



-----  
UNIVERSITÉ DE LIÈGE – FACULTÉ DES SCIENCES  
Collège de Doctorat en Sciences Spatiales  
-----

## THÈSE

En vue de l'obtention du titre de

**Docteur en Sciences**  
de l'Université de Liège  
Spécialité : Sciences Spatiales

---

Présentée par **Alice DECOCK**

soutenue publiquement à l'Université de Liège  
le 7 novembre 2014

# ÉTUDE DES PRODUITS DE DISSOCIATION DE H<sub>2</sub>O DANS UN ÉCHANTILLON DE COMÈTES D'ORIGINES VARIÉES

dirigée par Dr. Emmanuel JEHIN

---

### Jury de thèse

Pr. Marc-Antoine DUPRET	Président du Jury, Université de Liège, <i>Belgique</i>
Dr. Dominique BOCKELÉE-MORVAN	Observatoire de Paris-Meudon, <i>France</i>
Dr. Johan DE KEYSER	Institut d'Aéronomie Spatiale de Belgique, <i>Belgique</i>
Dr. Olivier HAINAUT	European Southern Observatory, <i>Allemagne</i>
Dr. Benoît HUBERT	Université de Liège, <i>Belgique</i>
Dr. Damien HUTSEMÉKERS	Université de Liège, <i>Belgique</i>
Pr. Philippe ROUSSELOT	Observatoire de Besançon, <i>France</i>
Dr. Emmanuel JEHIN	Promoteur, Université de Liège, <i>Belgique</i>

---

### Unité de recherche

Département d'Astrophysique, de Géophysique et d'Océanographie – Université de Liège



## Résumé

---

Les comètes sont connues pour contenir de grandes quantités d'eau et des molécules organiques en tout genre. Formées lors de la naissance de notre Système Solaire, il y a 4.6 milliards d'années, elles n'ont ensuite pas beaucoup évolué, ce qui les rend témoins potentiels des processus physico-chimiques présents à cette période. L'étude des comètes permet donc d'en apprendre davantage sur leur propre nature encore potentiellement énigmatique, mais également sur notre Système Solaire lui-même, et tout particulièrement sa genèse. La mission européenne Rosetta, en orbite autour de la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko témoigne de l'intérêt porté à ces petits corps gelés du Système Solaire. Cette mission est unique puisqu'elle va permettre pour la première fois de mesurer la composition chimique précise d'un noyau cométaire. Ce type de mission est par contre très coûteux et ne concerne qu'une comète en particulier. Avec des télescopes au sol, il est possible d'étudier un nombre plus important de comètes. Certes, le noyau n'est dans ce cas pas directement atteignable, mais la spectroscopie permet d'analyser l'atmosphère de la comète. Formée par la sublimation des glaces du noyau et la dissociation des molécules qui s'en échappent, la coma contient de nombreuses informations nous permettant d'accroître nos connaissances sur la composition chimique du noyau.

L'objectif de cette thèse est l'étude des molécules liées à l'eau dans les comètes. Les glaces cométaires renferment en effet 80% d'eau. Etudier cette molécule est donc crucial pour définir la nature des comètes et comprendre les conditions physiques et chimiques régnant dans la coma. Toutefois,  $H_2O$  n'est pas détectable dans le domaine de longueur d'onde visible. Sur base d'un ensemble de données spectroscopiques visibles acquises depuis le sol, nous proposons dans cette thèse l'analyse de deux produits de dissociation de la molécule d'eau observables dans l'atmosphère de la comète, l'oxygène atomique et le radical OH.

Le premier volet de ce travail se concentre sur les trois raies interdites de l'oxygène localisées à 5577.339 Å pour la raie verte ( $O(^1S)$ ) et à 6300.304 Å et 6363.776 Å ( $O(^1D)$ ) pour les raies du doublet rouge en vue de déterminer la ou les molécules parentes à l'origine de ces atomes. Dans cette optique, nous avons créé un spectre synthétique de la molécule de  $C_2$  afin de décontaminer la raie verte des raies dues au  $C_2$ . Ensuite, nous avons mesuré les rapports d'intensité et les largeurs intrinsèques des trois raies d'oxygène pour des comètes situées à différentes distances héliocentriques. La comparaison du rapport de l'intensité de la raie verte sur la somme des intensités des raies rouges (rapport G/R) avec les taux d'excitation fournis par la théorie montre que  $H_2O$  est la molécule parente principale des atomes d'oxygène lorsque la comète est observée à  $r \sim 1$  ua. Par contre, lorsque la comète est loin du Soleil ( $>2.5$  ua), les molécules de  $CO_2$  contribuent également à la production d'oxygène. La mesure des largeurs intrinsèques des raies montre que la raie verte est plus large que les raies rouges alors que la théorie prédit l'inverse. Découle de cette observation que la raie verte pourrait principalement provenir de la photodissociation du  $CO_2$  alors que

les raies rouges seraient uniquement formées via H<sub>2</sub>O.

En étudiant les raies d'oxygène à différentes distances du noyau cométaire, nous réalisons que la molécule parente de l'oxygène varie : le CO<sub>2</sub> est le contributeur premier des atomes d'oxygène en deçà de ~1000 km du noyau et laisse ensuite la place à H<sub>2</sub>O. Qui plus est, nous notons l'importance du quenching collisionnel produit par H<sub>2</sub>O dans la coma interne qui joue un rôle significatif dans la perte des atomes de O(<sup>1</sup>S) et O(<sup>1</sup>D). Un modèle d'émission est réalisé pour reproduire nos données observationnelles. En se penchant sur le comportement adopté par les raies d'oxygène près du noyau et sur l'ajustement fourni par le modèle, une estimation de l'abondance relative du CO<sub>2</sub> est déterminée. Des lors, cette thèse présente une nouvelle méthode pour déterminer l'abondance CO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>O dans les comètes à partir de données obtenues depuis le sol alors qu'une mesure directe de la molécule de CO<sub>2</sub> n'est jusqu'à ce jour possible que depuis l'Espace.

La seconde partie de notre travail porte sur l'analyse des rapports isotopiques <sup>16</sup>O/<sup>18</sup>O et D/H à partir des isotopes du radical OH. La connaissance des rapports isotopiques dans des comètes d'origines variées est importante car cela peut nous renseigner sur les conditions physiques et chimiques existantes lorsque la comète s'est formée. De plus, la mesure du D/H s'inscrit dans le débat actuel de l'origine des océans terrestres. Dans ce contexte, des spectres synthétiques de <sup>16</sup>OH, <sup>18</sup>OH et OD sont créés sur base d'un modèle de fluorescence. Le rapport <sup>16</sup>O/<sup>18</sup>O est déduit pour la première fois par ce modèle pour la comète C/2012 F6 (Lemmon) et il établit le point de départ d'une longue série de mesures portées sur des comètes brillantes à venir.



# Abstract

---

Comets are known to contain large amounts of water and organic molecules. Formed at the birth of the Solar System, 4.6 billion years ago, they did not evolve much, which makes them potential witnesses of the physical and chemical processes at play at the beginning of the Solar System. Studying comets allows to learn more not only about their own enigmatic nature, but also on our Solar System itself and particularly its genesis. The European Rosetta mission, orbiting comet 67P/Churyumov-Gerasimenko, proves the interest given to these small icy bodies. This mission is unique since it could provide, for the first time, an accurate measurement of the chemical composition of a comet nucleus. However, this kind of mission is very expensive and only concerns a specific comet. With ground-based telescopes, it is possible to study a larger sample of comets. The nucleus is not directly reachable but spectroscopy is used to analyze the atmosphere of the comet. Formed through the ices sublimation and the dissociation of molecules, the coma has information enabling us to increase our knowledge about the chemical composition of the nucleus.

The goal of this thesis is the study of water-related molecules in comets. Water constitutes 80% of cometary ices. Studying this molecule is thus essential to determine the nature of comets and understand the physical and chemical conditions in the coma. However,  $\text{H}_2\text{O}$  is not detectable in the visible range spectrum. From a unique and visible spectroscopic data obtained from the ground, we propose to analyze two dissociation products of water that are observable in the comet atmosphere : atomic oxygen and OH radical.

In the first part of this thesis, we focus our analysis on the three forbidden oxygen lines [OI] located at 5577.339 Å for the green line ( $\text{O}(^1\text{S})$ ) and at 6300.304 Å and 6363.776 Å ( $\text{O}(^1\text{D})$ ) for the red doublet lines in order to determine the parent molecule of these atoms. We created  $\text{C}_2$  synthetic spectra to decontaminate the green oxygen line from  $\text{C}_2$  lines. Then, we measured the intensity ratios and intrinsic widths of the three [OI] lines for comets located at different heliocentric distances. By comparing the green to red lines ratio (G/R) with the effective excitation rates, we found that  $\text{H}_2\text{O}$  is the main parent molecule of oxygen when the comet is observed at  $r \sim 1$  ua. When the comet is far from the Sun ( $> 2.5$  au),  $\text{CO}_2$  molecules also contribute to the production of oxygen. The analysis of the oxygen intrinsic widths shows that the green line is wider than the red ones while the theory predicts the opposite. Therefore, the green line could mainly come from the  $\text{CO}_2$  photodissociation while red lines are formed only through  $\text{H}_2\text{O}$ .

The study of the oxygen atoms at different nucleocentric distances leads us to the conclusion that the parent molecule producing oxygen is not always the same :  $\text{CO}_2$  is the main contributor of oxygen below  $\sim 1000$  km while the water molecules form all the oxygen atoms beyond this nucleocentric distance. Moreover, we notice the importance of collisional quenching by  $\text{H}_2\text{O}$  in the inner coma, which plays a significant role in the loss rate of  $\text{O}(^1\text{S})$  and  $\text{O}(^1\text{D})$  atoms. The observations are interpreted in the framework of a coupled-chemistry-emission model and upper limits

of CO<sub>2</sub> relative abundances are derived from the observed G/R ratios. This thesis thus provides a new way to determine the CO<sub>2</sub> relative abundance in comets using data obtained from the ground while a direct CO<sub>2</sub> measurement is only possible from Space.

The second part of this work carries on the analysis of OH isotopic ratios, <sup>16</sup>O/<sup>18</sup>O and D/H. Studying the abundance ratios of the isotopes in comets of various origins is important because it can provide information about physical and chemical conditions existing when the comet was formed. The D/H measurement takes part in the current debate about the origin of terrestrial oceans. In this context, synthetic spectra of <sup>16</sup>OH, <sup>18</sup>OH and OD are built using a new fluorescence model. Thanks to this model, the <sup>16</sup>O/<sup>18</sup>O ratio is estimated for the first time for comet C/2012 F6 (Lemmon) and establishes the first step of a long series of measurements deduced from bright comets of the future.

# MERCI!

---

Au terme de ces quatre années de recherche, je désire exprimer ma reconnaissance aux personnes qui m'ont soutenue dans cet effort. Mes tous premiers remerciements vont à mon promoteur de thèse, Emmanuel Jehin, pour m'avoir donné l'opportunité d'entrer dans l'Univers des comètes, à la fois depuis mon bureau liégeois mais aussi lors de missions au Chili. Ta passion communicative pour la science cométaire a été pour moi un moteur pour débiter en tant que jeune scientifique. Je tiens ensuite à remercier chaleureusement Damien Hutsemékers pour sa disponibilité, son écoute et son appui scientifique. Ton enthousiasme et tes nombreux conseils par rapport à mes travaux de recherches ont été essentiels pour la réalisation de cette thèse. Je tiens également à remercier Philippe Rousselot qui m'a permis d'entamer une collaboration avec l'observatoire de Besançon. Ton savoir-faire et ton aide précieuse ont rendu plus agréable la réalisation de ce code de fluorescence, pour moi qui ignorais encore tout du langage de programmation C il y a quatre ans. Merci également de m'avoir offert la chance de partager avec toi l'expérience d'astronome à l'observatoire Roque de Los Muchachos de La Palma même si nous avons dû sacrifier notre réveillon de Noël pour cela. Cette aventure fut pour moi très enrichissante et m'a permis de voir toutes les facettes du métier d'astrophysicien. Je souhaite également exprimer ma profonde gratitude et mes sincères remerciements à Claude Arpigny et Jean Manfroid. Vos partages d'expérience et vos aides m'ont beaucoup apporté durant ces quatre années de recherche. Un grand merci au Professeur Marc-Antoine Dupret de m'avoir fait l'honneur de présider mon jury de thèse ainsi qu'aux membres du jury Dominique Bockelée-Morvan, Johan De Keyser, Olivier Hainaut et Benoît Hubert.

A l'heure de terminer mes études, je ne peux regarder le chemin que j'ai parcouru sans penser à mon professeur de physique du secondaire, Monsieur De Deken. Ce sont ses cours de physique, donnés avec passion et énergie qui ont été pour moi révélateurs de mon amour pour la physique et surtout l'astrophysique. Par la même occasion, je remercie mon professeur de latin et de grec, Monsieur Marchal pour m'avoir inculqué une rigueur de travail, sans laquelle la réussite de mes études aurait été - encore - plus difficile.

La vie de doctorante au quotidien n'aurait pas été la même sans mes nombreux collègues de l'institut. Que ce soit mon chef de groupe, Professeur Pierre Magain, les anciens doctorants/post-doctorants, Virginie, Mélanie, Géraldine, Valérie, Eva ou les doctorants actuels, Laetitia, Monika et Cyrielle (merci également à toi pour les échanges de science cométaire mêlés à de bonnes tranches de rigolade). L'ambiance de la rotonde n'aurait pas été la même sans vous. Merci également à mes collègues internationaux. Je pense ici aux doctorants rencontrés lors de mes séjours à Besançon, Arvind et Ashok. Mes remerciements s'adressent aussi à Angela, pour avoir toujours mené à bien tout l'administratif relatif à ma thèse tout en prenant toujours de mes nouvelles. Merci également à Sandrine pour la gestion des soucis informatiques en tout genre.

Mes pensées vont ensuite aux autres collègues devenus amis. Tout d'abord, merci à toi Rhita pour les pauses cafés, existentielles par certains moments, ainsi que pour les parties de grimette à l'escalade. Nous aurons presque atteint le sommet ! Pour continuer dans le répertoire sportif, je n'oublie pas de remercier Marie qui m'aura initié au badminton durant une année. Un grand merci à Arnaud et Maïté. Nous avons achevé ensemble notre master et nous avons continué à nous serrer les coudes pour atteindre le même objectif : celui de devenir docteur. Félicitations à toi Docteur Arnaud pour avoir été le premier à franchir la ligne d'arrivée de cette course folle qu'est la thèse et bon courage à toi, Maïté pour nous rejoindre dans quelques années.

Audrey, ce fut un réel plaisir de partager le bureau avec toi durant ces quelques années. Les journées paraissaient moins monotones. Merci pour ton soutien pendant les coups durs de la thèse mais aussi pour les bons moments de fous rires. Fous rires partagés avec Sébastien que je remercie aussi vivement pour l'aide et les conseils qu'il m'a apportés depuis mes années de bachelier.

Malgré les 200 kilomètres séparant Liège de Tournai, les retours dans ma ville natale m'ont toujours semblé très courts grâce à toi, Thierry. Nos discussions interminables que ce soit sur des sujets politiques, ou sur les innombrables différences franco-belges m'ont permis de prendre avec le sourire les retards de la SNCB et les interminables travaux de l'E42. Je te remercie également pour tes idées et ton aide (même jusqu'à la dernière minute) qui m'ont été très bénéfiques pour la finalisation de ma thèse.

Merci infiniment à toi Lauriane. Ces quatre années de thèse ont tissé les liens d'une belle amitié qui n'est pas prête, je l'espère, de s'achever. Avec Pascal, vous m'avez apporté un soutien sans faille dont je vous serai toujours reconnaissante. Je ne vous remercierai jamais assez pour tout ce que vous avez fait pour moi pendant ces derniers mois rythmés par la finalisation de ma thèse. Un gros bisou aussi à votre adorable fille Zoélie qui, par son sourire ou ses quelques mots d'enfant, m'a souvent fait oublier - l'espace d'un instant - la difficulté liée à la rédaction de thèse.

L'aboutissement de ce travail n'aurait jamais été possible sans mes amies de coeur. Amélie et Fanny. Nos chemins se sont croisés il y a plus de dix ans maintenant et depuis, nous nous ne sommes jamais quittées. Nous reflétons la preuve d'une amitié sans limite dans l'espace et dans le temps. Merci également à vos moitiés, Baptiste et Sébastien qui ont contribué à rendre nos soirées - encore plus - mémorables. Et je tiens également à remercier vivement Sébastien pour avoir relevé avec talent le défi que je lui ai lancé il y a quelques mois à savoir l'illustration de ma thèse. Ta couverture et ton dessin sont de véritables chef-d'oeuvres. Parmi mes meilleures amies, je n'oublie bien sûr pas, Noémie, toujours à mes côtés. Nous en aurons franchi des étapes ensemble sans jamais altérer notre profonde amitié. Merci encore pour tous tes encouragements.

Et puis, Gilles. Je crois que tu connais mes pensées. Mes remerciements se résumeront donc en

une unique phrase : Le hasard fait parfois bien les choses. Nous nous comprendrons.

Au point final cette thèse, mes pensées se tournent vers ma famille, le pilier fondamental de ma vie. Tout d'abord, merci à mes deux grandes soeurs, Charlotte et Constance pour cette complicité que nous avons depuis toujours. Vous avez toujours eu les bons (souvent drôles) mots pour m'apporter la motivation et le réconfort nécessaires pendant mes études. Un immense merci également à mon petit frère, Grégoire, toujours présent lors d'une panne informatique ou pour des débats mouvementés concernant les physiciens versus les ingénieurs. Je tiens également à remercier ma grand-mère, ma marraine et mon parrain qui se sont toujours intéressés à mon travail.

Et enfin - et surtout - , mes parents qui ont cru en moi le jour où, fraîchement diplômée de l'enseignement secondaire en options gréco-latines, je leur ai annoncé mon désir de me lancer dans la physique. Merci de m'avoir soutenue dans tous mes choix de vie et pour tout le reste...





*"Il faut toujours viser la lune, car même en cas d'échec, on atterrit dans les étoiles"*

Oscar Wilde





*A Mamy Mouscron*  
*A Papy, qui rêvait que je devienne astronaute*



---

# Table des matières

---

<b>1</b>	<b>Introduction</b>	<b>3</b>
<b>I</b>	<b>Science cométaire et composition chimique des comètes</b>	<b>7</b>
<b>2</b>	<b>Les comètes</b>	<b>11</b>
2.1	Introduction . . . . .	13
2.2	Structure des comètes . . . . .	13
2.2.1	Le noyau . . . . .	14
2.2.2	La coma . . . . .	17
2.2.3	Les queues des comètes . . . . .	19
2.3	Etat de la question et perspectives . . . . .	20
2.4	Composition chimique des comètes et spectroscopie cométaire . . . . .	22
2.4.1	Quelques rappels théoriques de spectroscopie . . . . .	22
2.4.1.1	Nomenclature . . . . .	22
2.4.1.2	Transitions et règles de sélection . . . . .	26
2.4.1.3	Niveaux énergétiques . . . . .	27
2.4.2	Découvertes cométaires amenées par la spectroscopie . . . . .	29
2.4.2.1	Spectroscopie cométaire dans le domaine du visible . . . . .	31
2.4.2.2	La spectroscopie cométaire ultraviolette . . . . .	35
2.4.2.3	La spectroscopie cométaire infrarouge . . . . .	37
2.4.2.4	La spectroscopie cométaire dans le domaine radiométrique . . . . .	38
2.4.2.5	La spectroscopie dans le domaine du rayonnement X . . . . .	39
2.5	Conclusion . . . . .	41
<b>3</b>	<b>Les produits de dissociation de l'eau</b>	<b>43</b>
3.1	Introduction . . . . .	45
3.2	L'oxygène atomique . . . . .	47
3.3	Le radical OH . . . . .	51
3.4	L'hydrogène atomique . . . . .	55

3.5	L'ion $H_2O^+$ . . . . .	55
<b>II Raies interdites de l'oxygène</b>		<b>63</b>
<b>4</b>	<b>Etude des raies interdites de l'oxygène dans un échantillon de comètes observées à différentes distances héliocentriques</b>	<b>67</b>
4.1	Introduction . . . . .	69
4.2	Observations et acquisition des données . . . . .	71
4.3	Réduction des données . . . . .	78
4.4	Corrections des données . . . . .	79
4.5	Analyse des données . . . . .	81
4.6	Résultats et discussions . . . . .	82
4.6.1	Détermination des rapports d'intensité des raies de [OI] . . . . .	82
4.6.1.1	Discussion sur le rapport G/R à grande distance héliocentrique	88
4.6.1.2	Lien entre le rapport G/R et l'abondance de $CO_2$ dans les comètes	92
4.6.2	Mesure de la largeur intrinsèque des raies de [OI] . . . . .	94
4.6.2.1	Largeur anormale de la raie verte : discussion . . . . .	104
4.6.3	Analyse détaillée de la comète 103P/Hartley 2 . . . . .	106
4.6.4	Résultats liés à la mission Deep Impact . . . . .	108
4.6.5	Influence de l'activité solaire sur les raies interdites de l'oxygène . . . . .	109
4.7	Conclusions et perspectives . . . . .	109
<b>5</b>	<b>Etude des raies interdites de l'oxygène à différentes distances nucléocentriques dans les comètes</b>	<b>113</b>
5.1	Introduction . . . . .	115
5.2	Observations . . . . .	116
5.3	Réduction des données . . . . .	119
5.3.1	Soustraction des raies d'émission de $C_2$ . . . . .	119
5.4	Résultats et discussions . . . . .	120
5.4.1	Le rapport G/R . . . . .	120
5.4.1.1	Estimation des abondances relatives de $CO_2$ dans les comètes de l'échantillon . . . . .	134
5.4.2	Effet du seeing atmosphérique et de l'abondance de $CO_2$ sur la valeur du rapport G/R . . . . .	139
5.4.2.1	Le cas de la comète 103P/Hartley 2 . . . . .	142
5.4.3	Mesure de la largeur intrinsèque des raies de [OI] . . . . .	142
5.5	Conclusion . . . . .	150
<b>6</b>	<b>Observations de la comète C/2013 R1 (Lovejoy) avec le spectrographe HARPS-N</b>	<b>153</b>
6.1	Introduction . . . . .	155

6.2	Observations . . . . .	156
6.3	Réduction . . . . .	157
6.4	Mesure des raies interdites de l'oxygène [OI] . . . . .	158

### **III Radical OH 167**

#### **7 Présentation du code de modélisation du processus de fluorescence de la molécule OH 171**

7.1	Introduction . . . . .	173
7.1.1	Les rapports isotopiques . . . . .	173
7.1.2	Le fractionnement isotopique, une signature interstellaire dans les comètes ? 176	
7.1.3	Comment mesurer les rapports isotopiques ? . . . . .	177
7.2	Fluorescence de la molécule OH dans les comètes . . . . .	178
7.2.1	Processus de fluorescence . . . . .	178
7.2.2	Modélisation du processus de fluorescence . . . . .	179
7.3	Notre modèle de fluorescence de la molécule OH et ses isotopologues <sup>18</sup> OH et OD 181	
7.3.1	Utilité d'un tel outil numérique . . . . .	181
7.3.2	Description de notre modèle . . . . .	183
7.4	Validation du code et application à des spectres cométaires . . . . .	189
7.4.1	Test du modèle de fluorescence de OH sur quelques comètes de notre échantillon . . . . .	189
7.4.2	Analyse des comètes C/2002 T7 (LINEAR) et C/2012 F6 (Lemmon) et mesure des rapports isotopiques . . . . .	196
7.5	Les raies <i>promptes</i> de OH du proche ultraviolet . . . . .	205
7.6	Conclusion . . . . .	207

#### **8 Conclusions et perspectives 213**

### **IV Annexes 219**

#### **Bibliographie 221**

#### **A Liste des publications 241**

#### **B La formule de la largeur des raies en vitesse 243**

#### **C Rapports isotopiques du CN et du NH<sub>2</sub> pour la comète C/2012 F6 (Lemmon) 249**

C.1	Rapports isotopiques du CN . . . . .	251
C.2	Rapports isotopiques du NH <sub>2</sub> . . . . .	252



# 1

---

## Introduction

---

Qui n'a jamais rêvé de lever les yeux vers le ciel étoilé pour admirer le spectacle, parfois grandiose, offert par une comète lors de son passage à proximité de notre Terre ? Certes, le ciel nocturne regorge d'une multitude d'objets lumineux observables à l'oeil nu mais, parmi ceux-ci, les comètes occupent une place privilégiée. En effet, contrairement aux étoiles et aux planètes, elles nous étonnent par leur caractère imprévisible, perturbant la ronde bien connue des astres sur la sphère céleste. Leurs apparitions mystérieuses et incomprises pendant des siècles ont fait des comètes des objets d'interpellation pour l'Homme. Long fut le chemin avant que ces astres, parfois impressionnants avec leur large et brillante chevelure, soient considérés comme des corps célestes et non comme des signes divins. Les écrits historiques relatent que l'apparition d'une comète présageait mauvais augure et laissait un sentiment de crainte pour l'homme. L'association des comètes à des événements néfastes a ainsi perduré pendant de longues années.

*Les comètes, en effet, ne sont décidément rattachées à la famille des astres que depuis deux siècles ; avant Newton, les astronomes mêmes les considéraient comme des météores passagers dont l'apparition, la disparition et les mouvements n'étaient soumis à aucune loi. Pour les populations de l'antiquité, du moyen-âge, de la Renaissance même, c'étaient des objets d'effroi, des apparitions miraculeuses, des signes précurseurs de calamités terribles, les symboles flamboyants de la colère divine. Pour les savants d'autrefois, les Comètes étaient les monstres du ciel. On a mis deux siècles, - ce n'est pas trop, - pour*

*réhabiliter ces astres si calomniés.*

Extrait du livre *Les comètes* de A. Guillemin, 1875

Il a fallu attendre le XVII<sup>ème</sup> siècle et Isaac Newton pour que les comètes soient considérées comme des corps célestes à part entière, au même titre que les planètes. Elles venaient d'acquérir un intérêt scientifique. Ensuite, en démontrant que les comètes peuvent posséder une trajectoire périodique, Edmond Halley met en place les prémices de l'étude de la dynamique des comètes. S'en sont suivies les premières recherches réalisées dans le but de comprendre la nature physique et la composition chimique de ces corps glacés. Pour mener celles-ci à bien, des observations sont nécessaires. L'arrivée de grands télescopes ces vingt dernières années a permis de faire un pas de géant dans la maîtrise de la science cométaire. En effet, une étude systématique des comètes est désormais possible et les avancées ne sont plus uniquement apportées suite à l'apparition sporadique d'une comète très brillante dans le ciel. La volonté d'obtenir des informations précises sur la physique et la chimie des comètes reste néanmoins très actuelle. Il est en effet inutile de rappeler l'importance de la mission Rosetta qui a quitté le sol terrestre il y a dix ans et qui va apporter des informations d'une précision jamais encore égalée grâce à des mesures *in situ*. Un des objectifs de cette quête est de percer les mystères liés à la formation du Système Solaire. En effet, les comètes se sont formées lors de la naissance de celui-ci il y a 4.6 milliards d'années et elles auraient ensuite très peu évolué. Elles sont donc considérées comme des vestiges de la nébuleuse protosolaire et pourraient peut-être renfermer des informations sur le nuage moléculaire d'origine. De plus, les comètes ont probablement contribué au grand bombardement qu'ont subi les planètes lors des premières phases de l'histoire du Système Solaire. En percutant la Terre, les comètes ont peut-être apporté de la matière qui a conduit à la formation des océans et de l'atmosphère et ont également contribué à la chimie prébiotique. Chaque comète constitue donc une pierre de Rosette pour la connaissance de la formation de notre Système, son évolution et ses composés chimiques originels qui pourraient être liés à l'émergence de la vie sur Terre.

Le présent travail oeuvre pour meilleure compréhension des comètes en vue de mieux cerner les origines de notre Système Solaire. Le premier chapitre a pour but de permettre au lecteur d'appréhender le monde des comètes et de prendre connaissance d'une série d'informations sur le sujet. De la schématisation d'une simple boule de neige sale adoptée par Fred Whipple pour décrire le noyau d'une comète à une description plus détaillée sur les différentes parties de ces objets (noyau, coma, queues), ce chapitre fera également l'état de l'art de la composition chimique connue de ces corps. Outre la prépondérance d'eau sous forme de glace, les comètes contiennent également une grande variété d'autres molécules telles que du monoxyde de carbone, du dioxyde de carbone ainsi que du mé-



thanol. De plus, de nombreuses molécules présentes dans le noyau (molécules *mères*) et provenant de la sublimation des glaces produiront, suite au phénomène de photodissociation, d'autres molécules ou atomes (molécules *filles*).

Après cette brève introduction, le lecteur découvrira la spectroscopie, tout d'abord d'un point de vue général théorique, puis appliquée aux comètes. Cette technique constitue actuellement un des moyens pour déterminer la composition chimique d'un objet, comme l'atmosphère des comètes. La discussion du chapitre 3 portera sur la description détaillée des produits de l'eau détectés dans la coma des comètes, à savoir l'oxygène atomique, le radical OH, l'hydrogène et l'ion  $\text{H}_2\text{O}^+$ . En effet, le sujet principal de cette thèse est l'analyse de l'eau dans les comètes à partir de ses produits de dissociation, l'oxygène et le radical OH, possédant des transitions dans le visible. Ces travaux nous amèneront à mieux comprendre les conditions auxquelles la molécule d'eau est soumise dans la coma.

Le coeur du travail se concentrera d'abord sur les trois raies interdites de l'oxygène présentes en émission dans les spectres visibles des comètes. L'objectif est, d'une part, de mesurer les rapports des intensités des raies du doublet rouge à  $6300.304 \text{ \AA}$  et  $6363.776 \text{ \AA}$  entre elles et de comparer l'intensité de la raie verte à  $5577.339 \text{ \AA}$  avec la somme des intensités du doublet rouge. D'autre part, les largeurs intrinsèques de ces raies seront évaluées. A partir de ces mesures, deux analyses seront effectuées. La première s'attardera sur l'évolution des rapports d'intensité et des largeurs des raies en fonction de la distance héliocentrique de la comète. Pour réaliser cette première étude, 48 spectres provenant de douze comètes observées avec le spectrographe UVES du VLT ont été mis à notre disposition. L'on a recouru à l'utilisation de cet instrument dans le but d'obtenir des spectres cométaires avec une meilleure résolution par rapport aux enregistrements acquis lors des investigations antérieures. Les résultats obtenus seront confrontés à la théorie en vue d'une meilleure compréhension de ces raies peu étudiées jusqu'à présent. La seconde analyse portera sur l'étude de l'oxygène détecté à différentes distances du noyau. L'intérêt de ces recherches, décrites dans les chapitres 4 et 5, est d'identifier le ou les parent(s) à l'origine des atomes d'oxygène.

Par ailleurs, le chapitre 6 exposera les observations réalisées en décembre dernier de la comète C/2013 R1 (Lovejoy) avec le télescope italien TNG (*Telescopio Nazionale Galileo*) installé à l'Observatoire *Roque de Los Muchachos* de La Palma.

Composées essentiellement de glace d'eau, les comètes sont des cibles privilégiées pour l'étude de l'eau dans le Système Solaire. OH étant un produit de dissociation direct de la molécule de  $\text{H}_2\text{O}$ , ce radical est souvent utilisé pour mesurer l'abondance de l'eau. La

deuxième partie de cette thèse sera dédiée à l'étude des raies de OH dans le proche ultraviolet et, plus précisément, à la présentation du code de fluorescence de ce radical. Ce code a pour objectif de déduire des spectres cométaires les rapports isotopiques D/H et  $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$ . Des études récentes ont montré que le rapport D/H variait d'une comète à l'autre. Cette dépendance étant potentiellement en lien avec la région de formation des comètes, une telle mesure établie pour un grand échantillon de comètes pourrait nous permettre d'obtenir des renseignements supplémentaires quant à l'origine de chacune d'entre elles. De plus, la détermination de ces rapports isotopiques est fondamentale pour répondre à la question de l'origine des océans terrestres. Notre modèle sera appliqué aux spectres de la comète C/2012 F6 (Lemmon).

# PARTIE I

## SCIENCE COMÉTAIRE ET COMPOSITION CHIMIQUE DES COMÈTES



*"- Qu'est-ce que tu veux faire, mon fils ?*

*- De la recherche papa."*

*"Mon Dieu !" pensa Edouard, consterné, mais en lui souriant comme s'il trouvait cette idée merveilleuse, "pourquoi les enfants sont-ils si compliqués ?"*

Jean-Michel Guenassia - La vie rêvée d'Ernesto G.



# 2

---

## Les comètes

---

### Sommaire

---

<b>2.1</b>	<b>Introduction</b>	<b>13</b>
<b>2.2</b>	<b>Structure des comètes</b>	<b>13</b>
2.2.1	Le noyau	14
2.2.2	La coma	17
2.2.3	Les queues des comètes	19
<b>2.3</b>	<b>Etat de la question et perspectives</b>	<b>20</b>
<b>2.4</b>	<b>Composition chimique des comètes et spectroscopie cométaire</b>	<b>22</b>
2.4.1	Quelques rappels théoriques de spectroscopie	22
2.4.1.1	Nomenclature	22
2.4.1.2	Transitions et règles de sélection	26
2.4.1.3	Niveaux énergétiques	27
2.4.2	Découvertes cométaires amenées par la spectroscopie	29
2.4.2.1	Spectroscopie cométaire dans le domaine du visible	31
2.4.2.2	La spectroscopie cométaire ultraviolette	35
2.4.2.3	La spectroscopie cométaire infrarouge	37
2.4.2.4	La spectroscopie cométaire dans le domaine radio-métrique	38
2.4.2.5	La spectroscopie dans le domaine du rayonnement X	39
<b>2.5</b>	<b>Conclusion</b>	<b>41</b>

---





---

## 2.1 Introduction

---

Il y a 4.8 milliards d'années, dans un des bras de la Voie Lactée, la contraction d'un nuage interstellaire a conduit à la formation d'un disque aplati en rotation qui a donné naissance à notre Système Solaire. Celui-ci est alors constitué d'une multitude de poussières de tailles différentes qui, en s'agglomérant progressivement au cours des rotations, ont formé différents corps célestes. L'accrétion de poussières et la condensation des gaz dans le disque aboutissent tout d'abord à la formation de planétésimaux tels les comètes et les astéroïdes. Certains d'entre eux ont ensuite formé les huit planètes connues (Morbidelli, 2005). La dynamique du Système Solaire naissant était très chaotique. La configuration résonante 2 : 1 des planètes Jupiter et Saturne a amené une grande instabilité gravitationnelle dans le Système entraînant la modification des orbites de Neptune et Uranus mais également l'expulsion de la quasi totalité des planétésimaux dans toutes les directions (Morbidelli et al., 2005; Tsiganis et al., 2005). Une partie de ces corps a donc migré vers l'intérieur du Système et est à l'origine du grand bombardement tardif (LHB) (Gomes et al., 2005). Les collisions des comètes avec notre planète pourraient être à l'origine de l'eau dans les océans terrestres<sup>1</sup>. Les planétésimaux situés entre Jupiter et Saturne ont été éjectés vers les confins du Système Solaire pour former le Nuage de Oort à la limite du milieu interstellaire. Les corps situés dans la partie externe du disque des planétésimaux ont subi une perturbation moins importante et forment la Ceinture de Kuiper et le Scattered Disk (Levison et al., 2008). Les différentes familles de comètes classées selon leurs régions de formation se sont retrouvées piégées dans des réservoirs distincts. L'étude des comètes d'origines diverses peut donc apporter de précieux indices sur les différentes régions du Système Solaire primitif. Les intérêts d'une telle analyse sont multiples et les scientifiques ont depuis longtemps tenté de percer les mystères de ces petits corps de glace en se posant de nombreuses questions : *D'où viennent-ils ? De quoi sont-ils constitués ? Quelle est leur structure interne et externe ?* Tant de questions qui requièrent d'importantes observations et analyses.

---

## 2.2 Structure des comètes

---

Au XVII<sup>ème</sup> siècle, Isaac Newton décrit les comètes comme des corps constitués d'un noyau solide qui brille suite à la réflexion de la lumière du Soleil. La queue observée serait formée des vapeurs libérées par le noyau. Cette vision de base est tout à fait fondée mais la véritable nature physique des comètes a été débattue pendant les trois siècles qui ont

---

1. Cette théorie sera détaillée dans le chapitre 7

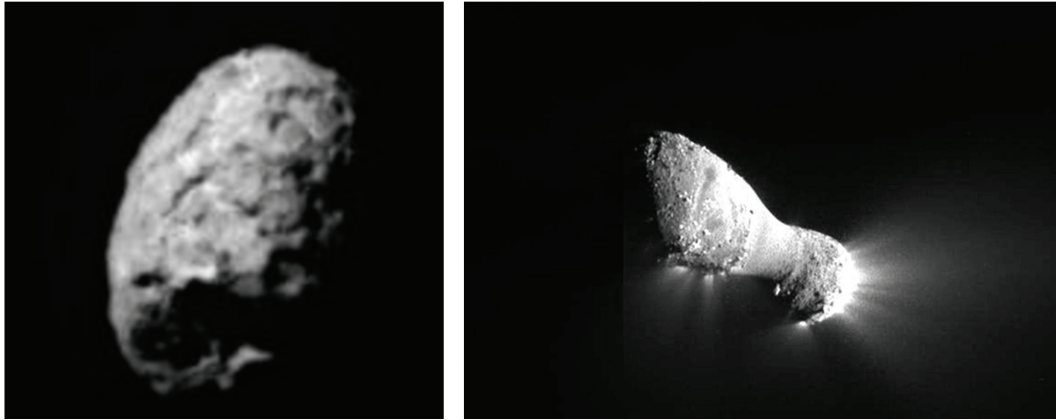
suivi et actuellement beaucoup d'éléments demeurent encore incompris. Lyttleton (1951) présente les comètes comme un agglomérat de poussières légèrement liées gravitationnellement. Il postule qu'à l'approche du Soleil, des collisions entre les particules démarrent et provoquent la pulvérisation de celles-ci. Sous l'effet du rayonnement solaire cela produit la queue cométaire. Cependant, sa théorie se heurte à plusieurs problèmes, à savoir qu'elle ne peut ni expliquer la survie des comètes après plusieurs passages à proximité de notre astre, ni justifier la modification du mouvement des comètes due à l'éjection de matière. Whipple (1950) a, quant à lui, proposé un modèle selon lequel le noyau d'une comète est un bloc monolithique qui renferme de la glace et des particules de poussières et est semblable visuellement à une *boule de neige sale*. Cette théorie a été confirmée lors du survol historique du noyau de la comète Halley en 1986 par la sonde européenne Giotto (Keller et al., 1986). Le modèle de Whipple permet également d'expliquer certaines propriétés des comètes comme la modification de leur trajectoire par rapport à une orbite qui serait uniquement calculée par des forces gravitationnelles. En effet, Whipple a mis en évidence l'existence de forces non gravitationnelles, forces qui induisent un mouvement de recul de la comète causé par la perte de masse non isotrope entraînée par la sublimation des glaces. Les modèles dynamiques de Marsden (1969) et Marsden et al. (1973) se basent d'ailleurs sur ces travaux.

La physique sous-jacente des comètes n'est pas simple et de nombreuses recherches ont été réalisées sur le sujet. Dans les sous-sections suivantes, nous proposons de faire un état de l'art des connaissances actuelles de la structure physique de ces petits corps célestes.

### 2.2.1 Le noyau

Lorsqu'elle est éloignée du Soleil, la comète se résume à un conglomérat de roches et de glaces. Ces glaces renferment 80% de  $H_2O$ , 10 à 20% de CO et  $CO_2$ , ainsi que des centaines d'autres composés minoritaires, présents à l'état de trace (<1%), en ce compris des molécules organiques. Cet ensemble constitue le *noyau* de la comète. De formes irrégulières et souvent oblongues, les noyaux cométaires sont de petites tailles. Les observations radars et photométriques estiment entre quelques centaines de mètres à quelques dizaines de kilomètres le diamètre des noyaux cométaires. La structure du noyau est très fragile et sa densité très faible, de quelques dixièmes de grammes par centimètres cubes (Donn, 1963). Weissman (1986) a proposé de décrire la surface interne du noyau selon le modèle du *rubble pile*, c'est-à-dire comme un agrégat de planétésimaux de différentes tailles. Ce modèle est communément admis pour les astéroïdes de la ceinture principale. Donn & Hughes (1986) présentent, quant à eux, le modèle de *l'agrégat fractal* selon lequel le noyau serait composé de gros blocs entre lesquels des petits blocs remplissent les espaces vides. D'autres modèles ont également prôné, comme le modèle de colle glacée

de Gombosi & Houpis (1986) décrivant le noyau comme un ensemble de blocs rocheux collés ensemble par de la glace ou encore le modèle de Belton et al. (2007) qui propose un noyau créé de couches de poussières et de glaces. Le faible albédo ( $\sim 4\%$ ) (Fernández et al., 1999) des noyaux les rend, par contre, difficiles à observer. En effet, d'une part, lorsque la comète s'approche de la Terre, donc a fortiori du Soleil, la coma brillante englobe le noyau cométaire et empêche son observation. D'autre part, à de grandes distances héliocentriques, la coma n'est pas encore formée mais les télescopes actuels, même les plus grands, ne permettent pas de résoudre le noyau. Peu d'informations sont donc récoltées sur les noyaux et les caractéristiques physiques et chimiques de ceux-ci restent, dès lors, encore mal connues. Les découvertes obtenues sur les noyaux cométaires n'ont pu être amenées que grâce à des mesures *in situ* ou à la suite du survol de la surface d'une comète par des missions spatiales. Malheureusement le coût de tels projets rend ces survols rares. A ce jour, sept comètes ont été approchées par des sondes, à savoir les comètes 21P/Giacobini-Zinner, 1P/Halley, 26P/Grigg-Skjellerup, 19P/Borrelly, 81P/Wild 2, 9P/Tempel 1 et 103P/Hartley 2. Pour celles-ci, la forme, la taille, la masse, l'albédo et la période de rotation ont pu être définis. Ces observations, réalisées jusqu'à quelques centaines de kilomètres seulement de la comète ont permis d'acquérir des clichés des noyaux, comme présentés sur la figure 2.1.



**FIGURE 2.1** – Image du noyau de la comète 81P/Wild 2 acquise le 2 janvier 2004 lors de la mission de la NASA Stardust (gauche). Celui-ci est de forme elliptique triaxiale de rayons  $1.65 \times 2.00 \times 2.75 \pm 0.05$  km (Duxbury et al., 2004). Cette photographie a été prise lorsque la sonde se trouvait à une distance de 500 km de la comète. Noyau de la comète 103P/Hartley 2 photographié lors de la mission EPOXI le 4 novembre 2010 (droite). 103P est caractérisée par une activité importante malgré sa petite taille (2.33 km de long) (A'Hearn et al., 2011).

Les noyaux cométaires sont également caractérisés par la présence d'une activité gazeuse qui apparaît à certains endroits de la surface, appelés zones actives. Cette activité correspond à la sublimation des matériaux volatils situés en surface qui est provoquée par l'interaction avec le rayonnement solaire. L'activité du noyau est dominée par la su-

blimation des glaces de H<sub>2</sub>O lorsque la comète est proche du Soleil (<3 ua). En effet, à de telles distances héliocentriques, la température d'équilibre du corps est approximativement égale à la température de sublimation de l'eau. Pour information, le taux de sublimation se définit comme (Crovisier & Encrenaz, 2000) :

$$\frac{F(1 - A)}{r^2} = \eta (\sigma T^4 + LZ)$$

où  $F$  = la constante solaire = 1360 W m<sup>-2</sup> à 1 unité astronomique (ua) ;

$A$  = l'albédo ;

$r$  = la distance au Soleil exprimée en ua ;

$\sigma T^4 \eta$  = l'énergie totale radiée depuis le corps ;

$\sigma$  = la constante de Stefan qui vaut 5.67 10<sup>-8</sup> W m<sup>-2</sup> K<sup>-4</sup> ;

$\eta LZ$  = l'énergie absorbée par la sublimation de la glace ;

$L$  = la chaleur latente de sublimation qui vaut 2500 kJ kg<sup>-1</sup> pour l'eau à 273K ;

$Z$  = le taux de sublimation en kg s<sup>-1</sup> m<sup>-2</sup> ;

$\eta$  = facteur géométrique.

Le taux de sublimation est donc inversement proportionnel au carré de la distance au Soleil et varie également en fonction de la nature des glaces. En effet, les glaces de H<sub>2</sub>O cessent de sublimer aux alentours de 3 ua alors que d'autres glaces, telles celles de CO et CO<sub>2</sub> deviennent les moteurs de l'activité cométaire à de grandes distances héliocentriques (Delsemme, 1982; Crovisier & Encrenaz, 2000). L'activité du noyau dépend donc de la distance au Soleil mais peut également être modifiée suite à une cassure du noyau. Ces cassures peuvent être causées par les forces de marées engendrées suite au passage de la comète à proximité d'autres objets célestes, comme des planètes ou le Soleil mais aussi suite à la collision avec un autre corps ou à des effets thermiques. Ces événements sont accompagnés d'une augmentation temporaire mais parfois très importante de la luminosité puisque, d'une part, une plus grande surface de matière est exposée au Soleil et, d'autre part, de la glace fraîche, donc plus réactive, est mise à nu.

Les noyaux sont qualifiés d'hétérogènes. Leur masse n'est pas facilement mesurable. En effet, mis à part la mesure *in situ* par une sonde, elle ne peut s'obtenir qu'indirectement en modélisant les forces non gravitationnelles, c'est-à-dire, en évaluant les perturbations engendrées par l'éjection des gaz sur l'orbite de la comète. Actuellement la masse des comètes est estimée entre 10<sup>10</sup> et 10<sup>15</sup> kg (Britt et al., 2006). Cette masse diminue après plusieurs passages à proximité du Soleil qui conduisent à la sublimation des matières volatiles. Lorsque la totalité des glaces s'est sublimée, la comète s'éteint et certains scien-

tifiques avancent qu'il ne subsisterait alors qu'un corps rocheux semblable à un astéroïde (Campins & Swindle, 1998; Lodders & Osborne, 1999). A ce jour, ce scénario n'a toutefois pas encore été prouvé. Notons que les variations d'abondance des espèces mesurées d'une comète à l'autre peuvent provenir d'un nombre d'orbites successives différent mais aussi être intrinsèques aux comètes et fournir une preuve sur les possibles différentes régions de formation des comètes, comme proposé par Bockelée-Morvan et al. (2004).

Les noyaux ont des mouvements de rotation parfois complexes autour de plusieurs axes dont les périodes de rotation varient, d'une comète à l'autre, de quelques heures à plusieurs jours. L'enregistrement de la courbe de lumière du noyau permet de déterminer la période de rotation mais cette technique est peu fréquente car elle n'est possible que lorsque la coma n'est pas présente. D'autres méthodes consistent à analyser les changements de morphologies et de structures qui apparaissent au cours du temps dans la coma, comme les jets de gaz. L'étude de la variation du taux de production de certaines molécules en fonction de l'illumination des zones actives permet également de déterminer la période de rotation des comètes.

### 2.2.2 La coma

Lorsque la comète s'approche du Soleil, la température du noyau s'accroît et la sublimation des glaces s'accélère, entraînant l'éjection croissante de gaz et de poussières. Le noyau se trouve alors entouré d'un halo lumineux de plusieurs milliers de kilomètres de diamètre et devient difficilement observable. Cette étendue brillante dont les extensions font penser à une longue chevelure est appelée la *coma*. C'est en fait l'atmosphère de la comète. La lumière qui en émane vient principalement de deux sources : un continu solaire dû au fait que les grains de poussières constituant la coma réfléchissent la lumière du Soleil et un phénomène de fluorescence. En effet, Schwarzschild & Kron (1911) ont montré que la présence de photons émis par des atomes ou molécules était due à ce phénomène de fluorescence<sup>2</sup>. Etant donné que l'augmentation de la température et donc, a fortiori, la quantité d'éjection des gaz et des poussières, est proportionnelle à la distance héliocentrique, plus la comète s'approche du Soleil, plus la coma sera importante et étendue. La taille précise de la coma est donc difficile à définir. Tous les éléments volatils n'apparaissent pas en même temps dans la coma cométaire. Plus on s'approche du noyau, plus on détecte des éléments très volatils, comme le monoxyde de carbone (CO) et le dioxyde de carbone (CO<sub>2</sub>). Ensuite, sont détectées les molécules de H<sub>2</sub>O, HCN, NH<sub>3</sub> et CH<sub>4</sub>. Après la sublimation, ces molécules, dites *parentes*, sont sujettes à la radiation du rayonnement solaire ultraviolet qui les photodissocie en atomes, radicaux ou molécules

---

2. Ce processus sera explicité dans le chapitre 7

*filles*. Le produit final créé par le phénomène de photodissociation dépend de l'énergie du photon absorbé par la molécule parente. Si l'énergie est suffisante, des ions pourront être produits. De plus, dans la coma interne, une minorité d'éléments sont également issus de réactions chimiques ou photolytiques suite à des collisions. Comme les molécules parentes ne sont observables que dans les domaines de longueurs d'onde infrarouges et radios, l'examen des composés chimiques des comètes de notre étude se basera sur les éléments filles qui possèdent généralement des transitions électroniques et sont donc observables dans le domaine du visible. L'étude de la coma cométaire est d'un grand intérêt pour approfondir nos connaissances sur les composés chimiques de ces petits corps de glace. Parmi les composés détectables dans le visible, les plus abondants et les plus facilement identifiables sont les radicaux et molécules OH, CN, C<sub>3</sub>, C<sub>2</sub> et NH<sub>2</sub> ainsi que les ions CO<sup>+</sup> et H<sub>2</sub>O<sup>+</sup>. Les principaux constituants des comètes repérés dans le domaine visible sont listés dans le tableau 1 de Feldman et al. (2004b). Notons que ces radicaux et ions ne viennent pas toujours d'une molécule parente unique. En effet, Helbert et al. (2005) ont montré par exemple que le C<sub>3</sub> et le C<sub>2</sub> pouvaient provenir de la dissociation de nombreuses molécules parentes. Le radical OH est, quant à lui, supposé provenir exclusivement de la molécule H<sub>2</sub>O. La mesure du taux de production de ce radical devient particulièrement intéressante puisque celui-ci nous donne une valeur du taux de production de l'eau de la comète étudiée.

La courbe de lumière des comètes est souvent asymétrique entre les observations pré-périhélie et post-périhélie. Cette particularité est causée par les changements d'illumination que subit le noyau cométaire avec la distance héliocentrique (effets saisonniers). L'activité gazeuse augmente souvent après le passage au périhélie en raison de l'inertie thermique mais aussi car le passage de la comète près du Soleil libère de la glace nouvelle. Le gaz libéré par la sublimation des glaces s'échappe à la vitesse sonique et s'étend rapidement jusqu'à atteindre une vitesse supersonique. La vitesse finale des molécules parentes est de l'ordre de 0.5 à 2 km s<sup>-1</sup> lorsque la comète se situe à une unité astronomique du Soleil. Les modèles actuels adoptent très souvent l'hypothèse d'une symétrie sphérique pour décrire le mouvement de ces échappements gazeux. Cette approximation est assez réaliste car les données récoltées correspondent généralement à des observations de la coma externe, c'est-à-dire d'une région suffisamment éloignée du noyau pour que le dégazage soit devenu isotrope. De plus, au niveau de la coma interne, la rotation du noyau atténue les effets d'inhomogénéité et la modélisation de l'expansion des gaz, bien que plus simpliste, reste valable.

