

Transfert de rayonnement II Sondages spectroscopiques

Emmanuel Marcq

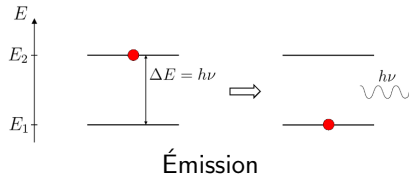
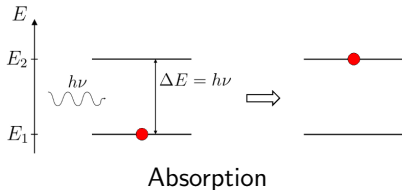
LATMOS, Université de Versailles St-Quentin-en-Yvelines

M2 Planétologie et Exploration Spatiale – 2024-2025

Notion de niveaux d'énergie

- Les interactions élémentaires entre rayonnement et matière se font de façon **quantifiée**.
- Les états stationnaires possibles de la matière au niveau microscopique sont également quantifiés, avec une énergie associée à chaque état. Ce sont les **niveaux d'énergie**
- Les interactions rayonnement-matière **conservent l'énergie** totale. On a donc $h\nu = hc\sigma = |E_{|final\rangle} - E_{|initial\rangle}|$
- Types de niveaux d'énergie**

Nucléaires Nucléons dans les noyaux : X, γ
Électroniques Électrons autour des noyaux : UV, Vis, proche IR
Moléculaires Rotation et vibration des liaisons moléculaires : IR, μ -ondes.



Niveaux électroniques

Atome d'hydrogène

- États quantiques de l'électron : $|n, l, m\rangle$

n nombre quantique principal

$$E_n \approx -13,6 \text{ eV} / n^2, n \in \mathbb{N}^*$$

l nombre quantique secondaire $0 \leq l \leq n-1$

m nombre quantique magnétique $-l \leq m \leq l$

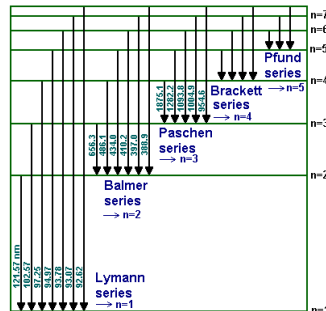
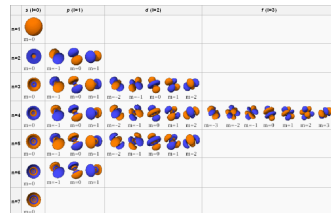
- Transitions** entre niveaux d'énergies respectives E_n et $E_{n'}$:

- Absorption ou émission d'un photon de nombre d'onde σ tel que :

$$\sigma = 1,097 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-1} \left| 1/n'^2 - 1/n^2 \right|$$

Autres atomes/molécules

- Pas de formule explicite exacte.
- Principe identique : existence de transitions entre **niveaux d'énergie électroniques** associées aux orbitales atomiques ou moléculaires.



Niveaux vibrationnels

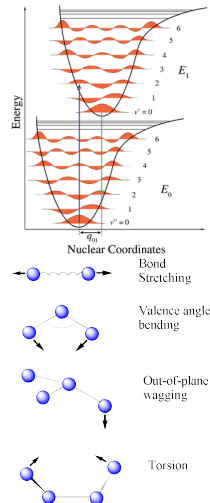
Molécules diatomiques

- **Modèle harmonique** : $E_v = (v + 1/2) h c \sigma_0$
- $v \in \mathbb{N}$, $\sigma_0 \gtrsim 600 \text{ cm}^{-1}$
- Correction anharmonique χ :

$$E_v = [1 - \chi(v + 1/2)] (v + 1/2) h c \sigma_0$$

Autres molécules

- Plusieurs liaisons interatomiques : différents modes de vibration coexistent
- Niveaux excités non peuplés thermiquement à température ambiante (300 K).
 - Énergie thermique microscopique typique
 $kT \simeq 0,026 \text{ eV}$
 - Écart entre les niveaux
 $h\nu_0 = h c \sigma_0 \simeq 0,075 \text{ eV} \gg kT$



