

THÈSE de DOCTORAT de l'UNIVERSITÉ PARIS 6

Spécialité :
Astrophysique

présentée par
Céline LAFFONT

pour obtenir le grade de DOCTEUR de l'UNIVERSITÉ PARIS 6

Étude d'émissions gazeuses dans les régions internes de
trois comètes : Halley, C/1996 B2 Hyakutake et
C/1995 O1 Hale-Bopp

Soutenue le 25 septembre 1998, devant le jury composé de :

| | |
|---------------------------|--------------------------|
| Dominique BOCKELÉE-MORVAN | <i>Rapporteur</i> |
| Daniel BOICE | |
| Philippe BRÉCHIGNAC | <i>Rapporteur</i> |
| Jacques CLAIREMIDI | |
| Pierre ENCRENAZ | <i>Président du jury</i> |
| Christine JOBLIN | |
| Guy MOREELS | |

Remerciements

Je tiens tout d'abord à exprimer ma gratitude envers Madame Sonia Clairemidi, Directrice de l'Observatoire de Besançon, pour son accueil au sein du laboratoire.

Je remercie tout particulièrement Messieurs Jacques Clairemidi et Guy Moreels qui m'ont confié ce travail et permis de le mener à bien, me consacrant beaucoup de leur temps. Merci également d'avoir favorisé ma participation à différents congrès internationaux ainsi que mon séjour américain au Southwest Research Institute à San Antonio.

Je voudrais exprimer ma reconnaissance envers Monsieur Pierre Encrenaz, Directeur du DEA à l'Institut d'Astrophysique de Paris, pour son soutien et pour avoir accepté de faire partie du jury. Je remercie également Madame Joëlle Dhooge, secrétaire du DEA, qui m'a permis de résoudre de nombreux problèmes administratifs avec l'Université Pierre et Marie Curie.

Je remercie Madame Dominique Bockelée-Morvan pour sa lecture attentive de ma thèse et son accord d'en être un rapporteur.

Merci à Madame Christine Joblin pour s'être intéressée à ma thèse et avoir accepté de faire partie du jury.

Je remercie également Monsieur Philippe Bréchnignac qui m'a encadrée lors de mon stage au laboratoire de Photophysique Moléculaire d'Orsay et qui a accepté d'être un rapporteur de cette thèse.

Un grand merci à Monsieur Daniel Boice pour son accueil chaleureux dans la ville de San Antonio et au Southwest Research Institute, et pour sa participation en temps que membre du jury.

Je remercie Madame Françoise Gazelle, ingénieur informatique à l'Observatoire de Besançon, qui a toujours répondu avec rapidité et efficacité à mes questions.

Merci à Madame Suzanne Considère pour m'avoir appris à utiliser le logiciel de traitement d'images Midas, me faisant gagner un temps considérable, et pour ses conseils lors de la rédaction de cette thèse.

Je remercie Mesdames Elisabeth Alaime et Danielle Chabod, secrétaires de l'Observatoire de Besançon, pour leur aide toujours efficace, ainsi que tout le personnel de l'Observatoire de Besançon. Je m'excuse auprès des personnes que je ne citerai pas et qui ont contribué à la réalisation de ce travail.

Enfin, un grand merci à mes parents qui m'ont permis de suivre cette voie, à Yann qui m'a autant soutenue que supportée...

Table des matières

| | | |
|------------|---|-----------|
| I | Introduction gnrale | 9 |
| II | Gnralits sur les comtes | 13 |
| 1 | Mouvement, origine et devenir des comtes | 17 |
| 1.1 | Historique | 17 |
| 1.2 | Thorie actuelle | 18 |
| 1.3 | volution | 19 |
| 1.4 | Intrt de l'tude des comtes | 20 |
| 2 | Description | 21 |
| 2.1 | Prsentation gnrale | 21 |
| 2.1.1 | Le noyau | 21 |
| 2.1.2 | La coma ou chevelure | 21 |
| 2.1.3 | La queue de poussières et la queue de plasma | 23 |
| 2.2 | Message spectroscopique des comtes | 23 |
| III | Le naphtalne C₁₀H₈ | 27 |
| 1 | Introduction | 31 |
| 2 | tude du naphtalne en jet supersonique | 33 |
| 2.1 | Introduction | 33 |
| 2.2 | Photophysique des molcules aromatiques polycycliques | 33 |
| 2.3 | Exprience | 35 |
| 2.3.1 | chantillon gazeux | 36 |
| 2.3.2 | Jet libre | 36 |
| 2.3.3 | Excitation optique | 36 |
| 2.3.4 | Dtection | 37 |
| 2.4 | Spectres d'mission de fluorescence | 38 |
| 2.5 | Dures de vie et rendements quantiques de fluorescence | 43 |
| 2.5.1 | quation thorique de la dcroissance de fluorescence | 44 |
| 2.5.2 | Dtermination des dures de vie de fluorescence | 44 |

| | | |
|-----------|--|-----------|
| 2.5.3 | Determination du rendement quantique de fluorescence | 45 |
| 2.6 | Conclusion | 47 |
| 3 | Spectres TKS de la comte de Halley | 49 |
| 3.1 | Introduction | 49 |
| 3.2 | Spectres de la comte de Halley | 49 |
| 3.2.1 | Le spectromtre tri-canal de la mission Vega 2 | 50 |
| 3.2.2 | Nouvelles missions dans les spectres du jour J | 50 |
| 3.2.3 | Spectre du jour J-1 | 52 |
| 3.3 | Identification du naphthalne ? | 54 |
| 3.4 | Construction d'un spectre simulant la fluorescence du naphthalne soumis au rayonnement solaire | 55 |
| 3.5 | Comparaison entre le spectre synthtique et les spectres TKS de la comte de Halley | 58 |
| 3.6 | Conclusion | 59 |
| 4 | Conclusion | 61 |
| | | |
| IV | La molcule de soufre S₂ | 63 |
| 1 | Introduction | 67 |
| 2 | Calcul du spectre de fluorescence du systme B – X de S₂ | 71 |
| 2.1 | Introduction | 71 |
| 2.2 | Modle antrieur de fluorescence "multi-cycle" | 71 |
| 2.3 | Prsentation du modle et de la mthode de calcul | 72 |
| 2.3.1 | La molcule modle | 72 |
| 2.3.2 | Longueurs d'onde des transitions | 73 |
| 2.3.3 | Probabilitis de transition | 74 |
| 2.3.4 | Population initiale | 76 |
| 2.3.5 | Population des niveaux vibrationnels | 77 |
| 2.4 | volution de la population des niveaux vibrationnels | 78 |
| 2.5 | Spectres d'mission de fluorescence | 79 |
| 2.6 | Conclusion | 81 |
| 3 | Spectres IUE des comtes IRAS-Araki-Alcock et Hyakutake | 83 |
| 3.1 | Introduction | 83 |
| 3.2 | Rduction des donnes du satellite IUE | 84 |
| 3.2.1 | Spectromtres LWR et LWP de IUE | 84 |
| 3.2.2 | Retrait du fond de ciel | 85 |
| 3.2.3 | Calibration en flux | 85 |
| 3.3 | S ₂ dans des spectres IUE de la comte IRAS-Araki-Alcock | 85 |
| 3.3.1 | Extraction d'un spectre partir de l'image spectrale LWR15908 | 85 |
| 3.3.2 | Comparaison avec le spectre calcul de S ₂ | 86 |
| 3.3.3 | Calcul de l'abondance des molcules de S ₂ | 88 |

| | | |
|----------|---|------------|
| 3.4 | S ₂ dans des spectres IUE de la comète Hyakutake? | 91 |
| 3.4.1 | Observations | 91 |
| 3.4.2 | Extraction d'un spectre partir de l'image spectrale LWP32088 | 92 |
| 3.4.3 | Comparaison avec le spectre calcul de S ₂ | 94 |
| 3.4.4 | Limite supérieure de l'abondance de S ₂ | 96 |
| 3.5 | Conclusion | 98 |
| 4 | Spectres TKS de la comète de Halley | 101 |
| 4.1 | Introduction | 101 |
| 4.2 | Comparaison avec le spectre calcul de S ₂ | 101 |
| 4.3 | Conclusion | 104 |
| 5 | Conclusion | 105 |
| V | La molécule de carbone C₂ | 107 |
| 1 | Introduction | 111 |
| 2 | Méthodes d'observation | 115 |
| 2.1 | Spectroscopie dans le mode fente longue | 115 |
| 2.2 | Spectro-imagerie | 117 |
| 2.3 | Recherche de sources tendues dans la coma | 118 |
| 3 | étude théorique du spectre de fluorescence de C₂ | 119 |
| 3.1 | Méthode de calcul | 119 |
| 3.2 | Spectre de fluorescence de C ₂ | 121 |
| 3.3 | étude du rapport d'intensité aux longueurs d'onde des têtes des bandes (1,1) et (0,0) de la séquence $\Delta v = 0$ | 122 |
| 4 | Comète Hyakutake | 125 |
| 4.1 | Introduction | 125 |
| 4.2 | Observations | 125 |
| 4.3 | Morphologie de la coma | 126 |
| 4.3.1 | Condensations dans la direction anti-solaire | 128 |
| 4.3.2 | Jets et enveloppes dans la direction solaire | 129 |
| 4.4 | Continuum et mission de C ₂ dans la coma | 130 |
| 4.4.1 | étude en spectro-imagerie | 130 |
| 4.4.2 | étude en spectroscopie | 136 |
| 4.5 | Conclusion | 139 |
| 5 | Comète Hale-Bopp | 141 |
| 5.1 | Introduction | 141 |
| 5.2 | Observations | 141 |
| 5.3 | Morphologie de la coma : jets et arcs | 142 |

| | | |
|-----------|--|------------|
| 5.3.1 | Aot, septembre, octobre 1996 | 142 |
| 5.3.2 | Fvrier, mars, avril 1997 | 144 |
| 5.4 | volution de la luminosit | 146 |
| 5.5 | Corrlation entre la couleur de la poussire et l'excitation des molcules de C ₂ . . . | 148 |
| 5.6 | Conclusion | 150 |
| 6 | Conclusion | 151 |
| VI | Conclusion gnrale | 153 |
| | Annexe | 158 |
| A | Modle de fluorescence du systme $B - X$ de S₂ : transitions rovibrationnelles | 159 |
| A.1 | Longueurs d'onde des transitions | 159 |
| A.2 | Probabilit de transition | 160 |
| A.3 | Rgles de slection | 161 |
| A.4 | Dgnrescence des niveaux rovibrationnels | 162 |
| A.5 | Population initiale | 162 |
| A.6 | Population des niveaux vibrationnels | 163 |
| A.7 | Intensit des raies d'mission | 163 |
| B | Rsum tendu en anglais : extended abstract | 165 |
| C | Principales publications | 169 |

Première partie

Introduction générale

Le milieu cométaire est caractérisé par une source principale, le noyau, qui devient généralement active lorsque la comète se rapproche à moins de 3 UA du Soleil et par un environnement ténu. Près du noyau cométaire, la densité des molécules de gaz et des particules de poussière est relativement élevée et les collisions sont importantes. Sous l'effet du rayonnement solaire, les molécules subissent des photodissociations et les radicaux ou atomes produits émettent un rayonnement de fluorescence. Les particules de poussière diffusent les photons en provenance du Soleil.

Au cours des quinze dernières années, trois comètes ont permis d'améliorer notre connaissance du milieu cométaire :

- la comète de Halley qui est observée depuis très longtemps et dont l'orbite est connue avec une grande précision et qui a permis d'organiser un programme d'observations *in-situ* par plusieurs sondes interplanétaires lors de son passage auprès de la Terre en mars 1986,
- la comète Hyakutake (C/1996 B2) qui est passée près de la Terre, à 15 millions de kilomètres ($\Delta = 0,1$ UA), en mars 1996 et a permis des observations depuis le sol avec une bonne résolution spatiale,
- la comète Hale-Bopp (C/1995 O1) dont le noyau de taille importante a présenté une activité de grande intensité.

Avant le passage de la comète de Halley en 1986 et son étude *in-situ*, de nombreuses questions concernant la nature et la composition du noyau et de sa surface étaient encore sans réponse.

Le travail présenté ici apporte une contribution à la connaissance des molécules qui composent la coma et des mécanismes qui la régissent. Il comporte une partie modélisation, une partie expérimentale et une partie observation et interprétation.

Dans la partie ??, nous résumons les principales caractéristiques d'une comète et les phénomènes physiques qui ont lieu dans la coma. Nous présentons également les raisons qui font des comètes des objets intéressants à étudier.

Dans la partie ??, nous décrivons les résultats obtenus lors de la mission spatiale Vega 2 vers la comète de Halley par un instrument construit en partie à l'Observatoire de Besançon, le spectromètre tri-canal TKS. L'analyse de ces données nous a amené à effectuer des expériences au laboratoire de photophysique moléculaire d'Orsay pour obtenir des spectres d'un hydrocarbure polycyclique aromatique, le naphthalène, afin de le comparer aux spectres cométaires.

La partie ?? est relative à la recherche de la molécule de soufre S_2 dans la comète Hyakutake, à la suite d'observations effectuées avec le satellite IUE (*International ultraviolet explorer*). Cette étude a nécessité l'élaboration d'un modèle de fluorescence de S_2 en fonction du temps d'exposition des molécules au rayonnement solaire. Nous avons appliqué ce modèle au spectre de la comète IRAS-Araki-Alcock obtenu avec IUE en 1983 qui a permis la première détection de S_2 dans une comète. Le modèle permet également la recherche de S_2 dans les spectres de la comète de Halley obtenus *in-situ* par le spectromètre TKS.

La partie ?? présente un programme d'observation des comètes Hyakutake et Hale-Bopp réalisé à l'Observatoire de Haute Provence qui vise à étudier les molécules de carbone C_2 dans la coma et à rechercher la présence de sources étendues où les molécules sont libérées localement,

probablement par des grains. Cette étude est basée sur un modèle de fluorescence de C_2 qui a été établi précédemment et que nous présentons brièvement. La comète Hale-Bopp ayant pu être observée sur une longue période, un suivi de son activité avant son passage au périhélie a pu également être effectué.

Enfin, nous donnerons quelques directions pour la poursuite du travail entrepris dans chacune des parties.

Deuxième partie

Généralités sur les comètes

Sommaire

| | | |
|---|--|----|
| 1 | Mouvement, origine et devenir des comtes | 17 |
| 2 | Description | 21 |

Chapitre 1

Mouvement, origine et devenir des comètes

1.1 Historique

Le passage d'une comète dans notre ciel est un phénomène éphémère et parfois spectaculaire. Ce sont les grecs qui les ont appelées *κομητη* qui signifie astre chevelu. Ces corps sont observés depuis très longtemps et la première description que nous en avons eue a été faite par les Chinois en l'an 2316 avant JC. D'après Aristote (384-322 avant JC), il s'agissait de phénomènes atmosphériques. Cette idée a prédominé jusqu'en 1577 lorsque Tycho Brahé a mesuré par parallaxe la distance d'une comète. Elle se trouvait bien au-delà de l'atmosphère terrestre, quatre fois plus loin de la Terre que la Lune.

L'énigme du mouvement des comètes a été résolue au XVII^e siècle par Isaac Newton et Edmond Halley, travail facilité par l'invention de la lunette. Le premier établit que les comètes sont soumises à l'attraction du Soleil et décrivent des ellipses très allongées autour du Soleil. Le second utilisa ces résultats pour calculer l'orbite de plusieurs comètes et, trouvant des similitudes entre certaines trajectoires, il montra l'existence d'une comète périodique dont il fut en mesure de prévoir le retour en 1758. Elle fut baptisée comète de Halley.

En ce qui concerne l'origine des comètes, un foisonnement de théories est apparu depuis le début du XIX^e siècle :

- pour Laplace (1813), ce sont des condensations de matière interstellaire capturées par le Soleil lorsqu'elles passent dans sa sphère d'attraction,
- pour Lagrange (1814), il s'agit de corps éjectés par les planètes géantes, en particulier Jupiter,
- pour Chamberlain (1901), elles sont issues de la fragmentation de petits astéroïdes au voisinage des planètes géantes.

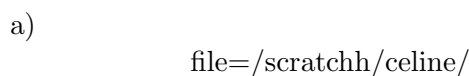
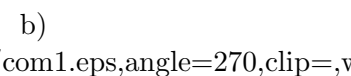
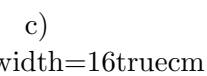
Aucune de ces hypothèses ne pouvait cependant rendre compte de façon satisfaisante des caractéristiques orbitales de l'ensemble des comètes connues. En 1950, Oort a suggéré l'existence d'un immense réservoir de comètes situé aux confins du système solaire (Oort50). Appelé nuage

de Oort, ce réservoir serait une gigantesque sphère centrée sur le Soleil, d'environ 50 000 UA de rayon, qui contiendrait une centaine de milliards de comètes totalisant une masse très faible (d'un dixième de la masse terrestre à quelques masses terrestres). Toutefois, il paraît improbable que la matière ait pu se condenser et s'accréter pour former des corps aussi grands que les comètes à de telles distances du Soleil où la densité du gaz et des poussières est faible.

1.2 Théorie actuelle

Aujourd'hui, on considère que les comètes ont été formées dans la même région que les planètes géantes, par condensation puis accréation de la matière contenue dans le disque protoplanétaire entourant le Soleil (cf. chapitre ??). Les perturbations gravitationnelles dues aux planètes géantes les ont alors transférées sur des orbites très excentriques et elles ont alimenté le nuage de Oort (Fig.??a). Elles accomplissent leur révolution autour du Soleil en 5 millions d'années environ.

FIG. 1.1 – a) Vue en coupe de la sphère constituant le nuage de Oort. b) Perturbation gravitationnelle produite par le passage d'une galaxie, d'un nuage interstellaire géant ou d'une étoile à proximité du système solaire et trajectoire d'une comète à longue période. c) Perturbation gravitationnelle produite par une planète géante et trajectoire d'une comète à courte période (d'après Chauvin87).

a)  b)  c) 
file=/scratchh/celine/com1.eps,angle=270,clip=,width=16truecm

Une autre perturbation, provoquée par des effets de marée galactiques ou le passage d'un nuage interstellaire géant ou d'une étoile à proximité du nuage de comètes, déclenche la déviation de certaines d'entre elles soit à l'extérieur du système solaire, soit en direction du système solaire interne auquel cas elles deviennent des comètes à longue période (entre 100 et 100 000 ans) (Fig.??b).

Certaines d'entre elles passent ensuite dans la sphère d'attraction des planètes géantes et le grand axe de leur orbite diminue considérablement. Elles deviennent des comètes à courte période (< 200 ans) (Fig.??c).

Si ce scénario est conforme à la réalité, il devrait rester d'autres comètes n'ayant pu rejoindre le nuage de Oort au-delà de l'orbite de Neptune, dans une zone relativement protégée des perturbations de Jupiter et Saturne mais encore assez proche du Soleil, où la densité du disque protoplanétaire était suffisante pour permettre la condensation de gaz et l'accréation de matière. Demeurées sur leur lieu de formation, approximativement dans le plan de l'écliptique, elles constitueraient un réservoir appelé ceinture de Kuiper. L'existence de cette ceinture a été proposée par Kuiper pour expliquer que la plupart des comètes de courte période avait une faible inclinaison par rapport au plan de l'écliptique.

Le disque de poussières et de gaz observé autour de l'étoile β Pictoris renforce cette idée : il mesure au-moins 1000 UA de rayon et montre que la matière susceptible de s'agglomérer peut s'étendre loin de l'étoile.

Il ne restait plus qu'à obtenir confirmation de cette hypothèse par des découvertes observationnelles. Les détecteurs de plus en plus performants permettent d'observer des objets de moins en moins lumineux et de plus en plus lointains. En 1992, Jewitt et Luu (IAUC 5611) ont découvert le premier objet de la ceinture de Kuiper. Depuis, une soixantaine d'objets peu lumineux, d'une taille de l'ordre de la centaine de kilomètres, ont pu être mis en évidence, à un peu plus de 40 UA du Soleil. Ils sont appelés objets trans-neptuniens.

1.3 Évolution

À chaque passage au périhélie, le noyau de la comète cède définitivement une partie de sa masse, estimée à $\simeq 5\%$. Une comète perd tous ses éléments volatils ou se recouvre d'une croûte inactive en un nombre assez restreint de passages au périhélie. On constate par exemple que la comète Encke, dont la période est de 3,3 ans seulement, voit son éclat diminuer peu à peu. Après épuisement de leurs réserves de matériaux volatils, les noyaux continuent de graviter autour du Soleil, comme des astéroïdes d'éclat très faible, donc difficiles à détecter. L'existence de plusieurs dizaines d'astéroïdes de la famille des Apollo-Amor, dont le diamètre de l'ordre du kilomètre et l'orbite très allongée s'apparentent plus à ceux des comètes qu'à ceux des autres astéroïdes, renforce cette hypothèse.

Cette lente évolution est parfois accélérée par la fragmentation du noyau qui a lieu le plus souvent au voisinage du périhélie. Elle s'explique par un effet de marée lié à la différence des forces d'attraction s'exerçant sur la face du noyau tournée vers le Soleil et sur la face opposée. Ainsi, le groupe de Kreutz, ensemble de comètes passant très près du Soleil, entre 0,001 et 0,01 UA, proviendrait d'une même comète cassée par effet de marée. Le noyau de la comète West s'est fragmenté en quatre morceaux après son passage au périhélie fin février 1976. La comète Shoemaker-Levy 9 a subi le même sort, mais par un effet de marée dû à Jupiter. Elle est passée à moins de 1,5 rayon jovien en juillet 1992 et s'est fragmentée en plus de vingt morceaux. Deux ans plus tard, elle s'écrasait sur Jupiter.

En ce qui concerne le devenir des poussières éjectées du noyau à chaque passage près du Soleil, les plus petites, celles qui forment les queues, sont dispersées par la pression de radiation solaire et viennent alimenter le nuage zodiacal, fuseau de poussières allongé le long de l'écliptique, les plus grosses se dispersent tout au long de l'orbite cométaire et provoquent une pluie d'étoiles filantes en entrant dans l'atmosphère terrestre, lorsque la Terre rencontre un tel tube de poussières. Par exemple, l'essaim d'étoiles filantes des Léonides, dont le maximum a lieu mi-novembre, est associé à la comète Tempel-Tuttle.

1.4 Intérêt de l'étude des comètes

Selon la théorie la mieux admise aujourd'hui, le système solaire s'est formé il y a 4,55 milliards d'années, à partir d'une nébuleuse primitive résultant de la fragmentation d'un immense nuage interstellaire constitué de gaz et de poussières. La nébuleuse est animée d'un grand mouvement

de rotation. Sous l'effet de la gravité, elle se contracte et forme d'une part l'étoile centrale, le Soleil, d'autre part un disque protoplanétaire.

La matière du disque s'agglomère en grains de plus en plus gros. Des planétoïdes de quelques kilomètres de diamètre, puis des planètes, se forment sous l'effet des collisions avec une vitesse relative faible puis de l'attraction gravitationnelle.

Si les différents corps du système solaire ont été formés à la même époque, leur évolution ultérieure a par contre été différente : alors que les planètes subissent des modifications physico-chimiques importantes du fait de leur grande masse, les petits corps, comètes et astéroïdes n'évoluent pratiquement pas. Les comètes passent la plus grande partie de leur existence loin du Soleil, dans un milieu froid et dilué qui les conserve dans leur état initial. Ainsi, l'étude de ces vestiges du passé peut nous aider à déterminer la composition chimique de la nébuleuse primitive et les conditions physiques qui y régnaient.

Chapitre 2

Description

2.1 Présentation générale

2.1.1 Le noyau

Loin du Soleil, la comète est inactive. Elle se réduit à un noyau solide constitué de grains de poussière entourés d'un manteau de glaces. Elle apparaît donc comme une "boule de neige sale", ainsi décrite par F. Whipple en 1950. Le noyau étant de petite taille, de quelques kilomètres à quelques dizaines de kilomètres, il est difficilement observable directement depuis le sol. Cependant, des observations *in situ* de la comète de Halley lors de son passage au périhélie en mars 1986 ont permis de perfectionner ce modèle. Son noyau a une forme très irrégulière et présente de nombreux cratères. Sa surface a un albédo faible (4%) et une température relativement élevée (300-400K à 0,8 UA) indiquant la présence d'un manteau de matière réfractaire, sombre et poreuse, qui isolerait du flux solaire une couche riche en éléments volatils. Sa surface possède des zones actives, opposées aux zones inactives créées par l'accumulation locale de poussières en plaques qui protègent les éléments volatils du rayonnement solaire. Cette inhomogénéité explique la présence de jets lors de la sublimation des éléments volatils au niveau des zones actives. La proportion de surface active est un paramètre très variable selon les comètes.

2.1.2 La coma ou chevelure

Lorsque la comète se rapproche du Soleil, à moins de 5 UA environ, elle devient active (Fig.??). La matière gelée à la surface du noyau subit des phénomènes de diffusion et de sublimation, libérant ainsi des gaz qui entraînent avec eux des poussières et forment une nébulosité autour du noyau appelée coma ou chevelure. Elle s'étend sur plusieurs centaines de milliers de kilomètres du noyau. De nombreux mécanismes physico-chimiques s'y produisent : les molécules issues directement du noyau, appelées molécules mères, s'en éloignent avec une vitesse de l'ordre de 1 km s^{-1} , puis produisent des radicaux libres et des atomes par photodissociation sous l'effet des photons ultraviolets solaires. Selon les molécules, la vitesse de dissociation est très variable. Certaines sont photodissociées en quelques secondes, d'autres après plusieurs jours seulement. Certains de ces composés peuvent effectuer plusieurs cycles d'absorption et émission de photons se traduisant par un rayonnement de fluorescence.

Près du noyau, la densité des particules est suffisamment grande pour que les molécules soient soumises à des collisions qui peuvent entraîner des désexcitations ou même des dissociations. Même si le gaz est émis de façon anisotrope par le noyau inhomogène, il se répartit rapidement de façon isotrope sous l'effet des collisions au fur et à mesure que les molécules s'éloignent du noyau. Ceci est moins vrai pour les particules de poussières qui, beaucoup plus lourdes, subissent moins l'effet des collisions. La vitesse des grains de poussière est d'autant plus grande que leur taille est petite et varie entre 0,1 et 1 km s⁻¹. La pression de radiation due aux photons d'origine solaire agit de manière différente sur les grains selon leur taille. Les plus petits sont repoussés plus rapidement dans la direction opposée au Soleil. La distribution en taille des grains varie ainsi en fonction de la distance au noyau et de la direction angulaire. D'autres phénomènes interviennent sans doute au niveau des particules de poussière, en particulier le mécanisme de fragmentation des grains qui peut se produire à plusieurs milliers de kilomètres du noyau et libérer localement des molécules gazeuses.

2.1.3 La queue de poussières et la queue de plasma

Lorsque l'activité devient suffisamment intense, on voit se développer deux queues (Fig.??). Les radicaux et atomes formés dans la coma, mais aussi les molécules mères, s'ionisent et interagissent avec le vent solaire, constitué de protons et d'électrons s'éloignant du Soleil à la vitesse de 400 km s⁻¹. Les ions majoritaires proviennent des molécules mères H₂O et CO. Ils sont repoussés dans la direction opposée au Soleil en une queue de plasma, rectiligne et de couleur bleutée due la présence d'ions CO⁺. Les grains de poussières, eux, sont soumis à la pression de radiation solaire et acquièrent des trajectoires paraboliques (effet fontaine). Ils forment une queue de poussières, diffuse et d'aspect jaunâtre, légèrement incurvée par le mouvement de la comète. La queue de poussières peut atteindre une longueur voisine de dix millions de kilomètres et la queue de plasma une centaine de millions de kilomètres.

2.2 Message spectroscopique des comètes

Le noyau de la comète est difficilement observable : trop petit pour être observé avec précision quand il est loin du Soleil, il est masqué par l'enveloppe de gaz et de poussières qu'il éjecte lorsqu'il s'en approche. Or c'est précisément la composition du noyau qu'il est intéressant de connaître. La seule démarche générale de l'étude des comètes a longtemps été la suivante : l'observation des produits secondaires dans la coma et dans les queues, résultant de l'interaction des molécules du noyau avec le rayonnement solaire, puis la construction de modèles physico-chimiques qui tentent de remonter à la composition du noyau.

Le phénomène étudié étant extrêmement complexe vu la diversité des constituants mis en jeu et des processus physico-chimiques (photodissociation, photoionisation, collisions, cinétique chimique, etc), aucun modèle ne parvient actuellement à déterminer une composition en molécules mères qui rende totalement compte des produits secondaires observés. Toutefois, les progrès de la radio-astronomie permettent aujourd'hui de détecter directement de nombreuses molécules mères par leurs transitions de rotation. Par ailleurs, plusieurs missions spatiales telles que les sondes Stardust qui atteindra la comète Wild 2 en 2004 et Rosetta qui rejoindra la comète Wirtanen en 2011 permettront l'étude *in-situ* du noyau cométaire.

Depuis le sol et les télescopes spatiaux, l'analyse spectroscopique permet d'obtenir des informations sur la nature et la composition des comètes et des astres en général.

Le flux d'énergie qui provient de la comète comporte deux composantes en émission :

- des émissions discrètes (raies ou bandes) dues aux molécules, atomes et ions qui émettent un rayonnement après absorption de photons solaires. Les produits primaires de la sublimation du noyau, ou molécules mères, tels que H_2O , HCN , NH_3 , CH_3CN , etc, ont pu être mis en évidence par des observations dans les domaines infrarouge et millimétrique. Dans ce cas, il peut s'agir d'une émission purement thermique. Les produits de la dissociation de ces molécules mères (molécules filles, radicaux, ions) sont beaucoup plus faciles à détecter par leurs transitions électroniques intenses dans les domaines ultraviolet et visible.
- une émission continue qui, dans les domaines visible et ultraviolet, est produite par la diffusion du rayonnement solaire par les grains de poussière, et par la réflexion de la lumière sur la surface du noyau. Elle est très intense près du noyau où les poussières sont plus concentrées. Dans les domaines radio et infrarouge, il s'agit de l'émission thermique des poussières.

La figure ?? montre un spectre de la comète de Halley obtenu en mars 1986 par le canal UV-visible du spectromètre tricanal TKS de la mission Vega 2.

Afin de mettre en évidence les bandes d'émission de fluorescence des molécules gazeuses, il faut retrancher le continuum dû à la diffusion de la lumière solaire par les particules de poussière de la coma. En première approximation, il est proportionnel au spectre solaire. Il suffit donc d'ajuster le spectre solaire au spectre cométaire puis de le soustraire. Cependant, lorsque le domaine de longueur d'onde étudié s'étend sur plusieurs nanomètres, il faut aussi tenir compte de l'effet de "rougissement" du spectre solaire qui dépend de la taille des poussières et de la longueur d'onde. L'intensité I_d du rayonnement diffusé par les particules de poussière est plus intense que l'intensité I_{Sol} du rayonnement solaire reçu. Le rapport $\frac{I_d}{I_{Sol}}$ augmente avec la longueur d'onde du rayonnement. Le rougissement est de l'ordre de 10 % sur un domaine de 10 nm dans le proche-ultraviolet.

FIG. 2.1 – a) Photographie de la comète Hale-Bopp obtenue par G. Rau à l’Observatoire de Haute Provence le 26 mars 1997 avec un appareil photographique classique. La queue de plasma, rectiligne, est dirigée dans la direction opposée au Soleil. Sa couleur bleutée est due à l’émission de fluorescence par les ions CO^+ . La queue de poussières est légèrement incurvée à cause du déplacement de la comète sur sa trajectoire. b) Structure générale d’une comète (d’après Chauvin87). Les ordres de grandeur sont, pour une comète qui se trouve à $\simeq 1$ UA du Soleil, quelques kilomètres pour le noyau, quelques centaines de milliers de kilomètres pour la coma, quelques dizaines de millions de kilomètres pour la queue de poussières et quelques centaines de millions de kilomètres pour la queue de plasma.

a)
file=/scratchh/celine/com2a.eps,clip=,width=11truecm

b)
file=/scratchh/celine/com2.eps,clip=,width=10truecm

FIG. 2.2 – Spectre de la comète de Halley obtenu en mars 1986 par le spectromètre TKS de la sonde Vega 2. La sonde se trouvait alors à 380 000 km de la comète. Le spectromètre visait à 18 000 kilomètres du noyau. Le spectre obtenu (en haut) est la somme d’un continuum dû à la diffusion des photons solaires par les particules de poussière et de bandes d’émission des molécules gazeuses. La soustraction du spectre solaire (ligne pointillée) ajusté au spectre enregistré permet d’isoler ces émissions gazeuses (en bas).

file=/scratchh/celine/com3.ps,clip=,angle=270,width=16cm
longueur d’onde (nm)

Troisième partie

Le naphthalène $C_{10}H_8$

Sommaire

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | Introduction | 31 |
| 2 | tude du naphtalne en jet supersonique | 33 |
| 3 | Spectres TKS de la comte de Halley | 49 |
| 4 | Conclusion | 61 |

Chapitre 3

Introduction

La caractéristique essentielle des molécules hydrogénées aromatiques polycycliques (PAHs = polycyclic aromatic hydrocarbons) est leur structure cyclique due à l'hybridation sp^2 des électrons de valence du carbone. Ce sont des hydrocarbures dont les atomes de carbone s'arrangent en cycles hexagonaux et pentagonaux. Le premier membre de la famille des composés aromatiques est le benzène, C_6H_6 , analysé pour la première fois au XIX^e siècle par Faraday.

Le naphthalène, $C_{10}H_8$, est l'une des plus petites molécules hydrogénées aromatiques polycycliques. Sa structure, composée de deux cycles benzéniques, est représentée sur la figure ??.

FIG. 3.1 – Structure de la molécule de naphthalène, $C_{10}H_8$, composé hydrogéné aromatique polycyclique à deux cycles benzéniques.

file=/scratchh/celine/nphA.ps,angle=270,clip=,width=6truecm

Les PAHs sont caractérisés par leur grande stabilité. Ces molécules sont peu déformables et réagissent peu avec d'autres composés. Leur faible réactivité chimique est à la base de nombreuses applications : elles entrent dans la composition de carburants, de diluants pour peintures, dans l'industrie des fibres synthétiques, etc. Elles se trouvent dans des substances aussi courantes que le charbon et la suie et se forment lors de nombreuses réactions chimiques de combustion.

Les molécules hydrogénées aromatiques polycycliques semblent se former aussi aisément dans l'espace que sur la Terre, en particulier dans les enveloppes d'étoiles carbonées. On les trouve aussi dans les météorites de type chondrites carbonées et dans les tholines qui sont des composés organiques analogues à ceux qui se forment dans l'atmosphère de Titan lors de son irradiation par des particules chargées électriquement (Sagan, 1993).

Par ailleurs, l'analyse spectroscopique infrarouge de nombreux objets interstellaires (nébuleuses, matière circumstellaire) a conduit à formuler l'hypothèse de la présence de PAHs dans l'espace interstellaire. Depuis une vingtaine d'années, des bandes d'émission sont observées dans ces objets. Ces bandes, appelées "bandes IR non identifiées", se situent toujours aux mêmes longueurs d'onde : 3,3 ; 6,2 ; 7,7 ; 8,6 et 11,3 μm . Les molécules responsables de ces émissions sont portées

à des températures vibrationnelles très élevées lors de l'absorption d'un photon UV puis se refroidissent lentement en émettant des photons IR à ces longueurs d'onde. Or les spectres d'absorption et d'émission thermique du coronène, molécule hydrogénée aromatique polycyclique à sept cycles benzéniques, ainsi que d'autres PAHs, présentent des raies pratiquement aux mêmes longueurs d'onde : 3,3 ; 6,2 ; 7,7 ; 8,85 et 11,9 μm . ?leger84 et ?allamandola89 ont suggéré que toute une famille de PAHs pourrait être responsable de ces émissions.

Les comètes s'étant formées à partir de matière interstellaire, il est probable qu'elles contiennent des molécules hydrogénées polycycliques aromatiques.

Dans le domaine infrarouge, les spectres de plusieurs comètes (P/Halley 1986 III, Wilson 1987 VII, Bradfield 1987 XXIX et Levy 1990 XX) présentent une émission à 3,28 μm , qui est une bande de vibration de la liaison C-H caractéristique d'un PAH (? , ?)encrenaz88,crovisier93.

Dans le domaine proche-ultraviolet, l'obtention de spectres d'émission de fluorescence du phénanthrène, molécule hydrogénée polycyclique aromatique à trois cycles, $C_{14}H_{10}$, au laboratoire de photophysique moléculaire d'Orsay (? , ?)hermine94 a permis de proposer l'identification de cette molécule dans des spectres de la comète de Halley obtenus par le spectromètre tricanal TKS lors de la mission Vega 2 en 1986 (? , ?)moreels94.

Chapitre 4

Étude du naphthalène en jet supersonique

4.1 Introduction

Ce travail expérimental vise à obtenir des spectres d'émission du naphthalène, $C_{10}H_8$, afin de les comparer à des spectres cométaires. Le dispositif expérimental utilisé se trouve au laboratoire de photophysique moléculaire d'Orsay. L'expérience utilise la technique du jet supersonique et permet de simuler raisonnablement les conditions du milieu cométaire : les molécules sont en phase gazeuse dans un milieu de faible densité et sont refroidies à très basse température.

Des spectres de fluorescence du naphthalène ont été obtenus précédemment par Beck81 dans les mêmes conditions de jet supersonique. Cependant, leurs conditions d'excitation induite par des lasers monochromatiques ne reproduisent pas les conditions d'excitation des molécules dans la coma par le rayonnement solaire. Nous avons obtenu des spectres de fluorescence en choisissant des énergies d'excitation qui simulent plus précisément l'excitation par la lumière du Soleil.

4.2 Photophysique des molécules aromatiques polycycliques

Le schéma typique des états électroniques singulets et triplets d'une molécule hydrogénée aromatique polycyclique est donné figure ???. Dans le cas du naphthalène, l'énergie du niveau électronique S_1 est égale à $32\,020\text{ cm}^{-1}$ (correspondant à la longueur d'onde de 312,3 nm) et celle du niveau S_2 est $35\,817\text{ cm}^{-1}$ (correspondant à 279,2 nm), soit 3797 cm^{-1} au-dessus de S_1 .

Des processus radiatifs et non radiatifs se produisent lors d'une excitation UV entre l'état électronique fondamental S_0 et un état électronique excité S_n , $n \geq 1$. Quatre mécanismes de désexcitation entrent en compétition :

- la fluorescence électronique, désexcitation radiative qui se traduit par l'émission de photons dans les domaines ultraviolet et/ou visible,
- la fluorescence vibrationnelle qui se traduit par l'émission en cascade de photons dans l'infrarouge et ne peut avoir lieu qu'à la suite d'une relaxation non radiative,
- l'émission de phosphorescence qui nécessite aussi une relaxation non radiative préalable,
- la photodissociation.

Suivant la longueur d'onde d'excitation et la nature de la molécule considérée, l'un ou l'autre de ces mécanismes est favorisé. Quand on excite l'origine du premier état électronique S_1 , on observe l'émission de fluorescence radiative. Lorsque l'excès d'énergie du photon déposée au-dessus du niveau S_1 augmente, les processus non radiatifs sont favorisés et l'intensité de la fluorescence diminue. Une émission de phosphorescence apparaît suite au croisement intersystème vers les états triplets, puis, quand l'excès d'énergie est suffisant pour autoriser la conversion interne vers S_0 , la fluorescence IR vibrationnelle prédomine tant que l'énergie des photons absorbés reste inférieure à l'énergie de dissociation de la molécule.

La compétition entre ces divers processus joue sur la valeur du rendement quantique de fluorescence et affecte la forme des spectres d'émission de fluorescence.

FIG. 4.1 – Diagramme typique des états électroniques d'une molécule hydrogénée aromatique polycyclique (d'après ?hermine94). Les différents mécanismes de désexcitation sont la fluorescence, l'émission de photons infrarouges (fluorescence vibrationnelle) et la phosphorescence.

file=/scratchh/celine/nph0.eps,angle=0,clip=,width=12cm

Pour de très grandes énergies en excès, l'énergie du photon UV absorbé est totalement convertie en énergie vibrationnelle. C'est la fluorescence IR vibrationnelle observée dans les objets du milieu interstellaire où les énergies absorbées sont de l'ordre de 10 eV, soit $\simeq 80\,600\text{ cm}^{-1}$ (cf. chapitre ??). Les circonstances sont différentes dans le milieu interplanétaire avec des énergies d'environ 4 eV ($\simeq 32\,200\text{ cm}^{-1}$) et où les phénomènes de fluorescence électronique et de phosphorescence entrent en jeu.

