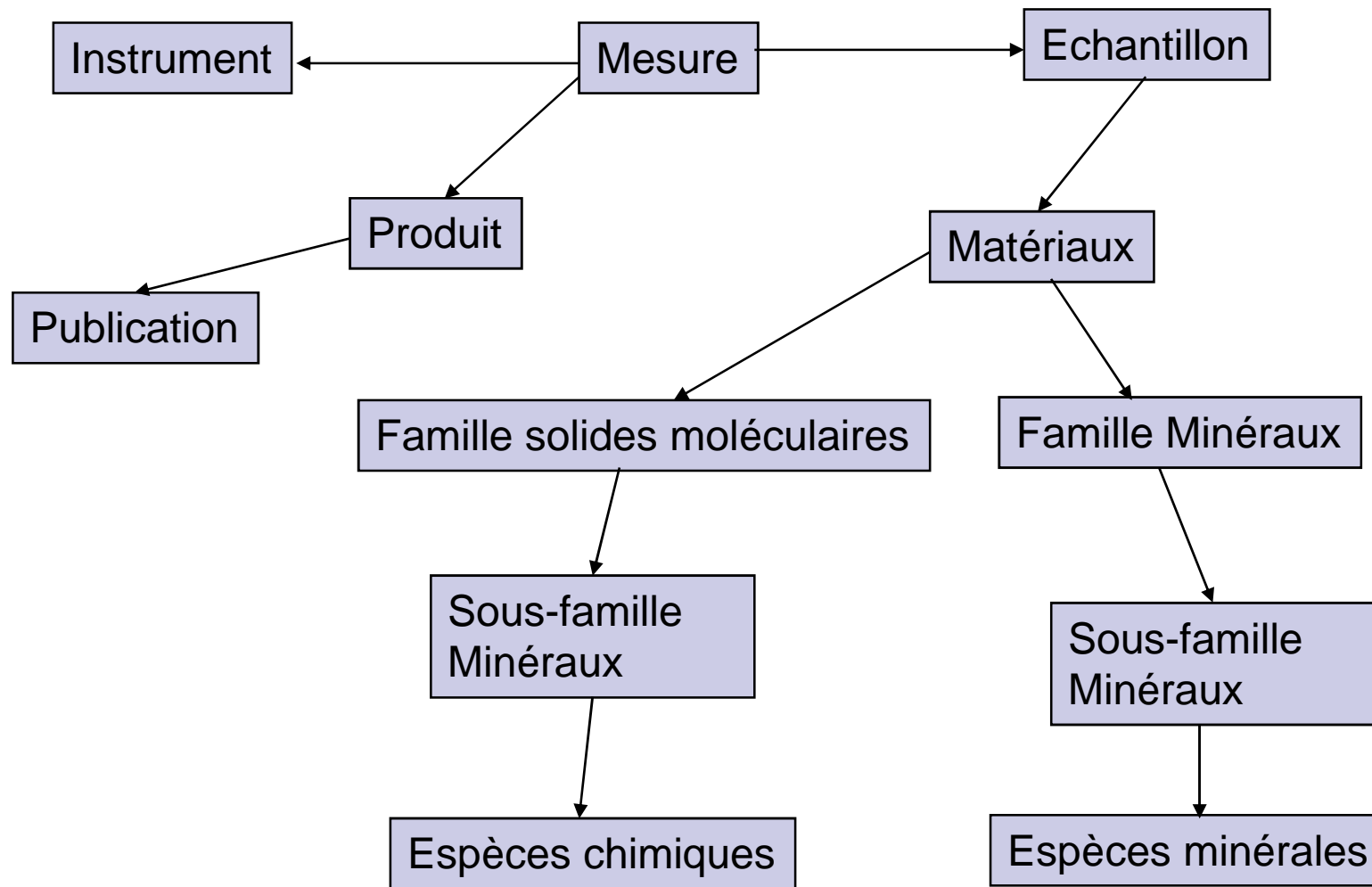
Etape 7

- Conception des outils de visualisation (zoom sur graphe).
- Simulation de spectres en réflexion (logiciel existant) et transmission (à faire).

Etape 8

- Conception des outils de livraison des nouvelles données : serveur FTP, alerte par email.

Structure de la base de données



Evolution en Observatoire virtuel

- Elargissement des données convexes : dictionnaire commun, fichiers d'échanges XML, moteur de recherche de base.
- Conception interface OV : ajout de menus supplémentaires.

Choix techniques

- Open Source
- OS : Linux Fedora Core 7
- Base de données : MYSQL
- Modélisation base : DBDesigner Fork
- Modélisation projet : BOUML (UML)
- Framework de développement : Eclipse, J2EE/JAVA, Apache Tomcat

Conclusion

- Création de la base de données des mesures et produits de spectroscopie du LPG et interface WEB.
- Evolution en OV pour la planétologie : base et interface WEB extensibles.