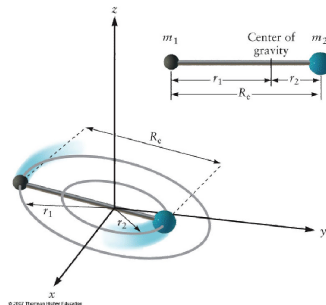
Niveaux rotationnels

Rotateur rigide

- Moment d'inertie $I = \sum_i m_i r_i^2$
- $E_J = BhcJ(J+1)$, $J \in \mathbb{N}$
- **Constante rotationnelle** $B = \frac{h}{8\pi^2 I_c}$
- $B \sim 1 \text{ cm}^{-1}$

Molécules complexes

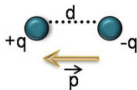
- Principe identique
- Couplages entre rotations et vibrations
- Niveaux peuplés thermiquement à température ambiante.
 - Écart typique entre niveaux d'énergie $hcB \simeq 10^{-4} \text{ à } 10^{-3} \text{ eV} \ll kT$



Spectre ro-vibrationnel

Règles de sélection : $\Delta J = -1, 0, +1$; $\Delta v = \pm 1$

- $\Delta J = 0$ interdit pour molécules linéaires **sauf** si moment dipolaire $\vec{p}$ (induit par vibration ou non) non parallèle à l'axe intermoléculaire.



Moment dipolaire

$$\vec{p} = q \times \vec{d}$$

(en Debye, $1D = 3,336 \cdot 10^{-30} \text{C.m}$)

$\vec{p}$ dirigé de $\ominus$ vers $\oplus$

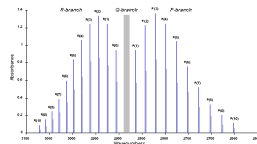
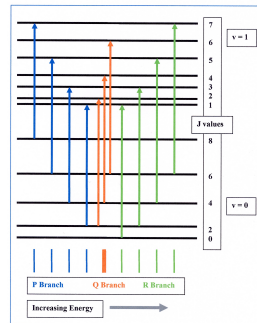
Branches P,Q,R

P $\Delta J = -1$

Q $\Delta J = 0$

R $\Delta J = +1$

- Intensité des raies fonction des populations des niveaux à la température du système.



Profil d'une raie

Raies observées non monochromatiques. Elles sont élargies :

Intrinsèquement $\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar$. Négligeable en général.

Par collisions elles altèrent les niveaux d'énergie. Dominant à forte pression.

Par effet Doppler les vitesses relatives des molécules altèrent les fréquences. Dominant à forte température.

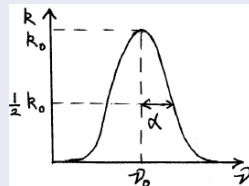
Facteur de forme $f(\Delta\nu)$

$$k_\nu = S f(\Delta\nu = \nu - \nu_0) \text{ avec}$$

$$\int_{\nu'} f(\nu') d\nu' = 1$$

$$\text{Force de raie } S = \int_{\nu} k_\nu d\nu$$

Largeur à mi-hauteur α



Élargissement Doppler

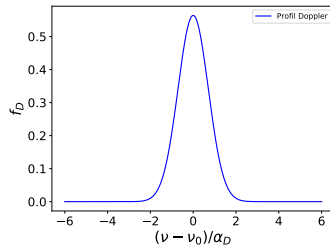
Origine

- $\nu = \nu_0 (1 \pm v/c)$ avec v vitesse de la molécule le long de la ligne de visée.
- Densité de probabilité $p(v) dv$ donnée par la statistique de Maxwell-Boltzmann :
 $p(v) \propto \exp(-E_C/kT)$
 $\Rightarrow p(v) \propto \exp(-mv^2/2kT)$

Profil Doppler : gaussienne

$$f_D(\nu) = \frac{\exp\left[-\frac{\Delta\nu^2}{\alpha_D^2}\right]}{\sqrt{\pi}\alpha_D}$$

avec $\alpha_D = \nu_0 \sqrt{2kT/mc^2}$: largeur Doppler



Élargissement collisionnel

Origine

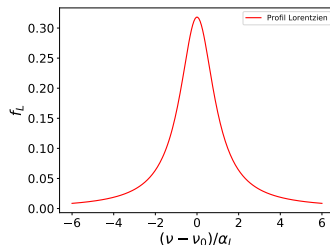
- Après collisions, les émissions perdent leur cohérence de phase et suivent un processus de Poisson d'espérance τ la durée entre deux collisions.