4.3 Expérience

L'expérience utilise la technique de jet supersonique combinée avec l'utilisation de lasers à colorants accordables monochromatiques qui permettent d'avoir une gamme étendue de longueurs d'onde d'excitation. Les très basses températures atteintes et le régime sans collision obtenu dans un jet libre simulent raisonnablement la situation rencontrée dans les milieux cométaires. Le schéma expérimental est donné dans la figure ?? et expliqué dans les paragraphes suivants.

FIG. 4.2 – Schéma du montage expérimental permettant d'étudier la fluorescence de molécules en phase gazeuse, refroidies à de très basses températures dans un régime sans collision.

file=/scratchh/celine/nph1.eps,angle=0,width=16truecm,clip=

4.3.1 Échantillon gazeux

Les molécules de naphthalène sont sous forme de cristaux qu'il faut chauffer afin d'obtenir de la vapeur. Les cristaux sont placés dans une cellule entourée d'un thermocoaxe chauffant.

La température du réservoir, contrôlée à l'aide d'un thermocouple, est choisie de manière empirique en fonction de l'intensité de fluorescence obtenue. Toutefois, il ne faut pas travailler avec une température trop importante pour ne pas vaporiser trop rapidement les molécules. La température utilisée est d'environ 25°C.

4.3.2 Jet libre

La vapeur est entraînée par un gaz porteur dans une chambre à vide à travers une tuyère de faible diamètre. La pression du gaz porteur ne doit pas être trop forte afin d'éviter les risques de formation d'agrégats de gaz rare ou de polymères. Nous avons utilisé une pression $P_0 = 5$ bars d'hélium. Les molécules de naphthalène sont refroidies lors de la détente adiabatique du gaz à travers la tuyère, réalisée par la fermeture et l'ouverture d'un embout conique de 500 micromètres de diamètre commandées par un électro-aimant. Un boîtier électronique permet de changer la fréquence d'ouverture de l'embout. Elle est synchronisée sur la fréquence du pulse laser à l'aide d'une photodiode qui reçoit une partie du faisceau laser et l'envoie sur un oscilloscope. Le pulse laser doit arriver un peu après l'ouverture de la vanne qui dure environ 1 milliseconde.

Pour une pression $P_0 = 5$ bars de gaz porteur, la pression dans la chambre est de l'ordre de 0,2 torr (soit 2×10^{-4} bars). Les molécules sont refroidies à une température de quelques Kelvins et se trouvent dans le niveau électronique fondamental S_0 .

4.3.3 Excitation optique

Les molécules de naphthalène dans le jet libre sont excitées par des lasers. Un laser YAG délivre une impulsion de puissance élevée et de fréquence égale à 15 Hz dans l'infrarouge à 1064 nm. Après doublage de fréquence par un cristal KDP, on obtient un faisceau à 532 nm qui sert à pomper un laser à colorant Quantel. La longueur d'onde du faisceau de sortie est supérieure à 532 nm, de l'ordre de 600 nm. Un deuxième cristal doubleur placé sur le trajet optique permet d'avoir un faisceau ultraviolet ($\lambda_{exc} \simeq 300$ nm) à l'entrée de la chambre à vide.

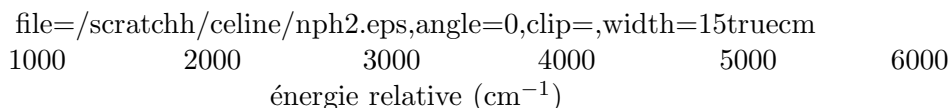
Pour avoir une longueur d'onde d'excitation plus petite, on utilise un laser Excimère XeCl qui délivre un faisceau à 308 nm. Le passage du faisceau dans un colorant, composé de coumarine dans de l'éthanol, permet d'obtenir un faisceau monochromatique dont la longueur d'onde peut varier entre 520 et 580 nm environ. On règle la longueur d'onde en déplaçant un miroir devant le réseau interne à la cavité du laser accordable.

On peut régler la position du jet de naphthalène afin que le laser le coupe. Lorsque la longueur d'onde du laser correspond à une transition dans la molécule, celle-ci est excitée du niveau S_0 au niveau S_1 ou S_2 , selon l'énergie du laser. Elle peut relaxer en émettant un rayonnement de fluorescence. Les longueurs d'onde efficaces pour l'excitation du naphthalène sont données par le spectre d'excitation (cf. §??). Nous nous sommes basés sur le spectre d'excitation obtenu par Beck80 pour accorder les lasers sur des longueurs d'onde efficaces (Fig.??).

4.3.4 Détection

Les photons émis sont collectés dans une direction perpendiculaire à la fois au jet et au faisceau laser et transmis à un photomultiplicateur (PM) qui les convertit en signal électrique. Le courant issu du photomultiplicateur est amplifié avant d'être analysé.

FIG. 4.3 – Spectre d’excitation du naphthalène (Beck80). Les flèches indiquent les énergies d’excitation pour lesquelles des spectres de fluorescence ont été obtenus : B pour Beck81, H pour Hermine94 et le symbole \bullet pour le travail présenté ici. La première partie du spectre est multipliée par 18. L’énergie est relative à l’origine $S_1 \leftarrow S_0$ à $32\,020\text{ cm}^{-1}$.



Mesure du spectre d’excitation

Le spectre obtenu en traçant l’intensité du signal collecté par le photomultiplicateur en fonction de la longueur d’onde excitatrice du laser qui est balayée au niveau du laser à colorant est le spectre d’excitation de fluorescence. Il est égal au produit du spectre d’absorption (signal absorbé en fonction de la longueur d’onde du laser) par le rendement quantique de fluorescence. Les raies du spectre correspondent à une transition dans la molécule. Les molécules du jet supersonique étant toutes dans l’état fondamental électronique et vibrationnel S_0 , le spectre donne donc la structure vibrationnelle de l’état excité. Les mesures de spectres d’excitation que nous avons faites sont peu précises mais nous ont permis de vérifier qu’elles étaient identiques à celles de Beck80 (Fig.??).

Mesure des spectres d’émission de fluorescence

Un niveau vibronique excité émet un rayonnement de fluorescence en se désexcitant vers un certain nombre de niveaux vibroniques de l’état fondamental. Pour analyser cette fluorescence, le faisceau est transporté sur la fente d’entrée d’un monochromateur à réseau monté en spectrographe et équipé en sortie d’un détecteur à matrice de CCD situé dans le plan image de la fente d’entrée. Pour augmenter le rapport signal sur bruit, on somme les intensités de fluorescence recueillies dans les pixels alignés sur une même verticale (image monochromatique de la fente d’entrée) en fonction de la position horizontale des pixels, donc de la longueur d’onde. Le spectre d’émission ainsi obtenu donne la structure vibrationnelle de l’état fondamental.

On fait varier la résolution du spectromètre en modifiant la largeur de la fente d’entrée, le but étant d’augmenter au maximum la résolution tout en ayant un signal suffisamment intense. La largeur de la fente choisie était de l’ordre de 0,1 mm, correspondant à une résolution de 0,4 nm environ. La résolution dépend aussi de l’ordre dans lequel on choisit de travailler. Dans l’ordre 2, la dispersion est deux fois plus grande et la résolution est meilleure pour une largeur de fente donnée. Cependant, chaque pixel reçoit deux fois moins de photons que dans l’ordre 1, impliquant une intensité plus faible. On peut également choisir de travailler avec le réseau 150 traits/mm ou le réseau 1200 traits/mm. Dans le premier cas, le domaine de longueurs d’onde balayé est plus grand et permet de mesurer le spectre à la fois dans l’ordre 1 autour de la longueur d’onde λ et dans l’ordre 2 autour de la longueur d’onde $2 \times \lambda$. Nous avons fait des mesures dans les deux ordres et avec les deux réseaux puis vérifié que les résultats étaient identiques après correction de l’efficacité des réseaux et de la sensibilité du détecteur (CCD traité pour la détection du rayonnement ultraviolet).

Mesure des durées de vie de fluorescence

On mesure aussi les durées de vie de fluorescence en enregistrant au cours du temps la décroissance de la fluorescence après l'excitation laser. On ouvre les fentes du monochromateur afin de laisser passer un maximum de lumière. Le signal provenant du photomultiplicateur est envoyé sur un oscilloscope. Les signaux transitoires sont moyennés sur 1000 impulsions laser avant d'être enregistrés. On compare la courbe représentant la décroissance du signal transitoire à une courbe synthétique qui rend compte du caractère exponentiel de la vraie décroissance de fluorescence, convoluée par une fonction d'appareil (cf. §??). Cette mesure donne des renseignements sur la compétition entre la fluorescence et d'autres phénomènes non radiatifs. Elle permet d'estimer le rendement quantique de fluorescence Q_{fl} de la molécule.

4.4 Spectres d'émission de fluorescence

Des études précédentes du naphthalène dans les jets supersoniques ont été réalisées avec différentes conditions d'excitation. La figure ?? et le tableau ?? donnent les énergies et les longueurs d'onde d'excitation utilisées par les différents auteurs.

TAB. 4.1 – Liste des longueurs d'onde λ_{exc} et énergies excitatrices données par rapport à l'origine $S_1 \leftarrow S_0$ à $32\,020\text{ cm}^{-1}$, pour lesquelles des spectres d'émission de fluorescence induite par laser du naphthalène ont été obtenus.

| auteurs | énergie relative (cm^{-1}) | λ_{exc} (nm) |
|--------------------|--|-------------------------|
| Beck et al. (1981) | 0 | 312,3 |
| | 435 | 308,2 |
| | 1422 | 299,0 |
| | 2122 | 292,9 |
| | 2570 | 289,1 |
| | 2867 | 286,6 |
| | 3068 | 285,0 |
| | 3797 | 279,2 |
| | 4029 | 277,4 |
| Hermine (1994) | 435 | 308,2 |
| | 5574 | 266,0 |
| ce travail | 1422 | 299,0 |
| | 2122 | 292,9 |
| | 2570 ^a | 289,1 ^a |
| | 3950 | 278,4 |
| | 4383 | 274,7 |
| | 5293 | 268,0 |

^aSeul le déclin de la fluorescence a été enregistré.

?beck81 ont obtenu des spectres d'émission de fluorescence en excitant les molécules de naphthalène à l'aide de lasers de longueurs d'onde comprises entre $\lambda_{exc} = 312,3$ nm (excitation à l'origine de la transition $S_1 \leftarrow S_0$ à $32\,020$ cm^{-1} : pas d'énergie en excès par rapport au niveau électronique S_1) et $\lambda_{exc} = 277,4$ nm (excitation sur des niveaux vibrationnels situés légèrement au dessus de S_2 : excès d'énergie supérieur à 3797 cm^{-1}).

?hermine94 a obtenu des spectres en excitant à $308,2$ nm (excitation sur des niveaux vibrationnels de S_1 avec une énergie en excès de 435 cm^{-1}) et 266 nm (excitation sur des niveaux vibrationnels de S_2).

Les deux auteurs ayant réalisé un spectre de fluorescence en excitant les molécules avec un laser à la longueur d'onde $\lambda_{exc} = 308,2$ nm (excès d'énergie égal à 435 cm^{-1}), nous pouvons comparer les résultats qui sont présentés sur la figure ???. Les mêmes raies se trouvent bien aux mêmes longueurs d'onde mais l'intensité relative est très différente. Le spectre obtenu par ?beck81 a des intensités faibles pour les énergies relatives plus petites, correspondant à de plus grandes longueurs d'onde, par rapport à celles des spectres obtenus par ?hermine94. On remarque notamment une grande différence dans l'intensité de la raie située à $\simeq -1800$ cm^{-1} tandis que celle de la raie située à $\simeq 500$ cm^{-1} est la même dans les deux spectres.

FIG. 4.4 – Spectres d'émission de fluorescence du naphthalène obtenus avec une énergie d'excitation de 435 cm^{-1} au dessus de S_1 , soit une longueur d'onde excitatrice $\lambda_{exc} = 308,2$ nm, par a) ?beck81 et b) ?hermine94. Les spectres sont tracés en fonction de l'énergie relative à l'origine $S_1 \leftarrow S_0$ à $32\,020$ cm^{-1} . Le spectre obtenu par ?hermine94 contient des raies plus intenses pour les petites énergies en excès (pour les grandes longueurs d'onde) que celui obtenu par ?beck81.

a)

b)

file=/scratchh/celine/nph3b.eps,angle=0,clip=,width=7.8truecm
-2000 -1000 0
énergie relative (cm^{-1})

file=/scratchh/celine/nph3a.eps,angle=0,clip=,width=7.8truecm
-2000 -1000 0
énergie relative (cm^{-1})

Afin de pouvoir comparer nos résultats avec ceux de ?beck81, nous avons mesuré des spectres d'émission du naphthalène en excitant aux longueurs d'onde $\lambda_{exc} = 299$ et $292,9$ nm. Les spectres sont présentés dans les figures ???.a et b. Là encore, nous retrouvons les mêmes raies mais, dans le cas des spectres de ?beck81 (lignes pointillées), l'intensité des raies diminue au delà de 325 nm par rapport à l'intensité des raies dans nos spectres.

Nous avons également comparé deux spectres obtenus dans des conditions d'excitation très proches : $\lambda_{exc} = 279,2$ nm (? , ?)beck81 et $\lambda_{exc} = 278,4$ nm (ce travail). L'énergie excitatrice est maintenant plus grande et les molécules excitées sont dans l'état S_2 . Une redistribution

FIG. 4.5 – Spectres d’émission de fluorescence du naphthalène obtenus avec une excitation aux longueurs d’onde a) 299 nm, b) 292,9 nm et c) $\simeq 279$ nm. L’énergie relative est repérée par rapport à l’origine $S_1 \leftarrow S_0$ à $32\,020\text{ cm}^{-1}$. Lorsque l’énergie d’excitation est grande ($\lambda_{exc} \simeq 279$ nm), un continuum important, dû à une redistribution intramoléculaire, se superpose aux raies. Dans les trois cas, le spectre obtenu par Beck et al. (1981) (en pointillés) est moins intense que le nôtre pour les grandes longueurs d’onde.

a) $\lambda_{exc} = 299$ nm

énergie en excès = 1422 cm^{-1}

énergie relative (cm^{-1})

longueur d’onde (nm)

b) $\lambda_{exc} = 292,9$ nm

énergie en excès = 2122 cm^{-1}

énergie relative (cm^{-1})

longueur d’onde (nm)

c) $\lambda_{exc} \simeq 279$ nm, énergie en excès $\simeq 3900\text{ cm}^{-1}$

énergie relative (cm^{-1})

longueur d’onde (nm)

file=/scratchh/celine/nph4a.ps,angle=270,clip=,width=7.5truecm
 file=/scratchh/celine/nph4b.ps,angle=270,clip=,width=7.5truecm

FIG. 4.6 – Spectres d’émission de fluorescence du naphthalène induite par des excitations aux longueurs d’onde a) 274,7 nm et b) 268 nm. L’énergie relative est repérée par rapport à l’origine $S_1 \leftarrow S_0$ à $32\,020\text{ cm}^{-1}$. Les spectres présentent un maximum d’émission vers 350 nm, et sont similaires au spectre obtenu pour $\lambda_{exc} = 278,4$ nm (cf. Fig.??).c). Les structures fines du spectre disparaissent peu à peu lorsque l’énergie excitatrice augmente (ou lorsque λ_{exc} diminue).

a) $\lambda_{exc} = 274,7$ nm, énergie en excès = 4383 cm^{-1}

énergie relative (cm^{-1})

longueur d’onde (nm)

b) $\lambda_{exc} = 268$ nm, énergie en excès = 5293 cm^{-1}

longueur d’onde (nm)

file=/scratchh/celine/nph5a.ps,angle=270,clip=,width=13.5truecm

file=/scratchh/celine/nph5b.ps,angle=270,clip=,width=13.5truecm

intramoléculaire sur les niveaux de S_1 , suivie de phénomènes de conversion interne, crée un continuum intense qui se superpose aux raies (Fig.??).c). Nous constatons encore que l'intensité du spectre obtenu par Beck81 (en pointillés) diminue rapidement lorsque la longueur d'onde augmente contrairement à notre spectre.

Enfin, nous avons obtenu deux autres spectres en excitant les molécules sur des niveaux vibrationnels encore plus excités de S_2 : $\lambda_{exc} = 274,7$ et 268 nm (Fig.??). Ces spectres, centrés vers 350 nm, ressemblent fortement au spectre obtenu en excitant très près de l'origine S_2 ($\lambda_{exc} = 278,4$ nm). Les structures les plus fines disparaissent au fur et à mesure que l'énergie d'excitation augmente (ou que λ_{exc} diminue). Nous verrons au chapitre ?? (§??) que les excitations à ces trois longueurs d'onde ($\lambda_{exc} = 278,4$; $274,7$ et 268 nm) permettent de simuler de manière plus appropriée l'excitation des molécules dans la coma par le rayonnement solaire.

4.5 Durées de vie et rendements quantiques de fluorescence

Nous avons enregistré sur un oscilloscope la décroissance au cours du temps de la fluorescence émise par les molécules de naphthalène, excitées aux longueurs d'onde $\lambda_{exc} = 299, 292,9, 289,1$ et $274,7$ nm. Trois des signaux mesurés sont représentés sur la figure ?? . Indépendamment des oscillations qui sont dues à un artéfact créé par un problème de câblage, ils révèlent un comportement biexponentiel.

FIG. 4.7 – Décroissance de la fluorescence des molécules de naphthalène excitées aux longueurs d'onde $\lambda_{exc} = 299, 292,9$ et $274,6$ nm. La courbe en pointillés est l'ajustement théorique à la décroissance de la fluorescence des molécules de naphthalène excitées à la longueur d'onde $\lambda_{exc} = 299$ nm. Il s'agit d'une décroissance biexponentielle.

file=/scratchh/celine/nph6.ps,angle=270,clip=,width=14.5truecm

On ajuste une courbe théorique à la courbe expérimentale afin de déterminer les deux constantes de temps caractéristiques de la décroissance biexponentielle : τ_l pour la composante longue et τ_c pour la composante courte. La courbe théorique, dont l'équation est donnée au paragraphe suivant, est représentée en pointillés pour la longueur d'onde d'excitation $\lambda_{exc} = 299$ nm.

4.5.1 Équation théorique de la décroissance de fluorescence

L'impulsion laser dure moins de 10 ns. On considère qu'elle est instantanée relativement aux temps mesurés. Si t_0 désigne l'instant où arrive l'impulsion laser, la population de l'état excité du naphthalène en l'absence de relaxation s'écrit comme une fonction d'Heaviside :

$$H(t - t_0)$$

Du fait de la relaxation (radiative et non radiative), la réponse du naphthalène à l'impulsion laser est de forme exponentielle. L'enregistrement de la décroissance de la fluorescence montre qu'elle est biexponentielle (cf. figure ??) :

$$C_l e^{-\frac{t}{\tau_l}} + C_c e^{-\frac{t}{\tau_c}}$$

où τ_l et τ_c sont respectivement les constantes de temps pour la composante longue et la composante courte de la décroissance.

Le photomultiplicateur et l'électronique associée ont une certaine fonction de réponse R qui retarde la réponse du naphthalène à l'impulsion laser. Considérons que la réponse R du détecteur est une exponentielle :

$$R = e^{-\frac{t}{\tau_R}}$$

Le signal enregistré est alors de la forme :

$$\begin{aligned} S &= R \otimes [H(t - t_0) \times (C_l e^{-\frac{t}{\tau_l}} + C_c e^{-\frac{t}{\tau_c}})] \\ &= e^{-\frac{t}{\tau_R}} \otimes [H(t - t_0) \times (C_l e^{-\frac{t}{\tau_l}} + C_c e^{-\frac{t}{\tau_c}})] \\ &= \int e^{-\frac{t_1}{\tau_R}} H(t - t_1 - t_0) (C_l e^{-\frac{t-t_1}{\tau_l}} + C_c e^{-\frac{t-t_1}{\tau_c}}) dt_1 \\ &= \int_0^{t-t_0} e^{-\frac{t_1}{\tau_R}} (C_l e^{-\frac{t-t_1}{\tau_l}} + C_c e^{-\frac{t-t_1}{\tau_c}}) dt_1 \\ &= C_l e^{-\frac{t}{\tau_l}} \int_0^{t-t_0} e^{-t_1(\frac{1}{\tau_R} - \frac{1}{\tau_l})} dt_1 + C_c e^{-\frac{t}{\tau_c}} \int_0^{t-t_0} e^{-t_1(\frac{1}{\tau_R} - \frac{1}{\tau_c})} dt_1 \\ &= C_l \frac{\tau_R \tau_l}{\tau_R - \tau_l} e^{-\frac{t}{\tau_l}} e^{-(t-t_0)(\frac{1}{\tau_R} - \frac{1}{\tau_l})} + C_c \frac{\tau_R \tau_c}{\tau_R - \tau_c} e^{-\frac{t}{\tau_c}} e^{-(t-t_0)(\frac{1}{\tau_R} - \frac{1}{\tau_c})} \end{aligned}$$

4.5.2 Détermination des durées de vie de fluorescence

Comme le montre la figure ??, la durée de vie τ_c est d'autant plus grande que la longueur d'onde excitatrice λ_{exc} est grande. L'influence de la réponse de la chaîne de détection devient négligeable lorsque la longueur d'onde excitatrice augmente car τ_R est de plus en plus petit par rapport à τ_c . On détermine alors le temps de réponse du détecteur τ_R à partir de la mesure obtenue pour $\lambda_{exc} = 299$ nm qui donne la plus grande durée de vie τ_c et est la moins affectée par le temps de réponse de la détection. La valeur obtenue est $\tau_R \simeq 30$ ns.

τ_R étant maintenant fixé, on détermine la durée de vie pour toutes les excitations. Elles sont données dans le tableau ?? et la figure ??a montre la durée de vie en fonction de la longueur d'onde d'excitation. La composante longue τ_l vaut 1 μ s environ et la composante courte τ_c varie entre 83 et 377 ns.

4.5.3 Détermination du rendement quantique de fluorescence

Lorsque la molécule absorbe un photon, le mécanisme de désexcitation radiative (fluorescence à partir de l'état électronique S_1) entre en compétition avec les mécanismes de relaxation non radiative conduisant à l'émission de photons IR ou de phosphorescence (cf. §??). On a la relation :

$$Q_{fl} + Q_{ph} + Q_{IR} = 1 \quad (4.1)$$

où Q_{fl} , Q_{ph} et Q_{IR} sont respectivement les rendements quantiques de fluorescence (à partir de l'état S_1), de phosphorescence (état T_1) et d'émission de photons IR (état S_0).

TAB. 4.2 – Durées de vie et rendements quantiques de fluorescence des molécules de naphthalène excitées à différentes longueurs d'onde λ_{exc} . À ces longueurs d'onde, le photon absorbé a une certaine énergie en excès par rapport au niveau S_1 à $32\,020\text{ cm}^{-1}$. La décroissance de la fluorescence a un comportement biexponentiel, avec une composante longue τ_l et une composante courte τ_c .

| λ_{exc} (nm) | excès d'énergie (cm^{-1}) | τ_l (μs) | τ_c (ns) | Q_{fl} (%) |
|-------------------------|---|-------------------------------|------------------|-----------------|
| 299 | 1422 | 1,3 | 377 | 45 |
| 292,9 | 2122 | 1,8 | 116 | 12 |
| 289,1 | 2570 | 0,9 | 83 | 10 |
| 274,7 | 4383 | 1,0 | 83 | 10 |

Le rendement quantique de fluorescence Q_{fl} s'exprime en fonction des constantes de vitesses radiative k_{rad} et non radiative k_{nrad} :

$$Q_{fl} = \frac{k_{rad}}{k_{rad} + k_{nrad}}$$

ou en fonction des durées de vie :

$$Q_{fl} = \frac{\tau_c}{\tau_{rad}} \quad (4.2)$$

avec

$$\tau_{rad} = \frac{1}{k_{rad}} \quad \text{et} \quad \tau_c = \frac{1}{k_{rad} + k_{nrad}}$$

τ_c est la durée de vie de fluorescence totale à partir de l'état S_1 qui est la variable mesurée expérimentalement. τ_{rad} est la durée de vie purement radiative.

On peut obtenir la durée de vie radiative τ_{rad} de l'état S_1 à partir de mesures en absorption pour la transition $S_1 \leftarrow S_0$. En effet, la section efficace d'absorption σ_{abs} est reliée au coefficient d'Einstein d'absorption B par la relation suivante :

$$\int \sigma_{abs}(\lambda) d\lambda = B \frac{h\nu}{c} \frac{\Delta\lambda}{\Delta\nu} = B \frac{h}{\nu} \quad (4.3)$$

La durée de vie radiative est :

$$\tau_{rad} = \frac{1}{A}$$

où A est le coefficient d'Einstein d'émission. La relation entre les coefficients d'Einstein d'absorption et d'émission est :

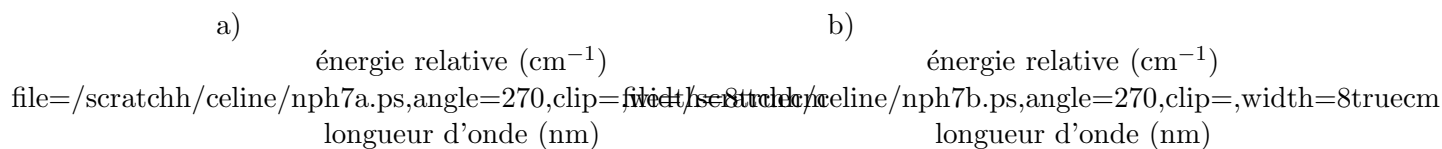
$$B = A \times \frac{c^3}{8\pi h\nu^3}$$

La relation ?? devient :

$$\begin{aligned} \int \sigma_{abs}(\lambda) d\lambda &= \frac{1}{\tau_{rad}} \times \frac{c^3}{8\pi\nu^4} \\ &= \frac{1}{\tau_{rad}} \times 1,0743 \cdot 10^{-36} \text{ m}^3 \text{ avec } \nu = 33\,000 \text{ cm}^{-1} \end{aligned}$$

La durée de vie radiative a été mesurée pour des molécules de naphthalène froides et isolées en jet moléculaire par ?behlen81. Ils ont obtenu $\tau_{rad} \simeq 1 \mu s$. L'équation ?? donne des valeurs de rendement quantique qui varient entre 0,1 et 0,45 (voir Tab.?? et Fig.??b). D'après l'équation ??, un rendement quantique inférieur à 1 signifie qu'il existe une voie de désexcitation non radiative. Par ailleurs, Q_{fl} diminue lorsque l'énergie du photon absorbé augmente car les processus non radiatifs deviennent prédominants (cf. §??).

FIG. 4.8 – a) Durées de vie de fluorescence τ_c et b) rendements quantiques de fluorescence Q_{fl} en fonction de la longueur d'onde excitatrice. L'énergie relative est repérée par rapport à l'origine $S_1 \leftarrow S_0$ à $32\,020 \text{ cm}^{-1}$.



De nombreux auteurs ont mesuré le rendement quantique de fluorescence du naphthalène en phase vapeur : ?lim72, ?beddard73, ?hsieh74, ?stockburger75, ?hall76, ?suto92. Cependant, les valeurs obtenues varient énormément d'un auteur à l'autre, d'un facteur pouvant aller de deux à plusieurs dizaines. Nous pouvons comparer nos résultats avec ceux de ?stockburger75 et ?suto92 qui ont fait des mesures dans les mêmes conditions d'excitation que nous. Les valeurs sont données dans le tableau ??.

TAB. 4.3 – Rendement quantique de fluorescence des molécules de naphthalène en phase vapeur excitées à différentes longueurs d'onde λ_{exc} . À ces longueurs d'onde, le photon absorbé a une certaine énergie en excès par rapport au niveau S_1 à $32\,020 \text{ cm}^{-1}$.

| λ_{exc} (nm) | excès d'énergie (cm^{-1}) | Q_{fl} (%) | | |
|-------------------------|---|------------------------------|-----------------------|------------|
| | | Stockburger et al. (1975) | Suto et al. (1992) | ce travail |
| 299 | 1422 | 33 | $\simeq 2$ | 45 |
| 292,9 | 2122 | 16 | $\simeq 2$ | 12 |
| 289,1 | 2570 | 14 | $\simeq 4$ | 10 |
| 274,7 | 4383 | — | $\simeq 8$ | 10 |

Nos valeurs sont du même ordre de grandeur que celles de ?stockburger75 mais très différentes de celles obtenues par ?suto92. Ces derniers observent par ailleurs une chute du rendement quantique de fluorescence pour $\lambda_{exc} > 280 \text{ nm}$ qui est contraire à la diminution des processus non radiatifs lorsque la longueur d'onde excitatrice augmente. La méthode de mesure utilisée par ?suto92 est différente. Ils mesurent les sections efficaces de fluorescence σ_{fl} et d'absorption

σ_{abs} et calculent le rendement quantique de fluorescence selon la relation suivante :

$$Q_{fl} = \frac{\sigma_{fl}}{\sigma_{abs}}$$

La valeur de Q_{fl} dépend donc de la calibration en intensité des sections efficaces qui est très délicate. Par ailleurs, ils travaillent à température ambiante et des phénomènes tels que les collisions peuvent intervenir.

4.6 Conclusion

Nos spectres de fluorescence du naphthalène sont différents de ceux obtenus précédemment par Beck81 bien que le principe de l'expérience utilisée soit le même. Ils ont cependant utilisé un détecteur qui est moins sensible dans le rouge que le celui que nous avons employé. On peut alors expliquer que les spectres qu'ils ont enregistrés aient une intensité trop faible pour les grandes longueurs d'onde par rapport aux spectres émis si la correction de la fonction de réponse du système n'a pas été faite avec précision.

Nos résultats, obtenus dans les conditions d'excitation précisées dans ce chapitre, vont nous permettre de synthétiser un spectre qui simule au mieux l'émission de fluorescence d'une molécule de naphthalène soumise au rayonnement solaire dans une coma.

Dans le cas d'une détection de cette molécule dans un environnement cométaire, la connaissance du rendement quantique de fluorescence pourra permettre d'estimer l'abondance du naphthalène. Une sous-estimation de la valeur du rendement quantique de fluorescence conduirait à une sur-estimation de l'abondance de la molécule dans la coma.

Chapitre 5

Spectres TKS de la comète de Halley

5.1 Introduction

Il est généralement admis que les comètes ont été formées à partir de matière interstellaire contenue dans la nébuleuse primitive, en même temps que le système solaire, et ont gardé depuis la même composition. De nombreuses molécules observées dans le milieu interstellaire ont en effet été détectées dans des comètes. Par ailleurs, l'existence des molécules hydrogénées aromatiques polycycliques (PAHs) dans le milieu interstellaire est aujourd'hui bien reconnue.

Il est donc probable que les comètes contiennent également des composés hydrogénés aromatiques polycycliques. La détection dans les spectres IR de plusieurs comètes d'une bande de vibration de la liaison C-H caractéristique d'un PAH conforte cette idée (cf. chapitre ??). De plus, des observations de la comète de Halley par le spectromètre TKS de la sonde spatiale Vega 2 ont révélé la présence de bandes d'émission de fluorescence d'un PAH, le phénanthrène, dans le domaine proche-ultraviolet (,)moreels94.

Les conditions du laboratoire simulant raisonnablement celles du milieu cométaire, les spectres du naphthalène expérimentaux présentés dans le chapitre précédent peuvent être comparés à des spectres de comètes et notamment aux spectres de la comète de Halley obtenus par le spectromètre TKS.

5.2 Spectres de la comète de Halley

La comète de Halley est observée depuis plus de vingt siècles. Elle passe près de la Terre et du Soleil tous les 76 ans et son mouvement est connu avec une grande précision. Son dernier passage à proximité de la Terre a été l'occasion d'une vaste étude au moyen d'observations à la fois depuis le sol et l'espace.

Cinq sondes spatiales sont parties à sa rencontre en mars 1986, juste un mois après son passage au périhélie, alors qu'elle se trouvait à 0,83 UA du Soleil et 1,09 UA de la Terre. Ce sont les sondes japonaises Suisei et Sakigake, les sondes soviétiques Vega 1 et 2 et la sonde européenne Giotto. De nombreuses informations ont été obtenues grâce aux instruments embarqués sur ces sondes. Elles sont en partie décrites dans un numéro spécial de Nature (,)nature86.

5.2.1 Le spectromètre tri-canal de la mission Vega 2

Les sondes Vega ont été conçues pour étudier l'atmosphère de Vénus et la comète de Halley et en obtenir des spectres dans les domaines infrarouge, visible et ultraviolet. Elles sont passées à l'intérieur même de la coma avec une vitesse relative de $76,8 \text{ km s}^{-1}$, à 9000 km et 8030 km du noyau pour Vega 1 et Vega 2 respectivement.

Le spectromètre tri-canal TKS, réalisé en partie à l'Observatoire de Besançon, n'a fonctionné que sur la sonde Vega 2. Il comporte un télescope de type Cassegrain de distance focale $f = 350 \text{ mm}$ et un ensemble spectrométrique à trois canaux : ultraviolet, visible et infrarouge. Nous nous intéressons ici au canal visible (et proche-ultraviolet) qui balaye le domaine de longueur d'onde 275-710 nm.

Le miroir secondaire du télescope est mobile et balaye un champ angulaire de $2^\circ \times 1,5^\circ$ centré sur l'axe optique du télescope. Les acquisitions sont transmises toutes les cinq secondes. Elles sont la somme de huit spectres, le miroir étant dans une position donnée. Le miroir passe donc d'une position à l'autre toutes les cinq secondes.

Suite à un dérèglement de l'alignement optique des instruments, l'angle entre le noyau et la ligne de visée du miroir dans sa position initiale était de $1,2^\circ$. Par ailleurs, le détecteur s'est trouvé défocalisé pendant le voyage, provoquant une dégradation de la résolution spectrale qui est légèrement supérieure à la résolution de 2,7 nm mesurée avant le vol.

Le courant d'obscurité a été retiré des spectres qui sont également corrigés de la différence de sensibilité des pixels du détecteur. Les calibrations en longueur d'onde et en intensité ont été réalisées à l'aide de sources dont les longueurs d'onde et intensités des raies sont parfaitement connues. Afin de retirer la lumière diffusée par les poussières, un spectre solaire (Neckel84) convolué avec une gaussienne de largeur à mi-hauteur égale à la résolution du spectromètre est ajusté puis soustrait au spectre cométaire.

5.2.2 Nouvelles émissions dans les spectres du jour J

On appelle jour J le jour de la rencontre entre la sonde Vega 2 et la comète de Halley qui s'est produite le 9 mars 1986. Ce jour-là, la distance sonde-comète est passée de 520 000 à 8030 km pendant les séances d'observation et le spectromètre TKS a visé entre 38 800 et 421 km du noyau.

Les données obtenues par le spectromètre TKS permettent de suivre l'évolution des spectres lorsque la distance entre la ligne de visée du spectromètre et le noyau diminue. Leur examen révèle des émissions nouvelles qui échappent aux identifications classiques dont l'intensité augmente au fur et à mesure que la distance entre la ligne de visée et le noyau diminue, à partir de 3000 km environ.

La figure ?? met en évidence un système de bandes larges qui apparaît entre 342 et 375 nm, entre les émissions de NH et CN. Moreels94 ont attribué ces bandes au phénanthrène. Une bande intense située à 323 nm apparaît également sur l'aile droite de la bande (0,0) de OH.

FIG. 5.1 – Spectres de la comète de Halley obtenus le 9 mars 1986 par le spectromètre TKS en fonction de la distance entre la ligne de visée du spectromètre et le noyau. Lorsque cette distance diminue, de nouvelles émissions apparaissent à 323 nm et entre 342 et 375 nm. Ces dernières bandes, situées entre les émissions de NH et CN, ont été attribuées au phénanthrène (??)moreels94.

file=/scratchh/celine/323nm1.eps,angle=270,clip=,width=13.3truecm

Des spectres à haute résolution de la comète Austin 1989cl, obtenus au McDonald Observatory en 1990, présentent de nombreuses raies qui ont toutes été identifiées excepté deux raies situées autour de 323 nm (??)valk92. Outre les molécules et ions déjà observés dans les comètes, plusieurs candidats ont été envisagés par les auteurs, mais sans succès. Des raies d'émission situées aux alentours de 323 nm sont aussi présentes dans des spectres d'autres comètes : P/Brorsen-Metcalf 1990o (??)odell91,cochran90, P/Giacobini-Zinner 1984e (??)mcfadden87, P/Swift-Tuttle 1992t (??)kiselev93 et P/Tuttle 1992r (??)divine86. Compte tenu de la faible résolution des spectres TKS, tout porte à croire que ces émissions sont créées par la molécule responsable de la bande observée par TKS quand il vise près du noyau de la comète de Halley.

Le spectre obtenu lorsque la ligne de visée était au plus près du noyau, à 421 km, est représenté dans la figure ???. L'intensité est donnée en kilorayleighs par nm, où 1 rayleigh = 10^6 photons $s^{-1} cm^{-2}$ émis le long de la ligne de visée dans un angle solide de 4π stéradians. Le continuum dû à la diffusion des photons solaires par les particules de poussière a été soustrait. Les bandes attribuées au phénanthrène sont indiquées par des traits. La bande non identifiée à 323 nm se superpose à l'aile droite de la bande (0,0) de OH. Elle est au moins aussi intense que celles du phénanthrène et de NH.

FIG. 5.2 – Spectre de la comète de Halley obtenu le 9 mars 1986 par le spectromètre TKS lorsqu'il visait à 421 km du noyau. La sonde se trouvait alors à 9260 km du noyau.

file=/scratchh/celine/323nm3.ps,angle=270,clip=,width=15truecm
longueur d'onde (nm)

5.2.3 Spectre du jour J-1

Le jour J-1 est la veille de la rencontre entre la sonde Vega 2 et la comète de Halley, le 8 mars 1986. La sonde se trouvait alors à environ 7 millions de kilomètres de la comète lors des observations. À une telle distance, seule la bande la plus intense de OH, la bande (0,0) à $\simeq 310$ nm, apparaît nettement. La bande de CN à $\simeq 386$ nm est très faible.

Cependant, sur l'un de ces spectres, une émission apparaît nettement à 323 nm (Fig.??). Son intensité est environ douze fois moindre que celle de l'émission détectée à la même longueur d'onde le jour J (cf. Fig.??), mais 1,5 fois plus grande que l'émission de OH le jour J-1, donc

supérieure au niveau de bruit. Par ailleurs, du fait de la configuration de l'instrument (réseau fixe), il ne peut s'agir d'un reflet d'un rayon solaire sur une pièce de l'instrument lors d'un mouvement de la sonde, car alors il serait dispersé sur tout le spectre et non localisé en une longueur d'onde. Il reste malgré tout la possibilité d'une erreur dans la transmission des données...

La sonde se trouvait à la distance $d = 6\,863\,000$ km de la comète lors de l'enregistrement de ce spectre. La position du miroir donnait un angle entre la ligne de visée et le noyau $\alpha = 2,9^\circ$. La distance entre la ligne de visée et le noyau était donc :

$$d \times \tan \alpha = 350\,000 \text{ km.}$$

La présence de la bande de OH montre que la ligne de visée traversait effectivement la coma.

FIG. 5.3 – Spectres TKS obtenus pour deux positions consécutives du miroir la veille de la rencontre entre la sonde Vega 2 et la comète de Halley, le 8 mars 1986. La sonde se trouvait alors à 7 millions de km de la comète environ. Sur l'un des spectres, une émission est présente autour de 323 nm.

file=/scratchh/celine/323nm0.ps,angle=270,clip=,width=15truecm
longueur d'onde

Dans l'hypothèse où cette bande correspond bien à l'émission d'un composé, il convient de comprendre pourquoi elle n'apparaît avec une telle intensité que sur un seul spectre. Nous pouvons calculer quelle était la surface couverte par le spectromètre au niveau de la comète. Les dimensions de la fente du spectromètre sont $a = 25 \mu\text{m}$ et $b = 2,5 \text{ mm}$. La distance focale du télescope est $f = 350 \text{ mm}$. Au niveau de la comète, la surface observée est $a' \times b'$ avec :

$$\begin{aligned} a' &= \frac{a}{f} \times d = 500 \text{ km} \\ b' &= \frac{b}{f} \times d = 50\,000 \text{ km} \end{aligned}$$

soit une surface $a' \times b'$ de plusieurs millions de km^2 qui est beaucoup plus grande que celle d'une éventuelle source responsable de l'émission. Le fait de ne pas voir celle-ci dans les spectres pris lors de l'acquisition précédente (5 secondes plus tôt) et de la suivante (5 secondes plus tard) est donc compréhensible car le spectromètre sondait alors les régions de la coma adjacentes de ce champ $a' \times b'$.

On peut expliquer cette émission par une libération locale des molécules qui en sont responsables tandis que l'émission détectée le jour J, dont l'intensité diminue lorsque la distance au noyau augmente, provient de molécules issues du noyau qui sont peu à peu photodissociées lorsqu'elles s'en éloignent. La libération locale de molécules peut se faire par des grains.