Les comètes sont donc des objets riches constitués à la fois de molécules simples et de molécules complexes. La totalité des composants cométaires n'a pas encore été identifiée

et les constituants principaux n'ont pas encore dévoilé tous leurs secrets. De nouvelles découvertes sont encore attendues afin d'apporter des éclaircissements sur la nature de ces corps mystérieux. Dans ce sens, cette thèse propose d'étudier des produits de dissociation de l'eau, à savoir l'hydroxyle (OH) et l'oxygène (O), en se basant sur des spectres cométaires de grande qualité couvrant le domaine du visible. Le but principal d'un tel travail est d'extraire des informations sur le constituant principal des comètes : l'eau.

### 2.2.3 Les queues des comètes

La représentation d'une comète ne se limite pas à un simple noyau obscur et à une coma mais elle se caractérise également par la présence de plusieurs types de queues. Celles-ci font des comètes des objets parfois spectaculaires à admirer dans le ciel étoilé et qui ont de ce fait marqué l'esprit des hommes au travers de l'histoire. L'étendue des queues des comètes peut atteindre des dizaines de millions de kilomètres. Il y a d'abord la *queue de poussières*. Elle résulte de la diffusion de la lumière du Soleil par les poussières qui s'échappent du noyau. Ceci lui donne d'ailleurs sa couleur caractéristique blanc-jaune, qui se révèle être le continu solaire. Elle est large, incurvée le long de la trajectoire de la comète et orientée dans la direction anti-solaire. Les grains de poussières qui la constituent, possèdent leurs propres orbites et sont repoussés par la pression de radiation du Soleil et par la force d'attraction gravitationnelle du Soleil. La courbure de cette queue est d'autant plus prononcée que l'accélération des particules qui la forment est faible. La taille des poussières peut varier de quelques centièmes de  $\mu\text{m}$  à quelques  $\mu\text{m}$ . De nombreuses structures, comme des stries, sont souvent observées dans la queue de poussières. La *queue d'ions* ou *queue de plasma* est étroite, rectiligne et orientée dans la direction anti-solaire. Nombre d'ions sont détectés dans le spectre de cette queue tels  $\text{CO}^+$ ,  $\text{N}_2^+$ ,  $\text{CH}^+$ ,  $\text{CO}_2^+$ ,  $\text{H}_2\text{O}^+$ . Le  $\text{CO}^+$ , mis en évidence par une émission bleue à 427 nm, constitue l'élément le plus abondant de la queue d'ions et lui confère sa couleur bleuâtre. La queue d'ions est entraînée par le champ magnétique du vent solaire<sup>3</sup>. Son aspect varie en fonction de l'activité solaire et peut changer d'envergure en quelques jours voire quelques heures.

La coma et la queue des comètes sont donc constituées de gaz et de poussières en quantités variables. En fonction de ces quantités, on les qualifie parfois de comètes poussiéreuses ou gazeuses. Les gaz et les poussières n'ont pas les mêmes propriétés et leurs analyses respectives apportent des informations complémentaires. En effet, les poussières sont des composés réfractaires qui restent chimiquement et morphologiquement stables même lorsqu'elles sont portées à des températures de quelques centaines de kelvins. Dès

---

3. Le vent solaire se déplace à la vitesse de  $400 \text{ km s}^{-1}$  à une unité astronomique.



**FIGURE 2.2** – Image de la comète Hale-Bopp observée en 1997 avec sa queue d'ions et sa queue de poussières.

lors, ces poussières peuvent avoir véhiculé des éléments condensables comme des particules provenant des vents stellaires d'étoiles évoluées jusqu'au nuage proto-planétaire. Si une fraction de ces poussières demeure intacte, l'étude de leur minéralogie et de leurs propriétés physiques peut apporter des éclaircissements sur la nucléosynthèse stellaire (Williams et al., 1997). De plus, l'analyse des poussières peut nous renseigner, d'une part, sur leur densité, leur degré de porosité et, d'autre part, sur la structure et l'évolution du noyau. Ainsi, l'exploration de la comète 1P/Halley a notamment révélé la présence d'une nouvelle population de grains composés de carbone, hydrogène, oxygène et azote (CHON). Ces grains CHON représentent 30% de la masse totale des particules mesurées et ont permis la découverte des composés organiques (Mumma et al., 1993).

A partir des espèces gazeuses, les taux de production d'atomes et de molécules peuvent être déduits en mesurant l'intensité des bandes d'émission ou raies d'émission les plus importantes dans l'ultraviolet, le visible et le domaine radio. Par exemple, le taux de production de l'hydrogène se détermine à partir de la raie de Lyman- $\alpha$  localisée à 1216 Å. Dans le visible, ces mesures sont effectuées à partir d'observations photométriques utilisant des filtres à bandes étroites qui se concentrent sur une émission intense, comme OH, NH, CN, C<sub>3</sub> et C<sub>2</sub> (A'Hearn et al., 1979, 1995) ou à l'aide de la spectroscopie longue fente (cf. par exemple Rauer et al. (2006); Boehnhardt et al. (2007)).

## 2.3 Etat de la question et perspectives

---

Bien que possédant une masse de moins d'un milliardième de la masse de la Terre, les comètes offrent un spectacle grandiose dans le ciel. A l'approche du Soleil, ces petits corps deviennent les objets les plus actifs du Système Solaire. Une connaissance précise



du noyau cométaire et de son atmosphère est essentielle pour comprendre l'origine et la formation des comètes, mais également les premières étapes de la formation du Système Solaire. Cependant, nous savons encore peu de choses sur la structure et la composition chimique de ces corps glacés étant donné que les informations s'obtiennent la plupart du temps de façon indirecte, à partir de l'observation des gaz et des poussières issus du noyau ainsi qu'à partir du comportement dynamique des comètes. Le manque de données continues en est la cause. Les comètes restent des objets éphémères et les observations que l'on peut en tirer ne peuvent malheureusement s'effectuer que durant un laps de temps court. Dès lors, il est rare de posséder à la fois des données spectroscopiques et photométriques d'une comète à différentes distances du Soleil. Néanmoins, les données récoltées jusqu'à ce jour ont permis de grandes avancées dans la science cométaire, notamment ces dernières années grâce aux missions spatiales. Au niveau des propriétés physiques, il a été mis en évidence que les comètes ne satisfaisaient pas toutes aux mêmes spécificités et ne pouvaient pas être décrites selon le même modèle. En effet, les comètes sont d'une grande diversité et chacune d'elle semble être "unique". La classification des comètes passe également par leurs compositions chimiques. En effet, bien que fort semblable d'un point de vue général, la composition des glaces varie aussi d'une comète à l'autre. L'intensité des émissions observées diffère ainsi que le rapport entre le continuum et les émissions discrètes. Néanmoins, dans le visible par exemple, certains groupements ont été mis en évidence en fonction de la teneur en volatils carbonés. On parle ainsi de comètes riches ou déplétées en carbone selon qu'elles contiennent plus ou moins de molécules carbonées linéaires comme le  $C_2$  ou le  $C_3$  (A'Hearn et al., 1995). L'origine de la déplétion en carbone de certaines comètes reste inconnue. Provient-elle d'un processus évolutif ou est-elle simplement le résultat de différences dans la composition initiale des comètes liées à des régions de formation distinctes ? Une étude systématique et intensive des molécules parentes et filles est requise pour trancher sur la question.

La nature précise des comètes n'est pas encore élucidée mais chaque observation et analyse permet de percer un peu plus les secrets de ces corps glacés. Les missions spatiales sont d'un intérêt capital car elles permettent d'étudier *in situ* et avec une résolution spatiale supérieure les noyaux cométaires. Tous les regards sont actuellement portés sur la mission de l'agence spatiale européenne Rosetta qui déposera très prochainement son atterrisseur Philae sur la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko. La visite de la surface d'une comète est une grande première et délivrera des données inestimables, offrant aux scientifiques la possibilité de poursuivre leurs recherches en la matière.

## 2.4 Composition chimique des comètes et spectroscopie cométaire

La composition chimique des comètes peut être déduite via différentes méthodes. La plus précise et la plus directe consiste bien sûr à mesurer les espèces moléculaires et atomiques directement sur le noyau de la comète. Il s'agit de l'analyse dite *in situ*, laquelle sera réalisée pour la première fois avec Philae, le module de la mission Rosetta de l'ESA. Les composés cométaires peuvent également être analysés en laboratoire suite à un retour d'échantillon. Les poussières de la comète 81P/Wild 2, collectées lors de la mission spatiale Stardust ont notamment été examinées de la sorte (Keller et al., 2006). Cette méthode ne garantit toutefois pas la non altération des espèces en raison du processus de capture (collision dans l'aérogel). Les observations acquises par spectroscopie restent néanmoins privilégiées pour la compréhension de la chimie cométaire étant donné que cette technique permet de récolter plus simplement et à moindre coût une grande quantité de données. Cette thèse portera dès lors sur l'analyse des émissions spectrales de certains produits de dissociation de l'eau, à savoir l'oxygène et l'hydroxyle, observés dans le domaine visible. Afin de détailler les processus en oeuvre à l'origine de ces émissions, un bref rappel de notions spectroscopiques est proposé dans ce chapitre. Celui-ci se focalisera essentiellement sur le cas des atomes et des molécules diatomiques, objets de notre étude.

### 2.4.1 Quelques rappels théoriques de spectroscopie

#### 2.4.1.1 Nomenclature

##### 2.4.1.1.1 Notations de base

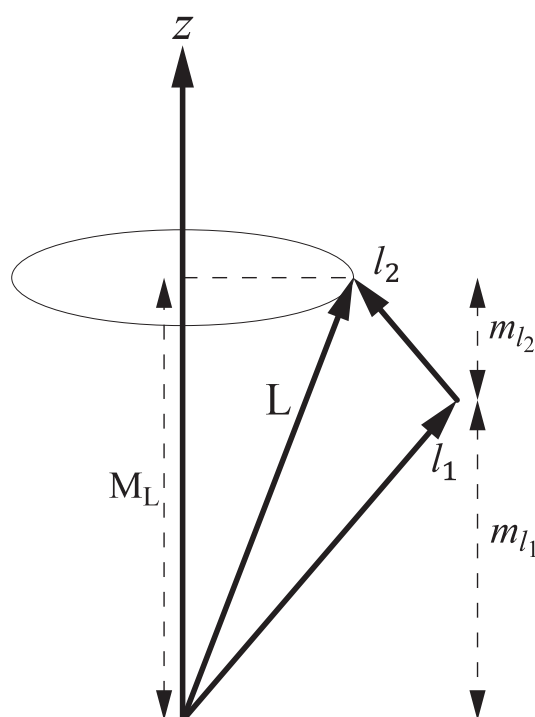
L'énergie d'un électron est quantifiée. Elle ne peut donc prendre que certaines valeurs, correspondant aux niveaux d'énergie possibles des électrons. Pour chacune de ces valeurs d'énergie, l'électron est défini par son nombre quantique principal  $n$  et son nombre quantique orbital  $l$ . Ce dernier décrit le mouvement orbital de l'électron et va de 0 à  $n-1$  par pas entier. Lorsque l'atome est soumis à un champ magnétique, l'effet Zeeman apparaît. Pour expliquer cet effet sur le mouvement des électrons, Sommerfeld a postulé que le plan de l'orbite des électrons ne pouvait être orienté que de certaines façons par rapport à la direction du champ magnétique. Ces orientations sont imposées par le nombre quantique magnétique  $m_l$  dont les valeurs entières oscillent entre  $-l$  et  $+l$ . Le nombre quantique  $m_l$  correspond à la projection de  $l$  sur un axe privilégié. En plus du mouvement orbital, l'électron subit un mouvement de rotation propre, appelé *spin* de l'électron. Celui-ci est associé au nombre quantique de spin  $s$  qui vaut  $\frac{1}{2}$ . La projection du spin  $s$  est décrite par le

nombre quantique magnétique de spin  $m_s$ . Par analogie au moment orbital  $m_l$ ,  $m_s$  adopte les valeurs de  $-s$  à  $+s$ . Il vaut donc  $\pm\frac{1}{2}$  et définit les deux états de spin possibles de l'électron.

Les électrons d'un atome s'organisent en niveaux d'énergie selon les valeurs de leurs nombres quantiques  $n$  et  $l$ . Ces deux paramètres décrivent la *configuration électronique* des atomes. En effet,  $n$  désignera la *couche* électronique de l'électron :  $n = 1 \rightarrow$  couche K,  $n = 2 \rightarrow$  couche L,  $n = 3 \rightarrow$  couche M, etc. Le nombre quantique  $l$  décrira, quant à lui, la *sous-couche* de l'électron, appelée plus souvent *orbitale*. Ainsi, lorsque  $l = 0$ , on parlera d'orbitale  $s$ , pour  $l = 1$ , d'orbitale  $p$ , pour  $l = 2$ , d'orbitale  $d$ , etc. Bref, la configuration électronique d'un atome décrit la façon dont les électrons sont distribués sur les différentes orbitales. Notons encore que les électrons doivent satisfaire au *principe d'exclusion de Pauli* qui stipule que deux électrons d'un atome ne peuvent pas être caractérisés par les mêmes valeurs des nombres quantiques  $n$ ,  $l$ ,  $m_l$  et  $m_s$ .

#### 2.4.1.1.2 Spectroscopie électronique des atomes et molécules

Prenons un atome ou une molécule possédant  $k$  électrons de valence sur sa couche externe. Chacun de ces électrons est défini par son moment angulaire  $\vec{l}_i$  avec  $i = 1, \dots, k$ . L'interaction entre les électrons dépend de l'orientation relative des vecteurs  $\vec{l}_i$  ainsi que du moment angulaire orbital total  $\vec{L}$  tel que  $\vec{L} = \vec{l}_1 + \vec{l}_2 + \dots + \vec{l}_k$ . Dans le cadre d'une molécule diatomique, le mouvement des électrons s'établit selon une symétrie cylindrique définie par l'axe internucléaire de la molécule. La composante  $\vec{L}$  est orientée autour de la direction spatiale  $z$  et précesse autour de celui-ci.



**FIGURE 2.3** – Représentation du vecteur  $\vec{L}$  et de sa projection  $M_L$  sur l'axe internucléaire  $z$ . Le schéma est présenté pour un système avec deux électrons de valence.

Au moment angulaire orbital total  $\vec{L}$  est associé le nombre quantique  $L$  pour les atomes et  $\Lambda$  pour les molécules. La valeur de ce nombre quantique est limitée par les valeurs des nombres quantiques orbitaux  $l_i$  :

$$L = l_1 + l_2 + \dots + l_k, l_1 + l_2 + \dots + l_k - 1, \dots, |l_1 - l_2 - \dots - l_k|$$

Pour une molécule diatomique, on introduit le vecteur  $\vec{M}_L$  qui correspond à la projection de  $\vec{L}$  sur l'axe  $z$  (cf. figure 2.3). Cette composante projetée est la seule constante du mouvement. Elle vaut  $M_L \hbar$  avec  $M_L$  qui peut prendre  $2L+1$  valeurs de  $-L$  à  $+L$  par pas de 1 et  $\hbar$  qui vaut  $h/2\pi$  ( $h$  étant la constante de Planck).

Les états décrits par des nombres quantiques  $L$  ( $\Lambda$ ) différents sont appelés "termes électroniques atomiques (moléculaires)". Ils se notent par des lettres capitales latines S, P, D, F, ... pour les atomes et grecques  $\Sigma$ ,  $\Pi$ ,  $\Delta$ ,  $\Phi$ , .. pour les molécules selon que  $L$  ( $\Lambda$ ) prend la valeur 0, 1, 2, 3, ...

Les états caractérisés par une même valeur absolue de  $M_L$ , c'est-à-dire possédant une même énergie, sont dits dégénérés (sauf dans le cas où  $M_L = 0$ ). Pour lever la dégénéres-

cence sur ces états, on introduit un nombre quantique supplémentaire,  $S$ , qui est associé au spin  $\vec{S}$  de l'atome ou au spin  $\vec{\Sigma}$  de la molécule. Le spin correspond à la somme vectorielle des moments de spin de chaque électron individuel  $i$  :  $\vec{S} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2 + \dots + \vec{s}_k$ . Le nombre quantique  $S$  peut être entier ou demi-entier selon que le nombre total d'électrons dans l'atome ou la molécule est pair ou impair. A partir de la valeur de  $S$ , la multiplicité de l'état électronique peut être déduite. En effet, celle-ci est donnée par  $2S+1$ . En fonction de la valeur de la multiplicité, les termes électroniques seront qualifiés de *singulet* ( $S=0$ ), *doublet* ( $S=1/2$ ), *triplet* ( $S=1$ ), ... La multiplicité se note en haut à gauche du terme décrivant la configuration des électrons :  $^1S, ^3P, ^2\Sigma, \dots$

Le moment angulaire de spin couplé à la charge de l'électron introduira le moment magnétique intrinsèque de spin  $\vec{\mu}_i$ . Ce moment est à l'origine de la structure fine observée dans les spectres atomique et moléculaire. La structure fine correspond à la séparation d'une raie spectrale en plusieurs composantes de fréquences très voisines. L'écartement introduit par la structure fine est toujours plus petit comparé à la différence entre les divers niveaux de  $L$  ou  $\Lambda$  (sauf pour l'atome d'hydrogène).

Lorsque l'hypothèse de Russel-Sanders est satisfaite, c'est-à-dire lorsque l'interaction électrostatique est plus grande que l'énergie magnétique de l'interaction spin-orbite, l'addition vectorielle de  $\vec{L}$  et de  $\vec{S}$  engendre le moment cinétique total  $\vec{J}$  pour les atomes et  $\vec{\Omega}$  pour les molécules, tels que  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$  et  $\vec{\Omega} = \vec{\Lambda} + \vec{\Sigma}$ . Les nombres quantiques  $J$  et  $\Omega$  sont associés au moment cinétique total. Ils prendront toutes les valeurs entières et demi-entières comprises entre  $L+S$  et  $|L-S|$  pour les atomes et  $\Lambda + \Sigma$  et entre  $|\Lambda-\Sigma|$  pour les molécules.

La valeur de  $J$  ( $\Omega$ ) est ajoutée en indice inférieur à droite du symbole décrivant le terme électronique. Le terme  $^3P_2$  se rapporte à  $S=1$ ,  $L=1$  et  $J=2$ . L'état moléculaire  $^2\Pi_{3/2}$  correspond à  $\Sigma=1/2$ ,  $\Lambda=1$  et  $\Omega=3/2$ .

Pour les molécules diatomiques, les états électroniques sont représentés par des lettres capitales.  $X$  désigne l'état fondamental et  $A, B, C, D, \dots$  servent à décrire les états excités possédant une même multiplicité que l'état fondamental. L'ordre de ces lettres suit en principe l'ordre croissant d'énergie des niveaux. Les états excités ayant une multiplicité différente de celle de l'état fondamental  $X$  seront décrits par les lettres minuscules  $a, b, c, d, \dots$  dont l'ordre est également défini en fonction de l'ordre croissant d'énergie. Une molécule diatomique est également caractérisée par un moment lié à la rotation du noyau, noté  $\vec{N}$ . Dans ce cas, le moment cinétique total avec spin devient  $\vec{J} = \vec{\Omega} + \vec{N}$ .

Enfin, tout plan passant par l'axe internucléaire d'une molécule diatomique se comporte comme un plan de symétrie de la molécule. Si réflexion il y a, la fonction d'onde sera indiquée avec un signe négatif,  $\Sigma^-$ , sinon elle sera notée  $\Sigma^+$ . Notons encore que pour les molécules diatomiques homonucléaires, en plus de l'axe de symétrie, il existe un centre de symétrie autour duquel gravitent les électrons. Dans ce cas particulier, si la fonction d'onde demeure inchangée après réflexion par le centre de symétrie, celle-ci sera qualifiée de fonction *paire* et indiquée *g* (pour *gerade* signifiant pair en allemand). Si la fonction est modifiée à la suite d'une réflexion, alors elle sera *impaire* et adoptera l'indice *u* (pour *ungerade*).

Au final, la configuration électronique d'un atome sera décrite par :

$$^{2S+1}K_J$$

avec  $K$  le symbole principal,  $2S+1$  la multiplicité et  $J$  le nombre quantique associé au moment cinétique total.

Le terme spectroscopique d'une molécule diatomique prendra la forme :

$$X^{2S+1}\Lambda_{\Omega}^{+/-}$$

avec  $X$  représentant l'état électronique,  $2S+1$  la multiplicité,  $\Lambda$  l'état moléculaire et  $\Omega$  le nombre quantique associé au moment cinétique total.

#### 2.4.1.2 Transitions et règles de sélection

Une transition est générée suite à l'interaction entre un atome ou une molécule et le champ de rayonnement. En effet, cette interaction induit une perturbation qui entraîne une certaine probabilité de trouver l'électron sur un état final  $j$  différent de son état d'origine  $i$ . La fréquence du champ associé obéit alors à la relation  $h\nu = |E_j - E_i|$ . La détermination de cette probabilité par unité de temps nous fournit la probabilité pour les transitions vers des niveaux d'énergie supérieure (qui donnera une raie en absorption) et vers les niveaux d'énergie inférieure (qui donnera une raie en émission). Toutes les transitions ne sont cependant pas a priori autorisées mais doivent satisfaire à certaines règles. Pour les transitions dipolaires électriques, ces règles sont énumérées ci-dessous :

- $\Delta\Lambda = 0, \pm 1$  : seul le passage d'un état électronique à l'état électronique voisin est autorisé.
- Les transitions  $\Sigma - \Sigma$  ne sont possibles que dans les cas où  $+ \leftrightarrow +$  ou  $- \leftrightarrow -$ .
- $\Delta S = 0$  : le spin doit demeurer identique après une transition.

- $\Delta J = 0, \pm 1$  à l'exception des transitions  $J=0 \rightarrow J=0$  qui sont interdites.
- $\Delta M_J = 0, \pm 1$
- Seules les transitions affectées par un changement de parité sont autorisées.
- Dans le cas des molécules homonucléaires, les transitions satisfont à la règle  $g \leftrightarrow u$ .

Si aucune transition n'est permise à partir d'un état excité alors le système demeurera dans cette situation aussi longtemps qu'une désexcitation collisionnelle ou une excitation vers un état d'énergie supérieure lui permettra de retourner à la normale. Ces états sont qualifiés d'états métastables. Cependant, il arrive que dans les milieux peu denses, certaines transitions se produisent en violant l'une de ces règles. On parle alors de *transitions interdites*. Les raies d'oxygène étudiées dans cette thèse proviennent de transitions interdites et une description détaillée de celles-ci sera fournie dans le chapitre 3.

### 2.4.1.3 Niveaux énergétiques

Dans une molécule, les électrons se déplacent, le noyau oscille autour de sa position d'équilibre et la molécule se meut dans tout son ensemble. Pour chacun de ces mouvements, une énergie est associée. L'énergie d'une molécule se divise donc en trois parties quantifiables : l'énergie électronique provenant du mouvement des électrons, l'énergie vibrationnelle due à la vibration induite par l'oscillation des noyaux et l'énergie rotationnelle liée à la rotation de la molécule. Dès lors, l'énergie totale se définit par :

$$E_{\text{totale}} = E_{\text{électronique}} + E_{\text{vibrationnelle}} + E_{\text{rotationnelle}}$$

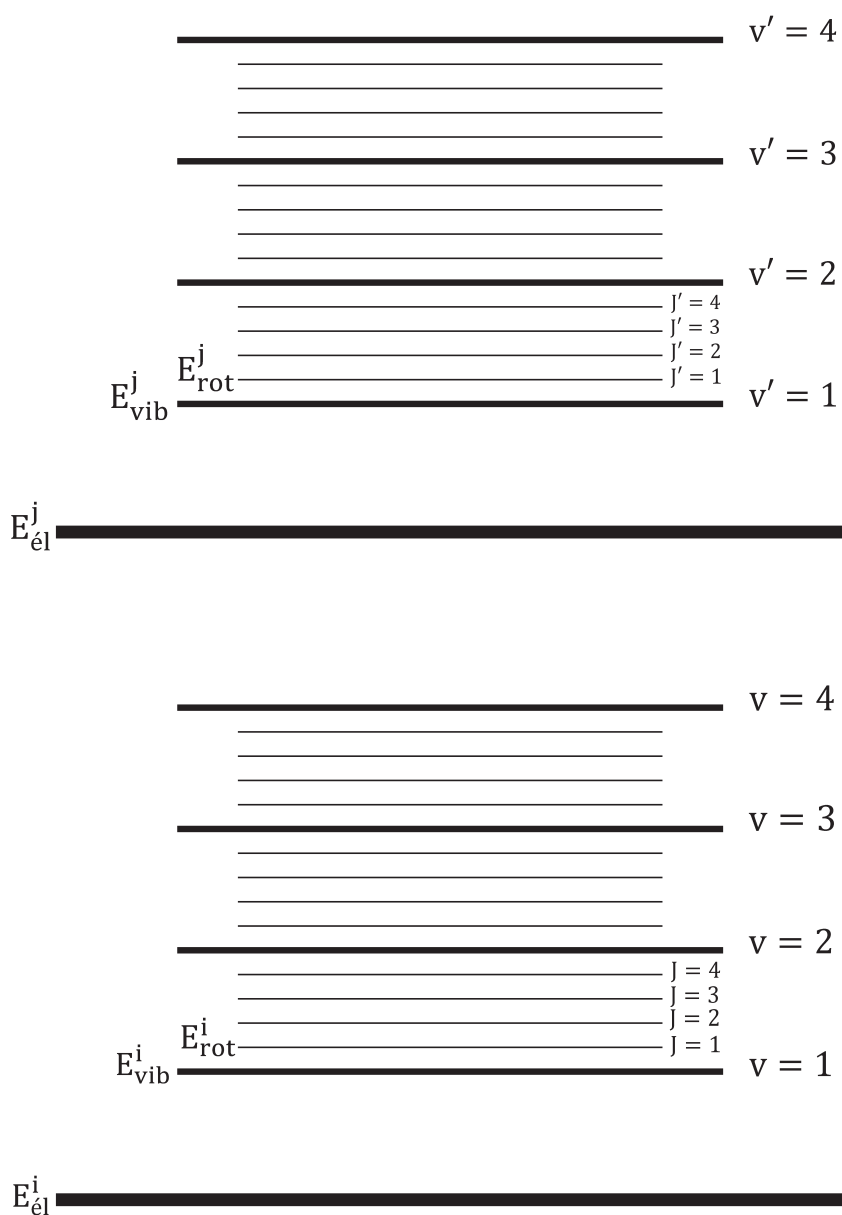
avec la propriété que

$$E_{\text{électronique}} \gg E_{\text{vibrationnelle}} \gg E_{\text{rotationnelle}}$$

Les niveaux électroniques sont largement espacés. Entre ceux-ci on retrouve les niveaux vibrationnels plus fins à l'intérieur desquels on distinguera les niveaux rotationnels énergiquement très serrés (cf. figure 2.4).

D'emblée, l'étude des trois mouvements d'une molécule est complexe. L'approximation de Born-Oppenheimer est très souvent utilisée afin de permettre le traitement de ces mouvements. Celle-ci consiste à interpréter les trois types de mouvements comme des mouvements distincts les uns des autres. Cette approximation est applicable lorsque la masse des noyaux est grande devant la masse des électrons.

Une transition spectrale se décrit par la variation d'énergie induite par le passage de l'état



**FIGURE 2.4** – Représentation schématique des niveaux d'énergie électroniques ( $E^i, E^j$ ), vibrationnels (caractérisés par les nombres quantiques  $v$  et  $v'$ ) et rotationnels (définis par les nombres quantiques  $J$  et  $J'$ )

initial  $i$  à l'état final  $j$ . Par la loi de Planck, la transition spectrale se note :

$$h\nu = \Delta E_{\text{électronique}} + \Delta E_{\text{vibrationnelle}} + \Delta E_{\text{rotationnelle}} \quad (2.1)$$



$$h\nu = (E_{\text{él}}^j - E_{\text{él}}^i) + (E_{\text{vib}}^j - E_{\text{vib}}^i) + (E_{\text{rot}}^j - E_{\text{rot}}^i) \quad (2.2)$$

Les spectres électroniques, tels que ceux qui seront analysés au cours de cette thèse, sont constitués de système de bandes. Le premier terme de l'équation (2.2) définit la position du système de bandes. Le deuxième se rapporte à la position relative d'une bande. Le troisième détermine la structure fine de la bande. Ces types de spectres sont observés dans les domaines ultraviolet et visible. En infrarouge proche, seules les énergies vibrationnelles et rotationnelles changent et  $E_{\text{él}}^j - E_{\text{él}}^i = 0$ . Dans ce cas, on parle de spectres ro-vibrationnels. Enfin, en infrarouge lointain, seule la rotation est modifiée et les spectres sont dits de rotation pure.

## 2.4.2 Découvertes cométaires amenées par la spectroscopie

D'un point de vue général, la spectroscopie est une technique qui permet de décomposer la lumière afin d'observer en détail la distribution d'énergie d'un objet. En astronomie, cela permet également de déterminer la composition chimique des astres en fonction des raies observées. Dès lors, nombre d'informations sont extraites des comètes via l'analyse de leurs spectres. Le spectre d'une comète brillante est caractérisé par une émission continue appelée *continuum* et des émissions discrètes qui se présentent sous forme de raies ou de bandes de raies. Le continuum se manifeste principalement au centre de la coma et se présente dans le spectre par une largeur spatiale plus ou moins intense en fonction de la quantité de poussières émises par la comète et de sa distance à la Terre. Il est dû à la diffusion de la radiation solaire par les grains de poussières cométaires. Dans ce continuum, des raies d'absorption sont distinguées. Il s'agit bien sûr des raies solaires.

Les émissions discrètes se superposent au continuum. La plupart de ces émissions sont spatialement symétriques par rapport au continu solaire et appartiennent à des molécules neutres présentes dans la coma. Lorsqu'elles sont asymétriques, elles correspondent à des atomes ou molécules ionisés une fois et produits dans la queue cométaire. Ces émissions spectrales sont proportionnelles à l'intensité de la radiation solaire ainsi qu'au nombre d'atomes et de molécules présents dans la comète.

La majorité des raies en émission observées dans les spectres cométaires sont dues au phénomène de fluorescence stimulée par la radiation solaire. Les photons solaires de longueur d'onde fixée sont absorbés par les atomes et les molécules contenus dans la comète. L'atome ou la molécule concerné monte, dans un premier temps, vers un niveau d'énergie plus élevé. Il existe trois types de transitions provoquées suite à l'excitation des particules par la radiation solaire, à savoir les transitions *rotationnelles*, *vibrationnelles* et *électroniques*. Par définition, une transition *rotationnelle* correspond à un changement d'état de

rotation au sein d'une même bande vibrationnelle. Ce type de transition est essentiellement visible dans le domaine de longueur d'onde radiométrique et le temps de vie des molécules excitées est de l'ordre de la seconde. Au niveau des règles de sélection, seules les transitions entre niveaux voisins sont autorisées. En fonction des valeurs initiale et finale du nombre quantique  $J$ , différents types de transitions seront générés. Si les photons ultraviolets entraînent la molécule de l'état  $J$  à  $J' = J+1$ , la raie résultante sera définie de type R. Lorsque la transition porte la molécule de l'état  $J$  à  $J' = J-1$ , la raie sera de type P. Enfin, on parlera de raie de type Q pour les transitions de  $J$  à  $J' = J$ . Une transition *vibrationnelle* est relative au passage des particules vers une bande vibrationnelle différente. Ces transitions requièrent toujours une quantité d'énergie qui correspond au domaine infrarouge du spectre. Le temps de vie des particules excitées par transitions vibrationnelles est de l'ordre du millième de seconde. Si - en plus de changer de bande vibrationnelle - la particule subit un changement de rotation, la transition est dite *ro-vibrationnelle*. Enfin, une transition *électronique* est définie par un changement d'arrangement des électrons. Ces transitions sont observées principalement dans les domaines ultraviolet, visible et proche infrarouge. Le temps de vie des particules ayant subi ce type de transition est de  $10^{-8}$  secondes. De plus, un changement de niveau électronique peut également inclure une modification de bandes vibrationnelles et/ou rotationnelles pour créer des transitions *vibro-électroniques* et *ro-vibro-électroniques*. Notons qu'une raie cométaire sera faible si le niveau supérieur dont elle est issue est peuplé par des transitions dont les longueurs d'onde tombent à l'endroit des raies d'absorption solaires, c'est-à-dire, là où il y a peu d'énergie disponible pour leur excitation. L'effet Greenstein peut également influencer les intensités des raies étant donné qu'il produit un décalage des raies suite aux mouvements présents à l'intérieur de l'atmosphère cométaire.

En plus du processus de fluorescence, les collisions peuvent contribuer à la population des niveaux. Cependant, ne seront peuplés par les collisions que les niveaux de rotation inférieurs, l'énergie induite par les chocs étant trop faible pour que cela entraîne une transition électronique. Ajoutons que les collisions jouent un rôle nettement moins important que la fluorescence. En effet, celles-ci ne sont pas fréquentes car l'atmosphère cométaire reste un milieu très ténu dont la densité décroît au plus on s'éloigne du noyau. Enfin, certaines émissions peuvent être causées par une population directe d'atomes ou de molécules dans un état excité, produits par *photodissociation*. C'est notamment le cas pour les raies interdites de l'oxygène pour lesquelles les probabilités de transition sont trop faibles pour que l'absorption du rayonnement solaire puisse exciter les atomes de façon appréciable par le phénomène de fluorescence.

Les premiers spectres cométaires ont été obtenus par l'astronome Giovanni Battista Donati au XIX<sup>ème</sup> siècle. Il fut le pionnier de la spectroscopie des comètes avec l'étude de la composition chimique de la comète C/1964 N1 (Tempel). Dans les spectres de cette comète, il a détecté les bandes d'émission Swan de la molécule de C<sub>2</sub>, même si celles-ci n'ont pas été identifiées à l'époque. Quelques années plus tard, William Huggins a remarqué que la coma de la comète 55P/Tempel-Tuttle générait un continu montrant qu'une grande partie de la lumière produite par la comète est en fait de la lumière solaire réfléchie. Au cours du XX<sup>ème</sup> siècle, l'observation des comètes au moyen d'instruments au sol et spatiaux a pris beaucoup d'ampleur. Les études se sont portées sur tous les domaines spectraux afin de dégager un maximum d'informations sur ces corps de glace. Nous proposons, ci-après, d'exposer un bref aperçu des découvertes amenées par spectroscopie dans tous les domaines de longueur d'onde. Nous détaillerons davantage la spectroscopie du domaine du visible étant donné que les données sur lesquelles se base le travail de cette thèse couvrent cette région spectrale.

#### 2.4.2.1 Spectroscopie cométaire dans le domaine du visible

Dans le domaine du visible, le spectre d'une comète révèle des centaines de raies d'émission qui proviennent de molécules ou radicaux, comme CN, C<sub>2</sub>, C<sub>3</sub>, CH, OH, NH et NH<sub>2</sub>, qui sont les produits de la dissociation de molécules plus complexes. Ces raies peuvent également provenir d'atomes tels que l'hydrogène (H), l'oxygène (O) et l'azote (N) ou encore être causées par des ions moléculaires comme CO<sup>+</sup>, CO<sub>2</sub><sup>+</sup>, H<sub>2</sub>O<sup>+</sup> (Feldman et al., 2004b). Ajoutons que les raies dues aux atomes métalliques comme le calcium, le potassium, le fer, le nickel ou le chrome n'apparaissent que lorsque la comète passe très près du Soleil (*sun-grazing comets*). Près du Soleil, la chaleur devient suffisante pour sublimer la composante réfractaire de la matière cométaire. L'observation de la comète Ikeya-Seki (1965 VIII) jusqu'à une distance héliocentrique de ~0.2 ua a ainsi permis la détection de nombreux éléments lourds tels que Ca, Na, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, K et V (Slaughter, 1969; Arpigny, 1979).

L'identification des molécules parentes présentes dans le noyau des comètes n'est pas aisée et est même souvent impossible. Il est difficile de les observer directement dans le visible car leurs signatures spectrales se situent principalement dans les domaines infrarouges et millimétriques. En effet, les molécules les plus abondantes dans le gaz de la coma des comètes, CO, CO<sub>2</sub> et H<sub>2</sub>O, n'ont pas de transition électronique dans le visible ou l'ultraviolet. Ces molécules ne peuvent être détectées directement que via leurs transitions vibrationnelles dans l'infrarouge ou via leurs transitions rotationnelles dans le domaine radio. Cependant, des hypothèses peuvent tout de même être émises quant à leur

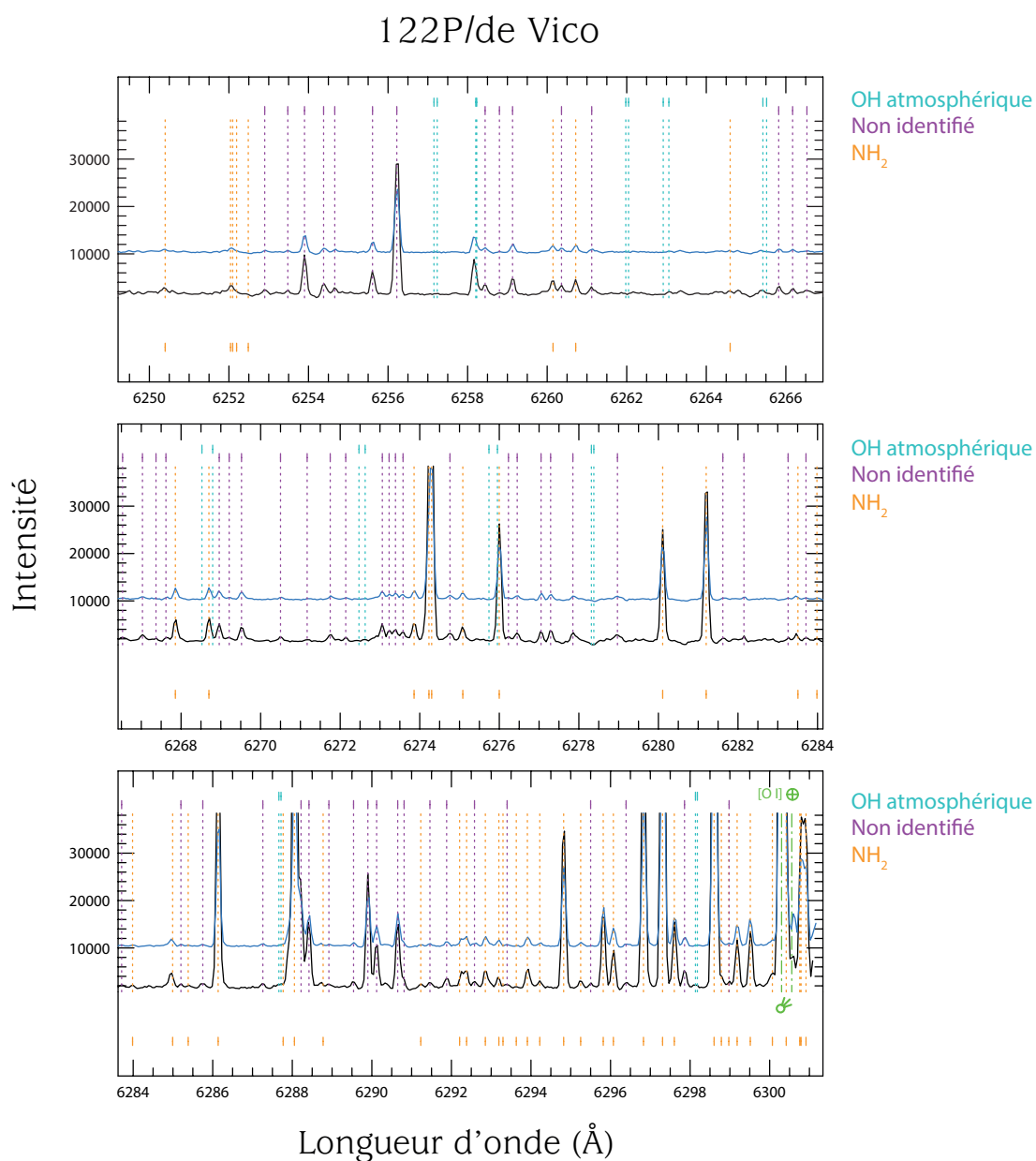
existence après avoir identifié les molécules secondaires qui résultent de la photodissociation des molécules parentes sous l'action du rayonnement UV solaire. L'observation des molécules filles est plus facile dans le visible étant donné qu'elles possèdent de fortes signatures spectrales dans cette partie du spectre.

Notre travail est basé sur l'étude de spectres obtenus depuis le sol couvrant les régions spectrales du visible et du proche ultraviolet.

Species*	Transition	System Name	Wavelength (Å)
OH	$A^2\Sigma^+ - X^2\Pi_i$ (0,0)		3085
CN	$B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$ (0,0)	Violet	3883
	$A^2\Pi - X^2\Sigma^+$ (2,0)	Red	7873
C <sub>2</sub>	$d^3\Pi_g - a^3\Pi_u$ (0,0)	Swan	5165
	$A^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$ (3,0)	Phillips	7715
	$D^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ (0,0)	Mulliken	2313
C <sub>3</sub>	$\tilde{A}^1\Pi_u - \tilde{X}^1\Sigma_g^+$	Comet Head Group	3440–4100
CH	$A^2\Delta - X^2\Pi$ (0,0)		4314
	$B^2\Sigma^- - X^2\Pi$ (0,0)		3871, 3889
CS	$A^1\Pi - X^1\Sigma^+$ (0,0)		2576
NH	$A^3\Pi_1 - X^3\Sigma^-$ (0,0)		3360
NH <sub>2</sub>	$\tilde{A}^2A_1 - \tilde{X}^2B_1$		4500–7350
O I <sup>1</sup> D	<sup>1</sup> D– <sup>3</sup> P		6300, 6364
O I <sup>1</sup> S	<sup>1</sup> S– <sup>1</sup> D		5577
C I <sup>1</sup> D	<sup>1</sup> D– <sup>3</sup> P		9823, 9849
CO <sup>+</sup>	$B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$ (0,0)	First Negative	2190
	$A^2\Pi - X^2\Sigma^+$ (2,0)	Comet Tail	4273
CO <sub>2</sub> <sup>+</sup>	$\tilde{B}^2\Sigma_u - \tilde{X}^2\Pi_g$		2883, 2896
	$\tilde{A}^2\Pi_u - \tilde{X}^2\Pi_g$	Fox-Duffendack-Barker	2800–5000
CH <sup>+</sup>	$A^1\Pi - X^1\Sigma^+$ (0,0)	Douglas-Herzberg	4225, 4237
OH <sup>+</sup>	$A^3\Pi - X^3\Sigma^-$ (0,0)		3565
H <sub>2</sub> O <sup>+</sup>	$\tilde{A}^2A_1 - \tilde{X}^2B_1$		4270–7540
N <sub>2</sub> <sup>+</sup>	$B^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$ (0,0)	First Negative	3914

\*CO is both a dissociation product and a native molecular species and is discussed by *Bockelée-Morvan et al.* (2004).

**FIGURE 2.5** – Principales espèces détectées par spectroscopie dans le domaine du visible. Tableau extrait de l'article de Feldman et al. (2004b).



**FIGURE 2.6** – Spectres de la comète 122P/de Vico couvrant une petite partie de la région visible. Le spectre bleu correspond à une observation acquise le 3 octobre 1995 et le spectre noir se rapporte à une observation obtenue le 4 octobre 1995. Le spectre bleu a été volontairement décalé en intensité afin d’avoir une meilleure visualisation. Les raies identifiées et non identifiées sont notées sur le spectre. Notons que les raies d’oxygène cométaire ([OI]) et atmosphérique (⊕) sont détectées. Figure extraite de l’article de Cochran & Cochran (2002).

### 2.4.2.2 La spectroscopie cométaire ultraviolette

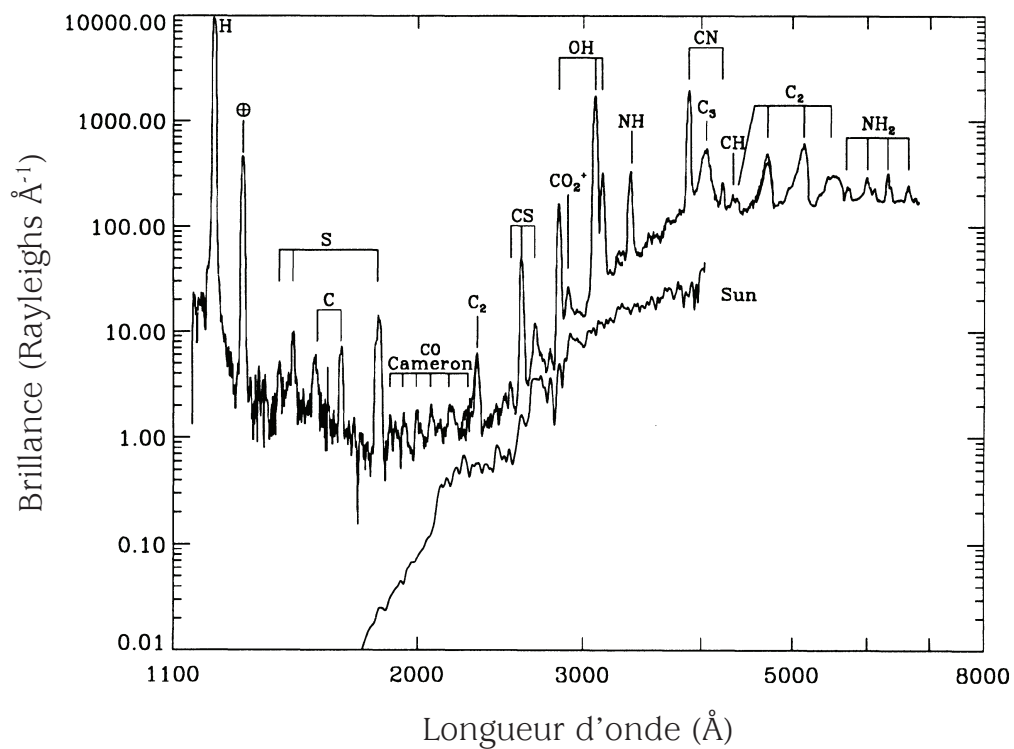
L'utilisation du satellite spatial OAO-2 (Orbiting Astronomical Observatory-2) a apporté la première observation ultraviolette cométaire de la comète Tago-Sato-Kosaka 1969 IX (Code et al., 1970). En 1978, un projet commun ESA-NASA a abouti à la réalisation de IUE (*International Ultraviolet Explorer*) qui a offert des spectres UV de plus de 40 comètes pendant près de 18 ans. Le télescope spatial FUSE (*Far Ultraviolet Spectroscopic Explorer*) a également contribué à la collecte de données cométaires UV de 1999 à 2007. Actuellement, le télescope spatial HST (*Hubble Space Telescope*) permet d'acquérir des spectres ultraviolets de comètes (Weaver & Feldman, 1992). Ceux-ci sont cependant plutôt rares en raison du peu de temps disponible sur ce télescope très sollicité.

Les principales transitions engendrées par les atomes d'hydrogène, de carbone, d'azote, d'oxygène et de soufre se forment dans le domaine ultraviolet. Ces atomes étant justement considérés parmi les plus abondants de l'atmosphère cométaire, l'accès à cette région spectrale est d'une grande importance. Étant donné que le Soleil ne produit pas beaucoup de rayonnement ultraviolet, les spectres cométaires UV sont caractérisés par un faible continu solaire. Ces spectres sont par contre dominés par la raie Lyman- $\alpha$  de l'hydrogène située à 1216 Å ainsi que par la bande électronique du radical OH observée aux alentours de 3000 Å. OH est, avec la molécule de CN, un des éléments les plus abondants dans les comètes. Son origine se trouve essentiellement dans la molécule d'eau et l'intensité de ses raies est un bon indicateur du taux de production de gaz généré par la comète et donc, a fortiori, de son activité. La localisation des raies de OH est à la limite du "cut-off" atmosphérique causé par l'ozone à 3000 Å. Dès lors, les spectres acquis par le spectrographe UVES (qui a la particularité d'observer loin dans le bleu) nous offrent la possibilité d'étudier le radical OH depuis le sol.

Les spectres UV présentent également une bande de raies de CO à 145 nm qui est une molécule stable qui provient des glaces cométaires du noyau et de la coma. Le CO s'est avéré être la première molécule parente identifiée par spectroscopie (Feldman & Brune, 1976). Enfin, d'autres raies signalent aussi la présence de monoxyde de carbone dans les comètes. Il s'agit du groupement de raies situées aux alentours de ~220 nm et produites suite à la photodissociation du dioxyde de carbone (Weaver et al., 1994). Ces raies sont plus communément nommées *bande de Cameron du CO*.

Ajoutons que les transitions des gaz nobles (He, Ne, Ar, Kr, Xe) se trouvent aussi dans l'UV lointain ( $\lambda \leq 1200$  Å). Ces longueurs d'onde sont malheureusement très difficiles d'accès et aucune détection convaincante de ces gaz n'a, jusqu'à ce jour, été reportée à l'exception de l'Argon qui semble avoir été détecté par Stern et al. (2000). L'étude de ces gaz est pourtant particulièrement intéressante car ceux-ci sont chimiquement inertes

et hautement volatils ce qui en font des indices potentiels pour l'histoire thermique des comètes.



**FIGURE 2.7** – Spectre ultraviolet de la comète 103P/Hartley 2 obtenu par l'instrument FOS (*Faint Object Spectrograph*) installé à bord du HST (*Hubble Space Telescope*). Figure extraite de l'article de Weaver & Feldman (1992).

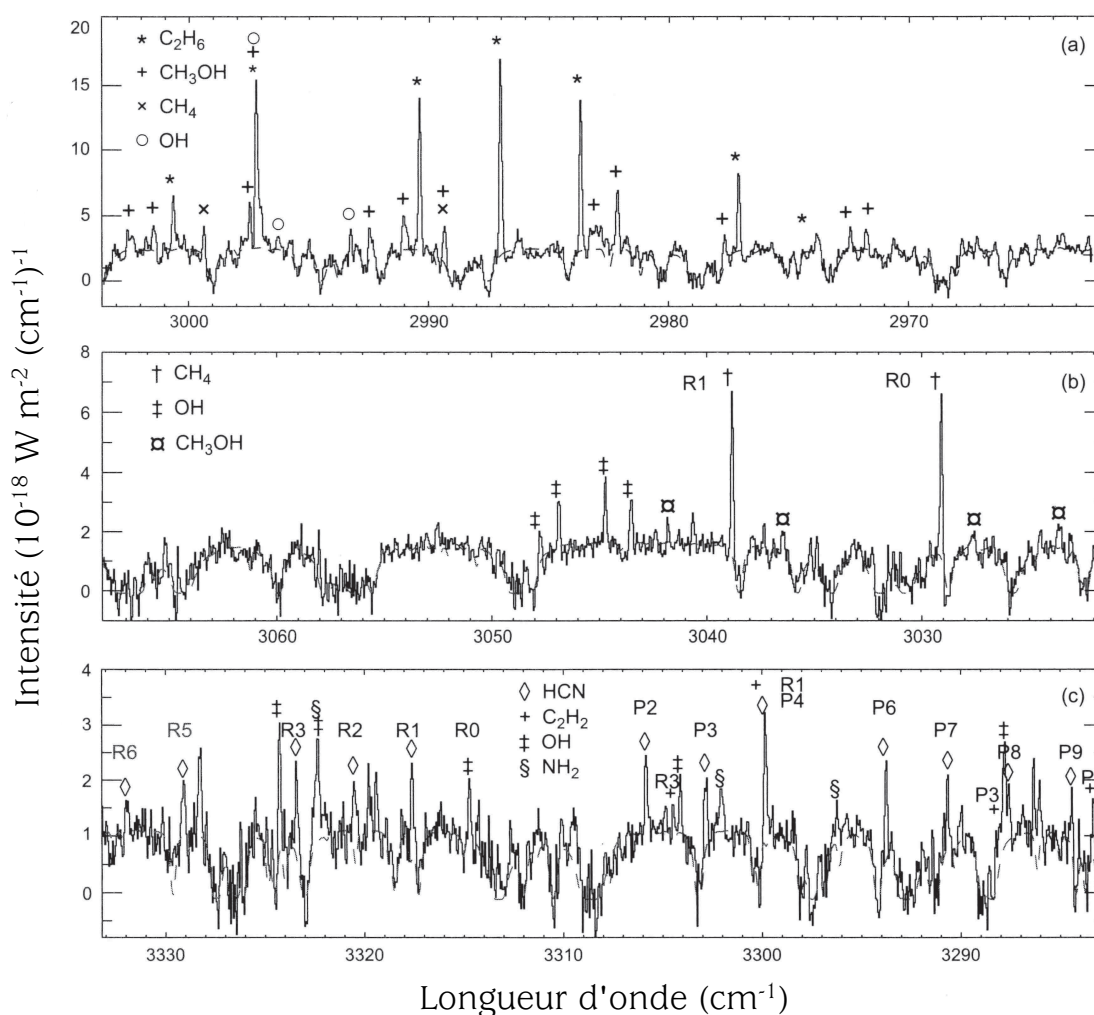


### 2.4.2.3 La spectroscopie cométaire infrarouge

La spectroscopie cométaire infrarouge (IR) permet de mieux détecter les molécules parentes qui s'échappent du noyau. En effet, les comètes sont des corps froids et possèdent une température de surface d'environ 300 K à 1 ua du Soleil. Considérant que le noyau et les grains de poussières ont une émission semblable à celle d'un corps noir, la loi de Wien ( $\lambda_{\max} = \frac{2.898 \cdot 10^{-3}}{T}$ ) conclut que l'émission maximale a lieu aux alentours de 10  $\mu\text{m}$ , autrement dit, dans l'infrarouge.

