



# Lecture de spectres

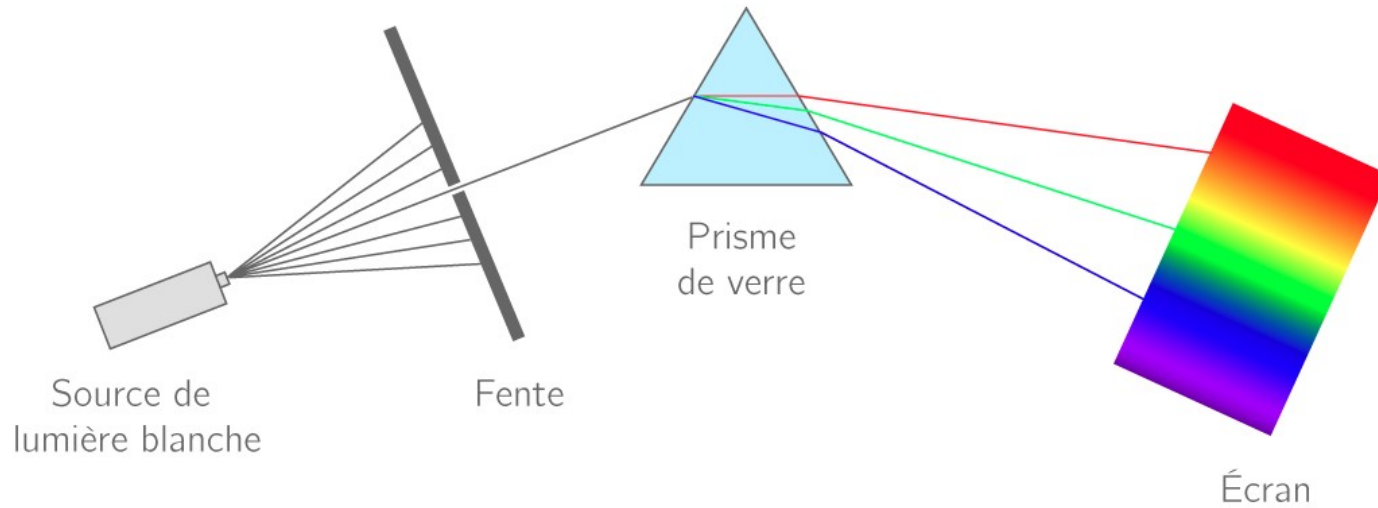
## Quelques bases pour la spectrométrie





# Rappels

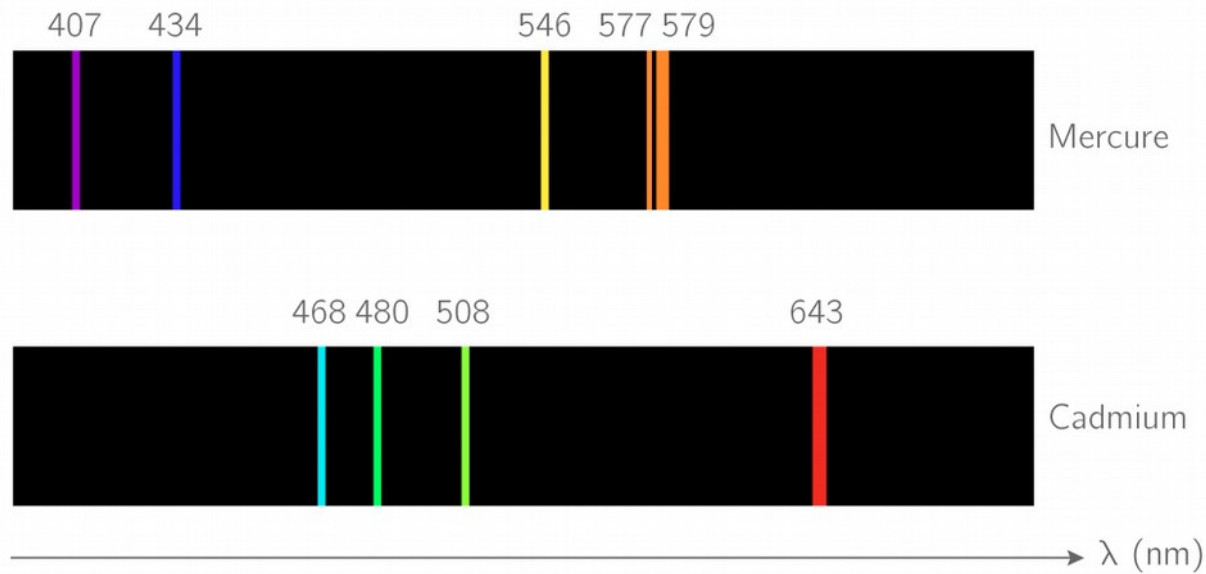
## Spectre d'émission



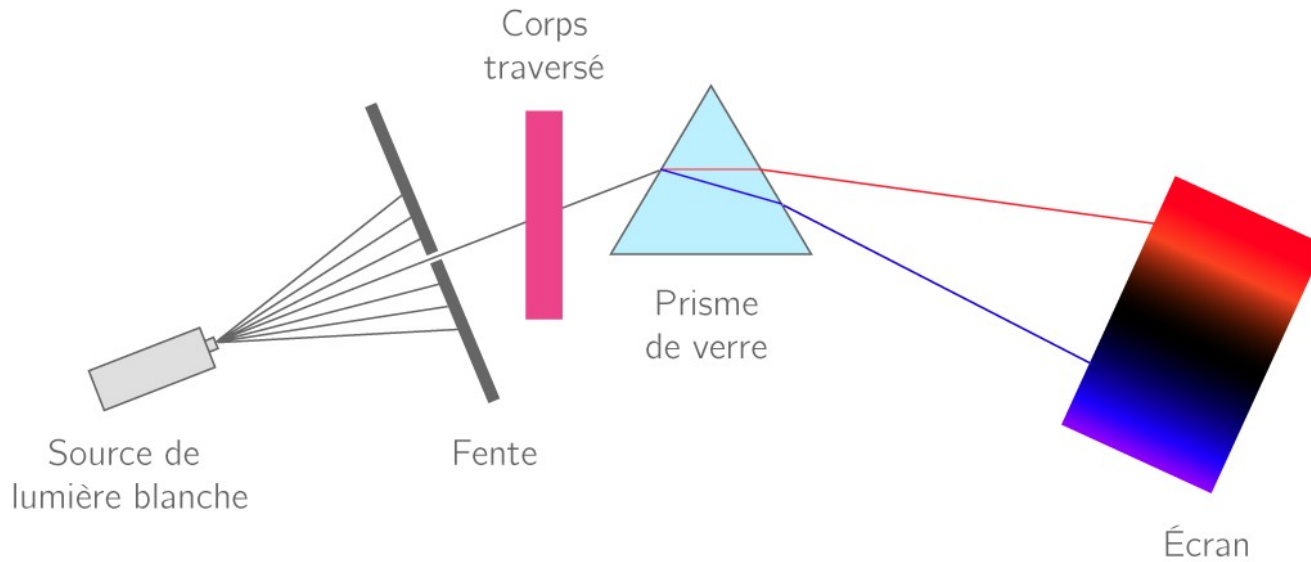
## Spectre thermique continu



## Spectre de raies d'émission

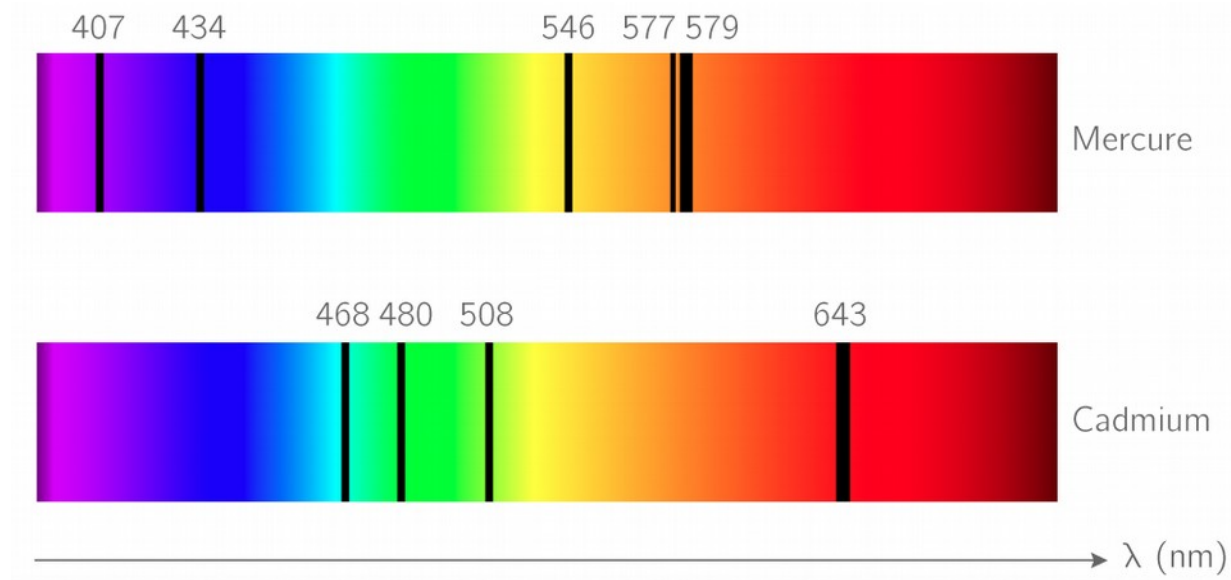


## Spectre d'absorption

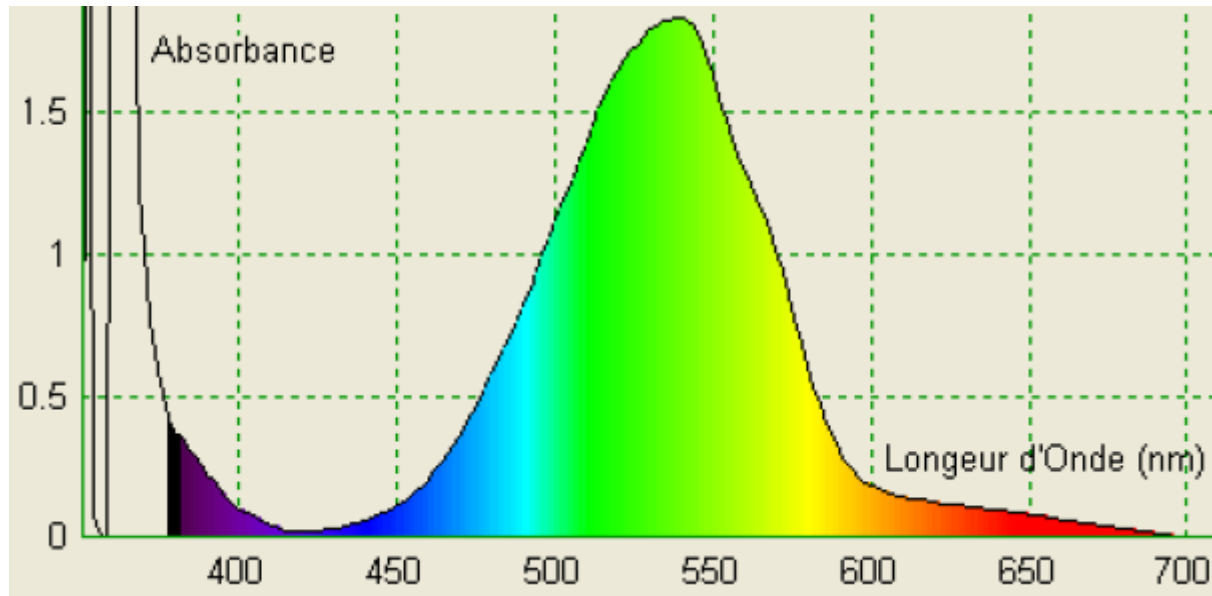




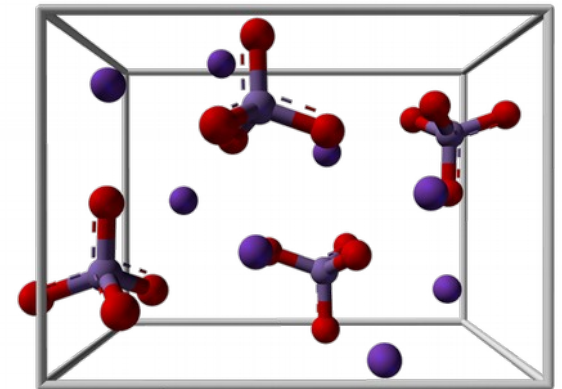