De tels phénomènes ont déjà été observés, notamment dans la comète de Halley. Des observations du 18 mars 1986 par le satellite IUE montrent sur un seul des spectres la présence du doublet CO_2^+ à $\simeq 289 \text{ nm}$ qui témoigne d'une production locale de cette molécule à 150 000 km du noyau (? ,)feldman86.

Il n'est par ailleurs pas rare de détecter des sources étendues de molécules telles que CN ou C₂ qui sont libérées par des grains de poussière à plusieurs milliers de kilomètres du noyau. On peut citer la mise en évidence de sources étendues de molécules de C₂ dans les comètes de la comète de Halley (,)rousselot94 et de la comète Hyakutake (,)laffont98pss, exposée dans la partie ??.

Enfin, il semblerait que les molécules de phénanthrène observées dans la comète de Halley ne proviennent pas du noyau mais soient transportées puis libérées à plusieurs centaines de kilomètres du noyau, probablement par des grains de poussière. En effet, ?moreels94 ont déduit une durée de vie des molécules de phénanthrène de l'ordre de 30 000 secondes à partir des spectres TKS. Or ?joblin97 ont modélisé l'évolution de PAHs gazeux soumis à l'irradiation solaire et ont obtenu des durées de vie très courtes, de l'ordre de 15 secondes pour le phénanthrène. Une molécule de phénanthrène issue du noyau serait immédiatement photodissociée et ne pourrait être détectée dans les conditions d'observation par le spectromètre TKS. Ceci ne remet pas en cause la détection du phénanthrène ou la possibilité de détection de PAHs dans un environnement cométaire, mais suggère que ces molécules, si elles ont observées, doivent être produites par une source étendue.

Une détection isolée le jour J-1 n'est donc pas impossible, qu'il s'agisse de l'émission de molécules ou ions observés couramment dans les comètes ou de molécules plus complexes telles que les PAHs.

5.3 Identification du naphthalène ?

Comme nous l'avons mentionné, cette émission échappe à toutes les identifications classiques. Elle ne peut notamment pas être attribuée à la molécule CO₂⁺ qui a une bande d'émission à $\simeq 326$ nm. Après la détection du phénanthrène dans les spectres TKS de la comète de Halley et sachant que les PAHs sont un constituant important de la matière interstellaire dont sont formées les comètes, nous avons alors pensé qu'une molécule hydrogénée aromatique polycyclique pouvait être porteur de cette bande.

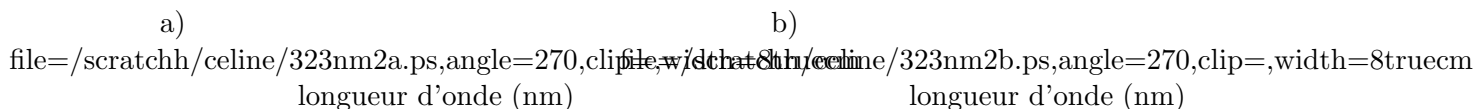
Parmi le grand nombre de PAHs naturels possibles, le naphthalène fut considéré comme étant un bon candidat sur la base de spectres d'émission en phase liquide qui présentent une bande autour de 323 nm (,)berlman65. Cependant, le solvant interagit avec les molécules de naphthalène et peut entraîner un décalage en longueur d'onde des émissions par rapport à un spectre de molécules froides et en phase gazeuse, tel qu'il peut être observé dans les comètes.

Nous avons alors comparé les spectres cométaires avec des spectres obtenus au laboratoire par ?beck81 dans des conditions proches de celles du milieu cométaire. Les molécules sont à l'état gazeux, refroidies dans un régime sans collision.

Les figures ??a et ??b montrent la comparaison entre un spectre de laboratoire mesuré lorsque les molécules sont excitées par un laser à la longueur d'onde $\lambda_{exc} = 289,1$ nm et des spectres TKS de la comète de Halley obtenus le jour J et le jour J-1 respectivement. Cette comparaison semble également prometteuse.

Cependant, l'excitation à la longueur d'onde $\lambda_{exc} = 289,1$ nm n'est pas représentative d'une

FIG. 5.4 – Spectre d'émission de fluorescence du naphthalène en phase vapeur obtenu par Beck et al. (1981). L'excitation de la molécule s'est faite à la longueur d'onde $\lambda_{exc} = 289,1$ nm. Il est comparé à des spectres TKS de la comète de Halley obtenus a) le jour J et b) le jour J-1. L'intensité relative entre les deux spectres cométaires n'est pas respectée.



excitation par le rayonnement solaire. Par ailleurs, nous avons vu dans le chapitre précédent (§??) que les spectres obtenus par Beck81 sont très différents de ceux obtenus par Hermine94 et nous-mêmes. Il convient donc de synthétiser un spectre de fluorescence qui rende mieux compte de la fluorescence des molécules soumises à la radiation solaire dans la coma. Ceci est possible à partir de nos spectres réalisés au laboratoire, compte-tenu des conditions d'excitation que nous avons choisies.

5.4 Construction d'un spectre simulant la fluorescence du naphthalène soumis au rayonnement solaire

Le spectre d'excitation du naphthalène comporte des pics d'intensité à des longueurs d'onde discrètes que nous avons définies comme étant les longueurs d'onde efficaces pour l'excitation des molécules de naphthalène (cf. chapitre ??, §??).

Les molécules dans la coma reçoivent un flux continu en provenance du Soleil mais elles n'absorbent le flux qu'à certaines longueurs d'onde correspondant aux longueurs d'onde efficaces. Le nombre de photons absorbés à une longueur d'onde donnée λ_{exc} dépend bien sûr du flux solaire à cette longueur d'onde. Or nous avons vu que selon la longueur d'onde λ_{exc} des photons absorbés, l'allure du spectre de désexcitation par fluorescence change. L'allure du spectre de fluorescence du naphthalène dans une coma dépend donc du nombre de photons reçus à chaque λ_{exc} , soit du flux solaire.

Les paramètres importants pour définir le spectre cométaire sont donc :

- le flux solaire F_{Sol} qui représente la quantité relative de photons reçus par la molécule en fonction de la longueur d'onde,
- la section efficace de fluorescence $\sigma_{fl} = \sigma_{abs} \times Q_{fl}$, donnée par le spectre d'excitation, qui représente la quantité relative de photons absorbés puis émis par la molécule en fonction de la longueur d'onde.

Afin de déterminer l'influence relative des longueurs d'onde excitatrices sur les molécules de naphthalène soumises au rayonnement solaire, nous avons calculé pour chaque longueur d'onde efficace λ_{exc} le facteur k suivant :

$$k(\lambda_{exc}) \propto \sigma_{fl}(\lambda_{exc}) \times F_{Sol}(\lambda_{exc})$$

Le spectre solaire est donné par Mount81. Il tient compte de la présence de raies de Fraunhofer. Nous avons déduit les valeurs relatives de la section efficace de fluorescence à partir du spectre d'excitation mesuré par Beck80 (cf. Fig.??). Les facteurs k sont donnés dans la table ??.

TAB. 5.1 – Facteur de pondération $k(\lambda_{exc}) \propto \sigma_{fl}(\lambda_{exc}) \times F_{Sol}(\lambda_{exc})$ utilisé lors du calcul du spectre synthétique du naphthalène soumis à l’irradiation solaire. σ_{fl} est la section efficace de fluorescence (Beck80) et F_{Sol} le flux solaire (Mount81). L’énergie en excès est mesurée au-dessus du niveau électronique S_1 à $32\,020\text{ cm}^{-1}$.

| λ_{exc} (nm) | excès d’énergie (cm^{-1}) | σ_{fl} unités arbitraires | F_{Sol} ($10^{12}\text{ ph cm}^{-2}\text{ s}^{-1}\text{ \AA}^{-1}$) | k |
|-------------------------|---|-------------------------------------|--|------|
| 308,2 | 435 | 0,28 | 7,64 | 2,1 |
| 299 | 1422 | 0,18 | 6,42 | 1,2 |
| 292,9 | 2122 | 0,11 | 6,83 | 0,7 |
| 285 | 3068 | 0,06 | 2,82 | 0,2 |
| 282,1 | 3417 | 0,19 | 4,01 | 0,8 |
| 279,2 | 3797 | 2,8 | 1,33 | 3,7 |
| 278,4 | 3950 | 5,6 | 2,49 | 13,9 |
| 274,7 | 4383 | 4,7 | 1,82 | 8,5 |
| 270,9 | 4890 | 3,0 | 3,57 | 10,7 |
| 268 | 5293 | 8,0 | 3,24 | 25,9 |
| 263,5 | 5930 | 5,0 | 2,51 | 12,5 |
| 258,8 | 6620 | 5,0 | 1,61 | 8,0 |

Ils sont relativement faibles pour des longueurs d’onde d’excitation $\lambda_{exc} > 280\text{ nm}$. Les photons absorbés ont une énergie inférieure à 3797 cm^{-1} au-dessus de l’origine $S_1 \leftarrow S_0$, il s’agit de l’excitation sur des niveaux vibroniques de S_1 . Même si le nombre de photons reçus est grand, les petites valeurs de la section efficace de fluorescence font que l’excitation sur les niveaux vibroniques de S_1 est faible.

Les facteurs k sont plus importants dès lors que l’excitation a lieu sur les niveaux vibroniques de S_2 , lorsque l’excès d’énergie des photons absorbés est supérieur ou égal à 3797 cm^{-1} ($\lambda_{exc} < 280\text{ nm}$). Le nombre de photons reçu est maintenant plus faible mais la section efficace de fluorescence est environ 10 à 100 fois plus grande.

Ainsi, dans la coma, l’excitation sur les niveaux vibroniques de S_2 domine. L’allure du spectre de fluorescence va dépendre de celle des spectres obtenus lorsque les molécules sont excitées avec des longueurs d’onde inférieures à 280 nm . Or, nous avons vu au chapitre ?? (§??) que ces spectres avaient tous la même allure générale, celle d’une bande large centrée sur 350 nm comportant quelques structures fines qui disparaissent peu à peu lorsque l’énergie excitatrice augmente.

Nous avons synthétisé un spectre de fluorescence du naphthalène qui simule le spectre d’émission de molécules de naphthalène soumises à l’irradiation solaire en faisant une combinaison linéaire des spectres de fluorescence que nous avons obtenus avec les longueurs d’onde excitatrices $\lambda_{exc} = 299, 292,9, 278,4, 274,7$ et 268 nm , pondérés par le facteur $k(\lambda_{exc})$. Il est présenté dans la figure ??.

FIG. 5.5 – Spectre synthétique de fluorescence du naphthalène soumis à l’irradiation solaire. L’énergie en excès est relative à l’origine $S_1 \leftarrow S_0$ à $32\,020\text{ cm}^{-1}$.

énergie en excès (cm^{-1})
 file=/scratchh/celine/nph8.ps,angle=270,clip=,width=13.5truecm
 longueur d’onde (nm)

Ce spectre synthétique a effectivement l’allure d’une bande large centrée sur 350 nm environ avec peu de structures fines. Il est donc très différent de ceux obtenus par Beck81. Étant donné qu’il simule raisonnablement le spectre de molécules soumises au rayonnement solaire, c’est ce spectre que nous allons comparer aux spectres TKS de la comète de Halley.

5.5 Comparaison entre le spectre synthétique et les spectres TKS de la comète de Halley

La figure ?? représente le spectre de la comète de Halley obtenu le jour J lorsque la sonde se trouvait à 9260 km du noyau. La ligne de visée était décalée de 421 km par rapport au noyau. Le spectre synthétique qui simule l’émission de fluorescence de molécules de naphthalène soumises à la radiation solaire est superposé au spectre cométaire, ainsi que le spectre du phénanthrène obtenu au laboratoire de photophysique moléculaire d’Orsay par Hermine94.

FIG. 5.6 – Comparaison entre le spectre de la comète de Halley obtenu le 9 mars 1986 par le spectromètre TKS lorsqu’il visait à 421 km du noyau et le spectre synthétique d’émission de fluorescence du naphthalène soumis au rayonnement solaire. Le spectre du phénanthrène (Hermine94) est également tracé. Ses bandes correspondent à des bandes dans le spectre cométaire.

file=/scratchh/celine/323nm4.ps,angle=270,clip=,width=15truecm
 longueur d’onde (nm)

Les bandes d’émission du phénanthrène correspondent à des bandes du spectre cométaire. Hermine94 en ont déduit que le phénanthrène était présent dans la comète de Halley. La situation pour le naphthalène est plus délicate. La bande très large du spectre synthétique se trouve au niveau des bandes plus étroites qui ont été attribuées au phénanthrène.

Enfin, contrairement à ce que pouvaient laisser penser les spectres de laboratoire obtenus par Beck81, l’émission centrée à 323 nm, présente dans des spectres de la comète de Halley le jour de la rencontre et dans l’un des spectres la veille, ne peut pas être expliquée par l’émission du naphthalène.

5.6 Conclusion

La comparaison des spectres TKS de la comète de Halley avec un spectre synthétique construit à partir de spectres obtenus au laboratoire dans des conditions proches du milieu cométaire amène différentes conclusions :

- l'émission intense située à 323 nm détectée près du noyau de la comète ne peut pas être attribuée au naphthalène et demeure encore non identifiée. L'observation de cette émission sur un spectre la veille de la rencontre entre la sonde et la comète suggère la présence d'une source étendue à 350 000 km du noyau,
- l'allure du spectre de fluorescence du naphthalène, bande large située au niveau des bandes du phénanthrène, rend délicate la détection de cette molécule, si elle se trouve dans la comète de Halley. Il se peut que l'émission de molécules de naphthalène se superpose à celle du phénanthrène, mais son intensité serait alors faible, suggérant que les molécules de naphthalène sont bien moins abondantes que celles de phénanthrène.

Chapitre 6

Conclusion

L'expérience menée au laboratoire a permis d'étudier des molécules de naphthalène en phase gazeuse, refroidies à de très basses températures et peu soumises aux collisions, qui simulent bien les molécules dans un milieu cométaire. La combinaison de spectres obtenus avec une excitation optique des molécules par des lasers monochromatiques de différentes longueurs d'onde permet en outre de simuler l'excitation des molécules soumises au rayonnement solaire dans une coma.

Le spectre du naphthalène ainsi obtenu se présente sous la forme d'une bande large s'étendant sur 80 nm environ et centrée sur 350 nm, dans le domaine proche-ultraviolet. Des spectres de la comète de Halley ont été obtenus dans ce domaine spectral par le spectromètre tri-canal TKS lors de la rencontre de la comète avec la sonde spatiale Vega 2 en mars 1986. La caractéristique essentielle de ces spectres est leur grande résolution spatiale qui rend possible la détection de molécules se trouvant près du noyau, telles que les molécules mères.

Ces spectres sont effectivement riches en émissions qui ne peuvent être expliquées par les molécules habituellement détectées dans les comètes. Il s'agit notamment d'un système de bandes situées entre 342 et 375 nm qui a été attribué à la fluorescence d'un composé hydrogéné aromatique polycyclique, le phénanthrène, et d'une bande à 323 nm. Celle-ci, contrairement à ce que le laissait envisager des spectres de PAHs en phase liquide, n'est pas due à l'émission de fluorescence de molécules gazeuses de naphthalène soumises à la radiation solaire qui se produit vers 350 nm.

Cette émission est particulière car elle a aussi été détectée sur l'un des spectres enregistrés la veille de la rencontre, localisée à 350 000 km du noyau. Sa présence, isolée à cette distance du noyau, peut s'expliquer par l'existence d'une source étendue, formée de grains en provenance du noyau et renfermant des glaces, et qui libéreraient les molécules gazeuses à cet endroit de la coma. Il serait évidemment très intéressant de trouver quelle molécule est responsable de cette émission, d'autant plus qu'elle semble correspondre à des émissions non identifiées détectées dans d'autres comètes.

Dans cette recherche, il faut se souvenir que les molécules hydrogénées polycycliques aromatiques semblent constituer une "grande famille" dans le milieu interstellaire. Or de nombreux

PAHs ou PAHs dont l'un des atomes H est absent ou substitué par un radical du type méthyl CH_3 ou hydroxyle OH n'ont pas été étudiés en phase gazeuse. On peut citer par exemple le méthyl-naphthalène et le fluorène qui émettent aux alentours de 323 nm en phase liquide (Berlman65). Ils peuvent être des candidats envisageables bien que la durée de vie des PAHs soit très courte (cf §??) puisque l'existence de sources étendues loin du noyau ne semble pas être rare dans les comètes, comme nous le verrons dans la partie ??.

Quatrième partie

La molécule de soufre S₂

Sommaire

| | | |
|----------|---|------------|
| 1 | Introduction | 67 |
| 2 | Calcul du spectre de fluorescence du systme $B - X$ de S_2 | 71 |
| 3 | Spectres IUE des comtes IRAS-Araki-Alcock et Hyakutake | 83 |
| 4 | Spectres TKS de la comte de Halley | 101 |
| 5 | Conclusion | 105 |

Chapitre 7

Introduction

Le soufre est un élément relativement abondant dans les comètes. De nombreux composés du soufre, tels que CS, SH, CS₂, H₂S, H₃S⁺, ainsi que l'atome S, ont été observés dans différentes comètes. La molécule OCS a été découverte dans la comète Hyakutake (,)woodney96 et les spectres de la comète Hale-Bopp ont révélé la présence de SO, SO₂ (,)lis97,bockelee97 et H₂CS (,)woodney97.

Cependant, la molécule S₂ a été détectée de manière non ambiguë dans seulement deux comètes : la comète IRAS-Araki-Alcock en 1983 (,)ahearn83 avec une abondance de 0,07 % par rapport à l'eau et la comète Hyakutake en 1996 avec une abondance relative de 0,01 % environ (,)weaver96,laffont98grl. ?krishna87 ont proposé la présence de S₂ dans des spectres IUE de plusieurs comètes (Cernis, Bowell, Encke, Halley, etc) mais leurs résultats ont été contestés (,)feldman91.

S₂ a aussi été observé momentanément dans la stratosphère de Jupiter sur les sites de l'impact avec la comète Shoemaker-Levy 9 en 1994 (,)noll95,yelle96.

La molécule S₂ a une courte durée de vie, de l'ordre de 250 secondes à la distance de 1 UA du Soleil. Sa détection nécessite une grande résolution spatiale et est facilitée pour des comètes qui passent près de la Terre (les distances géocentriques des comètes IRAS-Araki-Alcock et Hyakutake étaient $\Delta = 0,032$ UA et 0,1 UA respectivement). Il se peut que S₂ soit présent dans de nombreuses comètes mais difficile à détecter pour des distances géocentriques typiques de 0,3-1,5 UA, ou que l'abondance relative de S₂ par rapport à l'eau varie beaucoup d'une comète à l'autre comme dans le cas d'autres espèces peu abondantes telles que CO qui dépendent des conditions de formation ou d'irradiation de la comète.

La molécule S₂ étant difficile à détecter, les observations sont peu nombreuses. Son origine est encore inconnue à l'heure actuelle. L'étude du profil des bandes observées dans la comète IRAS-Araki-Alcock en fonction de la distance au noyau a montré que les molécules S₂ étaient confinées dans la région interne de la coma à moins de 200 km du noyau, suggérant que S₂ est une molécule mère qui se sublime directement à partir du noyau.

Différents processus possibles permettant de former S₂ ont été proposés dont :

- l'irradiation de composés du soufre contenus dans les glaces cométaires par les rayons

- cosmiques qui pénètrent plus profondément que les photons ultraviolets (Ahearn, 1983),
- l'éjection de S₂ à partir de grains de poussière contenant H₂S ou FeS sous l'action de protons de haute énergie du vent solaire (Vanysek, 1993),
- l'association d'atomes de soufre catalysée par l'éthylène C₂H₄ (Saxena, 1995).

Outre la compréhension de la formation des molécules S₂, l'étude et l'inventaire des composés du soufre dans les comètes peut permettre de mieux comprendre les origines des comètes. Par ailleurs, le soufre étant un élément qui entre dans les réactions prébiotiques, son étude peut aider à élucider les questions concernant les origines de la vie.

La figure ?? représente plusieurs réactions qui ont lieu entre différents composés du soufre dans la coma à 500 km du noyau, S₂ et CS₂ étant supposés être des molécules mères.

FIG. 7.1 – Quelques réactions des composés du soufre qui ont lieu dans une comète à la distance de 500 kilomètres du noyau. S₂ et CS₂ sont supposés être des molécules mères. Les espèces qui entrent dans la réaction sont indiquées à côté des flèches. ν symbolise la photodissociation ou la photoionisation. L'épaisseur des flèches est un indicateur de l'importance des réactions.

file=/scratchh/celine/s20.eps,angle=90,clip=,width=7.4truecm

Ce diagramme a été construit à partir d'une modélisation des processus physiques et chimiques dans la coma en fonction des caractéristiques de la comète : taille, albédo, composition du noyau, distance héliocentrique, etc (Huebner, 1991; Boice, 1996). Plus de 2000 réactions chimiques sont considérées. Le modèle donne également la distribution de la densité et de la vitesse des molécules en fonction de la distance cométocentrique.

Nous avons développé un calcul de spectre d'émission de fluorescence de S₂ en fonction du temps d'exposition des molécules au rayonnement solaire (chapitre ??). Ce spectre est comparé à des observations de comètes obtenues avec une résolution spatiale suffisante pour permettre la détection des molécules S₂ si elles sont présentes dans la coma. Il s'agit des spectres ultraviolets des comètes IRAS-Araki-Alcock (chapitre ??, §??) et Hyakutake (chapitre ??, §??) et des spectres dans les domaines proche-ultraviolet et visible de la comète de Halley obtenus par le spectromètre TKS de la sonde spatiale Vega 2 (chapitre ??).

Chapitre 8

Calcul du spectre de fluorescence du système $B - X$ de S_2

8.1 Introduction

Les spectres électroniques de la molécule de soufre S_2 ont été étudiés depuis le début du siècle, que ce soit en absorption ou en émission, dans les domaines ultraviolet, visible ou infrarouge. En particulier, le spectre correspondant aux transitions entre l'état électronique fondamental $X^3\Sigma_g^-$ et l'état excité $B^3\Sigma_u^-$ a été analysé en détail. Cependant, du point de vue théorique, aucun modèle complet de la fluorescence de S_2 n'a été élaboré à ce jour.

8.2 Modèle antérieur de fluorescence “multi-cycle”

Un modèle précédent fait par ?kim90 utilise une approche de fluorescence “multi-cycle” qui suppose qu'à un moment donné les niveaux d'énergie sont à l'équilibre. Partant d'une population initiale n_X^0 dans l'état fondamental X , ils calculent la population n_B^1 des niveaux de l'état B en considérant qu'ils sont à l'équilibre, c'est-à-dire qu'il y a autant d'émission ($\text{émi}_{B \rightarrow X}$) depuis un niveau donné que d'absorption ($\text{abs}_{B \leftarrow X}$) en direction de ce niveau :

$$\sum_B n_B^1 \times \text{émi}_{B \rightarrow X} = \sum_B n_X^0 \times \text{abs}_{B \leftarrow X}$$

d'où la population n_B^1 de l'état B pour le premier cycle :

$$n_B^1 = \frac{\sum_B n_X^0 \times \text{abs}_{B \leftarrow X}}{\sum_B \text{émi}_{B \rightarrow X}}$$

Les auteurs calculent la nouvelle population n_X^1 des niveaux de l'état fondamental X :

$$n_X^1 = n_X^0 - \sum_B n_B^1 + \frac{\sum_B n_B^1 \times \text{émi}_{B \rightarrow X}}{\sum_B \text{abs}_{B \leftarrow X}}$$

le dernier terme représentant le nombre de transitions de tous les niveaux de l'état B au niveau de l'état X considéré en un cycle. Ils considèrent alors à nouveau l'équilibre pour les niveaux de l'état B pour le deuxième cycle :

$$n_B^2 = \frac{\sum_B n_X^1 \times \text{abs}_{B \leftarrow X}}{\sum_B \text{émi}_{B \rightarrow X}}$$

Ainsi, pour chaque cycle, ils calculent la population d'équilibre n_B^J des niveaux de l'état excité B à partir de la population n_X^{J-1} des niveaux de l'état fondamental X obtenue au cycle précédent.

Chaque population n_B^J du J^{e} cycle donne un spectre qui évolue vers le spectre de l'équilibre de fluorescence. Ils obtiennent celui-ci après cinq itérations. L'hypothèse d'équilibre des niveaux à chaque cycle n'étant pas physiquement réelle, il est difficile de faire correspondre un temps t d'exposition des molécules au rayonnement d'excitation au spectre de chaque cycle. Cependant, ils estiment à l'aide de calculs de taux d'excitation que la durée de chaque cycle est de 100 secondes environ et que l'équilibre est atteint au bout de 500 secondes.

Le modèle présenté ici est différent de l'approche de fluorescence "multi-cycle". Il ne fait pas l'hypothèse d'équilibre de la population à un instant donné. Il permet de calculer le spectre d'émission de fluorescence de S₂ pour n'importe quel temps t , où t est le temps d'exposition de la molécule à l'irradiation solaire après libération par le noyau cométaire, depuis des temps très petits (de l'ordre de la microseconde) jusqu'au moment où l'équilibre de fluorescence est atteint.

8.3 Présentation du modèle et de la méthode de calcul

8.3.1 La molécule modèle

Nous nous intéressons aux transitions entre l'état électronique fondamental $X^3\Sigma_g^-$ et l'état électronique excité $B^3\Sigma_u^-$. Elles sont observables dans les domaines proche-ultraviolet et visible. Lorsque le photon absorbé a une énergie supérieure à $D_e = 35\,492\text{ cm}^{-1}$, la molécule est excitée sur un niveau vibrationnel $v' \geq 10$ de l'état $B^3\Sigma_u^-$. Elle passe alors de cet état stable à l'état instable voisin $^1\Pi_u$ et se prédissocie. La prédissociation du niveau $v' = 10$ est efficace à 92 % (?,)ricks69. Ainsi, la transition de plus grande énergie observée correspond à la transition $v' = 9 \rightarrow v'' = 0$ qui donne la première raie d'émission dans le spectre à la longueur d'onde 282,9 nm.

La figure ?? représente le diagramme d'énergie de la molécule modèle. Elle contient 37 niveaux vibrationnels, 27 dans l'état fondamental X ($0 \leq v'' \leq 26$) et 10 dans l'état électronique excité B ($0 \leq v' \leq 9$). Les constantes de temps des transitions sont de l'ordre de 100 secondes pour l'absorption et 1 microseconde pour l'émission, soit une différence de huit ordres de magnitude.

La distribution initiale est obtenue avec une température de Boltzmann de 200 K environ, qui est la température typique d'un gaz en expansion à la surface du noyau cométaire. À cette température, la plupart des molécules se trouvent dans l'état fondamental électronique et vibrationnel $v'' = 0$ (cf. §??).

FIG. 8.1 – Diagramme d'énergie du système B-X de S₂. L'énergie de prédissociation D_e vaut 35 492 cm⁻¹ et est représentée par la ligne en pointillés. Les ordres de grandeurs pour les constantes de temps des transitions en absorption (τ = 100 s) et en émission (τ = 1μs) sont très différents.

file=/scratchh/celine/s21.ps,angle=270,clip=,width=11.5truecm

8.3.2 Longueurs d'onde des transitions

L'énergie de vibration, due aux mouvements des noyaux des deux atomes le long de l'axe internucléaire peut être décrite comme celle d'un oscillateur anharmonique. L'énergie E_v (en cm⁻¹) du niveau vibrationnel v est :

$$E_v = T_e + \omega_e(v + \frac{1}{2}) - \omega_e x_e(v + \frac{1}{2})^2 + \omega_e y_e(v + \frac{1}{2})^3 + \dots \quad (8.1)$$

où T_e est l'énergie du niveau vibrationnel v = 0 de l'état électronique considéré. On ne tient compte que des trois premiers termes de l'équation, les autres étant négligeables. Les constantes T_e, ω_e et ω_ex_e sont données par Herzberg89 et reportées dans la table ??.

L'énergie E_{v'v''} de la transition entre le niveau vibrationnel v'' de l'état électronique fondamental X et le niveau vibrationnel v' de l'état électronique B est :

$$E_{v'v''} = E_{v'} - E_{v''}$$

ce qui correspond à la longueur d'onde λ_{v'v''} (en nm) :

$$\lambda_{v'v''} = \frac{10^7}{E_{v'v''}}$$

Les longueurs d'onde s'étendent entre 280 et 680 nm environ, dans les domaines proche-ultraviolet et visible.

TAB. 8.1 – Constantes de l'oscillateur anharmonique pour l'énergie de vibration de la molécule S₂ (Herzberg89).

| état électronique | T _e (cm ⁻¹) | ω _e | ω _e x _e | transitions observées |
|--|------------------------------------|----------------|-------------------------------|---------------------------|
| D ³ Π _u | 58733 | 793,9 | 4,00 | D ↔ X, ultraviolet |
| C ³ Π _u | 55598 | 830,2 | 3,75 | C ↔ X, ultraviolet |
| B ³ Σ _u ⁻ | 31835 | 434,0 | 2,75 | B ↔ X, proche-UV, visible |
| X ³ Σ _g ⁻ | 0 | 725,68 | 2,852 | |

8.3.3 Probabilités de transition

Probabilités d'émission

La probabilité d'émission $P_{v'v''}$ entre le niveau vibrationnel v' de l'état électronique B et le niveau v'' de l'état fondamental X est égale au coefficient d'Einstein d'émission spontanée $A_{v'v''}$:

$$\begin{aligned} P_{v'v''} &= A_{v'v''} \\ &= \frac{64\pi^4 E_{v'v''}^3}{3h} R_e^2 q_{v'v''} \frac{2 - \delta_{0,\Lambda'+\Lambda''}}{2 - \delta_{0,\Lambda'}} \end{aligned} \quad (8.2)$$

où h est la constante de Planck ($h = 6,6252 \times 10^{-27}$ erg s), R_e^2 est le moment de transition électronique, constant sur tout le système $B - X$, $q_{v'v''}$ est la probabilité de transition vibrationnelle (ou facteur de Franck-Condon), calculée par Anderson79 pour le système $B - X$ de S₂, Λ' et Λ'' sont les nombres quantiques associés au moment cinétique des états électroniques B et X respectivement et δ est le symbole de Kronecker.

On calcule le moment de transition électronique R_e^2 à partir de la durée de vie $\tau_{v'}$ du niveau vibrationnel v' :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_{v'}} &= \sum_{v''} A_{v'v''} \\ &= \frac{64\pi^4 R_e^2}{3h} \sum_{v''} E_{v'v''}^3 q_{v'v''} \end{aligned}$$

Quick81 ont mesuré une durée de vie $\tau_{v'} = 36$ ns pour le niveau $v' = 4$ de l'état $B^3\Sigma_u^-$ des molécules de S₂ en phase vapeur. On déduit alors la valeur $R_e^2 \simeq 5 \times 10^{-36}$ erg cm³.

Dans le cas du système $B^3\Sigma_u^- - X^3\Sigma_g^-$ de S₂, il s'agit de transitions vibrationnelles entre deux états électroniques Σ . On a donc $\Lambda' = 0$ et $\Lambda'' = 0$. L'équation ?? devient :

$$P_{v'v''} = \frac{64\pi^4 E_{v'v''}^3}{3h} R_e^2 q_{v'v''}$$

Probabilités d'absorption

La probabilité d'absorption $P_{v''v'}$ entre le niveau vibrationnel v'' de l'état fondamental X et le niveau v' de l'état électronique B est le produit du coefficient d'Einstein d'absorption $B_{v''v'}$ par la densité de radiation solaire $\rho_{v''v'}$ (en erg s cm⁻³) à la longueur d'onde $\lambda_{v'v''}$ de la transition :

$$\begin{aligned} P_{v''v'} &= B_{v''v'} \rho_{v''v'} \\ &= \frac{A_{v'v''}}{8\pi h E_{v'v''}^3} \rho_{v''v'} \end{aligned}$$

La densité de radiation solaire ρ à la longueur d'onde λ est reliée au flux solaire F_{Sol} par la relation suivante :

$$\rho(\lambda) = F_{Sol}(\lambda) \times \frac{\lambda^2}{c^2}$$

?ahearn83report donnent la densité de radiation solaire $\rho_{1\text{UA}}$ pour un objet situé à 1 UA du Soleil. Pour un objet situé à la distance r du Soleil, la densité de radiation solaire est :

$$\rho = \frac{1}{r^2} \times \rho_{1\text{UA}}$$

Le modèle tient compte de l'effet Swings dû à la vitesse héliocentrique de la comète. Considérons un objet qui se déplace à la vitesse v_h par rapport au Soleil. Le rayonnement qu'il reçoit est décalé en longueur d'onde par effet Doppler. Ainsi, le flux reçu à la longueur d'onde λ est celui qui a été émis par le Soleil à la longueur d'onde λ_0 avec :

$$\lambda = \lambda_0 \left(1 + \frac{v_h}{c}\right)$$

Le spectre solaire $F_{\text{Sol}}(\lambda)$ et donc la densité de radiation solaire $\rho(\lambda)$ reçus au niveau de l'objet sont décalés vers le bleu par rapport au spectre émis par le Soleil pour un objet qui se rapproche du Soleil et vers le rouge pour un objet qui s'éloigne du Soleil. Prenons par exemple le cas de la comète Hyakutake à la fin du mois de mars 1997 qui se rapprochait du Soleil avec une vitesse de 31 km s^{-1} , soit $v_h = -31 \text{ km s}^{-1}$. Le rayonnement émis par le Soleil à la longueur d'onde $\lambda_0 = 300 \text{ nm}$ sera reçu par la comète à la longueur d'onde $\lambda = 299,9997 \text{ nm}$, soit décalé de $3 \times 10^{-4} \text{ nm}$ du côté bleu du spectre.

Ainsi, pour une transition $v'' \rightarrow v'$ donnée, la probabilité d'absorption $P_{v''}$ dépend de la vitesse héliocentrique v_h de l'objet considéré. L'effet Swings peut devenir important si l'on considère les structures fines du spectre, c'est-à-dire si l'on tient compte des niveaux de rotation dans le calcul.

Les transitions du système $B \leftrightarrow X$ se produisent dans les domaines proche-ultraviolet et visible. Celles du système $C \leftrightarrow X$ se font dans le domaine ultraviolet (cf. Tab.??). La densité de radiation ρ étant au moins 100 fois plus faible dans le second domaine, on néglige l'influence des absorptions qui peuvent avoir lieu de l'état fondamental X à l'état excité C dans le calcul des transitions entre les états X et B .

8.3.4 Population initiale

On suppose qu'à $t = 0$, au moment où les molécules de S_2 sont libérées et soumises à la radiation solaire, la population des niveaux vibrationnels suit la distribution de Boltzmann. La température cinétique initiale est celle de la surface d'un noyau cométaire à 1 UA du Soleil : $T \simeq 200 \text{ K}$. C'est aussi la température approximative de sublimation de l'eau à cette distance héliocentrique. Dans le cas de la comète Hyakutake, des modèles physico-chimiques donnent $T = 208 \text{ K}$ (? ,])boice96.

La statistique de Boltzmann montre qu'à une température aussi faible les niveaux vibrationnels v' de l'état électronique excité B ne sont pas peuplés : $n_{v'} = 0$. La population relative $n_{v''}$ d'un niveau v'' de l'état fondamental X est donnée par l'équation suivante :

$$n_{v''} = n_0 e^{-E_{v''0} \frac{hc}{kT}}$$

où k est la constante de Boltzmann ($k = 1,38 \times 10^{-16}$ erg K⁻¹), $E_{v''0}$ est l'énergie du niveau v'' par rapport au niveau vibrationnel fondamental ($v'' = 0$) et n_0 est la population du niveau $v'' = 0$.

On a d'après l'équation ?? (§??) :

$$E_{v''0} = \omega_e v'' - [\omega_e x_e (v'' + \frac{1}{2})^2 - \frac{1}{4}]$$

et d'après l'équation de conservation :

$$\begin{aligned} \sum_{v''} n_{v''} &= 1 \\ \sum_{v''} n_0 e^{-E_{v''0} \frac{hc}{kT}} &= 1 \end{aligned}$$

soit :

$$n_0 = \frac{1}{\sum_{v''} e^{-E_{v''0} \frac{hc}{kT}}}$$

À la température $T \simeq 200$ K, plus de 99 % des molécules se trouvent initialement sur le niveau $v'' = 0$.

8.3.5 Population des niveaux vibrationnels

L'intensité de la raie d'émission pour la transition $v' \rightarrow v''$ à la longueur d'onde $\lambda_{v',v''}$ dépend de la population $n_{v'}$ du niveau vibrationnel v' de l'état électronique excité B (cf. équation ??, §??). Pour calculer le spectre de fluorescence en fonction du temps, il faut donc calculer la population des niveaux vibrationnels.

Soit n_i la population du niveau vibrationnel i dans l'état fondamental X ou dans l'état excité B . L'évolution temporelle de n_i est donnée par l'équation :

$$\begin{aligned} \dot{n}_i &= -n_i \sum_j P_{ij} + \sum_j n_j P_{ji} \\ &= -\sum_j \sum_k n_j P_{ik} \delta_{ij} + \sum_j n_j P_{ji} \\ &= \sum_j n_j [P_{ji} - \delta_{ij} \sum_k P_{ik}] \\ &= \sum_j n_j T_{ij} \end{aligned} \tag{8.3}$$

avec :

$$T_{ij} = P_{ji} - \delta_{ij} \sum_k P_{ik}. \tag{8.4}$$

P_{ij} est la probabilité de transition entre les niveaux i et j . Elle est soit A_{ij} en émission soit $B_{ij}\rho_{ij}$ en absorption.

Sous la forme matricielle, l'équation ?? s'écrit :

$$\dot{n} = Tn$$

ou encore :

$$\begin{pmatrix} \dot{n}_{v''} \\ \dot{n}_{v'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{v''v''} & T_{v''v'} \\ T_{v'v''} & T_{v'v'} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_{v''} \\ n_{v'} \end{pmatrix}$$

S_2 étant une molécule homonucléaire, son moment dipolaire est nul. Les transitions vibrationnelles pures au sein d'un même état électronique ne sont alors pas permises. On déduit alors de l'équation ?? que les matrices $T_{v''v''}$ et $T_{v'v'}$ sont diagonales. Les éléments de matrice s'écrivent :

$$T_{ii} = -\sum_k B_{ik}\rho_{ik} \quad \text{pour la matrice } T_{v''v''},$$

$$T_{ij} = B_{ij}\rho_{ij} \quad \text{pour la matrice } T_{v''v'},$$

$$T_{ij} = A_{ij} \quad \text{pour la matrice } T_{v'v''},$$

$$T_{ii} = -\sum_k A_{ik} \quad \text{pour la matrice } T_{v'v'}.$$

Résoudre les 37 équations différentielles de l'équation ?? revient donc à inverser la matrice T 37×37 . On possède par ailleurs une autre équation, celle de conservation de la population des niveaux :

$$\sum_i n_i = 1. \quad (8.5)$$

Ainsi, l'une des équations est redondante. En pratique, on résout toutes les équations et on utilise l'équation de conservation pour vérifier la précision de la solution.

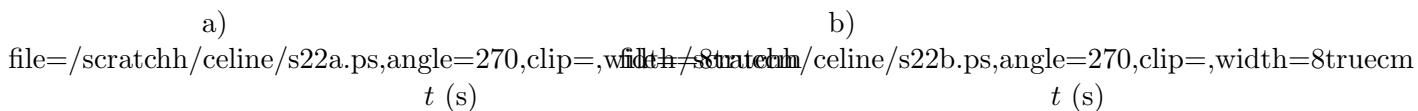
Le système d'équations est résolu en utilisant la méthode de Gear (,)gear71 adaptée aux équations différentielles dont les constantes de temps varient de plusieurs ordres de magnitude (environ huit dans notre cas, cf. §??). La résolution se fait en intégrant par pas de temps variables et la solution est vérifiée à chaque pas d'intégration avec l'équation de conservation ?. La méthode comporte des techniques de contrôle d'erreur qui permettent de préserver la précision pendant l'intégration. Les variations restent de l'ordre de la précision de la machine.

8.4 Évolution de la population des niveaux vibrationnels

La figure ??a montre l'évolution de la population des niveaux vibrationnels v'' de l'état fondamental X de S_2 lorsque la molécule est soumise à l'irradiation solaire à 1 UA du Soleil.

À $t = 0$ s, 99 % des molécules sont dans l'état fondamental $v'' = 0$ (cf. §??), mais très rapidement, les autres niveaux vibrationnels v'' sont peuplés, tandis que la population du niveau

FIG. 8.2 – Évolution en fonction du temps t d'exposition de S₂ à l'irradiation solaire à 1 UA du Soleil a) de la population $n_{v''}$ des niveaux vibrationnels v'' de l'état électronique fondamental X , b) de la population $n_{v'}$ des niveaux vibrationnels v' de l'état électronique excité B .