Les premières observations satellitaires ont été réalisées par IRAS (*Infrared Astronomical Satellite*) qui a effectué, dès 1983, le suivi d'une trentaine de comètes (Matson et al., 1986). A partir de ces mesures, il a été mis en évidence que les spectres infrarouges des comètes sont caractérisés par une forte et large émission à 3.4  $\mu\text{m}$ . Cette émission est en partie produite par les bandes vibrationnelles du méthanol ( $\text{CH}_3\text{OH}$ ) à 3.3  $\mu\text{m}$  (Knacke et al., 1986; Bockelée-Morvan et al., 1991, 1994). Les molécules de  $\text{H}_2\text{O}$  se manifestent dans l'infrarouge par une bande vibrationnelle importante à 2.7  $\mu\text{m}$  et les signatures correspondant au  $\text{CO}_2$  se trouvent à 4.25  $\mu\text{m}$  (Combes et al., 1988). Une bande d'émission observée aux alentours de 3.28  $\mu\text{m}$  indique également la présence de composés organiques PAHs (Polycyclic aromatic hydrocarbon), c'est-à-dire des molécules contenant uniquement des atomes de carbone et d'hydrogène (Davies et al., 1991; Bockelée-Morvan et al., 1995)

De nos jours, des spectrographes haute résolution installés sur les grands télescopes implantés en altitude permettent une étude détaillée des molécules mères en infrarouge depuis le sol. Le spectrographe à haute résolution NIRSPEC (*Near-InfraRed SPECTrometer*) installé sur le Keck II a ainsi révélé ou confirmé l'existence de nombreuses molécules, comme l'eau, le monoxyde de carbone, le méthanol, le méthane, l'éthane, l'acétylène et le cyanure d'hydrogène (Mumma et al., 2001). La plus grande difficulté des études menées depuis le sol reste la présence de raies d'absorption telluriques qui sont très nombreuses et intenses dans ce domaine de longueur d'onde. Celles-ci sont principalement dues à l'eau atmosphérique. Depuis 2006, l'analyse des spectres infrarouges s'est intensifiée avec les données fournies par les spectromètres IRC (*near-InfraRed Camera/spectrometer*) et FIS (*Far-Infared camera/Spectrometer*) du télescope spatial AKARI (Ootsubo et al., 2012a,b). De plus, les spectromètres PACS (*Photodetector Array Camera and Spectrometer*) et HIFI (*Heterodyne Instrument for the Far-Infrared*) du télescope spatial Herschel ont fourni de nombreux spectres cométaires entre 2009 et 2013 dans lesquels la molécule de  $\text{H}_2\text{O}$  et ses isotopes ont notamment été étudiés (Bockelée-Morvan et al., 2010; Hartogh et al., 2011; Bockelée-Morvan et al., 2012, et références comprises)



**FIGURE 2.8** – Spectres infrarouges de la comète C/1999 H1 (Lee) acquis le 21 août 1999 avec le spectromètre NIRSPEC (*Near-InfraRed SPECTrometer*) du télescope Keck. La ligne pointillée présente un spectre synthétique de la transmittance atmosphérique. Figures adaptées de Mumma et al. (2001) et extraites de Bockelée-Morvan et al. (2004).

#### 2.4.2.4 La spectroscopie cométaire dans le domaine radiométrique

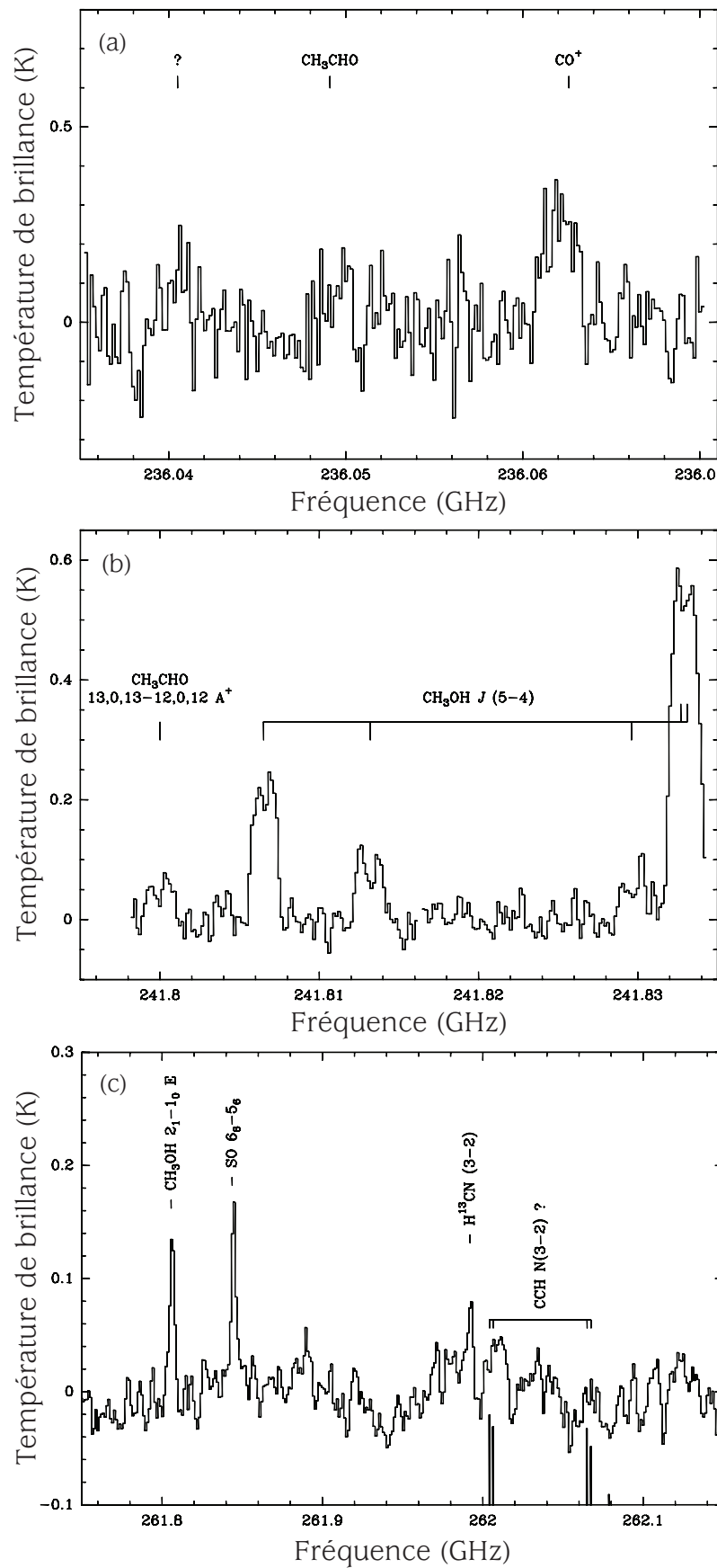
Suite à l'analyse du spectre radio de la comète C/1973 E1 (Kohoutek) en décembre 1973, la raie du radical OH à 18 centimètres a été détectée (Turner, 1974). OH provient de la décomposition des molécules d'eau sous l'influence de la radiation solaire ultraviolette. L'analyse des spectres cométaires acquis dans le domaine radio a également permis la découverte du cyanide d'hydrogène (HCN) à 3 mm (Snyder et al., 1974; Huebner et al., 1974) correspondant à la molécule parente du radical CN ainsi que la détection du  $\text{H}_2\text{CO}$  et de ses molécules parentes, le  $\text{H}_2\text{S}$  et le  $\text{CH}_3\text{OH}$  (Bockelée-Morvan et al., 1990a). Le domaine radio a aussi montré que l'activité cométaire observée à de grandes distances héliocentriques est due aux molécules de CO,  $\text{N}_2$  et  $\text{CO}_2$ .

D'autres molécules parentes plus complexes ont également été mises en évidence dans ce domaine submillimétrique, comme notamment le  $\text{NH}_2\text{CHO}$ , le  $\text{HCOOH}$ , le  $\text{CH}_3\text{CHO}$  et le  $\text{HCOOCH}_3$  (Bockelée-Morvan et al., 1997, 2000; Crovisier et al., 2004; Biver et al., 2014). La détection d'un acide aminé dans une comète, la glycine  $\text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOH}$ , s'est faite à partir de spectres radiométriques (Briggs et al., 1992; Crovisier et al., 2004). Une revue détaillée des observations radiométriques est présentée dans l'article de Bockelée-Morvan et al. (2004).

Les spectres acquis en radio sont très sensibles à la vitesse de la comète par rapport au Soleil et par rapport à la Terre. Le profil réel des raies individuelles peut donc être extrait afin de permettre l'étude des mouvements des molécules dans la comète.

#### **2.4.2.5 La spectroscopie dans le domaine du rayonnement X**

La première détection d'une émission X cométaire a été réalisée sur la comète C/1996 B2 (Hyakutake) avec le satellite ROSAT (Lisse et al., 1996). Les astronomes ont remarqué que les comètes étaient des sources importantes de rayons X (Lisse et al., 2004, et références comprises). Cependant, il est impossible que ces émissions viennent directement du noyau en raison de leur faible température. Ces émissions trouvent leur origine dans l'interaction entre la coma de la comète et la radiation solaire de haute énergie. En effet, les émissions X seront produites suite à l'échange de charges entre les particules du vent solaire fortement ionisées et les composés neutres cométaires (Krasnopolsky et al., 2004; Bhardwaj et al., 2007; Bodewits et al., 2007).



**FIGURE 2.9** – Spectres radio de la comète C/1995 O1 (Hale-Bopp) observée avec le radio télescope de 30 mètres IRAM (*Institut de RadioAstronomie Millimétrique*) (a), l'interféromètre du Plateau de Bure (b) et le CSO (*Caltech Submillimeter Observatory*) (c). Figures extraites de Crovisier et al. (2004).

---

## 2.5 Conclusion

---

Les survols des comètes par des sondes spatiales nous ont apporté de nombreux renseignements sur la structure du noyau. Cependant, nous sommes encore actuellement incapables de définir un modèle exact de représentation du noyau cométaire. Tous les yeux se tournent en ce moment sur la mission spatiale Rosetta qui déposera très prochainement son atterrisseur Philae sur la surface de la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko. Celui-ci nous donnera très certainement une meilleure idée de la structure du noyau cométaire. Cependant, cette mission ne dévoilera pas tous les secrets des comètes mais uniquement quelques uns, et pour une seule comète bien précise. En effet, n'oublions pas que les comètes restent des objets uniques. Les premières images fournies par la caméra Osiris de Rosetta en sont témoins. La surprise fut d'ailleurs générale lorsque nous avons observé que le noyau de 67P était formé de deux lobes. La structure de ces petits corps est donc complexe et varie d'une comète à l'autre. Une étude systématique des comètes est donc primordiale pour en apprendre davantage sur la physique de ces corps.

L'intérêt de la connaissance des composés cométaires s'inscrit dans un contexte bien plus large. En effet, au cours de la formation du Système Solaire, de nombreux corps, comme les comètes et les astéroïdes, ont bombardé intensivement les planètes. En percutant la Terre, les comètes ont donc pu amener des composés chimiques qui n'étaient pas ou plus présents sur les planètes à l'époque des bombardements. Owen & Bar-Nun (1995) ont notamment avancé que les comètes pourraient être à l'origine des éléments volatils présents dans les atmosphères planétaires. De plus, les comètes sont peut-être liées à la source d'eau des planètes et plus particulièrement des océans terrestres (Chyba, 1987, 1990). Les molécules organiques qui composent les comètes auraient pu jouer un rôle dans la chimie prébiotique et, peut-être, dans l'apparition de la vie sur Terre. Dès lors, l'étude de la composition chimique des comètes est nécessaire et importante car elle pourra nous renseigner sur les comètes elles-mêmes, sur les processus chimiques en jeu au sein de celles-ci, et également sur les origines de certains éléments présents sur Terre.

La composition chimique des comètes est principalement déduite par spectroscopie. Cette technique permet d'étudier facilement les composés de la coma cométaire car l'atmosphère des comètes constitue un milieu généralement optiquement mince. Les molécules parentes sont néanmoins difficilement détectables dans le domaine du visible. Leurs observations directes exigent d'analyser les spectres dans les longueurs d'onde infrarouges et radio-millimétriques. Le domaine optique est plus propice à l'observation des molécules dites *filles* voire *petites-filles*. Toutefois, de nombreuses informations concernant les molécules parentes sont souvent déduites indirectement à partir de ces produits.

L'étude des gaz cométaires par spectroscopie a donné lieu à de grandes avancées dans la compréhension de la chimie des comètes depuis les trente dernières années. La spectroscopie dans tous les domaines de longueur d'onde est devenue un outil puissant pour la détermination des espèces moléculaires et atomiques présentes dans la coma, le noyau et les queues cométaires. L'avènement d'une technologie instrumentale de plus en plus pointue pour les spectrographes permet d'atteindre aujourd'hui des résolutions très élevées lors de l'acquisition des spectres et, dès lors, de détecter des composés de plus en plus rares. Les mesures obtenues à partir de ces spectres, combinées avec un modèle adéquat, comme celui décrit par Combi et al. (2004), conduisent à la détermination de l'abondance d'espèces présentes dans la comète étudiée. La comparaison de ces abondances dans différentes comètes confirme chaque jour la grande diversité inhérente aux évolutions physique et chimique des comètes.

# 3

---

## Les produits de dissociation de l'eau

---

### Sommaire

---

<b>3.1</b>	<b>Introduction</b> . . . . .	<b>45</b>
<b>3.2</b>	<b>L'oxygène atomique</b> . . . . .	<b>47</b>
<b>3.3</b>	<b>Le radical OH</b> . . . . .	<b>51</b>
<b>3.4</b>	<b>L'hydrogène atomique</b> . . . . .	<b>55</b>
<b>3.5</b>	<b>L'ion H<sub>2</sub>O<sup>+</sup></b> . . . . .	<b>55</b>

---





### 3.1 Introduction

---

La molécule d'eau est formée de deux atomes d'hydrogène et d'un atome d'oxygène. Il s'agit d'une molécule toute simple mais possédant de nombreuses propriétés physico-chimiques. Les molécules de H<sub>2</sub>O se forment à la suite de trois réactions chimiques combinées :



L'eau est omniprésente dans l'Univers. Toutefois, elle n'a, jusqu'à présent, été identifiée que sous forme gazeuse (vapeur d'eau) ou solide (glace d'eau). A l'heure actuelle, seule la Terre possède de l'eau sous son troisième état : liquide. L'eau liquide est de loin le constituant majeur des organismes vivants. Cette molécule apparaît comme un élément indispensable à l'apparition de la vie telle que nous la connaissons. L'eau liquide est donc recherchée activement dans l'Univers et notamment dans les exoplanètes afin de trouver des planètes semblables à la nôtre, propices à la vie. Une des grandes questions actuelles est donc : *Y-a-t-il de l'eau liquide dans l'Univers?* Jaumann et al. (2014) ont montré que des traces observées sur le sol martien correspondraient à la présence d'eau liquide dans le passé. Des hypothèses ont également été émises quant à l'existence d'un océan liquide sous la surface glacée d'Europe qui expliquerait son aspect craquelé (Schmidt et al., 2011).

La recherche de l'eau dans l'Univers a pour but de détecter des traces de vapeur d'eau ou de glace. Dans les deux cas, ces études se basent sur des données spectroscopiques infrarouges et millimétriques. L'observation de la vapeur d'eau est une tâche difficile parce que les molécules de H<sub>2</sub>O sont aussi présentes en grande quantité dans l'atmosphère terrestre. La vapeur d'eau dans le milieu interstellaire a ainsi été identifiée pour la première fois depuis le sol dans le domaine radio en 1969 (Knowles et al.). Les découvertes amenées par l'analyse de la vapeur d'eau se sont ensuite amplifiées avec l'envoi des télescopes spatiaux, comme ISO (*Infrared Space Observatory*), SWAS (*Submillimeter-Wave Astronomical Satellite*), Odin et Herschel.

La glace d'eau est plus facile à observer étant donné que celle-ci est moins présente dans l'atmosphère terrestre, surtout au niveau des sites astronomiques implantés à haute altitude et dans des endroits secs. Les signatures spectrales principales de la glace d'eau se situent dans l'infrarouge à 1.5  $\mu\text{m}$  et 2  $\mu\text{m}$ . De nombreux objets du Système Solaire pos-

sèdent de la glace d'eau, comme les satellites de Jupiter et de Saturne, les anneaux de Saturne, ainsi que les comètes.

En effet, en 1950, Fred Whipple avait prédit sur base de modèles thermochimiques que les noyaux des comètes devaient être constitués de glace d'eau. Les comètes deviennent donc des cibles privilégiées pour l'étude de l'eau dans le Système Solaire. Toutefois, le noyau cométaire n'est pratiquement pas visible en raison de la coma qui l'entoure. Les scientifiques cherchent donc à détecter les signatures spectrales de la vapeur d'eau présente dans la coma. Avant l'ère spatiale, l'observation directe de H<sub>2</sub>O gazeux était difficile puisque les raies de cette molécule se trouvaient principalement dans le domaine infrarouge. Des observations indirectes, c'est-à-dire via les produits de dissociation de H<sub>2</sub>O, ont néanmoins permis de mettre en évidence la présence de l'eau dans les comètes. Tout d'abord, la détection des raies d'hydrogène à 1216 Å (Lyman- $\alpha$ ) et 6563 Å (H $\alpha$ ) ainsi que des raies d'oxygène dans le visible et l'ultraviolet ont montré que le rapport H/O valait  $\sim 2$ . La composition chimique des comètes semble donc dominée par H<sub>2</sub>O. Ensuite, la bande de raies intenses de OH du proche UV ( $\sim 3090$  Å) a également été rapidement observée dans les spectres, indiquant la présence de l'eau dans la coma. L'observation d'un nuage d'hydrogène englobant le noyau indique une expansion de l'hydrogène atomique qui est compatible avec les modèles photochimiques de dissociation de H<sub>2</sub>O par le rayonnement UV solaire. Enfin, la détection de l'ion H<sub>2</sub>O<sup>+</sup> dans le domaine du visible à 6198 Å confirme d'autant plus la présence de l'eau dans l'atmosphère cométaire (Herzberg & Lew, 1974; Wehinger & Wyckoff, 1974).

La campagne d'observation menée sur la comète 1P/Halley, à la fois depuis le sol mais aussi avec des instruments spatiaux, marque une évolution dans la connaissance de l'eau des comètes. En effet, le spectrographe installé sur l'observatoire aéroporté KAO (*Kuiper Airborne Observatory*) a apporté la première détection directe de la molécule d'eau en phase gazeuse (Mumma et al., 1986). La signature spectrale de H<sub>2</sub>O se présente aux alentours de 2.7  $\mu\text{m}$  sous la forme de raies individuelles de vibration-rotation très étroites et bien séparées les unes des autres. Il en a été déduit que le mécanisme à l'origine des raies de H<sub>2</sub>O était la fluorescence. Krasnopolsky et al. (1986) ont ensuite confirmé la détection de la vapeur d'eau grâce à des mesures prises par la sonde Vega-2. Les observations de l'eau cométaire en phase gazeuse se sont poursuivies, tout d'abord, avec KAO pour les comètes C/1986 P1 (Wilson), C/1989 X1 (Austin) et C/1990 K1 (Levy) (Mumma et al., 1988) et ensuite avec le télescope spatial ISO pour les comètes C/1996 B2 (Hyakutake), C/1995 O1 (Hale-Bopp) (Leech et al., 1997) et 103P/Hartley 2 (Crovisier et al., 2000). Bien que difficilement détectable, la glace d'eau cométaire fut finalement mise en évidence. Tout d'abord, elle fut marginalement observée aux alentours de 3  $\mu\text{m}$  dans le spectre de la comète 1P/Halley obtenu par le spectromètre IKS (signifiant *Infrared Spec-*

trometer en russe) de la sonde Vega-1 (Combes et al., 1988). La première détection convaincante de glace d'eau sur une comète fut fournie par l'instrument LWS (*Long Wavelength Spectrometer*) de l'observatoire spatial ISO. Celui-ci a obtenu des spectres de la comète C/1995 O1 (Hale-Bopp) dans lesquels Lellouch et al. (1998) ont observé pour la première fois la bande de raie de H<sub>2</sub>O solide aux alentours de 45  $\mu$ m.

L'analyse de la vapeur d'eau dans les comètes nous fournit des informations sur la composition chimique de la comète. Comme ces corps célestes évoluent dans des milieux froids, loin du Soleil et à l'abri des collisions, les molécules qu'ils renferment correspondent à celles qui étaient présentes lors de la formation du Système Solaire. Les comètes sont donc des indices pour la détermination des éléments chimiques existant lors des premières phases de la naissance de notre Système Solaire. Au niveau de l'étude des glaces cométaires, l'intérêt est quelque peu différent. La structure de la glace d'eau peut être amorphe ou cristalline selon les conditions physico-chimiques dans lesquelles les comètes sont nées. La structure de cette glace nous apporte des renseignements sur la température régnant au moment de la formation des comètes. Une structure cristalline indique une température de formation élevée (supérieure à quelques centaines de kelvins) alors qu'une structure amorphe signifie que la comète est née dans une région froide. A ce jour, la nature de la structure de la glace cométaire n'a pas encore été clairement identifiée (Laufer et al., 1987; Tancredi et al., 1994; Meech et al., 2009). La mission Rosetta devrait apporter des éclaircissements à ce sujet.

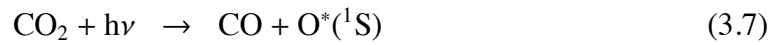
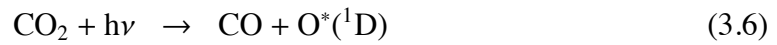
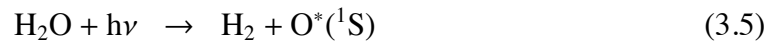
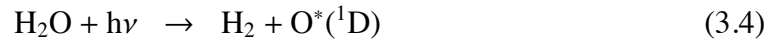
Ce travail de thèse a pour but l'analyse de l'eau dans les comètes à partir de spectres couvrant les régions optique et proche UV. H<sub>2</sub>O constitue 80% en masse des glaces cométaires (Greenberg, 1998) et joue un rôle très important dans les conditions physico-chimiques régnant dans la coma. Les molécules de H<sub>2</sub>O ne possèdent cependant pas de transition dans le domaine visible. Mais plusieurs produits de sa photodissociation et de photoionisation comme l'oxygène, l'hydroxyle, l'hydrogène et l'ion H<sub>2</sub>O<sup>+</sup> ont des transitions dans le visible. Le temps de vie de H<sub>2</sub>O avant la photodissociation par le rayonnement UV solaire est de  $\sim$ 36 heures. Même si la méthode est indirecte, l'étude de ces sous-produits pourra nous apporter des renseignements sur la molécule de H<sub>2</sub>O. Les sections suivantes seront consacrées à la description de ces sous-produits.

## 3.2 L'oxygène atomique

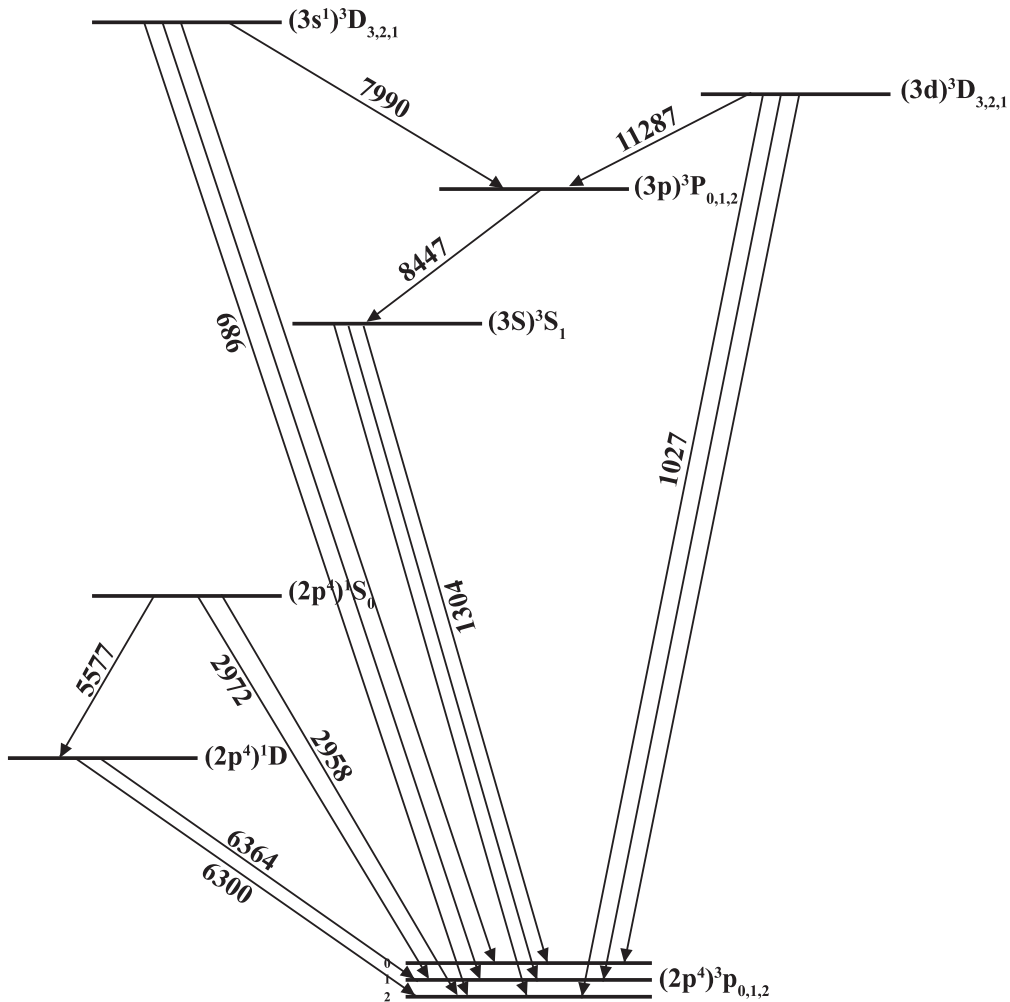
---

Les atomes d'oxygène proviennent de la photodissociation de molécules venant de la sublimation des glaces cométaires. Parmi ces différentes molécules parentes, les plus

probables sont l'eau (H<sub>2</sub>O), le dioxyde de carbone (CO<sub>2</sub>) et le monoxyde de carbone (CO), produisant l'oxygène atomique via les réactions suivantes (3.4 à 3.9) (Bhardwaj & Raghuram, 2012; Festou & Feldman, 1981) :



Les raies d'oxygène atomique se manifestent à différents endroits du spectre électromagnétique, comme on peut le constater sur le diagramme d'énergie présenté sur la figure 3.1.



**FIGURE 3.1** – Transitions permises et interdites dans le spectre de l'atome d'oxygène. Les longueurs d'onde sont exprimées en angströms.

Dans le domaine de l'ultraviolet, trois triplets de raies d'oxygène sont observés dans l'atmosphère terrestre : un triplet localisé à 1304 Å et correspondant à la transition  $(3s)^3S_1 - (2p^4)^3P$  (Festou & Feldman, 1981), un autre triplet de raies répertorié à 1027 Å, définissant la transition  $(3d)^3D - (2p^4)^3P$  et le troisième à 989 Å se rapportant à la transition  $(3s^1)^3D_0 - (2p^4)^3P$  (Anderson et al., 1980). De plus, Slinger et al. (2006) ont également mis en évidence la présence de deux autres raies dans l'UV, situées à 2972.288 Å et à 2958.365 Å. Ces raies sont dues à la transition interdite de l'oxygène de l'état  $^1S$  à  $^3P$ . En plus de sa détection dans l'atmosphère terrestre, la raie à 2972.288 Å a été observée dans l'atmosphère de la planète Mars (Barth et al., 1971; Leblanc et al., 2006). Dans le domaine infrarouge, trois raies d'oxygène sont détectées, à 11287 Å (transition  $(3s^1)^3D - (3p)^3P$ ), à 8447 Å (transition  $(3p)^3P - (3s)^3S_1$ ) et 7990 Å (transition  $(3s^1)^3D_0 - (3p)^3P$ ) (Anderson et al., 1980). Enfin, dans le domaine visible, trois raies d'oxygène sont observables. Celles-ci, engendrées par des transitions interdites, ont également été mises en évidence dans un spectre cométaire par l'astrophysicien et spectroscopiste liégeois, Pol Swings (Swings & Greenstein, 1958; Swings, 1962). En effet, c'est dans les spectres de la comète Mrkos (1957 V) (Greenstein, 1958) qu'il observa le doublet rouge à 6300.304 Å et 6363.776 Å correspondant à la transition interdite  $^1D - ^3P$  (cf. figure 3.2). La raie verte à 5577.339 Å, correspondant à la transition interdite  $^1S - ^1D$  fut mise en évidence un peu plus tard (Cochran, 1984). Son observation est plus difficile en raison de sa faible intensité d'une part et d'autre part à cause de la myriade de raies dues au  $C_2$  qui l'entoure. Parmi ces transitions, seront analysées dans les spectres cométaires, les raies qui se produisent dans le domaine du visible, à savoir les trois raies interdites de l'oxygène, localisées à 5577.339 Å, 6300.304 Å et 6363.776 Å. Ces dernières interviennent pour 90-95% de la désexcitation de l'état  $^1S_0$  excité.

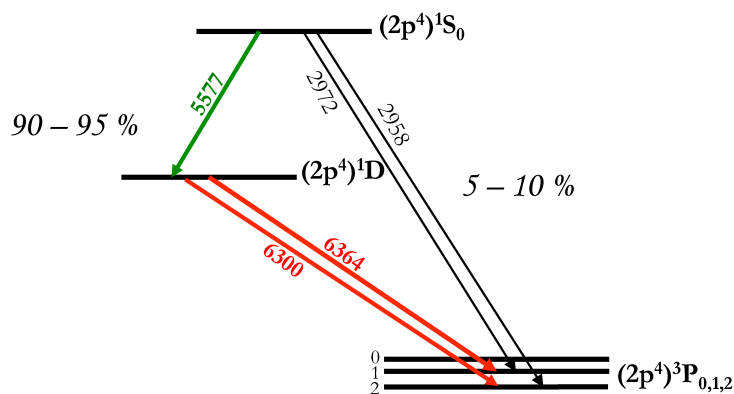


FIGURE 3.2 – Transitions de l'atome d'oxygène entre l'état  $^1S$  et l'état fondamental  $^3P$ .

Une raie de transition interdite en émission se définit comme une raie spectrale produite par la désexcitation d'un atome ou d'une molécule empruntant le chemin d'une transition d'énergie qui n'est en principe pas autorisée par les règles de sélection de la

mécanique quantique. En effet, en mécanique quantique, un atome excité finit toujours par retomber sur un niveau de plus faible énergie en se désexcitant. La probabilité d'une transition *permise* est toujours beaucoup plus importante que celle des transitions *interdites*. Cependant, les états métastables possédant une durée de vie de l'ordre de la milliseconde<sup>1</sup> adopteront uniquement la méthode de désexcitation par les transitions *interdites*. Ajoutons encore que ces raies *interdites* ne sont observables que dans des gaz et des plasmas de faibles densités, comme par exemple, dans l'espace interstellaire, dans la haute atmosphère terrestre ou encore dans la coma des comètes. En effet, les états métastables sont assez communs lorsque la densité est de quelques atomes par  $\text{cm}^3$ , rendant les collisions peu probables. Les raies de transition interdites constituent donc une quantité importante de photons émis par les gaz de faible densité. Par exemple, la raie interdite la plus connue est celle de l'hydrogène à 21 cm qui est observée dans le milieu interstellaire. Enfin, la désignation de ces raies particulières se fait en entourant l'atome de crochets. Ainsi les raies interdites de l'oxygène se notent [OI].

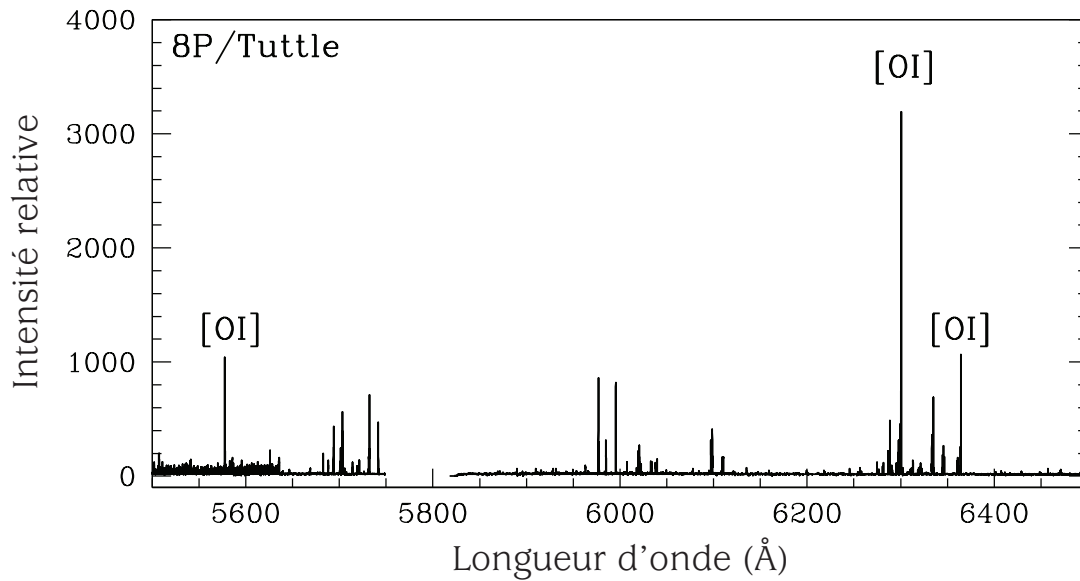
L'identification des trois raies interdites au niveau cométaire n'est cependant pas aisée. En effet, le spectre du ciel est malheureusement également caractérisé par la présence de ces raies de l'oxygène que nous qualifions de raies *telluriques*. Pour distinguer les raies cométaires de ces raies *telluriques*, il convient de connaître le décalage Doppler des raies cométaires induit par la vitesse de la comète par rapport à la Terre. La limite de détection des raies de [OI] sera explicitée dans le chapitre 4. Notons déjà qu'un enregistrement des spectres à très haute résolution est aussi nécessaire car la raie verte à  $5577.339 \text{ \AA}$  est située dans une bande spectrale de  $\text{C}_2$  très riche en raies. Les raies rouges à  $6300.304 \text{ \AA}$  et  $6363.776 \text{ \AA}$  se trouvent également dans une région où de nombreuses raies telluriques en absorption sont présentes.

L'étude des raies d'oxygène dans les comètes est intéressante dans le sens où l'oxygène constitue l'un des éléments les plus abondants dans l'Univers après l'hydrogène et l'hélium. De plus, comme 80% des glaces cométaires sont formées d'eau, l'oxygène est un élément prépondérant dans les comètes, ce qui amplifie l'intérêt de son analyse.

### 3.3 Le radical OH

Le radical hydroxyle constitue l'un des principaux produits de dissociation de la molécule  $\text{H}_2\text{O}$ . Les raies de OH sont produites par les transitions ayant lieu entre l'état excité  $A^2\Sigma^+_{\frac{1}{2}}$  et l'état fondamental  $X^2\Pi_{\frac{1}{2},\frac{3}{2}}$ . Les termes électroniques s'expliquent grâce aux notions de spectroscopie décrites dans le chapitre 2. En effet, puisque les états sont  $\Pi$  et  $\Sigma$ , les

1. Pour comparaison, les états habituels possèdent une durée de vie de l'ordre de la microseconde.



**FIGURE 3.3** – Détection des trois raies interdites de l’oxygène situées à 5577.339 Å, 6300.304 Å et 6363.776 Å dans le spectre de la comète 8P/Tuttle. Ce spectre acquis le 2 février 2008 avec un temps de pose de 3900 s par le spectrographe UVES (VLT). L’interruption des données spectrales aux alentours de 5800 Å est due à l’écart entre les deux CCDs.

nombre quantique  $\Lambda$  associés au moment orbital  $\vec{L}$  valent 1 pour l’état fondamental et 0 pour l’état excité. Etant donné que le radical OH possède un nombre impair d’électrons, le nombre quantique  $\Sigma$  associé au spin est demi-entier. Il en résulte que la multiplicité des états électroniques donnée en indice supérieur gauche vaut donc bien 2. L’indice inférieur droit décrit le moment cinétique total  $\Omega$ . Sachant que  $\Omega = |\Lambda + \Sigma|$ , le moment cinétique total vaut  $\frac{1}{2}$  pour l’état  $\Sigma$  et  $\left\{\frac{1}{2}; \frac{3}{2}\right\}$  pour l’état  $\Pi$ .

Le radical OH provient de la photodissociation de la molécule de  $\text{H}_2\text{O}$  par le rayonnement UV solaire (Becker & Haaks, 1973; Carrington, 1964) :



La plupart des raies de OH sont produites par le phénomène de fluorescence. Cependant, une partie des molécules de OH peuvent être entraînées vers des niveaux rotationnels très élevés de l’état  $\text{A}^2\Sigma^+$  et se désexciter très rapidement vers le niveau fondamental  $\text{X}^2\Pi$  en produisant des raies via le phénomène d’émissions *promptes*. Contrairement aux raies générées par fluorescence, les raies *promptes* sont principalement visibles près du noyau, à quelques dizaines de kilomètres tout au plus. Une très haute résolution spatiale est dès

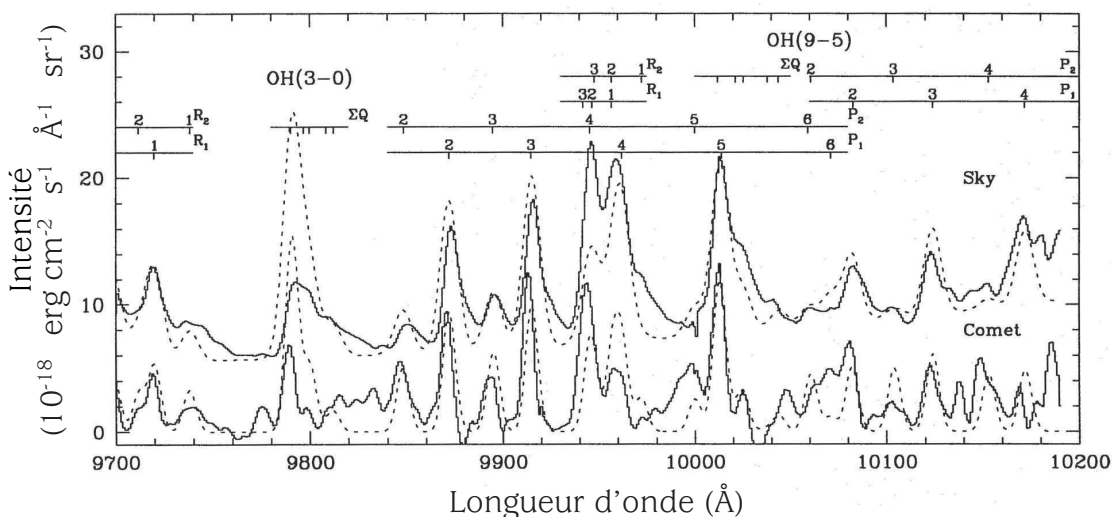


lors requise pour les localiser.

Le temps de vie du radical OH est relativement court. Provenant de H<sub>2</sub>O, le radical OH constitue une bonne cible pour dégager des informations sur l'eau présente dans les comètes, comme notamment son taux de production. Les observations acquises par le satellite IUE (*International Ultraviolet Explorer*) ont été utilisées pendant de nombreuses années dans le but de déterminer celui-ci à partir du radical hydroxyle (Festou et al., 1986; Combi & Feldman, 1992, 1993).

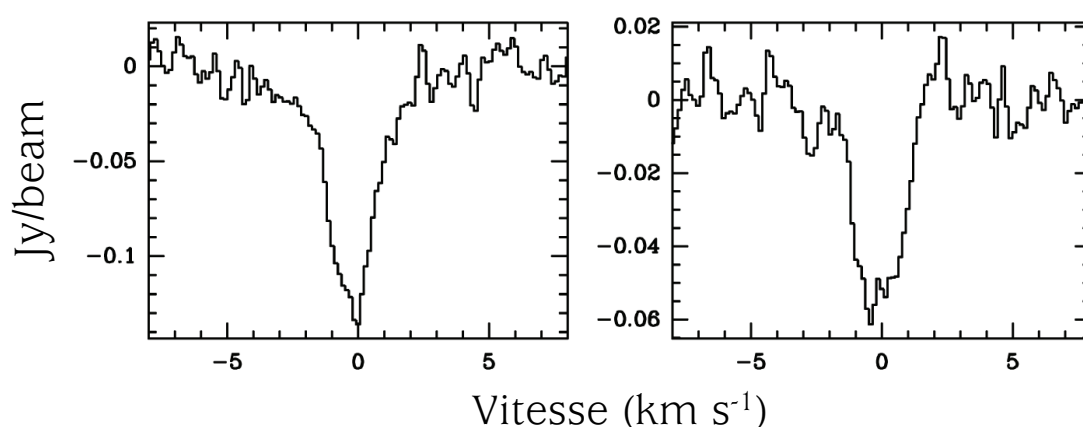
Les raies se rapportant au radical OH peuvent se manifester à différents endroits du spectre électromagnétique.

Premièrement, OH possède un spectre riche en transitions ro-vibrationnelles dans le domaine proche infrarouge. Ces raies sont néanmoins difficiles à détecter en raison de la présence de ces mêmes transitions dans l'atmosphère terrestre. Meisel & Berg (1974) et Krasnopolsky et al. (1986) ont observé des raies de OH en infrarouge dans les spectres des comètes C/1973 E1 (Kohoutek) et 1P/Halley. En analysant les spectres de la comète 109P/Swift-Tuttle, Tozzi et al. (1994) semblent observer des raies dues à la molécule OH dans la région 9700-10200 Å. Cette détection concernerait les bandes de OH du système de Meinel, c'est-à-dire des raies produites par les transitions vibrationnelles et rotationnelles existant entre les deux sous-états de l'état électronique fondamental X<sup>2</sup>Π. Le mécanisme le plus probable engendrant ces transitions serait l'émission prompte générée suite à la photodissociation de l'eau.



**FIGURE 3.4** – Spectres de la comète 109P/swift-Tuttle (inférieur) et du ciel (supérieur). Des bandes des raies de OH semblent détectées. Des spectres synthétiques de OH en pointillés sont superposés à ces spectres. La figure provient de Tozzi et al. (1994).

En 1973, des raies de OH à 18 centimètres ont été identifiées dans les spectres de la comète C/1973 E1 (Kohoutek) grâce au radiotélescope de Nançay (Biraud et al., 1974; Turner, 1974). Observées dans les nuages interstellaires et dans les masers circumstellaires, ces raies sont activement recherchées dans les comètes (Despois et al., 1981; Gérard, 1990; Gérard et al., 1998). En effet, l'étude des raies de OH dans le domaine millimétrique permet de déterminer le taux de production de OH de la comète et donc, a fortiori celui de H<sub>2</sub>O. Celui-ci peut être notamment évalué grâce au modèle de Haser dont la description est donnée par Crovisier et al. (2002). Contrairement aux domaines ultraviolet et infrarouge, les raies de OH dans le domaine radio ont la particularité d'être parfaitement résolues. Dès lors, leur profil Doppler permet de déterminer la vitesse d'expansion de OH et donc, de H<sub>2</sub>O grâce à la méthode décrite par Bockelée-Morvan et al. (1990b).



**FIGURE 3.5** – Observations des raies de OH à 18 centimètres dans les spectres de la comète 22P/Kopff obtenus avec le radiotélescope de Nançay. Figure extraite de Crovisier et al. (2002).

Enfin, historiquement, la première détection des raies de OH s'est réalisée dans l'ultraviolet. En effet, en 1941, Swings (1941) observe pour la première fois un spectre cométaire ultraviolet d'une comète, à savoir C/1940 R2 (Cunningham). Il découvre alors une bande de raies aux alentours de 3078-3100 Å qui correspond à la présence d'hydroxyle. En supposant que OH provient de la photodissociation de la molécule de H<sub>2</sub>O, ces spectres constituent la première observation évidente de la présence de l'eau dans les noyaux cométaires. Il a ensuite été confirmé plus tard que H<sub>2</sub>O était bien présent en grande quantité dans les comètes.

La grande surface collectrice du VLT et l'efficacité inégalée de UVES dans la partie bleue du spectre permettent d'observer ces raies depuis le sol avec un excellent rapport signal-sur-bruit. A partir de tels spectres, Hutsemékers et al. (2008) ont utilisé les raies de OH du proche UV et ses isotopologues dans le but de déterminer les rapports isotopiques D/H et <sup>16</sup>O/<sup>18</sup>O. La dernière partie de cette thèse exposera d'ailleurs une méthode de mesure des

isotopes de OH à partir des spectres acquis depuis le sol (cf. chapitre 7).

### 3.4 L'hydrogène atomique

---

L'équation 3.10 montre que la dissociation de  $H_2O$  peut également être à l'origine des atomes d'hydrogène (H). Nous ne développons pas ce sous-produit de l'eau mais présentons ici quelques informations non exhaustives concernant l'étude de l'hydrogène dans les comètes. Dans les spectres cométaires, H se manifeste via la raie Lyman- $\alpha$  à 1216 Å et via la raie H- $\alpha$  localisée à 6563 Å. La photodissociation UV, conduisant à la production de H, crée une coma d'hydrogène spatialement étendue. Pour une comète brillante, comme C/1995 O1 (Hale-Bopp), cette enveloppe d'hydrogène peut atteindre des dimensions impressionnantes, jusque 1 ua.

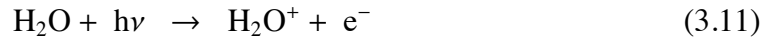
L'analyse de l'hydrogène dans les comètes se base sur la raie Lyman- $\alpha$  utilisée comme révélateur de  $H_2O$ . En effet, H permettra non seulement de déterminer l'abondance de l'eau mais aussi de fournir une idée précise de la distribution spatiale de  $H_2O$ .

Grâce à la caméra SWAN (*Solar Wind ANisotropies*) installée à bord du satellite spatial SOHO (*Solar and Heliospheric Observatory*), des images de l'hydrogène Lyman- $\alpha$  ont été obtenues pour plusieurs comètes comme C/1995 O1 (Hale-Bopp) (Combi et al., 1999), C/1996 B2 (Hyakutake) (Combi et al., 2005) ou encore plus récemment pour 67P/Churyumov-Gerasimenko (Combi et al., 2009). L'enveloppe d'hydrogène autour du noyau cométaire varie en luminosité mais également en taille. La forme de la coma de H dépend principalement de l'interaction entre la distribution de vitesse des atomes de H s'échappant de la coma collisionnelle interne avec l'accélération de la pression de radiation solaire. C'est l'utilisation de modèles adéquats qui permet de définir le taux de production de l'eau à partir de H. L'instrument SWAN est idéal pour observer la luminosité, la distribution et l'évolution de H Lyman- $\alpha$  dans la coma des comètes (Bertaux et al., 1998). Qui plus est, l'acquisition quotidienne de données offre la possibilité de suivre l'évolution du taux de production de l'eau de la comète en fonction de sa distance héliocentrique. Combi et al. (1999) ont ainsi trouvé que le taux de production d'eau maximal était observé environ deux semaines après le passage de la comète au périhélie.

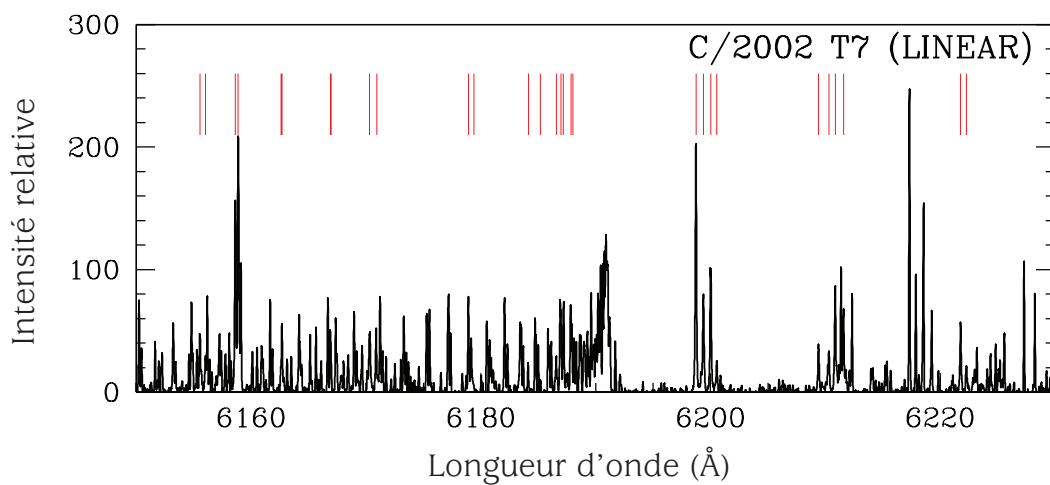
### 3.5 L'ion $H_2O^+$

---

Le principal mécanisme de destruction des molécules d'eau est la photodissociation par le rayonnement UV solaire. Une partie de ces molécules subit également un autre processus, la photoionisation et conduit à la formation d'un autre produit de l'eau, à savoir l'ion  $H_2O^+$  (Huebner et al., 1992) :



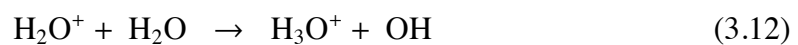
Il est estimé que  $\sim 5$  à  $\sim 10\%$  des molécules de  $\text{H}_2\text{O}$  peuvent être ionisées. Ce pourcentage varie en fonction du taux de production de gaz de la comète (Wegmann et al., 1999). L'ion  $\text{H}_2\text{O}^+$  produit des raies dans tout le domaine visible. Une petite partie de celles-ci sont indiquées dans la figure 3.6.