Profil collisionnel : lorentzienne

$$f_L(\Delta\nu) = \frac{\alpha_L}{\pi(\alpha_L^2 + \Delta\nu^2)}$$

$$\alpha_L = \alpha_0 \cdot (P/P_0) \cdot (T/T_0)^{-1/2}$$

$\alpha_0/c \simeq 0,1 \text{ cm}^{-1}$ dans les conditions standard de température et de pression ($P_0 = 1 \text{ bar}$, $T_0 = 273 \text{ K}$).



Profil de Voigt

Combinaison des élargissements

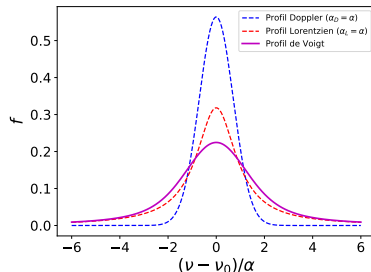
- f_V : **convolution** de f_L et f_D

$$f_V(\nu) = \int_{-\infty}^{+\infty} f_L(\nu - \nu') f_D(\nu') d\nu'$$

- Cœur plus large que chacune des contributions f_L et f_D .
- Ailes lointaines dominées par la Lorentzienne

Validité expérimentale

- Bonne près du centre de la raie
- Se dégrade à grande distance du centre (profil sous-Lorentzien)

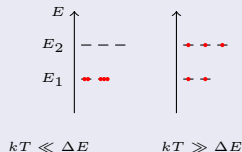


Rupture de l'Équilibre Thermodynamique Local (ETL)

Définition de l'ETL

- Lorsque deux niveaux quelconques d'énergie E_1 et E_2 et de dégénérescence g_1 et g_2 sont peuplés (populations n_1 et n_2) selon la statistique de

$$\text{Maxwell-Boltzmann : } \frac{n_2}{n_1} = \frac{g_2}{g_1} \exp\left(-\frac{E_2 - E_1}{kT}\right)$$



Processus en jeu

Collisions Elles amènent à l'ETL

Radiation Absorption, émission induite et spontanée ne le font pas forcément !

Condition

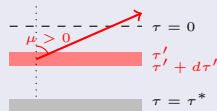
- $\eta = \frac{c_{12}}{r_{12}}$ rapport entre de taux de collision et d'absorption.
- $\eta \gg 1 \Rightarrow \text{ETL}$
- Condition réalisée dans les atmosphères planétaires pour $P > 1 \text{ Pa}$ (Terre : $z < 80 \text{ km}$)

Équation du transfert radiatif

En plan-parallèle et émission thermique

$\mu > 0$: ascendant

$$I_\nu(\mu; 0) = I_\nu(\mu; \tau^*) e^{\frac{-\tau^*}{\mu}} + \int_0^{\tau^*} B_\nu [T(\tau')] e^{\frac{-\tau'}{\mu}} \frac{d\tau'}{\mu}$$



Température de brillance T_ν^B

- $T_\nu^B(\mu)$ telle que $I_\nu(\mu; 0) = B_\nu [T_\nu^B(\mu)]$.
- La donnée de $T_\nu^B(\mu)$ contient **la même information** que celle du spectre.

Cas particulier : atmosphère semi-infinie

- $I_\nu(\mu; 0) = \frac{1}{\mu} \int_0^\infty B_\nu [T(\tau')] e^{-\tau'/\mu} d\tau'$
- Flux sortant $F_\nu = 2\pi \int_0^1 \mu I_\nu(\mu; 0) d\mu = 2\pi \int_0^\infty B_\nu [T(\tau')] E_2(\tau') d\tau'$
avec $E_2(\tau) = \int_0^1 e^{-\tau/\mu} d\mu$.

Fonction-poids WF

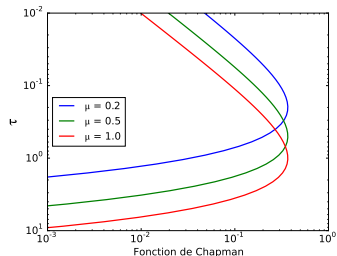
Définition de WF

- $I_\nu(\mu; 0) = \int_0^\infty WF(\mu; p) B_\nu [T(p)] d \ln p$
- $WF(\mu; p) = e^{-\tau/\mu} \frac{d(\tau/\mu)}{d \ln p} = \frac{dT_\nu}{d \ln p}$ avec la transmission $T_\nu = \exp(-\tau_\nu/\mu)$
- **Fonction de contribution CF** définie par $CF(\mu; p) = WF(\mu; p) B_\nu [T(p)]$