$v'' = 0$ décroît. La population des niveaux $v'' = 2$ à 26 croît linéairement les dix premières secondes et après 600 secondes, la distribution des niveaux est celle de l'équilibre de fluorescence.

La figure ??b montre l'évolution de la population des niveaux vibrationnels v' de l'état électronique B . Le modèle montre que la population des niveaux $v' = 7$ à 9 augmente très rapidement, dès que la coma reçoit la lumière solaire, et atteint une valeur proche de celle de l'équilibre de fluorescence en seulement 1 seconde. Celle des autres niveaux ont atteint 90 % des valeurs de l'équilibre de fluorescence après 200 secondes.

8.5 Spectres d'émission de fluorescence

La population $n_{v'}$ des niveaux vibrationnels de l'état excité B permet de calculer l'efficacité quantique de fluorescence $g_{v'v''}$ (en $\text{ph s}^{-1} \text{ molec}^{-1}$) pour chaque transition $v' \rightarrow v''$:

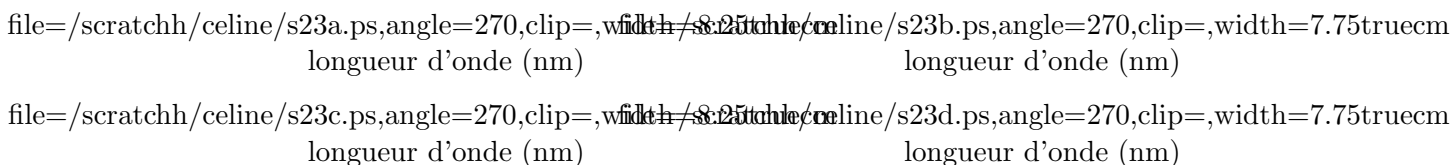
$$g_{v'v''} = n_{v'} \times A_{v'v''}$$

puis l'intensité des raies (en $\text{erg s}^{-1} \text{ molec}^{-1}$) pour les transitions :

$$\begin{aligned} I_{v'v''} &= g_{v'v''} \times hcE_{v'v''} \\ &= n_{v'} \times A_{v'v''} \times hcE_{v'v''} \end{aligned} \quad (8.6)$$

Les facteurs $g_{v'v''}$ obtenus lorsque l'équilibre de fluorescence est atteint sont donnés dans le tableau ?? pour différentes transitions (il s'agit des transitions observées dans le proche-ultraviolet, notamment par le satellite IUE). Ils ont été calculés pour un objet situé à 1 UA du Soleil. Leurs valeurs sont similaires à celles calculées par ?kim90.

FIG. 8.3 – Spectres synthétiques de fluorescence de S₂ en fonction du temps t d'exposition de la molécule au rayonnement solaire à 1 UA du Soleil. À $t = 600$ secondes, la molécule a atteint l'équilibre de fluorescence. L'échelle des intensités est la même pour les quatre spectres.



Les spectres d'émission de fluorescence de S₂ sont présentés sur la figure ?? en fonction du temps t d'exposition de la molécule à l'irradiation solaire. L'évolution du spectre peut être ana-

TAB. 8.2 – Efficacités quantiques de fluorescence $g_{v'v''}$ des transitions vibrationnelles $v' - v''$ du système $B-X$ de S_2 à l'équilibre de fluorescence pour un objet situé à 1 UA du Soleil.

| $v' - v''$ | λ (nm) | $g_{v'v''}$ (10^{-4} ph s $^{-1}$ molec $^{-1}$) | |
|---------------|-----------------------|--|-------------------|
| | | ce travail | Kim et al. (1990) |
| 9-0 | 282,9 | 4,94 | 3,92 |
| 8-0 | 286,0 | 3,88 | 2,54 |
| 9-1, 7-0 | 288,8 ; 289,2 | 3,91 + 3,73 = 7,64 | 6,81 |
| 8-1, 6-0 | 292,0 ; 292,6 | 6,10 + 1,89 = 7,99 | 6,25 |
| 7-1, 5-0 | 295,4 ; 296,1 | 5,96 + 0,97 = 6,93 | 7,25 |
| 8-2, 6-1 | 298,2 ; 298,9 | 0,32 + 5,07 = 5,39 | 6,23 |
| 9-3, 7-2, 5-1 | 301,2 ; 301,8 ; 302,5 | 2,86 + 2,87 + 2,91 = 8,64 | 9,14 |
| 8-3, 6-2 | 304,7 ; 305,4 | 2,46 + 3,33 = 5,79 | 5,82 |

lysée de manière qualitative en se reportant l'évolution de la population des niveaux vibrationnels du système $B - X$ de S_2 (cf. Fig.??).

Les transitions à partir des niveaux $v' = 7$ à 9 correspondent aux premières raies du spectre de fluorescence, dans la région spectrale 280-300 nm. Nous avons vu que leur population augmentait très rapidement jusqu'à une valeur proche de la valeur de l'équilibre de fluorescence en une seconde seulement. Par conséquent, l'intensité de ces raies ne varie pas beaucoup entre $t = 1$ s et l'équilibre de fluorescence.

Quand le temps t d'exposition de la molécule à l'irradiation solaire augmente, les niveaux plus bas sont peuplés et l'intensité des raies de la région 300-400 nm devient plus importante. Les populations des niveaux v' ayant atteint 90 % de leur valeur à l'équilibre après 200 secondes, le spectre varie très peu à partir de ce moment jusqu'à l'équilibre.

Une différence immédiate est notée entre les résultats de ?kim90 et ceux présentés ici. ?kim90 ont estimé que le spectre du "premier cycle" de fluorescence est atteint après 100 secondes environ. Après cinq cycles, le spectre n'évolue plus, il s'agit de l'équilibre de fluorescence qui est atteint après 500 secondes selon leur raisonnement.

Nous trouvons qu'un spectre similaire au spectre du "premier cycle" est atteint après quelques secondes seulement et nous obtenons le spectre de l'équilibre de fluorescence après 600 secondes. Le spectre varie beaucoup entre $t = 0$ et 200 secondes, mais très peu ensuite jusqu'à environ 600 secondes, où un spectre semblable à celui de l'équilibre de fluorescence est atteint. Ainsi, après seulement 200 secondes, le spectre de fluorescence est très proche de celui de l'équilibre.

Dans une coma, les molécules de S_2 observées atteignent rapidement un état proche de l'équilibre sauf si elles sont désexcitées à cause de collisions dans la coma interne. Toutefois, ceci n'est probablement pas le cas dans des comètes qui n'ont pas une densité trop élevée près du noyau.

8.6 Conclusion

Ce modèle n'est pas complet car il ignore les niveaux de rotation et les transitions de rotation-vibration. Cependant, le programme actuel peut être adapté à un calcul plus précis. Un calcul préliminaire montre qu'au-delà du cinquantième niveau rotationnel associé à chaque niveau vibrationnel, les raies de rotation-vibration ont une intensité très faible. Il suffirait donc de considérer $37 \times 50 = 1850$ niveaux pour la molécule modèle. Par ailleurs, nous avons pu tester que la méthode d'inversion de matrice fonctionnait bien et en un temps raisonnable pour des matrices de cette taille. Il est donc possible, avec notre algorithme, d'obtenir un modèle plus complet qui inclut les transitions rovibrationnelles et permet de suivre l'évolution du spectre en fonction du temps. Le développement d'un tel modèle est en cours, il est présenté en annexe ???. L'écart entre deux raies étant de l'ordre de 0,1 nm, on peut résoudre la structure rovibrationnelle avec des observations à haute résolution spectrale.

Dans une prochaine étape, le modèle pourra être amélioré en prenant davantage en compte les caractéristiques physiques du milieu cométaire. En effet, les collisions qui peuvent avoir lieu dans la coma proche du noyau là où la densité est la plus élevée ne sont pas prises en compte. Pour cela, il faudrait ajouter un terme $P_{c,ji}$ de désexcitation par collisions au terme P_{ji} de désexcitation par émission radiative dans l'équation ?? (§??). On peut considérer que la probabilité de transition collisionnelle $P_{c,ji}$ suit une loi du type :

$$P_{c,ji} = \text{constante} \times e^{E_{ij} \frac{hc}{kT}}$$

où E_{ij} est la différence d'énergie entre les niveaux j et i (en cm^{-1}), T est la température du milieu, h et k sont les constantes de Planck et de Boltzmann respectivement. Cependant, les valeurs caractéristiques concernant les collisions pour les molécules de S₂ sont très peu connues. On peut également estimer le taux de transitions dues aux collisions ν_{coll} en considérant la section efficace de collision égale à la section efficace géométrique σ et comparer ν_{coll} au taux de transitions radiatives ν_{rad} . On considère essentiellement les collisions avec les molécules d'eau qui sont les plus abondantes. La densité n_{H_2O} des molécules d'eau à la distance r du noyau est :

$$n_{H_2O} = \frac{Q_{H_2O}}{4\pi r^2 v}$$

où Q_{H_2O} est le taux de production de l'eau par le noyau et v est la vitesse des molécules, de l'ordre du kilomètre par seconde. La fréquence des collisions est :

$$\nu_{coll} = \sqrt{2} n_{H_2O} \sigma v$$

avec $\sigma \simeq 10^{-15} \text{ cm}^2$.

Dans le cas de la comète Hyakutake, $Q_{H_2O} \simeq 10^{29} \text{ molécules s}^{-1}$, le nombre de molécules à $r = 100$ kilomètres du noyau vaut $n_{H_2O} \simeq 8 \times 10^8 \text{ molécules cm}^{-3}$ et la fréquence de collisions $\nu_{coll} \simeq 0,1 \text{ s}^{-1}$. La fréquence de désexcitation radiative est $\nu_{rad} \simeq 10^6 \text{ s}^{-1}$ (cf. §??). Le taux de désexcitation par collisions est donc négligeable par rapport au taux de désexcitation par émission de photons. Cependant cette estimation reste aléatoire car la section efficace de

collision réelle est peut-être beaucoup plus grande que la section efficace géométrique σ .

Le modèle néglige enfin les effets d'épaisseur optique UV qui entraînent l'absorption d'une partie du rayonnement solaire par la coma interne. Nous allons toutefois utiliser le modèle tel qu'il est actuellement pour étudier l'émission de S_2 dans les spectres cométaires.

Chapitre 9

Spectres IUE des comètes IRAS-Araki-Alcock et Hyakutake

9.1 Introduction

La molécule S_2 ayant une courte durée de vie dans le champ de radiation solaire, de l'ordre de 250 secondes à 1 UA du Soleil, elle est concentrée dans la partie la plus interne de la coma, limitée à quelques centaines de kilomètres autour du noyau. Elle ne peut être détectée que lors d'observations avec une grande résolution spatiale, c'est-à-dire pour une comète qui passe près de la Terre. C'est le cas des comètes IRAS-Araki-Alcock et Hyakutake qui se sont approchées à 0,032 UA et 0,1 UA de la Terre respectivement. Elle ont toutes deux été observées avec le satellite IUE (*International ultraviolet explorer*).

Nous étudions le spectre de la comète IRAS-Araki-Alcock qui a permis la détection de S_2 par ?ahearn83. L'analyse du spectre a été reprise plus tard par ?kim90 et ?budzien92. Toutefois, l'étude présentée ici est basée sur un nouveau modèle de fluorescence de S_2 . Elle permet :

- de dériver une nouvelle valeur de l'abondance obtenue avec d'autres valeurs de la durée de vie et de la longueur d'échelle des molécules de S_2 dans la coma en se basant sur les résultats obtenus par le modèle,
- de vérifier notre procédure de réduction des spectres IUE,
- de comparer notre modèle de fluorescence de S_2 avec un spectre de S_2 cométaire.

Nous analysons ensuite les spectres IUE de la comète Hyakutake obtenus au moment de son passage au périhélie et recherchons la présence éventuelle de signatures de S_2 .

Les données que nous étudions concernant les comètes IRAS-Araki-Alcock et Hyakutake ont été obtenues en 1983 avec le spectromètre LWR et en 1996 avec le spectromètre LWP respectivement. Le domaine spectral couvert par ces spectromètres est 190-320 nm. Il permet d'étudier les bandes CS, OH (1,1), (0,0) et (1,0), ainsi que les bandes de S_2 répertoriées dans le tableau ?? du chapitre précédent, si elles existent.

9.2 Réduction des données du satellite IUE

Le logiciel de traitement d'image MIDAS comporte une procédure spéciale pour l'extraction automatique et la calibration en flux de spectres à partir de données obtenues avec IUE. Cependant, elle n'est valable que pour des sources ponctuelles et ne peut être appliquée aux objets diffus tels que les comètes. Les données sont toutefois déjà étalonnées en longueur d'onde.

9.2.1 Spectromètres LWR et LWP de IUE

Les observations des comètes IRAS-Araki-Alcock et Hyakutake ont été faites avec des spectromètres à fente longue. La dimension de la fente est :

- 10" × 15" pour le spectromètre LWR,
- 10" × 22" pour le spectromètre LWP.

La résolution spectrale est de 0,5 nm environ pour les deux spectromètres. Cependant, les comètes étant des objets étendus spatialement, ils peuvent se déplacer dans la fente pendant le temps d'exposition et entraîner un élargissement des raies observées. La résolution pour les sources étendues est estimée à environ 1,1 nm.

FIG. 9.1 – Schéma de l'image spectrale obtenue avec le spectromètre LWP du satellite IUE. Elle possède 80 lignes dans la direction spatiale et 640 colonnes pour la dispersion spectrale.

file=/scratchh/celine/iue0.ps,angle=270,clip=,width=14.2truecm
colonne de l'image

Les données se présentent sous la forme d'images spectrales (Fig.??). Elles comportent 80 pixels dans la direction spatiale et 640 pixels le long de l'axe de dispersion spectrale. Le champ angulaire d'un pixel est 1,525". Dans la direction spatiale, une dizaine de lignes enregistrent le flux provenant de la comète et sont entourées de deux bandes qui reçoivent le flux en provenance du ciel.

9.2.2 Retrait du fond de ciel

Nous construisons un spectre synthétique de l'émission du ciel en calculant la moyenne colonne par colonne (donc longueur d'onde par longueur d'onde) de 14 lignes de l'image spectrale sur lesquelles est enregistré le fond de ciel, situées de chaque côté des lignes contenant l'émission de la comète (cf. Fig.??). Ce spectre est ensuite soustrait à chaque ligne de l'image spectrale.

9.2.3 Calibration en flux

Soit I_{net} l'intensité de l'image spectrale, donnée en unité de digitalisation. L'intensité calibrée en $\text{ph nm}^{-1} \text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$ est alors :

$$I(\lambda) = \frac{I_{net}(\lambda)}{S(\lambda)} \times gain \times \frac{R_{temperature}}{R_{temps} \times t_{eff}}$$

où S est la sensibilité du détecteur en $\text{ph}^{-1} \text{nm cm}^2$, $gain$ est le gain du détecteur, $R_{temperature}$ et R_{temps} sont des facteurs de correction de la sensibilité dépendant de la température et du temps respectivement et t_{eff} est le temps de pose effectif en secondes.

9.3 S₂ dans des spectres IUE de la comète IRAS-Araki-Alcock

Nous étudions le spectre LWR15908 de la comète IRAS-Araki-Alcock qui a permis la première détection de S₂ dans une comète (Ahearn83). Ce spectre a été enregistré pendant 30 minutes le 11 mai 1983 par le spectromètre LWR du satellite IUE. La comète se trouvait alors au périégée, à moins de cinq millions de kilomètres de la Terre ($\Delta = 0,032$ UA). Sa distance héliocentrique était $r \simeq 1$ UA. La fente du spectromètre était centrée sur le noyau de la comète.

9.3.1 Extraction d'un spectre à partir de l'image spectrale LWR15908

Un spectre est extrait à partir de l'image spectrale en sommant les dix lignes situées autour de la ligne la plus brillante de l'ouverture, soit environ 7,5" de part et d'autre du noyau de la comète. La comète étant à la distance $\Delta = 0,032$ UA de la Terre au moment de l'observation, la taille projetée p d'un pixel au niveau de la comète est :

$$p = \alpha \times \Delta = 36 \text{ km}$$

où α est le champ angulaire d'un pixel (1,525") exprimé en radians. Le spectre mesure donc les émissions dans un champ angulaire de 10" \times 15", soit 240 \times 360 km au niveau de la comète.

Le spectre obtenu est présenté figure ???. On observe les émissions habituellement détectées dans les comètes dans le domaine spectral 250-320 nm : CS à $\simeq 257$ nm, OH (1,0) à $\simeq 282,5$ nm, OH (0,0) à $\simeq 309$ nm et OH(1,1) à $\simeq 314$ nm. Ces deux dernières bandes sont saturées. Des bandes de S₂, aussi intenses que celle de CS ou la bande (1,0) de OH, sont détectées entre les bandes (1,0) et (0,0) de OH. L'origine de ces bandes est indiquée par des traits sur la figure.

Afin de soustraire le continuum dû à la diffusion du rayonnement solaire par les poussières dans la coma, nous avons ajusté le spectre solaire SOLSTICE (*Solar/Stellar irradiance comparison experiment*) obtenu par le satellite UARS (*Upper atmosphere research satellite*) (Rottman93). Le spectre est rougi (6%/10nm) et convolué avec la résolution de 1,1 nm du spectromètre LWR avant d'être soustrait.

FIG. 9.2 – Spectre LWR15908 de la comète IRAS-Araki-Alcock obtenu en sommant sur la longueur de la fente et spectre solaire SOLSTICE convolué avec une gaussienne de largeur à mi-hauteur de 1,1 nm, rougi et ajusté au spectre cométaire. Entre les bandes (1,0) et (0,0) de OH, les traits indiquent l'origine des bandes de S₂.

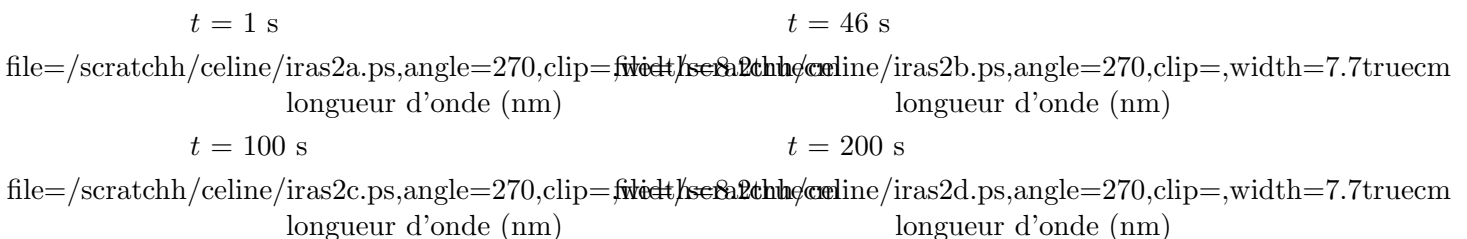
file=/scratchh/celine/iras1.ps,angle=270,clip=,width=15truecm
longueur d'onde (nm)

9.3.2 Comparaison avec le spectre calculé de S₂

D'après notre modèle, les molécules de S₂ soumises au rayonnement solaire à la distance de 1 UA sont très rapidement dans un état proche de celui de l'équilibre de fluorescence, après 200 secondes environ (cf. §??, chapitre ??). Dans la coma, les molécules de gaz s'éloignent du noyau avec une vitesse typique de l'ordre de 1 km s⁻¹. Les molécules de S₂ qui se trouvent à 200 km du noyau doivent donc être dans un état proche de l'équilibre de fluorescence sauf si elles ont subi des désexcitations collisionnelles dans la coma interne. Le spectre que nous avons extrait de l'image spectrale LWR15908 donne la somme des émissions des molécules présentes dans la coma, dans une région de 240 × 360 km centrée sur le noyau.

La figure ?? montre la comparaison entre le spectre cométaire et des spectres calculés (en gras) pour différents temps t d'exposition de la molécule au rayonnement solaire. Les raies théoriques sont convoluées avec une gaussienne de largeur à mi-hauteur de 1,1 nm égale à la résolution du spectromètre LWR. Dans cette région spectrale 280-330 nm, les bandes sont aux mêmes longueurs d'onde quel que soit t , seule l'intensité relative des bandes diffère. L'accord entre les bandes observées et calculées est meilleur pour $t = 200$ secondes, c'est-à-dire lorsque l'équilibre de fluorescence est pratiquement atteint. Les bandes de S₂ observées proviendraient donc de molécules dans un état proche de l'équilibre de fluorescence. La comète IRAS-Araki-Alcock n'étant pas intrinsèquement très active, les molécules S₂ subissent peu de désexcitations par collisions dans la coma interne où la densité est la plus élevée.

FIG. 9.3 – Spectre LWR15908 de la comète IRAS-Araki-Alcock et spectres de S₂ (en gras) calculés après différents temps t d'exposition des molécules au rayonnement solaire, de $t = 1$ s jusqu'à ce qu'un état très proche de l'équilibre de fluorescence soit atteint ($t = 200$ s). Les spectres synthétiques sont convolués avec une gaussienne de largeur à mi-hauteur de 1,1 nm.



La transition 8-0 observée à 286 nm a une intensité plus grande que celle donnée par le calcul. Cet effet semble être dû à une interaction avec l'état $B''^3\Pi_u$, voisin de l'état $B^3\Sigma_u^-$ qui entraîne une augmentation de la durée de vie des niveaux $v' = 8$ et $v' = 9$ (? ,]quick81. Or les facteurs de Frank-Condon que nous avons utilisés pour le calcul du spectre (? ,]anderson79 ne prennent pas en compte cette interaction.

9.3.3 Calcul de l'abondance des molécules de S₂

Calcul du nombre de molécules dans l'ouverture de la fente

Le nombre N de molécules dans l'ouverture de la fente est donné par la relation suivante :

$$N = \frac{4\pi}{d\Omega} \times F \times \frac{r^2}{g} \quad (9.1)$$

où F est le flux en $\text{ph cm}^{-2} \text{s}^{-1}$ intégré sur une bande observée, g est l'efficacité quantique de fluorescence associée à cette bande, calculée pour une molécule située à 1 UA du Soleil, et r est la distance héliocentrique de la comète exprimée en UA ($r = 1$ UA). $d\Omega$ est l'angle solide sous lequel le satellite voit une surface de 1 cm^2 à la distance d :

$$d\Omega = \frac{dS}{d^2}$$

d étant la distance entre le satellite et la comète, exprimée en centimètres. Elle est pratiquement égale à la distance géocentrique de la comète :

$$d \simeq \Delta = 0,032 \text{ UA}$$

Les valeurs de N calculées à partir de différentes bandes sont reportées dans le tableau ??.

TAB. 9.1 – Nombre N de molécules dans l'ouverture de la fente calculé à partir des flux intégrés F de différentes bandes observées de S₂ correspondant aux transitions notées $v' - v''$. Les facteurs g sont ceux de l'équilibre de fluorescence.

| $v' - v''$ | λ (nm) | F ($\text{ph cm}^{-2} \text{s}^{-1}$) | g ($10^{-4} \text{ ph s}^{-1} \text{ molec}^{-1}$) | N (10^{27} molec) |
|---------------|-------------------|--|---|------------------------------------|
| 8-0 | 285,9 | 0,31 | 3,88 | 2,3 |
| 9-1, 7-0 | 288,9 | 0,44 | 7,64 | 1,7 |
| 8-1, 6-0 | 292,0 | 0,42 | 7,99 | 1,5 |
| 7-1, 5-0 | 295,4 | 0,43 | 6,93 | 1,8 |
| 8-2, 6-1 | 298,8 | 0,40 | 5,39 | 2,1 |
| 9-3, 7-2, 5-1 | 302,1 | 0,56 | 8,64 | 1,9 |

Les facteurs g utilisés sont ceux de l'équilibre de fluorescence. La bande 9-0 ne peut être utilisée car elle se confond avec la bande (1,0) de OH. Nous calculons la moyenne de ces valeurs sans tenir compte de celle obtenue pour la transition 8-0 car nous avons vu que le modèle ne représentait pas correctement cette bande. La valeur moyenne obtenue est $N = 1,8 \times 10^{27}$ molécules dans l'ouverture de la fente.

Calcul du nombre total de molécules dans la coma

Afin de connaître le nombre total de molécules dans la coma, il faut déterminer la proportion de molécules vues dans l'ouverture de la fente. Soit $2 \times X$ et $2 \times Y$ les dimensions de la fente

au niveau de la comète : $2 \times X = 240$ km et $2 \times Y = 360$ km. Soit $f(\rho)$ la densité de colonne des molécules en fonction de la distance projetée ρ de la ligne de visée au noyau. Dans le repère (x,y) associé à la fente (cf. Fig.??), ρ s'écrit :

$$\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$$

FIG. 9.4 – Projection de la fente du spectromètre au niveau de la comète. $2 \times X$ et $2 \times Y$ sont les dimensions de la fente. Un point quelconque de la coma peut être repéré soit par ses coordonnées cartésiennes (x,y) , soit par ses coordonnées polaires (ρ,α) .

file=/scratchh/celine/iras3.ps,angle=0,clip=,width=7truecm

Le nombre de molécules dans l'ouverture de la fente est :

$$N = \int_{-X}^X \int_{-Y}^Y f(x,y) dx dy = 4 \int_0^X \int_0^Y f(x,y) dx dy$$

Le nombre total de molécules dans la coma est :

$$N_{tot} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x,y) dx dy = 4 \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} f(x,y) dx dy$$

Le modèle de Haser (Haser 57) donne la distribution des molécules dans la coma d'une manière simple et relativement correcte. Les hypothèses de base du modèle sont :

- le noyau cométaire est sphérique, de rayon R_0 ,
- les molécules mères quittent le noyau de façon isotrope avec une vitesse radiale v ,
- les molécules mères sont photodissociées en suivant la loi :

$$n = n_0 e^{-\frac{t}{\tau}},$$

où n_0 est le nombre de molécules mères au moment où elles quittent le noyau à $t = 0$ et τ est la durée de vie moyenne des molécules.

La densité $n(R)$ des molécules mères à la distance R du noyau est alors donnée par la relation suivante :

$$n(R) = \frac{Q}{4\pi v R^2} e^{-\frac{R-R_0}{l}}$$

où Q est le taux de production des molécules par le noyau et l la longueur d'échelle des molécules :

$$l = \tau v$$

La densité de colonne $f(\rho)$ des molécules mères à la distance projetée ρ du noyau s'obtient en intégrant la densité $n(R)$ le long de la ligne de visée. Elle s'écrit :

$$f(\rho) = \frac{Q}{2\pi v \rho} e^{-\frac{R_0}{l}} \int_0^{\frac{\pi}{2}} e^{-\frac{\rho}{l \cos \alpha}} d\alpha \quad (9.2)$$

Le calcul de $\frac{N}{N_{tot}}$ permet d'éliminer le facteur constant $\frac{Q}{2\pi v} e^{-\frac{R_0}{r}}$ et d'éviter les erreurs dues à l'incertitude sur la valeur R_0 du rayon du noyau.

La durée de vie τ de S_2 est un autre paramètre peu connu.

?dealmeida86 ont calculé la durée de vie $\tau = 250$ s pour une molécule de S_2 située à 1 UA du Soleil. En considérant que les molécules s'éloignent du noyau avec une vitesse $v \simeq 1$ km s⁻¹, la longueur d'échelle est $l \simeq 250$ km.

?budzien92 ont mesuré une longueur d'échelle $l = 200$ km à partir des profils de bandes de S_2 détectées dans la comète IRAS-Araki-Alcock. Cependant, ils ne considèrent pas une durée de vie de 200 secondes car elle n'est pas en accord avec les résultats énoncés par ?kim90, à savoir : les molécules de S_2 observées dans la comète IRAS-Araki-Alcock semblent être à l'équilibre de fluorescence qui, d'après eux, est atteint après 500 secondes (cf. §?? au chapitre ??). Ils adoptent alors une vitesse $v = 0,5$ km s⁻¹ et une durée de vie $\tau = 400$ s qui laisse le temps aux molécules de se rapprocher de l'équilibre de fluorescence.

Toutefois, nous avons vu qu'après 200 secondes seulement, l'état atteint est très proche de celui de l'équilibre. Une durée de vie de l'ordre de 200 secondes n'est donc pas incompatible avec les observations de la comète IRAS-Araki-Alcock et est en accord avec le calcul de ?dealmeida86. Nous considérons donc une durée de vie $\tau = 250$ s et une longueur d'échelle $l = 250$ km.

D'après nos calculs basés sur le modèle de Haser, 53 % du nombre total de molécules de S_2 se trouvent alors dans l'ouverture de la fente. Le nombre total de molécules de S_2 dans la coma est donc :

$$N_{tot} = \frac{N}{0,53} = 3,4 \times 10^{27} \text{ molécules.}$$

Calcul du taux de production et de l'abondance

Le taux de production des molécules de S_2 est :

$$Q = \frac{N_{tot}}{\tau} = 1,4 \times 10^{25} \text{ molécules s}^{-1}.$$

Le taux de production de l'eau étant $Q_{H_2O} = 1,9 \times 10^{28}$ molécules s⁻¹ le même jour (? , ?)budzien92, l'abondance relative de S_2 par rapport à l'eau est :

$$\frac{Q}{Q_{H_2O}} = 7,1 \times 10^{-4}.$$

Elle est supérieure à celle obtenue par ?budzien92 ($\frac{Q_{S_2}}{Q_{H_2O}} = 2,2 \times 10^{-4}$) qui ont considéré une durée de vie plus longue. Elle est par ailleurs du même ordre de grandeur que l'abondance relative des molécules de CS (? , ?)ahearn83 : $\frac{Q_{CS}}{Q_{H_2O}} = 5 \times 10^{-4}$, suggérant que, dans cette comète, S_2 est une molécule qui joue un rôle aussi important que CS_2 , la molécule mère de CS.

9.4 S_2 dans des spectres IUE de la comète Hyakutake ?

La comète Hyakutake est passée à une distance de la Terre relativement faible ($\Delta = 0,1$ UA). La détection de S_2 , si présent dans la coma interne, pouvait raisonnablement être envisagée. Le

satellite HST (*Hubble Space Telescope*) a en effet détecté S₂ le premier avril 1996 (Weaver, 1996). Des spectres ont été obtenus par le satellite IUE aux alentours du passage de la comète au périhélie. Nous étudions ces spectres afin de rechercher des signatures spectrales de S₂.

Nous considérons que les conditions dans les comètes IRAS-Araki-Alcock et Hyakutake sont similaires (elles sont intrinsèquement peu actives) où les dissociations par effet de collisions ne semblent pas affecter la fluorescence de S₂. Nous supposons alors que l'émission des molécules de S₂ dans la comète Hyakutake, si elle existe, ressemble à celle de l'équilibre de fluorescence, ce qui n'est pas incompatible avec une durée de vie de 250 s environ pour des molécules situées à 1 UA du Soleil.

9.4.1 Observations

Un programme d'observation de 16 heures avec le satellite IUE de la comète Honda-Mrkos-Pajdusakova avait été planifié pour février 1996. La comète Hyakutake a été découverte le 31 janvier 1996. Étant donné qu'elle est apparue comme un objet bien plus brillant et s'approchant plus près de la Terre, nous avons consacré deux séquences d'observation à cette comète au lieu de la comète Honda-Mrkos-Pajdusakova. D'autres spectres ont ensuite été obtenus jusque fin mars, surtout lors du passage au périhélie, le 25 mars ($\Delta = 0,1$ UA, $r = 1$ UA). Aucune observation n'a pu avoir lieu lors du périhélie, le 1^{er} mai 1996 ($\Delta = 1,2$ UA, $r = 0,23$ UA) car l'élongation de la comète (angle Terre-comète-Soleil) était trop faible pour que le satellite IUE puisse l'observer.

À cause du grand mouvement propre de la comète, des expositions plus longues qu'une heure ont été difficiles à obtenir. Par ailleurs, notre programme d'observation qui consiste en la recherche de molécules "nouvelles" s'est fait conjointement avec un programme d'étude de l'émission de OH mené par un autre groupe (M. Festou, H. Aernach, M. A'Hearn et M. Haken) qui nécessitait des expositions plus courtes afin d'éviter la saturation des bandes de OH.

Les spectres obtenus avec le spectromètre LWP de IUE sont donnés dans la table ???. La taille p d'un pixel de l'image projetée au niveau de la comète est donnée par la relation suivante :

$$p = \alpha \times \Delta$$

où α est le champ angulaire d'un pixel (1,525") exprimé en radians et Δ la distance géocentrique.

Nous nous sommes concentrés sur le spectre LWP32088 obtenu le 27 mars, deux jours après le passage de la comète au périhélie, avec un temps d'exposition d'une heure. La réduction des données est décrite au paragraphe ???.

9.4.2 Extraction d'un spectre à partir de l'image spectrale LWP32088

Un spectre est extrait en sommant six lignes de l'image spectrale centrées sur la partie la plus brillante de l'ouverture, soit environ 9" entourant le noyau cométaire. La distance projetée p d'un pixel étant de 146 km (cf. Tab.??), le spectre mesure les émissions dans un champ angulaire de 10" \times 9", soit 960 \times 880 km autour du noyau. Les six lignes dans la direction spatiale correspondent à environ quatre longueurs d'échelle de la molécule S₂. Le spectre englobe les émissions des molécules dans la coma à une distance inférieure ou égale à deux longueurs d'échelle de S₂ et enregistre la plus grande partie de l'émission des molécules de S₂, si elles existent.

TAB. 9.2 – Observation de la comète Hyakutake avec le spectromètre LWP du satellite IUE. Δ et r sont les distances géocentriques et héliocentriques respectivement, p est la taille d'un pixel projetée au niveau de la comète.

| numéro de spectre | date 1996 | heure (TU) | temps d'exposition | Δ (UA) | r (UA) | p (km) |
|-------------------|------------|------------|--------------------|---------------|----------|----------|
| LWP32008 | 19 février | 6h10 | 10800 s | 1,19 | 1,71 | 1356 |
| LWP32016 | 22 février | 5h22 | 900 s | 1,09 | 1,66 | 1241 |
| LWP32026 | 27 février | 5h42 | 1200 s | 0,92 | 1,57 | 1050 |
| LWP32064 | 4 mars | 3h10 | 5700 s | 0,72 | 1,46 | 820 |
| LWP32066 | 4 mars | 5h45 | 1200 s | 0,72 | 1,46 | 820 |
| LWP32083 | 23 mars | 2h50 | 900 s | 0,12 | 1,09 | 143 |
| LWP32084 | 24 mars | 4h05 | 600 s | 0,11 | 1,07 | 123 |
| LWP32085 | 25 mars | 1h32 | 120 s | 0,10 | 1,05 | 116 |
| LWP32086 | 26 mars | 21h53 | 1985 s | 0,11 | 1,01 | 131 |
| LWP32088 | 27 mars | 16h34 | 3600 s | 0,13 | 0,99 | 146 |

Le spectre obtenu est présenté figure ??a. On observe les émissions de CS à $\simeq 257$ nm, OH (1,0) à $\simeq 282,5$ nm, OH (0,0) à $\simeq 309$ nm et OH (1,1) à $\simeq 314$ nm habituellement détectées dans les comètes. Elles sont saturées dans ce spectre.

FIG. 9.5 – a) Spectre LWP32088 de la comète Hyakutake et spectre solaire SOLSTICE convolué avec une gaussienne de largeur à mi-hauteur de 1,1 nm, rougi et ajusté au spectre cométaire. b) Différence entre les spectres cométaire et solaire. Les traits entre les bandes (1,0) et (0,0) de OH indiquent l'origine des bandes de S₂. Le niveau du bruit 1- σ est aussi tracé en positif et en négatif (lignes pointillées).

- a)
 file=/scratchh/celine/iue1a.ps,angle=270,clip=,width=15truecm
 longueur d'onde (nm)
- b)
 file=/scratchh/celine/iue1b.ps,angle=270,clip=,width=15truecm
 longueur d'onde (nm)

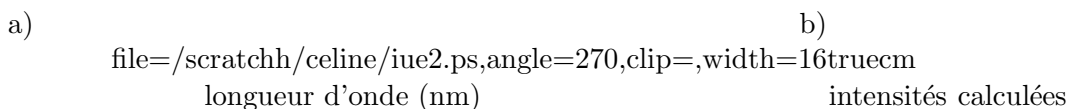
Afin de soustraire le continuum, nous avons utilisé le spectre solaire SOLSTICE obtenu par le satellite UARS (?,]rottman93. Le spectre solaire rougi (8%/10nm) et convolué avec la résolution de 1,1 nm du spectromètre LWP est ajusté au spectre cométaire. La comète se déplaçant rapidement sur la voûte céleste, il faut faire très attention aux décalages en longueurs d'onde qui peuvent survenir à cause d'erreurs de guidage et peuvent donner de fausses signatures cométaires après soustraction du spectre solaire. En effet, un meilleur ajustement est obtenu si le spectre solaire est déplacé de 0,5 nm du côté bleu du spectre par rapport au spectre cométaire.

La différence entre le spectre IUE et le spectre solaire ajusté est présenté Fig.??b. Dans la région spectrale 280-330 nm, des signatures sont présentes avec une intensité comprise entre $2\text{-}\sigma$ et $3\text{-}\sigma$, σ étant le niveau du bruit, somme du bruit électronique et du bruit de photons. Ces bandes sont larges et persistent aux mêmes longueurs d'onde le long de la direction spatiale de la fente, avec une intensité décroissante au fur et à mesure que l'on s'éloigne du noyau. Ceci suggère que ces bandes sont de nature cométaire. Leurs longueurs d'ondes sont proches de celles des bandes de fluorescence du système $B - X$ de S_2 dont l'origine est indiquée par des traits sur la figure.

9.4.3 Comparaison avec le spectre calculé de S₂

La figure ??a montre la comparaison entre le spectre cométaire LWP32088 et le spectre théorique de S₂ à l'équilibre de fluorescence (en gras). Celui-ci est convolué avec une gaussienne de largeur à mi-hauteur de 1,1 nm qui correspond à la résolution du spectromètre LWP. Toutes les bandes de S₂ semblent être présentes, cependant parfois légèrement décalées en longueur d'onde.

FIG. 9.6 – a) Spectre LWR32088 de la comète Hyakutake et spectre calculé de l'équilibre de fluorescence de S₂ (en gras). b) Intensités cométaires en fonction des intensités calculées pour le domaine spectral 285-304 nm et droites de régression. Le coefficient de corrélation est égal à 0,45.



Afin de déterminer la corrélation entre les spectres observé et calculé d'une manière plus quantitative, nous avons tracé les intensités cométaires en fonction des intensités calculées pour la région spectrale 285-304 nm, tous les 0,2 nm, entre les bandes OH (1,0) et (0,0), en excluant la région d'émission de CO₂⁺ autour de 289 nm. Nous avons aussi exclu la région spectrale au-delà de la bande OH (1,1) qui est plus bruitée à cause de la faible efficacité du détecteur. Ce diagramme de dispersion est présenté figure ??b.

Soit x la variable contenant les intensités calculées et y la variable contenant les intensités cométaires. On peut tracer deux droites de régression dont les équations, lorsque l'on considère x ou y comme étant la variable indépendante, sont respectivement :

$$y = \bar{y} + \frac{cov}{\sigma_x^2} \times (x - \bar{x}) \quad \text{et} \quad x = \bar{x} + \frac{cov}{\sigma_y^2} \times (y - \bar{y})$$

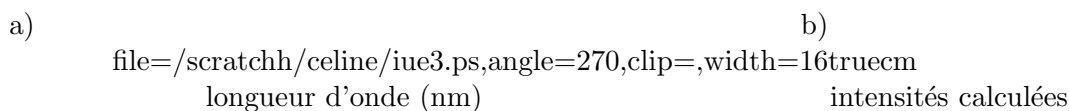
où \bar{x} et \bar{y} sont les valeurs moyennes de x et y , cov est la covariance entre les deux variables et σ_x^2 et σ_y^2 sont les variances de x et y . Ces droites sont représentées figure ??b. Le coefficient de corrélation est la racine carrée du produit des pentes des deux droites de régression. Il est égal à 0,45.

Nous pouvons effectuer le même test statistique dans deux cas :

- celui de la détection de S_2 dans le spectre LWR15908 de la comète IRAS-Araki-Alcock obtenu le 11 mai 1983 (cf. §??),
- celui d'une non détection de S_2 dans le spectre LWP32086 de la comète Hyakutake obtenu le 26 mars 1996 avec un temps de pose environ deux fois plus faible que celui du spectre LWP32088.