## Spectre de raies d'absorption



## Spectre de bandes d'absorption

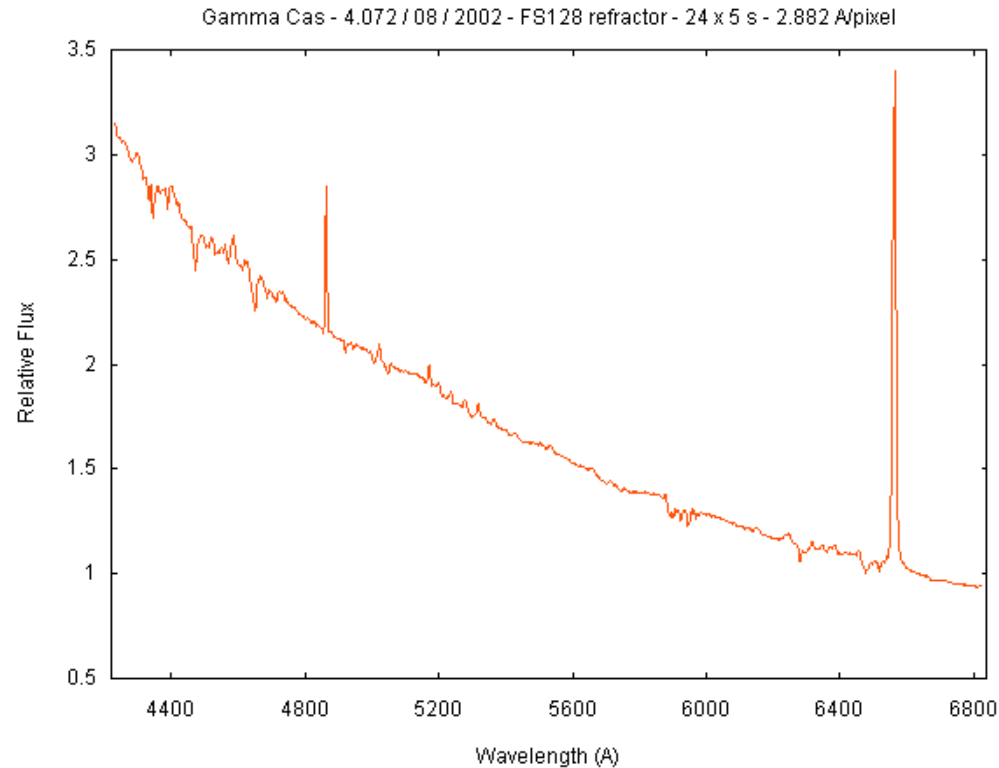


Solution de permanganate de potassium





## Courbe spectrale



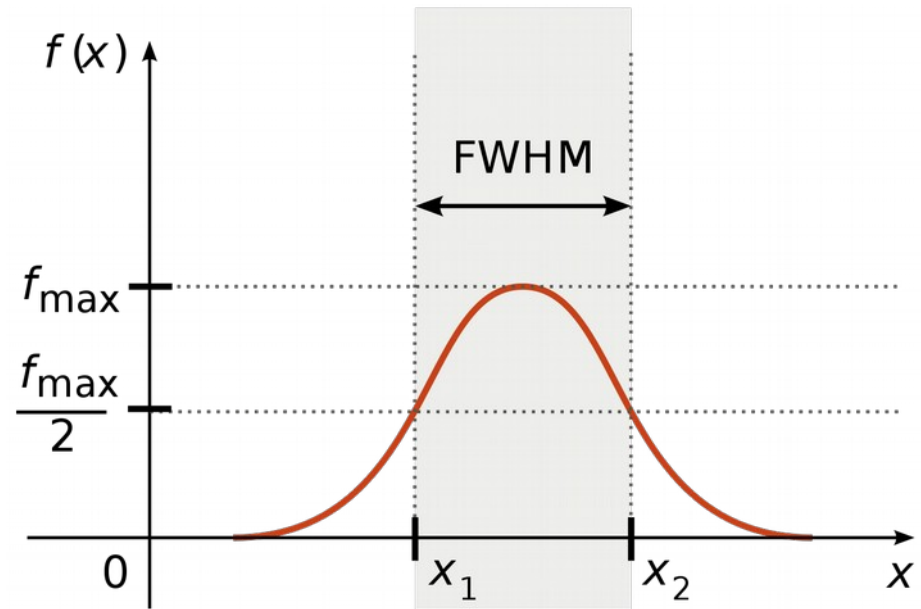
- On peut mesurer l'intensité de chaque longueur d'onde
- On produit ainsi une courbe d'intensité
- Ou encore une courbe d'absorbance (pour les spectres d'absorption)



Intensité de raie

## Les raies ont une « épaisseur »

- On parle de largeur de raie
- On la mesure par sa largeur à mi-hauteur ou FWHM (« Full Width at Half Maximum »)



