

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
- Etapes 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

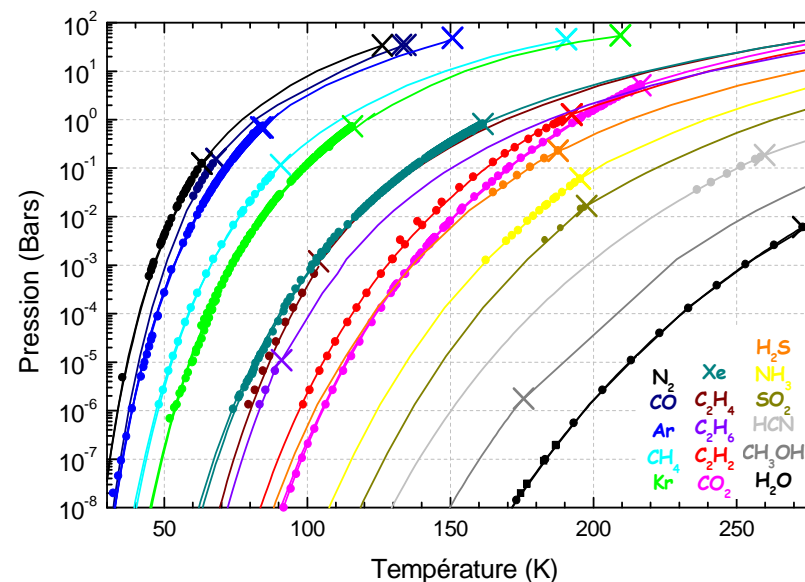
- Glaces, molécules volatiles, hydrates, clathrates, ...
- Organiques: simples, matériaux macromoléculaires, polymères,
- Roches, minéraux, sels, matériaux hydratés, ...
- Autres composés (composés Soufrés, ...)
- Echantillons naturels et Extraterrestres (météorites, IDP's, ...)
- Composants optiques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



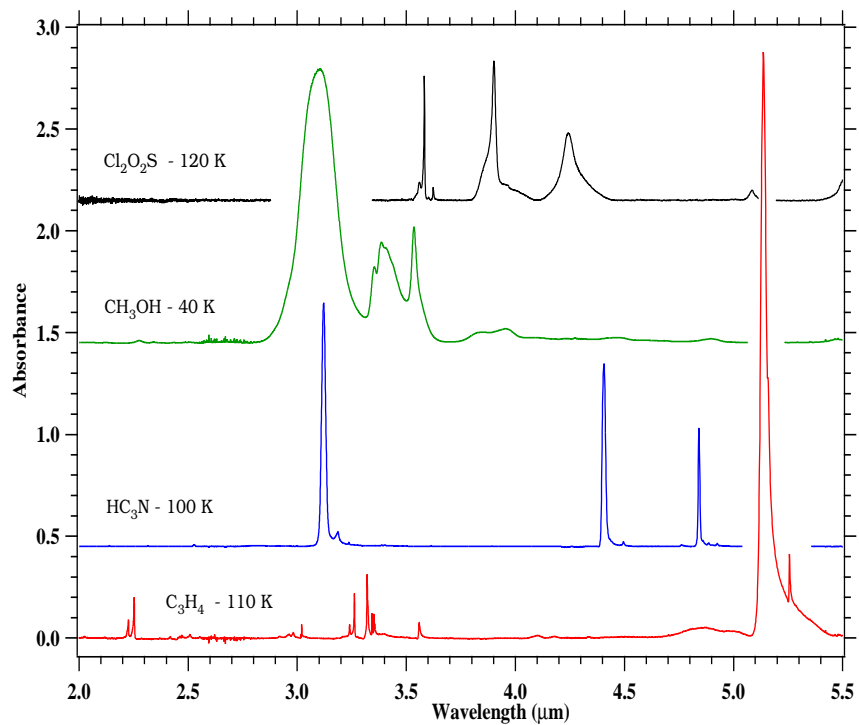
Compilation des Pressions de vapeur saturante des glaces

Propriétés Spectroscopiques Visible-Infrarouge

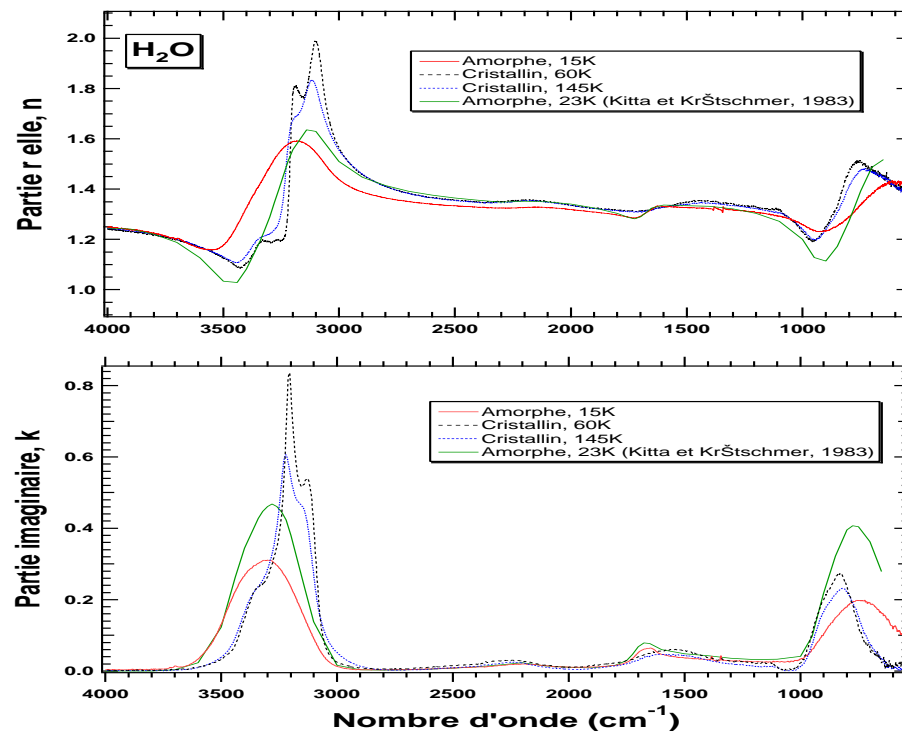
- Gamme spectrale : 0,3 - 200 μm
- Température : 10 K - 300 K