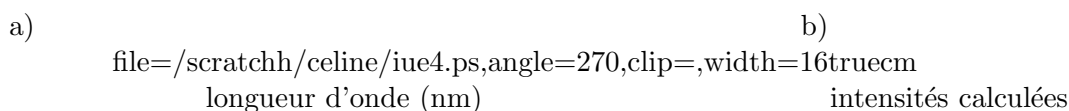
Le spectre LWR15908 de la comète IRAS-Araki-Alcock est présenté figure ??a. Les deux droites de régression sont pratiquement parallèles (Fig.??b) et le coefficient de corrélation est proche de 1, égal à 0,9, indiquant la présence de S_2 .

FIG. 9.7 - a) Spectre LWR15908 de la comète IRAS-Araki-Alcock et spectre calculé de S_2 à l'équilibre de fluorescence (en gras). b) Diagramme de dispersion et droites de régression. Le coefficient de corrélation est égal à 0,9.



Le spectre LWP32086 de la comète Hyakutake obtenu le 26 mars est présenté figure ??a. L'émission de OH est légèrement plus faible que dans le spectre LWP32088 (Fig.??a). Les deux droites de régression sont perpendiculaires (Fig.??b) et le coefficient de corrélation est nul, indiquant que S_2 n'a pas été détecté le long de la ligne de visée pendant cette session.

FIG. 9.8 - a) Spectre LWP32086 de la comète Hyakutake et spectre calculé de S_2 à l'équilibre de fluorescence (en gras). b) Diagramme de dispersion et droites de régression. Le coefficient de corrélation est nul.



Le 27 mars, avec une exposition plus longue et un meilleur guidage sur la partie centrale de la coma, le coefficient de corrélation n'est pas nul. Le diagramme de dispersion présenté figure ??b est la superposition d'une composante bruit aux plus faibles intensités cométaires, comme dans la figure ??b, et d'un signal aux plus grandes intensités à des longueurs d'onde qui correspondent à peu près aux bandes de S_2 , comme dans la figure ??b. C'est le diagramme de dispersion attendu pour un spectre avec un faible rapport signal sur bruit.

Cette étude statistique permet de conclure que l'émission de S_2 était possiblement présente dans le spectre LWP32088 obtenu le 27 mars 1996.

9.4.4 Limite supérieure de l'abondance de S_2

Étant donnée cette détection possible, nous déduisons une limite supérieure à l'abondance de S_2 à partir du spectre LWP32088 de la comète Hyakutake.

Calcul du nombre de molécules dans l'ouverture de la fente

Le nombre N de molécules dans la partie centrale ($10'' \times 9''$) de l'ouverture de la fente est donné par la relation suivante (cf. équation ??, §??) :

$$N = 4\pi \frac{d^2}{dS} \times F \times \frac{r^2}{g}$$

où F est le flux en $\text{ph cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ intégré sur une bande observée, g est l'efficacité quantique de fluorescence associée à cette bande, calculée pour une molécule située à 1 UA du Soleil, r est la distance héliocentrique de la comète exprimée en UA ($r = 0,99$ UA).

$\frac{dS}{d^2}$ est l'angle solide sous lequel le satellite voit l'élément de surface dS de 1 cm^2 situé au niveau de la comète à la distance d . d est exprimée en centimètres et est environ égale à la distance géocentrique $\Delta = 0,13$ UA.

Nous mesurons le flux intégré F sur les bandes (8-1) (6-0), (7-1) (5-0), (6-1) (8-2) et (9-3) (7-2) (5-1) et déduisons une valeur de N pour chacune des bandes. Les valeurs sont reportées dans le tableau ?. Nous obtenons $N = (2,67 \pm 0,16) \times 10^{27}$ molécules dans l'ouverture de la fente.

TAB. 9.3 – Nombre N de molécules dans l'ouverture de la fente calculé à partir des flux intégrés F de différentes bandes observées de S₂ correspondant aux transitions $v' - v''$. Les facteurs g sont ceux de l'équilibre de fluorescence.

| $v' - v''$ | λ (nm) | F ($\text{ph cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$) | g ($10^{-4} \text{ ph s}^{-1} \text{ molec}^{-1}$) | N (10^{27} molec) |
|---------------|-------------------|---|---|------------------------------------|
| 8-1, 6-0 | 292,0 | 0,04 | 7,99 | 2,4 |
| 7-1, 5-0 | 295,4 | 0,04 | 6,93 | 2,8 |
| 8-2, 6-1 | 298,8 | 0,03 | 5,39 | 2,7 |
| 9-3, 7-2, 5-1 | 302,1 | 0,05 | 8,64 | 2,8 |

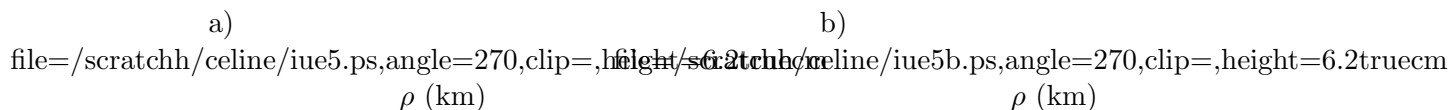
Calcul du nombre total de molécules dans la coma

La durée de vie des molécules de S₂ soumises au rayonnement solaire est $\tau \simeq 250$ s à 1 UA du Soleil (cf. §??). À partir d'un modèle dynamique du gaz dans la coma élaboré par Huebner91, Boice96 ont calculé que la vitesse moyenne d'expansion du gaz dans la comète Hyakutake était $v = 0,8 \text{ km s}^{-1}$. On en déduit la longueur d'échelle $l = \tau v = 200$ km pour les molécules de S₂ dans la comète Hyakutake.

Pour cette longueur d'échelle, 95 % des molécules de la coma se trouvent dans la partie centrale de la fente considérée lors de l'extraction du spectre d'après le modèle de Haser (équation ??, §??) .

On calcule également ce pourcentage à partir du modèle dynamique. Contrairement au modèle de Haser, il considère que la vitesse v n'est pas constante. En effet, lorsque les molécules

FIG. 9.9 – a) Vitesse des molécules de gaz en fonction de la distance au noyau ρ dans la coma de la comète Hyakutake. b) Nombre de molécules de S_2 intégré en fonction de la distance au noyau. Ces valeurs ont été obtenues par un modèle physico-chimique (??, ?)boice96.



s'éloignent du noyau, les collisions sont de moins en moins fréquentes. L'énergie dissipée par les collisions diminue au profit de l'énergie cinétique. La vitesse v des molécules gazeuses augmente donc avec la distance au noyau ρ (Fig.??a). Le modèle donne également le nombre de molécules intégré sur la ligne de visée en fonction de ρ (Fig.??b). On obtient alors que 91 % des molécules de S_2 se trouvent dans la partie centrale de l'ouverture de la fente. Le nombre total de molécules est :

$$N_{tot} = \frac{N}{0,91} = (2,94 \pm 0,18) \times 10^{27} \text{ molécules.}$$

Calcul du taux de production et de l'abondance

Le taux de production est :

$$Q = \frac{N_{tot}}{\tau} = (1,17 \pm 0,07) \times 10^{25} \text{ molécules s}^{-1}.$$

À partir du même spectre (LWP32088), ?haken96 ont déterminé un taux de production de l'eau $Q_{H_2O} = 12,1 \times 10^{28}$ molécules s^{-1} . L'abondance relative de S_2 par rapport à l'eau était alors :

$$\frac{Q}{Q_{H_2O}} = (9,6 \pm 0,6) \times 10^{-5}.$$

Cette limite est inférieure à l'abondance de CS calculée par ?haken96 : $\frac{Q_{CS}}{Q_{H_2O}} = 8 \times 10^{-4}$.

9.5 Conclusion

De l'étude du spectre IUE de la comète IRAS-Araki-Alcock dans lequel des bandes de fluorescence de S_2 ont été découvertes, nous pouvons tirer les conclusions suivantes :

- le spectre observé est très proche de celui de l'équilibre de fluorescence,
- ceci n'est pas incompatible avec la durée de vie $\tau \simeq 250$ s des molécules de S_2 soumises au rayonnement solaire à la distance de 1 UA calculée par ?dealmeida86 et avec la longueur d'échelle $l = 200$ km dérivée du spectre IUE de la comète IRAS-Araki-Alcock par ?budzien92,
- l'abondance relative de S_2 par rapport à l'eau était de 0,07 % le jour de la découverte de S_2 , le 11 mai 1983.

Pour des comètes du même type que les comètes IRAS-Araki-Alcock et Hyakutake, qui ne sont pas intrinsèquement trop actives, la densité moléculaire dans la coma interne n'est pas trop

élevée et les collisions n'empêchent pas les molécules S₂ d'atteindre un état proche de l'équilibre de fluorescence. Dans de telles comètes, on peut donc s'attendre à observer un spectre ressemblant à celui de l'équilibre de fluorescence.

La comparaison des spectres IUE de la comète Hyakutake obtenus en février et mars 1996 avec le spectre synthétique de fluorescence de S₂ suggère l'existence d'une corrélation entre les deux spectres dans le cas du spectre enregistré pendant une heure le 27 mars, deux jours après le passage au périhélie. La limite supérieure de l'abondance par rapport à l'eau était de 0,01 % environ. Cette identification possible de S₂ corrobore la détection faite cinq jours plus tard avec le satellite HST (*Hubble space telescope*) qui a un télescope beaucoup plus grand que celui du satellite IUE. L'abondance relative était de 0,008 % environ (Weaver, 1996).

Chapitre 10

Spectres TKS de la comète de Halley

10.1 Introduction

Nous avons présenté au chapitre ?? de la partie ?? les spectres de la comète de Halley obtenus en mars 1986 par le spectromètre tri-canal TKS de la sonde Vega 2. Ces spectres ont une résolution spectrale assez faible. La sonde s'étant approchée à 8030 km de la comète et le spectromètre ayant visé à 421 km du noyau, ils ont par contre une très grande résolution spatiale, condition nécessaire pour observer une molécule de courte durée de vie issue du noyau telle que S_2 .

Nous étudions le spectre obtenu lorsque la ligne de visée du spectromètre était au plus près du noyau, à 421 km. La sonde se trouvait alors à 9260 km du noyau. La distance héliocentrique de la comète était égale à 0,83 UA. Le domaine spectral 280-450 nm est commun au spectre TKS et au spectre de fluorescence du système $B - X$ de S_2 , permettant donc de rechercher la présence éventuelle de bandes de S_2 .

10.2 Comparaison avec le spectre calculé de S_2

La résolution du spectromètre TKS étant estimée à 4,5 nm environ, nous convoluons les raies calculées de S_2 avec une gaussienne de largeur à mi-hauteur de 4,5 nm.

Le modèle de fluorescence de S_2 montre que l'équilibre de fluorescence est atteint en 400 secondes à la distance héliocentrique de la comète de Halley au moment de la mission Vega 2 ($r = 0,83$ UA). Les spectres de fluorescence de S_2 calculés pour différents temps t d'exposition des molécules à la radiation solaire et convolués sont présentés figure ?. t varie entre 1 seconde jusqu'au moment où l'équilibre de fluorescence est atteint.

Dans les spectres obtenus pour $t = 46$ jusqu'à l'équilibre de fluorescence, les bandes ont leur maximum aux mêmes longueurs d'onde, sauf pour la bande la plus intense dont la longueur d'onde varie entre 325 et 330 nm. La différence essentielle entre les spectres concerne les intensités relatives, particulièrement entre la bande la plus intense et celle à $\simeq 290$ nm.

Le spectre obtenu pour $t = 1$ seconde diffère plus des trois autres spectres. La bande la plus intense n'est plus celle située vers 325 nm mais se trouve à 290 nm. On ne retrouve pas exactement les mêmes bandes à des longueurs d'onde proches ou identiques.

FIG. 10.1 – Raies des transitions du système $B - X$ de S₂ convoluées avec une gaussienne de largeur à mi-hauteur de 4,5 nm proche de la résolution du spectromètre TKS. Les temps d'exposition des molécules au rayonnement solaire sont, de bas en haut, $t = 1, 46, 100$ et 400 s.

file=/scratchh/celine/tks2.ps,angle=270,clip=,width=12truecm
longueur d'onde (nm)

La comète de Halley était environ cinquante fois plus productive en gas que la comète IRAS-Araki-Alcock, ce qui implique une densité plus élevée dans la coma interne. On ne peut pas supposer que les conditions dans la comète de Halley sont similaires à celles de la comète IRAS-Araki-Alcock. On ne sait pas si les molécules de S₂ situées à quelques centaines de kilomètres du noyau ont été désexcitées sous l'effet des collisions et ou si elles ont été soumises suffisamment longtemps au rayonnement solaire pour atteindre un état proche de l'équilibre de fluorescence.

Nous faisons alors deux hypothèses :

- les molécules de S₂ subissent dans la coma interne des collisions qui les désexcitent et n'ont pas le temps d'atteindre l'équilibre de fluorescence ; on compare le spectre cométaire avec le spectre calculé pour un temps d'exposition $t = 1$ s,
- les molécules de S₂ atteignent un état proche de l'équilibre de fluorescence ; on compare le spectre cométaire avec le spectre de l'équilibre de fluorescence qui n'est pas très différent des spectres obtenus à $t = 100$ et 46 s en ce qui concerne la longueur d'onde des bandes.

La première situation est illustrée par la figure ??a, la deuxième par la figure ??b. Les spectres simulés sont en gras. Nous avons marqué par des traits les longueurs d'onde des maxima des bandes de S₂, sauf pour celles qui se confondent avec des émissions cométaires "classiques" telles que OH, NH, CN et CH.

FIG. 10.2 – Comparaison entre le spectre de la comète de Halley obtenu le 9 mars 1986 par le spectromètre TKS lorsqu'il visait à 421 km du noyau et le spectre calculé de S₂ (en gras) a) après une seconde d'exposition au rayonnement solaire, b) à l'équilibre de fluorescence. L'intensité en kilorayleigh nm⁻¹ est celle du spectre TKS. 1 rayleigh = 10⁶ photons s⁻¹ cm⁻² dans 4π stéradians. L'intensité relative entre les spectres calculés à $t = 1$ s et à l'équilibre de fluorescence n'est pas respectée.

a) $t = 1$ s

file=/scratchh/celine/tks1b.ps,angle=270,clip=,width=15truecm
longueur d'onde (nm)

b) $t = 400$ s

file=/scratchh/celine/tks1a.ps,angle=270,clip=,width=15truecm
longueur d'onde (nm)

1^{er} cas : recherche de molécules de S₂ dans un état différent de l'équilibre de fluorescence

Peu de bandes cométaires sont à des longueurs d'onde identiques ou même seulement proches de celles des bandes de S₂. De plus, des bandes de S₂ comme celle à 420 nm ou la bande intense à 290 nm n'apparaissent pas dans le spectre cométaire. Les molécules S₂ dans cet état ne se trouvaient donc pas dans la coma ou en quantité insuffisante pour être détectées. Cette comparaison montre par ailleurs que l'émission "nouvelle" présentée dans la partie ?? (chapitre ??) n'est pas due à la molécule de soufre.

2^e cas : recherche de molécules dans un état proche de l'équilibre de fluorescence

Quelques bandes cométaires coïncident avec des bandes de S₂ parmi lesquelles certaines ont été attribuées au phénanthrène par ?moreels94 (cf. partie ??, chapitre ??). L'absence d'autres bandes ne permet cependant pas d'envisager une détection de S₂, même si ce cas semble légèrement plus favorable que le précédent. Les molécules de S₂ ne se trouvaient pas dans la coma ou en quantité infime ne permettant pas une détection.

10.3 Conclusion

Lors de son dernier passage auprès de la Terre en 1986, la comète de Halley a été un sujet d'étude intense par des observations à la fois depuis le sol et l'espace. Sa distance au périhélie était relativement grande, $\simeq 1,09$ UA. Les spectres obtenus avec le spectromètre TKS sont actuellement les seuls qui fournissent une telle résolution spatiale, suffisamment grande pour détecter des molécules mères ayant une courte durée de vie et confinées dans la coma interne, telles que la molécule de soufre.

L'étude du spectre TKS obtenu lorsque l'axe optique du spectromètre était au plus près du noyau montre que les molécules S₂ étaient absentes de la coma ou en quantité trop faible pour être détectées, ou qu'elles ont été dissociées dans la coma interne. Cette conclusion reste valable pour les autres spectres TKS enregistrés pour des distances plus grandes entre la ligne de visée et le noyau.

Chapitre 11

Conclusion

Le modèle de fluorescence du système $B - X$ de S_2 que nous avons mis au point permet de calculer un spectre simulant les spectres cométaires en fonction du temps d'exposition des molécules au rayonnement solaire. Les molécules de S_2 sont rapidement photodissociées, en environ 250 secondes à 1 UA du Soleil. Leur détection nécessite alors des observations avec une bonne résolution spatiale qui permet de voir les émissions dans la coma interne, dans un rayon de quelques centaines de kilomètres autour du noyau.

Ce fut le cas des comètes IRAS-Araki-Alcock, qui est passée à la distance $\Delta = 0,032$ UA de la Terre, et Hyakutake ($\Delta = 0,1$ UA). Les spectres obtenus lors de la rencontre entre la comète de Halley et la sonde spatiale Vega 2 à la distance de 8000 km environ ont également une très bonne résolution spatiale.

Notre modèle reproduit très bien le spectre IUE de la comète IRAS-Araki-Alcock dans lequel S_2 a été détecté pour la première fois dans une comète (Ahearn, 1983) le 11 mai 1983. Il montre que les molécules ont le temps d'atteindre un état voisin de l'équilibre de fluorescence avant d'être photodissociées et donne un taux de production de $1,4 \times 10^{25}$ molécules s^{-1} , soit une abondance de 0,07 % par rapport à l'eau.

La détection de S_2 dans les spectres IUE de la comète Hyakutake est moins évidente. Toutefois, la comparaison de notre modèle avec un spectre obtenu le 27 mars 1996, deux jours après le passage au périhélie de la comète, suggère la présence possible de S_2 dans ce spectre avec un taux de production inférieur à $1,2 \times 10^{25}$ molécules s^{-1} , soit une abondance inférieure à 0,01 % par rapport à l'eau. Cette détection a été confirmée par la suite par des observations avec le satellite HST le premier avril (Weaver, 1996), l'abondance dérivée de ces observations étant d'environ 0,008 % par rapport à l'eau.

Les spectres de la comète de Halley ne présentent par contre aucune signature spectrale des molécules de soufre dans la coma à plus de 400 km du noyau, indiquant que les molécules S_2 sont soit inexistantes dans la comète de Halley, soit totalement ou en grande partie dissociées dans la région la plus interne de la coma à cause de collisions.

Le modèle que nous avons développé est un modèle de fluorescence en fonction du temps très général. La méthode de calcul est par ailleurs rapide et stable. Il peut donc avoir facilement

d'autres applications, telles que :

- la comparaison à d'autres spectres cométaires,
- l'analyse de la détection de S₂ lors de l'impact entre Jupiter et la comète Shoemaker-Levy 9 (,)noll95,yelle96 en modifiant les paramètres physiques du milieu, le spectre de S₂ apparaissant en absorption sur le rayonnement émis par l'atmosphère de Jupiter.
- le calcul du spectre de fluorescence d'autres molécules diatomiques observées dans les comètes telles que CS, CH ou SO. CS et CH ayant des durées de vie courtes, elle ne sont observées que très près de leur source. L'étude des raies d'émission donne des indications sur les conditions d'excitation et donc sur la nature des molécules parentes. ?cochran98 ont obtenu des observations du radical CH dans différentes régions de la coma de la comète Hale-Bopp dont la modélisation serait intéressante. La molécule SO a été découverte dans la comète Hale-Bopp. Son émission est plus importante que celle attendue de la photodissociation de SO₂, suggérant l'existence d'une autre source de SO (,)kim98,bockelee98.

Ce modèle peut être amélioré en incluant les transitions rovibrationnelles (cf. annexe ??) et en étudiant le rôle des collisions et de l'effet d'épaisseur optique qui entraîne une absorption du rayonnement ultraviolet solaire dans la coma interne.

Cinquième partie

La molécule de carbone C_2

Sommaire

| | | |
|---|--|-----|
| 1 | Introduction | 111 |
| 2 | Mthodes d'observation | 115 |
| 3 | tude thorique du spectre de fluorescence de C ₂ | 119 |
| 4 | Comte Hyakutake | 125 |
| 5 | Comte Hale-Bopp | 141 |
| 6 | Conclusion | 151 |

Chapitre 12

Introduction

Dans les domaines visible et UV, les émissions observées dans la coma sont le plus souvent dues aux radicaux cométaires qui proviennent de la photolyse de molécules issues directement du noyau. L'eau, le constituant majeur des noyaux cométaires, est photodissociée et produit le radical OH. L'émission de OH est la plus intense de toutes celles des radicaux. Elle se situe dans le proche-ultraviolet, vers 310 nm.

Les transitions électroniques des molécules C_2 ont lieu dans le domaine visible. Plusieurs émissions provenant de différents radicaux sont détectées depuis le sol dans la même région spectrale. Il s'agit par exemple de NH, CN, C_3 et CH. Les molécules parentes des radicaux ne sont pas toujours bien connues.

- NH a une bande d'émission vers 336 nm, à la limite du domaine observable depuis le sol. Il serait issu de la molécule NH_2 , elle-même produite par la photodissociation de l'ammoniac NH_3 . NH_3 a été découvert dans la comète Hyakutake (? ,)wootten96.
- CN a une bande d'émission intense située vers 386 nm. Il est probablement issu de la photodissociation de l'acide cyanhydrique HCN ou (et) du cyanure de méthyle CH_3CN observé pour la première fois dans la comète Hyakutake (? ,)bockelee96.
- C_3 a une émission beaucoup plus faible vers 405 nm. C_4H_2 a été proposée comme étant une éventuelle molécule mère.
- CH a une faible bande d'émission centrée sur 436 nm. Il peut provenir de la photodissociation des hydrocarbures.

C_2 se manifeste par des émissions regroupées en séquences ($\Delta v = 1, 0, -1$) et appelées bandes de Swan qui sont parmi les plus intenses dans ce domaine spectral. Elles ont été observées la première fois en 1868 par W. Huggins. Cependant, les molécules parentes de C_2 font toujours partie du domaine des hypothèses.

L'acétylène C_2H_2 et l'éthane C_2H_6 , tous deux découverts dans des spectres de la comète Hyakutake (? ,)brooke96,mumma96,sorkhabi96 sont d'éventuels candidats. ?jackson96 et ?sorkhabi96 ont en effet montré par des expériences en laboratoire que la photodissociation de C_2H_2 suivie de celle de C_2H pouvait produire une partie des molécules C_2 . Par ailleurs, la détection de molécules hydrogénées aromatiques polycycliques (PAHs) dans les comètes suggère que des molécules C_2 peuvent également provenir de la destruction de PAHs.

La figure ?? présente un spectre cométaire dans le domaine visible. Il a été obtenu à l'Observatoire de Haute Provence lors du passage au périhélie de la comète Hyakutake, le 25 mars 1996. Le continuum n'est pas très intense par rapport aux émissions gazeuses, montrant que la comète Hyakutake était modérément poussiéreuse.

FIG. 12.1 – Spectre de la comète Hyakutake obtenu le 25 mars 1996 dans le domaine visible à l'Observatoire de Haute Provence avec le télescope de 193 cm. Les molécules CN et C_2 sont responsables des émissions les plus intenses dans ce domaine. Plus faibles, des bandes d'émission des molécules C_3 et CH apparaissent également. NH émet vers 336 nm, à la limite du domaine observable depuis le sol.

file=/scratchh/celine/hyakA.ps,angle=270,clip=,width=16truecm

Les comètes Hyakutake et Hale-Bopp ont été des objets très brillants dans notre ciel en mars 1996 et 1997 respectivement, la première parce qu'elle s'est approchée très près de la Terre, la seconde parce qu'elle a été très active.

La comète Hyakutake, dont le noyau est de petite taille, $\simeq 2$ km (Fernandez96), n'était pas intrinsèquement active mais est passée à moins de 15 millions de kilomètres de la Terre ($\Delta = 0,1$ UA) le 25 mars 1996. Aucune comète observable n'était passée aussi près de la Terre depuis la comète IRAS-Araki-Alcock en 1983 ($\Delta = 0,032$ UA). Son passage près de la Terre a permis à la comète Hyakutake de briller dans notre ciel et aux astronomes d'effectuer des observations à grande résolution spatiale depuis le sol et avec les télescopes spatiaux et de découvrir de nombreuses molécules.

La comète Hale-Bopp est passée beaucoup plus loin de la Terre, à 200 millions de kilomètres ($\Delta = 1,4$ UA) le 9 mars 1997. Son noyau de grande taille, 20 à 40 kilomètres, et son importante production de gaz et de poussières en ont fait une comète très active et tout autant brillante. Observée depuis sa découverte en 1995, son évolution a pu être suivie et étudiée sur une longue période et pour des distances héliocentriques variant entre 7 et 0,9 UA.

Elles ont été le sujet de nombreuses études, observées depuis le sol et l'espace dans tous les domaines spectraux. Nous avons réalisé des observations dans le visible à l'Observatoire de Haute Provence ayant pour but l'étude des émissions de C_2 .

Chapitre 13

Méthodes d'observation

L'émission de C_2 a été étudiée dans les comètes Hyakutake et Hale-Bopp à l'aide d'observations dont le but est de i) rechercher les sources étendues dans la coma en identifiant les régions où C_2 est produit avec une température d'excitation élevée, ii) mettre en évidence des processus qui modifient la distribution en taille des particules de poussière, tels que la fragmentation, en mesurant la couleur du rayonnement solaire diffusé.

Une étude comparative de la température d'excitation du C_2 et de la couleur de la poussière permet ensuite de préciser si une partie de la composante gazeuse est produite directement par les grains de poussière, et non par le noyau.

Ce programme a été réalisé à l'Observatoire de Haute Provence grâce à des observations en spectro-imagerie, complétées par des observations en spectroscopie dans le mode fente longue.

13.1 Spectroscopie dans le mode fente longue

La spectroscopie est réalisée avec le spectromètre Carelec placé au foyer Cassegrain $f/15,5$ du télescope de 193 cm. La longueur de la fente est de $5,5'$ et son ouverture peut varier entre $0,3''$ et $13''$. Le détecteur est un CCD de 512×512 pixels. L'ouverture angulaire d'un pixel est égale à $1,1''$, sa taille est de $27 \mu\text{m}$. Selon les conditions d'observation (magnitude de la comète, plage de longueurs d'onde désirée, etc), les dispersions utilisées sont 13 et $6,6 \text{ nm/mm}$, correspondant à une résolution de $0,7$ et $0,36 \text{ nm}$ respectivement.

Les données sont sous forme d'images spectrales de 512 colonnes le long de la dispersion spectrale et 240 lignes dans la direction spatiale. Le courant d'obscurité est soustrait et les images sont corrigées du champ plat qui donne la différence de sensibilité des pixels du CCD. Des spectres de lampes (hélium, argon, néon) dont la longueur d'onde des raies est parfaitement connue sont enregistrés pour effectuer la calibration en longueur d'onde. Les images spectrales sont ensuite corrigées de l'extinction atmosphérique qui dépend de la longueur d'onde et de la couche d'atmosphère traversée par le rayonnement, donc de la hauteur h de l'astre observé. L'intensité corrigée I est donnée par la relation suivante :

$$I(\lambda) = I_{brut}(\lambda) \times 10^{0,4nA(\lambda)} \quad (13.1)$$

où I_{brut} est l'intensité mesurée, A est le coefficient d'absorption en magnitude par masse d'air

et n est le nombre de masse d'air :

$$n = \frac{1}{\sin h}$$

La calibration en flux se fait à l'aide d'observations d'étoiles standards, situées si possible dans un champ proche de celui de la comète pour que les conditions d'absorption par l'atmosphère soient similaires. Soient $I_{cal,*}$ l'intensité de l'étoile en $\text{erg cm}^{-2} \text{s}^{-1} \text{nm}^{-1}$ et I_* l'intensité mesurée et corrigée de l'extinction atmosphérique. Le spectre calibré de la comète est :

$$I_{cal}(\lambda) = I(\lambda) \times \frac{I_{cal,*}(\lambda)}{I_*(\lambda)} \times \frac{t_*}{t}$$

où I est l'intensité de la comète mesurée et corrigée de l'extinction atmosphérique, t_* et t sont les temps d'exposition sur l'étoile standard et la comète respectivement.

Un spectre est enfin extrait en sommant quelques lignes de l'image spectrale autour de la ligne la plus brillante qui correspond au noyau.

Dans le domaine visible nous pouvons observer les bandes de Swan de C₂ pour les séquences $\Delta v = -1$, $\Delta v = 0$ et $\Delta v = 1$ entre 450 et 580 nm (cf. Fig.??, chapitre ??). Nous nous intéressons plus spécifiquement aux bandes (1,1) et (0,0) de la séquence $\Delta v = 0$ et avons donc observé aux alentours de 515 nm (Fig.??).

FIG. 13.1 – Spectres de la comète Hyakutake obtenu a) le 25 mars 1996 avec une dispersion de 13 nm/mm et b) le 1^{er} avril 1996 avec une dispersion de 6,6 nm/mm. Les spectres sont extraits des lignes de l'image spectrale les plus brillantes où est mesurée l'émission provenant de la coma interne. Dans la séquence $\Delta v = 0$, les têtes des bandes de Swan (1,1) et (0,0) de C₂ se situent à 513 et 516 nm respectivement. L'intensité du continuum peut être mesurée vers 530 nm où aucune émission gazeuse n'est présente.

a) b)
 file=/scratchh/celine/hyakB.ps,angle=270,clip=,width=16truecm

Afin de mesurer l'intensité de l'émission de C₂ au niveau des têtes de bandes (1,1) à 513 nm et (0,0) à 516 nm, il faut retirer l'intensité diffusée par la poussière à ces longueurs d'onde. Elle peut être mesurée vers 530 nm par exemple car aucune émission gazeuse n'apparaît dans cette région du spectre. On soustrait alors le continuum selon les équations :

$$\begin{aligned} I_{gaz,513nm} &= I_{513nm} - \alpha_1 \times I_{530nm} \\ I_{gaz,516nm} &= I_{516nm} - \alpha_2 \times I_{530nm} \end{aligned} \quad (13.2)$$

où

$$\alpha_1 = \frac{I_{Sol,513nm}}{I_{Sol,530nm}} \quad \text{et} \quad \alpha_2 = \frac{I_{Sol,516nm}}{I_{Sol,530nm}}$$

I_{Sol} étant l'intensité de la radiation solaire, donnée par ?neckel84. Les valeurs obtenues sont de l'ordre de 0,96 pour α_1 et 0,86 pour α_2 .

13.2 Spectro-imagerie

La spectro-imagerie est réalisée au foyer Newton f/6 du télescope de 120 cm équipé d'une caméra CCD 1024×1024 pixels. Le champ angulaire d'un pixel est $0,67''$. Une roue à filtres, placée entre la source et le détecteur permet d'isoler les émissions cométaires que l'on souhaite étudier.

Après soustraction du courant d'obscurité, les images sont corrigées de la différence de sensibilité entre les pixels du CCD. La correction de l'extinction atmosphérique se fait comme dans le cas de la spectroscopie (équation ??), en multipliant l'intensité mesurée sur chaque pixel par le facteur :

$$10^{0,4nA(\lambda_f)}$$

où λ_f est la longueur d'onde centrale du filtre.

La calibration en flux se fait à partir d'étoiles standards dont l'intensité $I_{cal,*}$ à la longueur d'onde λ_f du filtre est connue :

$$I_{cal} = I \times \frac{I_{cal,*}}{I_*} \times \frac{t_*}{t} \quad (13.3)$$

où I est l'intensité de chaque pixel de l'image cométaire après correction de l'extinction atmosphérique et la valeur de I_* est obtenue en sommant l'intensité de tous les pixels qui reçoivent des photons provenant de l'étoile standard. t_* et t sont les temps de pose sur l'étoile et la comète respectivement.

Deux filtres à bande passante étroite ($\Delta\lambda = 5$ nm) permettent de mesurer le continuum dû à la diffusion du rayonnement solaire par les poussières dans les régions spectrales visible et rouge à 527 nm et 682 nm. À ces longueurs d'onde, aucune émission gazeuse n'est présente et on mesure bien seulement le continuum.

Deux autres filtres sont utilisés pour isoler les bandes d'émission (1,1) et (0,0) de la molécule C_2 à 513 nm et 516 nm ($\Delta\lambda = 2$ nm). Le filtre à 516 nm mesure l'intensité des raies dans la tête de bande (0,0). Celui à 513 nm mesure l'intensité des raies dans la tête de bande (1,1) et des raies de la bande (0,0) correspondant à un nombre quantique rotationnel élevé. À cela s'ajoute la lumière solaire diffusée par la poussière à ces longueurs d'onde.

Des images en lumière blanche sont aussi obtenues à l'aide d'un disque à faces parallèles en verre BK7 placé dans la roue à filtres.

Afin d'obtenir une image de l'extension spatiale de l'émission de C_2 indépendamment du continuum, il faut soustraire ce continuum aux images obtenues dans les bandes d'émission de C_2 . La soustraction se fait selon les expressions suivantes :

$$\begin{aligned} I_{gaz,513nm} &= I_{513nm} - \alpha_1 \times I_{527nm} \\ I_{gaz,516nm} &= I_{516nm} - \alpha_2 \times I_{527nm} \end{aligned} \quad (13.4)$$

où

$$\alpha_1 = \frac{I_{Sol,513nm}}{I_{Sol,527nm}} \times \frac{S_{513nm}}{S_{527nm}} \quad \text{et} \quad \alpha_2 = \frac{I_{Sol,516nm}}{I_{Sol,527nm}} \times \frac{S_{516nm}}{S_{527nm}}$$

I_{Sol} est l'intensité de radiation solaire (Neckel 84), S est la sensibilité du système instrumental total (surfaces optiques, CCD, etc). Les rapports des sensibilités aux différentes longueurs d'onde sont calculés à l'aide d'images de l'étoile standard à travers les mêmes filtres.

Les valeurs obtenues sont de l'ordre de 0,34 pour α_1 et 0,38 pour α_2 . Avant la soustraction, la position de la partie centrale de la région nucléaire, *i.e.* le point le plus brillant de l'image, est déterminée avec une précision inférieure à 0,5 pixel. Les images sont ensuite centrées sur ce point avant d'être soustraites l'une à l'autre.

13.3 Recherche de sources étendues dans la coma

Dans le chapitre suivant (§??), nous verrons que le rapport des intensités aux longueurs d'onde des têtes des bandes (1,1) et (0,0) de C_2 à 513 et 516 nm respectivement définit le degré d'excitation des molécules de C_2 . Il permet de localiser des sources étendues dans la coma où les molécules de C_2 ont un degré d'excitation qui diffère de celui des molécules environnantes qui proviennent de la photodissociation de molécules issues du noyau.

Le rapport des intensités du continuum à 682 et 527 nm définit la couleur de la poussière qui est d'autant plus rouge que le rapport est élevé. Ce rapport est difficile à interpréter. Sa variation donne des renseignements sur l'évolution de la distribution en taille des grains de poussière dans la coma (Goidet-devel 94). On observe une légère variation du rapport en fonction de la distance cométocentrique car les grains sont peu à peu triés selon leur taille sous l'effet de la pression de radiation solaire. Le rapport permet de localiser des régions de la coma où la distribution en taille des particules n'est pas celle régie par la pression de radiation solaire, mais est due à d'autres phénomènes comme, par exemple, la fragmentation des grains.

L'étude de ces deux paramètres permet ainsi de rechercher une éventuelle corrélation entre la présence de sources étendues de C_2 et des régions de la coma où la taille des grains est différente, peut-être à la suite de processus tels que la fragmentation qui peuvent entraîner la libération locale de molécules.

Chapitre 14

Étude théorique du spectre de fluorescence de C_2

Dans la partie visible du spectre, les bandes de Swan de C_2 font partie des émissions gazeuses les plus intenses (cf. chapitre ??). Ces émissions sont connues depuis le début de la spectroscopie cométaire et le radical C_2 a sans doute été l'un des plus observé. Il est cependant l'un des moins bien compris sur le plan théorique.

Des travaux sur les bandes de Swan de C_2 conduits lors de la campagne d'observation de la comète de Halley en 1986 ont montré que le rapport d'intensité $I(\Delta v = 1)/I(\Delta v = 0)$ varie avec la distance cométocentrique (?,)odell88,vanysek88,clairemidi90.

Un modèle puissant de la fluorescence de C_2 à l'équilibre a été développé par ?gredel89 mais il ne décrit pas avec précision la variation des intensités des bandes de C_2 dans la coma interne. Ceci est dû au manque de connaissance sur les probabilités des transitions interdites entre un état triplet et un état singulet. ?rousselot93 a adopté une autre approche et utilisé une méthode de Monte-Carlo pour calculer l'évolution en fonction du temps de la population des niveaux excités et, par conséquent, l'évolution du spectre de fluorescence.

L'analyse des observations des comètes Hyakutake et Hale-Bopp est basée sur ce calcul de spectre théorique de fluorescence de C_2 (?,)rousselot93,rousselot94. Dans ce chapitre, nous exposons rapidement la méthode de calcul employée et les résultats obtenus qui seront utilisés dans les chapitres suivants.

14.1 Méthode de calcul

Les niveaux électroniques et transitions pris en compte dans le calcul sont représentés dans le diagramme ??. La molécule présente deux séries d'états, singulets et triplets. Contrairement au principe de base de la mécanique quantique selon lequel une transition ne peut avoir lieu qu'entre deux états de même multiplicité, les transitions intercombinatoires a-X et c-X, bien qu'ayant une probabilité faible, doivent être prises en compte afin de modéliser correctement le spectre cométaire.

FIG. 14.1 – Diagramme des niveaux d'énergie de la molécule C₂ représentant les niveaux électroniques et les transitions pris en compte par ?rousselot93 dans son calcul du spectre de fluorescence.

file=/scratchh/celine/c21.ps,angle=270,clip=,width=14truecm états
 états
 singulets triplets

Pour chaque état électronique, les six premiers niveaux vibrationnels et tous les niveaux rotationnels de nombre quantique $J \leq 100$ sont considérés. Ceci revient à inclure 6000 niveaux d'énergie différents dans le calcul. Si l'on veut étudier l'évolution du spectre de fluorescence entre l'instant où les molécules de C₂ sont créées par la photodissociation des molécules mères libérées au niveau du noyau et le moment où elles atteignent l'équilibre de fluorescence, il faut alors résoudre un système de 6000 équations différentielles dépendant du temps :

$$\dot{n}_i = -n_i \sum_j P_{ij} + \sum_j n_j P_{ji} \quad (14.1)$$

où n_i est la population du niveau i et P_{ij} est la probabilité de transition entre les niveaux i et j , soit en absorption, soit en émission. Ceci revient encore à diagonaliser une matrice 6000×6000 (cf. partie ??, §??). La grande taille de cette matrice a donc conduit ?rousselot93 à développer une méthode de Monte-Carlo pour son calcul.

Ce calcul permet d'obtenir la répartition globale des populations des niveaux d'énergie à un instant donné et en fonction de la distribution initiale des molécules sur les différents niveaux d'énergie, puis le spectre de fluorescence.

?rousselot93 a appliqué son modèle au calcul des bandes d'émission de fluorescence de Swan qui sont observables dans le domaine visible (cf. Fig. ??, chapitre ??). Les observations en spectro-imagerie se portant sur la séquence $\Delta v = 0$, nous nous limiterons à la présentation des résultats relatifs aux bandes de cette séquence.

14.2 Spectre de fluorescence de C₂

Le spectre peut être défini par deux paramètres, les températures d'excitation vibrationnelle et rotationnelle, si l'on considère que la population relative des niveaux suit une loi de Boltzmann. ?gredel89 ont montré que ces températures n'étaient pas forcément égales.

La température vibrationnelle T_{vib} est déduite de la population relative n_v du niveau vibrationnel v :

$$n_v \propto e^{-\frac{E_v}{kT_{vib}}} \quad (14.2)$$

où E_v est l'énergie en cm^{-1} du niveau v par rapport au niveau fondamental ($v = 0, J = 0$), T_{vib} est la température vibrationnelle, h et k sont les constantes de Planck et de Boltzmann

respectivement. Le modèle permet de calculer la population n_v en faisant la somme de toutes des populations $n_{v,J}$ des niveaux rotationnels J associés au niveau vibrationnel v :

$$n_v = \sum_J n_{v,J}$$

La température rotationnelle T_{rot} associée au niveau vibrationnel v est déduite de la population relative $n_{v,J}$ du niveau rotationnel J :

$$n_{v,J} \propto (2J + 1)e^{\frac{E_{v,J} hc}{kT_{rot}}} \tag{14.3}$$

où $E_{v,J}$ est l'énergie en cm^{-1} du niveau rotationnel J associé au niveau vibrationnel v par rapport au niveau fondamental ($v = 0, J = 0$), $2J + 1$ est la dégénérescence de ce niveau et T_{rot} est la température rotationnelle. La population $n_{v,J}$ est donnée par le modèle.