**FIGURE 3.6** – Identification de certaines raies de  $\text{H}_2\text{O}^+$  pour le spectre de la comète C/2002 T7 (LINEAR) acquis avec l'instrument UVES (VLT) le 26 mai 2005.

L'analyse de cet ion permet d'étudier de façon indirecte, mais depuis le sol, la molécule de  $\text{H}_2\text{O}$  dans la coma cométaire. La distribution spatiale de  $\text{H}_2\text{O}^+$  varie en  $1/R^2$  avec  $R$  représentant la distance au noyau de la comète. Cette distribution est en accord avec les modèles magnétohydrodynamiques incluant la photochimie de  $\text{H}_2\text{O}^+$  et de son parent. Les profils spatiaux de  $\text{H}_2\text{O}^+$  présentent une concentration importante autour de l'axe de la queue jusqu'à une distance de  $5 \cdot 10^4$  km du noyau (Jockers & Bonev, 1997).

La destruction de cet ion est gouvernée au niveau de la coma interne par la réaction :



A de plus grandes distances du noyau, les ions  $\text{H}_2\text{O}^+$  peuvent également disparaître suite à la recombinaison dissociative :



**FIGURE 3.7** – Image de la comète 103P/Hartley 2 acquise le 12 novembre 2005 au moyen d'un filtre à bande étroite  $\text{H}_2\text{O}^+$  par le télescope TRAPPIST. Notons que la poussière n'a pas été soustraite.



Le but premier de l'analyse des ions  $\text{H}_2\text{O}^+$  est de fournir une estimation du taux de production de  $\text{H}_2\text{O}^+$  de la comète afin de le comparer avec celui de  $\text{H}_2\text{O}$ . Le taux de production a été évalué pour différentes comètes à partir d'images obtenues avec des filtres à bandes étroites (Disanti et al., 1990; Rauer & Jockers, 1990; Jockers, 1991; Schultz et al., 1993; Jockers & Bonev, 1997). La carte de densité de colonne de  $\text{H}_2\text{O}^+$  a également pu être déduite (Bonev & Jockers, 1994). Une autre étude qui a été menée pour différentes comètes est l'analyse des ions  $\text{H}_2\text{O}^+$  dans le but de déterminer la vitesse de ces derniers (Brown et al., 1993; Spinrad et al., 1994; Bonev et al., 2002). La mesure de cette vitesse s'obtient en appliquant la méthode de corrélation croisée sur des spectres acquis à différents endroits dans la queue cométaire. Elle a ainsi permis de rendre compte de la dépendance existant entre la vitesse des ions  $\text{H}_2\text{O}^+$  et leur localisation dans la queue. Sur base d'une telle analyse, Spinrad et al. (1994) ont notamment constaté que la dispersion en vitesse des ions  $\text{H}_2\text{O}^+$  était très faible près du noyau et qu'elle augmentait au fur et à mesure que l'on s'éloignait dans la queue de la comète.

Ajoutons que l'étude des ions dans les comètes, et donc de  $\text{H}_2\text{O}^+$ , apporte également des renseignements sur l'interaction entre le vent solaire et la comète ainsi que sur la photochimie cométaire (Reyes-Ruiz et al., 2010).

Depuis quelques années, l'ion  $\text{H}_2\text{O}^+$  est devenu une cible pour la détermination du rapport ortho/para de  $\text{H}_2\text{O}$  dans les comètes. Les molécules possédant des atomes d'hy-

drogène en position symétrique peuvent en effet adopter deux états de spins différents associés à la somme des spins de leurs atomes de H. Une molécule est dite *ortho* si son nombre quantique de spin total vaut 1 ( $I = 1$ ). Elle est qualifiée de *para* si ce nombre est, par contre, nul ( $I = 0$ ). Dès lors, une molécule d'eau *ortho* possède des spins parallèles orientés dans la même direction pour ses deux atomes d'hydrogène. Cette molécule est *para* lorsque les spins de ses atomes de H sont antiparallèles.

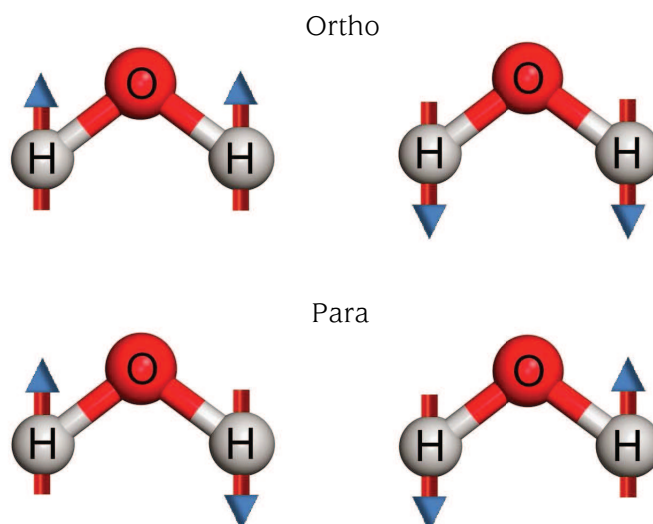


FIGURE 3.8 – Représentation des deux états de spin de molécule de H<sub>2</sub>O.

L'orientation des spins du noyau serait définie lors de la formation des glaces cométaires dans la nébuleuse solaire primordiale. Celle-ci dépend de la température régnant au moment où la molécule s'est formée ou lorsque cette dernière s'est condensée sur des grains. La diversité chimique des glaces cométaires peut être attribuée aux conditions physiques différentes régnant à l'endroit où les comètes se sont formées dans la nébuleuse ou encore provenir de variations dans l'histoire thermique de la comète. Les glaces cométaires peuvent contenir à la fois des matériaux formés sous différentes conditions et à des moments divers. Si les glaces cométaires constituent un mélange de glaces interstellaires et de composés de la nébuleuse créés par réactions chimiques, l'interprétation des molécules *ortho* et *para* est complexe. La compréhension de la formation des glaces cométaires passe entre autres par la connaissance du rapport de mélange entre les espèces *ortho* et *para*. Le rapport *ortho* et *para* de la molécule d'eau a déjà été déduit à partir de données spectroscopiques afin de déterminer la température à laquelle la molécule de H<sub>2</sub>O s'est formée dans les comètes (Dello Russo et al., 2005; Kawakita et al., 2006; Kawakita & Kobayashi, 2009; Bockelée-Morvan et al., 2009, et références comprises). Ces mesures montrent que les molécules de H<sub>2</sub>O se seraient formées à basse température (~25

à 30 K). Comme les réactions menant à H<sub>2</sub>O sont exothermiques, il est attendu de trouver une température de formation élevée. Or ce n'est pas le cas. Ceci suggère une formation sur des grains froids où H<sub>2</sub>O a pu se rééquilibrer à la température des grains (Tielens & Allamandola, 1987).

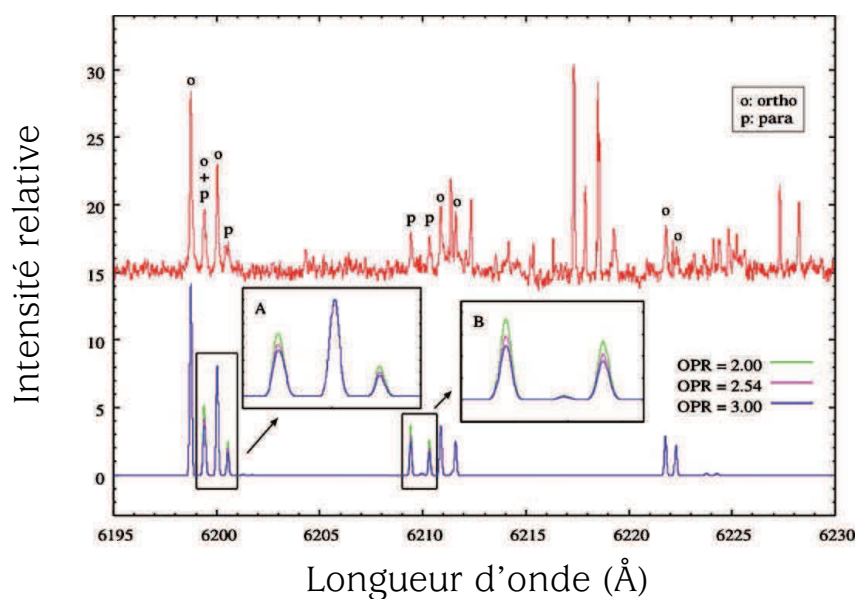
Comme H<sub>2</sub>O<sup>+</sup> provient principalement de H<sub>2</sub>O, son rapport ortho/para est considéré comme représentatif du rapport mesuré à partir de l'eau. L'avantage d'étudier les raies de H<sub>2</sub>O<sup>+</sup> est qu'elles sont visibles dans des spectres à haute résolution couvrant la région optique. La mesure du rapport ortho/para de H<sub>2</sub>O ne se base que sur des données infrarouges, à savoir à partir des raies situées aux alentours de 2.7 μm pour les bandes fondamentales vibrationnelles ν<sub>1</sub> et ν<sub>3</sub> (Mumma et al., 1987; Crovisier et al., 1997), autour de 2.9 μm (Dello Russo et al., 2005; Kawakita et al., 2006; Bonev et al., 2007, 2008; Kawakita & Kobayashi, 2009; Kobayashi et al., 2010) et aussi à partir de la bande vibrationnelle ν<sub>2</sub> à ~6 μm (Woodward et al., 2007; Bockelée-Morvan et al., 2009). L'étude des raies de H<sub>2</sub>O est donc plus contraignante de par la région spectrale dans laquelle les raies sont formées mais aussi par le fait qu'une grande quantité de raies telluriques sont présentes à ces longueurs d'onde. Les raies de H<sub>2</sub>O<sup>+</sup> ne sont, quant à elles, pratiquement pas affectées par les raies telluriques en absorption. Elles peuvent néanmoins parfois être contaminées par d'autres raies moléculaires en émission. L'analyse menée par Shinnaka et al. (2012) s'est dès lors focalisée sur la bande (0,10,0) de H<sub>2</sub>O<sup>+</sup> qui a la particularité d'être de forte intensité et très peu contaminée par d'autres espèces moléculaires.

La mesure du rapport ortho/para nécessite la construction d'un modèle de fluorescence de l'ion H<sub>2</sub>O<sup>+</sup>. Celui-ci se base sur les hypothèses que les conditions d'équilibre de fluorescence sont atteintes et que la distribution de population de H<sub>2</sub>O<sup>+</sup> est déterminée en résolvant les équations qui décrivent l'équilibre de fluorescence. Dans ce modèle, le rapport ortho/para est défini comme paramètre libre et ce dernier est déterminé en ajustant le spectre de H<sub>2</sub>O<sup>+</sup> produit par le modèle sur le spectre cométaire observé (cf. figure 3.9).

Une fois ce rapport ortho/para évalué, la température de spin (T<sub>spin</sub>) peut alors être estimée via la relation suivante (Mumma et al., 1987) :

$$\text{Rapport ortho/para} = \frac{(2 I_o + 1) \sum_{\text{niveaux ortho}} (2 J + 1) e^{\frac{E_i}{k T_{\text{spin}}}}}{(2 I_p + 1) \sum_{\text{niveaux para}} (2 J + 1) e^{\frac{E_i}{k T_{\text{spin}}}}} \quad (3.14)$$

où o et p se réfèrent respectivement aux niveaux ortho et para, I représente la somme des



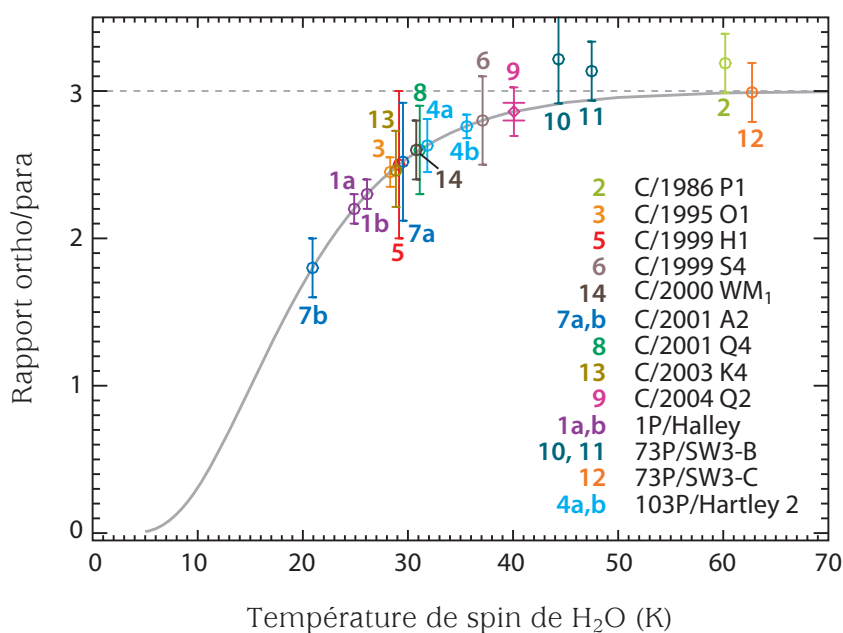
**FIGURE 3.9** – Comparaison entre le spectre observé de la comète C/2001 Q4 (NEAT) obtenu par le spectrographe HDS (*High Dispersion Spectrograph*) du télescope Subaru (rouge) et le spectre de H<sub>2</sub>O<sup>+</sup> produit par le modèle (bleu). Figure extraite de Shinnaka et al. (2012).

spins,  $J$  le nombre quantique de rotation et  $E$  correspond aux énergies de niveaux.

$T_{\text{spin}}$  se définit comme la température d'excitation rotationnelle pouvant reproduire un certain rapport ortho/para du spin du noyau sous des conditions d'équilibre thermique (Bockelée-Morvan et al., 2004). Ainsi une température de spin de  $\sim 30$  kelvins est déduite et cette valeur est en accord avec les résultats trouvés pour le rapport ortho/para de la molécule d'eau (Mumma & Charnley, 2011, et références comprises).

Nous savons que l'échange entre les spins de différents noyaux est interdit au sein d'une molécule. Il est donc assez probable qu'aucun rééquilibrage significatif de la température de spin n'a eu lieu dans les glaces cométaires depuis 4.6 milliards d'années. Dès lors, la valeur de cette température pourrait refléter la température à laquelle les molécules se sont formées dans la nébuleuse solaire ou dans le nuage moléculaire pré-solaire. Cependant, la signification réelle et précise de cette température demeure toujours mystérieuse (Bockelée-Morvan et al., 2009; Bonev et al., 2007, 2008, 2009). En effet, nous ignorons encore si la température de spin est liée aux conditions thermiques subies par les molécules lors de leur intégration dans le noyau cométaire ou si elle est plutôt liée aux conditions de formation et au rééquilibrage du rapport ortho/para s'établissant ultérieurement dans nébuleuse solaire. Aucune tendance n'a été clairement identifiée entre la température de spin, le taux de production, la distance héliocentrique, la période orbitale de la comète, suggérant que cette température est primitive (Kawakita et al., 2004). De plus, aucune corrélation entre la température de spin et la composition chimique des co-



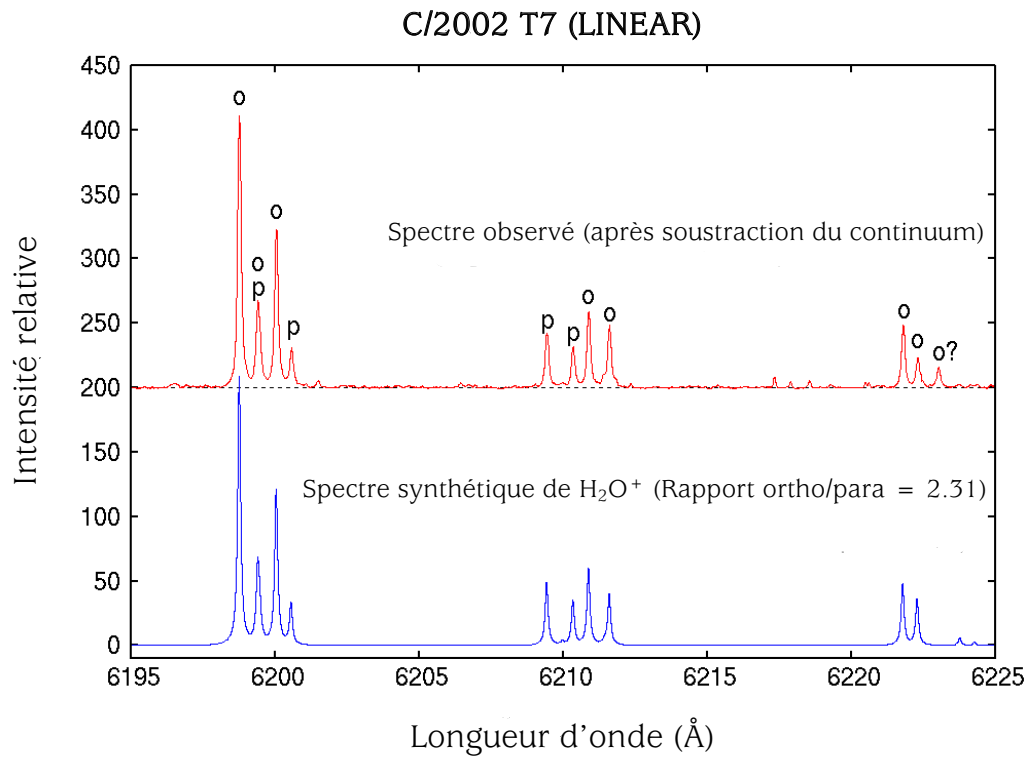


**FIGURE 3.10** – Rapports ortho/para mesurés dans 12 comètes à partir de la molécule de H<sub>2</sub>O. Figure extraite de Mumma & Charnley (2011).

mètes n'a été mise en évidence à ce jour. Cette température ne semble pas dépendre de la classe dynamique des comètes. De nombreuses recherches sont donc encore attendues afin d'approfondir nos connaissances sur le sujet. Dans ce sens, la possibilité de mesurer le rapport ortho/para de H<sub>2</sub>O à partir des ions H<sub>2</sub>O<sup>+</sup> prend tout son intérêt puisque cela nous permet d'acquérir des mesures de ce rapport sur un échantillon de données beaucoup plus grand étant donné que cet ion est observable dans le domaine visible et est donc plus facilement mesurable.

Dans ce contexte, il serait intéressant d'analyser les raies de H<sub>2</sub>O<sup>+</sup> dans les spectres UVES que nous possédons afin d'en déduire le rapport ortho/para et a fortiori la température de spin. Ce travail a été entamé en collaboration avec Y. Shinnaka et H. Kawakita. Les premiers résultats sont prometteurs. En effet, en utilisant leur modèle de fluorescence, un rapport ortho/para de 2.31 a été déterminé pour les spectres UVES de la comète C/2002 T7 (LINEAR). Cette valeur est en accord avec la température de spin du noyau déduite de la molécule de NH<sub>3</sub> (Shinnaka et al., 2011).

Dès lors, l'application du modèle de fluorescence de H<sub>2</sub>O<sup>+</sup> aux autres spectres UVES s'inscrit dans la continuité évidente de cette analyse.



**FIGURE 3.11** – Comparaison entre les spectres observé et synthétique de H<sub>2</sub>O<sup>+</sup> pour la comète C/2002 T7 (LINEAR). Les lettres "o" et "p" indiquent respectivement les raies ortho et para de H<sub>2</sub>O<sup>+</sup>. Analyse et figure réalisées par Y. Shinnaka et H. Kawakita.

## PARTIE II

### RAIES INTERDITES DE L'OXYGÈNE



*"L'imagination est plus importante que le savoir"*

Albert Einstein



# 4

---

## Etude des raies interdites de l'oxygène dans un échantillon de comètes observées à différentes distances héliocentriques

---

### Sommaire

---

<b>4.1</b>	<b>Introduction</b>	<b>69</b>
<b>4.2</b>	<b>Observations et acquisition des données</b>	<b>71</b>
<b>4.3</b>	<b>Réduction des données</b>	<b>78</b>
<b>4.4</b>	<b>Corrections des données</b>	<b>79</b>
<b>4.5</b>	<b>Analyse des données</b>	<b>81</b>
<b>4.6</b>	<b>Résultats et discussions</b>	<b>82</b>
4.6.1	Détermination des rapports d'intensité des raies de [OI]	82
4.6.1.1	Discussion sur le rapport G/R à grande distance héliocentrique	88
4.6.1.2	Lien entre le rapport G/R et l'abondance de CO <sub>2</sub> dans les comètes	92
4.6.2	Mesure de la largeur intrinsèque des raies de [OI]	94
4.6.2.1	Largeur anormale de la raie verte : discussion	104
4.6.3	Analyse détaillée de la comète 103P/Hartley 2	106
4.6.4	Résultats liés à la mission Deep Impact	108

---

4.6.5	Influence de l'activité solaire sur les raies interdites de l'oxygène	109
<b>4.7</b>	<b>Conclusions et perspectives . . . . .</b>	<b>109</b>

---



Les résultats présentés dans ce chapitre ont été publiés dans les articles suivants :

- **Decock, A.; Jehin, E.; Hutsemékers, D. & Manfroid, J. :** *Forbidden oxygen lines in comets at various heliocentric distances*, (2013), A&A, 555, A34
- **Decock, A.; Jehin, E.; Manfroid, J. & Hutsemékers, D. :** *Study of the forbidden oxygen lines in a dozen comets observed at the VLT (ESO)*, (2011) in EPSC-DPS, Joint Meeting, 1126

## 4.1 Introduction

Après l'hydrogène et l'hélium, l'oxygène est l'élément le plus abondant dans l'Univers. Comme nous l'avons vu (cf. chapitre 3), cet atome peut se manifester dans tout le spectre électromagnétique via différentes raies provenant de transitions permises et interdites (de 989 à 11287 Å). Cette deuxième partie de thèse se focalisera sur l'analyse des trois raies interdites de l'oxygène observées dans le domaine du visible. Outre l'apport d'information sur la chimie et les processus physiques en jeu dans la coma des comètes, cette étude permettra d'approfondir nos connaissances sur les origines de notre Système Solaire, les comètes étant des témoins potentiels de la formation de notre Système Solaire (Ehrenfreund & Charnley, 2000).

Les atomes d'oxygène sont détectés dans les spectres cométaires via les trois raies interdites de l'oxygène observées en émission à 5577.339 Å (raie verte), 6300.304 Å et 6363.776 Å (raies du doublet rouge) (Swings, 1962). Ces raies proviennent de la désexcitation de l'état supérieur  $(2p^4)^1S_0$  vers l'état  $(2p^4)^1D_2$  pour la raie verte et de l'état  $(2p^4)^1D_2$  vers l'état  $(2p^4)^3P_{1,2}$  pour les raies rouges (cf. figure 4.1)

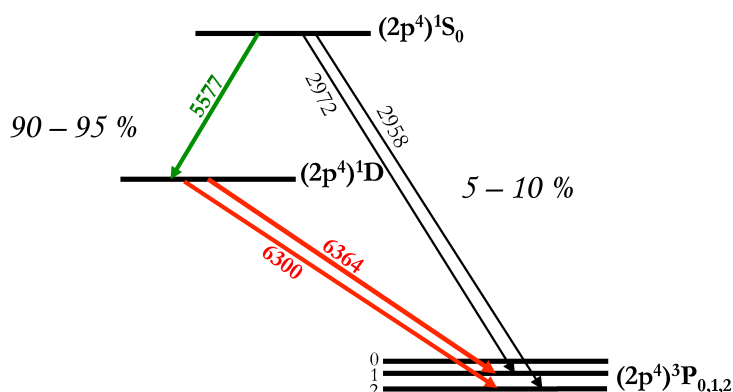


FIGURE 4.1 – Transitions de l'atome d'oxygène entre l'état  $^1S$  et l'état fondamental  $^3P$ .

Le temps de vie de l'oxygène dans l'état  $^1D$  est de 110 secondes et, est plus de cent

fois plus long que celui de l'état  $^1S$  de l'ordre de la seconde. La mesure de la raie verte est plus difficile à obtenir en raison de sa plus faible intensité et des nombreuses raies de  $C_2$  présentes aux alentours. L'une des premières approches théoriques du sujet a été menée par Festou & Feldman (1981). Ces derniers ont examiné les taux de production de  $O(^1D)$  et  $O(^1S)$  obtenus en laboratoire à partir des photodissociations de  $H_2O$ ,  $CO_2$  et  $CO$  et en ont déduit les rapports  $^1S/^1D$  correspondants. Récemment, Bhardwaj & Raghuram (2012) ont établi un nouveau modèle théorique pour les émissions de l'oxygène qui donne de nouvelles valeurs pour les taux de production de  $O(^1D)$  et  $O(^1S)$  se rapportant aux réactions (3.4) à (3.9). Ce nouveau modèle a également modifié l'estimation des rapports  $^1S/^1D$  qui sont, comme nous pouvons le constater dans le tableau 4.1, significativement différents des valeurs fournies par Festou & Feldman (1981) qui ont été utilisées durant les trente dernières années.

Parents	Taux d'émission ( $s^{-1}$ )		Rapports	
	$O(^1S)$	$O(^1D)$	$^1S/^1D$	$^1S/^1D^a$
$H_2O$	$6.4 \cdot 10^{-8}$	$8.0 \cdot 10^{-7}$	0.080	$\sim 0.1$
$CO$	$4.0 \cdot 10^{-8b}$	$5.1 \cdot 10^{-8}$	0.784	$\sim 1$
$CO_2$	$7.2 \cdot 10^{-7}$	$1.2 \cdot 10^{-6}$	0.600	$\sim 1$

**Tableau 4.1** – Taux d'émission et rapports  $^1S/^1D$  pour différentes réactions de photodissociation produites à 1 ua. Ces mesures, obtenues par Bhardwaj & Raghuram (2012), sont valables pour une activité solaire calme. <sup>(a)</sup> Les rapports obtenus par Festou & Feldman (1981) sont donnés dans la dernière colonne pour comparaison. <sup>(b)</sup> Ce taux est issu de Huebner & Carpenter (1979).

Un des intérêts de ce travail vient du fait que ces raies ont été jusqu'à présent assez peu étudiées dans les comètes de façon systématique. Seules quelques recherches se sont focalisées sur l'analyse des raies d'oxygène à différentes distances héliocentriques. Ce peu d'engouement est dû au fait que la détection de ces raies n'est pas évidente car elle exige à la fois une excellente résolution spectrale mais aussi spatiale. Morrison et al. (1997) ont observé les raies interdites de l'oxygène dans les spectres de la comète C/1996 B2 (Hyakutake) pris avec le télescope de 1 mètre de l'Observatoire Ritter. Cochran & Cochran (2001) et Cochran (2008) ont analysé les raies de [OI] dans huit comètes observées avec l'Observatoire du McDonald.

Ce chapitre a pour ambition de fournir une analyse globale des raies interdites de l'oxygène réalisée à partir d'un échantillon homogène de spectres cométaires de très haute qualité. Dans un premier temps, nous nous consacrerons à la mesure des intensités des trois raies de [OI]. Nous en déduirons la valeur des rapports d'intensités des raies du doublet rouge ( $I_{6300}/I_{6364}$ ) et le rapport de la raie verte sur la somme des raies rouges ( $I_{5577}/(I_{6300}+I_{6364})$ ). Par la suite, nous noterons souvent ce dernier "G/R". La mesure de ce rapport est très intéressante car il nous permet d'avoir des informations sur la (les)

molécule(s) parente(s) à l'origine des atomes d'oxygène en comparant celui-ci avec les taux d'excitation effectifs fournis théoriquement par Bhardwaj & Raghuram (2012) (cf. tableau 4.1). Nous étudierons également l'évolution du rapport G/R en fonction de la distance héliocentrique en analysant plus en détails les spectres des comètes C/2001 Q4 (NEAT) et C/2009 P1 (Garradd) acquis proche et loin du Soleil. Dans un second temps, la mesure des largeurs des raies sera réalisée. L'intérêt d'une telle analyse repose sur le débat engendré suite aux observations de Cochran (2008) qui sont en contradiction avec la théorie. En effet, la largeur intrinsèque de la raie verte est plus grande que les raies rouges alors que la théorie prédit l'inverse (Festou & Feldman, 1981; Bhardwaj & Raghuram, 2012).

## 4.2 Observations et acquisition des données

La présente analyse se base sur un échantillon de douze comètes différentes, considérant les deux composants de 73P/Schwassmann-Wachmann 3 (B et C) comme deux comètes distinctes. Cet échantillon est caractérisé par une grande diversité, ces comètes provenant d'origines dynamiques variées et leurs observations couvrant de nombreuses distances héliocentriques (0.68 au à 3.73 ua). Le détail des paramètres orbitaux des comètes est donné dans le tableau 4.2.

Comète	$T_p$	$e$	$a$	$q$	$i$	$P$	$T_J$	Type (L)
C/2002 V1 (NEAT)	18-02-2003	0.99990	1010	0.10	82	32100	0.06	EXT
C/2002 X5 (Kudo-Fujikawa)	29-01-2003	0.99984	1175	0.19	94	40300	-0.03	EXT
C/2002 Y1 (Juels-Holvorcem)	13-04-2003	0.99715	250.6	0.71	104	3967	-0.23	EXT
C/2001 Q4 (NEAT)	16-05-2004	1.00069	-	0.96	100	-	-	NEW
C/2002 T7 (LINEAR)	23-04-2004	1.00048	-	0.61	161	-	-	NEW
C/2003 K4 (LINEAR)	14-10-2004	1.00030	-	1.02	134	-	-	NEW
9P/Tempel 1	05-07-2005	0.51749	3.1	1.51	11	5.5	2.97	JF
73P-C/Schwassmann-Wachmann 3	07-06-2006	0.69338	3.1	0.94	11	5.4	2.78	JF
73P-B/Schwassmann-Wachmann 3	08-06-2006	0.69350	3.1	0.94	11	5.4	2.78	JF
8P/Tuttle	27-01-2008	0.81980	5.7	1.03	55	13.6	1.60	HT
103P/Hartley 2	28-10-2010	0.69500	3.5	1.06	14	6.5	2.64	JF
C/2009 P1 (Garradd)	23-12-2011	1.00110	-	1.55	106	-	-	NEW

**Tableau 4.2** – Caractéristiques orbitales et classification des 12 comètes de l'échantillon.  $T_p$  correspond à la date de passage au périhélie (jj-mm-aaaa),  $e$  est l'excentricité,  $a$  représente le demi grand axe de l'orbite (en ua),  $q$  représente la distance au périhélie (en ua),  $i$  est l'inclinaison de l'orbite à l'écliptique (en degrés),  $P$  correspond à la période (en années),  $T_J$  se rapporte au paramètre de Tisserand relatif à Jupiter. La dernière colonne donne le groupe dans lequel sont classés les comètes. Ces groupes ont été définis par Levison (1996). HT et JF, signifiant respectivement "Halley Type" et "Jupiter Family" rassemblent les comètes à courtes périodes, c'est-à-dire avec une période inférieure à 200 ans. EXT et NEW se rapportent aux comètes du Nuage de Oort, qualifiées soit d' "externes" lorsque leur paramètre  $a$  est inférieur à 10 000 ua, soit de "nouvelles" lorsque  $a > 10\,000$  ua.

Parmi ces douze comètes, certaines sont des morceaux de comètes qui se sont scindées comme 73P-C et 73P-B, d'autres sont passées relativement près de la Terre. D'autres encore ont été étudiées à de grandes distances héliocentriques, comme C/2001 Q4 (NEAT) et C/2009 P1 (Garradd). L'étude a été réalisée sur un total de 48 spectres caractérisés par un haut signal-sur-bruit.

L'ensemble de ces spectres provient d'observations effectuées au *Very Large Telescope* (VLT) de février 2002 à septembre 2011 par l'équipe de physique cométaire de l'institut d'Astrophysique, de Géophysique et d'Océanographie de l'Université de Liège (ULg) (Manfroid et al., 2009; Jehin et al., 2009, et références comprises). Appartenant à l'Observatoire Européen Austral (ESO) du Cerro Paranal, le VLT comprend quatre télescopes principaux, appelés UT pour *Unit Telescope* en anglais, ainsi que quatre télescopes auxiliaires nommés AT pour *Auxiliary Telescope*. L'implantation de ce matériel astronomique de pointe est située en plein coeur du désert d'Atacama au nord du Chili, à une altitude de 2635 mètres. Ce site est réputé pour ses 330 nuits claires par an. Le diamètre de chacun des miroirs principaux des UT est de 8.2 mètres. Ceux-ci sont caractérisés pour leur petite épaisseur de seulement 18 centimètres. Chacun de ces télescopes est doté de plusieurs foyers leur permettant d'accueillir plusieurs instruments. Nos spectres ont été acquis avec l'instrument UVES (*Ultraviolet and Visual Echelle Spectrograph*) monté au foyer Nasmyth B de l'UT 2 également baptisé *Kueyen*, signifiant "Lune" en langage *Mapuche*, dialecte du sud du Chili.

UVES est un spectrographe Echelle à haute résolution qui a pour mission d'opérer avec une grande efficacité principalement dans le domaine du visible (Dekker et al., 2000). Le qualificatif *Echelle* vient du fait que les ordres spectraux qu'il fournit sont disposés en "échelle" sur le détecteur. L'instrument optique est muni d'un filtre dichroïque qui divise le faisceau lumineux en deux parties correspondant à deux bras indépendants optimisés pour les courtes et les grandes longueurs d'onde. Dès lors, tout est dédoublé dans UVES qui peut donc, en quelque sorte, être assimilé à un double spectrographe. Le premier bras qualifié de "bleu" disperse la lumière de 3000 à 5000 Å. Il couvre l'étendue des rayonnements UV et bleus. Le second bras, surnommé "rouge" offre une étendue spectrale des longueurs d'onde visibles à rouges ou plus précisément de 4200 à 11 000 Å. Ces deux parties peuvent agir séparément ou en parallèle au moyen d'un séparateur de faisceau dichroïque. Chacune d'elles possède son propre détecteur CCD optimisé pour le domaine concerné. Dans le bleu, ce détecteur est constitué d'un seul chip alors que dans le rouge, il en possède deux. On parle alors de *mosaïque* et ces chips sont indicés "L" et "U" pour *Lower* et *Upper*. Les spectres analysés dans ce travail proviennent des deux chips du bras rouge qui ont soit été centrés sur 5800 Å, soit sur 5640 Å. Ajoutons qu'au cours de notre analyse, nous parlerons souvent de *spectres verts* et *spectres rouges* pour faire référence,

respectivement, aux spectres qui proviennent des chips L et U. Pour la plupart des observations, la fente du spectrographe a été ajustée à la dimension de  $0.45'' \times 11''$ . Avec une telle fente, le pouvoir maximum de résolution atteint est de  $R = \lambda/\Delta\lambda = 110\,000$  pour le bras rouge. Une telle résolution est requise pour isoler les raies de [OI] cométaires des raies de [OI] atmosphériques ainsi que des autres raies cométaires présentes aux alentours, comme les raies de  $C_2$  et de  $NH_2$ . De plus, cette résolution nous permet d'obtenir des spectres de très haute qualité, comme nous pouvons en juger au vu de la figure 4.3. La fente du spectrographe a généralement été centrée sur le noyau de la comète (cf. figure 4.4) et tous les spectres ont été acquis en considérant les mêmes paramètres instrumentaux. Pour une comète située à 1 ua de la Terre, l'étendue spatiale couverte par la fente vaut environ 320 km sur 8000 km. La taille précise de la fente utilisée lors de chaque observation est donnée dans le tableau 4.3.

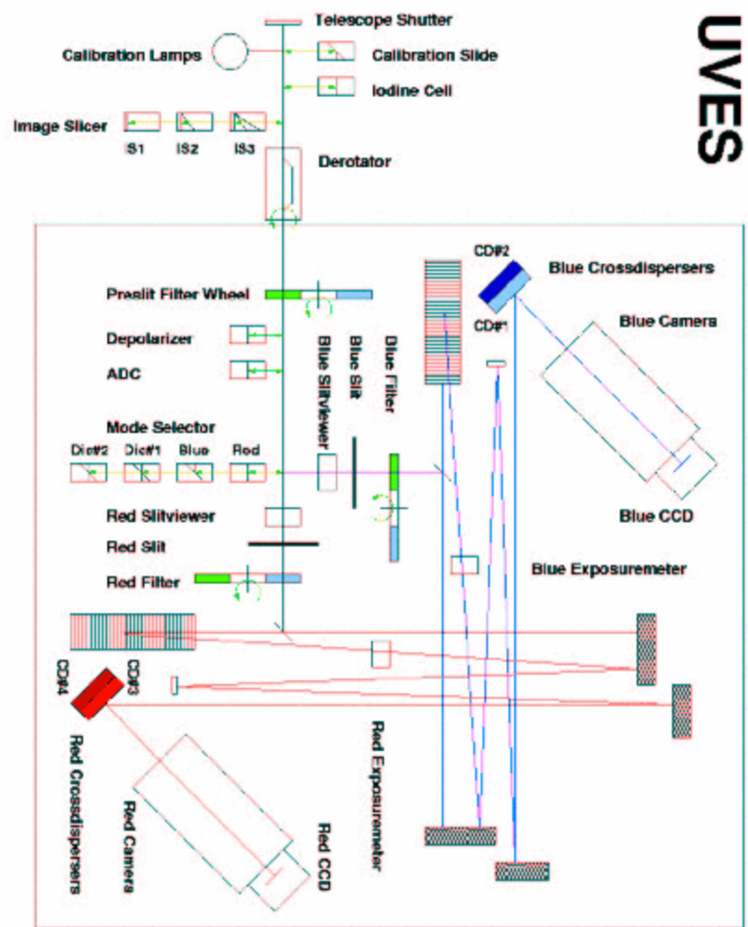
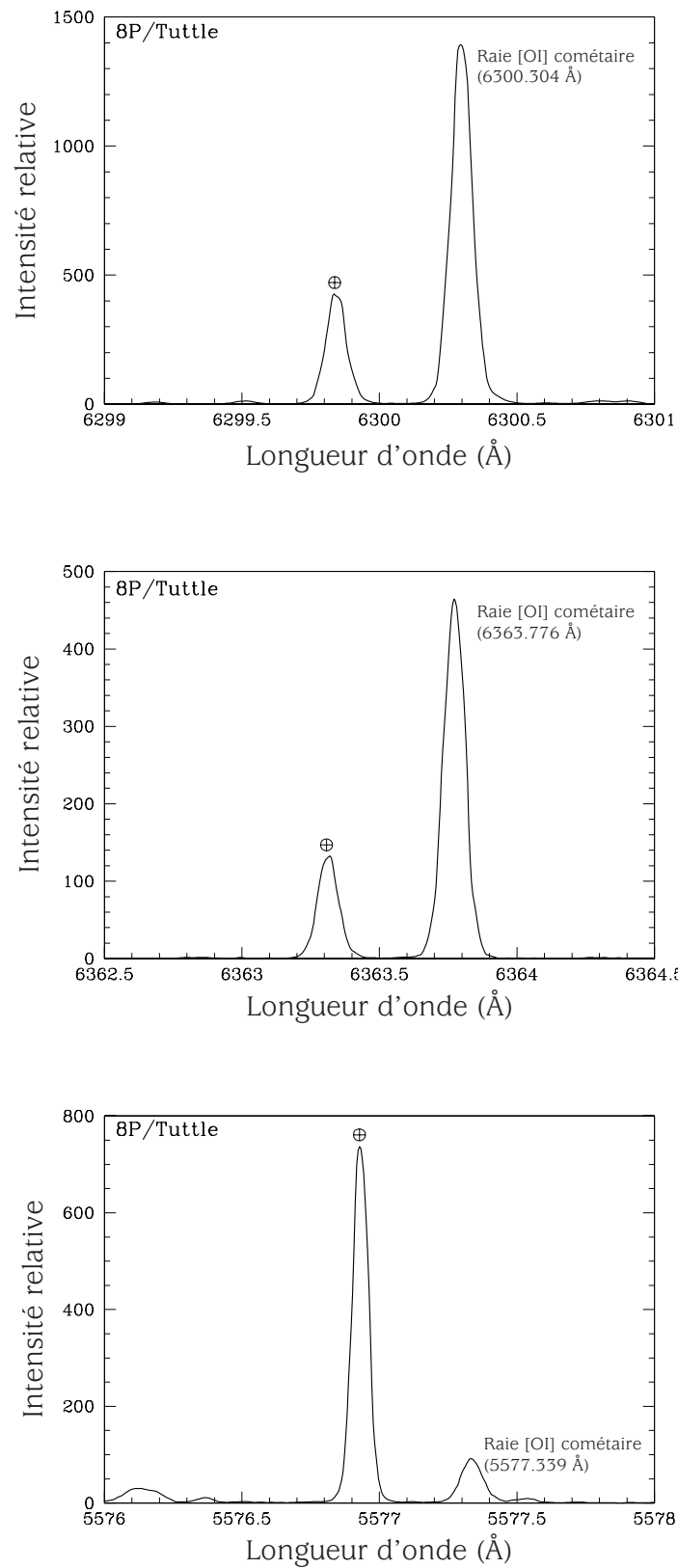


FIGURE 4.2 – Schéma de l'instrument UVES.



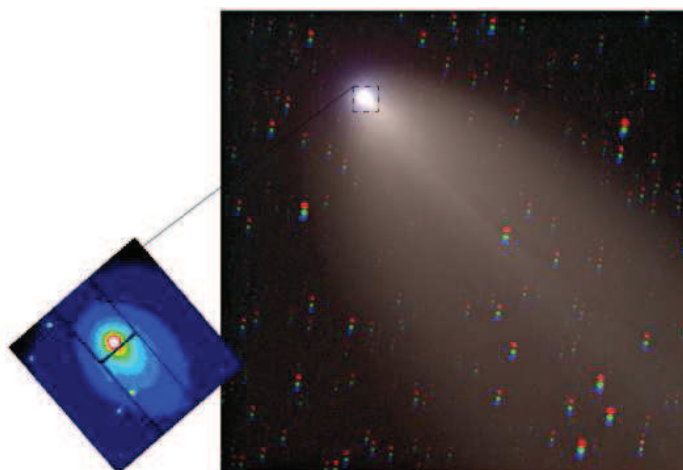
**FIGURE 4.3** – Les raies interdites d’oxygène à 6300.304 Å, 6363.776 Å et 5577.339 Å (tellurique (⊕) et cométaire) pour un spectre de la comète 8P/Tuttle acquis le 16 janvier 2008 avec un temps de pose de 3600 secondes. Grâce à la haute résolution du spectrographe UVES, les raies cométaires et telluriques sont bien séparées quand le décalage Doppler excède  $15 \text{ km s}^{-1}$ . Ces spectres illustrent la haute qualité des données de l’échantillon.

Comète	JD - 2 450 000.5	$r$ (ua)	$\dot{r}$ (km s <sup>-1</sup> )	$\Delta$ (ua)	$\dot{\Delta}$ (km s <sup>-1</sup> )	Exptime (s)	Fente (″×″)	Fente (km × km)
C/2002 V1 (NEAT)	2 647.037	1.22	-36.51	0.83	7.88	2100	0.45 × 11.00	271 × 6 622
C/2002 V1 (NEAT)	2 647.062	1.22	-36.53	0.83	7.99	2100	0.45 × 11.00	271 × 6 622
C/2002 V1 (NEAT)	2 649.031	1.18	-37.11	0.84	8.29	2100	0.45 × 11.00	274 × 6 702
C/2002 V1 (NEAT)	2 649.056	1.18	-37.11	0.84	8.33	1987	0.45 × 11.00	274 × 6 702
C/2002 V1 (NEAT)	2 719.985	1.01	39.76	1.63	42.02	600	0.45 × 11.00	532 × 13 004
C/2002 X5 (Kudo-Fujikawa)	2 705.017	1.06	37.01	0.99	29.34	1800	0.45 × 11.00	323 × 7 898
C/2002 X5 (Kudo-Fujikawa)	2 705.039	1.07	37.00	0.99	29.40	1800	0.45 × 11.00	323 × 7 898
C/2002 X5 (Kudo-Fujikawa)	2 705.060	1.07	36.99	0.99	29.45	1800	0.45 × 11.00	323 × 7 898
C/2002 Y1 (Juels-Holvorcem)	2 788.395	1.14	24.09	1.56	-7.24	1800	0.40 × 11.00	453 × 12 446
C/2002 Y1 (Juels-Holvorcem)	2 788.416	1.14	24.09	1.56	-7.21	1800	0.40 × 11.00	453 × 12 446
C/2002 Y1 (Juels-Holvorcem)	2 789.394	1.16	24.18	1.55	-7.21	1800	0.40 × 11.00	450 × 12 366
C/2002 Y1 (Juels-Holvorcem)	2 789.415	1.16	24.19	1.55	-7.18	1800	0.40 × 11.00	450 × 12 366
C/2001 Q4 (NEAT)	2 883.293	3.73	-18.80	3.45	-25.42	4500	0.45 × 11.00	1 126 × 27 524
C/2001 Q4 (NEAT)	2 883.349	3.73	-18.80	3.45	-25.32	4500	0.45 × 11.00	1 126 × 27 524
C/2001 Q4 (NEAT)	2 889.236	3.67	-18.91	3.36	-23.67	7200	0.45 × 11.00	1 097 × 26 806
C/2001 Q4 (NEAT)	2 889.320	3.66	-18.91	3.36	-23.54	7200	0.45 × 11.00	1 097 × 26 806
C/2002 T7 (LINEAR)	3 131.421	0.68	15.83	0.61	-65.62	1080	0.44 × 12.00	195 × 5 309
C/2002 T7 (LINEAR)	3 151.976	0.94	25.58	0.41	54.98	2678	0.30 × 12.00	89 × 3 568
C/2002 T7 (LINEAR)	3 152.036	0.94	25.59	0.42	55.20	1800	0.30 × 12.00	91 × 3 655
C/2003 K4 (LINEAR)	3 131.342	2.61	-20.34	2.37	-43.12	4946	0.80 × 11.00	1 375 × 18 908
C/2003 K4 (LINEAR)	3 132.343	2.59	-20.35	2.35	-42.95	4380	0.60 × 11.00	1 023 × 18 748
C/2003 K4 (LINEAR)	3 329.344	1.20	14.81	1.51	-28.23	1500	0.44 × 12.00	482 × 13 142
9P/Tempel 1	3 553.955	1.51	-0.21	0.89	8.95	7200	0.44 × 12.00	284 × 7 746
9P/Tempel 1	3 554.954	1.51	-0.15	0.89	9.07	7200	0.44 × 12.00	284 × 7 746
9P/Tempel 1	3 555.955	1.51	-0.04	0.90	9.19	7200	0.44 × 12.00	287 × 7 833
9P/Tempel 1	3 557.007	1.51	0.09	0.90	9.48	9600	0.44 × 12.00	287 × 7 833
9P/Tempel 1	3 557.955	1.51	0.20	0.91	9.44	7500	0.44 × 12.00	290 × 7 920
9P/Tempel 1	3 558.952	1.51	0.31	0.91	9.55	7500	0.44 × 12.00	290 × 7 920
9P/Tempel 1	3 559.954	1.51	0.43	0.92	9.68	7500	0.44 × 12.00	293 × 8 007
9P/Tempel 1	3 560.952	1.51	0.55	0.93	9.80	7800	0.44 × 12.00	297 × 8 094
9P/Tempel 1	3 561.953	1.51	0.66	0.93	9.91	7200	0.44 × 12.00	297 × 8 094
9P/Tempel 1	3 562.956	1.51	0.78	0.94	10.04	7200	0.44 × 12.00	300 × 8 181
73P-C/SW 3	3 882.367	0.95	-4.17	0.15	12.31	4800	0.60 × 12.00	65 × 1 305
73P-B/SW 3	3 898.369	0.94	1.79	0.25	13.10	4800	0.60 × 12.00	109 × 2 176



Comète	JD - 2 450 000.5	$r$ (ua)	$\dot{r}$ (km s <sup>-1</sup> )	$\Delta$ (ua)	$\dot{\Delta}$ (km s <sup>-1</sup> )	Exptime (s)	Fente (″×″)	Fente (km × km)
8P/Tuttle	4 481.021	1.04	-4.29	0.36	21.64	3600	0.44 × 10.00	115 × 2 611
8P/Tuttle	4 493.018	1.03	0.40	0.52	24.72	3900	0.44 × 10.00	166 × 3 771
8P/Tuttle	4 500.017	1.03	3.16	0.62	24.16	3900	0.44 × 10.00	198 × 4 497
103P/Hartley 2	5 505.288	1.06	2.53	0.16	7.08	2900	0.44 × 12.00	51 × 1 393
103P/Hartley 2	5 505.328	1.06	2.55	0.16	7.19	3200	0.44 × 12.00	51 × 1 393
103P/Hartley 2	5 510.287	1.07	4.05	0.18	7.96	2900	0.44 × 12.00	57 × 1 567
103P/Hartley 2	5 510.328	1.07	4.07	0.18	8.07	3200	0.44 × 12.00	57 × 1 567
103P/Hartley 2	5 511.363	1.08	4.37	0.19	8.27	900	0.44 × 12.00	60 × 1 654
C/2009 P1 (Garradd)	5 692.383	3.25	-16.91	3.50	-44.66	3600	0.44 × 12.00	1 117 × 30 461
C/2009 P1 (Garradd)	5 727.322	2.90	-16.89	2.57	-46.38	3600	0.44 × 12.00	820 × 22 367
C/2009 P1 (Garradd)	5 767.278	2.52	-16.46	1.64	-29.26	1800	0.44 × 12.00	523 × 14 273
C/2009 P1 (Garradd)	5 813.991	2.09	-14.82	1.47	14.79	4800	0.44 × 12.00	469 × 12 794
C/2009 P1 (Garradd)	5 814.974	2.08	-14.77	1.48	15.31	4800	0.44 × 12.00	472 × 12 881
C/2009 P1 (Garradd)	5 815.982	2.07	-14.71	1.49	15.84	4800	0.44 × 12.00	475 × 12 968

**Tableau 4.3** – Paramètres observationnels pour chaque spectre individuel. JD indique le Jour Julien (*Julian Day* en anglais) et correspond à la date d’observation,  $r$  représente la distance héliocentrique (en ua),  $\Delta$  est la distance géocentrique (en ua).  $\dot{r}$  et  $\dot{\Delta}$  sont respectivement les vitesses héliocentriques et géocentriques (en km s<sup>-1</sup>). Exptime correspond au temps d’exposition, exprimé en secondes. Les dimensions de la fente sont données en secondes d’arc et la dernière colonne traduit ces dimensions en étendue spatiale couverte par la fente.



**FIGURE 4.4** – Photographie à grand champ de la comète C/2000 WM1 (LINEAR) avec l'image de la fente du spectrographe UVES placée au centre de la coma cométaire (Arpigny et al., 2003).