- 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 |
| $3\nu_4$ | 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: « CxHyOz »)
 - recherche de bandes comprises dans une fourchette spectrale donnée pour les molécules type « CxHyOz » (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)

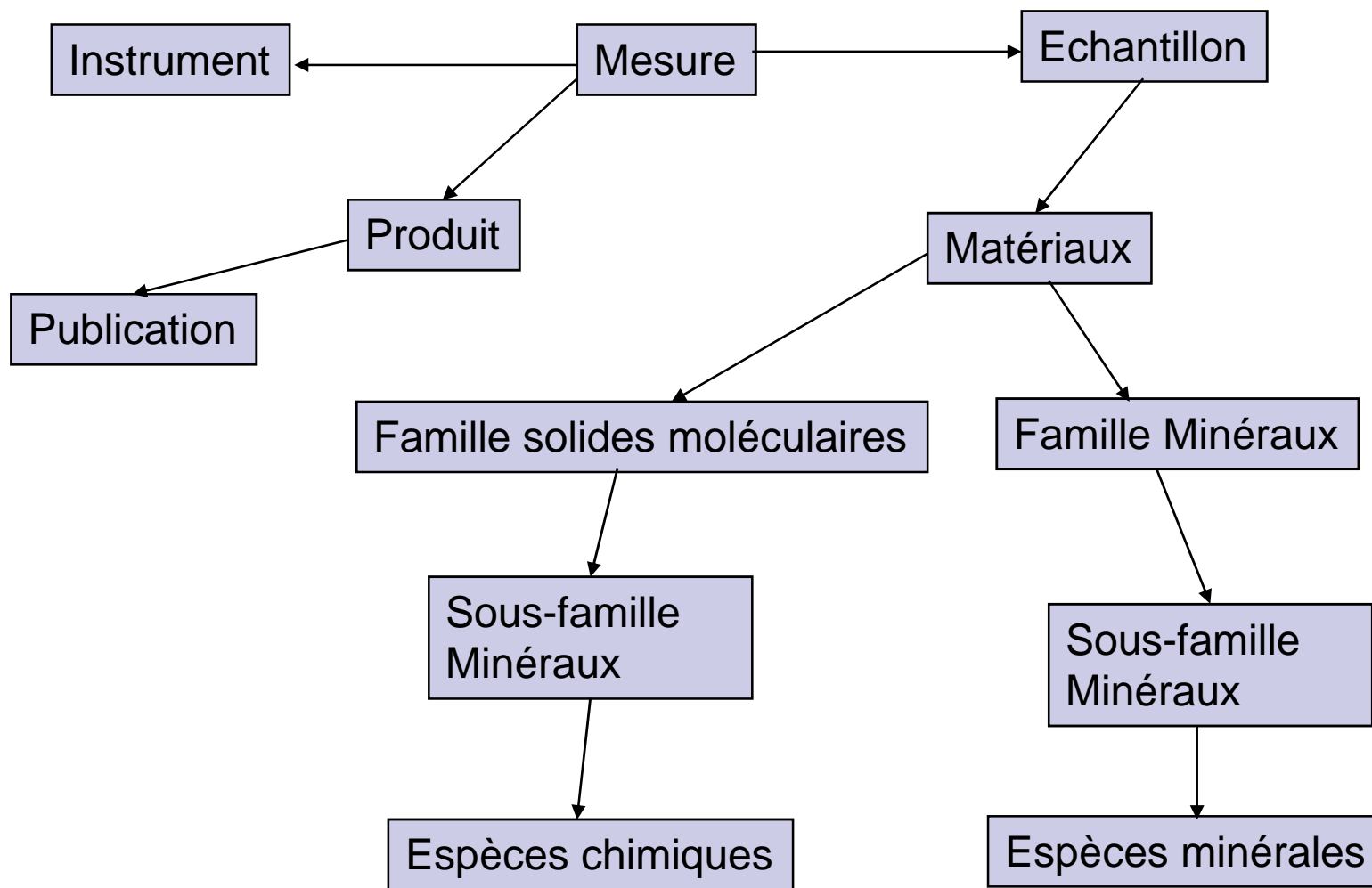
Etape 7

- 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.