Des spectres obtenus pour différentes températures d'excitation sont présentés figure ???. Les raies calculées ont été convoluées afin de représenter les bandes observées par le spectromètre Carelec du télescope 193 cm.

Les paramètres sont pour chaque spectre :

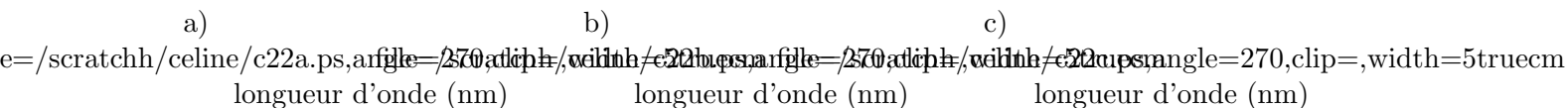
Fig.???a : $T_{vib} = 3000$ K et $T_{rot} = 2200$ K,

Fig.???b : $T_{vib} = 3500$ K et $T_{rot} = 2600$ K,

Fig.???c : $T_{vib} = 4500$ K et $T_{rot} = 3000$ K.

Les têtes des bandes (1,1) et (0,0) de C₂ se situent à 513 et 516 nm respectivement et sont indiquées par des traits sur la figure. Le rapport des intensités $I(513\text{nm})/I(516\text{nm})$ augmente avec la température d'excitation.

FIG. 14.2 – Spectres obtenus avec les paramètres a) $T_{vib} = 3000$ K et $T_{rot} = 2200$ K, b) $T_{vib} = 3500$ K et $T_{rot} = 2600$ K et c) $T_{vib} = 4500$ K et $T_{rot} = 3000$ K. Les traits indiquent les têtes des bandes (1,1) à 513 nm et (0,0) à 516 nm. Le rapport des intensités à 513 nm et 516 nm est d'autant plus élevé que les températures d'excitation sont grandes.



14.3 Étude du rapport d'intensité aux longueurs d'onde des têtes des bandes (1,1) et (0,0) de la séquence $\Delta v = 0$

Lorsque la molécule C₂ s'éloigne du noyau cométaire, sa température d'excitation est de plus en plus grande sous l'effet de la radiation solaire. Ceci entraîne une évolution de la population des niveaux d'énergie et de l'intensité des raies d'émission. Le rapport d'intensités

$I(513\text{nm})/I(516\text{nm})$ augmente alors régulièrement avec le temps. Il est important de noter que des raies de la bande (0,0), correspondant à des niveaux rotationnels élevés, sont mélangées à celles de la tête de bande (1,1). Ceci augmente le rapport $I(513\text{nm})/I(516\text{nm})$ même si seule l'intensité relative des raies rotationnelles change au profit des niveaux rotationnels les plus élevés.

La principale origine des molécules C_2 est le noyau, via une molécule mère et probablement une molécule grand-mère (cf. chapitre ??). Les molécules ont une distribution initiale d'énergie vers les niveaux faiblement excités. Le rapport $I(513\text{nm})/I(516\text{nm})$ est minimum lors de leur création au voisinage du noyau.

Les molécules, en s'éloignant du noyau, accroissent progressivement leur température d'excitation jusqu'à atteindre l'équilibre de fluorescence au bout de 3000 secondes environ. Ceci se traduit par une augmentation du rapport $I(513\text{nm})/I(516\text{nm})$ vers une valeur asymptotique caractéristique de l'équilibre de fluorescence.

Si l'on considère que les molécules s'éloignent du noyau avec une vitesse moyenne de 1 km s^{-1} , les molécules C_2 dans la coma qui sont à l'équilibre de fluorescence se trouvent à environ 3000 kilomètres du noyau. Cependant, les molécules C_2 étant des molécules petites-filles, leur lieu de création peut s'étendre assez loin du noyau. Il est donc possible d'observer des molécules qui n'ont pas encore atteint l'équilibre de fluorescence au-delà de 3000 kilomètres du noyau.

Certaines molécules C_2 peuvent aussi provenir de molécules mères, non pas issues du noyau, mais d'une source étendue. Cette source étendue est sans doute formée de grains, peut-être des grains CHON riches en éléments légers (carbone, hydrogène, oxygène et azote) comme ceux découverts par la sonde spatiale Giotto dans la comète de Halley en 1986 (?,)nature86. Ces grains libèreraient d'autres molécules mères qui créent des molécules C_2 dans un autre état d'énergie (?,)rousselot93,rousselot94. Le rapport $I(513\text{nm})/I(516\text{nm})$ a alors une valeur différente de celui des molécules C_2 de la coma environnante qui proviennent de la photolyse de molécules mères issues du noyau.

Chapitre 15

Comète Hyakutake

15.1 Introduction

Grâce à sa faible distance à la Terre, la comète Hyakutake, découverte le 31 janvier 1996 a été un objet très intéressant à observer entre février et avril 1996, aux alentours de son passage au périhélie.

Dix ans après l'étude *in-situ* de la comète de Halley par des sondes interplanétaires, l'approche de la comète Hyakutake a permis d'ajouter des éléments à notre connaissance actuelle de la nature des comètes. Nous avons notamment vu dans le chapitre ?? que de nombreuses espèces nouvelles ont été identifiées.

Vu l'excellente opportunité donnée par la comète Hyakutake, un programme d'observation basé sur les points suivants a été réalisé :

- spectro-imagerie à l'aide de filtres à bande spectrale étroite aux longueurs d'onde 513, 516, 527 et 682 nm mesurant les émissions de C₂ et de la poussière,
- mesure du rapport d'intensité des émissions de C₂ I(513nm)/I(516nm) et de la couleur de la poussière, soit I(682nm)/I(527nm), permettant la recherche de sources étendues,
- spectroscopie dans le mode fente longue dans la région spectrale des bandes de Swan et comparaison des spectres mesurés aux spectres synthétiques de C₂ calculés pour différentes températures d'excitation.

15.2 Observations

Des observations de la comète Hyakutake ont été réalisées à l'Observatoire de Haute Provence en mars et avril 1996, quelques mois seulement après sa découverte. Deux nuits ont été consacrées à la spectro-imagerie et trois nuits à la spectroscopie dans le mode fente longue.

La liste des sessions d'observation est donnée dans la table ?. p est la taille d'un pixel projetée au niveau de la comète :

$$p = \alpha \times \Delta$$

où α est le champ angulaire d'un pixel en radians et Δ est la distance géocentrique de la comète. L'étoile standard utilisée pour la calibration en flux est l'étoile G191B2B (??, ?)massey88,oke90.

TAB. 15.1 – Observations de la comète Hyakutake obtenues à l'Observatoire de Haute Provence en mars et avril 1996 avec le télescope 120 cm pour la spectro-imagerie et le télescope 193 cm pour la spectroscopie. r et Δ sont les distances héliocentriques et géocentriques respectivement. p est la taille du pixel au niveau de la comète.

| date | heure | r | Δ | p | télescope | télescope |
|---------|-----------|------|----------|------|-----------|-------------------------|
| 1996 | TU | (UA) | (UA) | (km) | 120 cm | 193 cm |
| 24 mars | 2h-4h | 1,07 | 0,11 | 90 | | 5 spectres 13 nm/mm |
| 25 mars | 2h-4h | 1,05 | 0,10 | 84 | | 6 spectres 13 nm/mm |
| 30 mars | 19h30-23h | 0,92 | 0,21 | 102 | 20 images | |
| 31 mars | 19h30-22h | 0,90 | 0,24 | 117 | 16 images | |
| 1 avril | 22h-23h | 0,88 | 0,27 | 222 | | 5 spectres 6,6 nm/mm |

15.3 Morphologie de la coma

La coma de la comète Hyakutake présente une morphologie intéressante avec de nombreuses structures. Ce sont des jets, des enveloppes et des condensations mis en évidence à l'aide de différentes méthodes de traitement d'image.

Une image obtenue en lumière blanche (vitre BK7 dans la roue à filtre) le 31 mars 1996 à 19 h 30 TU est présentée dans les figures ??a, c et d.

La taille de l'image est $44\,460 \times 44\,460$ km. Le Soleil se trouve dans le coin inférieur droit des images. Dans les trois cas, l'image d'origine est la même mais elle est traitée de différentes manières :

- Dans la figure ??a, afin de diminuer la contribution du continuum, l'image brute est multipliée par une image synthétique ayant une distribution d'énergie isotrope ρ^s , où ρ est la distance projetée au noyau. Le meilleur contraste a été obtenu avec le paramètre $s = 0,8$.
- Dans la figure ??c, on a soustrait à l'image brute l'image tournée d'un angle faible (2°) autour du noyau, *i.e.* autour du pixel le plus brillant de la coma interne.
- Dans la figure ??d, on a appliqué à l'image brute i) un filtre Gaussien, ii) un filtre Laplacien et iii) un filtre Gaussien.

Dans la direction solaire, la coma est semi-circulaire et comporte des enveloppes (Fig.??a). Une queue très fine s'étend dans la direction anti-solaire. Deux condensations, notées A et B,

sont apparentes le long de cette ligne. Les enveloppes et les condensations sont visibles sur la coupe dans la direction solaire anti-solaire présentée figure ??b.

Les condensations A et B apparaissent mieux figure ??c, alors que la figure ??d révèle la présence d'au moins un jet qui a son origine sur le noyau et d'une série de sept enveloppes dans l'hémisphère tourné vers le Soleil.

15.3.1 Condensations dans la direction anti-solaire

Des images obtenues le 24 mars 1996 par ?lecacheux96 ont révélé la présence de deux condensations situées dans la direction opposée au Soleil, l'une à 2340 kilomètres du noyau et l'autre plus près, à environ 400 kilomètres, s'éloignant du noyau avec une vitesse de 12 m s^{-1} .

Ces objets ont stimulé l'intérêt car ils pouvaient être une indication d'une fragmentation du noyau. Des exemples précédents tels que la comète West (? ,)sekanina82 et la comète Shoemaker-Levy 9 (? ,)rettig96 ont montré que les noyaux cométaires sont fragiles et peuvent se casser en plusieurs fragments.

Le 31 mars, nous avons observé probablement ces mêmes condensations, notées A et B, à 2000 kilomètres ($\pm 200 \text{ km}$, soit 3,5 pixels correspondant à l'incertitude due au seeing d'environ 2") et 8000 kilomètres ($\pm 200 \text{ km}$) du noyau dans la même configuration spatiale. Ceci suggère que la force dominante n'est pas l'interaction gravitationnelle dans le système à trois corps (noyau, condensations A et B). Les forces à considérer sont alors la gravitation solaire, la pression de radiation, les forces hydrodynamiques et les forces non-gravitationnelles produites par la sublimation de la glace dans la coma.

En outre, les condensations sont restées parfaitement alignées le long d'une ligne opposée à la direction du Soleil pendant plus d'une semaine. L'angle de position de la ligne noyau - condensations mesuré dans la figure ??c vaut 46° , ce qui est exactement la valeur de l'angle de position du rayon vecteur fourni par les éphémérides (? ,)yeomans96. Nous pouvons donc conclure que les deux forces dues au Soleil sont les principales forces.

Dans le référentiel de la comète, la gravitation solaire n'a pas d'effet au premier ordre. Ainsi, le mouvement des condensations résulte probablement de la pression de radiation solaire. Celle-ci a un effet comparativement plus efficace sur les petites particules de poussière que sur un corps solide de plusieurs mètres.

En utilisant les données de la figure ??c et celles fournies par ?lecacheux96, nous pouvons calculer l'accélération γ_B de la condensation B en supposant les forces de frottement négligeables. La condensation se trouvait à $\rho_1 = 2340 \text{ km}$ du noyau le 24 mars à $t_1 = 4 \text{ h TU}$ et à $\rho_2 = 8000 \text{ km}$ le 31 mars à $t_2 = 19 \text{ h } 30 \text{ TU}$. Le 31 mars, sa vitesse était :

$$v_2 = 2 \frac{\rho_2 - \sqrt{\rho_1 \rho_2}}{t_2 - t_1} = 11,2 \text{ m s}^{-1}$$

et son accélération :

$$\gamma_B = \frac{v_2^2}{2\rho_2} = 7,9 \times 10^{-6} \text{ m s}^{-2}$$

Cette valeur peut être comparée à l'accélération gravitationnelle $\gamma_g = 6 \times 10^{-3} \text{ m s}^{-2}$ et permet de déduire un ordre de magnitude pour la taille des particules dans la condensation B. Le rapport entre la force due à la pression de radiation F_r et les forces gravitationnelles F_g est :

$$\beta = \frac{F_r}{F_g} = \frac{3L}{16\pi cGM} \frac{Q_{pr}(a)}{a\rho} = 5,76 \times 10^{-4} \frac{Q_{pr}(a)}{a\rho} \quad (15.1)$$

où L et M sont la luminosité et la masse du Soleil, $Q_{pr}(a)$ l'efficacité quantique pour la pression de radiation que l'on suppose de l'ordre de 1, a et ρ le rayon et la masse volumique de la particule. Le rapport est inversement proportionnel à la taille de la particule a .

Nous obtenons ici $\beta = \frac{\gamma_B}{\gamma_g} = 1,3 \times 10^{-3}$, d'où $a\rho = 0,44 \text{ kg m}^{-2}$, soit $a = 0,44 \text{ mm}$ si on considère une masse volumique de la particule $\rho = 1 \text{ g cm}^{-3}$. Par conséquent, la pression de radiation aura un effet appréciable seulement si la condensation consiste en un nuage de particules de taille de l'ordre du millimètre ou moins.

Dans cette approche, les processus physiques tels que la sublimation des glaces n'ont pas été envisagés. Les effets dynamiques de ces processus ont été considérés par ?lien96 dans un modèle de simulation de Monte-Carlo. Il a trouvé que son modèle est en accord avec les données expérimentales si la destruction des grains est incluse. Ce résultat est donc cohérent avec les nôtres.

Les condensations A et B ne sont probablement pas des fragments compacts détachés du noyau mais des amas de particules qui sont libérés par le noyau dont la nature est poreuse et fragile.

15.3.2 Jets et enveloppes dans la direction solaire

Les jets de poussière sont observés depuis longtemps dans les comètes. Au siècle dernier, ?arago58 a fait une description détaillée de jets cométaires (Fig. 209 de son livre). La digitalisation de plaques photographiques de la comète de Halley obtenues en 1910 par ?bobrovnikoff31 a permis de mettre en évidence des arcs en spirale qui partent du noyau et de donner une estimation de sa période de rotation, égale à $\simeq 2,2$ jours (? ,)larson84.

Plus récemment, des études de la comète de Halley lors de son passage au périhélie en 1986 ont permis la découverte de jets de gaz dans les émissions de CN, C₂, C₃ et NH —?ahearn86, ?cosmovici86, ?clairemidi90, ?boehnhardt92, ?schulz93— qui suggère que ces radicaux peuvent être produits par des grains CHON (? ,)combi87. ?goidet-devel96 ont montré que les jets de gaz et de poussière de la comète de Halley sont liés et ont suggéré qu'une partie des jets de poussière produisent une source secondaire pour C₂.

Dans la coma de la comète Hyakutake, on distingue au moins un jet de poussière qui a son origine sur le noyau et est orienté dans la direction solaire (Fig.??d). À des distances plus grandes (2000 à 20 000 kilomètres), la présence de sept enveloppes résulte de la rotation du noyau, qui crée des forces centrifuges sur les jets de poussière collimatés dont les sources sont activées lors de l'irradiation par le Soleil, et de l'action de la pression de radiation solaire sur les particules de poussière. Aucune distinction n'est faite sur la figure ??d entre les jets de gaz et de poussière, l'image ayant été obtenue en lumière blanche.

15.4 Continuum et émission de C₂ dans la coma

Nous avons vu au chapitre ?? (§??) que l'étude de la comète dans la région spectrale 510-690 nm permet de mesurer le degré d'excitation des molécules de C₂ et de localiser leurs sources. Elle peut se faire par des observations en spectro-imagerie (§??) ou en spectroscopie (§??).

15.4.1 Étude en spectro-imagerie

Distribution de l'émission de C₂ et du continuum

La figure ??a montre une image obtenue avec le filtre à 516 nm le 31 mars 1996, à 20 h 30 TU. Le Soleil se trouve dans la direction du coin inférieur droit. L'image inclut l'émission de C₂ dans la bande (0,0) superposée au continuum à la longueur d'onde $\lambda = 516$ nm. Afin d'augmenter le contraste, chaque pixel de l'image est multiplié par un facteur ρ^s , où ρ est la distance au noyau. $s = 0,5$ permet d'avoir le meilleur contraste. L'image est en fausses couleurs.

La condensation B apparaît à 8000 kilomètres du noyau du côté anti-solaire. Un arc en forme de croissant s'étend entre le noyau et la condensation B perpendiculairement à la ligne noyau-condensation. Il se situe à environ 2000 kilomètres du noyau, à la même distance du noyau que la condensation A (cf. §??). La figure ??b montre la coupe dans la direction solaire (à droite) anti-solaire (à gauche).

Afin de montrer séparément l'étendue spatiale du continuum et de l'émission de C₂, des images obtenues avec les quatre filtres le 31 mars 1996 à 20 h TU sont présentées figure ?? . La taille des images est $44\,460 \times 44\,460$ km. Les figures ??a et b montrent le continuum à 682 et 527 nm respectivement. Les figures ??c et d montrent l'émission de C₂ à 516 et 513 nm, le continuum ayant été soustrait selon les équations ?? données au chapitre ?? . Les images dans le continuum et dans l'émission de C₂ présentent des différences majeures.

La poussière émet principalement dans l'hémisphère du côté du Soleil et dans la queue fine dirigée dans la direction opposée au Soleil, avec la présence d'une condensation à 8000 kilomètres du noyau.

L'émission de C₂ est pratiquement isotrope à l'exception du croissant près du noyau, dans l'hémisphère opposé au Soleil. Des observations faites par ?harris97 le 26 mars montre aussi la présence d'un croissant similaire dans les émissions de OH et CN. ?rodionov98 l'ont interprété comme étant une structure de choc neutre dans la coma. Dans ce qui suit, nous donnons une autre interprétation et montrons que le croissant est lié à la présence d'une source étendue.

Évolution du degré d'excitation des molécules de C₂

Comme nous l'avons vu dans le chapitre ?? (§??), le rapport d'intensité $I(513\text{nm})/I(516\text{nm})$ est un paramètre qui permet de mesurer le degré d'excitation des molécules C₂ et de localiser leur source dans la coma.

La figure ??a montre le rapport de deux images obtenues le 30 mars 1996 vers 23 h TU dans l'émission de C₂ à 513 et 516 nm, le continuum ayant été soustrait. Des isocontours (tracés pour les valeurs 0,6 à 0,69 tous les 0,1) sont superposés à l'image. Le noyau est au centre de l'image,

où le rapport a une valeur minimale. Le rapport augmente régulièrement à partir du noyau, sauf dans la direction anti-solaire.

La coupe dans la direction solaire anti-solaire est présentée figure ??b. Elle suit du côté du Soleil (à droite) une courbe symétrique en forme de V (ligne pointillée) dont le minimum, de valeur 0,53, se situe au niveau du noyau. Lorsque la distance cométocentrique augmente, le rapport tend vers une valeur asymptotique. La forme générale en V peut être expliquée par la lente augmentation de la température d'excitation des molécules de C₂ pendant leur trajet depuis leur principale source, le noyau, jusqu'aux régions de la coma où elles atteignent l'équilibre de fluorescence, après plusieurs heures d'exposition au champ de radiation solaire (cf. chapitre ??).

Dans la direction opposée au Soleil (à gauche), le rapport s'écarte de la courbe en forme de V et présente une augmentation rapide jusqu'à 1200 kilomètres (± 200 km) du noyau. À cette distance, le rapport présente un maximum relatif. Sa valeur, 0,67, est supérieure à la valeur 0,61 qui résulte du mécanisme de fluorescence pendant l'expansion des molécules qui a lieu dans la direction solaire. Le rapport montre ensuite un minimum secondaire à environ 2000 kilomètres du noyau qui correspond à la structure sombre en forme de croissant visible dans la figure ??a ou encore au croissant déjà mentionné au paragraphe ?? et visible dans la figure ??a. Nous donnons une explication de ce profil dans les paragraphes suivants.

Évolution de la couleur de la poussière

La couleur de la poussière est définie comme étant le rapport de l'intensité diffusée à deux longueurs d'onde. Ici, on considère le rapport $I(682\text{nm})/I(527\text{nm})$. Ce rapport est assez difficile à interpréter. Il apporte essentiellement des renseignements sur l'évolution de la distribution en taille des particules de poussière en fonction de la distance au noyau (cf. chapitre ??, §??).

La figure ??a montre le rapport de deux images obtenues le 30 mars 1996 vers 23 h TU dans le continuum à 682 et 527 nm. Le rapport est légèrement plus élevé du côté du Soleil que de l'autre côté, ce qui signifie une couleur de la coma plus rouge. La variation de la couleur peut être suivie le long de la direction solaire (à droite) anti-solaire (à gauche) sur la coupe donnée dans la figure ??b. La couleur de la poussière diminue légèrement de chaque côté du noyau à cause d'une petite variation dans la distribution des particules de poussière en fonction de la distance cométocentrique qui résulte du tri des grains selon leur taille par la pression de radiation solaire qui a une action d'autant plus efficace que les particules sont petites (?,)goidet-devel94.

À cette lente variation vient s'ajouter un changement plus rapide dans la couleur de la poussière dans la direction anti-solaire. Le rapport présente un minimum à 1200 kilomètres (± 200 km) du noyau, de valeur 0,59, inférieure à la valeur "normale" 0,66. Ce minimum correspond à un point sombre dans la figure ??a, situé entre le noyau et la condensation A. Ce changement indique une variation dans la distribution en taille des particules de poussière. Par contre, la condensation B située à 8000 kilomètres du noyau n'apparaît pas dans la figure ??a et on ne perçoit pas de coma autour de cette condensation.

Corrélation entre le degré d'excitation de C_2 et la couleur de la poussière

Afin d'étudier la connexion entre la poussière et le gaz C_2 , nous comparons les profils de la couleur de la poussière et du rapport d'intensité des bandes d'émission de C_2 . La figure ?? montre que les deux profils sont corrélés.

Là où le profil de la couleur de la poussière présente un maximum, le rapport d'intensité $I(513\text{nm})/I(516\text{nm})$ est minimum. C'est ce qui se passe au niveau du noyau et à 2000 kilomètres (± 200 km) du noyau dans la direction anti-solaire, au niveau de la condensation A visible dans le continuum (Fig.?? .a,b) et de l'arc en forme de croissant visible dans l'émission de C_2 (Fig.?? .c,d). Par contre, à 1200 kilomètres (± 200 km) du noyau dans la direction anti-solaire, le profil de la couleur de la poussière présente un minimum alors que le rapport $I(513\text{nm})/I(516\text{nm})$ est maximum.

Cette région, située entre le noyau et la première condensation, a un intérêt spécifique car elle apparaît comme une anomalie dans la coma, où les rapports d'intensité des émissions de C_2 et du continuum ont des valeurs qui sont en contradiction avec la variation régulière de ces paramètres expliquée comme suit.

Sous l'effet de la radiation solaire, un noyau cométaire libère du gaz. Le gaz emporte avec lui des particules de poussière. Les molécules C_2 , soumises à la radiation solaire, voient la population relative de leurs niveaux d'énergie évoluer au cours du temps et leur degré d'excitation changer. Ceci se traduit par une lente évolution du rapport d'intensité des bandes de C_2 qui augmente avec la distance au noyau, d'où un profil en forme de V. Le profil de la couleur de la poussière suit une courbe qui varie lentement avec la distance au noyau à cause de la modification de la distribution des particules de poussière qui sont triées en fonction de leur taille sous l'effet de la pression de radiation solaire.

Considérons maintenant le cas particulier de la comète Hyakutake où un amas de particules est libéré par le noyau. L'amas ne va pas se comporter de la même manière que le noyau.

- Les particules subissent des fragmentations qui modifient leur distribution en taille et provoquent un léger changement dans la couleur du rayonnement diffusé. Ceci se traduit par un minimum local dans le profil de la couleur de la poussière.
- Des molécules de C_2 sont libérées localement à 1200 kilomètres du noyau. Le degré d'excitation de ces molécules n'est pas identique à celui des molécules provenant de la photolyse de molécules issues du noyau, d'où une valeur différente dans le rapport d'intensité des bandes de C_2 $I(513\text{nm})/I(516\text{nm})$ (cf. chapitre ??).

La libération d'un amas de particules de poussière crée ainsi une source diffuse de C_2 identifiée par deux paramètres : i) une température d'excitation différente de celle des molécules provenant de la photolyse de molécules parentes libérées directement par le noyau et ii) une variation dans la couleur de la poussière.

La figure ?? montre que la source étendue est connectée avec la couleur plus rouge de la lumière diffusée par les grains de poussière. Ceci suggère que la libération de gaz par la source étendue est liée à un phénomène tel que la fragmentation de particules de poussière qui modifie la distribution en taille des grains et se traduit par une lumière diffusée de couleur différente.

15.4.2 Étude en spectroscopie

Étude qualitative du degré d'excitation des molécules de C_2

Nous étudions un spectre obtenu dans le mode fente longue le 24 mars 1996 à 3 h TU avec une dispersion de 13 nm/mm. L'orientation de la fente dans la direction solaire anti-solaire permet de faire une étude spatiale le long de cette ligne. Nous pouvons donc faire le rapport des coupes dans la direction spatiale de l'image spectrale aux intensités des têtes des bandes (1,1) et (0,0) de C_2 , le continuum ayant été soustrait (cf. equations ??, chapitre ??). Le résultat est présenté dans la figure ??.

À environ 300 kilomètres du noyau dans la direction anti-solaire, le profil présente une anomalie révélée par un maximum relatif. Ce maximum signifie que les molécules de C_2 ont un degré d'excitation qui est différent de celui qui résulterait de la simple expansion de molécules créées par la photodissociation de molécules parentes issues du noyau et soumises au rayonnement solaire, comme observé du côté du Soleil (cf. chapitre ??).

En comparant ce résultat avec l'étude faite à partir des observations en spectro-imagerie, on déduit qu'une source diffuse de C_2 , identifiée à 1200 kilomètres du noyau le 30 mars 1996 (Fig.??), était présente le 24 mars 1996, à environ 300 kilomètres du noyau, entre le noyau et la condensation A qui se trouvait alors à la distance de 700 kilomètres environ.

Comparaison avec des spectres synthétiques de fluorescence de C_2

À partir de l'image spectrale 2D obtenue le 24 mars 1996, nous extrayons quatre spectres à différentes distances projetées entre l'axe optique du télescope et le noyau : 5100 kilomètres dans la direction solaire, au niveau du noyau, 2500 et 5100 kilomètres dans la direction anti-solaire. Chacun de ces spectres est la somme de cinq lignes de l'image spectrale, correspondant à une étendue spatiale de 450 kilomètres dans la coma. Ces spectres sont présentés figure ??.

Le continu solaire est a été convolué avec une gaussienne de largeur à mi-hauteur $\simeq 1$ nm qui simule la réponse instrumentale du spectromètre Carelec. Il a ensuite été ajusté afin d'égaliser les intensités les plus faibles situées au dessous de la bande (0,0) (à environ 518 nm), sans rougissement préalable du spectre solaire car les bandes spectrales étudiées sont très étroites.

Afin d'interpréter de manière quantitative ces données expérimentales, nous utilisons des spectres synthétiques des bandes de Swan (1,1) et (0,0) de C_2 . Les raies d'émission calculées sont convoluées et les spectres résultants sont présentés en pointillés dans la figure ???. La région spectrale sur laquelle le spectre est calculé, de 510 nm à 520 nm, couvre la plupart des raies de la bande (0,0) et celles de la tête de bande (1,1).

Le spectre peut être défini avec une bonne précision par deux paramètres : la température vibrationnelle T_{vib} et la température rotationnelle T_{rot} (cf. chapitre ??, §??). Les températures qui donnent le meilleur ajustement des spectres théoriques aux spectres cométaires sont données dans la table ??.

Les températures d'excitation et le rapport d'intensité des bandes de C_2 $I(513nm)/I(516nm)$ augmentent avec la distance cométocentrique. La variation du rapport $I(513nm)/I(516nm)$ présentée dans la figure ???.b montre qu'une valeur d'équilibre est obtenue pour une distance d'environ 6000 kilomètres. Si on suppose que les molécules de C_2 ont été formées près du noyau

TAB. 15.2 – Températures vibrationnelles T_{vib} et rotationnelles T_{rot} adoptées pour ajuster au mieux les spectres obtenus le 24 mars 1996. Comparaison entre les rapports d'intensités des bandes de C_2 $I(513nm)/I(516nm)$ mesuré et théorique.

| distance au noyau (km) | direction | Fig.?? | T_{vib} (K) | T_{rot} (K) | $I(513nm)/I(516nm)$ mesuré | $I(513nm)/I(516nm)$ théorique |
|---------------------------|--------------|--------|------------------|------------------|-------------------------------|----------------------------------|
| 0 | | a | 3000 | 2200 | 0,54 | 0,50 |
| 2500 | anti-solaire | b | 3500 | 2600 | 0,58 | 0,55 |
| 5100 | anti-solaire | c | 4500 | 3000 | 0,64 | 0,62 |
| 5100 | solaire | d | 4500 | 3500 | 0,58 | 0,56 |

et s'en éloignent avec une vitesse radiale moyenne de 1 km s^{-1} , on déduit une constante de temps typique inférieure à 6000 secondes nécessaire pour que les molécules atteignent l'équilibre de fluorescence. Il s'agit en fait d'une limite supérieure car les molécules C_2 étant des molécules petites-filles, elles peuvent être créés assez loin du noyau.

Cette évolution confirme les résultats obtenus par ?rousselot94 dans leur analyse de la comète de Halley qui montre que le spectre mesuré très près du noyau est émis par des molécules de C_2 qui sont loin de l'équilibre de fluorescence.

15.5 Conclusion

Les principales caractéristiques révélées par la coma de la comète Hyakutake sont la présence de condensations alignées dans la queue et celle d'un croissant perpendiculaire à la queue observé dans l'émission gazeuse de C_2 .

L'étude du degré d'excitation des molécules C_2 et de la couleur de la poussière suggère que les condensations sont des essaims de particules de poussière qui, relâchées par le noyau, forment une source diffuse produisant des molécules de C_2 avec une autre température d'excitation dont la libération locale semble liée à la fragmentation de particules qui crée une population de grains plus petits que dans la coma environnante.

FIG. 15.1 – Image de la comète Hyakutake en lumière blanche (vitre BK7) obtenue le 31 mars 1996. La taille de l'image est 380×380 pixels ou $44\,460 \times 44\,460$ km. Le Nord est en haut, l'Est est à gauche. Le Soleil est dans la direction du coin inférieur droit de l'image. a) Le contraste est amélioré en multipliant l'image brute par une image virtuelle isotrope simulant une augmentation en $\rho^{0,8}$, ρ étant la distance au noyau. b) Profil dans la direction solaire (à droite) anti-solaire (à gauche). Des enveloppes sont apparentes dans la direction solaire. Deux condensations A et B peuvent être identifiées dans la direction anti-solaire. c) La soustraction de l'image tournée d'un angle de 2° rend meilleure la visibilité des condensations. d) Un filtre Laplacien appliqué à l'image brute permet de faire ressortir jets et enveloppes du côté du Soleil.

a)

file=/scratchh/celine/hyak1a.ps,angle=0,clip=,width=7truecm

file=/scratchh/celine/hyak1b.ps,angle=270,clip=,width=9truecm

c)

d)

file=/scratchh/celine/hyak2a.ps,angle=0,clip=,width=7truecm file=/scratchh/celine/hyak2b.ps,angle=180,clip=,width=7truecm

FIG. 15.2 – a) Image en fausses couleurs de la comète Hyakutake obtenue le 31 mars 1996 à travers un filtre à bande passante étroite ($\Delta\lambda = 2$ nm) centré sur 516 nm. L'intensité est la somme de l'émission de C₂ et du continuum à 516 nm. La taille de l'image est 380×380 pixels ou $44\,460 \times 44\,460$ km. Le Nord est en haut, l'Est est à gauche. Le Soleil est dans la direction du coin inférieur droit de l'image. Un arc est apparent à 2000 kilomètres du noyau dans la direction opposée au Soleil. b) Coupe dans la direction solaire (à droite) anti-solaire (à gauche).

a) C₂ + continuum, $\lambda = 516$ nm

file=/scratchh/celine/hyak4.ps,angle=180,clip=,width=7truecm

file=/scratchh/celine/hyak4b.ps,angle=270,clip=,width=9truecm

FIG. 15.3 – Partie centrale des images de la comète Hyakutake obtenues le 31 mars 1996. Les images sont en fausses couleurs. La taille des images est 380×380 pixels ou $44\,460 \times 44\,460$ km. Le Nord est en haut, l'Est est à gauche. Le Soleil est dans la direction du coin inférieur droit. Images du continuum a) dans la partie rouge à 682 nm et b) dans la partie visible à 527 nm ($\Delta\lambda = 5$ nm). Images dans l'émission de C₂, le continuum ayant été soustrait, dans les bandes c) (0,0) à 516 nm et d) (1,1) à 513 nm ($\Delta\lambda = 2$ nm).

a) continuum, $\lambda = 682$ nmb) continuum, $\lambda = 527$ nm

file=/scratchh/celine/hyak5a.ps,angle=180,clip=,width=7truecm file=/scratchh/celine/hyak5b.ps,angle=180,clip=,width=7truecm

c) C₂, $\lambda = 516$ nmd) C₂, $\lambda = 513$ nm

file=/scratchh/celine/hyak5c.ps,angle=180,clip=,width=7truecm file=/scratchh/celine/hyak5d.ps,angle=180,clip=,width=7truecm

FIG. 15.4 – a) Distribution 2D du rapport d’images obtenues le 30 mars 1996 dans l’émission de C_2 à 513 et 516 nm. La taille de l’image est égale à 200×200 pixels, soit $20\,400 \times 20\,400$ km. Le Nord est en haut, l’Est est à gauche. Le Soleil se trouve dans la direction du coin inférieur droit de l’image. b) Coupe dans la direction solaire (à droite) anti-solaire (à gauche). Elle est minimum au niveau du noyau et suit dans la direction solaire la courbe synthétique symétrique en forme de V représentée en pointillés. Dans la direction anti-solaire, la courbe présente un maximum à 1200 kilomètres du noyau puis un minimum secondaire à 2000 kilomètres du noyau, au niveau de l’arc en forme de croissant visible dans l’émission de C_2 .

a) b)

file=/scratchh/celine/hyak6a.ps,angle=180,clip=,width=7truecm
file=/scratchh/celine/hyak6b.ps,angle=270,clip=,width=9truecm

FIG. 15.5 – a) Distribution 2D du rapport des images obtenues le 30 mars 1996 dans le continuum à 682 et 527 nm et isocontours. La taille de l’image est égale à 200×200 pixels, soit $20\,400 \times 20\,400$ km. Le Nord est en haut, l’Est est à gauche. Le Soleil se trouve dans la direction du coin inférieur droit de l’image. b) Coupe dans la direction solaire anti-solaire. La couleur de la poussière est maximum au niveau du noyau et varie régulièrement dans la coma du côté du Soleil. Dans la direction anti-solaire, la couleur varie rapidement entre le noyau et la condensation A visible dans le continuum et présente un minimum à 1200 kilomètres du noyau.

a) b)

file=/scratchh/celine/hyak7a.ps,angle=180,clip=,width=7truecm
file=/scratchh/celine/hyak7b.ps,angle=270,clip=,width=9truecm

FIG. 15.6 – Coupe dans la direction solaire (à droite) anti-solaire (à gauche) des rapports d’intensité $I(513\text{nm})/I(516\text{nm})$ dans l’émission de C_2 (en gras) et $I(682\text{nm})/I(527\text{nm})$ dans le continuum. Au niveau du noyau, le rapport $I(513\text{nm})/I(516\text{nm})$ est minimum tandis que la couleur de la poussière présente un maximum. On a le phénomène inverse à 1200 kilomètres du noyau dans la direction anti-solaire. La lumière diffusée par la poussière est moins rouge, indiquant une distribution en taille des grains de poussière différente, et les molécules de C_2 sont dans un état d’excitation élevé, suggérant la présence d’une source diffuse de C_2 dans cette région.

file=/scratchh/celine/hyak8.ps,angle=270,clip=,width=12truecm

FIG. 15.7 – Variation du rapport d’intensité de l’émission de C_2 $I(513\text{nm})/I(516\text{nm})$ mesuré à partir de spectres obtenus le 24 mars 1996. La source diffuse de C_2 identifiée le 30 mars 1996 à 1200 kilomètres du noyau (Fig.??) est également présente le 24 mars à environ 300 kilomètres du noyau. La condensation A se trouverait à environ 700 kilomètres du noyau.

file=/scratchh/celine/hyak9.ps,angle=270,clip=,width=14truecm

FIG. 15.8 – Comparaison entre des spectres extraits de l’image spectrale de la comète Hyakutake obtenue le 24 mars 1996 à différentes distances cométocentriques et des spectres synthétiques calculés avec différentes températures d’excitation (ligne pointillée). a) Spectre mesuré au niveau du noyau et spectre calculé avec une température vibrationnelle $T_{vib} = 3000$ K et une température rotationnelle $T_{rot} = 2200$ K. b) Spectre mesuré à 2500 kilomètres du noyau dans la direction anti-solaire et spectre synthétique obtenu avec $T_{vib} = 3500$ K et $T_{rot} = 2600$ K. c) Spectre mesuré à 5100 kilomètres du noyau dans la direction anti-solaire et spectre synthétique obtenu avec $T_{vib} = 4500$ K et $T_{rot} = 3000$ K. d) Spectre mesuré à 5100 kilomètres du noyau dans la direction solaire et spectre synthétique obtenu avec $T_{vib} = 4500$ K et $T_{rot} = 3500$ K.

| | |
|--|--|
| a) | b) |
| file=/scratchh/celine/hyak10b.ps,angle=270,clip=,width=8truecm | file=/scratchh/celine/hyak10d.ps,angle=270,clip=,width=8truecm |
| longueur d’onde (nm) | longueur d’onde (nm) |
| c) | d) |
| file=/scratchh/celine/hyak10c.ps,angle=270,clip=,width=8truecm | file=/scratchh/celine/hyak10a.ps,angle=270,clip=,width=8truecm |
| longueur d’onde (nm) | longueur d’onde (nm) |

Chapitre 16

Comète Hale-Bopp

16.1 Introduction

La comète Hale-Bopp est apparue comme un objet très actif et très prometteur dès sa découverte fin juillet 1995. Elle se trouvait alors à 7 UA du Soleil et présentait déjà une activité, résultant de la sublimation du monoxyde de carbone CO et du dioxyde de carbone CO₂ comme le montrent la théorie (Zenzian96) et les observations (Biver98, Crovisier97), alors que la plupart des comètes ne deviennent actives qu'aux alentours de 3 UA lorsque la sublimation de l'eau débute. Elle s'est révélée par la suite être 20 fois plus productive en gaz et 100 à 200 fois en poussières que la comète de Halley (Schleicher98).

Un programme d'observation de la comète Hale-Bopp à l'Observatoire de Haute Provence a permis :

- d'étudier son évolution sur une longue période avant son passage au périhélie à 0,9 UA du Soleil le 1^{er} avril 1997,
- de rechercher la présence de sources étendues à l'aide d'images monochromatiques mesurant l'émission de C₂ et le continuum dû à la poussière.

16.2 Observations

La comète Hale-Bopp a été observée à l'Observatoire de Haute Provence à six époques différentes, en août, septembre et octobre 1996 et en février, mars et avril 1997. Elles s'étendent entre le moment où la sublimation de l'eau a débuté jusqu'au périhélie. Entre novembre 1996 et janvier 1997, la comète n'était pas observable, l'angle Soleil-Terre-comète étant trop faible.

Les observations ont été faites en spectro-imagerie avec le télescope de 120 cm. Les filtres utilisés permettent d'isoler les bandes d'émission de C₂ appelées bandes de Swan à 513 et 516 nm ($\Delta\lambda = 2$ nm) et de mesurer le continuum à 527 nm près des bandes de C₂ et dans le rouge à 682 nm ($\Delta\lambda = 5$ nm). Elles permettent d'étudier la morphologie de la coma et l'évolution de sa luminosité dans l'émission de C₂ et le continuum. Elles permettent aussi, en faisant le rapport d'images prises dans des filtres différents, de rechercher des sources étendues dans la coma où les molécules de C₂ sont produites avec une température d'excitation autre que celle des molécules C₂ créées par la photolyse de molécules issues du noyau. Les méthodes d'observation

sont détaillées dans le chapitre ??.