Fonction de Chapman

Hypothèses

- Absorbant uniformément mélangé ;
- Section efficace σ_ν constante avec p ;
- Atmosphère hydrostatique isotherme.
- $d\tau_\nu = -k_\nu dz = -\sigma_\nu n(z) dz = \frac{\sigma_\nu H}{kT} dp$
- $WF(\mu; p) = \frac{\tau_\nu}{\mu} e^{-\tau_\nu/\mu} = \frac{\sigma_\nu H p}{\mu kT} e^{-\frac{\sigma_\nu H p}{\mu kT}}$
- $WF(\mu; \ln p)$ **fonction de Chapman**
 - maximale en $\tau \sim \mu$
 - hauteur caractéristique $\Delta z \sim H$



Résumé

L'émission thermique provient principalement de la région centrée sur $\tau = \mu$

Avertissement

En non isotherme, $CF(p)$ peut différer beaucoup de $WF(p)$!

Sondages thermiques

Principe

- On utilise un composé opaque en IR **uniformément mélangé** (ex : CO₂ sur Terre) et de σ_ν connu.
- Calcul de $WF(p)$ pour chaque ν . Maximum en p_ν^0
- $I_\nu(0) \simeq B_\nu [T(p_\nu^0)]$
- On retrouve $T(p)$ sur un intervalle de p

Sondages de composition

Principe

- Composé de profil vertical inconnu mais de σ_ν connu.
- $T(p)$ connu (p.ex. via la méthode précédente)
- T_ν^B donne le niveau de pression sondé p_ν^0 tel que $T_\nu^B = T(p_\nu^0)$
- On remonte à la **densité de colonne** du composé entre p_ν^0 et l'espace connaissant σ_ν et $\tau(p_\nu^0) \approx \mu$.
- Inversion du profil du composé possible pour $\min_\nu (p_\nu^0) < p < \max_\nu (p_\nu^0)$.

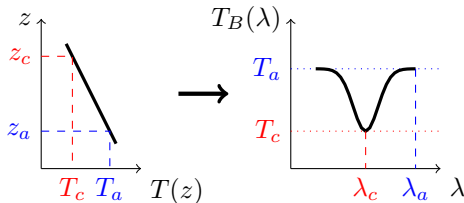
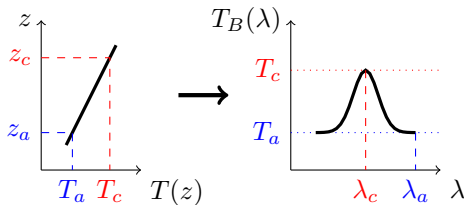
Difficultés

- Superposition des absorptions de divers composés + nuages
- Bonne résolution spectrale requise.

Raies observées en émission/en absorption

En absorption lorsque $dT/dz < 0$

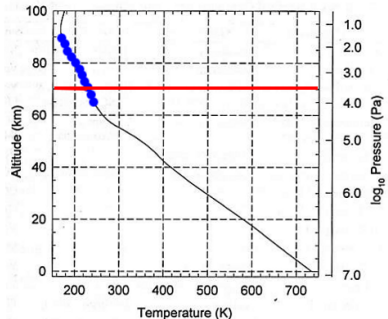
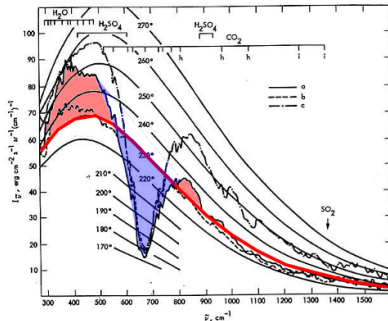
En émission lorsque $dT/dz > 0$



Effet de serre

Exemple : Vénus

- Température effective : 230 K (dépend seulement de l'albédo et du flux solaire reçu)
- Cœur de la bande de CO_2 sonde à 85 km où $T = 180$ K.
- Déficit d'émission « compensé » par augmentation de la température des nuages à 240 K $\Rightarrow$ 10 K d'effet de serre.