# Pourquoi les raies ont-elles une largeur ?

- Des raisons liées au spectrographe
  - Diffraction par la fente qui n'est pas infiniment mince
  - Diffraction par le réseau
  - Diffraction due aux dimensions des optiques du spectrographe



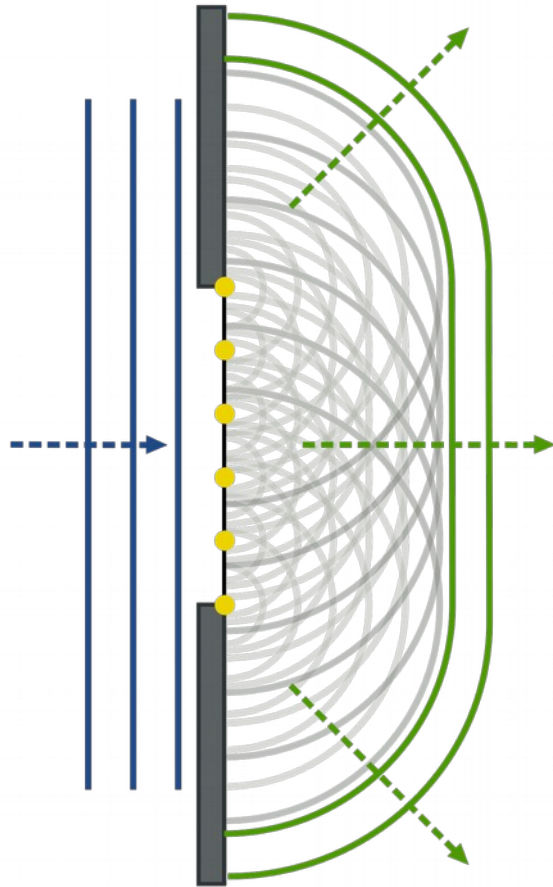
Impact sur le pouvoir de résolution du spectrographe

- Des raisons intrinsèques à l'objet observé
  - Collisions et diffusions
  - Effet Doppler du fait de la température des gaz
  - Effet Doppler dû à l'expansion de l'objet observé
  - Incertitude d'Heisenberg
  - Etc.

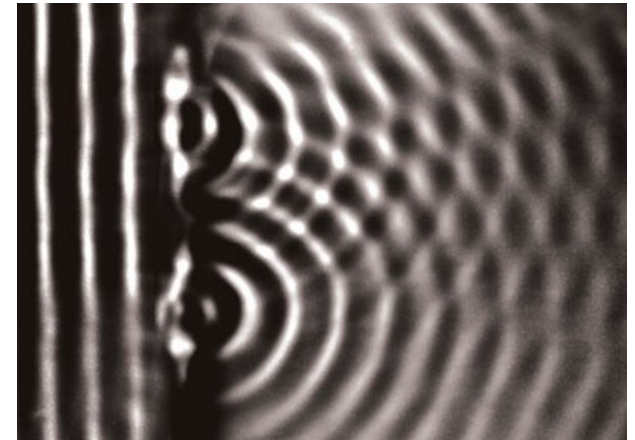
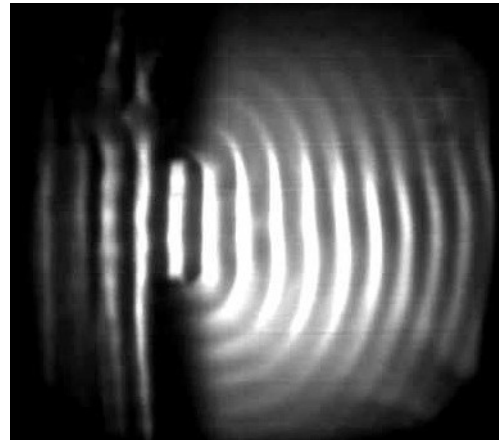
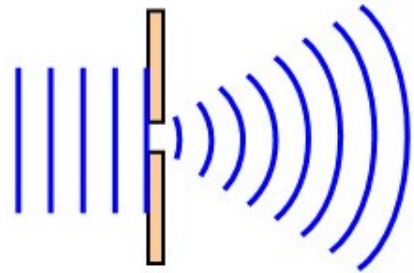
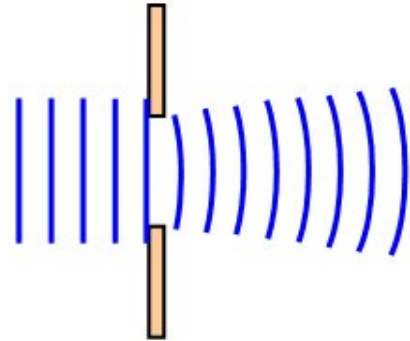


Impact sur la compréhension de la physique de l'objet observé

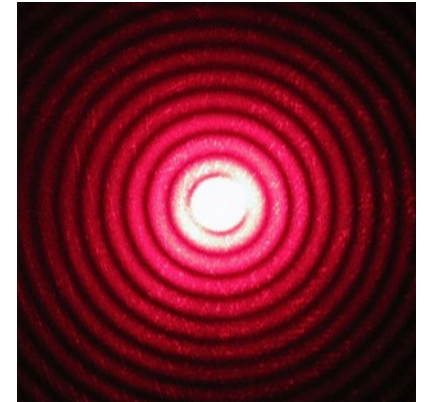
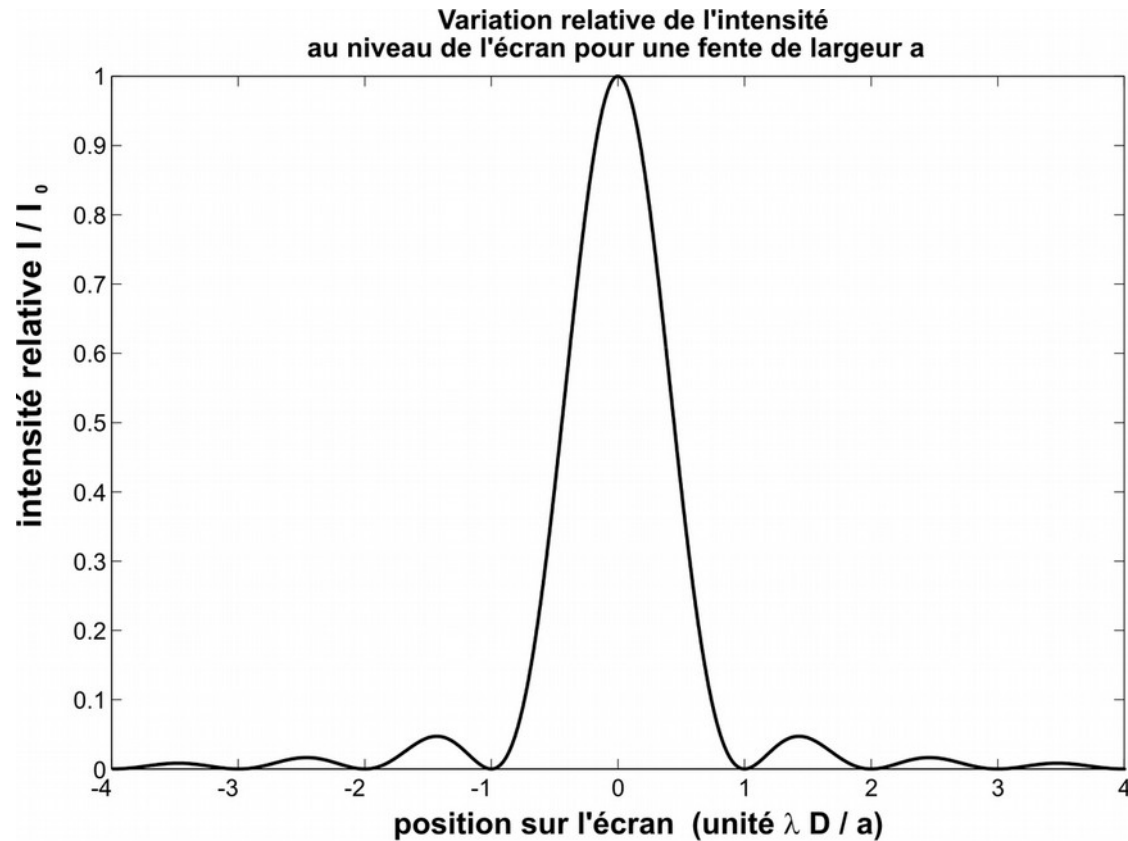
## Un mot sur la diffraction