Le tableau ?? donne pour chaque date d'observation la distance héliocentrique (r), la distance géocentrique (Δ), la taille d'un pixel projetée au niveau de la comète, l'angle de position du rayon vecteur opposé au Soleil mesuré sur le ciel du Nord vers l'Est (PA) et le nom des étoiles utilisées pour la calibration en flux des images. La taille p d'un pixel projetée au niveau de la comète est :

$$p = \alpha \times \Delta$$

où α est le champ angulaire du pixel en radians ($\alpha = 0,67''$).

TAB. 16.1 – Observations de la comète Hale-Bopp à l'Observatoire de Haute Provence avec le télescope de 120 cm. r et Δ sont les distances héliocentriques et géocentriques respectivement. p est la taille d'un pixel au niveau de la comète. PA est l'angle de position de la comète.

| date | heure TU | r (UA) | Δ (UA) | p (km) | PA (°) | étoile standard |
|-----------------|-------------|-------------|------------------|-------------|-----------|--------------------|
| 13 août 96 | 20h40 | 3,44 | 2,75 | 1334 | 102,3 | HR7596 |
| 07 septembre 96 | 21h20 | 3,15 | 2,86 | 1388 | 95,2 | Feige110 |
| 09 octobre 96 | 19h30 | 2,78 | 3,02 | 1465 | 85,0 | Feige34 |
| 17 février 97 | 4h20 | 1,19 | 1,69 | 822 | 325,3 | Feige34 |
| 09 mars 97 | 4h30 | 1,00 | 1,38 | 672 | 337,7 | BD332642 |
| 06 avril 97 | 20h45 | 0,92 | 1,40 | 681 | 34,5 | HR153 |

16.3 Morphologie de la coma : jets et arcs

Les jets de poussière sont une marque d'activité qui est observée depuis très longtemps dans les comètes. Par contre, les jets de gaz ont été découverts récemment, lors du passage de la comète de Halley près de la Terre en 1986. Les jets de gaz et de poussière sont parfois corrélés (cf. chapitre ??, §??). La présence de jets est le résultat de l'activité du noyau déclenchée par l'exposition périodique de régions actives à la radiation solaire. Les particules des jets sont soumises à la pression de radiation solaire et prennent peu à peu la forme d'arcs.

16.3.1 Août, septembre, octobre 1996

Entre août et octobre 1996, la distance héliocentrique de la comète Hale-Bopp a diminué de 3,5 à 2,5 UA. À la distance de 3,5 UA du Soleil, la température de la surface du noyau devient suffisante pour que la sublimation des glaces d'eau débute. Durant cette période, la comète Hale-Bopp était déjà très active et des images prises avec des filtres dans l'émission de C₂ et dans le continuum révèlent une coma qui s'étend au-delà de 100 000 kilomètres du noyau. La contribution des émissions gazeuses semble relativement faible comparée à la lumière diffusée par la poussière permettant de classer la comète Hale-Bopp parmi les comètes poussiéreuses. Le

rapport des taux de production de la poussière Q_p et du gaz Q_g était effectivement environ égal à 8 (Lisse, 1997), soit dix fois supérieur à celui de la comète de Halley.

Des images de la comète Hale-Bopp prises en août, septembre et octobre 1996 sont présentées figure 16.1. Les images 16.1.a, b et c montrent la comète à travers un filtre qui laisse passer la lumière diffusée par les poussières à 527 nm. Les images 16.1.d, e et f montrent le même champ de vue à travers un filtre qui laisse passer l'émission de C_2 à 513 nm. Le continuum à cette longueur d'onde a été soustrait selon les équations 16.1 données chapitre 16. La taille des images est de 300×300 pixels, ce qui correspond à une distance projetée au niveau de la comète comprise entre 400 000 et 440 000 kilomètres selon la date d'observation. Toutes les images sont traitées de la même manière en utilisant un filtre Laplacien qui fait ressortir les structures dans la coma.

FIG. 16.1 – Images monochromatiques de la comète Hale-Bopp en août, septembre et octobre 1996, dans le continuum ($\lambda = 527$ nm) et dans l'émission de C_2 ($\lambda = 513$ nm). La taille de l'image est de 300×300 pixels, soit $200'' \times 200''$. Le Nord est en haut et l'Est à gauche. La direction du Soleil est indiquée par la lettre s. Un filtre Laplacien a été appliqué aux images pour faire ressortir les structures de la coma.

| | août 1996 | septembre 1996 | octobre 1996 |
|---|-----------|----------------|--------------|
| c | | | |
| o | | | |
| n | | | |
| t | | | |
| i | | | |
| n | | | |
| u | | | |
| u | | | |
| m | | | |

file=/scratchh/celine/hb1A.ps,width=15.3truecm,angle=0

C_2

Les structures caractéristiques présentes dans la coma sont des jets radiaux qui proviennent de plusieurs régions actives du noyau. Dans les images du continuum, les jets apparaissent de manière contrastée. On en distingue cinq, voire six, en septembre et octobre 1996. Ils s'étendent

jusqu'à une distance d'au moins 200 000 kilomètres du noyau. Dans l'émission de C_2 , les jets sont beaucoup moins contrastés, on peut en distinguer trois ou quatre en octobre 1996.

Cette géométrie caractéristique de la coma, baptisée structure en "étoile de mer" ou "porc-épic", s'est développée pendant l'année 1996. Malgré la rotation du noyau relativement rapide, estimée à $\simeq 11,5$ h (? ,)Lecacheux97, l'orientation des jets reste presque constante durant plusieurs mois tandis que seule leur intensité relative change au cours du temps.

16.3.2 Février, mars, avril 1997

Aussitôt que la comète Hale-Bopp fut à nouveau observable en janvier 1997, sa coma a présenté une morphologie très différente.

FIG. 16.2 – Images monochromatiques de la comète Hale-Bopp en février, mars et avril 1997, dans le continuum ($\lambda = 527$ nm), et dans l'émission de C_2 ($\lambda = 513$ nm). La taille de l'image est de 300×300 pixels soit $200'' \times 200''$. Le Nord est en haut et l'Est à gauche. La direction du Soleil est indiquée par la lettre s. Un filtre Laplacien a été appliqué aux images.

| | février 1997 | mars 1997 | avril 1997 |
|---|--------------|-----------|------------|
| c | | | |
| o | | | |
| n | | | |
| t | | | |
| i | | | |
| n | | | |
| u | | | |
| u | | | |
| m | | | |

file=/scratchh/celine/hb1B.ps,width=15.3truecm,angle=0

C_2

Les images ??a, b et c montrent la comète à travers un filtre qui laisse passer la lumière diffusée par les poussières à 527 nm et les images ??d, e et f montrent le même champ de vue à travers un filtre qui laisse passer l'émission de C_2 à 513 nm, le continuum à cette longueur

d'onde ayant été soustrait (cf. équations ??, chapitre ??). La taille des images est toujours de 300×300 pixels, ce qui correspond maintenant à une distance projetée au niveau de la comète comprise entre 200 000 et 250 000 kilomètres selon la date d'observation. Les images sont traitées en utilisant un filtre Laplacien qui améliore le contraste.

Une série d'arcs peut être observée dans le continuum et dans l'émission de C_2 du côté du Soleil. En février 1997, on devine encore une structure de jets radiaux, superposée aux arcs. En avril 1997, les arcs sont pratiquement concentriques, régulièrement espacés d'une distance environ égale à 15 000 kilomètres.

L'image de mars 1997 montre un arc important dans l'émission de C_2 à $\simeq 20\,000$ kilomètres du noyau dans la direction Nord, dans l'hémisphère opposé au Soleil. Un arc similaire a été observé par ?boehnhardt98 dans l'émission de CN. L'image d'avril 1997 montre aussi que l'émission de C_2 s'étend dans l'hémisphère opposé au Soleil. Contrairement aux arcs dans le continuum qui se trouvent principalement du côté du Soleil, une spirale qui se prolonge dans l'hémisphère opposé au Soleil est visible dans l'émission de C_2 à environ 60 000 kilomètres du noyau. De tels arcs, non corrélés à l'émission de poussières, ont aussi été observés dans les émissions gazeuses de OH, NH, CN et C_3 (? ,)leder98.

La comète Hale-Bopp a par la suite présenté une coma en forme d'étoile de mer, sans arc, ressemblant à celle observée pendant l'année 1996. L'évolution de la morphologie de la coma entre 1996 et 1997 est résumée dans le tableau ??.

TAB. 16.2 – Évolution de la morphologie de la coma de la comète Hale-Bopp entre 1996 et 1997. r et Δ sont les distances héliocentriques et géocentriques de la comète respectivement.

| époque | structures | r (UA) | Δ (UA) |
|-------------------|---------------------|--------------|------------------|
| 1996 | jets radiaux | $> 1,4$ | > 2 |
| février 1997 | jets radiaux + arcs | $\simeq 1,2$ | $\simeq 1,8$ |
| mars - avril 1997 | arcs | 0,9 - 1 | 1,3 - 1,7 |
| mai 1997 | jets radiaux + arcs | $\simeq 1,2$ | $\simeq 2$ |
| fin 1997 | jets radiaux | $> 1,4$ | $> 2,5$ |

?samarasinha98 ont montré par des simulations que cette évolution était en fait due à un effet de perspective. Il s'agirait de l'évolution naturelle pour un noyau en rotation rapide, comportant des zones actives, lorsque les distances héliocentriques r et géocentriques Δ varient. Les arcs sont formés par les mêmes régions actives qui passent dans l'hémisphère ensoleillé toutes les 11,5 heures environ. Lorsque r et Δ augmentent, la résolution spatiale est moins bonne et la séparation entre les arcs vue par l'observateur est plus faible. On ne peut alors plus distinguer les arcs et seules les parties les plus brillantes des arcs, au niveau des zones actives, sont visibles, donnant une structure de jets radiaux.

16.4 Évolution de la luminosité

Afin de mesurer l'augmentation de la luminosité de la comète Hale-Bopp pendant la période pré-périhélie, les images sont calibrées en flux à l'aide des observations d'étoiles standards (cf. équations ??, chapitre ??). La luminosité de la coma est intégrée sur des disques de rayons $\rho = 10\ 000, 30\ 000, 50\ 000$ et $100\ 000$ kilomètres, centrés sur le point le plus brillant, dans le continuum à 527 nm et dans l'émission de C₂ à 513 nm, le continuum ayant été soustrait suivant les équations ?? du chapitre ??.

La luminosité intégrée B varie en fonction de la distance au noyau ρ selon la relation suivante :

$$B(\rho) \propto \rho^\alpha,$$

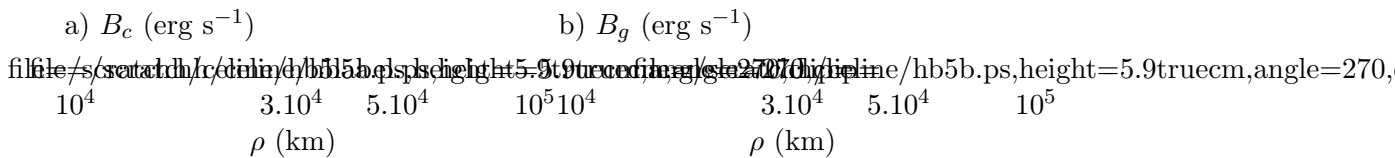
soit :

$$\log B(\rho) = \text{constante} + \alpha \times \log \rho.$$

La variation de B en fonction de ρ dans un diagramme log-log est représentée par une droite croissante de pente α .

La figure ??a représente la variation de la luminosité intégrée dans le continuum $B_c(\rho)$, pour ρ compris entre 10 000 et 100 000 kilomètres. B_c est calculée pour chaque période d'observation, *i.e.* pour des distances héliocentriques r comprises entre 0,92 et 3,44 UA.

FIG. 16.3 – Luminosité de la comète Hale-Bopp en fonction de la distance au noyau ρ pour différentes distances héliocentriques r avant le périhélie, a) dans le continuum à 527 nm et b) dans l'émission de C₂ à 513 nm. La luminosité est l'intensité intégrée sur la surface d'un disque de rayon $\rho = 10\ 000, 30\ 000, 50\ 000$ et $100\ 000$ kilomètres autour du noyau.



Pour chaque date d'observation, la variation $B_c(\rho)$ suit une droite de pente $\alpha = 1$. Dans le continuum, la variation de la luminosité $B_c(\rho)$ peut donc être interprétée par un modèle de flux libre (cf. équation ??). Dans un tel modèle, où les particules s'éloignent du noyau avec une vitesse radiale v , la luminosité $B_c(\rho, r)$ intégrée sur un disque de rayon ρ au niveau de la comète qui se trouve à la distance héliocentrique r est proportionnelle à ρ :

$$B_c(\rho, r) = \int_0^\rho \frac{Q(r)\pi a^2 \eta_{sca} S(a, \theta) 2\pi \rho'}{4v\rho'} d\rho' = \text{constante} \times \frac{Q(r)\rho}{v} \quad (16.1)$$

avec $Q(r)$ le taux de production des particules, a leur rayon moyen, η_{sca} leur efficacité de diffusion et $S(a, \theta)$ la fonction de phase, θ étant l'angle de diffusion (π - angle de phase).

La figure ??b représente la variation de la luminosité intégrée $B_g(\rho)$ dans l'émission gazeuse de C₂ pour ρ toujours compris entre 10 000 et 100 000 kilomètres, à différentes dates d'observation, *i.e.* pour différentes distances héliocentriques r . La luminosité $B_g(\rho)$ suit une droite

de pente α légèrement supérieure à 1, $1,12 < \alpha < 1,22$ suivant les dates d'observations. Ceci implique que des molécules C_2 sont produites peu à peu dans la coma par la photodissociation de molécules mères.

Nous pouvons aussi étudier la variation de la luminosité intégrée sur un disque de rayon ρ centré sur le noyau, en fonction de la distance héliocentrique r . La luminosité suit la loi :

$$B(r) \propto r^{-\beta}$$

soit :

$$\log B(r) = \text{constante} - \beta \times \log r.$$

La variation de B en fonction de r décroissant dans un diagramme log-log est représentée par une droite croissante de pente β .

La variation de la luminosité intégrée sur des disques de rayon $\rho = 10\,000, 30\,000$ et $100\,000$ kilomètres en fonction de la distance héliocentrique décroissante est représentée sur un graphe log-log dans la figure ?? dans le continuum (croix) et dans l'émission de C_2 (cercles).

FIG. 16.4 – Luminosité de la comète Hale-Bopp en fonction de la distance héliocentrique avant le périhélie dans le continuum à 527 nm (croix) et dans l'émission de C_2 à 513 nm (cercles). La luminosité est l'intensité intégrée sur la surface d'un disque centré sur le point le plus brillant de la coma interne, de rayon $\rho = 10\,000, 30\,000$ et $100\,000$ kilomètres.

$$\text{file=}/scratchh/celine/hb2.ps,width=14truecm,angle=-90,clip= \\ r \text{ (UA)}$$

À de larges distances héliocentriques, $r \gtrsim 3,2$ UA, les luminosités $B_c(r)$ de la lumière diffusée par la poussière et $B_g(r)$ de l'émission gazeuse de C_2 peuvent être décrites par une loi en $r^{-2,4}$ représentée dans le diagramme log-log par les droites en pointillés de pente $\beta = 2,4$.

Plus près du Soleil, $r \lesssim 1,1$ UA, l'activité de la comète devient plus grande, la production par le noyau de poussières et de molécules et la sublimation des grains et molécules sont plus grandes. Bien que la luminosité B ne donne pas directement le taux de production en gaz et en poussières, un changement dans l'activité se traduit par une augmentation plus rapide de la luminosité, soit par une plus forte pente des droites dans le diagramme log-log :

$$B_c(r) \propto r^{-6,8} \quad \text{et} \quad B_g(r) \propto r^{-6,1}.$$

Ainsi, un changement important dans le régime de l'activité de la comète est survenu entre octobre 1996 et février 1997. Le prolongement des lignes d'interpolation dans la figure ?? montre que ce changement a probablement eu lieu d'abord dans l'émission gazeuse de C_2 et quelques semaines plus tard dans le continuum.

16.5 Corrélation entre la couleur de la poussière et l'excitation des molécules de C_2

Le rapport $I(682\text{nm})/I(527\text{nm})$ de l'intensité du continuum à 682 et 527 nm donne la couleur de la poussière. Une variation dans la couleur de la poussière signifie une distribution en taille

des grains différente.

La figure ??a montre le rapport de deux images obtenues le 6 avril 1997 dans le continuum à 682 et 527 nm. Les arcs sont toujours visibles, espacés de 15 000 kilomètres environ. Une coupe dans la direction solaire anti-solaire est présentée figure ??c. Au niveau des arcs, le rapport $I(682\text{nm})/I(527\text{nm})$ est plus élevé que dans la coma environnante, signifiant que la couleur de la coma est plus “rouge”. Cette couleur différente indique un changement dans la distribution en taille des grains.

FIG. 16.5 – Variation en deux dimensions a) du paramètre couleur de la poussière ou rapport d’intensité $I(682\text{nm})/I(527\text{nm})$, b) du paramètre d’excitation de C_2 ou rapport $I(513\text{nm})/I(516\text{nm})$. La date d’observation est le 6 avril 1997. La taille de l’image est 200×200 pixels, soit $136\,000 \times 136\,000$ km. Le Nord est en haut, l’Est à gauche. La direction du Soleil est indiquée par la lettre s. c) Coupes dans la direction solaire (à droite) anti-solaire (à gauche) du paramètre couleur de la poussière et du paramètre d’excitation de C_2 (ligne pointillée).

a) $I(682\text{nm})/I(527\text{nm})$

b) $I(513\text{nm})/I(516\text{nm})$

file=/scratchh/celine/hb3.ps,width=13.5truecm,clip=

c)

file=/scratchh/celine/hb4.ps,width=13.5truecm,angle=270,clip=

Le degré d’excitation des molécules C_2 est fourni par le rapport $I(513\text{nm})/I(516\text{nm})$ des intensités aux longueurs d’onde des têtes des bandes de Swan (1,1) et (0,0). La visualisation du rapport d’images obtenues avec des filtres à 513 et 516 nm permet de localiser les différentes sources des molécules C_2 (cf. chapitre ??).

La figure ??b donne le rapport d’intensité $I(513\text{nm})/I(516\text{nm})$ de deux images obtenues en avril 1997 dans l’émission de C_2 à 513 et 516 nm. Le continuum à ces longueurs d’onde a d’abord été soustrait. L’image révèle également la présence d’arcs au niveau desquels le rapport $I(513\text{nm})/I(516\text{nm})$ est légèrement plus grand que dans la coma environnante. La coupe dans la direction solaire (à droite) anti-solaire (à gauche) présentée figure ??c (ligne pointillée) montre que le rapport a une forme générale en V, avec un minimum au niveau du noyau.

De tels profils dans le rapport d’intensité $I(513\text{nm})/I(516\text{nm})$ ont déjà été observés et analysés dans d’autres comètes telles que la comète de Halley (?,)rousselot94 et la comète Hyakutake (?,)laffont98pss par exemple. Ce profil est expliqué au chapitre ??. Il montre que la température d’excitation des molécules C_2 relâchées par le noyau augmente progressivement au fur et à mesure que les molécules s’en éloignent, jusqu’à ce que l’équilibre de fluorescence soit atteint, après une exposition d’environ 3000 secondes à la radiation solaire.

Au niveau des arcs, le rapport $I(513\text{nm})/I(516\text{nm})$ est plus élevé. Les molécules C_2 dans les arcs ont un degré d’excitation plus grand que les molécules environnantes créées par la photolyse de molécules parentes issues du noyau.

La superposition des coupes dans les deux paramètres, couleur de la poussière et degré d'excitation des molécules C_2 montre que les variations dans le rapport $I(513nm)/I(516nm)$ suivent les oscillations dues aux arcs dans le rapport $I(682nm)/I(527nm)$. L'observation d'une corrélation au niveau des arcs dans les deux paramètres suggère une production locale de molécules C_2 dans un état excité au niveau des arcs, probablement liée à la fragmentation de particules qui produit des grains de plus petite taille et libère du gaz contenant des molécules C_2 .

16.6 Conclusion

L'activité de la comète Hale-Bopp a considérablement augmenté entre octobre 1996 et février 1997. La morphologie de la coma a par ailleurs beaucoup évolué entre ces deux périodes : révélant d'abord une structure de jets radiaux, la coma a ensuite été caractérisée par la présence d'arcs concentriques observés dans l'hémisphère tourné vers le Soleil. Dans l'émission gazeuse de C_2 , ces arcs existent aussi mais ils s'étendent dans l'hémisphère opposé au Soleil.

L'étude du degré d'excitation des molécules C_2 et de la couleur de la poussière suggère que les particules de poussière dans les arcs pourraient être une source secondaire où les molécules C_2 sont libérées dans un état d'excitation plus élevé que les celles produites par la photolyse de molécules issues du noyau.

Chapitre 17

Conclusion

Les comètes Hyakutake et Hale-Bopp ont été deux objets exceptionnels, l'un par sa faible distance à la Terre, l'autre par sa grande activité.

Des algorithmes de traitement d'image ont permis de mettre en évidence différentes structures dans la coma :

- dans la comète Hyakutake, ce sont des jets de poussière dans l'hémisphère tourné vers le Soleil, deux condensations situées dans la direction anti-solaire à 2000 kilomètres (± 200 km) et 8000 kilomètres (± 200 km) du noyau le 31 mars 1996 et un arc en forme de croissant observé dans l'émission de C_2 à 2000 kilomètres du noyau entre le noyau et les condensations,
- dans la comète Hale-Bopp, il s'agit d'arcs de poussière observés dans l'hémisphère tourné vers le Soleil et des arcs dans l'émission de C_2 qui s'étendent dans l'hémisphère opposé au Soleil.

L'étude de deux paramètres, le rapport d'intensité des bandes (1,1) et (0,0) de C_2 à 513 nm et 516 nm et la couleur de la poussière, permet de rechercher la présence de sources étendues de C_2 . Le premier donne une mesure du degré d'excitation des molécules C_2 , le second caractérise la distribution en taille des grains de poussière. Ils ont révélé des sources étendues dans les deux comètes, dans lesquelles les molécules sont créées par la photolyse de molécules libérées localement par les grains de poussière et ont une température d'excitation différente de celle des molécules C_2 environnantes formées par la photolyse de molécules mères issues du noyau.

- dans la comète Hyakutake, la source étendue se situe entre le noyau et la première condensation. Elle est probablement liée à la libération par le noyau des amas de particules qui forment les condensations,
- dans la comète Hale-Bopp, il s'agit des arcs concentriques observés dans l'hémisphère tourné vers le Soleil.

La présence de sources étendues semble être un phénomène fréquent et pas seulement pour les molécules C_2 . Les premières sources étendues ont été mises en évidence dans la comète de Halley pour les molécules CO, H_2CO et C_2 . Dans la comète Hyakutake, des arcs en forme de croissant ont également été observés dans les émissions de CN, CH et OH (?,]harris97. Dans la comète Hale-Bopp, les molécules H_2CO , SO (?,]wink98, CH_3OH (?,]festou98, HNC (?,]irvine98, CO (?,]disanti98 et H_2O (cf. synthèse de ?combi98) semblent être produites en

partie par des sources étendues.

Ainsi, la libération de molécules mères dans une comète ne se fait pas seulement par le noyau mais aussi dans la coma plus externe, probablement par des grains de poussière.

Sixième partie
Conclusion générale

L'objet de ce travail a été d'apporter une contribution à la connaissance du milieu proche du noyau d'une comète. Les données analysées concernent la comète de Halley et les comètes Hyakutake (C/1996 B2) et Hale-Bopp (C/1995 O1).

Dans le cas de la comète de Halley, les spectres obtenus en mars 1986 par la sonde spatiale Vega 2 explorent la coma très proche du noyau, jusqu'à 421 kilomètres du noyau, avec une grande résolution spatiale. Dans les parties proche-ultraviolet et visible de ces spectres, des bandes d'émission apparaissent à moins de 3000 km du noyau. Certaines de ces bandes ont permis à ?moreels94 d'identifier le phénanthrène, molécule polycyclique aromatique, qui semble provenir de la poussière émise par le noyau.

Une bande située à 323 nm pose un problème d'identification. Elle est distincte de la bande de CO_2^+ à $\simeq 326$ nm et ne peut être expliquée par l'émission d'aucune molécule habituellement observée dans les comètes. Elle a aussi été détectée dans un spectre enregistré la veille de la rencontre entre la sonde Vega 2 et la comète à 350 000 kilomètres du noyau, suggérant que les molécules responsables de cette bande ont été libérées localement, probablement par des grains. Si cette bande présente un accord raisonnable avec les spectres d'une autre molécule polycyclique aromatique, le naphthalène, obtenus au laboratoire par ?beck81, une nouvelle expérience, permettant de mieux simuler les conditions d'excitation des molécules dans une coma, montre que le naphthalène ne peut être responsable de cette bande. Parmi les molécules polycycliques aromatiques ou leurs dérivés substitués, nous suggérons d'autres composés qui pourraient être responsables de cette bande.

Concernant la comète Hyakutake, nous avons pu disposer des dernières sessions d'observation avec le satellite IUE (*International ultraviolet explorer*) pour obtenir des spectres ultraviolets. Cette comète est passée relativement près de la Terre en mars 1996, à 15 millions de kilomètres ($\Delta = 0,1$ UA). Un des spectres, enregistré deux jours après le passage au périhélie de la comète, suggère la présence possible de bandes de fluorescence de S_2 , avec une abondance inférieure à 0,01 % par rapport à l'eau. Cette détection a été confirmée cinq jours plus tard par des observations avec le satellite HST (*Hubble space telescope*), l'abondance dérivée de ces observations étant de 0,008 % (? ,)weaver96acm.

Il s'agit de la seconde comète qui révèle la présence de la molécule de soufre, la première étant la comète IRAS-Araki-Alcock qui est passée à cinq millions de kilomètres de la Terre en 1983 ($\Delta = 0,032$ UA). Une grande résolution spatiale et donc une faible distance géocentrique Δ sont nécessaires pour détecter la molécule de soufre car elle a une durée de vie très courte, de l'ordre de 250 secondes pour une molécule située à 1 UA du Soleil, et est confinée dans la coma la plus interne. Bien que les spectres de la comète de Halley obtenus *in-situ* aient une bonne résolution spatiale, S_2 ne se manifeste pas, soit parce qu'il n'est pas un composé du noyau de la comète de Halley, soit parce qu'il s'y trouve en quantité trop faible pour être détecté, soit enfin parce qu'il est totalement dissocié dans la région très proche du noyau.

Afin de faire cette étude, un modèle de fluorescence de S_2 en fonction du temps d'exposition des molécules au rayonnement solaire a été élaboré. La comparaison avec le spectre de la comète IRAS-Araki-Alcock, qui a permis la première détection de S_2 dans une comète, montre que les molécules de soufre atteignent un état très proche de l'équilibre de fluorescence avant d'être dissociées par les photons solaires. Cette situation est probablement commune aux comètes in-

trinsèquement peu actives, telles que la comète Hyakutake, dans lesquelles la densité de la coma interne n'est pas trop grande et les collisions ne ralentissent pas le mécanisme de fluorescence.

L'étude de l'émission de C_2 dans les comètes Hyakutake et Hale-Bopp a été réalisée à l'aide d'un programme d'observation dans le domaine visible à l'observatoire de Haute Provence soit en spectroscopie dans le mode fente longue, soit en spectro-imagerie avec des filtres interférentiels à bande passante étroite. L'observation de l'évolution relative des bandes de Swan (1,1) et (0,0) de la séquence $\Delta v = 0$ permet de mettre en évidence des sources étendues dans la coma en identifiant les régions où C_2 est produit avec une température d'excitation différente de celle des molécules C_2 formées par la photolyse de molécules issues du noyau. La mesure de la couleur du rayonnement diffusé par les particules de poussière permet de caractériser la distribution en taille des particules et de rechercher une corrélation entre les processus qui modifie cette distribution, tels que la fragmentation, et la présence de sources étendues. Des sources étendues sont présentes dans la coma des deux comètes et sont probablement liées à la libération locale de molécules mères par les grains de poussière. Les sources étendues semblent exister fréquemment dans les comètes et peuvent expliquer la distribution de nombreuses molécules telles que CH, CN, OH, CO, SO, etc.

La comète Hale-Bopp ayant été observable pendant presque deux ans, son évolution à long terme a pu être suivie. Nous avons effectué des observations sur une période de neuf mois avant le passage au périhélie de la comète. Les luminosités de l'émission de C_2 et de la lumière diffusée par la poussière ont considérablement augmenté entre octobre 1996 et février 1997.

Ce travail entrepris peut être poursuivi dans différentes directions :

- Dans la comète de Halley, la bande à 323 nm n'est toujours pas identifiée. Étant donné que les molécules polycycliques aromatiques (PAH) sont un constituant du milieu interstellaire et que les comètes ont été formées par accréation de matière interstellaire, nous proposons des PAH comme candidats envisageables pour cette bande. Ce sont par exemple le méthylnaphtalène et le fluorène qui, d'après les spectres en phase liquide, émettent dans une région spectrale proche de 323 nm. Cependant, les spectres en phase liquide et gazeuse peuvent être très différents et il est nécessaire d'obtenir des spectres de fluorescence dans des conditions proches de celles du milieu cométaire : molécules en phase gazeuse, refroidies à de basses températures dans un régime sans collision. Dans cette recherche, il faut aussi tenir compte de l'absorption du rayonnement ultraviolet dans la coma interne qui peut empêcher ou diminuer l'excitation de molécules. On peut citer SO_2 comme un absorbant ultraviolet éventuel.
- Le modèle de fluorescence de S_2 qui a été développé n'est pas complet car il ne considère pas les niveaux rotationnels de la molécule. Cependant l'algorithme actuel peut être adapté à un calcul plus précis qui inclut les transitions rovibrationnelles. Les effets dus aux collisions dans la coma interne et l'épaisseur optique UV peuvent aussi être envisagés. Ce modèle étant très général, il peut être appliqué au calcul du spectre de fluorescence d'autres molécules diatomiques. On peut citer des observations du radical CH dans différentes régions de la coma de la comète Hale-Bopp qu'il serait intéressant de modéliser afin d'en étudier les conditions d'excitation. Ce modèle peut également calculer des spectres d'absorption et pourrait permettre une comparaison avec les spectres de S_2 observés lors de

l'impact de la comète Shoemaker-Levy 9 avec Jupiter.

- Les observations des bandes de Swan de C_2 permettent d'étudier le degré d'excitation des molécules et de mettre en évidence des sources étendues dans la coma. Elles peuvent se faire soit en spectroscopie dans le mode fente longue, soit en spectro-imagerie avec des filtres à bande spectrale étroite. Un tel programme d'étude peut être appliqué à toutes comètes. Par ailleurs, il serait intéressant d'élaborer, comme dans le cas des composés du soufre, un schéma où apparaissent les composés du carbone détectés dans les comètes. Il peut être construit grâce au modèle physico-chimique de la coma mis au point par Huebner91.

Les observations *in-situ* de la comète de Halley et celles des comètes brillantes Hyakutake et Hale-Bopp ont permis de progresser dans la connaissance de la composition des glaces et poussières cométaires. Cependant, nous ignorons encore de nombreux aspects relatifs à la structure des noyaux cométaires et aux propriétés physique du milieu cométaire. Plusieurs missions spatiales apporteront des réponses au début du XXI^e siècle, comme notamment la sonde spatiale Rosetta de l'Agence spatiale européenne qui ira explorer le noyau de la comète Wirtanen.

Chapitre 18

Modèle de fluorescence du système $B - X$ de S_2 : transitions rovibrationnelles

18.1 Longueurs d'onde des transitions

On considère 27 niveaux vibrationnels dans l'état électronique fondamental $X^3\Sigma_g^-$ et 10 dans l'état excité $B^3\Sigma_u^-$. v est le nombre quantique associé à un niveau vibrationnel et J est celui associé à un niveau rotationnel.

L'énergie (en cm^{-1}) de vibration-rotation d'un niveau rovibrationnel vJ est la somme des énergies d'un oscillateur anharmonique et d'un rotateur non rigide :

$$\begin{aligned} E_{vJ} &= T_e + \omega_e\left(v + \frac{1}{2}\right) - \omega_e x_e\left(v + \frac{1}{2}\right)^2 + \omega_e y_e\left(v + \frac{1}{2}\right)^3 + \dots \\ &+ B_v J(J+1) - D_v J^2(J+1)^2 + \dots \end{aligned} \quad (18.1)$$

où T_e est l'énergie de l'état électronique $B^3\Sigma_u^-$, B_v est la constante de rotation du niveau vibrationnel v et D_v représente l'influence de la force centrifuge. B_v et D_v s'expriment en fonction de la constante de rotation à l'équilibre B_e :

$$\begin{aligned} B_v &= B_e - \alpha_e\left(v + \frac{1}{2}\right) \\ D_v &= \frac{4B_e^3}{\omega_e^2} \end{aligned}$$

On néglige les termes $\omega_e y_e\left(v + \frac{1}{2}\right)^3$ de l'énergie de l'oscillateur et $D_v J^2(J+1)^2$ du rotateur qui sont très faibles.

Les constantes T_e , ω_e , $\omega_e x_e$, B_e et α_e sont données par Herzberg⁸⁹ et reportées dans la table ??.

TAB. 18.1 – Constantes de l'oscillateur anharmonique et du rotateur non rigide pour le système $B - X$ de la molécule S_2 . (? ,])herzberg89.

| État électronique | T_e (cm^{-1}) | ω_e | $\omega_e x_e$ | B_e | α_e |
|----------------------|------------------------|------------|----------------|--------|------------|
| $B^3\Sigma_u^-$ | 31835 | 434,00 | 2,750 | 0,2219 | 0,0018 |
| $X^3\Sigma_g^-$ | 0 | 725,68 | 2,852 | 0,2956 | 0,0016 |

L'énergie $E_{v'J',v''J''}$ de la transition entre le niveau rovibrationnel $v''J''$ de l'état électronique fondamental X et le niveau rovibrationnel $v'J'$ de l'état électronique B est :

$$E_{v'J',v''J''} = E_{v'J'} - E_{v''J''}$$

correspondant à la longueur d'onde $\lambda_{v'J',v''J''}$ (en nm) :

$$\lambda_{v'J',v''J''} = \frac{10^7}{E_{v'J',v''J''}}$$

18.2 Probabilités de transition

Probabilités d'émission

La probabilité d'émission $P_{v'J',v''J''}$ entre le niveau rovibrationnel $v'J'$ de l'état électronique excité B et le niveau $v''J''$ de l'état fondamental X est égale au coefficient d'Einstein d'émission spontanée $A_{v'J',v''J''}$:

$$\begin{aligned} P_{v'J',v''J''} &= A_{v'J',v''J''} \\ &= \frac{64\pi^4 E_{v'J',v''J''}^3}{3h} R_e^2 q_{v'v''} \frac{S_{J'J''}}{2J' + 1} \end{aligned} \quad (18.2)$$

où h est la constante de Planck, R_e^2 est le moment de transition électronique, constant sur tout le système $B - X$, $q_{v'v''}$ est la probabilité de transition vibrationnelle (ou facteur de Franck-Condon), calculée par ?anderson79 pour le système $B - X$ de S_2 et $S_{J'J''}$ est le facteur de Hönl-London, donné au paragraphe ??.

Probabilités d'absorption

La probabilité d'absorption $P_{v''J'',v'J'}$ entre le niveau rovibrationnel $v''J''$ de l'état fondamental X et le niveau $v'J'$ de l'état électronique B est le produit du coefficient d'Einstein d'absorption $B_{v''J'',v'J'}$ par la densité de radiation solaire $\rho_{v''J'',v'J'}$ (en $erg\ s\ cm^{-3}$) à la longueur

d'onde $\lambda_{v'J',v''J''}$ de la transition :

$$\begin{aligned} P_{v''J'',v'J'} &= B_{v''J'',v'J'} \times \rho_{v''J'',v'J'} \\ &= \frac{g_{v'J'}}{g_{v''J''}} \times \frac{A_{v'J',v''J''}}{8\pi h E_{v'J',v''J''}^3} \times \rho_{v''J'',v'J'} \end{aligned}$$

où $g_{v'J'}$ et $g_{v''J''}$ sont les dégénérescences des niveaux $v'J'$ et $v''J''$ respectivement, données au paragraphe ??.

18.3 Règles de sélection

Les règles de sélection pour les transitions sont :

- $\Delta J = J' - J'' = 1$, il s'agit de la branche R ,
- $\Delta J = J' - J'' = 0$, branche Q ,
- $\Delta J = J' - J'' = -1$, branche P .

Lorsque $\Delta\Lambda = 0$ (cas du système $B - X$ de S_2 où les états électroniques sont tous deux des états Σ), les facteurs de Hönl-London sont (Herzberg 1939) :

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{J',J''}^R &= k \times \frac{(J' + \Lambda')(J' - \Lambda')}{J'} \\ \mathcal{S}_{J',J''}^Q &= k \times \frac{(2J' + 1)\Lambda'^2}{J'(J' + 1)} \\ \mathcal{S}_{J',J''}^P &= k \times \frac{(J' + 1 + \Lambda')(J' + 1 - \Lambda')}{J' + 1} \end{aligned}$$

où k est un facteur de normalisation tel que :

$$\sum_{J'} \mathcal{S}_{J',J''} = (2 - \delta_{0,\Lambda'+\Lambda''})(2S + 1)(2J' + 1) \quad (18.3)$$

Λ' et Λ'' sont les nombres quantiques associés au moment cinétique des états électroniques B et X respectivement, δ est le symbole de Kronecker, S est le nombre quantique associé au spin électronique et $(2S + 1)$ est la multiplicité du niveau électronique.

Dans le cas du système $B^3\Sigma_u^- - X^3\Sigma_g^-$ de S_2 , il s'agit de transitions entre deux états Σ triplets. On a :

- $\Lambda' = 0$ et $\Lambda'' = 0$,
- $2S + 1 = 3$.

L'équation ?? devient :

$$\sum_{J'} \mathcal{S}_{J',J''} = 3(2J' + 1)$$

et les facteurs de Hönl-London sont :

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{J',J''}^R &= 3J' \\ \mathcal{S}_{J',J''}^Q &= 0 \\ \mathcal{S}_{J',J''}^P &= 3(J' + 1) \end{aligned}$$

Les transitions $\Delta J = 0$ sont interdites et la branche Q n'existe pas. Par conséquent, la bande origine correspondant à la transition $v'0 \rightarrow v''0$ n'apparaît pas.

18.4 Dégénérescence des niveaux rovibrationnels

Dans le cas particulier des molécules diatomiques homonucléaires, les niveaux rotationnels sont soit symétriques, soit antisymétriques.

Pour l'état $X^3\Sigma_g^-$ (état *gerade* -), les niveaux symétriques sont les niveaux positifs, ou encore les niveaux impairs.

Pour l'état $B^3\Sigma_u^-$ (état *ungerade* -), les niveaux symétriques sont les niveaux négatifs, ou encore les niveaux pairs.

Les dégénérescences g_s et g_a des niveaux symétriques et antisymétriques respectivement sont :

$$\begin{aligned} g_s &= (2J + 1)(2I + 1)(I + 1) \\ g_a &= (2J + 1)(2I + 1)I \end{aligned}$$

où J est le nombre quantique rotationnel et I est le spin nucléaire. Il est égal à 0 pour la molécule S_2 (? ,]herzberg89. Les dégénérescences sont alors :

$$\begin{aligned} g_s &= (2J + 1) \\ g_a &= 0 \end{aligned}$$

Les niveaux antisymétriques ne sont pas peuplés et seules les transitions entre les niveaux $v'J'$, J' pair et $v''J''$, J'' impair sont permises.

En résumé :

$$\begin{aligned} g_{v'J'} &= 0 && \text{si } J' \text{ impair} \\ &= 2J' + 1 && \text{si } J' \text{ pair} \\ g_{v''J''} &= 0 && \text{si } J'' \text{ pair} \\ &= 2J'' + 1 && \text{si } J'' \text{ impair} \end{aligned}$$

18.5 Population initiale

On suppose que la population initiale, à $t = 0$, suit la distribution de Boltzmann. La température cinétique initiale est celle de la surface d'un noyau cométaire à 1 UA du Soleil : $T \simeq 200$ K. À une si faible température, les niveaux vibrationnels v' de l'état électronique excité B ne sont pas peuplés : $n_{v'J'} = 0$.

La population relative du niveau $v''J''$ est donnée par l'équation suivante :

$$n_{v''J''} = n_{00} \times (2J'' + 1) e^{-E_{v''J'',00} \frac{hc}{kT}}$$

où k est la constante de Boltzmann, $E_{v'',J'',00}$ est l'énergie du niveau rovibrationnel $v''J''$ par rapport au niveau rovibrationnel fondamental ($v'' = 0, J'' = 0$) et n_{00} est la population du niveau fondamental.