### 4.3 Réduction des données

Les spectres à deux dimensions sont réduits grâce au *pipeline* de réduction UVES fourni par l'ESO. Pour les données acquises avant 2008, le *pipeline UVES* (version 2.8.0) a été utilisé à l'intérieur de l'environnement ESO-MIDAS<sup>1</sup> afin d'extraire, pour chaque ordre pris séparément, les spectres à deux dimensions. La soustraction des biais et du flat-field ainsi que la calibration en longueur d'onde se faisaient aussi dans cet environnement. ESO-MIDAS est un logiciel spécial possédant des fonctionnalités permettant de réduire les données obtenues avec les instruments ESO. Pour chaque observation, les ordres du spectre Echelle sont fusionnés suivant un système de pondération qui tient compte du signal-sur-bruit de chaque partie d'ordre. Cette procédure est nécessaire pour obtenir un bon recouvrement des ordres. Les observations obtenues après 2008 sont réduites via l'interface CPL *gasgano*<sup>2</sup> (version 2.4.3) adaptée au nouveau *pipeline UVES*. Celui-ci fournit directement une sommation précise du signal présent dans chaque colonne d'ordre des spectres à deux dimensions. Les spectres à une dimension, présentant le flux observé en fonction de la longueur d'onde, sont extraits en moyennant les spectres à deux dimensions tout en rejetant les rayons cosmiques. Notons que comme la comète est un objet étendu, son signal remplit toute la fente du spectrographe et le signal a donc été sommé sur toute la longueur de la fente. Les étoiles standards sont réduites de la même manière et sont combinées afin de produire la fonction de réponse instrumentale nécessaire à la correction des spectres à une dimension. En effet, les spectres des étoiles standards ont

1. <http://www.eso.org/sci/software/esomidas/>

2. <http://www.eso.org/sci/software/gasgano/>

permis de produire des courbes de réponse afin de fournir un spectre calibré en flux relatif qui ne contient plus que des variations de flux appartenant à l'objet observé. La calibration en longueur d'onde des spectres est rendue possible grâce à des spectres acquis avec une lampe de Thorium-Argon (Th-Ar) installée dans l'instrument et produisant des centaines de raies dont les positions sont connues très précisément en laboratoire. Grâce aux spectres de Th-Ar, une solution pixel-longueur d'onde est établie. La calibration révèle cependant un léger décalage en longueur d'onde dû au fait que les spectres de Th-Ar ont été pris le matin et non juste après les observations. Ce décalage est principalement dû à la différence de température de l'instrument entre le moment des observations cométaires et de l'acquisition des spectres de th-Ar (*décalage instrumental*). On remédie à ce problème en mesurant le décalage en longueur d'onde de neuf raies cométaires de NH<sub>2</sub> localisées autour de la raie de [OI] à 6300.304 Å et dont les positions théoriques sont parfaitement connues (Ross et al., 1988). Enfin, afin de travailler avec des spectres présentant les raies cométaires dans un référentiel où la comète est au repos, les longueurs d'onde seront corrigées du décalage Doppler. Ce décalage provient du fait que la comète est en mouvement par rapport à la Terre.

## 4.4 Corrections des données

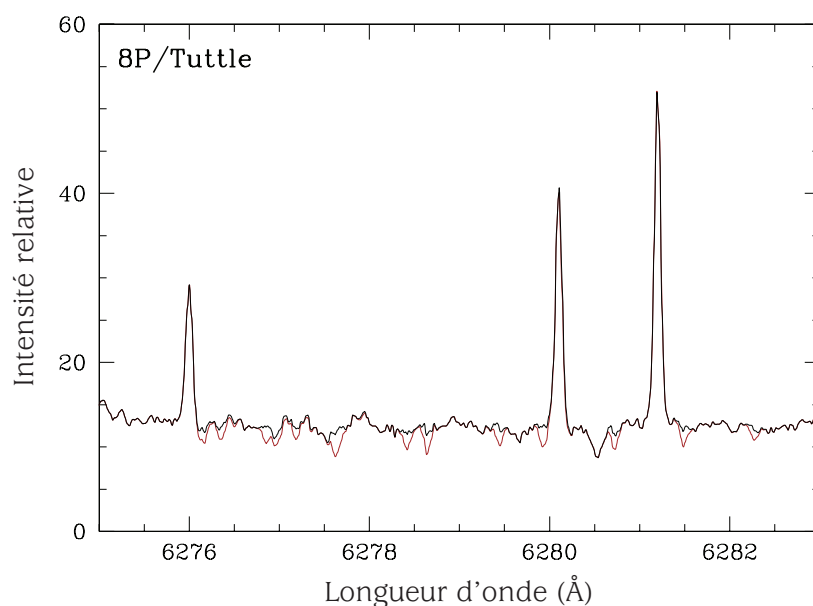
Afin de procéder à la mesure des intensités et des largeurs des raies d'oxygène, il faut s'affranchir des raies telluriques en absorption et soustraire le continu solaire en utilisant les spectres BASS2000<sup>3</sup> et Kurucz<sup>4</sup> (2005). Ces deux spectres sont des spectres solaires dont le premier contient les raies d'absorption atmosphériques tandis que le second en est dépourvu.

Autour des raies de [OI] rouges, de nombreuses raies telluriques en absorption sont en effet présentes. Celles-ci sont principalement dues à la molécule de O<sub>2</sub> présente dans l'atmosphère terrestre et peuvent induire une sous-estimation de l'intensité des raies étudiées (cf. figure 4.5).

La suppression de ces raies est réalisée en soustrayant le spectre solaire Kurucz du spectre BASS2000 afin d'obtenir un spectre artificiel contenant uniquement les raies telluriques en émission. Ce dernier peut alors être lui-même soustrait du spectre cométaire observé. Cette soustraction n'est cependant pas directe. Une correction multiplicative du type  $f(\lambda) = e^{b \log(a)}$  est d'abord appliquée, avec  $a$  représentant le spectre des raies telluriques en émission. Le paramètre  $b$ , proportionnel à la masse d'air, doit, quant à lui, être ajusté manuellement jusqu'à élimination parfaite des raies telluriques du spectre co-

3. [http://bass2000.obspm.fr/solar\\_spect.php](http://bass2000.obspm.fr/solar_spect.php)

4. <http://kurucz.harvard.edu/sun/irradiance2005/irradthu.dat>



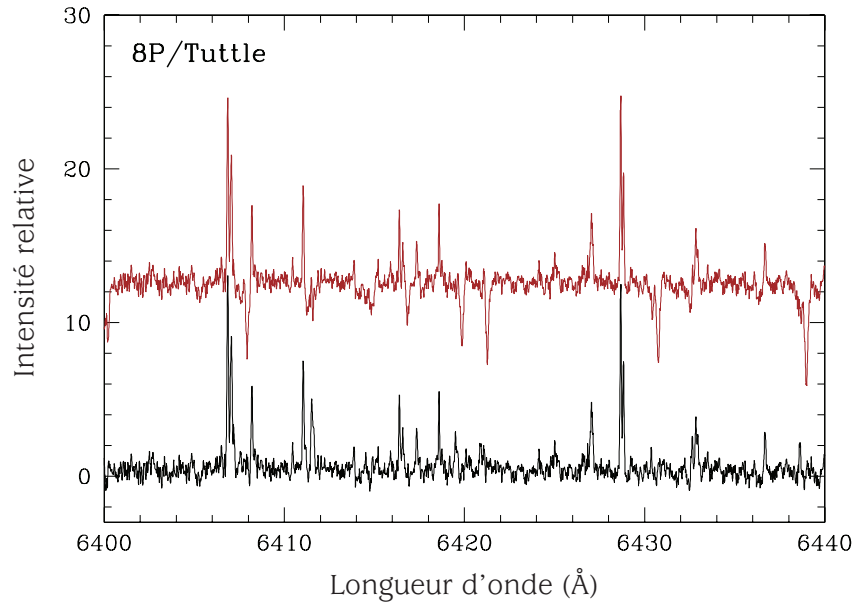
**FIGURE 4.5** – Les raies telluriques en absorption dans le voisinage des raies de [OI] rouges. Superposition du spectre brut corrigé du décalage Doppler (rouge) avec ce même spectre mais corrigé des raies telluriques (noir).

métaire. Ce travail ne s'effectue que pour les spectres "rouges", la partie "verte" n'étant pas affectée par les raies telluriques. Notons qu'une autre solution consisterait à utiliser un spectre synthétique atmosphérique comme HITRAN<sup>5</sup> (Rothman, 1978). Enfin, la méthode la plus précise serait de se servir de spectres d'étoiles chaudes de référence obtenus juste avant ou après les spectres cométaires.

Comme durant toutes nos mesures le Soleil éclaire les poussières des comètes, des raies d'absorption solaires apparaissent toujours dans les spectres et forment un continu solaire. Ce dernier se manifeste sous la forme de trois contributions différentes. La première, et la plus importante, est celle produite par la réflexion de la lumière solaire sur les poussières présentes dans la coma. La deuxième contribution apparaît quand les observations sont réalisées près ou dans le crépuscule. Enfin, la présence de la Lune lors de l'acquisition des spectres peut provoquer un rayonnement de fond diffus sous la forme d'un spectre solaire, définissant la troisième contribution. Pour enlever toutes ces contaminations, nous soustrayons le spectre solaire de Kurucz du spectre de la comète en jouant sur l'intensité des raies solaires afin que celles-ci finissent par disparaître totalement. Au préalable ce spectre solaire de Kurucz est corrigé du décalage Doppler de la comète afin de considé-

5. HITRAN est l'acronyme de HIgh-resolution TRANsmission molecular absorption database : <http://www.cfa.harvard.edu/hitran/>.

rer celui dans un référentiel où la comète est au repos. Cela nous fournit un spectre final - comme celui exposé dans la figure 4.6 pour le cas de la comète 8P/Tuttle - nettoyé des raies solaires et des raies telluriques en absorption.



**FIGURE 4.6** – Soustraction du continu solaire. Le spectre supérieur rouge correspond au spectre de la comète 8P/Tuttle qui n'est pas corrigé des raies solaires alors que le spectre inférieur noir est dépourvu des raies solaires.

## 4.5 Analyse des données

Une fois les travaux de réduction et de correction des spectres effectués, nous avons pu entamer les mesures proprement dites des intensités et des largeurs des trois raies interdites de l'oxygène. La largeur d'une raie peut se caractériser par sa largeur à mi-hauteur, nommée FWHM pour "Full Width at Half Maximum" en anglais. Les mesures des intensités et des largeurs des raies ont été obtenues en ajustant un profil gaussien sur les raies d'oxygène grâce au logiciel IRAF<sup>6</sup>. La largeur observée des raies cométaires correspond au produit de convolution de la largeur intrinsèque de ces raies avec le profil instrumental :

$$\text{FWHM}_{\text{observée}}(\lambda) = \sqrt{\text{FWHM}_{\text{intrinsèque}}^2(\lambda) + \text{FWHM}_{\text{instrumentale}}^2(\lambda)}, \quad (4.1)$$

6. IRAF, acronyme pour *Image Reduction and Analysis Facility* est un outil de réduction et d'analyse de données astronomiques (<http://iraf.noao.edu>)

où la largeur instrumentale ( $\text{FWHM}_{\text{instrumentale}}(\lambda)$ ) correspond à la largeur à mi-hauteur des raies non-résolues par l'instrument, comme par exemple - et ce sera notre choix ici - les raies de calibration produites par le Thorium-Argon. De telles mesures requièrent une excellente résolution spectrale. En effet, elles ne sont possible que lorsque la raie d'oxygène cométaire est bien séparée de la raie atmosphérique correspondante, c'est-à-dire lorsque la vitesse géocentrique de la comète excède  $15 \text{ km s}^{-1}$ . Néanmoins, l'utilisation de la commande *deblend*, disponible via la fonction *splot* dans IRAF, nous permet d'obtenir une mesure fiable des raies d'oxygène possédant un décalage Doppler pouvant atteindre au minimum  $7 \text{ km s}^{-1}$ . L'étude des raies d'oxygène pour des comètes ayant une vitesse géocentrique inférieure pourrait être envisagée si nous parvenions à créer un spectre synthétique de la raie d'oxygène atmosphérique que nous pourrions alors soustraire au spectre cométaire. Cependant, l'intensité des raies d'oxygène atmosphérique dépend de nombreux paramètres dont la masse d'air pour laquelle la fréquence de variation peut être de l'ordre de l'heure. Dès lors, la réalisation d'un tel spectre synthétique n'est pas aisée et nous nous limiterons ici à l'étude des raies cométaires d'oxygène à partir de spectres obtenus avec un décalage Doppler supérieur à  $7 \text{ km s}^{-1}$ .

## 4.6 Résultats et discussions

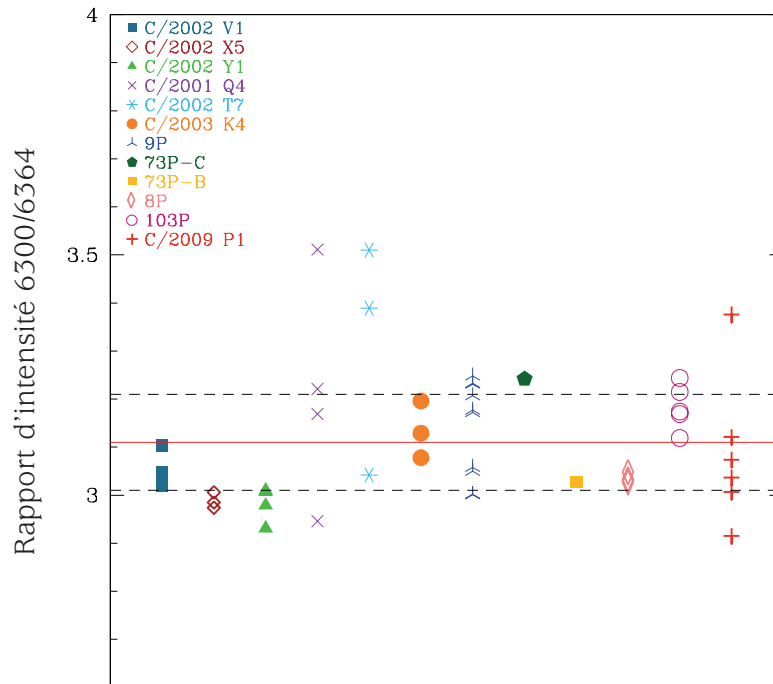
Une fois les spectres corrigés et nettoyés de tout élément parasite, la mesure proprement dite des raies interdites de l'oxygène est entamée dans le but d'analyser les rapports d'intensité ainsi que les largeurs à mi-hauteur. Ce travail se place dans la continuité des études menées par Cochran & Cochran (2001) et Cochran (2008) sur un échantillon de huit comètes. Il a de particulier qu'il représente, à lui seul, l'étude la plus complète effectuée à ce jour. En effet, il est constitué d'une part de douze comètes différentes, et d'autre part, la qualité de leurs 48 spectres - atteinte grâce à la résolution  $R = 115\,000$  de UVES - est supérieure à celle des études précédentes.

### 4.6.1 Détermination des rapports d'intensité des raies de [OI]

Les valeurs des deux rapports d'intensité,  $I_{6300}/I_{6364}$  et  $G/R = I_{5577}/(I_{6300}+I_{6364})$  se retrouvent respectivement sur les figures 4.7 et 4.8. Un symbole donné correspond à l'ensemble des spectres provenant d'une même comète. D'un point de vue théorique, en l'absence de collision, l'intensité d'une raie se définit par (Festou & Feldman, 1981) :

$$I = 10^{-6} \tau_p^{-1} \alpha \beta N \quad (4.2)$$

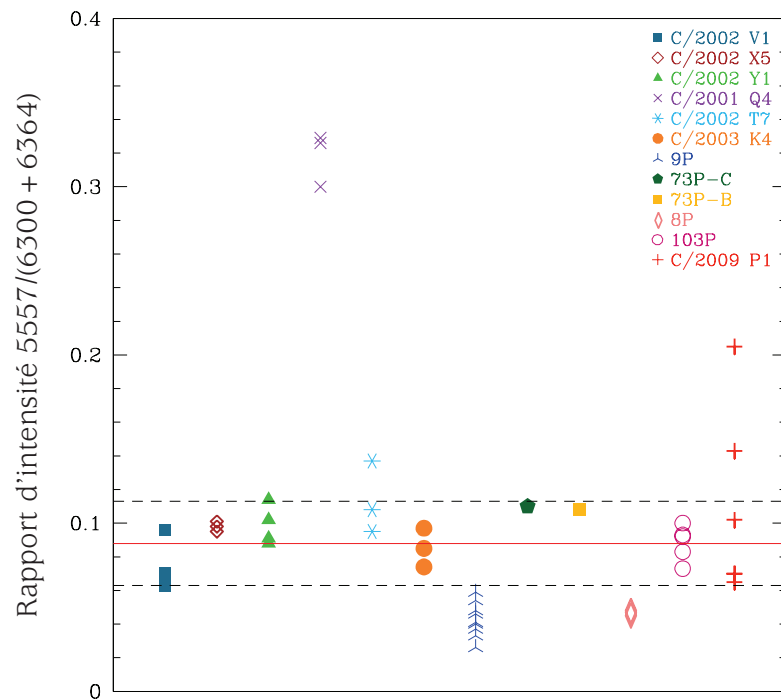
où l'intensité  $I$  s'exprime en Rayleigh<sup>7</sup>,  $\tau_p$  correspond au temps de vie de dissociation de la molécule parente et est exprimé en secondes,  $\alpha$  est le taux de photodissociation,  $\beta$  se rapporte au rapport de branchement pour la transition considérée et  $N$  représente la densité de colonne de la molécule parente (en  $\text{cm}^{-2}$ ). Le tableau 4.4 reprend l'ensemble des valeurs de l'intensité des raies (exprimées en ADU<sup>8</sup>) ainsi que les rapports d'intensité pour chaque spectre. Dans le tableau 4.5, une estimation de l'erreur pour chaque comète est donnée par la déviation standard ( $\sigma$ ) des rapports d'intensité mesurée sur l'ensemble de ses spectres. Etant donné que dans la plupart des cas, tous les spectres d'une même comète ont été obtenus durant un laps de temps relativement court, à de mêmes distances héliocentriques et géocentriques ainsi qu'avec un temps d'exposition plus ou moins similaire (cf. tableau 4.3), la déviation standard des rapports d'intensité fournit donc une bonne estimation de l'erreur. En effet, cette erreur tient compte des principales sources d'incertitudes, à savoir du bruit de photons et des erreurs pouvant provenir des corrections des raies telluriques en absorption et de la soustraction du continu solaire.



**FIGURE 4.7** – Le rapport d'intensité des raies du doublet rouge donné pour chaque spectre cométaire. Les spectres appartenant à une même comète sont représentés par le même symbole. La valeur moyenne de ce rapport mesuré sur l'échantillon complet vaut  $3.11 \pm 0.10$  et est représentée par le trait plein rouge. Les lignes en pointillés noirs montrent la déviation standard  $\sigma$ .

7. 1 Rayleigh =  $10^6$  photons  $\text{cm}^{-2}$   $\text{s}^{-1}$

8. ADU pour *Analog-to-Digital-Units*



**FIGURE 4.8** – Le rapport d'intensité G/R donné pour chaque spectre cométaire. Notons les résultats particuliers obtenus pour la comète C/2001 Q4 (NEAT) observée à 3.7 ua. En excluant ces points, la valeur moyenne de ce rapport vaut  $0.09 \pm 0.03$ .



Comète	JD - 2 450 000.5	r (ua)	Intensité (ADU)			$\frac{I_{6300}}{I_{6364}}$	$\frac{I_{5577}}{I_{6300}+I_{6364}}$
			5577.339 Å	6300.304 Å	6363.776 Å		
C/2002 V1 (NEAT)	2 647.037	1.22	2348	27539	8875	3.10	0.065
C/2002 V1 (NEAT)	2 647.062	1.22	2255	26790	8875	3.02	0.063
C/2002 V1 (NEAT)	2 649.031	1.18	3220	35672	11704	3.05	0.068
C/2002 V1 (NEAT)	2 649.056	1.18	3137	33738	11105	3.04	0.070
C/2002 V1 (NEAT)	2 719.985	1.01	8657	68162	22381	3.05	0.096
C/2002 X5 (Kudo-Fujikawa)	2 705.017	1.06	4016	31491	10589	2.97	0.095
C/2002 X5 (Kudo-Fujikawa)	2 705.039	1.07	4430	32822	10997	2.98	0.101
C/2002 X5 (Kudo-Fujikawa)	2 705.060	1.07	4249	32510	10816	3.01	0.098
C/2002 Y1 (Juels-Holvorcem)	2 788.395	1.14	6223	50960	17387	2.93	0.091
C/2002 Y1 (Juels-Holvorcem)	2 788.416	1.14	6386	54683	18167	3.01	0.088
C/2002 Y1 (Juels-Holvorcem)	2 789.394	1.16	3942	25792	8659	2.98	0.114
C/2002 Y1 (Juels-Holvorcem)	2 789.415	1.16	4254	31262	10398	3.01	0.102
C/2001 Q4 (NEAT)	2 883.293	3.73	143	324	110	2.95	0.329
C/2001 Q4 (NEAT)	2 883.349	3.73	151	353	110	3.22	0.326
C/2001 Q4 (NEAT)	2 889.236	3.67	-	354	112	3.17	-
C/2001 Q4 (NEAT)	2 889.320	3.66	261	677	193	3.51	0.300
C/2002 T7 (LINEAR)	3 131.421	0.68	116522	642304	211120	3.04	0.137
C/2002 T7 (LINEAR)	3 151.976	0.94	50544	365664	104187	3.51	0.108
C/2002 T7 (LINEAR)	3 152.036	0.94	40165	327184	96554	3.39	0.095
C/2003 K4 (LINEAR)	3 131.342	2.61	464	3609	1172	3.08	0.097
C/2003 K4 (LINEAR)	3 132.343	2.59	561	5027	1607	3.13	0.085
C/2003 K4 (LINEAR)	3 329.344	1.20	9244	94723	29640	3.20	0.074
9P/Tempel 1	3 553.955	1.51	230	3178	1039	3.06	0.054
9P/Tempel 1	3 554.954	1.51	172	3153	1051	3.00	0.041
9P/Tempel 1	3 555.955	1.51	-	3894	1297	3.00	-
9P/Tempel 1	3 557.007	1.51	341	5618	1842	3.05	0.046
9P/Tempel 1	3 557.955	1.51	223	5154	1595	3.23	0.033
9P/Tempel 1	3 558.952	1.51	277	5267	1629	3.23	0.040
9P/Tempel 1	3 559.954	1.51	291	4618	1440	3.21	0.048
9P/Tempel 1	3 560.952	1.51	388	4984	1571	3.17	0.059
9P/Tempel 1	3 561.953	1.51	211	4281	1347	3.18	0.037
9P/Tempel 1	3 562.956	1.51	142	4162	1281	3.25	0.026
73P-C/Schwassmann-Wachmann 3	3 882.367	0.95	16505	115170	35526	3.24	0.110
73P-B/Schwassmann-Wachmann 3	3 898.369	0.94	4890	33987	11226	3.03	0.108
8P/Tuttle	4 481.021	1.04	1779	28517	9385	3.04	0.047
8P/Tuttle	4 493.018	1.03	4437	74360	24565	3.03	0.045
8P/Tuttle	4 500.017	1.03	4179	64979	21424	3.03	0.048
103P/Hartley 2	5 505.288	1.06	45	373	120	3.12	0.092
103P/Hartley 2	5 505.328	1.06	50	456	144	3.22	0.100
103P/Hartley 2	5 510.287	1.07	51	390	121	3.24	0.073
103P/Hartley 2	5 510.328	1.07	41	425	131	3.17	0.083
103P/Hartley 2	5 511.363	1.08	48	395	125	3.17	0.093
C/2009 P1 (Garradd)	5 692.383	3.25	180	652	224	2.92	0.205
C/2009 P1 (Garradd)	5 727.322	2.90	129	693	205	3.38	0.143
C/2009 P1 (Garradd)	5 767.278	2.52	1110	8276	2652	3.12	0.102
C/2009 P1 (Garradd)	5 813.991	2.09	1594	17035	5666	3.01	0.070
C/2009 P1 (Garradd)	5 814.974	2.08	1571	16873	5489	3.07	0.070
C/2009 P1 (Garradd)	5 815.982	2.07	1506	17557	5780	3.04	0.065

**Tableau 4.4** – Intensités des trois raies interdites de l’oxygène données en ADU (*Analog-to-Digital Units*) et rapports d’intensité mesurés pour tous les spectres de chaque comète. La mesure de l’intensité de la raie verte n’a pas été possible pour les troisièmes spectres des comètes C/2001 Q4 (NEAT) et C/2009 P1 (Garradd) en raison de la contamination de la raie par un rayon cosmique.

Comet	N	$I_{6300}$	$I_{5577}$
		$I_{6364}$	$I_{6300}+I_{6364}$
C/2002 V1 (NEAT)	5	$3.05 \pm 0.03$	$0.07 \pm 0.01$
C/2002 X5 (Kudo-Fujikawa)	3	$2.99 \pm 0.02$	$0.10 \pm 0.003$
C/2002 Y1 (Juels-Holvorcem)	4	$2.98 \pm 0.04$	$0.10 \pm 0.01$
C/2001 Q4 (NEAT)	4	$3.21 \pm 0.23$	$0.32 \pm 0.02$
C/2002 T7 (LINEAR)	3	$3.31 \pm 0.18$	$0.15 \pm 0.05$
C/2003 K4 (LINEAR)	3	$3.14 \pm 0.06$	$0.09 \pm 0.01$
9P/Tempel 1	10	$3.14 \pm 0.10$	$0.04 \pm 0.01$
73P-C/SW 3	1	3.25	0.11
73P-B/SW 3	1	3.03	0.11
8P/Tuttle	3	$3.03 \pm 0.01$	$0.05 \pm 0.01$
103P/Hartley 2	5	$3.15 \pm 0.07$	$0.08 \pm 0.02$
C/2009 P1 (Garradd)	2	$3.15 \pm 0.33$	$0.017 \pm 0.04$
C/2009 P1 (Garradd)	3	$3.04 \pm 0.03$	$0.07 \pm 0.003$

**Tableau 4.5** – Valeurs moyennes des rapports d’intensité des raies données pour chaque comète. Les erreurs listées correspondent à la déviation standard mesurée à partir des N spectres disponibles pour chaque comète. Aucune erreur n’est fournie pour 73P-C/SW3 et 73P-B/SW3 car un seul spectre est disponible pour ces comètes mais nous pouvons supposer qu’elle est comparable.

Le rapport des raies du doublet rouge est sensiblement identique pour toutes les comètes. La valeur moyenne de ce rapport déduite sur l’ensemble de l’échantillon vaut  $3.11 \pm 0.10$ , avec l’erreur correspondant à la déviation standard moyenne. Ce résultat est en très bon accord avec les observations de Cochran (2008) qui obtient un rapport moyen de  $3.09 \pm 0.12$  pour huit comètes différentes. Comme les deux raies rouges proviennent de transitions d’un même niveau vers le niveau fondamental,  $\tau_p$ ,  $\alpha$  et  $N$  de l’équation (4.2) sont équivalents et il en découle que le rapport des deux raies rouges est tout simplement égal à la valeur du rapport de branchement  $\beta_{6300}/\beta_{6364}$ . C’est d’ailleurs le résultat que nous obtenons puisque le rapport moyen est en très bon accord avec le rapport de branchement de 3.096 déterminé théoriquement par Galavis et al. (1997). Plus récemment, Storey & Zeippen (2000) ont amélioré les calculs théoriques du rapport de branchement en prenant en compte les effets relativistes et ont publié une valeur légèrement plus petite : 2.997. La valeur plus élevée du rapport moyen obtenu à partir des données cométaires observationnelles pourrait s’expliquer par la présence d’une erreur systématique provenant d’un *blend* de la raie d’oxygène à  $6300.304 \text{ \AA}$  avec une faible raie cométaire non identifiée. Afin de vérifier cette possible contamination, nous avons analysé la valeur du rapport des trois comètes de l’échantillon observées à de grandes distances héliocentriques, C/2001 Q4 (NEAT), C/2003 K4 (LINEAR) et C/2009 P1 (Garradd), puisque les raies de fluorescence et leur contamination disparaissent au plus on s’éloigne du Soleil. Pour ces trois comètes, nous obtenons un rapport moyen de  $3.13 \pm 0.07$ . De plus, la mesure de ce même rapport à partir des raies d’oxygène atmosphériques nous donne un résultat égal à  $3.20 \pm 0.05$ . Ceci semble indiquer que les mesures se rapprochent davantage de la valeur théorique proposée par Galavis et al. (1997). L’erreur sur nos mesures reste néanmoins trop

grande pour écarter la mesure de Storey & Zeippen (2000).

La valeur moyenne du rapport de la raie verte sur la somme des raies rouges vaut  $0.11 \pm 0.07$  pour l'échantillon complet. Bien que ce résultat soit en très bonne concordance avec la mesure de  $0.09 \pm 0.01$  obtenue par Cochran (2008), nous constatons une plus grande dispersion dans nos mesures. Celle-ci s'explique, comme nous le verrons, par le fait que notre échantillon contient des comètes observées à de grandes distances du Soleil. Si nous évaluons le rapport G/R moyen pour les comètes observées à une distance héliocentrique inférieure à 2.5 au, nous obtenons un rapport de 0.09 et une dispersion nettement plus petite de seulement 0.02. Le bon accord de ce rapport avec les prédictions théoriques de Bhardwaj & Raghuram (2012) (cf. tableau 4.1) nous permet de conclure que les atomes d'oxygène produisant les raies interdites proviennent majoritairement de la molécule parente H<sub>2</sub>O pour laquelle le rapport théorique attendu est de 0.08.

Suite à cette analyse, nous avons étudié l'influence des collisions sur les résultats. Pour cela, nous avons regardé si le rapport G/R évoluait d'une façon quelconque avec le taux de production de H<sub>2</sub>O. En effet, au plus le taux de production de H<sub>2</sub>O dans une comète est élevé, au plus le taux de collisions sera important et entraînera davantage de perte d'atomes d'oxygène dans l'état <sup>1</sup>S et donc modifiera *in fine* la valeur du rapport G/R. Les taux de production de H<sub>2</sub>O des comètes utilisés dans cette étude proviennent de la littérature et les références sont détaillées dans le tableau 4.6. Comme les comètes de l'échantillon ont été observées sous différentes conditions, que cela soit au niveau des taux de production mais aussi de la distance héliocentrique, l'absence d'une tendance dans la figure 4.9 suggère que les collisions semblent négligeables et n'affectent pas nos conclusions principales.

Comète	$r$ (ua)	Date d'observation des spectres	$Q_{H_2O}$ ( $10^{28} \text{ s}^{-1}$ )	Date	Référence pour $Q_{H_2O}$
C/2002 V1 (NEAT)	1.22	8 jan 2003	8.56	8 jan 2003	Combi et al. (2011)
	1.01	21 mars 2003	12.73	21 mars 2003	Combi et al. (2011)
C/2002 X5 (Kudo-Fujikawa)	1.06	19 fév 2003	6.67	19 fév 2003	Combi et al. (2011)
C/2002 T7 (LINEAR)	0.68	6 mai 2004	35.5	5 mai 2004	DiSanti et al. (2006)
	0.94	27 mai 2004	52.1	27 mai 2004	Combi et al. (2009)
C/2003 K4 (LINEAR)	2.61	6 mai 2004	3.47	2004 May 6	( <sup>1</sup> )
	1.20	20 nov 2004	22.4	20 nov 2004	( <sup>1</sup> )
9P/Tempel 1	1.51	3 juil 2005	0.47	3 juil 2005	Gicquel et al. (2012)
73P-C/Schwassmann-Wachmann 3	0.95	27 mai 2006	1.70	17 mai 2006	Schleicher & Bair (2011)
73P-B/Schwassmann-Wachmann 3	0.94	12 juin 2006	1.76	18 mai 2006	Schleicher & Bair (2011)
8P/Tuttle	1.04	16 jan 2008	1.4	3 jan 2008	Barber et al. (2009)
103P/Hartley 2	1.06	5 nov 2010	1.15	31 nov 2010	Knight & Schleicher (2012)
C/2009 P1 (Garradd)	2.07	12 sep 2011	8.4	17-21 sep 2011	Paganini et al. (2012)

**Tableau 4.6** – Les taux de production de H<sub>2</sub>O et leurs références. Les  $Q_{H_2O}$  fournis dans ce tableau ont été mesurés pour des moments relativement proches de nos dates d'observation.

(<sup>1</sup>) Ces taux de production de H<sub>2</sub>O ont été estimés grâce à la relation de Jorda (Jorda et al., 1991) et en utilisant les magnitudes fournies par Manfroid et al. (2005).

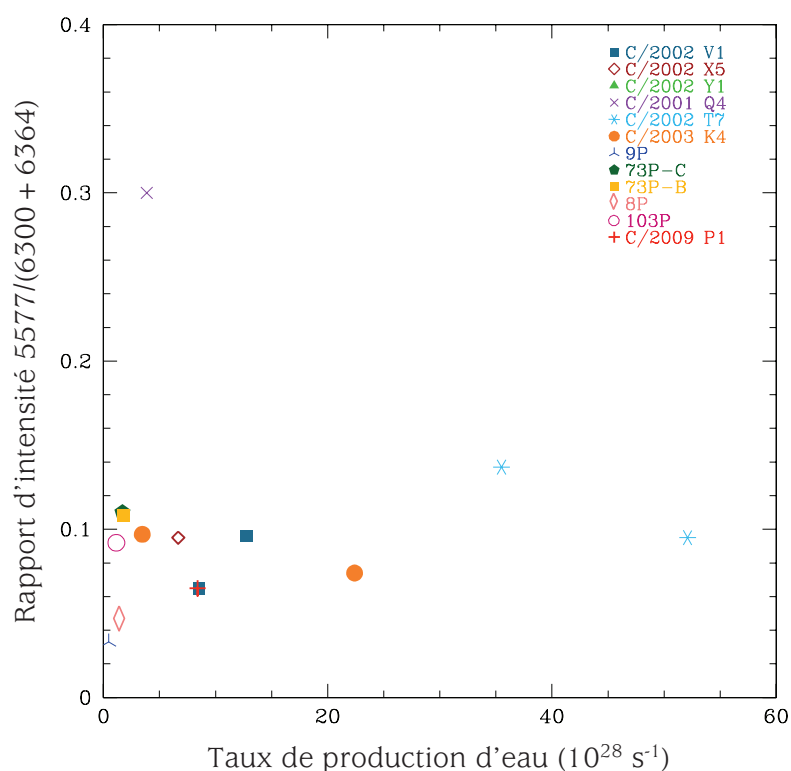


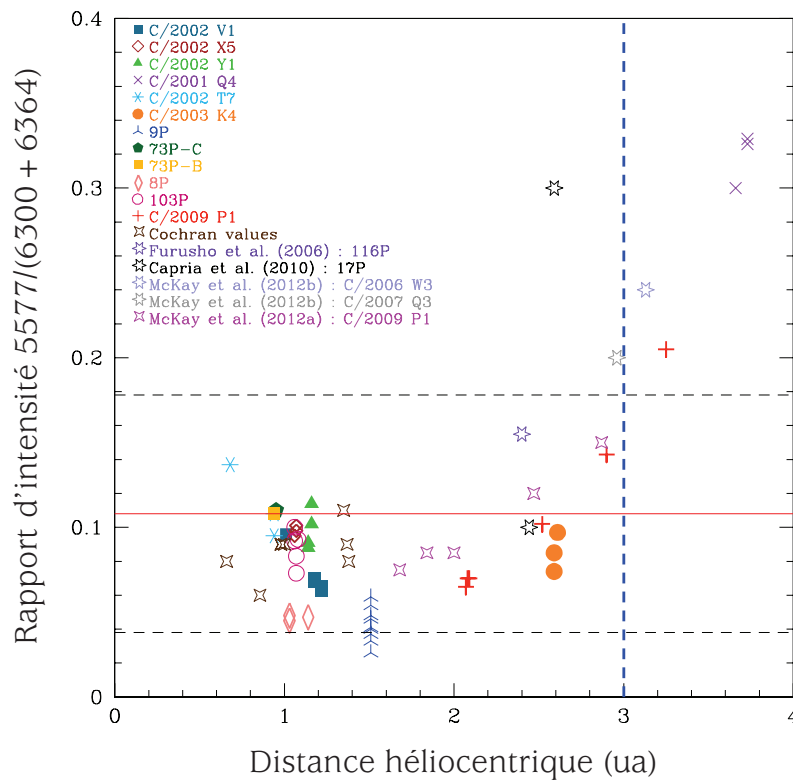
FIGURE 4.9 – Le rapport G/R présenté en fonction du taux de production d'eau.

#### 4.6.1.1 Discussion sur le rapport G/R à grande distance héliocentrique

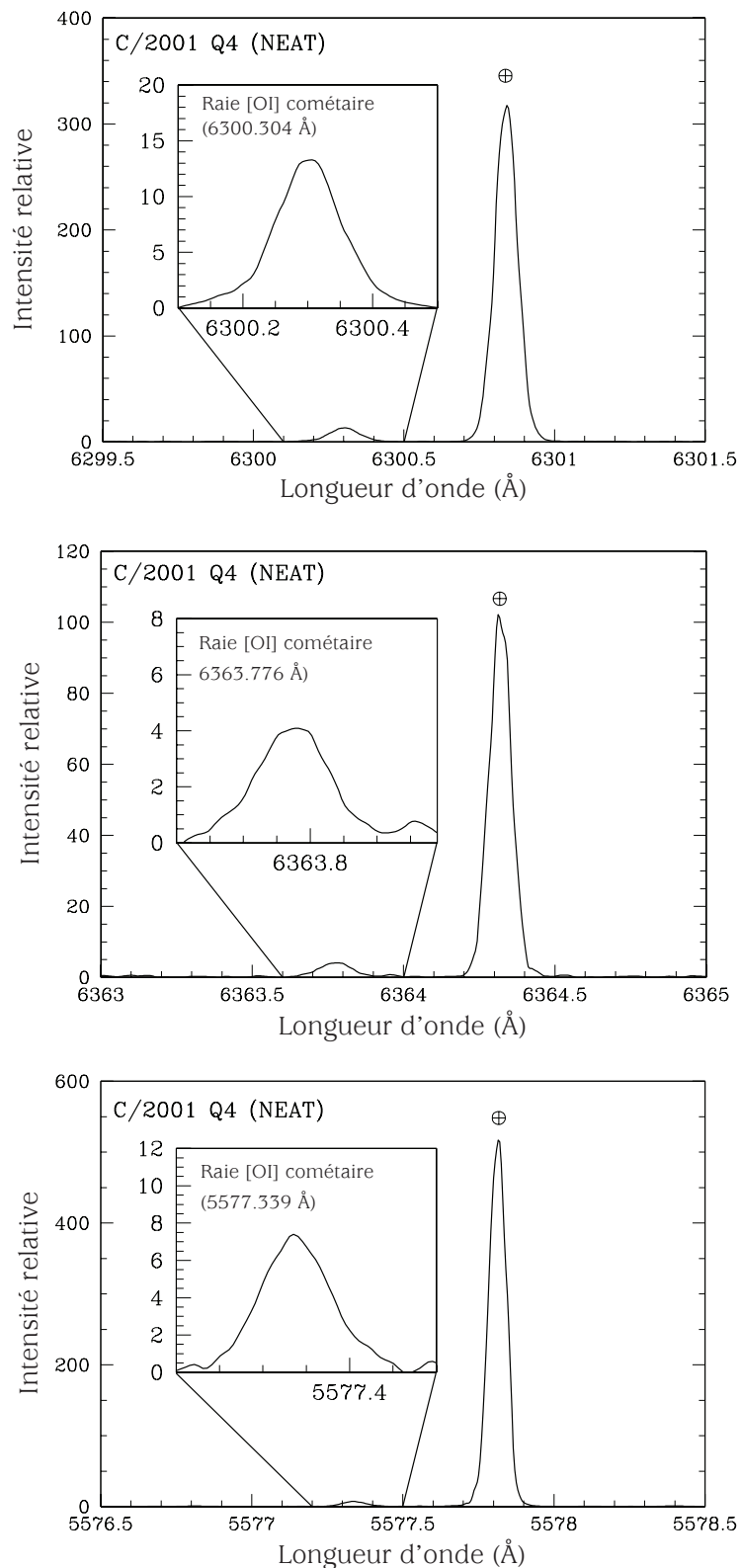
Sur la figure 4.8, nous remarquons que le rapport moyen de  $\sim 0.3$  obtenu pour les spectres de la comète C/2001 Q4 (NEAT) est nettement plus élevé que celui mesuré dans les autres comètes de l'échantillon qui reste toujours de l'ordre de 0.1. La comète C/2001 Q4 (NEAT) a la particularité d'avoir été observée loin du Soleil (3.7 au). Cette caractéristique nous amène à analyser de façon plus détaillée les résultats des comètes observées à grandes distances héliocentriques (cf. figure 4.11 et Decock et al. (2011))

Si nous considérons uniquement les données prises près du Soleil, c'est-à-dire lorsque  $r$  est inférieur à 2 ua, le rapport G/R moyen vaut  $0.09 \pm 0.02$ , ce qui est davantage en accord avec les rapports théoriques proposés par Bhardwaj & Raghuram (2012) et Festou & Feldman (1981) dans le cas où  $\text{H}_2\text{O}$  est la molécule mère principale (cf. tableau 4.1 avec des valeurs attendues de respectivement 0.08 et  $\sim 0.1$ ). La grande valeur du rapport G/R pour la comète C/2001 Q4 (NEAT) observée à  $r = 3.7$  ua pourrait s'expliquer par une contribution croissante, à grandes distances héliocentriques, d'autres molécules parentes produisant également des atomes d'oxygène. La sublimation des molécules d'eau décroît fortement au-delà de 3 ua alors que la sublimation d'autres molécules comme le monoxyde de carbone (CO) et le dioxyde de carbone ( $\text{CO}_2$ ) deviennent les principaux

moteurs de l'activité cométaire (Crovisier & Encrenaz, 2000). Afin d'étudier cette piste hypothétique, nous avons observé la nouvelle comète, C/2009 P1 (Garradd), à quatre distances héliocentriques différentes lorsque celle-ci s'approchait progressivement du Soleil, de 3.25 ua à 2.07 ua. La figure 4.10 présente les résultats du rapport G/R en fonction de la distance héliocentrique. Grâce à cette figure, une relation entre la distance au Soleil et le rapport d'intensité peut être dégagée : ce dernier croît rapidement à mesure que la comète s'éloigne du Soleil.



**FIGURE 4.10** – Rapports d'intensité G/R présentés en fonction de la distance héliocentrique (ua). Le même symbole est utilisé pour l'ensemble des spectres appartenant à une comète donnée. Les comètes situées à de grandes distances héliocentriques montrent des rapports plus élevés. D'autres valeurs tirées de la littérature sont ajoutées au graphique. Le trait plein rouge représente la valeur moyenne des rapports pour notre échantillon et la déviation standard de cette moyenne est indiquée par les traits pointillés horizontaux noirs. Si nous considérons uniquement les données acquises pour  $r < 2$  ua, la valeur moyenne de G/R descend à  $0.09 \pm 0.02$ . La ligne pointillée horizontale positionnée à 3 ua correspond à la distance à partir de laquelle la sublimation des molécules d'eau décroît fortement (Crovisier & Encrenaz, 2000).



**FIGURE 4.11** – Spectres de la comète C/2001 Q4 (NEAT) obtenus avec le VLT (ESO) après un temps de pose de deux heures. Ces spectres présentent la détection des raies de [OI] la plus lointaine jamais réalisée pour une comète ( $r=3.7$  ua). Les raies sont bien détectées et parfaitement séparées des raies de l'oxygène atmosphériques. Les largeurs des raies verte et rouges sont ici similaires.

Sur cette figure, nous avons également ajouté les résultats de Cochran & Cochran (2001) et Cochran (2008) obtenus à partir d'une analyse basée sur un échantillon de huit comètes différentes. Toutes leurs valeurs du rapport G/R se concentrent autour d'une unité astronomique et donnent un rapport moyen égal à  $\sim 0.1$ . La comète C/2001 Q4 (NEAT) fait également partie de cet échantillon et pour celle-ci, un rapport G/R de  $0.09 \pm 0.02$  a été mesuré pour une distance héliocentrique de 0.98 ua. D'autres mesures trouvées dans la littérature et acquises à partir de comètes observées à des distances héliocentriques supérieures à 2 ua ont également été ajoutées sur la figure. Parmi celles-ci, on retrouve les données de Furusho et al. (2006) qui ont étudié les raies de l'oxygène dans la comète 116P/Wild 4 observée à  $r = 2.4$  ua avec le télescope Subaru. Ont également été indiquées les mesures de G/R de Capria et al. (2010) acquises durant et après l'outburst de la comète 17P/Holmes. Cette "explosion" s'est produite le 24 octobre 2007 lorsque la comète était à une distance héliocentrique de 2.5 ua. Enfin, les rapports d'intensité des raies d'oxygène estimés par McKay et al. (2012) pour les comètes C/2006 W3 (Christensen) et C/2007 Q3 (Siding Spring) sont indiqués. Ces dernières ont été observées respectivement à 3.13 et 2.96 ua avec le spectromètre échelle ARCES installé sur le télescope de 3.5 mètres de l'Observatoire Apache Point. Bien que la qualité des données ne soit pas toujours excellente en raison de la faible intensité des raies et que la résolution spectrale maximale atteinte par ces instruments ne permette pas toujours de distinguer clairement la raie cométaire de la raie atmosphérique, toutes les mesures exposées ici présentent un rapport d'intensité G/R élevé quand la distance héliocentrique dépasse trois unités astronomiques. Cela confirme l'hypothèse que l'oxygène présent dans la coma des comètes à grandes distances héliocentriques proviendrait d'autre(s) molécule(s) que H<sub>2</sub>O. Au vu du tableau théorique (cf. tableau 4.1), CO et CO<sub>2</sub> sont de bons candidats étant donné que ces molécules produisent un rapport <sup>1</sup>S/<sup>1</sup>D élevé. D'où la question : *Pouvons-nous déterminer si les atomes d'oxygène observés ont été formés à partir de la photodissociation du CO et/ou du CO<sub>2</sub> ?*

Les observations HST/STIS de Feldman et al. (2004b) ont conduit à une estimation de 4% pour l'abondance relative du monoxyde de carbone par rapport à l'eau dans la comète C/2001 Q4 (NEAT) lorsque celle-ci se trouvait à 1 ua du Soleil. L'étude réalisée par Biver et al. (2012) pour la comète C/2009 P1 (Garradd) a fourni une abondance relative de CO égale à 5% à  $r = 1.9$  ua avant le passage au périhélie de la comète (Octobre 2011). Ces valeurs d'abondances qualifient les comètes Q4 et Garradd de comètes riches en CO (Lupu et al., 2007; Paganini et al., 2012; Feaga et al., 2014). Nous ne possédons pas de mesures de CO pour ces comètes à de plus grandes distances héliocentriques mais nous savons au moins que celles-ci doivent être plus grandes. Dès lors, la molécule de monoxyde

de carbone pourrait être un bon candidat pour donner un haut rapport G/R. Cependant, Bhardwaj & Raghuram (2012) ont montré qu'après la photodissociation de H<sub>2</sub>O, la principale source d'atomes O(<sup>1</sup>S) est la molécule de CO<sub>2</sub> avec un taux pouvant aller de 10 à 40% par rapport à H<sub>2</sub>O. Ces derniers ont comparé leur modèle théorique avec les données observationnelles présentées pour la comète C/1996 B2 (Hyakutake) par Morrison et al. (1997) et Cochran (2008) quand celle-ci se trouvait à 1 ua. Hyakutake est une comète riche en CO et son abondance est estimée à 22% à 1 ua (Biver et al., 1999). En supposant que l'abondance de CO<sub>2</sub> vaut seulement 1% et que le taux de photodissociation de O(<sup>1</sup>S) est égal à 0.2%, Bhardwaj & Raghuram (2012) ont conclu que les taux de production de O(<sup>1</sup>S) sont similaires pour CO et CO<sub>2</sub> et valent entre 10 et 25% pour les abondances définies ci-dessus. Cela dit, comme signalé précédemment, les comètes C/2001 Q4 et C/2009 P1 possèdent moins de CO que Hyakutake. Dès lors, malgré sa faible abondance, la molécule de CO<sub>2</sub> pourrait tout de même être le contributeur majeur dans la formation de la raie verte d'oxygène pour ces deux comètes étudiées à de grandes distances héliocentriques. Une mesure directe de l'abondance de CO<sub>2</sub> pour ces comètes s'avèrerait bien sûr très utile pour éclaircir cette hypothèse. Cependant celle-ci est malheureusement difficile à obtenir car le CO<sub>2</sub> n'est pas détectable depuis le sol.

#### 4.6.1.2 Lien entre le rapport G/R et l'abondance de CO<sub>2</sub> dans les comètes

##### 4.6.1.2.1 Méthodes actuelles pour la mesure de CO<sub>2</sub>

La molécule de dioxyde de carbone se manifeste dans le proche infrarouge, principalement via la bande fondamentale de vibration  $\nu_3$  à 4.26  $\mu\text{m}$ . Il est malheureusement impossible de détecter le CO<sub>2</sub> depuis un observatoire terrestre, en raison de l'importante absorption créée dans cette bande par l'atmosphère de notre planète riche en CO<sub>2</sub>. La présence de CO<sub>2</sub> dans les comètes a néanmoins été établie de façon indirecte par l'observation de l'ion CO<sub>2</sub><sup>+</sup> dans les queues cométaires (Swings & Page, 1950; Feldman & Brune, 1976; Feldman et al., 2004a). De nombreuses analyses ont ensuite vu le jour grâce aux mesures *in situ* obtenues, par exemple pour 1P/Halley par le spectromètre de masse de la sonde Giotto (Krankowsky et al., 1986) ou plus récemment pour 103P/Hartley 2 grâce à un spectrographe proche infrarouge de EPOXI de la NASA (A'Hearn et al., 2011). Le télescope ISO (*Infrared Space Observatory*) a permis l'obtention du taux de production de CO<sub>2</sub> dans la comète Hale-Bopp (Crovisier et al., 1997) et la comète 103P/Hartley 2 (Crovisier et al., 1999). Le télescope spatial japonais AKARI et sa caméra infrarouge IRC (*near and mid InfraRed Camera*) (Murakami et al., 2007) ont également conduit à la mesure du dioxyde de carbone dans 17 comètes (Ootsubo et al., 2012a). Des mesures indirectes ont apporté des informations sur le CO<sub>2</sub> dans les comètes, par exemple, via la



bande de Cameron de CO ( $a^3\Pi - X^1\Sigma^+$ ) générée par les émissions *promptes* du CO<sub>2</sub> et donc, considérée comme un traceur du CO<sub>2</sub>. En effet, l'étude de cette bande située à 2200 Å dans le domaine ultraviolet a permis de déduire le taux de production du CO<sub>2</sub> de quelques comètes à partir de celui du CO (Weaver et al., 1994; Feldman et al., 1997).

Assez peu de méthodes existent donc pour analyser le CO<sub>2</sub> depuis le sol, alors que cette molécule fait pourtant partie des trois éléments les plus abondants de la coma des comètes avec le H<sub>2</sub>O et le CO. L'oxygène atomique, l'un des produits de dissociation du CO<sub>2</sub> détecté facilement dans le domaine visible, pourrait ainsi être un nouvel outil pour mesurer le CO<sub>2</sub> cométaire. Jusqu'ici, seuls les domaines infrarouge et ultraviolet permettaient d'avoir des informations sur le CO<sub>2</sub>.