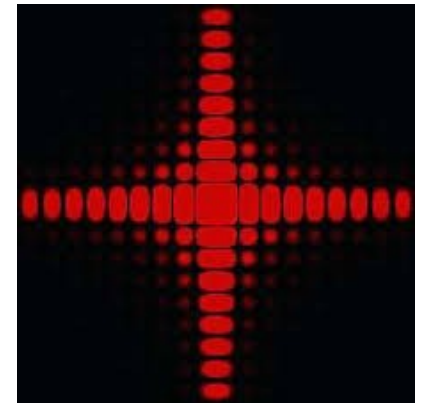
Principe de Huygens



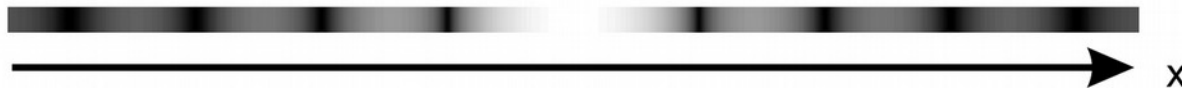




Diffraction par un trou circulaire



Diffraction par un trou carré





# Élargissement dû à l'objet observé

## Les principaux phénomènes physiques à l'œuvre

- Élargissement « naturel » → EFFET FAIBLE
- Effet de la pression du milieu observé → SOUVENT OBSERVÉ
- Effet de la température du milieu observé → SOUVENT OBSERVÉ
- Effet des vitesses (ex. objet en expansion rapide) → EFFET FORT

Hormis pour le premier cas, de nature systématique,  
les causes de l'élargissement de raie sont de nature dynamique

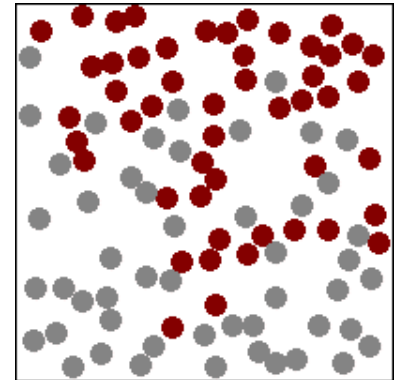
## Élargissement naturel

- Propriété de toute description ondulatoire
  - A la base également des mécaniques ondulatoire et quantique
  - Connue sous le nom de principe d'incertitude d'Heisenberg
- Très faible et peu, voire non visible
  - Faible résolution de notre spectre de démonstration

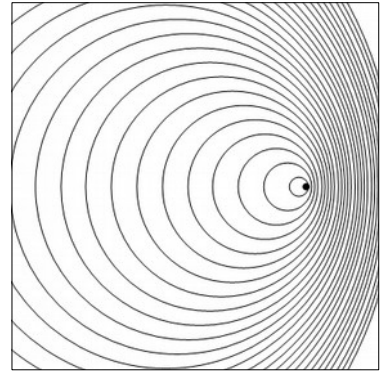
$$\Delta_x \cdot \Delta_p \geq \frac{\hbar}{2}$$

## Effet de la pression

- Prédominant dans les milieux denses
  - Ce n'est pas le cas des nébuleuses !
- Collisions de particules et diffusions
  - Le chemin moyen entre deux collisions (molécules, atomes...) dépend de la densité du milieu
  - Crée des déphasages du rayonnement émis par chaque particule (ou absorbé selon le cas)
  - Ces déphasages multiples provoquent un phénomène de résonance (par interférences) et un étalement en fréquences apparent autour d'une fréquence de résonance
- Distribution résultante en longueur d'onde
  - La répartition du signal selon la longueur d'onde aura donc un profil en rapport à une longueur d'onde caractéristique (lié aux distances moyennes, donc à la densité, et donc à la pression)
  - Cette répartition N'est PAS faite d'événements aléatoires indépendants



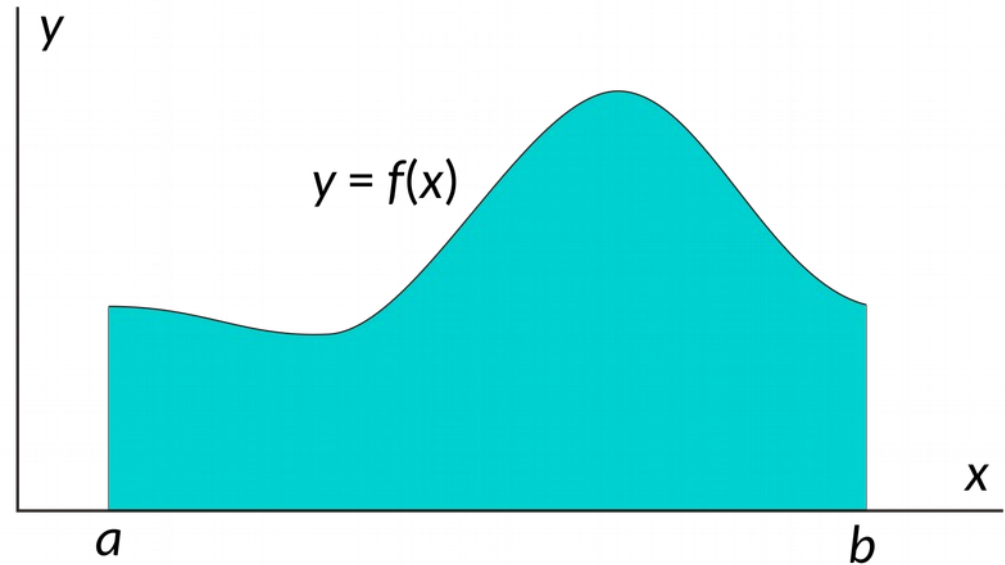
# Effet de la température



- Prédominant dans les milieux peu denses
  - Et dans les milieux chauds
- Plus la température est élevée, plus les particules sont agitées
  - Vitesses relatives (co-mobiles) plus importantes : certaines particules s'éloignent, d'autres se rapprochent à chaque instant, de façon aléatoire et indépendante
  - Effet Doppler au niveau de chaque particule émissive (ou absorbante)
  - La somme de tous ces effets Doppler locaux, produit en moyenne une raie d'une certaine épaisseur
- Distribution résultante en longueur d'onde
  - La répartition du signal selon la longueur d'onde aura donc un profil en loi « normale »
  - Cette répartition est faite d'événements aléatoires indépendants

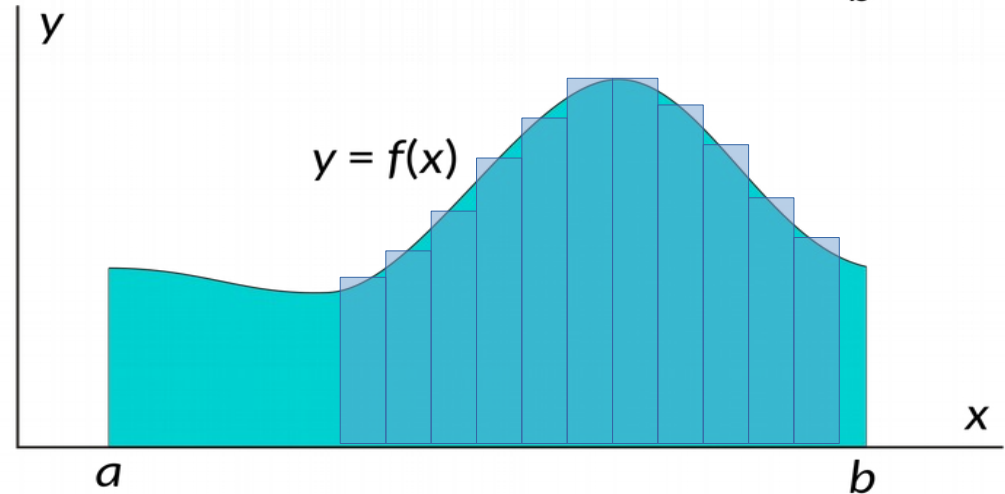
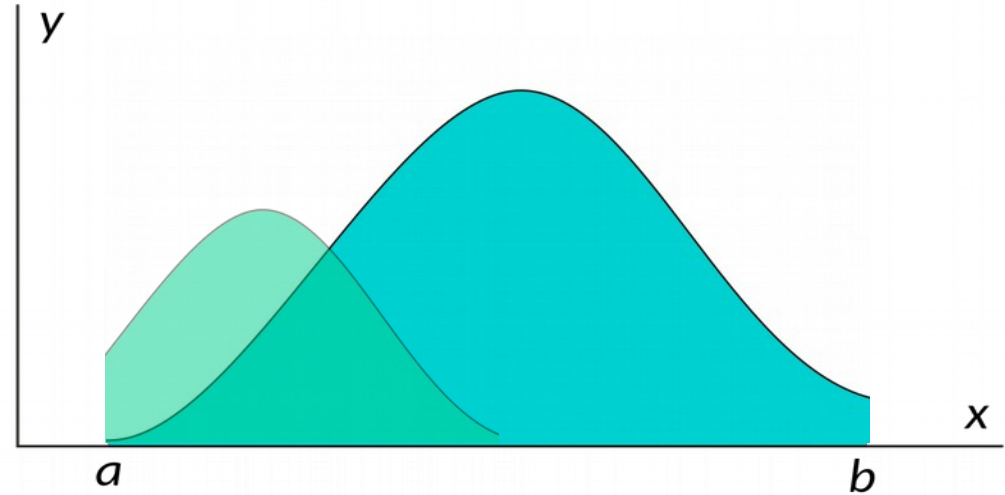
## L'intensité d'une raie