D'après l'équation ?? :

$$E_{v'',J'',00} = \omega_e v'' - \left[\omega_e x_e \left(v'' + \frac{1}{2} \right)^2 - \frac{1}{4} \right] + B_{v''} J'' (J'' + 1)$$

et d'après l'équation de conservation :

$$\begin{aligned} \sum_{v'',J''} n_{v'',J''} &= 1 \\ \sum_{v'',J''} n_{00} \times (2J'' + 1) e^{-E_{v'',J'',00} \frac{hc}{kT}} &= 1 \end{aligned}$$

soit :

$$n_{00} = \frac{1}{\sum_{v'',J''} (2J'' + 1) e^{-E_{v'',J'',00} \frac{hc}{kT}}}$$

À la température de 200 K, plus de 99 % des molécules sont initialement dans l'état $v'' = 0$. La répartition des populations sur les niveaux rotationnels J'' d'un niveau vibrationnel v'' donné suit une loi en :

$$(2J'' + 1) e^{B_{v''} J'' (J'' + 1) \frac{hc}{kT}}$$

qui est maximum pour le niveau rotationnel :

$$J'' = \sqrt{\frac{kT}{2hcB_{v''}}} - \frac{1}{2} = 15$$

18.6 Population des niveaux vibrationnels

La population n_i d'un niveau rovibrationnel i à un temps t est obtenue en résolvant l'équation différentielle :

$$\dot{n}_i = -n_i \sum_j P_{ij} + \sum_j n_j P_{ji}$$

La probabilité de transition P_{ij} entre les niveaux i et j est soit A_{ij} en émission soit $B_{ij} \rho_{ij}$ en absorption.

La méthode de résolution de cette équation est la même que dans le cas d'un calcul de spectre de fluorescence où seules les transitions vibrationnelles sont considérées. Elle est expliquée dans la partie ?? de ce manuscrit.

18.7 Intensité des raies d'émission

$n_{v'J'}$ étant la population relative du niveau $v'J'$ de l'état électronique B , l'intensité de la raie d'émission à la longueur d'onde $\lambda_{v'J',v''J''}$ correspondant à la transition vibrationnelle $v'J' \rightarrow v''J''$ est donnée par l'équation suivante :

$$I_{v'J',v''J''} = n_{v'J'} \times A_{v'J',v''J''} \times hcE_{v'J',v''J''}$$

L'intensité $I_{v'J',v''J''}$ s'exprime en $\text{erg s}^{-1} \text{ molec}^{-1}$.

Chapitre 19

Résumé étendu en anglais : extended abstract

Study of gaseous emissions in the inner comæ of the three H-Comets : Halley, Hyakutake and Hale-Bopp

During these last fifteen years, three comets allowed us to improve our knowledge of the cometary medium :

- Comet P/Halley that has been studied *in-situ* by several interplanetary probes, the condition of its crossing with the Earth orbite in March 1986 being well known in advance,
- Comet Hyakutake C/1996 B2 that closely approached the Earth, at 15 millions kilometres, in March 1996 and allowed ground-based observations with high spatial resolution,
- Comet Hale-Bopp C/1995 O1 that showed an important activity because of a large nucleus (its radius is 20 to 40 kilometres) and high gas and dust productions (20 and 100 to 200 times the production rates of Comet P/Halley respectively).

Previous to the *in-situ* study of Comet P/Halley, several problems were still non-resolved concerning the nature and composition of the nucleus and its surface.

The present work contributes to increase our knowledge of the molecules that are in the coma and of the mechanisms that take place in it. It comprises a modeling part, an experimental part and an observations and analysis part.

In the case of Comet P/Halley, we analyse some spectra obtained in March 1986 with the tri-canal spectrometer (TKS) of the Vega 2 mission, partly designed and built at the Observatoire de Besançon. The spectra measured the coma emissions very close to the nucleus with a high spatial resolution. During the encounter, the Vega 2 probe was 8000 kilometres away from the nucleus and the projected distance between the sight axis of the spectrometer and the nucleus was only 421 kilometres. In the near-UV and optical parts of the spectra, several emission bands appear at distances from the nucleus lower than 3000 kilometres. Some of these bands were attributed to a polycyclic aromatic hydrocarbon (PAH), the phenanthrene C₁₄H₁₀ (? ,]moreels94. This molecule seems not to be directly produced by the nucleus but by the dust.

Another band, centered on 323 nm, brings up an identification problem. It cannot be ex-

plained by any molecule usually observed in comets. This emission seems to have been detected in other comets from ground-based observations. Moreover, it has been detected on one TKS spectrum the day before the encounter at 350 000 kilometres from the nucleus, suggesting that the molecules responsible for this emission were locally released by a diffuse source, probably composed by grains.

Because PAH are a compound of the interstellar medium and comets are made from interstellar matter, and because a PAH was found in the TKS spectra of Comet P/Halley, we searched for a PAH to be the carrier of this unidentified band. Spectra in the liquid phase suggested that the naphthalene, $C_{10}H_8$, could be a candidate. We made an experiment at the Laboratoire de Photophysique Moléculaire d'Orsay to obtain fluorescence spectra of naphthalene under conditions that provide valuable simulation of the cometary situation, *i.e.* super-cooled gas phase molecules in a collision-free regime. The naphthalene molecules are cooled in a supersonic free jet and excited by lasers. The experiment allowed to measure the fluorescence lifetimes and fluorescence quantum-yields Q_{fl} of naphthalene for different excitation wavelengths λ_{exc} . We obtain $Q_{fl} = 45\%$ for $\lambda_{exc} = 299$ nm, 12% for $\lambda_{exc} = 293$ nm and 10% for $\lambda_{exc} = 289$ and 275 nm.

The excitation conditions we used allowed us to synthesize a spectrum that simulates the fluorescence emission of molecules excited by the solar radiation. The spectrum obtained is a large band centered on 350 nm, in the same spectral region as the phenanthrene bands (see Fig.??, page ??). It is then difficult to say that the naphthalene is a compound of Comet P/Halley nucleus or not. Maybe the naphthalene emission is superimposed to the phenanthrene emissions, but its intensity would be very weak, suggesting that the naphthalene molecules are less abundant than phenanthrene molecules.

The naphthalene cannot explain the emission band observed at 323 nm. We still have to search for the molecule responsible of this emission. We should remember that PAHs constitute a “family” in the interstellar medium. Several PAHs or derivatives have not been studied in gas phase. For instance, we can mention the methylnaphthalene and the fluorene that both emit around 323 nm in liquid phase and can be candidates for this band.

Comet Hyakutake closely approached the Earth in March 1996. It was the second closest approach after Comet IRAS-Araki-Alcock that came less than 5 millions kilometres from the Earth in May 1983. Such comets give the opportunity to obtain observations from the ground or Earth-bound satellite with a high spatial resolution and to investigate the inner coma. A small geocentric distance and a high spatial resolution are two conditions to detect molecules that are liberated by the nucleus and have a short lifetime in the solar radiation field. S_2 , having a lifetime of 250 seconds, is concentrated in the inner coma and has been observed in these two comets only.

We disposed of some of the last observing runs with the IUE satellite (*International ultraviolet explorer*) to obtain ultraviolet spectra of the comet. The spectral region recorded by the satellite coincides with the region where S_2 molecules emit and allows us to search for S_2 emission bands.

In order to make this study, we elaborated a time-dependent fluorescence model of S_2 . It gives a spectrum at anytime after the molecule was released by the nucleus. It shows that the molecules reach the steady-state in 600 seconds. However, the model spectrum obtained after 200 seconds closely is very close to the steady-state spectrum.

The comparison between our synthetic spectrum and the IUE spectra of Comet IRAS-

Araki-Alcock in which S₂ was discovered shows that the molecules are close to the steady-state. This is compatible with a lifetime of 250 seconds. We derived an abundance of 0.07 % relative to water.

In comets with a relatively low density in the inner coma, such as comets IRAS-Araki-Alcock and Hyakutake, the collisions in the inner coma do not slow down the fluorescence process. Consequently, the molecules have time to reach a state close to the steady-state before being photodissociated. Thus, we compare the steady-state spectrum with IUE spectra of Comet Hyakutake obtained in February and March 1996. This comparison suggests that the observed and calculated spectra may be correlated in the case of a spectrum having a time exposure of one hour, obtained two days after the closest approach of the comet to the Earth (see Fig??, page ??). We derived an upper limit to the abundance of 0.01 % relative to water. This detection was confirmed five days later by observations with the satellite HST (*Hubble space telescope*) that has a larger telescope than the IUE telescope. The abundance derived from these observations was 0.008 % relative to water.

TKS spectra of Comet P/Halley have also a high enough spatial resolution to allow the detection of S₂ molecules. This comet having a higher dust to gas ratio, we compared the TKS spectra with synthetic spectra calculated for different times after the release of the molecule by the nucleus. However, the comparison suggests that S₂ is not a compound of Comet Halley's nucleus, or a very low-abundant compound, or that it is totally photodissociated in the inner coma, within 421 kilometres.

The close approach of Comet Hyakutake and the exceptional activity of Comet Hale-Bopp allowed us to make interesting ground-based optical observations at the Observatoire de Haute Provence. The aim of these observations was the study of the C₂ emission. In the optical part of the spectrum, the Swan bands of C₂ are some of the most intense and they are observed since the beginning of the cometary spectroscopy. However, the parent molecules of C₂ still remain unknown.

Different image processing revealed several structures in the comæ. In Comet Hyakutake, there are dust jets in the solar side, two condensations in the anti-solar side, situated at 2000 kilometres (± 200 km) and 8000 kilometres (± 200 km) from the nucleus on 31 March 1996 (see Fig.??, ??), and a crescent-shape arc present in the C₂ emission at a cometocentric distance of 2000 kilometres in the anti-solar direction (see Fig.??, ??). The geometry of the condensations, that remained several weeks aligned in the tail of the comet, suggest that they are not solid fragments of the nucleus but dust particle clusters that are released from the nucleus. In Comet Hale-Bopp, the structures observed are dust arcs regularly spaced ($\simeq 15\,000$ km) in the sunward hemisphere and C₂ arcs that extend in the nightside hemisphere and are not correlated with the dust emission (see Fig.??, ??).

Our program was based on long-slit spectrometry and narrow-band filter imagery. Two filters are used to isolate the wavelengths corresponding to the C₂ (1,1) and (0,0) bandheads at 513 and 516 nm ($\Delta\lambda = 2$ nm). Two filters are used to measure the dust continuum close to the C₂ bands at 527 nm and in the red part of the spectrum at 682 nm ($\Delta\lambda = 5$ nm). The I(513nm)/I(516nm) intensity ratio is a parameter that gives the degree of excitation of the C₂ molecules. The I(682nm)/I(527nm) intensity ratio gives the dust color and characterizes the size distribution of the particles of dust. It can reveal some processes that change the size distribution like

fragmentation. The study of these two parameters can reveal the presence of diffuse sources where the C_2 molecules are directly produced by the photolysis of molecules released locally by dust particles. These C_2 molecules have a higher excitation degree than the molecules in the surrounding coma produced by the photolysis of molecules released by the nucleus. Diffuse sources are revealed in both comæ. In Comet Hyakutake, it is between the nucleus and the crescent-shape arc observed in the C_2 emission. This source is probably linked to the liberation of the dust clusters that form the condensations. In Comet Hale-Bopp, the diffuse source is the concentric arcs in the sunward hemisphere. Diffuse sources seem to be frequently observed in comets and can explain the distribution of several gas emission like CH, CN, OH, CO, SO, etc.

We observed Comet Hale-Bopp on a long period before perihelion. The study of its luminosity shows that the activity considerably increased between October 1996 and February 1997. The change in the activity regime probably occurred first in the gas and several weeks later in the dust.

This work should initiate further research :

- In Comet P/Halley, the 323 nm band emission is still unidentified. Some polycyclic aromatic hydrocarbons could be candidates but gas phase fluorescence spectra have to be obtained in laboratory conditions that simulate the cometary environment.

- The fluorescence model of S_2 is not complete. We have neglected the rotational levels in the computations. However, the actual model can be adapted to a more accurate calculation where the rovibrational transitions are taken into account. The role of collisions and the UV optical depth in the inner coma are neglected too. Their importance on the scale length of S_2 should be investigated. This time-dependent model is very general. It could be applied to the S_2 observations in Jupiter atmosphere during the Shoemaker-Levy 9 impact. It can also be used to calculate spectra of other diatomic molecules. CH was observed in different part of Comet Hale-Bopp and would be interesting to modelize in order to study CH excitation conditions.

- The observation program of the Swan bands of C_2 that allows to search for diffuse sources in the coma can be applied to many comets. Moreover, it would be interesting to elaborate a scheme that gives all the carbon-based species involved in the coma. Such a scheme can be constructed with a gas dynamics model (Huebner 1991).

In-situ observations of Comet P/Halley and observations of the bright comets Hyakutake and Hale-Bopp allowed to have a better understanding of the cometary medium. However, numerous problems will remain non-resolved at least before the spatial probe Rosetta explores the nucleus of Comet Wirtanen.

Chapitre 20

Principales publications

C. Laffont, D. C Boice, G. Moreels, J. Clairemidi, P. Rousselot et H. Andernach :
“Tentative identification of S₂ in the IUE spectra of Comet Hyakutake (C/1996 B2)”,
Geophys. Res. Lett., **25(14)**, p. 2749-2752, 1998.

C. Laffont, P. Rousselot, J. Clairemidi et G. Moreels :
“Condensations and diffuse source of C₂ in Comet Hyakutake C/1996 B2”,
Planet. Space Sci., **46(5)**, p. 585-601, 1998.

C. Laffont, P. Rousselot, J. Clairemidi, G. Morrels et D. C. Boice :
“Jets and arcs in Comet Hale-Bopp from August 1996 to October 1997”,
soumis à *Earth, Moon and Planets*.

Bibliographie

- A'Hearn, M. F., P. D. Feldman et D. G. Schleicher : 1983a, "The discovery of S₂ in Comet IRAS-Araki-Alcock 1983d," *Astrophys. J., Lett.*, **274**, 99–103.
- A'Hearn, M. F., J. T. Ohlmacher et D. G. Schleicher : 1983b, "A high resolution solar atlas for fluorescence calculations," Rap. tech. TR-AP83-044, University of Maryland, Dept. of Physics and Astronomy.
- A'Hearn, M. F., S. Hoban, P. V. Birch, C. Bowers, R. Martin et Klinglesmith III : 1986, "Cyanogen jets in Comet P/Halley," *Nature*, **324**, 649–651.
- Allamandola, L. J., A. G. G. M. Tielens et J. R. Barker : 1989, "Interstellar polycyclic aromatic hydrocarbons : the infrared emission bands. The excitation/emission mechanism, and the astrophysical implications," *Astrophys. J., Suppl. Ser.*, **71**, 773–775.
- Anderson, W. R., D. R. Crosley et J. E. Jr. Allen : 1979, "Frank-Condon factors for the B – X system of S₂," *J. Chem. Phys.*, **71(2)**, 821–829.
- Arago, F. : 1858, *Les comètes, Astronomie Populaire*, vol. XVII, Paris.
- Beck, S. M., J. B. Hopkins, D. E. Powers et R. E. Smalley : 1981, "Jet-cooled naphthalene. II. Single vibronic level fluorescence spectra," *J. Chem. Phys.*, **74(1)**, 43–52.
- Beck, S. M., D. E. Powers, J. B. Hopkins et R. E. Smalley : 1980, "Jet-cooled naphthalene. I. Absorption spectra and line profiles," *J. Chem. Phys.*, **73(5)**, 2019–2027.
- Beddard, G. S., S. J. Formosinho et G. Porter : 1973, "Pressure effects on the fluorescence from naphthalene vapour," *Chem. Phys. Lett.*, **22(2)**, 235–238.
- Behlen, F. M. et S. A. Rice : 1981, "Intersystem crossing in cold isolated molecules of naphthalene," *J. Chem. Phys.*, **75(12)**, 5672–5684.
- Berlman, I. B. : 1965, *Handbook of fluorescence spectra of aromatic molecules*, Academic Press.
- Biver, N., D. Bockelée-Morvan, P. Colom, J. Crovisier, B. Germain, E. Lellouch, J. K. Davies, W. R. F. Dent, R. Moreno, G. Paubert, J. Wink, D. Despois, D. C. Lis, D. Mehringer, D. Benford, M. Gardner, T. G. Phillips, M. Gunnarsson, H. Rickman, P. Bergman, L. E. B. Johansson, A. Winnberg et H. Rauer : 1998, "Long-term evolution of the outgassing of Comet Hale-Bopp from radio observations," *First International Conference on Comet Hale-Bopp, Tenerife, Espagne*, p. 20.
- Bobrovnikoff, N. T. : 1931, "Halley's comet in its apparition of 1909-1911," *Public. Lick Observatory*, **17**, 305–482.

- Bockelée-Morvan, D., P. Colom, N. Biver, J. Crovisier, E. Gérard, H. Rauer, D. Despois, A. Dutrey, M. Grewing, S. Guilloteau, R. Lucas, R. Neri, G. Paubert, R. Moreno et J. Wink : 1996, "Molecular observations of Comet C/1996 B2 Hyakutake with the IRAM telescopes," *ACM96 Cospar Colloquium 10, Versailles, France*, p. 46.
- Bockelée-Morvan, D., J. Wink, D. Despois, N. Biver, P. Colom, J. Crovisier, E. Gérard, B. Germain, E. Lellouch, R. Moreno, G. Paubert, J. K. Davies, W. R. F. Dent et H. Rauer : 1997, "Molecular observations of C/1995 O1 (Hale-Bopp) with the IRAM telescopes near perihelion : interferometric maps and new parent molecules," *Bull. Am. Astron. Soc., DPS meeting, #37-03*, **29(3)**, 1047.
- Bockelée-Morvan, D., J. Wink, D. Despois, N. Biver, P. Colom, J. Crovisier, E. Gérard, E. Lellouch, L. Jorda : 1998, "Interferometric imaging of molecular lines in comet Hale-Bopp," *Bull. Am. Astron. Soc., DPS meeting, #31-02*, **30(3)**, 1071.
- Boehnhardt, H., K. Birkle, F. Colas, A. Fiedler, L. Jorda, S. Peschke, H. Rauer, R. Schulz, G. Schwehm, N. Thomas, G. Tozzi et R. West : 1998, "Dust morphology of Comet Hale-Bopp (C/1995 O1) in 1996 and 1997 : I. pre- and post-perihelion coma structures," *First International Conference on Comet Hale-Bopp, Tenerife, Espagne*, p. 80.
- Boehnhardt, H. et L. Kohoutek : 1992, "Jets in the coma of P/Halley in mid-april 1986," *Icarus*, **99**, 106–114.
- Boice, D. C. et J. Benkhoff : 1996, "A dusty coma model of Comet Hyakutake," *Bull. Am. Astron. Soc., DPS meeting, #09-36*, **28(3)**, 1095.
- Brooke, T. Y., A. T. Tokunaga, H. A. Weaver, J. Crovisier et D. Bockelée-Morvan : 1996, "Detection of acetylene and other molecules from infrared spectroscopy of Comet C/1996 B2 (Hyakutake)," *ACM96 Cospar Colloquium 10, Versailles, France*, p. 29.
- Budzien, S. A. et P. D. Feldman : 1992, "Upper limits to the S₂ abundance in several comets observed with the International Ultraviolet Explorer," *Icarus*, **99**, 143–152.
- Chauvin, P. : 1987, "Halley, au rendez-vous de la comète," Rap. tech. ISBN-2-222-040728, CNRS.
- Clairemidi, J., G. Moreels et V. A. Krasnopolsky : 1990, "Gaseous CN, C₂ and C₃ jets in the inner coma of Comet P/Halley observed from the Vega 2 spacecraft," *Icarus*, **86**, 115–128.
- Cochran, A. L., D. C. Boice, E. S. Barker et C. Laffont : 1998, "The behavior of carbon-based molecules in the coma of Comet Hale-Bopp," *First International Conference on Comet Hale-Bopp, Tenerife, Espagne*, p. 48.
- Cochran, W. D., C. R. O'Dell, C. O. Miller, A. L. Cochran, C. B. Opal, D. Valk et E. S. Barker : 1990, "The near ultraviolet spectra of comets P/Brorsen-Metcalf and Austin," dans *Observations of recent comets*, édité par W. F. Huebner, J. Rahe, P. A. Wehinger et I. Konno, p. 50–54, Albuquerque, New Mexico.
- Combi, M. R. : 1987, "Sources of cometary radicals and their jets : gases or grains," *Icarus*, **71**, 178–191.
- Combi, M. R. : 1998, "Dust-gas interrelations in comets : observations and theory," *First International Conference on Comet Hale-Bopp, Tenerife, Espagne*, p. 83.

- Cosmovici, C. B., S. F. Green, D. W. Hughes, H. U. Keller, P. Mack, F. Moreno-Insertis et H. U. Schmidt : 1986, "Groundbased CCD-observations of Comet Halley with the Giotto-HMC-filters," *Proc. 20th ESLAB Symposium*, ESA SP-250 II, 375–379.
- Crovisier, J. et D. Bockelée-Morvan : 1993, "Infrared and radio spectroscopy of comets : recent results and new problems," dans *Physical Chemistry of Molecules and Grains in Space*, p. 10–113, Mont Sainte-Odile, France.
- Crovisier, J., K. Leech, D. Bockelée-Morvan, T. Y. Brooke, M. S. Hanner, B. Altieri, H. Uwe Keller et E. Lellouch : 1997, "The spectrum of Comet Hale-Bopp (C/1995 O1) observed with the Infrared Space Observatory at 2.9 astronomical units from the sun," *Science*, **275**, 1909–1912.
- de Almeida, A. A. et P. D. Singh : 1986, "Photodissociation lifetime of $^{32}\text{S}_2$ molecule in comets," *Earth, Moon, Planets*, **36**, 117–125.
- DiSanti, M. A., M. J. Mumma, N. Dello Russo, K. Magee-Sauer, T. Rettig et R. Novak : 1998, "Infrared spectroscopy of CO emission in C/1995 O1 Hale-Bopp at the NASA-Infrared Telescope Facility," *First International Conference on Comet Hale-Bopp, Tenerife, Espagne*, p. 85.
- Divine, N., H. Fechtig, T. I. Gombosi, M. S. Hanner, K. U. Keller, S. M. Larson, D. A. Mendis, R. L. Jr. Newburn, R. Reinhard, Z. Sekanina et D. K. Yeomans : 1986, "The Comet Halley dust and gaz environment," *Space Sci. Rev.*, **43**, 1–104.
- Encrenaz, T., L. d'Hendecourt et J.-L. Puget : 1988, "The interpretation of the 3.2-3.5 μm emission feature in the spectrum of Comet P/Halley : abundances in the comet and interstellar matter," *Astron. Astrophys.*, **207**, 162–173.
- Enzian, A., H. Cabot et J. Kinger : 1996, "A multi-dimensional thermodynamical model of comet nuclei," *ACM 96 Cospar Colloquium 10, Versailles, France*, p. 67.
- Feldman, P. D. : 1991, *Comets in the Post-Halley Era*, vol. 1, chap. Ultraviolet spectroscopy of cometary comae, édité par R. L. Jr. Newburn et al., Kluwer Academic, p. 139–148.
- Feldman, P. D., M. F. A'Hearn, M. C. Festou, L. A. McFadden, H. A. Weaver et T. N. Woods : 1986, "Is CO_2^+ responsible for the outbursts of Comet Halley?" *Nature*, **324**, L433–L436.
- Fernandez, Y. R., C. M. Lisse, A. Kundu, M. F. A'Hearn, W. F. Hoffmann et A. Dayal : 1996, "The nucleus of Comet Hyakutake (C/1996 B2)," *Bull. Am. Astron. Soc., DPS meeting, #09-04*, **28(3)**, 1088.
- M. C. Festou, M. C., M. Womack, S. A. Stern et J. Mangum : 1998, "The linewidths of molecular emissions of Comet C/1995 O1 (Hale-Bopp)," *First International Conference on Comet Hale-Bopp, Tenerife, Espagne*, p. 26.
- Gear, C. W. : 1971, *Numerical initial value problems in ordinary differential equations*, Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey.
- Goidet-Devel, B. : 1994, *Polarisation et intensité du rayonnement diffusé par la surface des astéroïdes et la poussière des comètes*, Thèse de doctorat, Université Paris 6.
- Goidet-Devel, B., J. Clairemidi, G. Moreels et P. Rousselot : 1996, "A fragmentation model of dust grains in the inner coma of Halley. A possible explanation of the color effect," dans *Physics, Chemistry and Dynamics of interplanetary dust, Astron. Soc. Pacif. Conf. Series*, édité par B. Gustafson et M. Hanner, vol. 104, p. 387–394.

- Gredel, R., E. F. VanDishoeck et J. H. Black : 1989, "Fluorescent vibration-rotation excitation of cometary C_2 ," *Astrophys. J.*, **338**, 1047–1070.
- Haken, M., M. F. A'Hearn, H. Andernach, P. D. Feldman et M. Festou : 1996, "IUE observations of Comet 1996 B2 Hyakutake," *ACM96 Cospar Colloquium 10, Versailles, France*, p. 37.
- Hall, L. M., T. F. Hunter et M. G. Stock : 1976, "Absolute fluorescence quantum yields for vapour-phase benzene and naphthalene, and comments on the non radiative processes," *Chem. Phys. Lett.*, **44(1)**, 145–149.
- Harris, W. M., M. R. Combi, R. K. Honeycutt, B. E. A. Mueller et F. Scherb : 1997, "Evidence for interacting gas flows and an extended volatile source distribution in the coma of Comet C/1996 B2 (Hyakutake)," *Science*, **277**, 676–681.
- Haser, L. : 1957, "Distribution d'intensité dans la tête d'une comète," *Académie royale de Belgique, Bull. classe des Sciences*, **43**, 740–750.
- Hermine, P. : 1994, *Étude de molécules aromatiques polycycliques en jet supersonique par fluorescence induite par laser et applications astrophysiques*, Thèse de doctorat, Université Paris-Sud, centre d'Orsay.
- Herzberg, G. : 1989, *Molecular Spectra and Molecular Structure. Volume I- Spectra of Diatomic Molecules*, Krieger publishing company, Malabar, Florida, USA.
- Hsieh, J. C., C.-S. Huang et E. C. Lim : 1974, "Radiationless singlet deactivation in isolated large molecules. I. Naphthalene, naphthol, and naphthylamine," *J. Chem. Phys.*, **60(11)**, 4345–4353.
- Huebner, W. F., D. C. Boice, H. U. Schmidt et R. Wegmann : 1991, *Comets in the Post-Halley Era*, vol. 2, chap. Structure of the coma : chemistry and solar wind interaction, édité par R. L. Jr. Newburn et al., Kluwer Academic, p. 907–936.
- Irvine, W. M., F. P. Schloerb, J. E. Dickens, A. J. Lovell, M. C. Senay, E. A. Bergin, H. E. Matthews et D. Jewitt : 1998, "The HNC/HCN ratio in comets," *First International Conference on Comet Hale-Bopp, Tenerife, Espagne*, p. 43.
- Jackson, W. M., V. M. Blunt, H. Lin, M. Green, O. Sorkhabi, G. Olivera et W. H. Fink : 1996, "Can experiment and theory provide enough information on the photodissociation of C_2H for cometary science?" *ACM 96 Cospar Colloquium 10, Versailles, France*, p. 55.
- Joblin, C., P. Boissel et P. de Parseval : 1997, "Polycyclic aromatic hydrocarbon lifetime in cometary environments," *Planet. Space Sci.*, **45(12)**, 1539–1542.
- Kim, S. J., M. F. A'Hearn et S. M. Larson : 1990, "Multi-cycle fluorescence : application to S_2 in Comet IRAS-Araki-Alcock 1983VII," *Icarus*, **87**, 440–451.
- Kim, S. J., D. Bockelée-Morvan, J. Crovisier et N. Biver : 1998, "Fluorescence and collisional processes of SO and SO_2 in Comet Hale-Bopp (C/1995 01)," *First International Conference on Comet Hale-Bopp, Tenerife, Espagne*, p. 43.
- Kiselev, N. N., K. Jockers et M. Kuppers : 1993, "Spectra of Comet Swift-Tuttle 1992t obtained with the twin spectrograph at the 3.5 m telescope at Calar Alto Observatory," communication personnelle.
- Krishna-Swamy, K. S. et M. K. Wallis : 1987, "Sulphur compounds in cometary IUE spectra," *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, **228**, 305–312.

- Laffont, C., D. C. Boice, G. Moreels, J. Clairemidi, P. Rousselot et H. Andernach : 1998a, "Tentative identification of S₂ in the IUE spectra of Comet Hyakutake (C/1996 B2)," *Geophys. Res. Lett.*, **25(14)**, 2749–2752.
- Laffont, C., P. Rousselot, J. Clairemidi et G. Moreels : 1998b, "Condensations and diffuse source of C₂ in Comet Hyakutake C/1996 B2," *Planet. Space Sci.*, **46(5)**, 585–601.
- Larson, S. M. et Z. Sekanina : 1984, "Coma morphology and dust-emission pattern of periodic Comet Halley. I High-resolution images taken at Mount Wilson in 1910," *Astron. J.*, **89(4)**, 571–578.
- Lecacheux, J., L. Jorda, A. Enzian, J. Klinger, F. Colas, E. Frappa et P. Laques : 1996, "Comet C/1996 B2 (Hyakutake)," *Circulaire IAU*, (**6354**).
- Lecacheux, J., L. Jorda et F. Colas : 1997, "Comet C/1995 O1 (Hale-Bopp)," *Circulaire IAU*, (**6560**).
- Lederer, S. M., D. J. Osip, H. Campins et D. G. Schleicher : 1998, "Gas jets in Comet Hale-Bopp (1995 O1)," *First International Conference on Comet Hale-Bopp, Tenerife, Espagne*, p. 85.
- Léger, A. et J.-L. Puget : 1984, "Identification of the unidentified IR emission features of interstellar dust?" *Astron. Astrophys.*, **137**, L5–L8.
- Lien, D. : 1996, "Evidence for ice cubes in comets : the dust "spike" of Comet 1996 B2 (Hyakutake)," *Bull. Am. Astron. Soc., DPS meeting, #09-06*, **28(3)**, 1089.
- Lim, E. C. et J. O. Uy : 1972, "Excitation energy and deuteration dependence of fluorescence in naphthalene vapor," *J. Chem. Phys.*, **56(7)**, 3374–3377.
- Lis, D., D. Mehringer, D. Benford, M. Gardner, T. G. Phillips, D. Bockelée-Morvan, N. Biver, P. Colom, J. Crovisier, E. Gérard, D. Gautier, D. Despois et H. Rauer : 1997, "New molecular species in Comet C/1995 O1 (Hale-Bopp) observed with the Caltech Submillimeter Observatory," *Bull. Am. Astron. Soc., DPS meeting, #37-02*, **29(3)**, 1046.
- Lisse, C. M., Y. R. Fernández, M. F. A'Hearn, T. Kostiuik, T. A. Livengood, H. U. Kaufl, W. F. Hoffmann, A. Dayal, L. K. Deutsch, G. G. Fazio, J. L. Hora, M. S. Hanner et M. Ressler : 1997, "Infrared observations of the dust emitted by Comet Hale-Bopp," *Bull. Am. Astron. Soc., DPS meeting, #32-05*, **29(3)**, 1034.
- Massey, P., K. Strobel, J. V. Barnes et E. Anderson : 1988, "Spectrophotometric standards," *Astrophys. J.*, **328**, 315–333.
- McFadden, L. A., M. F. A'Hearn, P. D. Feldman, H. Bohnhardt, J. Rahe, M. Festou, J. C. Brandt, S. P. Maran, M. B. Niedner, A. M. Smith et D. G. Schleicher : 1987, "Ultraviolet spectrophotometry of Comet Giacobini-Zinner during the ICE encounter," *Icarus*, **69**, 329–337.
- Moore, M. H., B. Donn et R. L. Hudson : 1988, "Vaporization of ices containing S₂ - Implications for comets," *Icarus*, **74**, 399–412.
- Moreels, G., J. Clairemidi, P. Hermine, P. Bréchnignac et P. Rousselot : 1994, "Detection of a polycyclic aromatic molecule in Comet P/Halley," *Astron. Astrophys.*, **282**, 643–656.
- Mount, G. H. et G. J. Rottman : 1981, "The solar spectral irradiance 1200-3184 Å near solar maximum : July 15, 1980," *J. Geophys. Res.*, **86(A11)**, 9193–9198.

- Mumma, M. J., M. A. di Santi, X. Xie, M. Fomenkova et K. Magee-Sauer : 1996, "Discovery of abundant ethane and methane in C/1996 B2 Hyakutake; implications for cometary and interstellar organic chemistry," *ACM96 Cospar Colloquium 10, Versailles, France*, p. 38.
- Nature : 1986, "Encounters with Comet Halley. The first results," vol. 321, n° 6067.
- Neckel, H. et D. Labs : 1984, "The solar radiation between 3300 and 12500 Å," *Sol. Phys.*, **90**, 205–258.
- Noll, K. S., M. A. McGrath, L. M. Trafton, S. K. Atreya, J. J. Caldwell, H. A. Weaver, R. V. Yelle, C. Barnet et S. Edgington : 1995, "HST spectroscopic observations of Jupiter after the collision of Comet Shoemaker-Levy 9," *Science*, **267**, 1307–1313.
- O'Dell, C. R., R. R. Robinson, K. S. Krishna-Swamy, P. J. McCarthy et H. Spinrad : 1988, "C₂ in Comet Halley : evidence for its being third generation and resolution of the vibrational population discrepancy," *Astrophys. J.*, **334**, 476–488.
- O'Dell, C. R., C. O. Miller, A. L. Cochran, W. D. Cochran, C. B. Opal et E. S. Barker : 1991, "New ultraviolet spectroscopic features found in Comet Brorsen-Metcalf (1989o)," *Astrophys. J.*, **368**, 616–621.
- Oke, J. B. : 1990, "Faint spectrophotometric standard stars," *Astron. J.*, **99(5)**, 1621–1631.
- Oort, J. H. : 1950, "The structure of the cloud of comets surrounding the solar system, and a hypothesis concerning its origin," *Bull. Astron. Inst. Netherlands*, **XI(408)**, 91–110.
- Quick, C. R. Jr. et R. E. Jr. Weston : 1981, "Fluorescence excitation spectra, lifetimes, and quenching of S₂(B³Σ_u⁻) in the wavelength region 280-315 nm," *J. Chem. Phys.*, **74(9)**, 4951–4959.
- Rettig, T. W., M. J. Mumma, G. J. Sobczak, J. M. Hahn et M. di Santi : 1996, "The nature of Shoemaker-Levy 9 subnuclei from analysis of preimpact Hubble Space Telescope images," *J. Geophys. Res.*, **101(E4)**, 9271–9281.
- Ricks, J. M. et R. F. Barrow : 1969, *Can. J. Phys.*, **47**, 2423.
- Rodionov, A. V., L. Jorda, G. H. Jones, J. F. Crifo, F. Colas et J. Lecacheux : 1998, "Comet Hyakutake gas arcs : first observational evidence of standing shock waves in a cometary coma," *Icarus*, **136**, 232–267.
- Rottman, G. J., T. N. Woods et T. P. Sparn : 1993, "Solar stellar irradiance comparison experiment : instrument design and operation," *J. Geophys. Res.*, **98**, 10,667–10,678.
- Rousselot, P. : 1993, *Analyse de spectres de la comète de Halley obtenus le 9 mars 1986 par le spectromètre TKS : étude de la distribution de OH et modélisation du spectre d'émission de C₂ en fonction du temps*, Thèse de doctorat, Université Paris 6.
- Rousselot, P., J. Clairemidi et G. Moreels : 1994, "Evolution of the C₂ spectrum in Halley's inner coma : evidence for a diffuse source," *Astron. Astrophys.*, **286**, 645–653.
- Sagan, C., B. N. Khare, W. R. Thompson et G. D. McDonald : 1993, "Polycyclic aromatic hydrocarbons in the atmospheres of Titan and Jupiter," *Astrophys. J.*, **414**, 399–405.
- Samarasinha, N. H., B. E. A. Mueller et M. J. S. Belton : 1998, "An analysis of the structure and evolution of coma morphology of Comet Hale-Bopp," *First International Conference on Comet Hale-Bopp, Tenerife, Espagne*, p. 15.

- Saxena, P. P. et A. Misra : 1995, "On the source of sulfur dimers in the innermost coma of Comet Halley," *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, **272**, 89–95.
- Schleicher, D. G., T. L. Farnham et P. V. Birch : 1998, "Post-perihelion observations of Comet Hale-Bopp (1995 O1)," *First International Conference on Comet Hale-Bopp, Tenerife, Espagne*, p. 18.
- Schulz, R., M. F. A'Hearn et N. H. Samarasinha : 1993, "On the formation and evolution of gaseous structures in comet P/Halley," *Icarus*, **103**, 319–328.
- Sekanina, Z. : 1982, *Comets*, chap. The problem of split comets in review, p. 251–287, University of Arizona Press.
- Sorkhabi, O., V. M. Blunt, W. M. Jackson, M. F. A'Hearn, C. Arpigny, P. D. Feldman et H. A. Weaver : 1996, "Tentative identification of ultraviolet fluorescence from C_2H_2 , C_2N_2 , and $C_2(X^1\Sigma_g^+ \leftarrow D^1\Sigma_u^+)$," *ACM96 Cospar Colloquium 10, Versailles, France*, p. 38.
- Stockburger, M., H. Gattermann et W. Klusman : 1975, "Spectroscopic studies on naphthalene in the vapor phase. II. Fluorescence quantum yields from single vibronic levels in the first excited singlet state - behavior of higher excited singlet states," *J. Chem. Phys.*, **63(10)**, 4529–4540.
- Suto, M., X. Wang, J. Shan et L. C. Lee : 1992, "Quantitative photoabsorption and fluorescence spectroscopy of benzene, naphthalene, and some derivatives at 106–295 nm," *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, **48(1)**, 79–89.
- Valk, J. H., C. R. O'Dell, A. L. Cochran, W. D. Cochran, C. B. Opal et E. S. Barker : 1992, "Near-ultraviolet spectroscopy of Comet Austin (1989 cl)," *Astrophys. J.*, **338**, 621–632.
- Vanysek, V., B. Valnicek et J. Sudova : 1988, "Flux ratio of C_2 Swan bands in the innermost atmosphere of Comet Halley," *Nature*, **333**, 435.
- Vanysek, V. : 1993, "On a possible mechanism for production of S_2 from comets," dans *Molecules and grains in space, AIP conference proceedings 312, Mont Sainte-Odile, France*, édité par I. Nenner, p. 247–253.
- Weaver, H. A., P. D. Feldman, M. F. A'Hearn, C. Arpigny, J. C. Brandt et C. E. Randall : 1996a, "An HST spectroscopic and imaging investigation of Comet Hyakutake (C/1996 B2)," *Bull. Am. Astron. Soc., DPS meeting, #62.01*, **28(2)**, 925.
- Weaver, H. A., P. D. Feldman, J. B. McPhate, M. F. A'Hearn, C. Arpigny, J. C. Brandt et C. E. Randall : 1996b, "Ultraviolet spectroscopy and optical imaging of Comet Hyakutake (1996 B2) with HST," *ACM96 Cospar Colloquium 10, Versailles, France*, p. 37.
- Wink, J., D. Bockelée-Morvan, D. Despois, P. Colom, N. Biver, J. Crovisier, E. Gérard, E. Lellouch, J. K. Davies, W. R. F. Dent et L. Jorda : 1998, "Evidences for extended sources and temporal modulations in molecular observations of C/1995 O1 (Hale-Bopp) at IRAM interferometer," *First International Conference on Comet Hale-Bopp, Tenerife, Espagne*, p. 84.
- Woodney, L. M., M. F. A'Hearn, R. Meier, D. Wellnitz, D. G. Schleicher et J. McMullin : 1996, "Multiwavelength spectroscopy of C/1996 B2 (Hyakutake)," *Bull. Am. Astron. Soc., DPS meeting, #62.13*, **28(2)**, 928.
- Woodney, L., J. McMullin, M. A'Hearn et N. Samarasinha : 1997, "Comet C/1995 O1 (Hale-Bopp)," *Circulaire IAU*, (**6607**).

- Wootten, A., B. Butler, D. Bockelée-Morvan, J. Crovisier, D. Despois, P. Palmer et D. Yeomans : 1996, "Detection of ammonia in Comet C/1996 B2 Hyakutake," *ACM96 Cospar Colloquium 10, Versailles, France*, p. 39.
- Yelle, R. V. et M. A. McGrath : 1996, "Ultraviolet spectroscopy of the SL9 impact sites. I. The 175-230 nm region," *Icarus*, **119**, 90–111.
- Yeomans, D. K. : 1996, "Orbit and ephemeris updates for Comet 1996 B2 Hyakutake," data on the world wide web network.

Liste des tableaux

Liste des figures