#### 4.6.1.2.2 Une nouvelle méthode pour la détermination de l'abondance de CO<sub>2</sub> à partir du sol

En utilisant l'équation (4.2) et en ne considérant que les principales molécules parentes aptes à produire des atomes d'oxygène, c'est-à-dire les molécules H<sub>2</sub>O, CO et CO<sub>2</sub>, nous pouvons écrire le rapport G/R de cette façon :

$$G/R = \frac{I^{\text{green}}}{I^{\text{red}}} = \frac{W_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{green}} \beta^{\text{green}} N_{\text{H}_2\text{O}} + W_{\text{CO}_2}^{\text{green}} \beta^{\text{green}} N_{\text{CO}_2} + W_{\text{CO}}^{\text{green}} \beta^{\text{green}} N_{\text{CO}}}{W_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{red}} \beta^{\text{red}} N_{\text{H}_2\text{O}} + W_{\text{CO}_2}^{\text{red}} \beta^{\text{red}} N_{\text{CO}_2} + W_{\text{CO}}^{\text{red}} \beta^{\text{red}} N_{\text{CO}}}, \quad (4.3)$$

où les  $W_b^a = \alpha_b^a \tau_b^{-1}$  correspondent aux taux de production effectifs pour les états O(<sup>1</sup>S) et O(<sup>1</sup>D). Les valeurs numériques de ces taux de production effectifs sont fournies dans les tableaux 1 et 2 de Bhardwaj & Raghuram (2012) et valent :  $W_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{red}} = 8 \times 10^{-7} \text{ s}^{-1}$ ,  $W_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{green}} = 6.4 \times 10^{-8} \text{ s}^{-1}$ ,  $W_{\text{CO}_2}^{\text{red}} = 1.2 \times 10^{-6} \text{ s}^{-1}$ ,  $W_{\text{CO}_2}^{\text{green}} = 7.2 \times 10^{-7} \text{ s}^{-1}$ ,  $W_{\text{CO}}^{\text{red}} = 5.1 \times 10^{-8} \text{ s}^{-1}$  et  $W_{\text{CO}}^{\text{green}} = 4 \times 10^{-8} \text{ s}^{-1}$ . La valeur numérique du rapport de branchement  $\beta^{\text{green}}$  vaut 0.91 et, est définie dans Slanger et al. (2006).

Premièrement, si nous considérons que tous les atomes d'oxygène ne viennent que de deux parents principaux, à savoir l'eau et le monoxyde de carbone, l'équation précédente peut se simplifier comme tel :

$$G/R = \frac{I^{\text{green}}}{I^{\text{red}}} = \frac{W_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{green}} \beta^{\text{green}} N_{\text{H}_2\text{O}} + W_{\text{CO}}^{\text{green}} \beta^{\text{green}} N_{\text{CO}}}{W_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{red}} \beta^{\text{red}} N_{\text{H}_2\text{O}} + W_{\text{CO}}^{\text{red}} \beta^{\text{red}} N_{\text{CO}}}. \quad (4.4)$$

Cependant, nous constatons que la valeur du rapport d'intensité G/R ne change pas fondamentalement et varie seulement de 0.08 à 0.1 pour des valeurs d'abondance de CO/H<sub>2</sub>O de 10% à 80%, respectivement. Malgré les hautes abondances testées, nous sommes donc

incapables de reproduire le rapport G/R élevé trouvé pour la comète C/2001 Q4 (NEAT). Cela nous amène donc à en déduire que les atomes d'oxygène semblent plutôt produits par les photodissociations des molécules de H<sub>2</sub>O et de CO<sub>2</sub> mais pas de CO. Dans ce cas, l'équation (4.3) peut se réécrire de cette façon :

$$G/R = \frac{I^{\text{green}}}{I^{\text{red}}} = \frac{W_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{green}} \beta^{\text{green}} N_{\text{H}_2\text{O}} + W_{\text{CO}_2}^{\text{green}} \beta^{\text{green}} N_{\text{CO}_2}}{W_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{red}} \beta^{\text{red}} N_{\text{H}_2\text{O}} + W_{\text{CO}_2}^{\text{red}} \beta^{\text{red}} N_{\text{CO}_2}}, \quad (4.5)$$

et nous pouvons alors en déduire l'abondance relative de CO<sub>2</sub> à partir du rapport d'intensité G/R :

$$\frac{N_{\text{CO}_2}}{N_{\text{H}_2\text{O}}} = \frac{(G/R) W_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{red}} - \beta^{\text{green}} W_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{green}}}{\beta^{\text{green}} W_{\text{CO}_2}^{\text{green}} - (G/R) W_{\text{CO}_2}^{\text{red}}}. \quad (4.6)$$

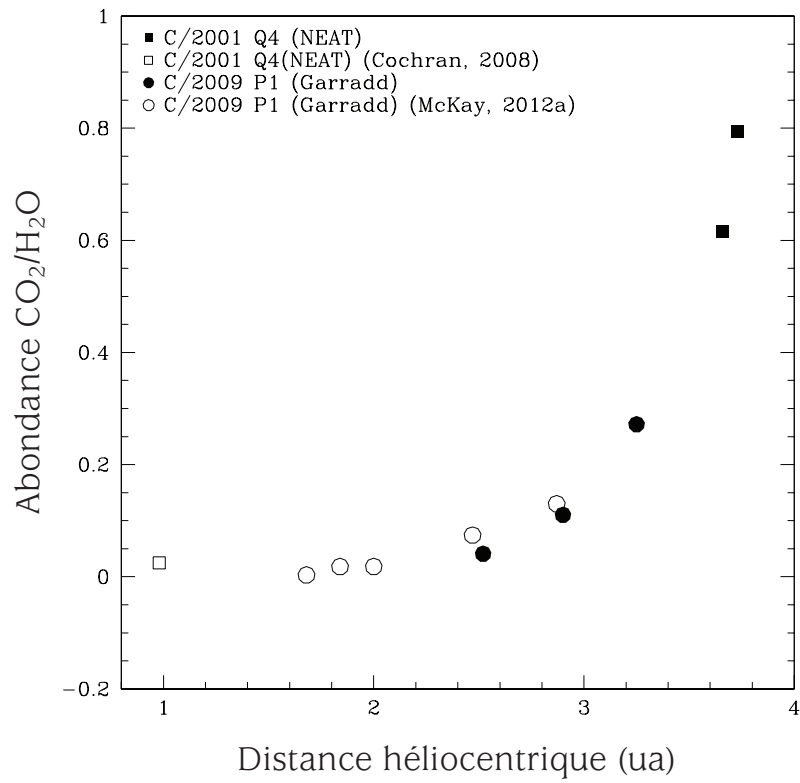
Notons que la valeur des taux de production effectifs  $W_b^a$  est indépendante de la distance au Soleil étant donné qu'ils dépendent tous de la même distance héliocentrique. Ceci est également le cas pour les valeurs fournies dans le tableau 4.1. Grâce à l'équation (4.6), nous pouvons désormais estimer l'abondance relative de CO<sub>2</sub> des comètes C/2001 Q4 (NEAT) et C/2009 P1 (Garradd) à partir des rapports G/R mesurés dans nos spectres mais aussi à partir de ceux calculés par Cochran (2008) et McKay et al. (2012). Les résultats sont présentés dans la figure 4.12 pour ces mêmes comètes.

Nous remarquons que, pour la comète C/2001 Q4 (NEAT), la valeur de l'abondance de CO<sub>2</sub> peut atteindre 75% de la valeur de l'abondance de H<sub>2</sub>O. Nous constatons que la contribution de la molécule de CO<sub>2</sub> dans la production d'atomes d'oxygène débute aux alentours de 2.5 ua. Cette distance héliocentrique est également mise en évidence dans l'étude menée par Ootsubo et al. (2012a) sur un échantillon de 17 comètes observées avec le télescope infrarouge spatial AKARI.

Dès lors, l'analyse et la mesure des raies interdites de l'oxygène nous procurent une nouvelle méthode pour déterminer, à partir de données obtenues au sol, l'abondance relative de CO<sub>2</sub> présente dans les comètes observées à grandes distances héliocentriques alors qu'une mesure directe de cette abondance n'est possible que depuis l'Espace.

#### 4.6.2 Mesure de la largeur intrinsèque des raies de [OI]

Le tableau 4.7 reprend l'ensemble des mesures des largeurs intrinsèques des trois raies de [OI], notées FWHM(v) et exprimées en km s<sup>-1</sup>. Ces largeurs représentent en réalité la vitesse la plus probable des atomes d'oxygène. Elles sont déduites des largeurs intrinsèques en longueur d'onde, FWHM<sub>intrinsèque</sub>(λ), grâce à la relation suivante :



**FIGURE 4.12** – Calcul de l’abondance de CO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>O en fonction de la distance héliocentrique (ua).

$$\text{FWHM}(\nu) = \frac{\text{FWHM}_{\text{intrinsèque}}(\lambda) c}{\lambda_{[\text{OI}]} 2 \sqrt{\ln 2}}, \quad (4.7)$$

où  $\lambda_{[\text{OI}]}$  correspond à la longueur d’onde de la raie d’oxygène considérée dans le calcul et  $c$  représente la vitesse de la lumière en  $\text{km s}^{-1}$ .

Le détail du calcul aboutissant à cette expression est donné dans l’annexe B.

Comète	JD - 2 450 000.5	$r$ (ua)	FWHM <sub>observée</sub> (Å)			FWHM <sub>intrinsèque</sub> (km s <sup>-1</sup> )		
			5577.339 Å	6300.304 Å	6363.776 Å	5577.339 Å	6300.304 Å	6363.776 Å
C/2002 V1 (NEAT)	2 647.037	1.22	0.092	0.098	0.094	2.08	1.57	1.40
C/2002 V1 (NEAT)	2 647.062	1.22	0.089	0.095	0.095	1.95	1.42	1.44
C/2002 V1 (NEAT)	2 649.031	1.18	0.096	0.096	0.095	2.23	1.45	1.42
C/2002 V1 (NEAT)	2 649.056	1.18	0.093	0.095	0.094	2.11	1.40	1.38
C/2002 V1 (NEAT)	2 719.985	1.01	0.108	0.098	0.096	2.76	1.54	1.49
C/2002 X5 (Kudo-Fujikawa)	2 705.017	1.06	0.104	0.094	0.093	2.64	1.46	1.50
C/2002 X5 (Kudo-Fujikawa)	2 705.039	1.07	0.104	0.095	0.095	2.61	1.54	1.60
C/2002 X5 (Kudo-Fujikawa)	2 705.060	1.07	0.104	0.095	0.094	2.64	1.50	1.54
C/2002 Y1 (Juels-Holvorcem)	2 788.395	1.14	0.106	0.092	0.091	2.88	1.52	1.47
C/2002 Y1 (Juels-Holvorcem)	2 788.416	1.14	0.103	0.092	0.091	2.75	1.54	1.49
C/2002 Y1 (Juels-Holvorcem)	2 789.394	1.16	0.113	0.095	0.094	3.09	1.59	1.57
C/2002 Y1 (Juels-Holvorcem)	2 789.415	1.16	0.112	0.095	0.094	3.03	1.61	1.59
C/2001 Q4 (NEAT)	2 883.293	3.73	0.101	0.116	0.117	2.51	2.39	2.39
C/2001 Q4 (NEAT)	2 883.349	3.73	0.097	0.123	0.125	2.31	2.63	2.69
C/2001 Q4 (NEAT)	2 889.236	3.67	-	0.119	0.121	-	2.49	2.52
C/2001 Q4 (NEAT)	2 889.320	3.66	0.102	0.125	0.117	2.55	2.75	2.36
C/2002 T7 (LINEAR)	3 131.421	0.68	0.115	0.099	0.100	3.12	1.82	1.80
C/2002 T7 (LINEAR)	3 151.976	0.94	0.101	0.089	0.090	2.84	1.70	1.71
C/2002 T7 (LINEAR)	3 152.036	0.94	0.100	0.088	0.090	2.81	1.66	1.72
C/2003 K4 (LINEAR)	3 131.342	2.61	0.131	0.135	0.136	2.51	1.81	1.66
C/2003 K4 (LINEAR)	3 132.343	2.59	0.106	0.108	0.105	2.76	2.12	1.94
C/2003 K4 (LINEAR)	3 329.344	1.20	0.097	0.094	0.096	2.38	1.52	1.52
9P/Tempel 1	3 553.955	1.51	0.110	0.096	0.093	2.91	1.61	1.43
9P/Tempel 1	3 554.954	1.51	0.091	0.095	0.094	2.14	1.59	1.48
9P/Tempel 1	3 555.955	1.51	-	0.094	0.094	-	1.56	1.46
9P/Tempel 1	3 557.007	1.51	0.091	0.095	0.095	2.03	1.55	1.44
9P/Tempel 1	3 557.955	1.51	0.084	0.095	0.095	1.75	1.54	1.47
9P/Tempel 1	3 558.952	1.51	0.084	0.095	0.095	1.79	1.58	1.48
9P/Tempel 1	3 559.954	1.51	0.101	0.101	0.097	2.57	1.84	1.60
9P/Tempel 1	3 560.952	1.51	0.106	0.098	0.096	2.77	1.72	1.52
9P/Tempel 1	3 561.953	1.51	0.087	0.096	0.095	1.92	1.63	1.48
9P/Tempel 1	3 562.956	1.51	0.081	0.096	0.095	1.67	1.61	1.48

Comète	JD - 2 450 000.5	$r$ (ua)	FWHM <sub>observée</sub> (Å)			FWHM <sub>intrinsèque</sub> (km s <sup>-1</sup> )		
			5577.339 Å	6300.304 Å	6363.776 Å	5577.339 Å	6300.304 Å	6363.776 Å
73P-C/Schwassmann-Wachmann 3	3 882.367	0.95	0.104	0.106	0.107	2.12	1.31	1.30
73P-B/Schwassmann-Wachmann 3	3 898.369	0.94	0.110	0.108	0.108	2.46	1.54	1.48
8P/Tuttle	4 481.021	1.04	0.091	0.093	0.091	2.16	1.55	1.36
8P/Tuttle	4 493.018	1.03	0.093	0.093	0.092	2.21	1.55	1.41
8P/Tuttle	4 500.017	1.03	0.095	0.093	0.091	2.28	1.47	1.33
103P/Hartley 2	5 505.288	1.06	0.095	0.091	0.097	2.30	1.35	1.29
103P/Hartley 2	5 505.328	1.06	0.090	0.082	0.081	2.31	1.26	1.25
103P/Hartley 2	5 510.287	1.07	0.092	0.081	0.083	2.31	1.26	1.06
103P/Hartley 2	5 510.328	1.07	0.092	0.081	0.079	2.24	1.27	1.17
103P/Hartley 2	5 511.363	1.08	0.090	0.081	0.081	2.19	1.23	1.18
C/2009 P1 (Garradd)	5 692.383	3.25	0.095	0.091	0.097	2.28	1.67	1.87
C/2009 P1 (Garradd)	5 727.322	2.90	0.099	0.083	0.089	2.54	1.27	1.49
C/2009 P1 (Garradd)	5 767.278	2.52	0.090	0.083	0.084	2.19	1.30	1.31
C/2009 P1 (Garradd)	5 813.991	2.09	0.090	0.085	0.087	2.18	1.25	1.33
C/2009 P1 (Garradd)	5 814.974	2.08	0.089	0.086	0.087	2.16	1.33	1.33
C/2009 P1 (Garradd)	5 815.982	2.07	0.090	0.087	0.089	2.21	1.57	1.58

**Tableau 4.7** – Liste des valeurs des FWHM<sub>observée</sub> (Å) et des largeurs intrinsèques en vitesse (km s<sup>-1</sup>) obtenues pour les trois raies interdites de l'oxygène. Aucune valeur n'est donnée pour les troisièmes spectres des comètes C/2001 Q4 (NEAT) et C/2009 P1 (Garradd) car, dans ces deux cas, la raie verte est contaminée par un rayon cosmique.

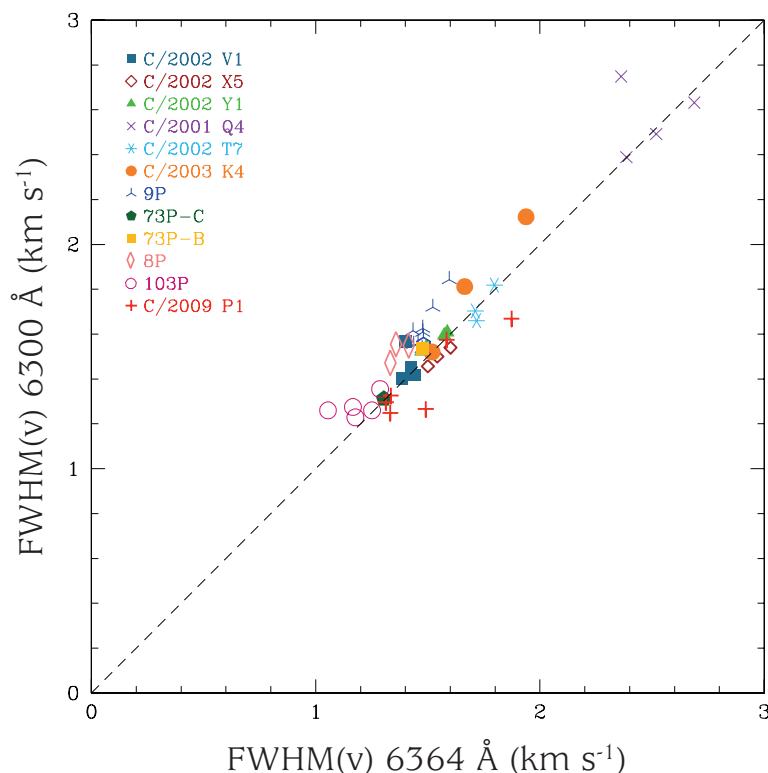
L'erreur sur la largeur est définie par la déviation standard ( $\sigma$ ) mesurée sur l'ensemble des largeurs des  $N$  spectres disponibles pour une comète donnée. Cette erreur est fournie dans le tableau 4.8 et vaut en moyenne 5% pour les raies rouges et 10% pour la raie verte. L'erreur plus importante pour la raie verte s'explique par le fait que son intensité est plus faible et parfois moins bien ajustée.

Comète	$N$	FWHM <sub>intrinsèque</sub> (km s <sup>-1</sup> )		
		5577.339 Å	6300.304 Å	6363.776 Å
C/2002 V1	5	1.48 ± 0.07	1.43 ± 0.04	2.22 ± 0.32
C/2002 X5	3	1.48 ± 0.07	1.43 ± 0.04	2.22 ± 0.32
C/2002 Y1	4	1.57 ± 0.04	1.53 ± 0.06	2.94 ± 0.15
C/2001 Q4	4	2.57 ± 0.16	2.49 ± 0.15	2.46 ± 0.13
C/2002 T7	3	1.77 ± 0.09	1.72 ± 0.07	2.47 ± 0.64
C/2003 K4	3	1.82 ± 0.30	1.71 ± 0.21	2.55 ± 0.19
9P	10	1.62 ± 0.09	1.48 ± 0.05	2.23 ± 0.47
73P-C	1	1.27	1.27	2.13
73P-B	1	1.54	1.47	2.56
8P	3	1.53 ± 0.05	1.37 ± 0.04	2.22 ± 0.06
103P	5	1.28 ± 0.05	2.00 ± 0.07	2.15 ± 0.20
C/2009 P1	2	1.47 ± 0.29	1.68 ± 0.27	2.41 ± 0.19
C/2009 P1	3	1.34 ± 0.17	1.42 ± 0.15	2.18 ± 0.02

**Tableau 4.8** – Moyenne des largeurs intrinsèques des raies de [OI] pour chaque comète. Les erreurs listées dans ce tableau correspondent à la déviation standard mesurée à partir des  $N$  spectres disponibles par comète. Aucune erreur n'est fournie pour 73P-C/SW3 et 73P-B/SW3 car un seul spectre est disponible pour ces comètes mais nous pouvons supposer qu'elle est comparable.

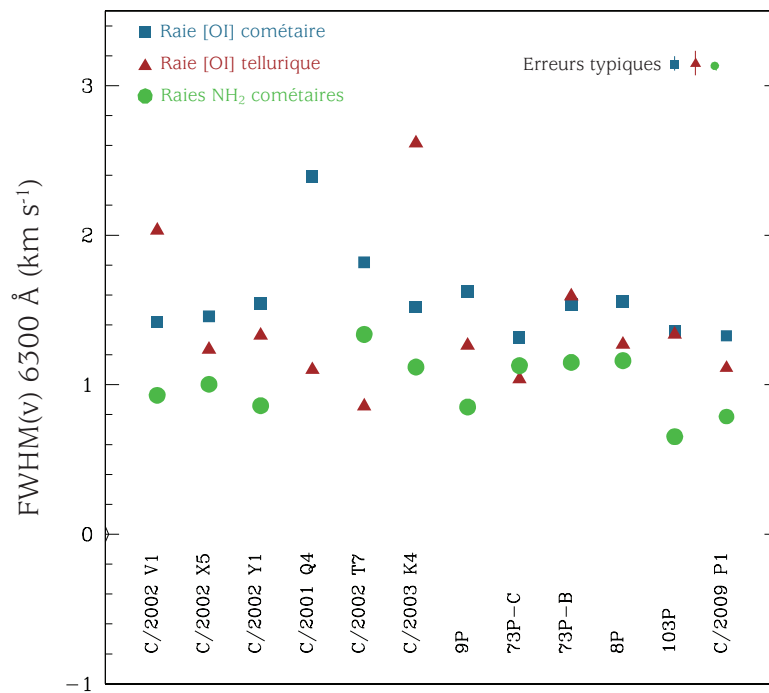
Comme nous pouvons le remarquer sur la figure 4.13, la largeur des deux raies rouges est identique aux erreurs près :  $1.61 \pm 0.34$  km s<sup>-1</sup> pour la raie à 6300.304 Å et  $1.56 \pm 0.54$  km s<sup>-1</sup> pour la raie à 6363.776 Å. Cette constatation n'a rien d'étonnant puisque les deux raies rouges résultent d'une même transition de l'état d'origine O(<sup>1</sup>D) vers le niveau fondamental. Les valeurs moyennes des largeurs de ces raies sont en bon accord avec les mesures de Cochran (2008) ( $1.22 \pm 0.36$  km s<sup>-1</sup>).

En ce qui concerne la largeur de la raie verte, nos résultats montrent que celle-ci est supérieure à la largeur des raies du doublet rouge. Avec une valeur moyenne de  $2.44 \pm 0.28$  km s<sup>-1</sup>, la raie verte est en effet presque une fois et demie plus large que les raies rouges. Ce résultat est en désaccord avec les prévisions théoriques qui prédisent un excès d'énergie de 1.6 km s<sup>-1</sup> pour l'état O(<sup>1</sup>S) et de 1.8 km s<sup>-1</sup> pour l'état O(<sup>1</sup>D) dans le cas de la photodissociation de H<sub>2</sub>O (Festou, 1981). Cette particularité avait déjà été notée par Cochran (2008) qui a trouvé une largeur moyenne de la raie verte égale à  $2.49 \pm 0.36$  km s<sup>-1</sup> et qui est en bon accord avec notre résultat. Une analyse plus approfondie s'impose donc.



**FIGURE 4.13** – La largeur de la raie à  $6300.304 \text{ \AA}$  en fonction de la largeur de la raie à  $6363.776 \text{ \AA}$ . Les spectres d'une même comète sont représentés par des symboles identiques.

Dans cette optique, nous avons comparé les largeurs des raies de [OI] cométaires avec, pour chacune de ces raies, à la fois la valeur de la largeur de la raie d'oxygène atmosphérique correspondante, ainsi que la moyenne des largeurs de quelques raies cométaires voisines. Les raies de  $\text{NH}_2$  seront utilisées pour comparer la largeur des raies d'oxygène du doublet rouge à d'autres raies cométaires et la raie verte de l'oxygène sera comparée à la largeur des raies de  $\text{C}_2$  voisines. Ces analyses sont reprises dans les trois figures suivantes, numérotées 4.14, 4.15 et 4.16. Les largeurs intrinsèques mesurées pour quelques raies de  $\text{NH}_2$  et de  $\text{C}_2$  valent respectivement  $1.00 \pm 0.20 \text{ km s}^{-1}$  et  $1.28 \pm 0.17 \text{ km s}^{-1}$ . Ces derniers résultats s'accordent avec ce qui est attendu pour la vitesse d'un gaz en expansion dans la coma d'une comète située à 1 ua de Soleil. La vitesse d'éjection due au surplus d'énergie présent suite au processus de photodissociation de la molécule mère se mesure via l'excès de vitesse résultant de la soustraction de la largeur des raies de  $\text{NH}_2$  ( $\text{C}_2$ ) à la largeur des raies d'oxygène rouges (verte). Considérant cela, nous en déduisons une vitesse d'éjection additionnelle moyenne de  $0.48 \pm 0.16 \text{ km s}^{-1}$  pour les raies du doublet rouge et de  $1.17 \pm 0.29 \text{ km s}^{-1}$  pour la raie verte.



**FIGURE 4.14** – La largeur de la raie cométaire à  $6300.304 \text{ \AA}$  (■), de la raie de [OI] tellurique (▲) et des raies cométaires de  $\text{NH}_2$  situées aux alentours de la raie de [OI] (●) ( $\text{km s}^{-1}$ ). Pour chaque comète, une valeur de cette  $\text{FWHM}(v)$  est donnée. L'erreur correspond à la déviation standard ( $\sigma$ ) mesurée en considérant tous les spectres de la comète 8P/Tuttle. Cette erreur a été vérifiée en mesurant aléatoirement le  $\sigma$  pour quelques spectres d'autres comètes. Pour la comète C/2001 Q4 (NEAT), la largeur des raies de  $\text{NH}_2$  est manquante car aucune raie de fluorescence n'a été détectée dans le spectre pris à grande distance héliocentrique.



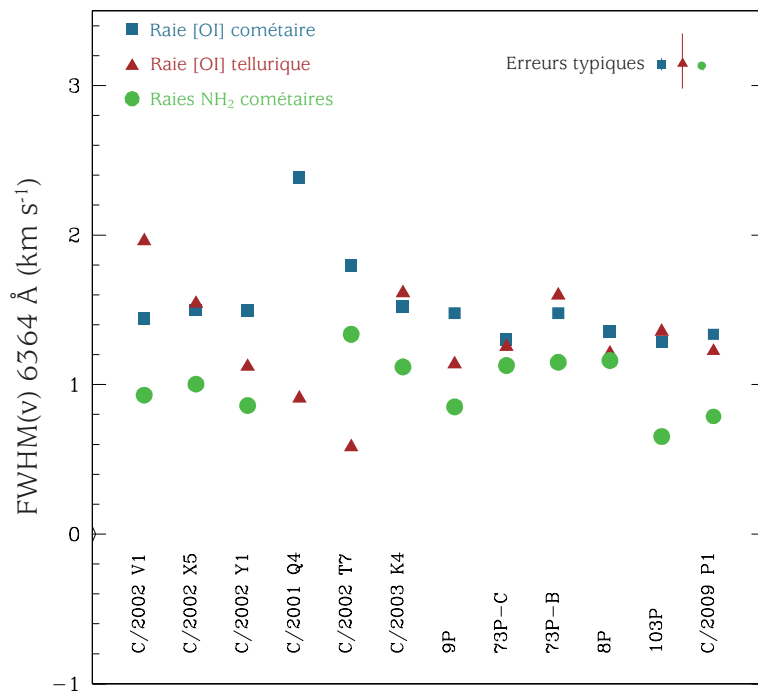


FIGURE 4.15 – Même figure que 4.14 mais pour la raie à 6363.776 Å.

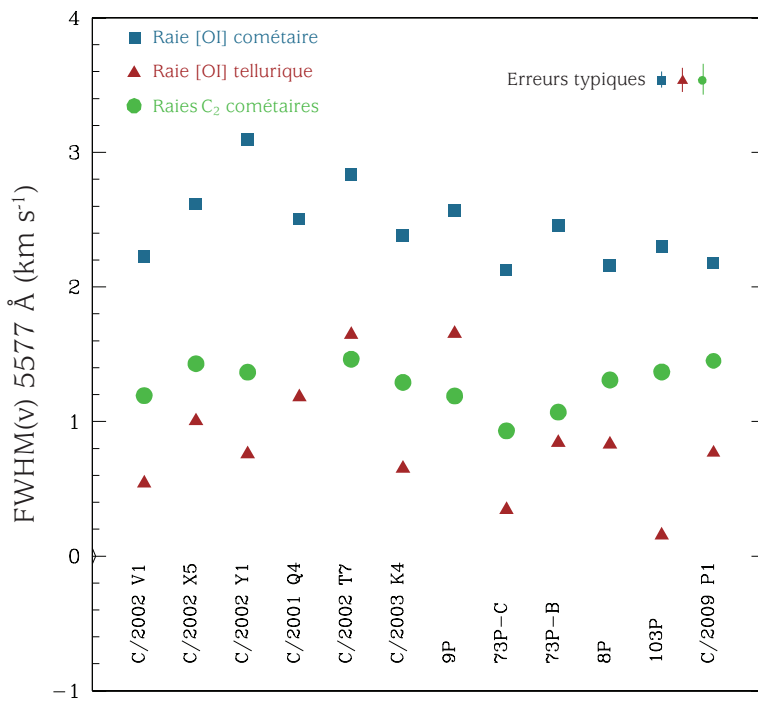
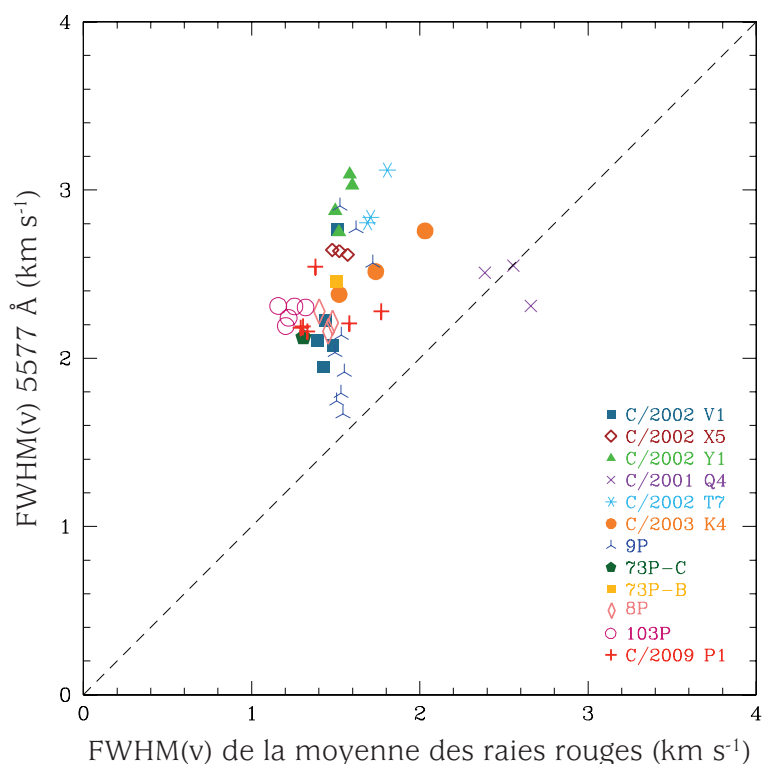


FIGURE 4.16 – Même figure que 4.14 mais pour la raie à 5577.339 Å.



**FIGURE 4.17** – Largeur de la raie verte à 5577.339 Å en fonction de la largeur moyenne des raies du doublet rouge. Les spectres d’une même comète sont indiqués par un même symbole. La largeur de la raie verte est toujours plus grande que celles de deux raies rouges, sauf pour la comète C/2001 Q4 (NEAT) où elles sont identiques.

Cette analyse et, plus particulièrement, la figure 4.17, confirment qu’au niveau observationnel la raie verte de l’oxygène cométaire est plus large que les raies du doublet rouge. Le taux de production de l’eau pourrait-il influencer la largeur des raies ?

La comparaison des vitesses des trois raies de [OI] avec le taux de production de H<sub>2</sub>O est établie dans les figures 4.18 et 4.19. Les taux de production de H<sub>2</sub>O sont donnés dans le tableau 4.6. Nous remarquons que la vitesse de la raie verte augmente légèrement avec le taux de production de H<sub>2</sub>O. Les figures 4.20 et 4.21 fournissent des graphiques similaires pour les vitesses des raies cométaires de C<sub>2</sub> et NH<sub>2</sub>. Ces résultats sont en accord avec ceux présentés par Tseng et al. (2007) mais nos barres d’erreur ne permettent pas d’être plus précis. En effet, le spectrographe utilisé dans notre étude possède une résolution maximale trop faible pour mesurer l’élargissement des raies.

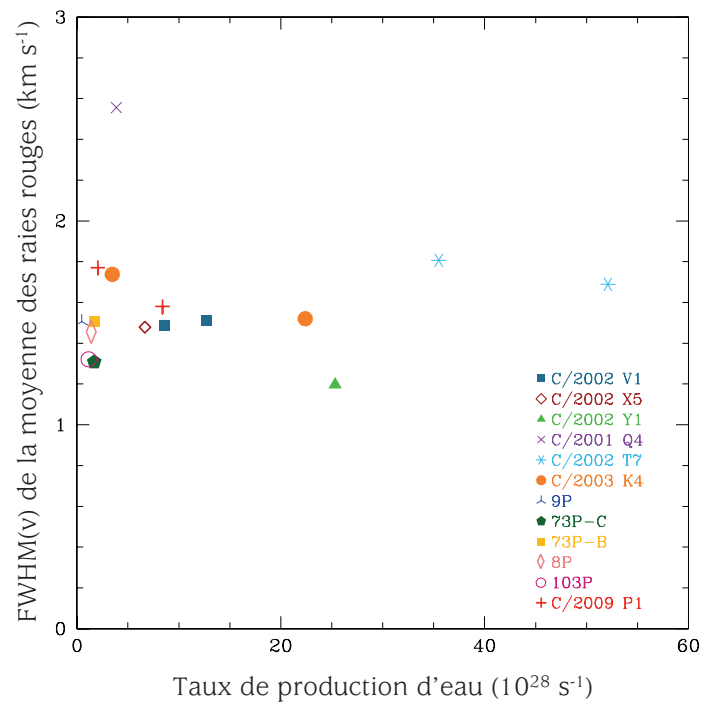


FIGURE 4.18 – Largeur intrinsèque moyenne des raies du doublet rouge en fonction du taux de production de H<sub>2</sub>O.

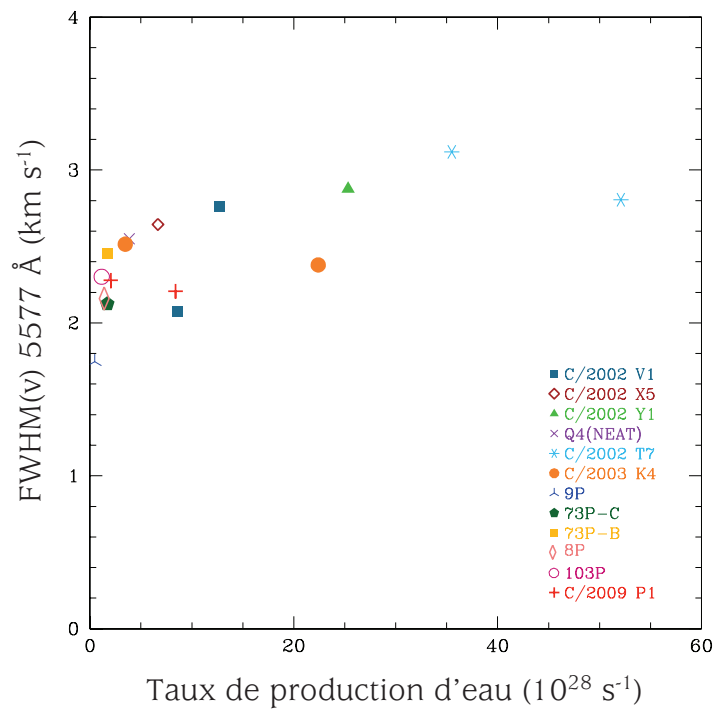


FIGURE 4.19 – Même figure que 4.18 mais pour la raie verte à 5577.339 Å.

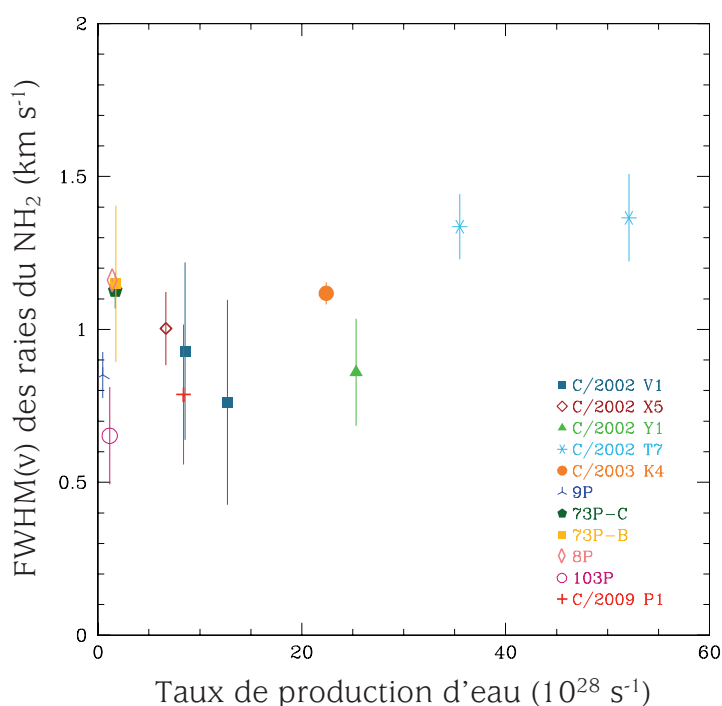


FIGURE 4.20 – Même figure que 4.18 mais pour les raies de NH<sub>2</sub>.

#### 4.6.2.1 Largeur anormale de la raie verte : discussion

Nous l'avons observé et confirmé, la raie verte de l'oxygène est plus large que les raies du doublet rouge et ce résultat va à l'encontre des prédictions théoriques. Comment expliquer cette contradiction ? Une première explication pourrait être que les photons produisant les atomes d'oxygène dans l'état <sup>1</sup>S soient plus énergétiques que les photons Lyman- $\alpha$  et/ou qu'ils proviennent de la photodissociation d'une autre molécule que la molécule de H<sub>2</sub>O. En effet, Bhardwaj & Raghuram (2012) montrent que la production majeure d'atomes O(<sup>1</sup>S) venant de la photodissociation de CO<sub>2</sub> est principalement due aux photons de la région de longueur d'onde 955-1165 Å qui est plus énergétique que les photons Lyman- $\alpha$ . De nouvelles études théoriques sont requises pour évaluer les excès de vitesse des états O(<sup>1</sup>D) et O(<sup>1</sup>S) provenant des photodissociations de H<sub>2</sub>O et de CO<sub>2</sub> et ainsi confirmer ou non cette première hypothèse.

Revenons un instant sur la figure 4.17. Nous pouvons remarquer que la largeur des raies rouges dans la comète C/2001 Q4 (NEAT) est étrangement plus grande que dans les autres comètes alors que la largeur de la raie verte reste similaire à la moyenne de l'échantillon. Cette particularité semble bien réelle étant donné que les deux raies rouges présentent la même largeur, à deux  $\sigma$  de la valeur moyenne des raies du doublet rouge de l'échantillon ( $1.58 \pm 0.30$  km s<sup>-1</sup>). A cela s'ajoute que les raies telluriques de Q4

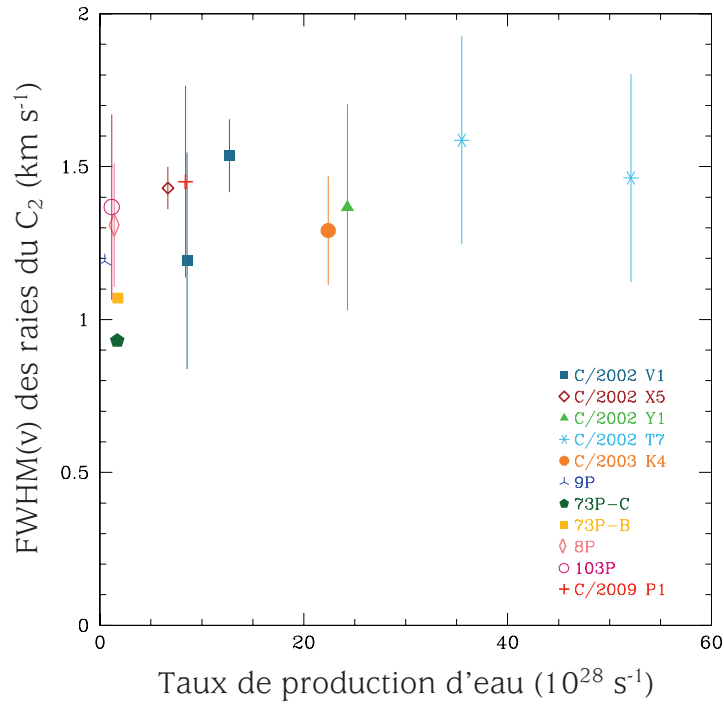


FIGURE 4.21 – Même figure que 4.18 mais pour les raies de C<sub>2</sub>.

sont "normales" au vu de leurs largeurs et valent  $0.99 \pm 0.10 \text{ km s}^{-1}$  pour la raie à  $6300.304 \text{ \AA}$ ,  $0.87 \pm 0.04 \text{ km s}^{-1}$  pour la raie à  $6363.776 \text{ \AA}$  et  $0.80 \pm 0.26 \text{ km s}^{-1}$  pour la raie à  $5577.339 \text{ \AA}$ . Cela exclut donc la possibilité d'un problème instrumental ou d'un problème survenu lors de l'analyse spectrale de cette comète qui aurait modifié la largeur des raies rouges. Plus étonnant encore, nous constatons que les largeurs des raies rouges et verte sont en fait relativement similaires pour C/2001 Q4 (NEAT) avec  $2.57 \pm 0.16 \text{ km s}^{-1}$  pour la raie à  $6300.304 \text{ \AA}$ ,  $2.49 \pm 0.15 \text{ km s}^{-1}$  pour la raie à  $6363.776 \text{ \AA}$  et  $2.46 \pm 0.13 \text{ km s}^{-1}$  pour la raie verte. Cette particularité peut nous apporter des informations sur les processus qui pourraient être en jeu. En effet, comme mentionné précédemment (cf. section 4.6.1), à grande distance héliocentrique, les raies interdites de l'oxygène proviendraient majoritairement des molécules de CO<sub>2</sub> qui se photodissocieraient principalement dans l'état <sup>1</sup>S. Par contre, lorsque la comète se rapproche du Soleil, les molécules de H<sub>2</sub>O, devenues les molécules dominantes de l'activité cométaire, produiraient les atomes d'oxygène en alimentant essentiellement l'état <sup>1</sup>D. Autrement dit, loin du Soleil, les raies du doublet rouge seraient produites via la chaîne <sup>1</sup>S-<sup>1</sup>D alors qu'à de faibles distances héliocentriques, ces raies seraient directement formées à partir de l'état <sup>1</sup>D. Avec cette hypothèse, nous nous attendons à trouver, d'une part, des largeurs similaires pour les raies rouges et verte observées à grandes distances héliocentriques car les atomes de O(<sup>1</sup>S) et O(<sup>1</sup>D) sont produits à partir de la même molécule et, d'autre part,

des largeurs différentes à plus petites distances au Soleil qui seraient expliquées par des parents différents pour  $O(^1S)$  et  $O(^1D)$ . Quelle molécule pourrait contribuer à la production d'atomes d'oxygène à grandes distances héliocentriques ? Comme proposé précédemment,  $CO_2$  s'avère être le meilleur candidat et la largeur plus grande des raies vertes se justifierait par la source d'excitation principale du  $CO_2$ . En effet, celle-ci correspond aux photons de la bande à 955-1165 Å qui sont plus énergétiques que les photons Lyman- $\alpha$ . Cela dit, cette spécificité ne s'observe pas pour la comète C/2009 P1 (Garradd) dont les spectres ont pourtant été acquis lorsque la comète se déplaçait loin du Soleil. La distance héliocentrique était cependant plus faible dans ce cas. De plus, une plus faible abondance de  $CO_2$  dans la comète Garradd pourrait expliquer les valeurs différentes pour les largeurs des raies. Quoi qu'il en soit, cette hypothèse a besoin d'être confirmée et de nouvelles observations de comètes situées à de grandes distances héliocentriques ( $> 3.5$  ua) sont nécessaires.

### 4.6.3 Analyse détaillée de la comète 103P/Hartley 2

Appartenant à la famille de Jupiter, la comète 103P/Hartley 2 est connue pour être pauvre en CO (Weaver et al., 2011) et riche en  $CO_2$  (A'Hearn et al., 2011). Les observations ISO menées par Crovisier et al. (1999) ont montré une abondance relative de  $CO_2$  de  $\sim 10\%$ , et plus récemment, A'Hearn et al. (2011) ont mesuré, avec la sonde EPOXI (NASA), une abondance relative de  $CO_2$  de  $\sim 20\%$ . Grâce à l'équation (4.6), les mesures des rapports d'intensité G/R obtenues à partir des spectres UVES peuvent nous fournir une valeur de l'abondance de  $CO_2$  dans Hartley 2. Les résultats sont donnés dans le tableau 4.9. La valeur moyenne des G/R vaut  $0.09 \pm 0.01$  et est semblable aux valeurs trouvées dans les autres comètes observées en deçà de 2.5 ua. Cependant, ce rapport d'intensité G/R donne une abondance de  $CO_2$  de seulement 3%. Il faudrait un rapport G/R de  $\sim 0.1$  à 0.2 pour atteindre une abondance de  $CO_2$  de  $\sim 10\%$  à 20%.

JD - 2 450 000.5	$r(\text{UA})$	G/R	$N_{CO_2}/N_{H_2O}$
5 505.288	1.06	0.09	0.028
5 505.328	1.06	0.10	0.040
5 510.287	1.07	0.07	0.001
5 510.328	1.07	0.08	0.015
5 511.363	1.08	0.09	0.030

**Tableau 4.9** – Les abondances de  $CO_2/H_2O$  pour la comète 103P/Hartley 2 estimées à partir de l'équation (4.6).

A ce stade de l'analyse, nous ne confirmons donc pas la valeur élevée de l'abondance de  $CO_2$  ni même la grande dispersion de celle-ci comme avancées par McKay et al. (2013).

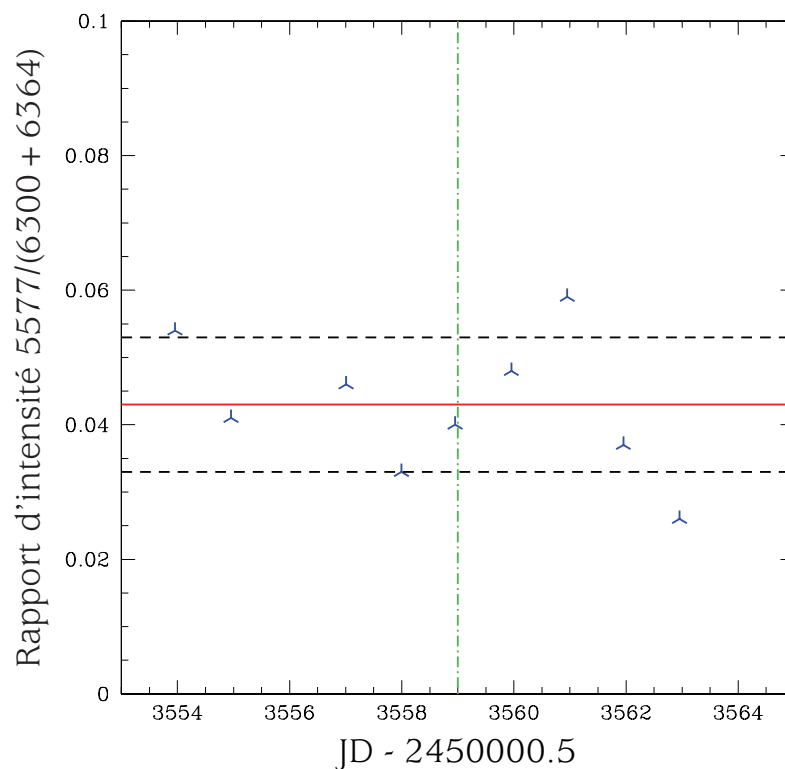
Leurs hautes valeurs de CO<sub>2</sub> proviennent très probablement de l'utilisation du  $W_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{green}}$  égal à  $2.6 \times 10^{-8} \text{ s}^{-1}$  alors que la valeur numérique correcte de ce paramètre est définie dans le tableau 1 de Bhardwaj & Raghuram (2012) et vaut  $6.4 \times 10^{-8} \text{ s}^{-1}$ .

Le désaccord présent entre les observations de EPOXI et ISO et nos mesures est intéressant. En effet, pour les distances héliocentriques plus faibles que  $r = 2.5 \text{ ua}$ , les valeurs des rapports d'intensité G/R varient entre une valeur minimale de 0.05 pour les comètes 9P/Tempel 1 ( $G/R = 0.043 \pm 0.010$ ) et 8P/Tuttle ( $G/R = 0.047 \pm 0.002$ ) et une valeur maximale de 0.12 pour la comète C/2002 T7 (LINEAR) ( $G/R = 0.113 \pm 0.021$ ). La couverture de valeurs de G/R obtenues pour les différentes comètes est plus importante que les marges d'erreur estimées pour les spectres d'une même comète. Cela peut s'expliquer par une variation intrinsèque des rapports G/R de comète à comète provoquée par la teneur en CO<sub>2</sub>. L'étendue des variations de G/R est de l'ordre de 0.1 et implique donc la possibilité d'une fluctuation de CO<sub>2</sub> de  $\sim 20\%$ . Cet intervalle d'abondance en CO<sub>2</sub> est justement observé dans les comètes situées à des distances héliocentriques inférieures à 2.5 ua (A'Hearn, 2012).

De plus, les comètes 9P/Tempel 1 et 8P/Tuttle présentent des valeurs de G/R inférieures au rapport obtenu dans le cas où on n'aurait que du H<sub>2</sub>O dans la coma (cas "eau pure"),  $G/R_{\text{min}} = 0.08$ , défini par Bhardwaj & Raghuram (2012). A cela s'ajoute que les rapports G/R pour 103P/Hartley 2 sont trop faibles comparés à ceux attendus pour obtenir une abondance de CO<sub>2</sub> aussi élevée que celle mesurée lors de la mission EPOXI. Ces deux dernières remarques semblent nous indiquer qu'il pourrait y avoir un problème dans les modèles théoriques. Si l'on se base sur nos données observationnelles, le rapport de l'eau pure devrait valoir 0.05, voire moins sachant que Feaga et al. (2007a) et Feaga et al. (2007b) ont montré que 9P/Tempel 1 possède une abondance relative de CO<sub>2</sub> de  $\sim 7\%$ . En se penchant davantage sur le détail des calculs théoriques réalisés par Bhardwaj & Raghuram (2012), nous notons qu'ils ont d'abord testé diverses valeurs (entre 0 et 1%) pour le paramètre  $\alpha_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{green}}$  et ont finalement opté pour la valeur de 1% mais ce choix demeure incertain. En l'absence totale de CO<sub>2</sub>, l'équation (4.6) nous amène à  $G/R_{\text{min}} = \beta^{\text{green}} W_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{green}} / W_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{red}}$ . En utilisant un  $\alpha_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{green}} = 0.5\%$ , le  $G/R_{\text{min}}$  devient alors égal à 0.04 et, est donc, d'une part, nettement plus petit que la valeur prédite par Bhardwaj & Raghuram (2012) avec  $\alpha_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{green}} = 1\%$ , et d'autre part, en meilleur accord avec nos faibles valeurs de G/R pour les comètes Tempel et Tuttle. Nous verrons dans le chapitre suivant que c'est la nouvelle valeur  $\alpha_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{green}} = 0.5\%$  qu'il faudra prendre en compte.