- Puisque le flux d'énergie de lumière d'une raie est répartie sur toute la largeur de la raie,
- l'intensité totale d'une raie est la somme des intensités de tous les points de la raie
- C'est son intégrale  
→ L'aire sous la courbe



## Mesurer une raie

- Il faut donc pouvoir séparer les raies  
*i.e.* Décomposer le signal en une superposition de courbes (raies)
- Toute l'importance est aussi portée sur l'échantillonnage et la résolution du spectre (cf. Théorème de Nyquist-Shannon)







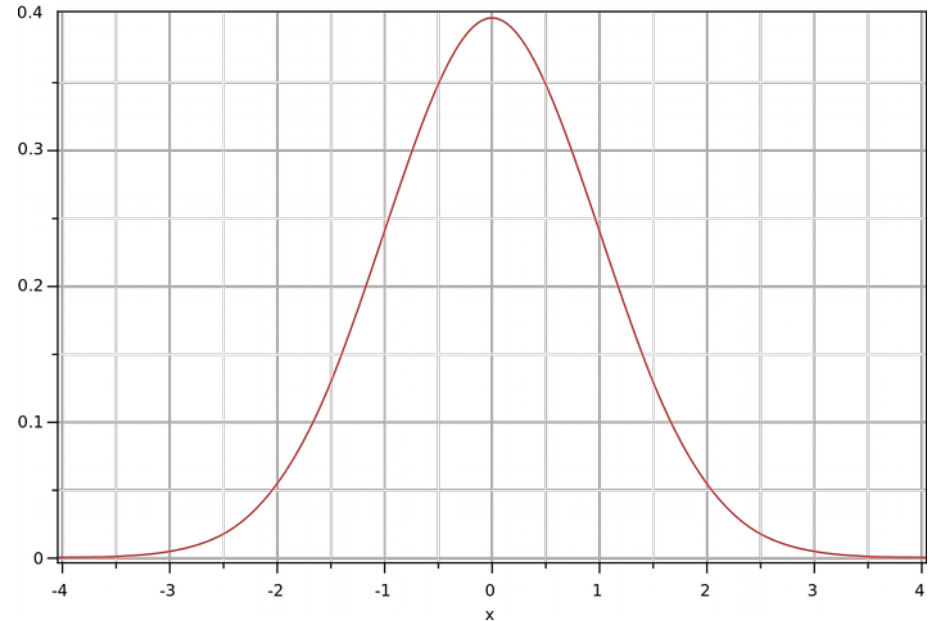
## Profil de raie

## Quelques lois de statistiques

- **Loi de Gauss (ou loi normale)**
  - Distribution d'une variable aléatoire indépendante
  - C'est à dire d'événements aléatoires indépendants
- **Loi de Cauchy (ou de Lorentz)**
  - Distribution d'une variable aléatoire se définissant par
    - la tangente à une variable aléatoire indépendante
    - ou le rapport de deux variables aléatoires indépendantes
  - C'est-à-dire en général d'événements dépendants d'autres événements aléatoires indépendants entre eux

## Profil gaussien

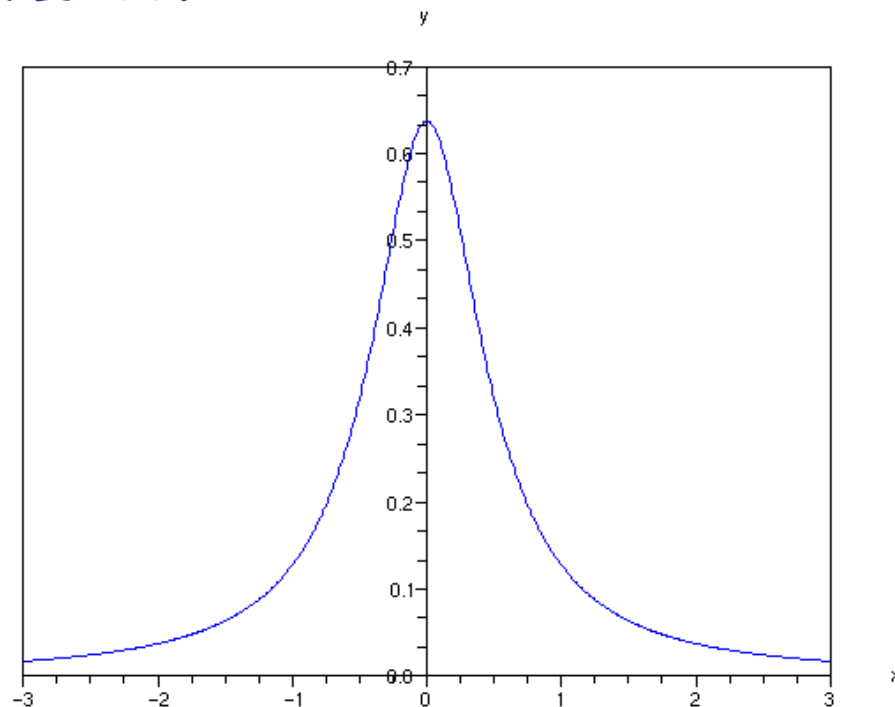
- Distribution de l'intensité selon une distribution de Gauss en  $\lambda$  (ou distribution « normale »)
- Typique des élargissements de raies dus aux effets de la **température** (et de tout effet Doppler en général)



$$I_{\lambda} = I_{\lambda_0} e^{-\frac{(\lambda - \lambda_0)^2}{2\sigma^2}}$$

## Profil lorentzien

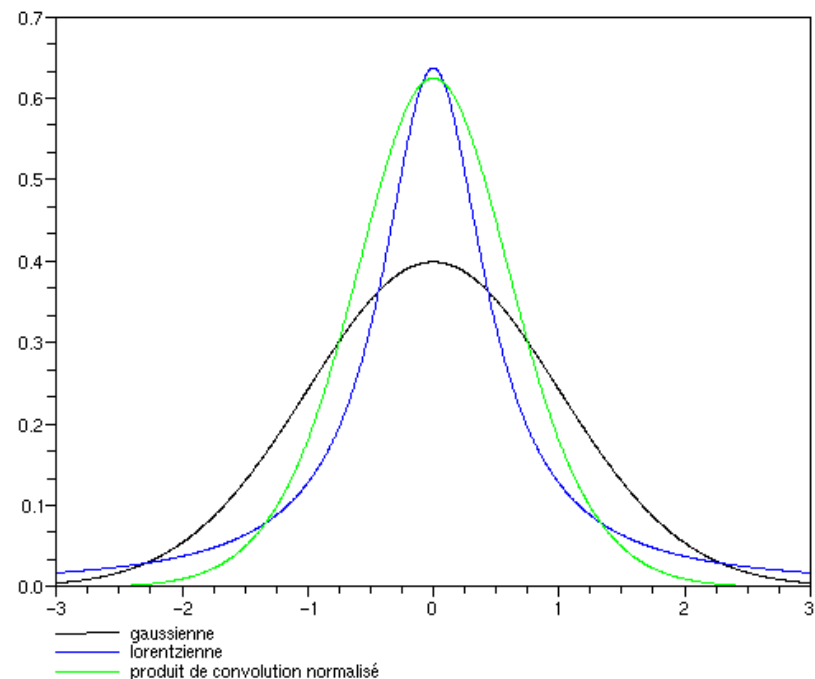
- Distribution de l'intensité selon une distribution de Cauchy en  $\lambda$
- Typique des élargissements de raies dus aux effets de la **pression**
- Utilisable aux fortes densités



$$I_{\lambda} = I_{\lambda_0} \left( \frac{\lambda - \lambda_0}{\Gamma/2} \right)^{-2}$$

## Profil de Voigt

- Combinaison des deux profils précédents Lorentz et Gauss
  - Produit de convolution des deux fonctions
- Souvent utilisé pour la convolution de raies en spectrométrie
  - Trouver les bons paramètres, c'est trouver l'influence relative de la pression et de la température



## Pour évaluer puis mesurer une raie, il faut...

- Choisir le bon profil selon le contexte ou par essais
- Faire correspondre une courbe avec chaque raie
- Lire les paramètres de la courbe
- En déduire la position et l'intensité de la raie

**Pas de panique !**

Des logiciels font cela automatiquement ou presque  
Cette opération s'appelle la **convolution**