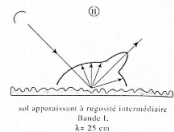
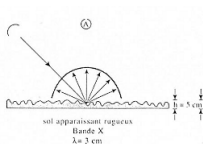


Propriétés de surface

Échelle de rugosité h

$h \ll \lambda$ Réflexion **spéculaire** (en miroir)

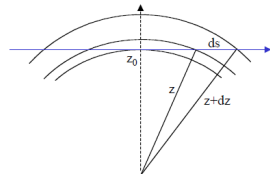
$h \gtrsim \lambda$ Surface **lambertienne** (luminance uniforme selon la direction d'observation).



Géométrie au limbe

Avantages

- Opacité sur la ligne de visée τ_s augmentée d'un facteur $\sqrt{2\pi \frac{R}{H}} \gg 1$: **observation d'espèces peu abondantes.**
- Fonction-poids très piquée autour de $z = z_0$ car $\frac{d\tau_s}{dz} = \frac{\sigma n(z)z}{\sqrt{z^2 - z_0^2}}$: en observant à différents z_0 , on accède au **profil** au-dessus de z_0 tel que $\tau_s(z_0) \sim 1$



Inconvénient

- Excellente résolution verticale exigée (orbiteurs)

Démonstration (indice ν sous-entendu)

$$\tau_s(z_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \sigma n(s) ds ; ds = d\left(\sqrt{z^2 - z_0^2}\right), \tau_s(z_0) = 2 \int_{z_0}^{+\infty} \frac{\sigma_\nu n(z)z}{\sqrt{z^2 - z_0^2}} dz$$

Or, $\sqrt{z^2 - z_0^2} \approx \sqrt{2R} \sqrt{z - z_0}$ pour $(z_0, z) \ll R$. On pose $x = \sqrt{z - z_0}$ et $T(z)$ uniforme, on a $\tau_s(z_0) = 2 \int_0^\infty \sigma n_0 e^{-x^2/H} \sqrt{2R} dx = \sigma n_0 \sqrt{2\pi R H}$ Or, en nadir avec les mêmes

hypothèses : $\tau(z_0) = \int_{z_0}^{+\infty} \sigma n_0 e^{-(z-z_0)/H} dz = \sigma n_0 H$, d'où $\frac{\tau_s(z_0)}{\tau(z_0)} = \sqrt{2\pi \frac{R}{H}}$.

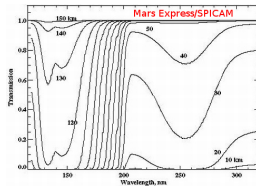
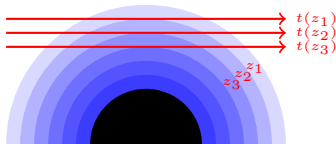
Profil d'extinction

Principe

- Observation en UV/visible/proche IR des transmissions t_i pour une étoile observée à différentes altitudes tangentes z_i
- On a alors $\tau_s(z_i) = -\ln(t_i)$ et $\tau_s(z_i) = 2 \int_{z=z_i}^{\infty} \frac{\sigma n(z) z dz}{\sqrt{z^2 - z_i^2}}$
- On déduit alors $n(z)$ des différentes mesures.

Méthode d'inversion dite en pelure d'oignon

- 1 $\tau_s(z_0)$ mesuré pour z_0 hors de l'atmosphère $\Rightarrow n(z_0)$
- 2 $\tau_s(z_1)$ mesuré pour $z_1 < z_0$. Comme $n(z_0)$ connu, $\Rightarrow n(z_1)$
- 3 Etc. pour $z_2 < z_1$, jusqu'à $\tau_s(z_i)$ trop grand (atmosphère opaque)



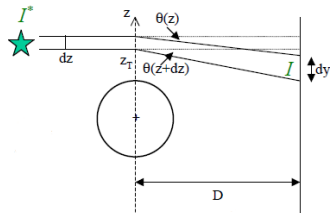
Profils de réfractivité

Phénomène

- La réfraction différentielle cause une **extinction supplémentaire** du signal.
- En radio, déphasage également mesurable.

Utilité

- On accède à $H(z) = RT(z)/Mg$, d'où mesure de **profils thermiques** $T(z)$.
- Jusque 0,5 mbar en visible/IR et 1 à 2 bar en radio.



$$dy = dz + \theta(z + dz)D - D\theta(z)$$

$$\frac{I^*}{I} = 1 + D \left| \frac{d\theta}{dz} \right|$$

On montre que :

$$d\theta/dz \simeq -\theta/H(z_T)$$