#### 4.6.4 Résultats liés à la mission Deep Impact

Les spectres de la comète 9P/Tempel 1 ont été obtenus avant et après le largage du projectile de la sonde *Deep Impact*, survenu le 4 juillet 2005. Comme nous pouvons le constater sur la figure 4.22, aucune particularité n'est observée pour les rapports d'intensité avant et après l'impact. Il en va d'ailleurs de même pour les largeurs des raies. Nous ne pouvons néanmoins pas tirer de conclusion sur de possibles changements lors de l'impact, étant donné que nous ne possédons pas de spectres acquis pendant l'évènement. En effet, l'enregistrement du premier spectre a eu lieu environ six heures après l'impact. Aucune particularité n'a été notée par Cochran (2008) qui a également analysé des spectres de la comète 9P/Tempel 1 acquis aux alentours du 4 juillet 2005.



**FIGURE 4.22** – Les rapports d'intensité G/R de la comète 9P/Tempel 1 pour les observations réalisées entre le 1<sup>er</sup> juillet 2005 et le 10 juillet 2005. L'évènement *Deep Impact* est indiqué par la ligne pointillée verticale verte à 3559 UT. La valeur moyenne du rapport est représentée par le trait plein rouge et les lignes horizontales en pointillés correspondent à la déviation standard ( $\sigma$ ). La valeur moyenne calculée autour de l'impact, c'est-à-dire entre 2453553.955 UT et 2453562.956 UT, vaut  $0.04 \pm 0.01$ . Aucune variation du G/R n'est observée après la collision.



### 4.6.5 Influence de l'activité solaire sur les raies interdites de l'oxygène

L'ensemble des données présentées dans cette étude a été acquis lors du vingt-troisième cycle solaire caractérisé par un minimum d'activité en 2001 et un maximum en 2008. Cependant, malgré une activité solaire décroissante entre les observations des comètes C/2001 V1 (NEAT) et 8P/Tuttle, aucune corrélation dans les intensités et les largeurs des raies de [OI] n'a été observée avec les variations du flux solaire. L'activité solaire ne semble pas influencer les résultats de ce travail.

## 4.7 Conclusions et perspectives

Ce chapitre décrit les résultats de l'étude des raies interdites de l'oxygène dans le domaine visible menée sur douze comètes observées à différentes distances héliocentriques. Les observations de ces douze comètes, réalisées avec le spectrographe UVES du VLT (ESO), ont permis d'acquérir 48 spectres de grande qualité (très haute résolution spectrale et haut rapport signal-sur-bruit). Une mesure précise du flux et des largeurs à mi-hauteur des raies a été effectuée dans le but d'en déduire, d'une part, les rapports d'intensité  $I_{6300}/I_{6364}$  et  $G/R = I_{5577}/(I_{6300} + I_{6364})$ , et d'autre part, la largeur en vitesse des raies (FWHM(v)). Ceci, pour la première fois de façon systématique dans diverses conditions et à différentes distances au soleil. Les résultats obtenus nous amènent aux conclusions suivantes.

- La valeur moyenne de  $3.11 \pm 0.10$  obtenue pour le rapport  $I_{6300}/I_{6364}$  est en très bon accord avec le rapport de branchement prédit par la mécanique quantique et, plus particulièrement, avec le travail théorique accompli par Galavis et al. (1997) et son rapport de 3.096. Cependant, des erreurs systématiques de l'ordre de 0.1 restent possibles et la valeur plus petite de 2.997 proposée par Storey & Zeppen (2000) ne peut pas être exclue.
- En se référant aux résultats théoriques de Bhardwaj & Raghuram (2012) qui sont résumés dans le tableau 4.1, le rapport  $G/R = 0.09 \pm 0.02$  pour les comètes observées à une distance héliocentrique inférieure à 2 ua confirme que l'eau est la molécule parente principale responsable de la production d'atomes d'oxygène. La valeur de ce rapport  $G/R$  ne demeure cependant pas constante pour les comètes situées au-delà de 2.5 ua et augmente même rapidement. Ce changement indique la présence d'une autre molécule parente, en plus de l'eau, dans la formation d'atomes d'oxygène. Le meilleur candidat semble être le dioxyde de carbone ( $\text{CO}_2$ ). La mesure des rapports  $G/R$  pourrait donc être utilisée comme méthode indirecte pour déter-

miner l'abondance relative de  $\text{CO}_2$ , alors que cette molécule ne peut être observée de façon directe que depuis l'Espace. En supposant que les atomes d'oxygène proviennent uniquement de la photodissociation des molécules de  $\text{H}_2\text{O}$  et de  $\text{CO}_2$  et en considérant deux comètes observées à différentes distances héliocentriques, nous avons dégagé une relation entre l'abondance de  $\text{CO}_2$  et la distance au Soleil. Une abondance relative de  $\text{CO}_2$  de  $\sim 75\%$  a ainsi été trouvée pour la comète C/2001 Q4 (NEAT) à une distance de 3.7 ua du Soleil.

- La largeur intrinsèque de la raie verte de l'oxygène excède celle de la raie rouge d'environ  $1 \text{ km s}^{-1}$ . Les calculs théoriques, considérant les photons Lyman- $\alpha$  comme unique source d'excitation pour les deux états, concluent que l'excès énergétique de  $\text{O}({}^1\text{D})$  est plus important que celui de  $\text{O}({}^1\text{S})$ , ce qui est en contradiction avec les résultats observationnels. Ce désaccord pourrait être expliqué par la nature différente de la source d'excitation en action et/ou par une contribution des molécules de  $\text{CO}_2$  dans la production d'atomes  $\text{O}({}^1\text{S})$ . En effet, récemment, Bhardwaj & Raghuram (2012) ont montré que le principal excitateur engendrant la photodissociation de  $\text{CO}_2$  est, non pas les photons Lyman- $\alpha$ , mais les photons de région spectrale de longueur d'onde 955-1165 Å. Une vérification quantitative de cette hypothèse requiert des calculs théoriques de l'excès énergétique des atomes d'oxygène formés via cette source d'excitation, à la fois pour les photodissociations de  $\text{H}_2\text{O}$  et de  $\text{CO}_2$ . Suite à l'analyse des largeurs des raies de [OI] nous avons également observé que les largeurs des trois raies de [OI] étaient similaires pour tous les spectres de la comète C/2001 Q4 (NEAT) acquis lorsque cette dernière se situait à  $\sim 3.7$  ua. Cette particularité est en accord avec l'idée que le  $\text{CO}_2$  serait le contributeur majeur dans la production d'atomes d'oxygène cométaires pour des distances héliocentriques supérieures à 2.5 ua. Pour confirmer cette hypothèse, il serait important d'observer d'autres comètes à grandes distances du Soleil ( $> 3$  ua).
- Une détermination indépendante des abondances de  $\text{CO}_2$  et de  $\text{CO}$ , associée aux mesures des rapports G/R et des largeurs intrinsèques des raies interdites de l'oxygène à différentes distances héliocentriques sont clairement requises pour fournir une conclusion générale fiable quant aux molécules parentes de l'atome d'oxygène. En effet, notre analyse n'a finalement été portée que sur deux comètes qui sont, certes qualifiées de riches en  $\text{CO}$ , mais dont l'abondance relative de cette molécule n'excède toutefois pas les  $\sim 5\%$ . Il serait donc pertinent d'étendre notre étude sur un échantillon de comètes caractérisées par différentes abondances relatives de  $\text{CO}$  et de  $\text{CO}_2$ . Malheureusement, l'abondance de  $\text{CO}_2$  dans les comètes n'est souvent pas

connue. Dans ce contexte, une idée qui permettrait de définir si la comète étudiée est riche ou non en  $\text{CO}_2$  serait de l'observer en utilisant un filtre NH avec lequel  $\text{CO}_2^+$  se manifeste lorsque l'abondance de  $\text{CO}_2$  de la comète est élevé.

- La comète 103P/Hartley 2, qualifiée de comète riche en  $\text{CO}_2$  avec ses  $\sim 20\%$  de  $\text{CO}_2$ , ne présente pas de rapport G/R anormalement élevé comme on devrait s'y attendre lorsque l'on considère l'équation (4.6). Pour justifier cela, nous proposons une nouvelle valeur pour le taux de photodissociation  $\alpha_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{green}}$  utilisé dans les calculs théoriques de Bhardwaj & Raghuram (2012), à savoir  $0.5\%$  au lieu de  $1\%$ . Une telle valeur pour ce paramètre expliquerait également les faibles valeurs des rapports G/R des comètes 9P/Tempel 1 et 8P/Tuttle (de  $0.043 \pm 0.010$  et  $0.047 \pm 0.002$ , respectivement). Notons que depuis la publication de cette analyse, cette valeur théorique de paramètre  $\alpha_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{green}}$  a été utilisée ( $0.5\%$ , Raghuram & Bhardwaj (2013)).

Les résultats détaillés dans ce chapitre apportent des éléments nouveaux concernant l'analyse de l'oxygène dans les comètes mais ouvrent aussi la porte à de nombreuses réflexions quant à l'identification précise et le rôle des molécules parentes de l'oxygène dans la coma des comètes. De nouvelles recherches sont à envisager afin de lever le voile sur certaines questions. Une première étude qui s'inscrit dans la continuité de ce travail sera de soustraire les raies de  $\text{C}_2$  au niveau de la raie de [OI] à  $5577.339 \text{ \AA}$ . En effet, de nombreuses raies de  $\text{C}_2$  sont présentes aux alentours de la raie verte d'oxygène. La suppression de ces raies évitera autant que possible la contamination de la raie verte et la mesure de l'intensité de celle-ci gagnera en précision. La soustraction du  $\text{C}_2$  n'est cependant pas aisée car elle requiert la réalisation de spectres synthétiques de  $\text{C}_2$  fournis pour les mêmes conditions physiques que les comètes observées. La description de ce travail fera l'objet de notre prochain chapitre et sera englobée dans une analyse plus générale, à savoir l'analyse des raies interdites de l'oxygène à différentes distances du noyau cométaire. Le but d'une telle étude est d'investiguer une éventuelle dépendance entre les molécules parentes de l'oxygène et la distance nucléocentrique à laquelle les atomes d'oxygène sont observés afin d'en déduire les processus en jeu dans les différentes régions de la coma cométaire. Il sera notamment judicieux de déterminer à quelle région de longueur d'onde appartiennent les photons qui photodissocient les molécules et voir ainsi si l'énergie de ceux-ci diffère avec la distance au noyau.



# 5

---

## Etude des raies interdites de l'oxygène à différentes distances nucléocentriques dans les comètes

---

### Sommaire

---

<b>5.1</b>	<b>Introduction</b>	<b>115</b>
<b>5.2</b>	<b>Observations</b>	<b>116</b>
<b>5.3</b>	<b>Réduction des données</b>	<b>119</b>
5.3.1	Soustraction des raies d'émission de C <sub>2</sub>	119
<b>5.4</b>	<b>Résultats et discussions</b>	<b>120</b>
5.4.1	Le rapport G/R	120
5.4.1.1	Estimation des abondances relatives de CO <sub>2</sub> dans les comètes de l'échantillon	134
5.4.2	Effet du seeing atmosphérique et de l'abondance de CO <sub>2</sub> sur la valeur du rapport G/R	139
5.4.2.1	Le cas de la comète 103P/Hartley 2	142
5.4.3	Mesure de la largeur intrinsèque des raies de [OI]	142
<b>5.5</b>	<b>Conclusion</b>	<b>150</b>

---



Les résultats présentés dans ce chapitre ont été publiés dans les articles suivants :

- **Decock, A. ; Jehin, E. ; Rousselot, P. ; Hutsemékers, D. ; Manfroid, J. ; Raghuram, S. ; Bhardwaj, A. ; Hubert, B. :** *Forbidden oxygen lines at various nucleocentric distances in comets*, (2014) accepted in A&A, *ArXiv e-prints*
- **Decock, A. ; Rousselot, P. ; Jehin, E. ; Hutsemékers, D. ; Manfroid, J. ; Bhardwaj, A. ; Raghuram, S. :** *Study of the Forbidden Oxygen Lines in Comets at Different Heliocentric and Nucleocentric Distances*, (2013), DPS meeting 45, 502.08

## 5.1 Introduction

Dans le chapitre précédent, nous avons confirmé que H<sub>2</sub>O était la molécule parente principale dans la production des atomes d'oxygène lorsque la comète se situait à une distance héliocentrique de  $\sim 1$  ua. Ce résultat a été déduit en mesurant le rapport d'intensité G/R à partir des trois raies interdites de l'oxygène pour une cinquantaine de spectres provenant de douze comètes et en comparant ce rapport aux valeurs théoriques fournies par le tableau 4.1. Nous avons conclu ce chapitre en évoquant que le paramètre  $\alpha_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{green}}$  décrivant le taux de photodissociation de H<sub>2</sub>O pour O(<sup>1</sup>S) était mal connu. Raghuram & Bhardwaj (2013) ont finalement mis en évidence récemment que ce paramètre  $\alpha_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{green}}$  valait plutôt 0.5% et non 1%, comme suggéré par Bhardwaj & Raghuram (2012) et considéré lors de notre analyse précédente. Avec une telle valeur pour le taux de photodissociation  $\alpha_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{green}}$ , les taux d'émission ont été recalculés pour H<sub>2</sub>O et les nouveaux résultats sont donnés dans le tableau 5.1. Ces derniers seront considérés dans la présente analyse qui se focalisera sur l'étude des raies interdites de l'oxygène dans la coma interne et au plus proche du noyau.

Parents	Emission rate (s <sup>-1</sup> )		Ratio <sup>1</sup> S/ <sup>1</sup> D
	O( <sup>1</sup> S)	O( <sup>1</sup> D)	
H <sub>2</sub> O	3.78 10 <sup>-8</sup>	9.5 10 <sup>-7</sup>	0.040
CO	4.0 10 <sup>-8a</sup>	6 10 <sup>-8</sup>	0.667
CO <sub>2</sub>	8.5 10 <sup>-7</sup>	6.2 10 <sup>-7</sup>	1.371

**Tableau 5.1** – Les taux d'émission calculés pour O(<sup>1</sup>S) et O(<sup>1</sup>D) ainsi que les rapports <sup>1</sup>S/<sup>1</sup>D pour les principales espèces contenant de l'oxygène. Ces taux ont été mesurés par Raghuram & Bhardwaj (2013) pour des conditions solaire calmes et pour une distance héliocentrique de  $r = 1$  ua.

<sup>a</sup> Ce taux provient de Huebner & Carpenter (1979).

L'intérêt de cette nouvelle étude est de déterminer les espèces parentes produisant les

atomes d'oxygène à différentes distances nucléocentriques. Ce travail a été effectué pour quatre comètes provenant de l'échantillon décrit dans le chapitre 4. Le but principal de ce chapitre est d'étudier l'influence des collisions provoquées par les espèces cométaires du milieu ambiant (majoritairement l'eau) sur le profil du rapport G/R qui se manifestent essentiellement près du noyau ( $\lesssim 1000$  km) causant ainsi la perte des atomes O(<sup>1</sup>S) et O(<sup>1</sup>D).

## 5.2 Observations

Cette étude se base sur les observations spectrales de quelques comètes de notre échantillon, à savoir les comètes C/2002 T7 (LINEAR), 73P-C/Schwassmann-Wachmann 3, 8P/Tuttle et 103P/Hartley 2.

Les spectres de C/2002 T7 ont été obtenus environ un mois après le passage de la comète au périhélie (Avril 2004). Parmi ceux-ci, on retrouve des spectres acquis avec différents *offsets*, c'est-à-dire pour lesquels la fente du spectrographe a été positionnée à différentes distances du noyau cométaire. En 1995, l'activité de la comète 73P/Schwassmann-Wachmann 3 a augmenté et le noyau s'est brisé en plusieurs morceaux (Bönnhardt et al., 1995). Le plus brillant, nommé 73P-C, fait l'objet de cette analyse. Comme cette comète était assez faible, un seul spectre a été acquis avec un long temps de pose (4800 s) lorsque la comète passait à 0.15 ua de la Terre. Pour la comète 8P/Tuttle, les spectres ont été obtenus durant trois nuits différentes. La comète de la famille de Jupiter, 103P/Hartley 2, a été étudiée en détail, d'une part, grâce à la mission EPOXI de la NASA mais aussi au moyen de nombreux télescopes implantés au sol (A'Hearn et al., 2011; Meech et al., 2011). Les données présentées dans ce travail ont été obtenues lors du survol de la comète par la sonde.

Comme spécifié dans le chapitre précédent, toutes les données sur lesquelles se portent cette analyse correspondent à des observations spectroscopiques acquises avec le spectrographe UVES installé sur l'UT2 du VLT (Manfroid et al., 2009; Jehin et al., 2009; Decock et al., 2013, et références mentionnées dans ces articles). La particularité de ces observations vient du fait que ces quatre comètes ont toutes été observées lorsqu'elles se situaient près de la Terre, de 0.61 ua pour C/2002 T7 jusqu'à 0.15 ua pour 73P-C. Ces petites distances géocentriques permettent une très bonne résolution spatiale (de 400 à 100 km par seconde d'arc), nous permettant ainsi d'étudier les espèces chimiques localisées très près du noyau. L'échantillon complet comporte cinq spectres pour la comète C/2002 T7, huit pour 103P, trois pour 8P et un pour 73P-C. Une fente de  $0.4'' \times 12''$  a généralement été centrée sur le noyau cométaire. Pour les comètes C/2002 T7 et 103P,



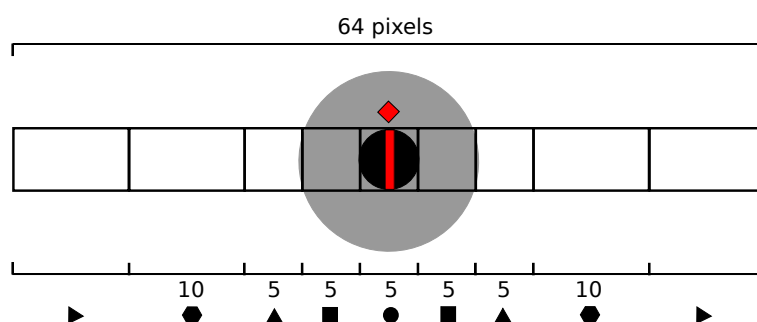
des spectres avec offsets ont également été obtenus dans le but d'étudier les raies de [OI] à de grandes distances du noyau. Précisons que ces spectres n'ont pas été utilisés lors de l'analyse des raies de [OI] à différentes distances héliocentriques (cf. chapitre 4). Tous les détails concernant les observations ainsi que les valeurs des offsets sont repris dans le tableau 5.2. Notons que le seeing mesure de la turbulence de l'atmosphère et donne ainsi une idée de la qualité optique du ciel et donc des observations.

Comète	Date UT	$r$ (ua)	$\dot{r}$ (km s <sup>-1</sup> )	$\Delta$ (ua)	$\dot{\Delta}$ (km s <sup>-1</sup> )	Exptime (s)	Offset (")	Fente ("×")	Fente (km × km)	Seeing (")	Seeing (km)
C/2002 T7 (LINEAR)	2004/05/06, 10 :15	0.68	15.83	0.61	-65.62	1080	5	0.44 × 12.00	195 × 5 309	1.0	458
C/2002 T7 (LINEAR)	2004/05/26, 23 :47	0.94	25.58	0.41	54.98	2678	0	0.30 × 12.00	89 × 3 568	0.7	198
C/2002 T7 (LINEAR)	2004/05/27, 01 :06	0.94	25.59	0.42	55.20	1800	0	0.30 × 12.00	91 × 3 655	0.7	206
C/2002 T7 (LINEAR)	2004/05/28, 23 :24	0.97	25.90	0.48	59.15	487	70	0.44 × 12.00	153 × 4 178	1.0	354
C/2002 T7 (LINEAR)	2004/05/29, 00 :09	0.97	25.90	0.48	59.26	3600	70	0.44 × 12.00	153 × 4 178	1.0	205
73P-C SW 3	2006/05/27, 09 :28	0.97	-4.17	0.15	12.31	4800	0	0.60 × 12.00	65 × 2 611	1.4	151
8P/Tuttle	2008/01/16, 01 :00	1.04	-4.29	0.36	21.64	3600	0	0.44 × 10.00	115 × 1 305	1.0	261
8P/Tuttle	2008/01/28, 00 :58	1.03	0.40	0.52	24.72	3900	0	0.44 × 10.00	166 × 3 771	0.9	319
8P/Tuttle	2008/02/04, 00 :57	1.03	3.16	0.62	24.16	3900	0	0.44 × 10.00	198 × 4 497	1.0	450
103P/Hartley 2	2010/11/05, 07 :18	1.06	2.53	0.16	7.08	2900	0	0.44 × 12.00	51 × 1 393	1.3	148
103P/Hartley 2	2010/11/05, 08 :19	1.06	2.55	0.16	7.19	3200	0	0.44 × 12.00	57 × 1 567	1.8	205
103P/Hartley 2	2010/11/10, 07 :17	1.07	4.05	0.18	7.96	2900	0	0.44 × 12.00	57 × 1 567	0.8	102
103P/Hartley 2	2010/11/10, 08 :19	1.07	4.07	0.18	8.07	3200	0	0.44 × 12.00	51 × 1 393	0.8	97
103P/Hartley 2	2010/11/11, 05 :53	1.08	4.33	0.19	7.94	4500	30	0.44 × 12.00	60 × 1 654	0.6	76
103P/Hartley 2	2010/11/11, 07 :18	1.08	4.35	0.19	8.08	3600	20	0.44 × 12.00	60 × 1 654	0.6	81
103P/Hartley 2	2010/11/11, 08 :16	1.08	4.36	0.19	8.19	2400	10	0.44 × 12.00	60 × 1 654	0.6	82
103P/Hartley 2	2010/11/11, 08 :57	1.08	4.37	0.19	8.27	900	0	0.44 × 12.00	60 × 1 654	0.7	92

**Tableau 5.2** – Paramètres observationnels pour chaque spectre individuel.  $r$  est la distance héliocentrique,  $\Delta$  représente la distance géocentrique.  $\dot{r}$  et  $\dot{\Delta}$  sont, respectivement, les vitesses héliocentriques et géocentriques. Exptime correspond au temps d'exposition et est exprimé en secondes. *Offset* (secondes d'arc) correspond à la distance projetée séparant la fente du centre du noyau cométaire. La colonne intitulée "Fente (\"×\")" représente, en secondes d'arc, l'ouverture de la fente du spectrographe. La colonne qui suit fournit la valeur de la surface couverte par la fente (km). Les deux dernières colonnes donnent les valeurs du seeing, en secondes d'arc et en kilomètres, mesurées au moment des observations.

## 5.3 Réduction des données

L'extraction des spectres à une dimension ainsi que la procédure de réduction des données est expliquée dans le chapitre 4. Afin d'étudier les raies d'oxygène au plus proche du noyau, nous avons extrait spatialement les spectres ligne par ligne. Nous avons divisé la fente en différentes zones de pixels correspondant à différentes distances du noyau. Dès lors, à partir d'un spectre 2D, nous avons produit différents spectres 1D qui seront traités individuellement. Comme présenté sur la figure 5.1, ces spectres 1D sont représentés par différents symboles qui seront utilisés dans les figures de ce chapitre. Dans la suite, nous parlerons de "*sous-spectres*". Pour les spectres acquis à de grandes distances du noyau (c'est-à-dire avec un offset), nous avons considéré la valeur moyenne obtenue pour toute la fente afin d'augmenter le rapport signal-sur-bruit. En effet, dans ces cas, les variations de distances séparant le noyau des zones de la fente sont petites comparées à la taille de celle-ci.



**FIGURE 5.1** – Schématisation de la division de la fente du spectrographe en différentes zones. Des symboles différents sont assignés à différentes zones de pixels. Ceux-ci seront repris dans les figures de ce chapitre. Les nombres indiqués au-dessus des symboles correspondent à la taille de la sous-fente déterminée (en pixels). Notons que le pixel central est représenté par un symbole diamant rouge au-dessus de la fente.

### 5.3.1 Soustraction des raies d'émission de $C_2$

De nombreuses raies de  $C_2$  sont présentes à proximité de la raie verte d'oxygène. Deux de ces raies ont été identifiées à  $5577.331 \text{ \AA}$  et  $5577.401 \text{ \AA}$  et se superposent donc à la raie de [OI] à  $5577.339 \text{ \AA}$ , produisant ainsi un *blend*. La contamination de la raie d'oxygène par les raies de  $C_2$  devient de plus en plus importante à mesure que la distance nucléocentrique augmente étant donné que le flux de [OI] décroît plus rapidement que celui du  $C_2$ . Ce *blend* peut affecter à la fois l'intensité de la raie verte de [OI] ainsi que sa largeur. Afin de s'affranchir de cette contamination, nous avons créé un spectre synthétique de la molécule de  $C_2$  que nous avons soustrait au spectre cométaire. Le spectre synthétique de  $C_2$

a été préalablement déterminé en ajustant en intensité et en profil la raie de  $C_2 P_3(25)$  de la bande de Swan (1,2) à 5577.541 Å. Les spectres synthétiques du  $C_2$  ont été construits en considérant une distribution de Boltzman pour les niveaux de populations rotationnels avec une température de 4000 K. Notons que les niveaux d'énergie concernés sont très proches (valeur identique pour le nombre rotationnel pour les états vibroniques supérieur et inférieur, voir Rousselot et al. (2012) pour plus de détails concernant la structure des bandes de Swan) et donc la température exacte de rotation n'a pas beaucoup d'influence sur l'ajustement final du  $C_2$ . La figure 5.2 montre un spectre pour chacune des comètes de cette analyse pour lequel les raies de  $C_2$  ont été soustraites. Cette décontamination n'a pas été nécessaire pour la comète 73P-C étant donné qu'aucune trace de  $C_2$  n'a été détectée aux alentours de la raie d'oxygène verte, cette comète étant cataloguée comme une comète pauvre en chaîne carbonée (Schleicher et al., 2006) et donc en  $C_2$ .

## 5.4 Résultats et discussions

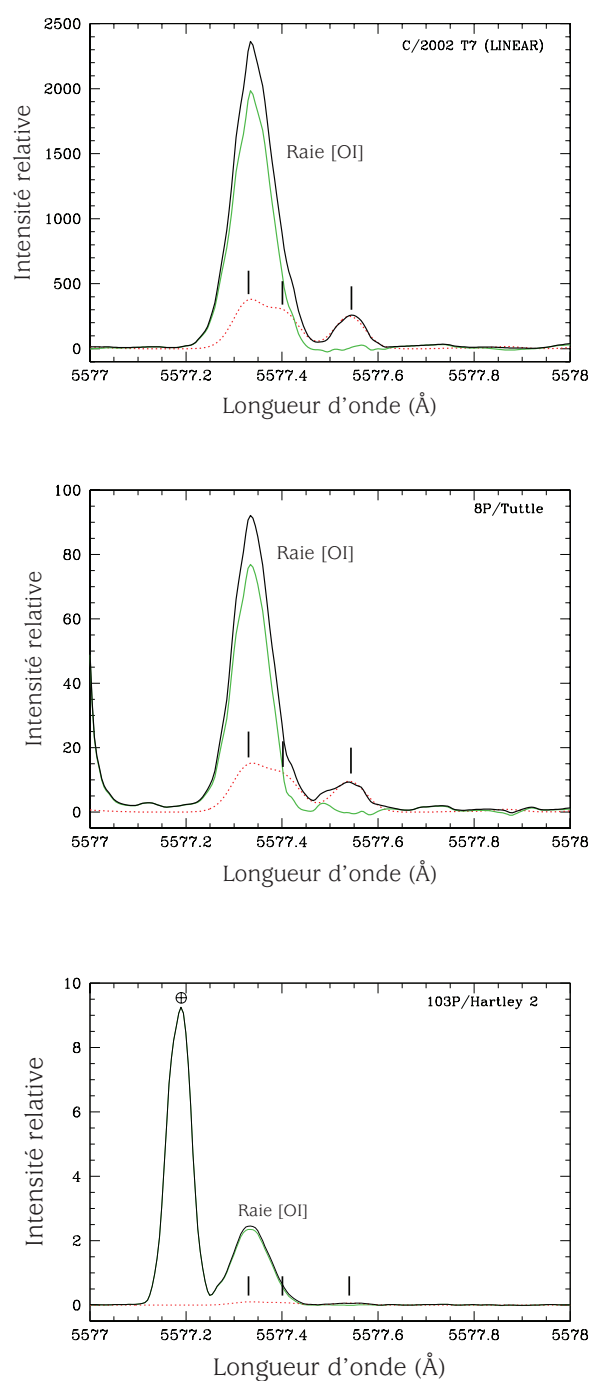
Comme explicité dans le chapitre 4, le logiciel IRAF a été utilisé dans le but de réaliser un ajustement gaussien sur les trois raies interdites de l'oxygène afin de déterminer les intensités et les largeurs de celles-ci. Les mesures des intensités et des largeurs ont ensuite permis d'estimer le rapport G/R ainsi que les largeurs intrinsèques en vitesse.

### 5.4.1 Le rapport G/R

Pour rappel, lorsque les collisions sont négligées, l'intensité  $I$  d'une raie est définie en théorie par (Festou & Feldman, 1981) :

$$I = 10^{-6} \tau_p^{-1} \alpha \beta N \text{ Rayleighs} \quad (5.1)$$

où l'intensité  $I$  s'exprime en Rayleigh,  $\tau_p$  correspond au temps de vie de dissociation de la molécule parente et est exprimé en seconde,  $\alpha$  est le taux de photodissociation,  $\beta$  se rapporte au rapport de branchement pour la transition considérée et  $N$  représente la densité de colonne de la molécule parente (en  $\text{cm}^{-2}$ ). Le rapport G/R a été évalué pour chaque sous-spectre et les résultats numériques sont donnés dans le tableau 5.3. Les figures 5.3 à 5.6 présentent ce rapport en fonction de la distance au noyau pour les quatre comètes de l'analyse. Le tableau 5.4 fournit en plus les erreurs pour le rapport G/R. Celles-ci correspondent à la déviation standard mesurée pour les  $N$  spectres disponibles pour une comète donnée. Les erreurs sur l'abscisse représentent l'étendue spatiale (en kilomètres) couverte par la zone de la fente considérée.

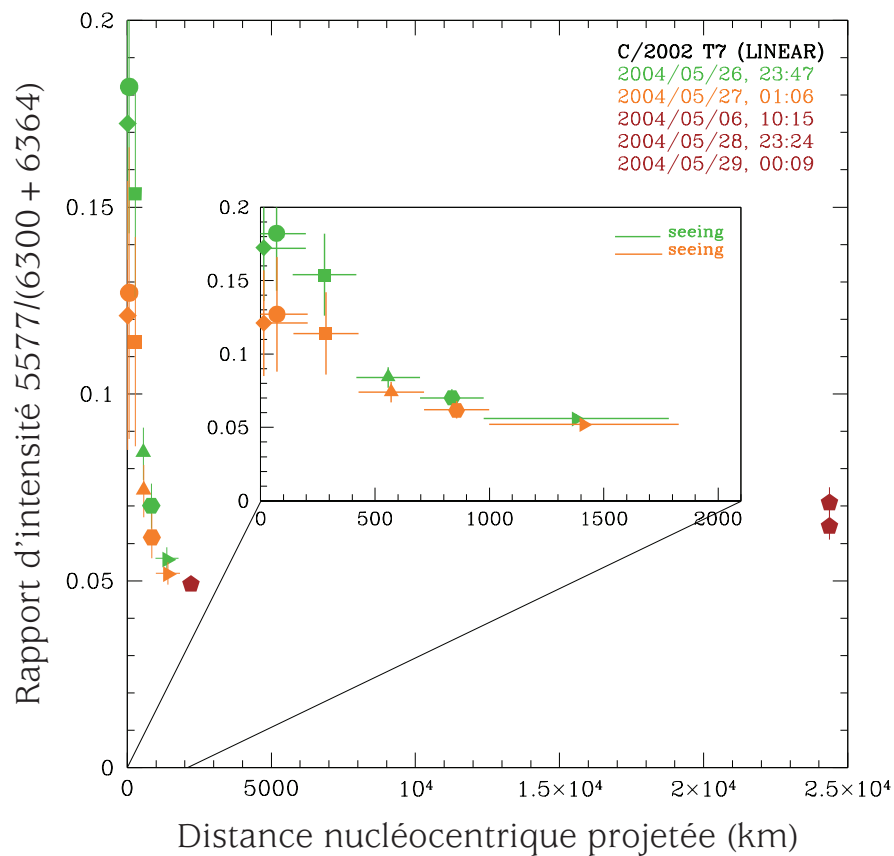


**FIGURE 5.2** – Soustraction des raies du C<sub>2</sub> dans les spectres des comètes C/2002 T7 (LINEAR), 8P/Tuttle et 103P/Hartley 2. Le spectre en trait continu noir correspond au spectre cométaire observé non corrigé du C<sub>2</sub>. Le spectre vert représente les données décontaminées des raies du C<sub>2</sub>. Le spectre synthétique du C<sub>2</sub> est donné en pointillé rouge. La position des raies de C<sub>2</sub> à 5577.331 Å, 5577.401 Å et 5577.541 Å est indiquée. Notons que la raie tellurique d'oxygène (⊕) est observée sur le spectre de la comète 103P/Hartley 2.

Comète	Date UT	Etendue de la distance nucléocentrique (km)	Intensité (ADU)			G/R	
			5577.339 Å	6300.304 Å	6363.776 Å		
C/2002 T7 (LINEAR)	2004/05/06, 10 :15	2212	3088	1015	201	0.049	
	2004/05/26, 23 :47	0 - 28	1899	569	426	0.172	
		0 - 139	1394	425	331	0.182	
		139 - 418	1576	490	317	0.154	
		418 - 697	1842	560	203	0.084	
		697 - 976	1523	456	139	0.070	
		976 - 1784	1155	358	84	0.056	
		2004/05/27, 01 :06	0 - 29	1837	555	289	0.121
	2004/05/28, 23 :24	0 - 143	1690	515	280	0.127	
		143 - 428	1675	503	245	0.114	
		428 - 714	1763	533	171	0.074	
		714 - 1000	1504	450	120	0.062	
	2004/05/29, 00 :09	1000 - 1828	1139	345	77	0.052	
		24522	47	14	4	0.065	
		24522	40	12	4	0.071	
73P-C/SW 3		2006/05/27, 09 :31	0 - 10	712	234	189	0.200
		0 - 51	697	232	188	0.202	
	51 - 153	612	202	145	0.178		
	153 - 255	595	203	92	0.115		
	255 - 357	519	174	64	0.092		
	357 - 653	405	133	18	0.033		
	8P/Tuttle	2008/01/16, 01 :00	0 - 25	182	61	15	0.063
		0 - 126	172	59	16	0.068	
		126 - 377	162	53	11	0.052	
		377 - 628	144	47	6	0.034	
628 - 1305		102	34	4	0.028		
2008/01/28, 00 :58		0 - 36	547	185	68	0.093	
0 - 181		475	155	59	0.094		
181 - 544		558	185	25	0.034		
544 - 907		305	100	12	0.029		
907 - 1886		182	60	7	0.027		
2008/02/04, 00 :57	0 - 43	452	149	36	0.059		
	0 - 216	408	135	32	0.060		
	216 - 649	465	130	23	0.039		
	649 - 1081	311	101	14	0.034		
	1081 - 2248	193	64	9	0.033		
	103P/Hartley 2	2010/11/05, 07 :18	0 - 11	2.3	0.7	0.7	0.224
		0 - 54	2.1	0.7	0.7	0.240	
		54 - 163	2.2	0.7	0.6	0.190	
		163 - 272	2.0	0.6	0.4	0.138	
		272 - 381	1.6	0.5	0.2	0.112	
381 - 696		1.3	0.4	0.2	0.094		
2010/11/05, 08 :19		0 - 12	2.4	0.8	0.8	0.259	
		0 - 61	2.2	0.7	0.8	0.292	
		61 - 184	2.2	0.7	0.7	0.236	
		184 - 306	2.0	0.7	0.4	0.167	
		306 - 428	1.8	0.6	0.3	0.121	
		428 - 783	1.4	0.4	0.2	0.087	
		2010/11/10, 07 :17	0 - 11	2.8	0.9	0.9	0.256
0 - 54		2.4	0.8	0.9	0.288		
54 - 163		2.4	0.6	0.5	0.180		
163 - 272	2.1	0.7	0.3	0.096			
272 - 381	1.7	0.5	0.2	0.081			
381 - 696	1.2	0.4	0.1	0.067			

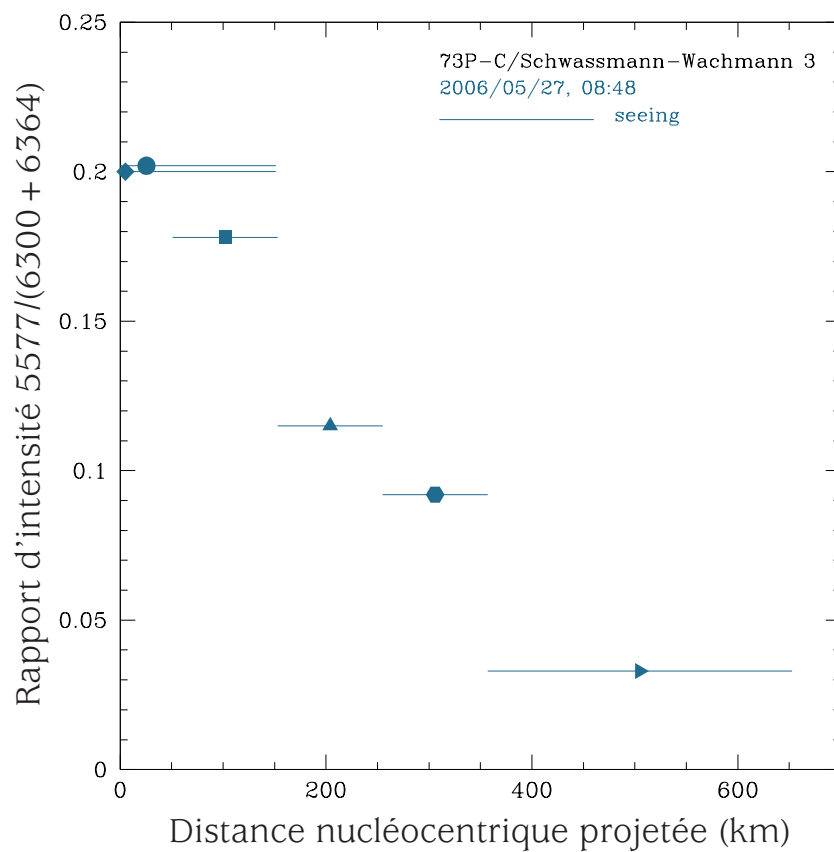
Comète	Date UT	Etendue de la distance nucléocentrique (km)	Intensité (ADU)			G/R
			5577.339 Å	6300.304 Å	6363.776 Å	
	2010/11/10, 08 :19	0 - 12	2.8	0.9	0.8	0.211
		0 - 61	2.0	0.7	0.7	0.272
		61 - 184	2.3	0.7	0.6	0.191
		184 - 306	2.3	0.7	0.3	0.111
		306 - 428	1.8	0.6	0.2	0.099
		428 - 783	1.3	0.4	0.2	0.088
	2010/11/11, 05 :53	4134	0.2	0.1	0.02	0.064
	2010/11/11, 07 :18	2756	0.8	0.3	0.04	0.046
	2010/11/11, 08 :16	1378	0.3	0.1	0.02	0.042
	2010/11/11, 08 :57	0 - 13	2.4	0.8	1.2	0.359
		0 - 65	2.0	0.7	1.1	0.417
		65 - 194	2.6	0.8	0.7	0.195
		194 - 323	1.8	0.6	0.3	0.135
		323 - 452	1.5	0.5	0.2	0.108
		452 - 827	1.1	0.4	0.1	0.089

**Tableau 5.3** – Intensités des raies exprimées en ADU (Analog-to-Digital Units), rapports G/R pour les trois raies interdites de l’oxygène pour chaque comète et chaque sous-spectre. Pour les spectres *offsetés*, nous donnons la distance depuis le centre de la fente. Pour le troisième sous-spectre de la troisième observation de la comète 103P/Hartley 2, la raie à 6363.776 Å n’a pas pu être utilisée à cause d’une contamination par un rayon cosmique dans cette zone de pixels.

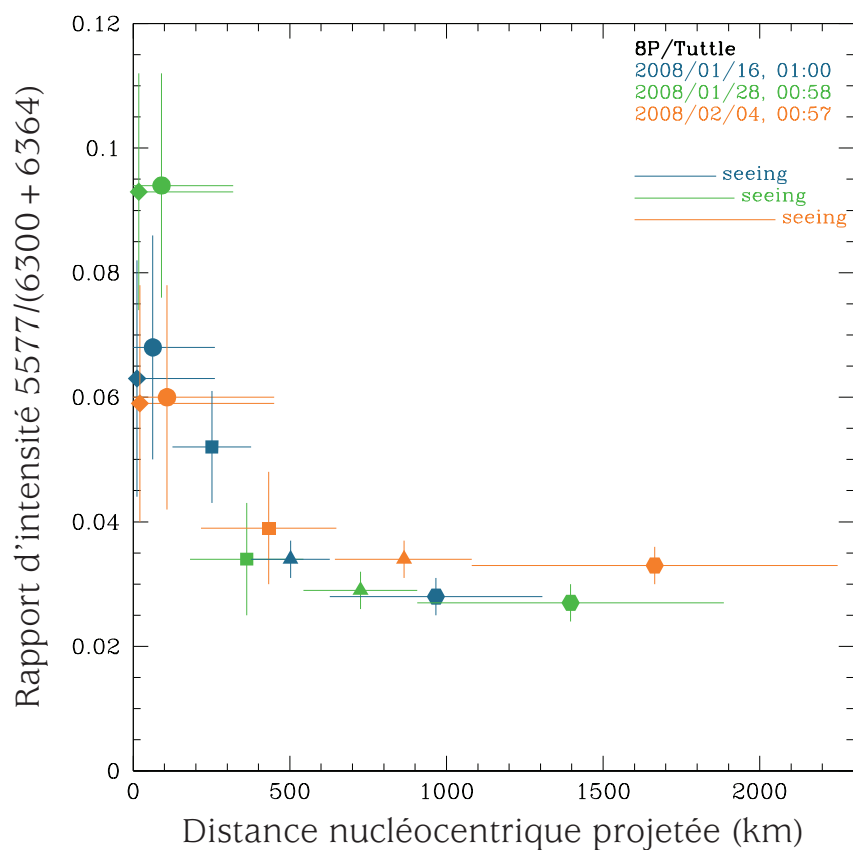


**FIGURE 5.3** – Le rapport G/R de chaque sous-spectre et des spectres offsetés pour la comète C/2002 T7 (LINEAR). L'étendue de la distance nucléocentrique couverte par chaque sous-spectre ainsi que l'erreur sur la valeur du rapport G/R sont indiquées. L'effet du seeing est également inclus dans les barres d'erreur selon x. Il définit la plus petite région qui peut être résolue. Il explique également le "plateau" observé pour les résultats obtenus pour les zones de pixels extraites très près du noyau. Ce profil se remarque davantage en échelle logarithmique sur les figures 5.11 à 5.14.

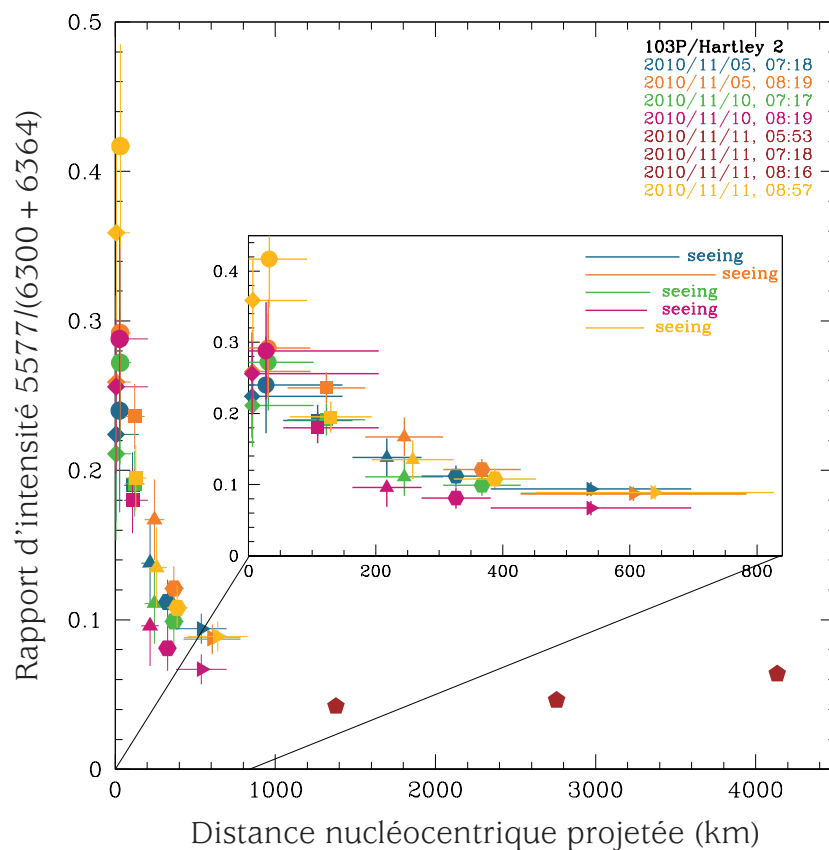




**FIGURE 5.4** – Le rapport G/R pour chaque sous-spectre de la comète 73P-C/Schwassmann-Wachmann 3. L'étendue de la distance nucléocentrique couverte par chaque point est indiquée.



**FIGURE 5.5** – Le rapport G/R pour chaque sous-spectre de la comète 8P/Tuttle. L'étendue de la distance nucléocentrique couverte par chaque point ainsi que l'erreur sur la valeur du rapport G/R sont indiquées.



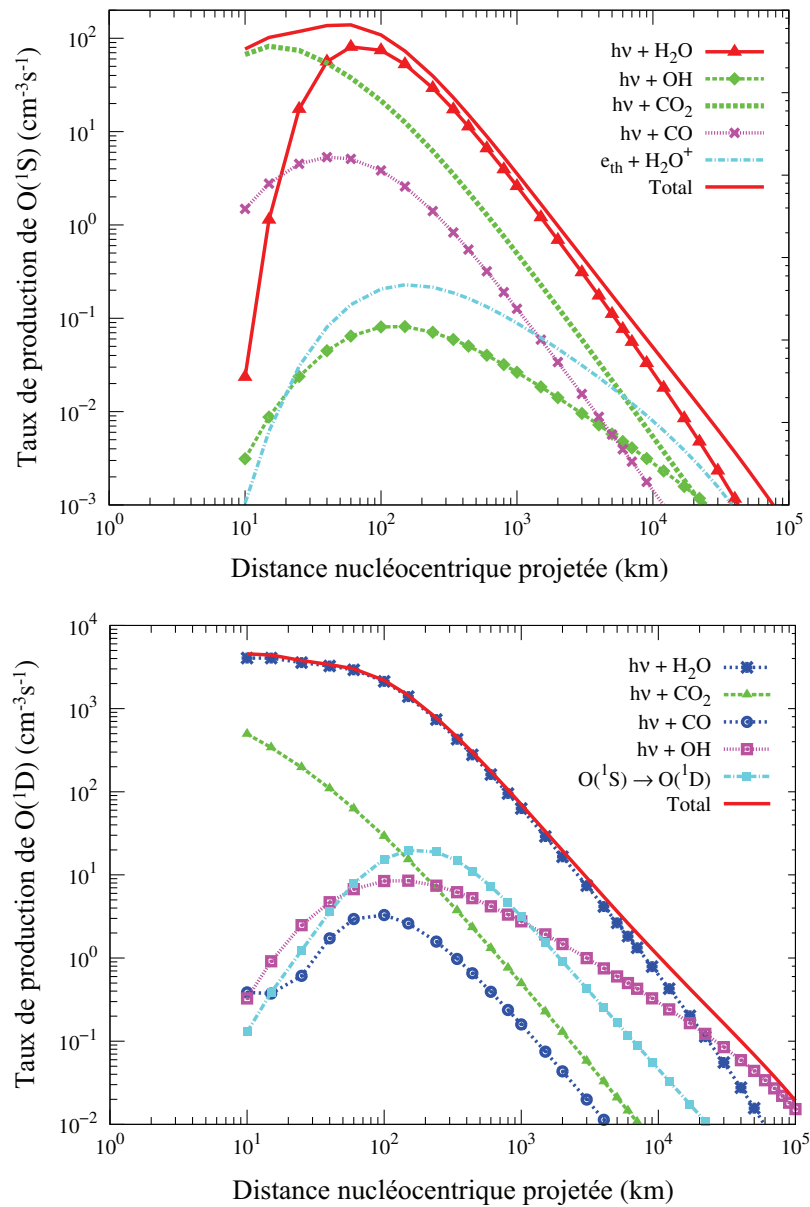
**FIGURE 5.6** – Le rapport G/R pour chaque sous-spectre de la comète 103P/Hartley 2. L'étendue de la distance nucléocentrique couverte par chaque point ainsi que l'erreur sur la valeur du rapport G/R sont indiquées.