# Mesure de raies

## Point de départ de la spectrométrie

## Que peut-on mesurer ?

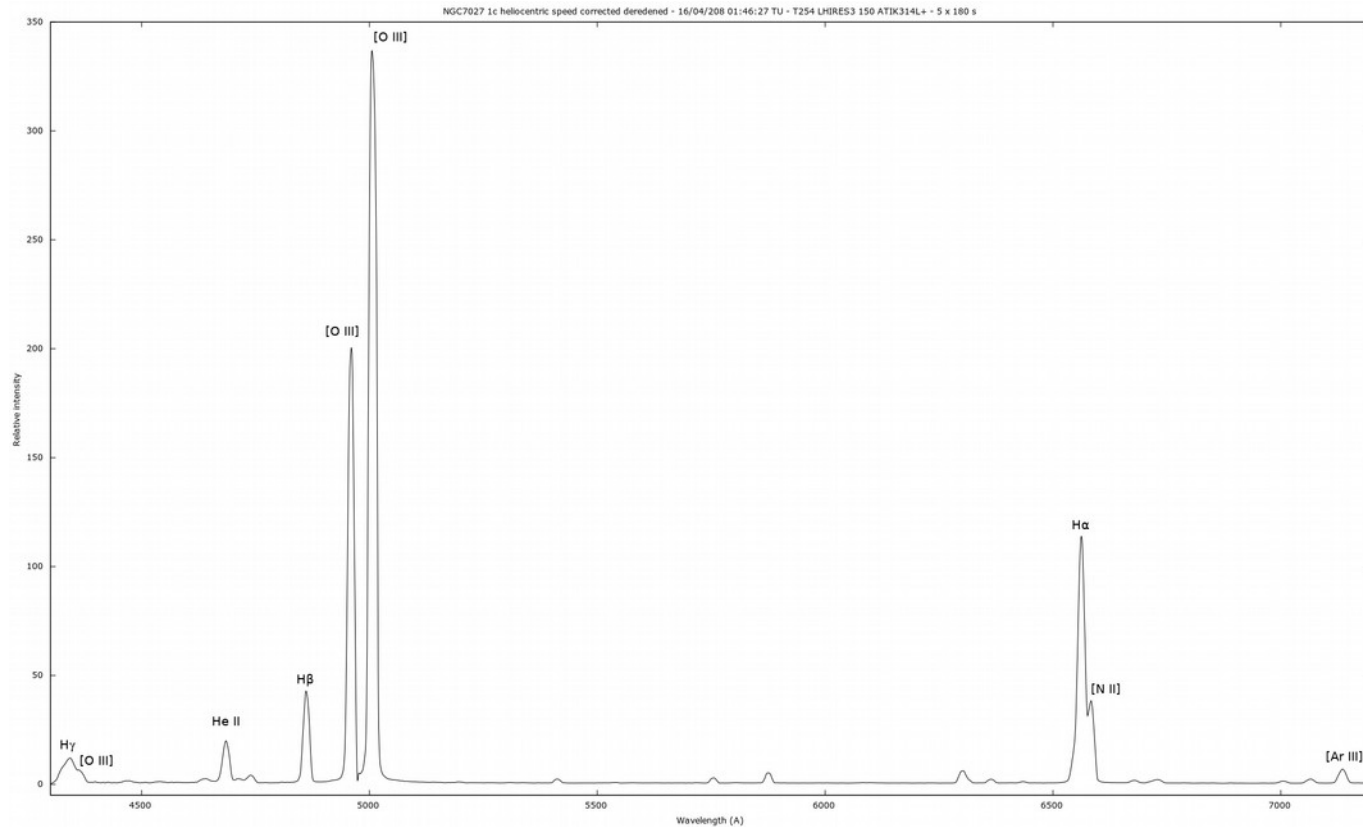
- La position centrale de la raie
  - C'est-à-dire la longueur d'onde moyenne
- La hauteur de la raie
  - C'est-à-dire la valeur relative du pic d'intensité de la raie
  - En général, ce pic se situe à la position centrale de la raie (mais ce n'est pas une obligation)
- La largeur de la raie
  - Il est plus facile de le mesurer à mi-hauteur (FWHM)
  - On calcule aussi les paramètres du meilleur profil de raie satisfaisant

## Cas du profil gaussien

- Adapté aux nébuleuses
  - La densité y est faible (plus faible qu'un bon vide de laboratoire)
- Détermination
  - de la valeur centrale  $\rightarrow$  longueur d'onde  $\lambda_0$
  - de la FWHM  $\rightarrow$  intensité relative
  - de la valeur max centrale  $I(\lambda_0) \rightarrow$  intensité relative


$$I_{raie} = \sqrt{2\pi} \cdot I_{\lambda_0} \cdot FWHM$$

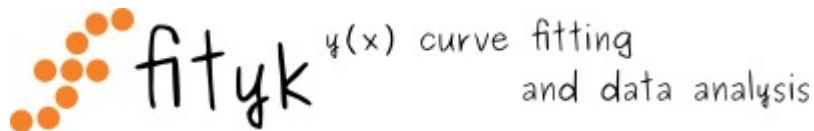
## Exemple sur une nébuleuse planétaire



NGC 7027

# Identification des raies

- Approximation par gaussienne (convolution)
  - Faite par algorithme de façon automatique
  - Ou bien faite de façon pseudo-automatique par un outil logiciel
- Utilisation d'un logiciel spécialisé
  - <https://fityk.nieto.pl/>
  -  <https://github.com/wojdyr/fityk/releases/download/v1.3.1/fityk-1.3.1-setup.exe>
  -  <https://github.com/wojdyr/fityk/releases/download/v1.3.1/fityk-1.3.1-osx.zip>
  -  <https://software.opensuse.org/download?project=home:wojdyr&package=fityk>



Raie	Lg. onde raie (Å)
Na I (?)	4324.62
H gamma	4340.47
[O III]	4363.21
N III	4640.00
He II	4685.68
[Ar IV]	4711.34
[Ar IV]	4740.20
H beta	4861.33
[O III]	4958.92
[O III]	5006.85
He II	5411.52
[N II]	5754.57
He I	5875.65
[O I]	6300.32
[O I]	6363.81
[N II]	6548.06
H alpha	6562.82
[N II]	6583.39
He I	6678.15
[S II]	6716.50
[S II]	6730.70
[Ar V]	7005.70
He I	7065.30
[Ar III]	7135.80

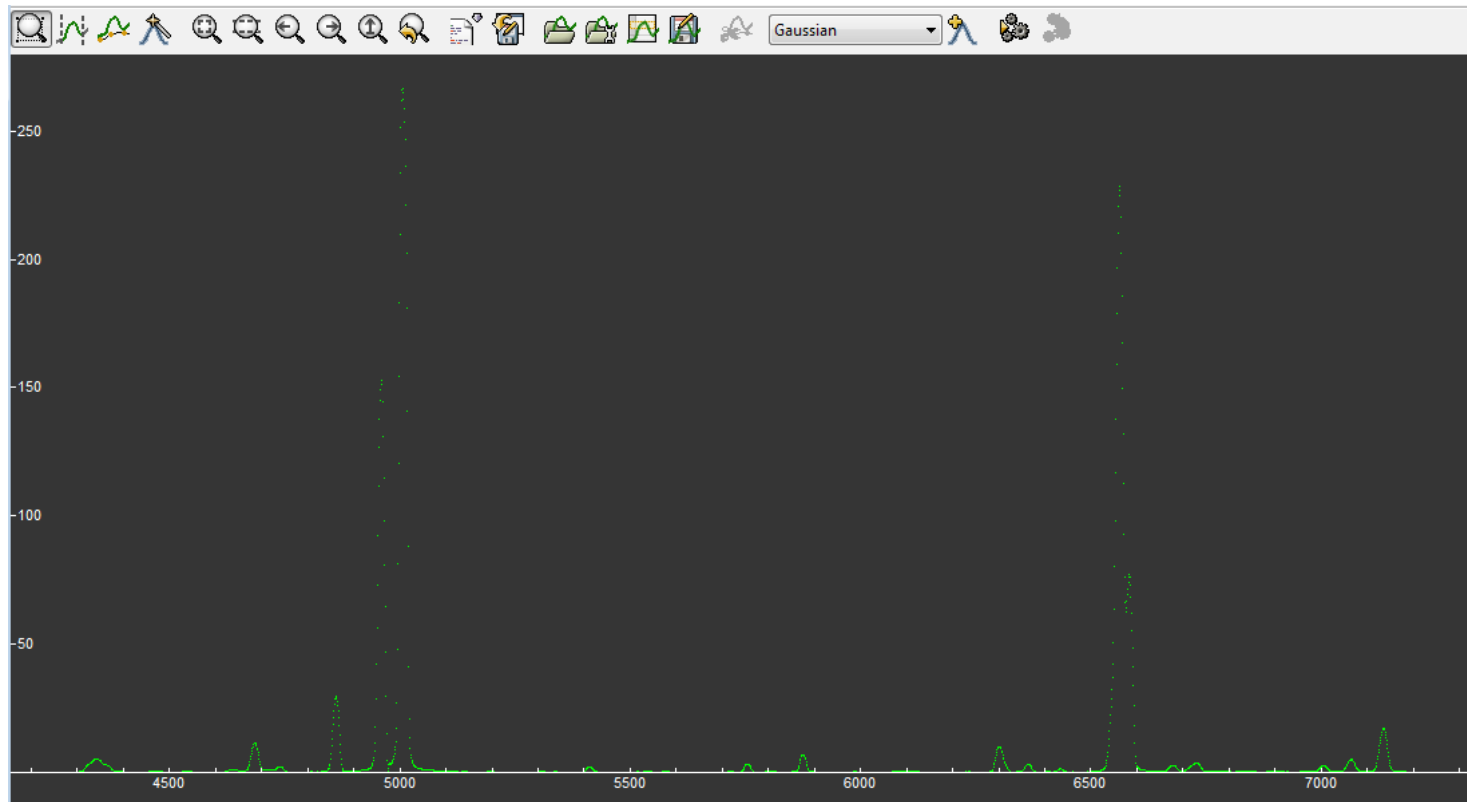
## Caractérisation des raies

- Détermination de la meilleure courbe
  - Fityk offre peut convoluer automatiquement
  - Fityk permet un ajustement manuel
- Lecture des paramètres de la courbe
  - Position moyenne (longueur d'onde du pic)
  - FWHM (largeur à mi-hauteur)
  - Valeur max centrale (valeur du pic)
- Calcul de l'intensité relative
  - Fityk fournit aussi la valeur intégrée de la courbe convoluée
  - Pour une gaussienne, c'est directement lié au FWHM

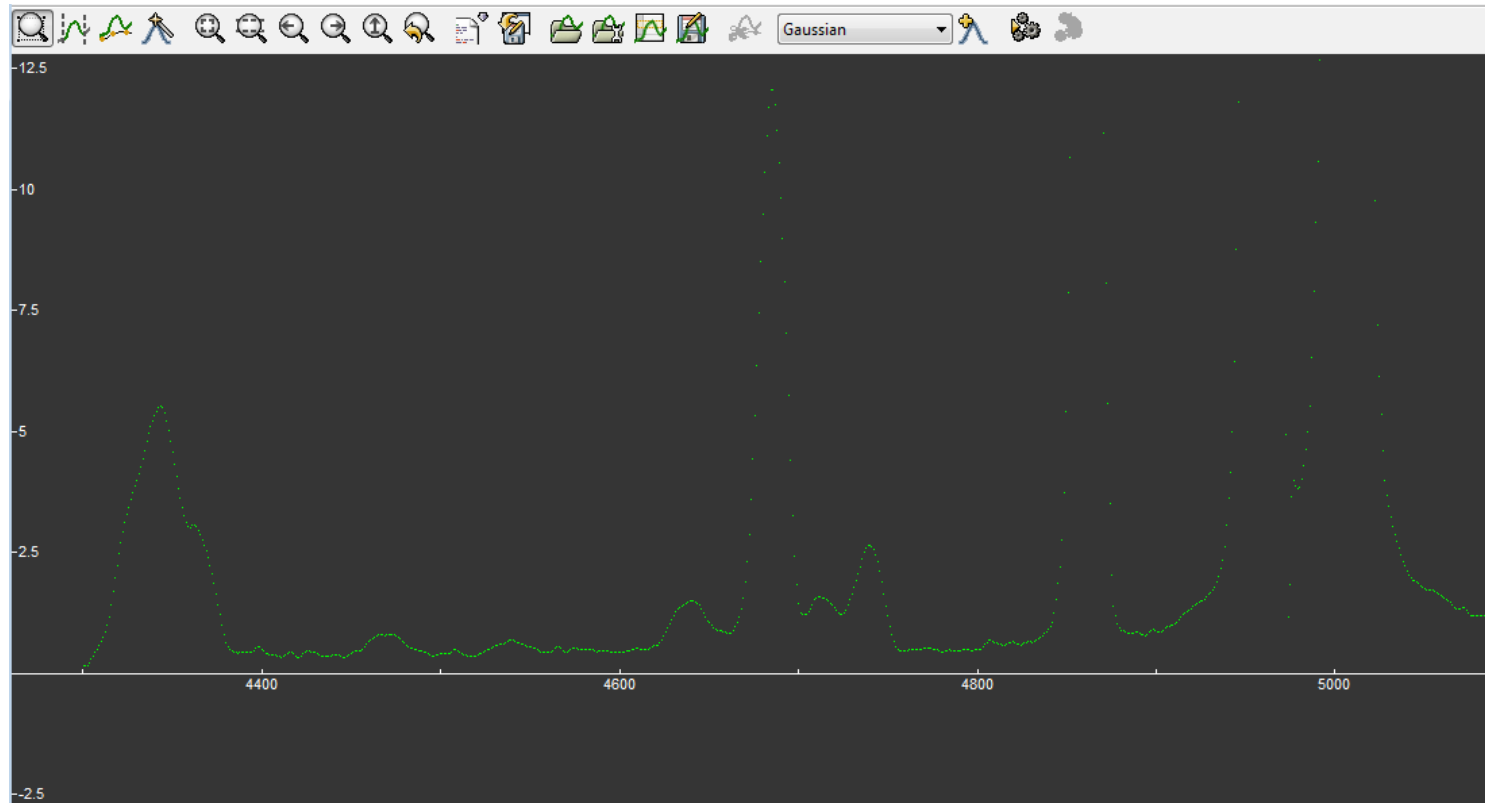
Raie	Lg. onde raie (Å)	Lg. onde mesurée (Å)	FWHM mesurée (Å)	I <sub>max</sub> rel. Mesurée
Na I (?)	4324,62	4326	19,4	2,7
H gamma	4340,47	4344	21,1	5,0
[O III]	4363,21	4366	18,6	2,4
N III	4640,00	4641	29,6	1,0
He II	4685,68	4685	16,7	11,8
[Ar IV]	4711,34	4714	16,8	1,2
[Ar IV]	4740,20	4739	17,1	2,3
H beta	4861,33	4861	14,5	30,7
[O III]	4958,92	4959	13,3	168,2
[O III]	5006,85	5007	15,2	305,7
He II	5411,52	5412	14,5	2,2
[N II]	5754,57	5755	13,6	3,5
He I	5875,65	5875	14,0	7,4
[O I]	6300,32	6300	14,4	9,3
		6310	16,5	3,4
[O I]	6363,81	6364	15,4	3,3
		6434	15,9	1,2
[N II]	6548,06	6545	15,0	16,8
H alpha	6562,82	6562	16,6	230,8
[N II]	6583,39	6584	14,0	76,7
He I	6678,15	6678	21,7	2,6
[S II]	6716,50	6713	16,2	1,2
[S II]	6730,70	6730	19,7	3,7
[Ar V]	7005,70	7005	20,0	2,5
He I	7065,30	7065	19,7	5,0
[Ar III]	7135,80	7135	18,7	17,3



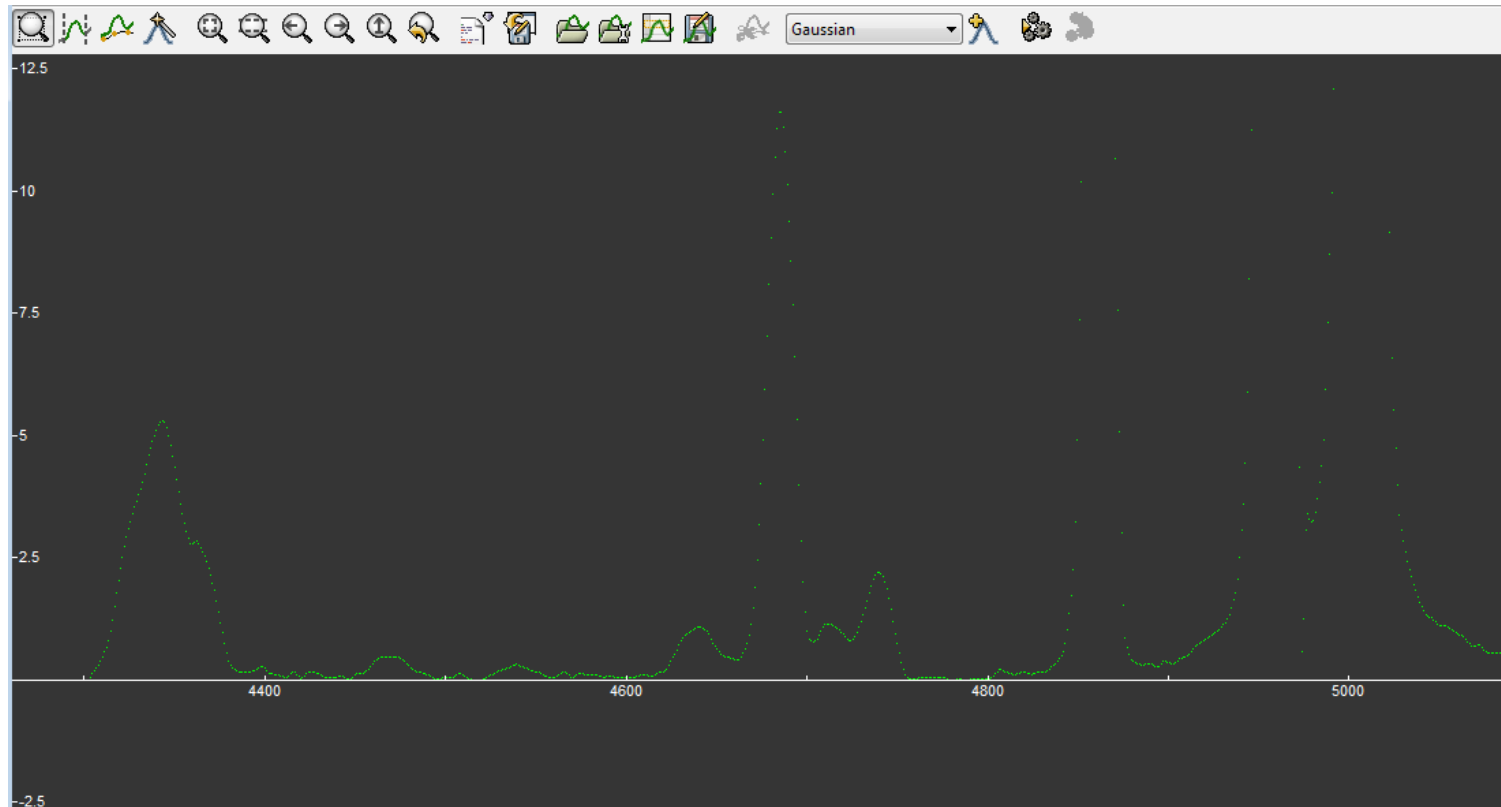
# L'ensemble du spectre échantillonné



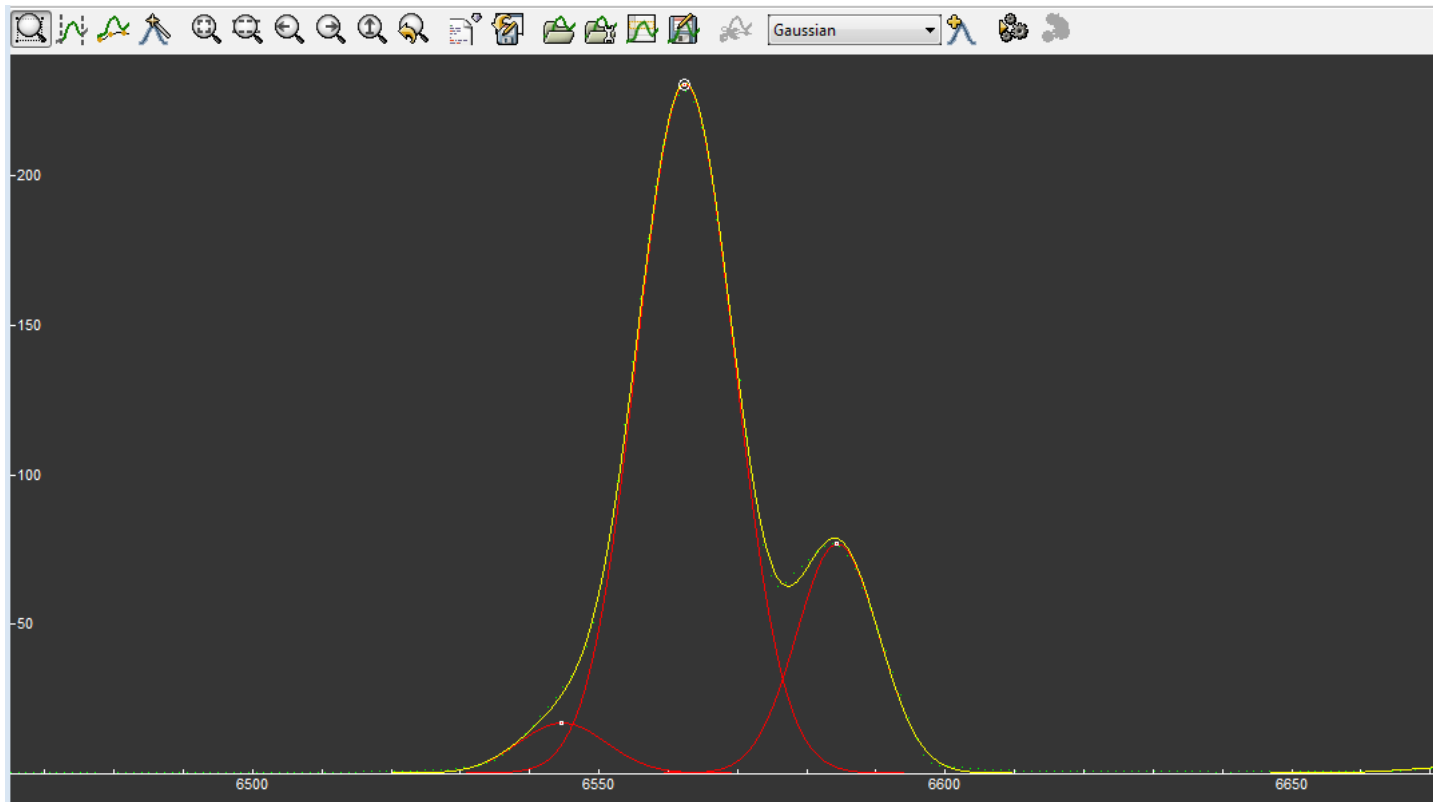
Sans « baseline » → Il reste un léger continuum superposé



Continuum retiré → Mesure des surfaces → Intensité énergétique



Approximation par gaussiennes → Zoom sur la région Ha



## Intensité relative

- Mesure intégrale de chaque raie identifiée  
→ Quantité d'énergie reçue (cf. CCD)  
→ Intensité d'énergie lumineuse
- L'intensité est en rapport avec le flux d'énergie émis
- Cette intensité est **relative**  
→ non calibrée, sans unité  
→ linéaire, proportionnelle à l'intensité « vraie »
- On peut la **normaliser** (par exemple par rapport à la valeur de la raie H $\beta$ )

Raie	Lg. onde raie (Å)	Lg. onde mesurée (Å)	FWHM mesurée (Å)	I <sub>max</sub> rel. Mesurée	I rel. Gaussienne	I rel / H $\beta$
Na I (?)	4324.62	4326	19.4	2.7	55	12
H gamma	4340.47	4344	21.1	5.0	112	24
[O III]	4363.21	4366	18.6	2.4	47	10
N III	4640.00	4641	29.6	1.0	32	7
He II	4685.68	4685	16.7	11.8	209	44
[Ar IV]	4711.34	4714	16.8	1.2	21	4
[Ar IV]	4740.20	4739	17.1	2.3	41	9
H beta	4861.33	4861	14.5	30.7	475	100
[O III]	4958.92	4959	13.3	168.2	2380	501
[O III]	5006.85	5007	15.2	305.7	4960	1045
He II	5411.52	5412	14.5	2.2	33	7
[N II]	5754.57	5755	13.6	3.5	51	11
He I	5875.65	5875	14.0	7.4	110	23
[O I]	6300.32	6300	14.4	9.3	143	30
		6310	16.5	3.4	59	12
[O I]	6363.81	6364	15.4	3.3	55	12
		6434	15.9	1.2	21	4
[N II]	6548.06	6545	15.0	16.8	268	56
H alpha	6562.82	6562	16.6	230.8	4087	861
[N II]	6583.39	6584	14.0	76.7	1143	241
He I	6678.15	6678	21.7	2.6	60	13
[S II]	6716.50	6713	16.2	1.2	21	4
[S II]	6730.70	6730	19.7	3.7	78	16
[Ar V]	7005.70	7005	20.0	2.5	54	11
He I	7065.30	7065	19.7	5.0	105	22
[Ar III]	7135.80	7135	18.7	17.3	345	73



# Statistiques FWHM en Å

(estimation à l'ordre 0, car en réalité le FWHM varie un peu avec la longueur d'onde  
→ cf. finesse du spectrographe =  $\Delta\lambda/\lambda$ )

	FWHM
MOYENNE	17
MAX	30
ECART-TYPE	4
NB MESURES	25
ERREUR	2,1

- Le FWHM permet de déduire l'intensité relative des raies
- L'erreur s'estime en fonction de l'écart-type (si le nombre N de mesures est suffisant) :

$$Err \approx \frac{3 \sigma}{\sqrt{N}}$$