Comète	Date UT	N	Moyenne de l'étendue de la distance nucléocentrique (km)	G/R	FWHM <sub>intrinsèque</sub> (km s <sup>-1</sup> )		
					5577.339 Å	6300.304 Å	6363.776 Å
C/2002 T7 (LINEAR)	2004/05/06	1	2212	0.049	2.329	1.819	1.795
	2004/05/26-27	2	0 - 29	0.147 ± 0.036	2.664 ± 0.043	1.730 ± 0.042	1.752 ± 0.026
		2	0 - 141	0.155 ± 0.039	2.741 ± 0.072	1.759 ± 0.030	1.785 ± 0.015
		2	141 - 423	0.134 ± 0.028	2.645 ± 0.144	1.689 ± 0.064	1.875 ± 0.054
		2	423 - 706	0.079 ± 0.007	2.649 ± 0.037	1.702 ± 0.021	1.706 ± 0.015
		2	706 - 988	0.066 ± 0.006	2.589 ± 0.048	1.620 ± 0.034	1.731 ± 0.027
		2	988 - 1806	0.054 ± 0.003	2.512 ± 0.060	1.683 ± 0.000	1.734 ± 0.006
73P-C/SW 3	2004/05/28-29	2	24522	0.068 ± 0.004	1.955 ± 0.123	1.846 ± 0.034	1.684 ± 0.105
	2006/05/27	1	0 - 10	0.200	2.278	1.493	1.369
		1	0 - 51	0.202	2.253	1.475	1.419
		1	51 - 153	0.178	2.214	1.421	1.594
		1	153 - 255	0.115	2.204	1.493	1.312
		1	255 - 357	0.092	2.143	1.396	1.211
		1	357 - 653	0.033	2.077	1.390	1.266
8P/Tuttle	2008/01/16-28, 02/04	3	0 - 35	0.072 ± 0.019	2.064 ± 0.032	1.514 ± 0.060	1.451 ± 0.109
		3	0 - 174	0.074 ± 0.018	2.060 ± 0.077	1.519 ± 0.057	1.492 ± 0.101
		3	174 - 523	0.042 ± 0.009	2.063 ± 0.037	1.350 ± 0.175	1.442 ± 0.086
		3	523 - 872	0.032 ± 0.003	1.935 ± 0.150	1.485 ± 0.059	1.353 ± 0.040
		3	872 - 1813	0.030 ± 0.003	1.948 ± 0.134	1.505 ± 0.022	1.383 ± 0.040
103P/Hartley 2	2010/11/05-10-11	5	0 - 12	0.262 ± 0.058	2.362 ± 0.036	1.330 ± 0.071	1.307 ± 0.074
		5	0 - 59	0.302 ± 0.068	2.420 ± 0.070	1.276 ± 0.047	1.187 ± 0.089
		5	59 - 178	0.198 ± 0.022	2.351 ± 0.107	1.279 ± 0.180	1.258 ± 0.177
		5	178 - 296	0.129 ± 0.027	2.252 ± 0.119	1.324 ± 0.193	1.182 ± 0.088
		5	296 - 414	0.104 ± 0.015	2.192 ± 0.103	1.328 ± 0.061	1.263 ± 0.038
		5	414 - 757	0.085 ± 0.010	2.016 ± 0.092	1.314 ± 0.025	1.282 ± 0.037
	2010/11/11, 05 :53	1	4134	0.064	1.739	1.338	1.269
	2010/11/11, 07 :18	1	2756	0.046	1.833	1.300	1.195
	2010/11/11, 08 :16	1	1378	0.042	1.825	1.228	1.183

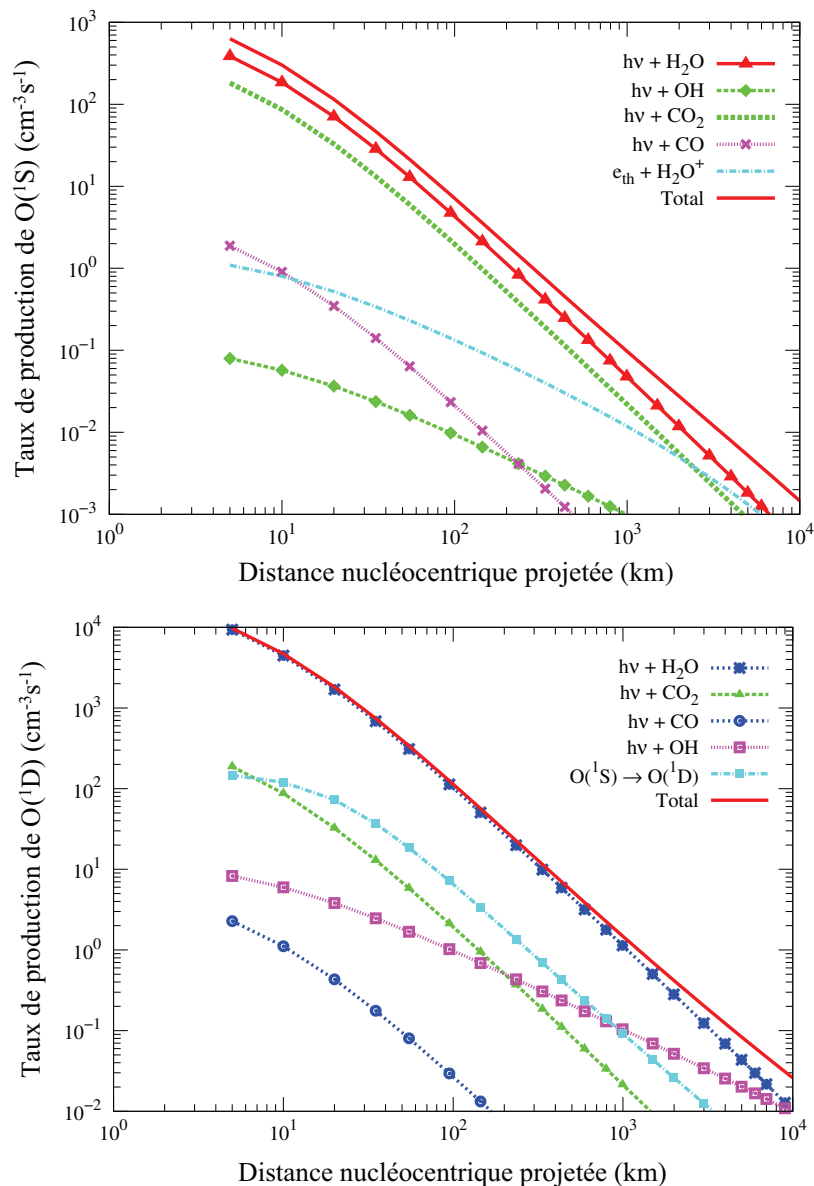
**Tableau 5.4** – Valeurs moyennes des rapports G/R et des largeurs intrinsèques en vitesse pour chaque sous-spectre. Les erreurs correspondent à la déviation standard calculée à partir des N spectres disponibles.

Le seeing atmosphérique limite la résolution spatiale et définit donc une distance nucléocentrique minimale qui peut être résolue. La valeur de cette dernière est donnée dans la dernière colonne du tableau 5.2. Notons que l'effet du seeing est également inclus dans l'erreur sur l'axe  $x$ . En analysant les figures précédentes, nous constatons que le rapport  $G/R$  décroît de façon monotone avec la distance au noyau. Ce profil peut s'expliquer par la présence de quenching collisionnel entre les atomes d'oxygène et les molécules de  $H_2O$  (Bhardwaj & Raghuram, 2012). Étant donné que le temps de vie des atomes  $O(^1D)$  ( $\tau \sim 120$  s) est cent fois plus long que celui de  $O(^1S)$  ( $\tau \sim 0.8$  s), la destruction de  $O(^1D)$  par les collisions est plus importante (Raghuram & Bhardwaj, 2014) et cela implique une diminution du rapport  $G/R$  au plus on s'éloigne du noyau. Le taux de perte des atomes de  $O(^1S)$  et  $O(^1D)$  généré par  $H_2O$  dans la coma interne dépend de la taille de la coma collisionnelle de la comète qui est elle-même proportionnelle au taux de production de l'eau. Au plus le taux de production d'eau est élevé, au plus la coma collisionnelle sera étendue et les collisions avec les molécules de  $H_2O$  seront importantes. Ceci explique pourquoi la comète C/2002 T7 (LINEAR), possédant un  $Q_{H_2O} \sim 5 \times 10^{29} \text{ s}^{-1}$ , atteint sa valeur minimale de  $G/R$  plus loin du noyau ( $\sim 1000$  km) comparée aux autres comètes ( $\sim 500$  km).

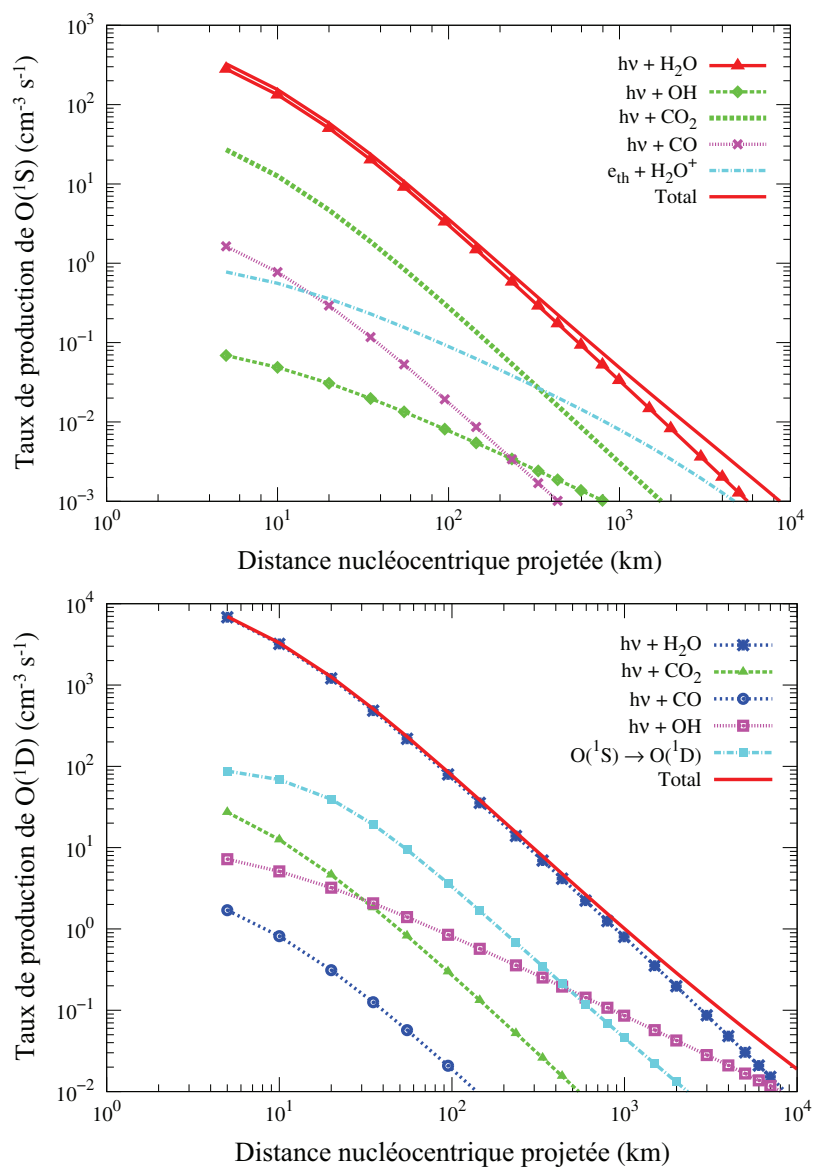
Nous nous sommes également attardés sur les estimations théoriques du taux de production des atomes  $O(^1S)$  et  $O(^1D)$  dont la valeur dépend du taux de production d'eau de la comète (Raghuram & Bhardwaj, 2013, 2014). Ceux-ci sont présentés pour chaque comète dans les figures 5.7, 5.8, 5.9 et 5.10. Pour les comètes 73P-C, 8P et 103P ayant un  $Q_{H_2O} \sim 10^{28} \text{ s}^{-1}$ , les atomes de  $O(^1S)$  proviennent des molécules de  $CO_2$  et de  $H_2O$  alors que ceux de  $O(^1D)$  sont uniquement produits via la photodissociation des molécules de  $H_2O$ . Vu son taux de production d'eau élevé, la situation est quelque peu différente pour la comète C/2002 T7 (LINEAR). En effet, dans ce cas, les atomes de  $O(^1S)$  formés très près du noyau ( $< 50$  km) sont uniquement produits via la photodissociation de  $CO_2$ . Au-delà de cette distance nucléocentrique, les molécules de  $CO_2$  et  $H_2O$  deviennent les deux contributeurs de la production des atomes de  $O(^1S)$ . Dès lors, si l'on se réfère aux valeurs de  $O(^1S)/O(^1D)$  données dans le tableau 5.1, le rapport  $G/R$  de la comète C/2002 T7 (LINEAR) mesuré à une distance nucléocentrique inférieure à 50 km devrait être encore plus grand. Nous ne pouvons, en réalité, pas l'observer étant donné que le seeing atmosphérique ne nous permet pas de résoudre la coma à de telles distances du noyau dans le cas de la comète C/2002 T7. Au-delà de  $10^3$  km, la contribution principale aux atomes de  $O(^1S)$  et de  $O(^1D)$  est la photodissociation de  $H_2O$ .



**FIGURE 5.7** – Taux de production en fonction de la distance nucléocentrique calculés pour  $O(^1S)$  (en haut) et  $O(^1D)$  (en bas) pour la comète C/2002 T7 (LINEAR) ayant un taux de production d'eau de  $52.1 \times 10^{28} \text{ s}^{-1}$  et des abondances relatives de  $\text{CO}_2$  de 2% et de CO de 5%.

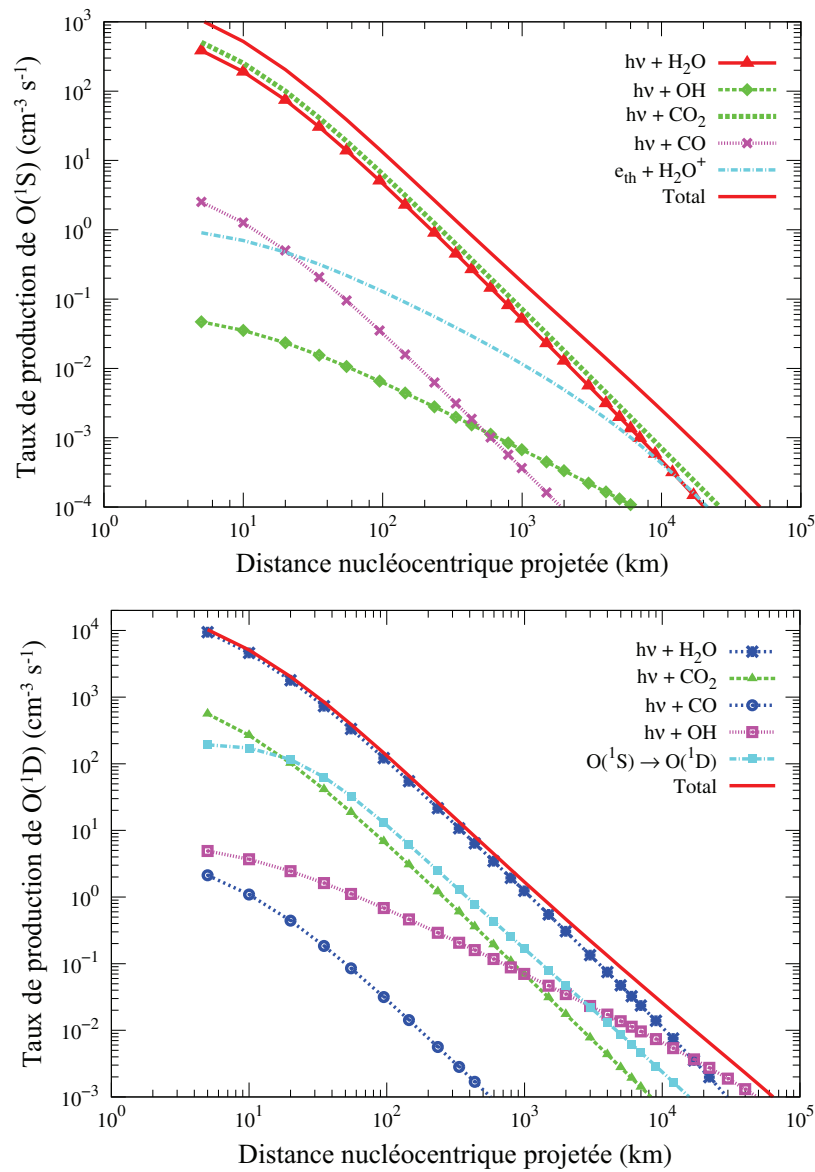


**FIGURE 5.8** – Taux de production en fonction de la distance nucléocentrique calculés pour  $O(^1S)$  (en haut) et  $O(^1D)$  (en bas) pour la comète 73P-C/Schwassmann-Wachmann 3 ayant un taux de production d'eau de  $1.7 \times 10^{28} \text{ s}^{-1}$  et des abondances relatives de  $\text{CO}_2$  de 5% et de CO de 5%.



**FIGURE 5.9** – Taux de production en fonction de la distance nucléocentrique calculés pour  $\text{O}(<sup>1</sup>\text{S})$  (en haut) et  $\text{O}(<sup>1</sup>\text{D})$  (en bas) pour la comète 8P/Tuttle ayant un taux de production d'eau de  $1.4 \times 10^{28} \text{ s}^{-1}$  et des abondances relatives de  $\text{CO}_2$  de 1% et de  $\text{CO}$  de 0.5%.





**FIGURE 5.10** – Taux de production en fonction de la distance nucléocentrique calculés pour  $O(^1S)$  (en haut) et  $O(^1D)$  (en bas) pour la comète 103P/Hartley 2 ayant un taux de production d'eau de  $1.15 \times 10^{28} \text{ s}^{-1}$  et des abondances relatives de  $\text{CO}_2$  de 15% et de  $\text{CO}$  de 0.15%.

Comme nous pouvons le constater sur les figures 5.3, 5.4, 5.5 et 5.6, à de telles distances nucléocentriques, le rapport G/R devient constant et vaut  $\sim 0.05$ , ce qui correspond bien à la valeur du rapport  $O(^1S)/O(^1D)$  défini en théorie pour le cas de l'eau pure (cf. tableau 5.1).

### 5.4.1.1 Estimation des abondances relatives de CO<sub>2</sub> dans les comètes de l'échantillon

Nous avons utilisé le modèle d'émission de Bhardwaj & Raghuram (2012) pour estimer l'abondance relative de CO<sub>2</sub> dans les comètes étudiées (c'est-à-dire le rapport d'abondance CO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>O) en se basant sur les profils G/R observés. Ce modèle prend en compte les processus majeurs de production et de perte des atomes O(<sup>1</sup>S) et O(<sup>1</sup>D) présents dans la coma cométaire interne. Dès lors, le quenching collisionnel existant entre O(<sup>1</sup>S) et O(<sup>1</sup>D) avec H<sub>2</sub>O est intégré au modèle. Les valeurs des taux de quenching collisionnel sont extraites de la littérature. Ainsi nous considérons un taux de  $4 \times 10^{-10}$  molécules<sup>-1</sup> cm<sup>3</sup> s<sup>-1</sup> pour O(<sup>1</sup>S) (Stuhl & Welge, 1969) et un taux de  $2.1 \times 10^{-10}$  molécules<sup>-1</sup> cm<sup>3</sup> s<sup>-1</sup> pour O(<sup>1</sup>D) (Atkinson et al., 2004; Takahashi et al., 2005). Nous avons pris en considération l'effet du seeing atmosphérique qui est particulièrement important près du noyau. Pour ce faire, nous avons convolué le profil spatial fourni par le modèle avec une fonction gaussienne dont la FWHM était égale à la valeur du seeing. Les taux de production de H<sub>2</sub>O, les valeurs du seeing utilisées dans la présente analyse ainsi que les distances héliocentriques sont repris dans les tableaux 5.2 et 5.5.

Comète	$r$	$Q_{H_2O}$ ( $10^{28}$ s <sup>-1</sup> )	Date	Référence pour $Q_{H_2O}$
C/2002 T7 (LINEAR)	0.68	35.5	5 mai 2004	DiSanti et al. (2006)
	0.94	52.1	27 mai 2004	Combi et al. (2009)
73P-C/Schwassmann-Wachmann 3	0.95	1.70	17 mai 2006	Schleicher & Bair (2011)
8P/Tuttle	1.04	1.4	3 jan 2008	Barber et al. (2009)
103P/Hartley 2	1.06	1.15	31 nov 2010 1	Knight & Schleicher (2012)
C/1996 B2 (Hyakutake)	0.94	26	1 avr 1996	Combi et al. (1998)
C/1995 A1 (Hale-Bopp)	0.93	957	26 mar 1997	Dello Russo et al. (2000)

**Tableau 5.5** – Taux de production de l'eau estimés à partir de données acquises aux alentours des dates d'observations. Les données correspondant aux comètes C/1996 B2 (Hyakutake) et C/1995 O1 (Hale-Bopp) sont ajoutées pour comparaison.

Comète	$Q_{H_2O}^a$ ( $10^{28}$ s <sup>-1</sup> )	$r$ (ua)	Abondance relative (%)	
			[CO]	Modèle [CO <sub>2</sub> ]
C/2002 T7 (LINEAR)	52	0.94	5 <sup>b</sup>	0 - 2
73P-C/Schwassmann-Wachmann 3	1.7	0.95	5 <sup>b</sup>	5
8P/Tuttle	1.4	1.03	0.5 <sup>c</sup>	0 - 5
103P/Hartley 2	1.15	1.06	0.15-0.45 <sup>d</sup>	15 - 20

**Tableau 5.6** – Paramètres d'entrée utilisés dans le modèle ainsi que les valeurs des abondances relatives du CO<sub>2</sub> déterminées par le modèle.

<sup>a</sup> Valeur extraite du tableau 5.5.

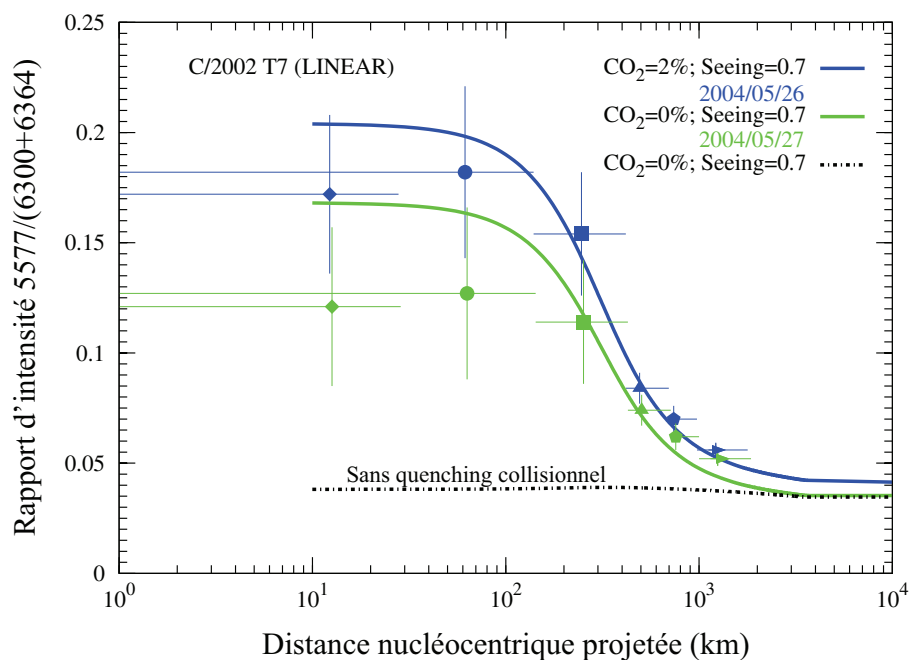
<sup>b</sup> Valeur supposée par le modèle de Raghuram & Bhardwaj.

<sup>c</sup> Bonev et al. (2008).

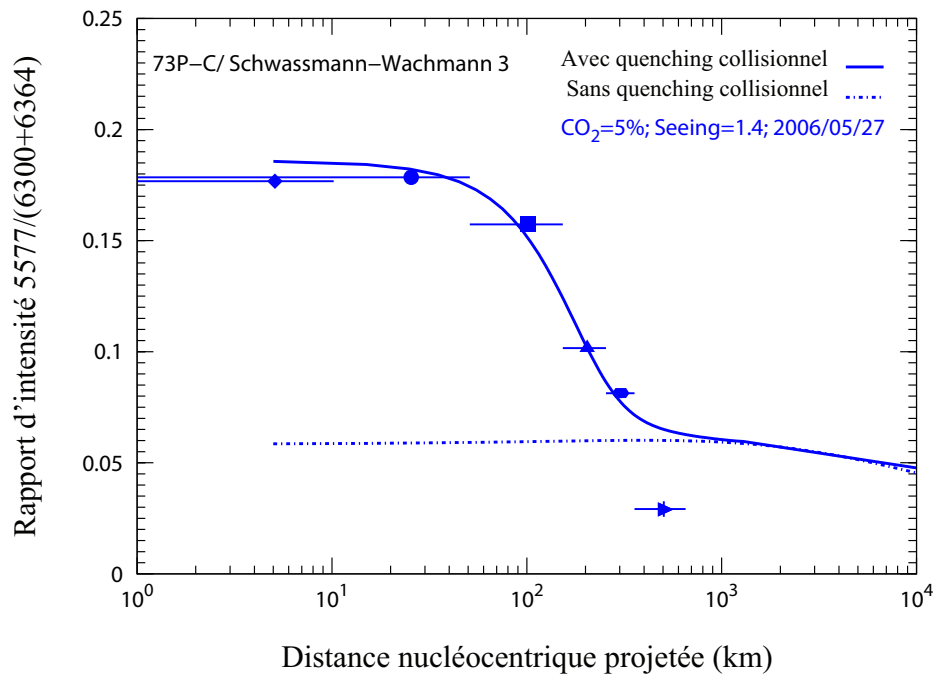
<sup>d</sup> Weaver et al. (2011).

Les valeurs du seeing atmosphérique ont été enregistrées par le moniteur de seeing

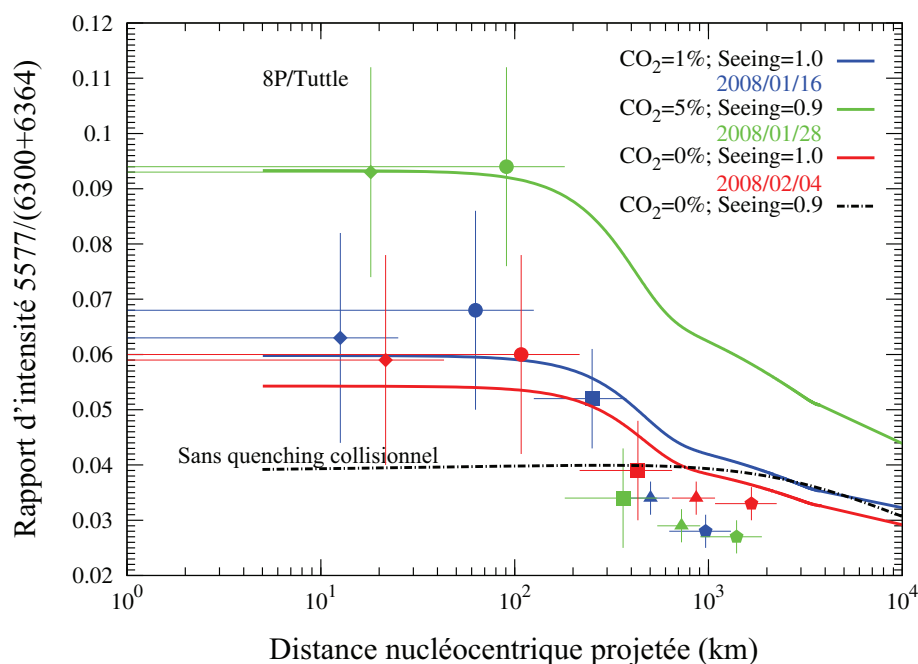
de Paranal. Les abondances relatives du CO pour les comètes C/2002 T7 et 73P-C sont supposées être égales à 5% dans notre modèle. Notons que des travaux antérieurs menés par Bhardwaj & Haider (2002), Raghuram & Bhardwaj (2013) et Raghuram & Bhardwaj (2014) ont montré que le rôle du CO dans la valeur du G/R était insignifiant. Finalement, l'ajustement des profils de G/R grâce au modèle nous a permis de déterminer les abondances relatives du CO<sub>2</sub> dans la coma des comètes étudiées. Celles-ci sont listées dans la dernière colonne du tableau 5.6.



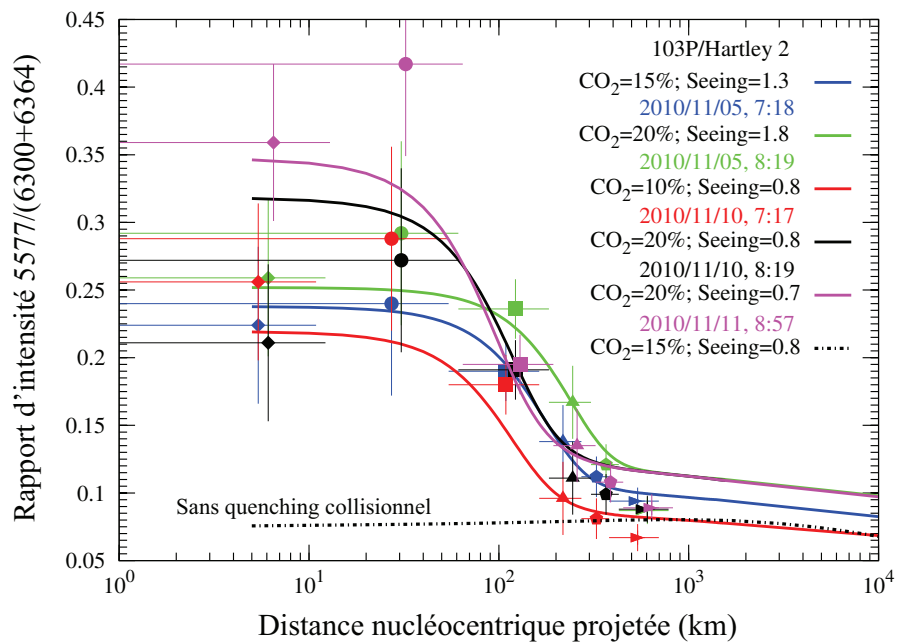
**FIGURE 5.11** – Estimation du rapport G/R par le modèle en fonction de la distance nucléocentrique projetée pour la comète C/2002 T7 (LINEAR). Cet ajustement a été obtenu en considérant un taux de production de H<sub>2</sub>O égal à  $5.2 \times 10^{29} \text{ s}^{-1}$  et une abondance relative de CO de 5% lorsque la comète est à une distance héliocentrique de  $r = 0.94 \text{ ua}$  et à une distance géocentrique  $\Delta \sim 0.41 \text{ ua}$ . Le modèle fournit une abondance relative de CO<sub>2</sub> de 0 à 2% pour cette comète. Les symboles correspondent aux résultats obtenus pour la mesure du G/R dans les différents sous-spectres observés. La courbe en pointillés noirs représente le rapport G/R calculé avec le modèle en considérant qu'il n'y a pas de quenching collisionnel et une abondance relative de CO<sub>2</sub> de 0%.



**FIGURE 5.12** – Estimation du rapport G/R par le modèle en fonction de la distance nucléocentrique projetée pour la comète 73P-C. Cet ajustement a été obtenu en considérant un taux de production de  $\text{H}_2\text{O}$  égal à  $1.7 \times 10^{28} \text{ s}^{-1}$  et une abondance relative de CO de 0.5% lorsque la comète est à une distance héliocentrique de  $r = 0.95 \text{ ua}$  et à une distance géocentrique  $\Delta = 0.15 \text{ ua}$ . Le modèle fournit une abondance relative de  $\text{CO}_2$  de 5%. Les symboles correspondent aux résultats obtenus pour la mesure du G/R dans les différents sous-spectres observés. La courbe en pointillés bleus représente le rapport G/R calculé avec le modèle en considérant qu'il n'y a pas de quenching collisionnel et une abondance relative de  $\text{CO}_2$  de 5%.



**FIGURE 5.13** – Estimation du rapport G/R par le modèle en fonction de la distance nucléocentrique projetée pour la comète 8P/Tuttle. Cet ajustement a été obtenu en considérant un taux de production de  $\text{H}_2\text{O}$  égal à  $1.4 \times 10^{28} \text{ s}^{-1}$  et une abondance relative de CO de 0.5% lorsque la comète est à une distance héliocentrique de  $r = 1.03 \text{ ua}$  et à des distances géocentriques  $\Delta$  de 0.62 ua à 0.32 ua. Le modèle fournit une abondance relative de  $\text{CO}_2$  de 0 à 5%. Les symboles correspondent aux résultats obtenus pour la mesure du G/R dans les différents sous-spectres observés. La courbe en pointillés noirs représente le rapport G/R calculé avec le modèle en considérant qu’il n’y a pas de quenching collisionnel et une abondance relative de  $\text{CO}_2$  de 0%.



**FIGURE 5.14** – Estimation du rapport G/R par le modèle en fonction de la distance nucléocentrique projetée pour la comète 103P/Hartley 2. Cet ajustement a été obtenu en considérant un taux de production de  $\text{H}_2\text{O}$  égal à  $1.18 \times 10^{28} \text{ s}^{-1}$  et une abondance relative de CO de 0.5% lorsque la comète est à une distance héliocentrique de  $r = 1.07 \text{ ua}$  et à une distance géocentrique  $\Delta \sim 0.18 \text{ ua}$ . Le modèle fournit une abondance relative de  $\text{CO}_2$  de 10 à 20% pour cette comète. Les symboles correspondent aux résultats obtenus pour la mesure du G/R dans les différents sous-spectres observés. La courbe en pointillés noirs représente le rapport G/R calculé avec le modèle en considérant qu'il n'y a pas de quenching collisionnel et une abondance relative de  $\text{CO}_2$  de 15%.

En comparant les valeurs des rapports G/R mesurés à partir des observations spectrales et le profil déterminé par le modèle, nous constatons que l'abondance relative du dioxyde de carbone de la comète C/2002 T7 est inférieur à 2% (cf. figure 5.11). De la même manière, l'analyse du profil G/R calculé pour la comète 73P-C montre que cette comète doit avoir une abondance relative de CO<sub>2</sub> de 5%, comme nous pouvons le constater sur la figure 5.12. L'utilisation du modèle sur les données de 8P nous permet de déduire que l'abondance relative de CO<sub>2</sub> de cette comète est comprise entre 0 et 5% (cf. figure 5.13). La figure 5.14 présente les résultats du modèle pour la comète 103P. Une abondance relative de CO<sub>2</sub> de 15 à 20% a dû être considérée dans le modèle afin de reproduire les observations. Ceci est en accord avec les mesures de CO<sub>2</sub> réalisées par les observations de EPOXI (A'Hearn et al., 2011).

Enfin, nous constatons que les données obtenues près du noyau sont assez bien reproduites par le modèle. Cela montre que les valeurs des taux de quenching collisionnel provenant de Stuhl & Welge (1969) et Takahashi et al. (2005) sont probablement assez fiables.

En s'attardant un peu plus sur les figures 5.13 et 5.14, nous remarquons néanmoins que le modèle ne reproduit pas parfaitement certaines observations. Pour la comète 8P/Tuttle, le problème pourrait venir du fait que nous n'avons pas de mesure du seeing pour ces nuits-là. Pour 103P/Hartley 2, la distribution non-uniforme des espèces parentes dans la coma pourrait expliquer le léger désaccord. En effet, EPOXI a montré que la vapeur d'eau et le dioxyde de carbone ne s'échappaient pas de façon uniforme dans la coma (A'Hearn et al., 2011). Or notre modèle suppose une expansion radiale des gaz et à symétrie sphérique. Cette explication reste néanmoins hypothétique car cet effet ne semble pas se manifester pour les autres comètes. Des analyses supplémentaires portées sur d'autres comètes sont donc requises pour nous éclairer davantage sur cette problématique.

#### **5.4.2 Effet du seeing atmosphérique et de l'abondance de CO<sub>2</sub> sur la valeur du rapport G/R**

Nous avons constaté que ne pas prendre en compte le seeing ne permettait pas de reproduire les résultats trouvés observationnellement avec le modèle, et ce, principalement pour les données acquises près du noyau. Dès lors, une mesure précise du seeing est requise et celle-ci doit être acquise en même temps que les observations.

Afin de mieux visualiser l'influence du seeing, nous avons testé différentes valeurs de celui-ci. La valeur de l'abondance relative du CO<sub>2</sub> a, par contre, été fixée. Ces tests ont été réalisés pour un des spectres de la comète 103P pour lequel, le CO<sub>2</sub> a été pris égal à 15%.

Nous noterons que la courbe qui passe le mieux par les points est celle pour laquelle le

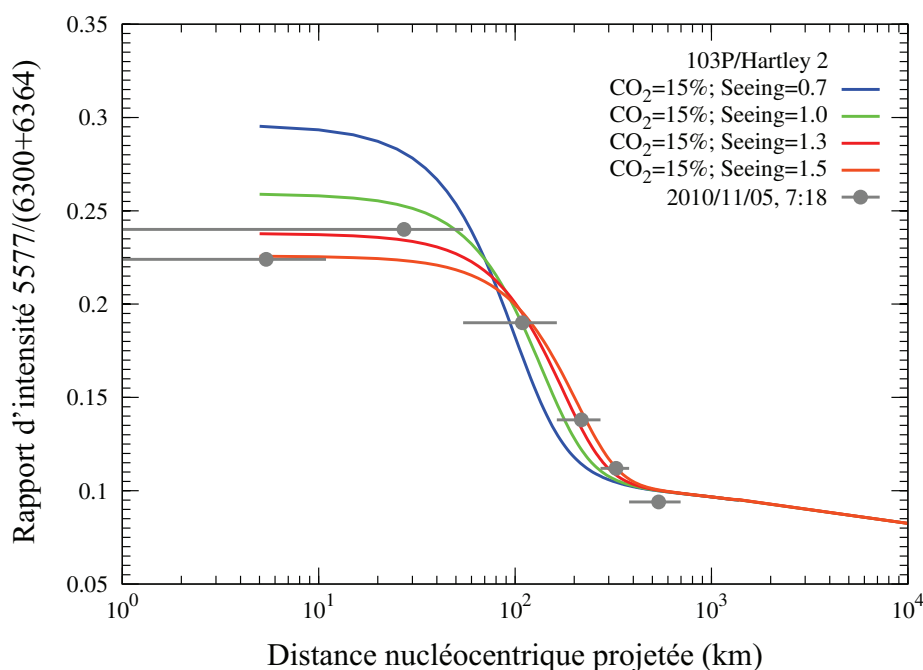


FIGURE 5.15 – Etude de l’influence du seeing sur le modèle pour une valeur de  $\text{CO}_2$  prise à 15%.

seeing vaut  $1.3''$ , qui est en fait la valeur du seeing mesurée simultanément par le moniteur de Paranal. Cela montre l’importance de la prise en compte du seeing dans le modèle.

Le modèle est-il capable de fournir une mesure précise de l’abondance de  $\text{CO}_2$  ou du moins de donner une idée de l’erreur sur la valeur de celle-ci ? Pour répondre à cette question, nous avons testé le comportement du rapport G/R fourni par le modèle en faisant varier l’abondance relative du  $\text{CO}_2$  tout en fixant, cette fois, la valeur du seeing.

Nous constatons que la valeur de  $15\% \pm 2\%$  pour l’abondance relative de  $\text{CO}_2$  permet de bien ajuster les points observés. Pour chaque spectre, le modèle est donc capable de fournir une valeur assez précise (à 2% près) du  $\text{CO}_2/\text{H}_2\text{O}$ .

Ajoutons que le taux de quenching collisionnel représente aussi un élément capital à prendre en compte dans le modèle d’émission de Bhardwaj & Raghuram. En effet, le quenching collisionnel modifie également la courbe produite par le modèle, tout particulièrement à proximité du noyau. En l’absence totale de quenching collisionnel, les atomes de  $\text{O}(^1\text{S})$  et  $\text{O}(^1\text{D})$  ne seront détruits que par la recombinaison radiative et cette destruction reste constante quelle que soit la distance au noyau. Le rapport G/R calculé par le modèle pour ce cas spécifique est représenté par le trait pointillé noir sur la figure 5.17, et ne permet donc pas de reproduire les G/R observés. Si maintenant, les collisions par  $\text{H}_2\text{O}$  sont prises en compte pour les atomes d’oxygène, la destruction de ces derniers sera plus importante près du noyau car la concentration de molécules de  $\text{H}_2\text{O}$  est plus



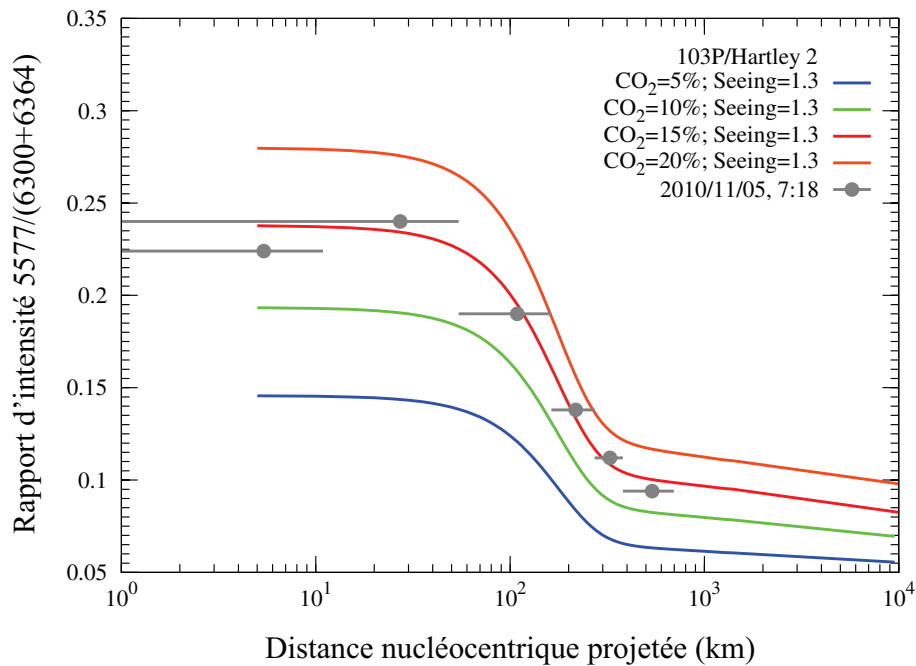


FIGURE 5.16 – Etude du comportement de l'abondance relative de  $\text{CO}_2$  sur le modèle pour une valeur de seeing fixée.

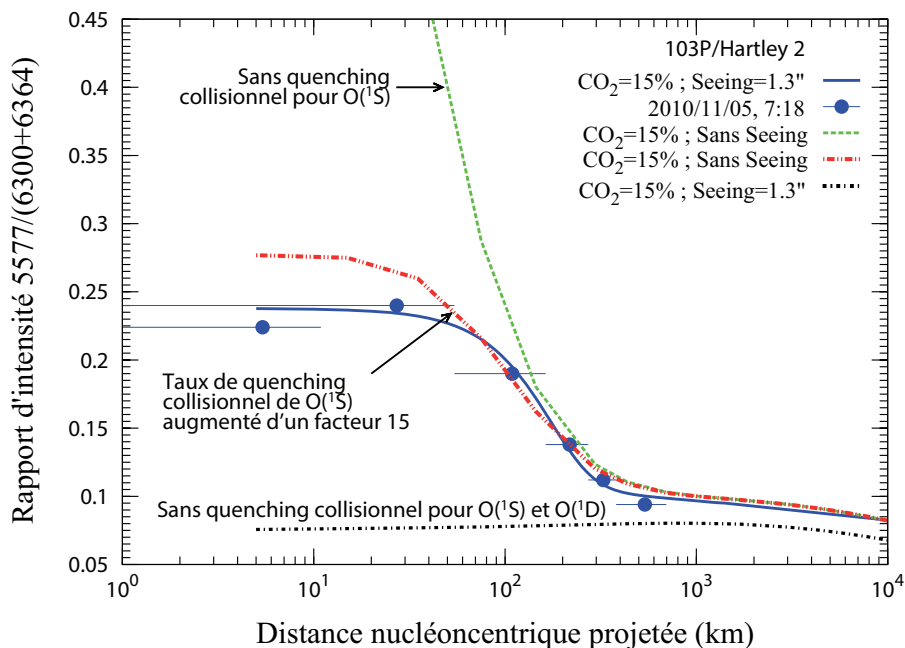


FIGURE 5.17 – Etude du comportement du taux de quenching collisionnel sur le modèle pour une abondance de  $\text{CO}_2$  fixée à 15% et une valeur de seeing fixée à 1.3''.

importante au plus on s'enfonce dans la coma interne. Cela dit, comme les atomes de  $\text{O}(^1\text{D})$  possèdent un temps de vie plus long que ceux de  $\text{O}(^1\text{S})$ , ils seront davantage dé-

truits par ce processus. Il en résultera que le rapport G/R diminuera de façon continue au plus on s'éloigne du noyau cométaire. Ceci est représenté par la courbe pointillée verte. A ce stade, nous constatons que le modèle peut alors s'ajuster aux points observationnels étudiés aux alentours de 100-1000 km du noyau mais pas en deçà. Comme nous l'avons vu, c'est la prise en compte du seeing qui permet de décrire les données analysées très près du noyau. L'augmentation du taux de collisions pour les atomes O(<sup>1</sup>S) pourrait néanmoins permettre d'atteindre ces données avec le modèle mais nous constatons rapidement qu'il faudrait alors inclure une valeur pour le taux de collisions qui est loin d'être réaliste (cf. courbe discontinue rouge).

#### 5.4.2.1 Le cas de la comète 103P/Hartley 2

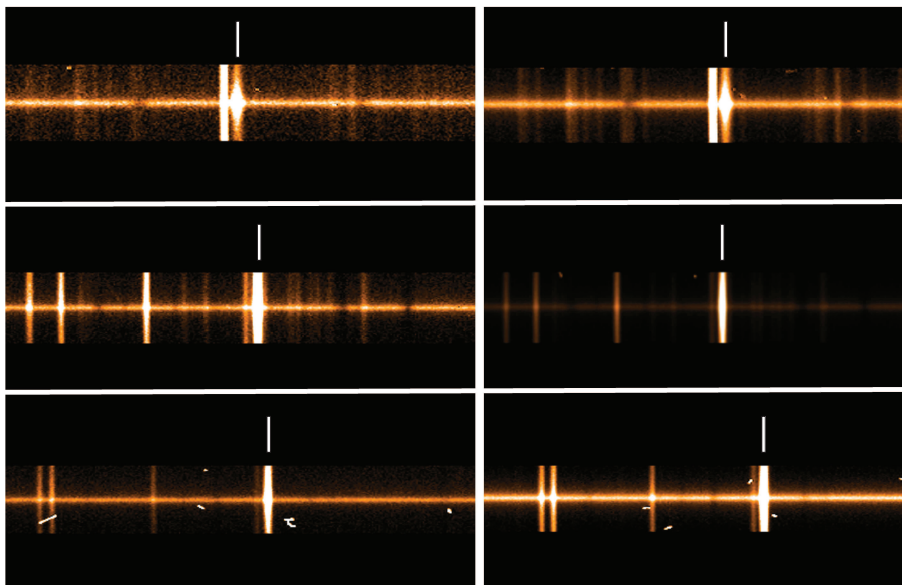
Sur la figure 5.6, deux points observationnels obtenus très près du noyau apparaissent avec un rapport G/R relativement élevé alors que les autres points appartenant au même spectre et mesurés plus loin du noyau présentent des G/R similaires à ceux obtenus pour les autres spectres. Dans un premier temps, nous avons pensé à une possible contamination par un rayon cosmique mais une analyse des trois raies interdites de l'oxygène à partir des spectres à deux dimensions nous a prouvé qu'aucun rayon cosmique n'était passé par là (cf. figure 5.18). Cette figure confirme également qu'aucun problème n'est apparu lors de l'acquisition de ce spectre en comparant celui-ci avec le spectre obtenu le jour précédent. Cela nous amène à émettre l'hypothèse que l'abondance CO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>O pourrait parfois varier fortement près du noyau. Ces changements pourraient être causés par des particules de glace qui s'évaporerait très rapidement dans les dix premiers kilomètres. Un autre possibilité serait que les variations perçues seraient liées à la rotation du noyau étant donné qu'il a été démontré que le CO<sub>2</sub> venait d'une région bien particulière du noyau (A'Hearn et al., 2011).

#### 5.4.3 Mesure de la largeur intrinsèque des raies de [OI]

En utilisant la relation (4.7) que nous rappelons ici :

$$\text{FWHM}(v) = \frac{\text{FWHM}_{\text{intrinsèque}}(\lambda) c}{\lambda_{[\text{OI}]} 2 \sqrt{\ln 2}}, \quad (5.2)$$

la vitesse la plus probable des atomes d'oxygène (FWHM(v)) est évaluée à partir de la largeur observée des raies (FWHM<sub>observée</sub> (Å)). Les résultats obtenus se retrouvent dans le tableau 5.7 et les erreurs estimées sur la largeur en vitesse sont fournies dans le tableau 5.4. Les figures 5.19, 5.20 et 5.21 présentent la largeur intrinsèque en vitesse des trois raies interdites de l'oxygène en fonction de la distance nucléocentrique.

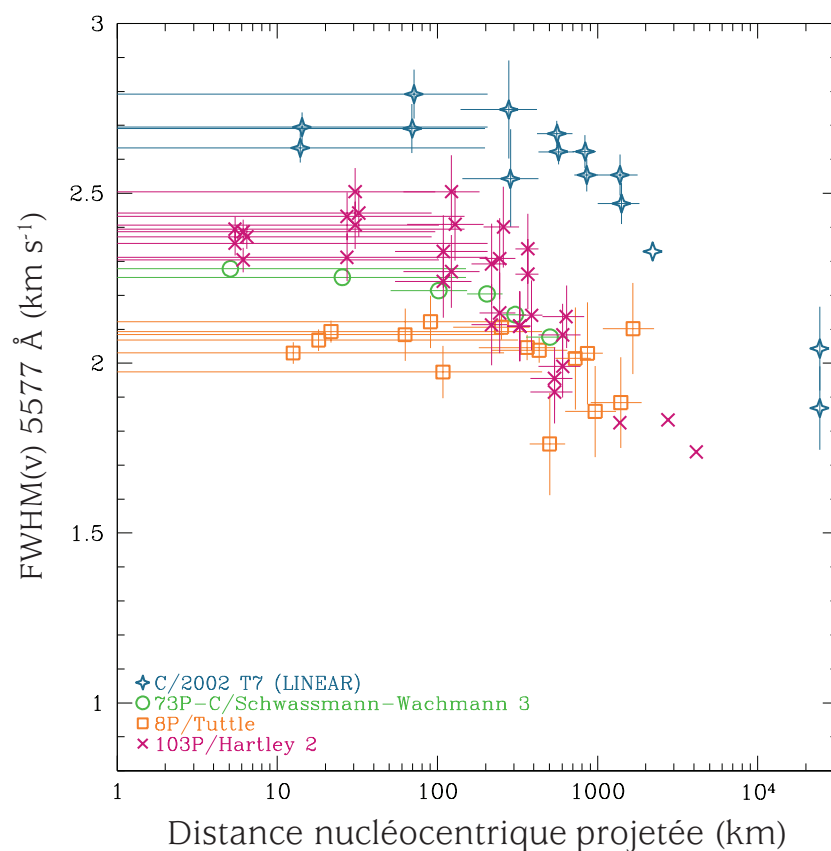


**FIGURE 5.18** – Raies interdites de l’oxygène détectées dans le spectre échelle à deux dimensions pour la comète 103P. Les données de droite ont été acquises le 10/11/2010 à 9h19 et celles de gauche le 11/11/2010 à 8h57. De haut en bas, on retrouve les raies de 5577.339 Å, 6300.304 Å et 6363.776 Å. La position des raies cométaires de [OI] est indiquée. Aucun rayon cosmique ne semble contaminer les raies d’oxygène.

Comète	Date UT	Etendue de la distance	FWHM <sub>observée</sub> (Å)			FWHM <sub>intrinsèque</sub> (km s <sup>-1</sup> )		
			5577.339 Å	6300.304 Å	6363.776 Å	5577.339 Å	6300.304 Å	6363.776 Å
C/2002 T7 (LINEAR)	2004/05/06, 10 :15	2212	0.095	0.099	0.100	2.329	1.819	1.795
		2004/05/26, 23 :47	0 - 28	0.096	0.090	0.091	2.634	1.759
		0 - 139	0.097	0.091	0.092	2.691	1.780	1.796
		139 - 418	0.099	0.090	0.093	2.747	1.734	1.836
		418 - 697	0.097	0.089	0.090	2.676	1.717	1.696
		697 - 976	0.095	0.088	0.090	2.623	1.644	1.713
		976 - 1784	0.094	0.089	0.090	2.554	1.683	1.729
	2004/05/27, 01 :06	0 - 29	0.097	0.089	0.091	2.695	1.700	1.771
		0 - 143	0.100	0.090	0.092	2.792	1.738	1.775
		143 - 428	0.093	0.088	0.095	2.543	1.644	1.913
		428 - 714	0.095	0.089	0.090	2.623	1.687	1.717
		714 - 1000	0.094	0.087	0.091	2.554	1.595	1.750
		1000 - 1828	0.091	0.089	0.091	2.470	1.683	1.738
		2004/05/28, 23 :24	24522	0.088	0.100	0.096	2.043	1.822
	2004/05/29, 00 :09	24522	0.084	0.101	0.100	1.868	1.870	1.758
73P-C/SW 3	2006/05/27, 09 :31	0 - 10	1.493	1.369				
		0 - 51	0.107	0.108	0.108	2.253	1.475	1.419
		51 - 153	0.106	0.107	0.111	2.214	1.421	1.594
		153 - 255	0.106	0.109	0.107	2.204	1.493	1.312
		255 - 357	0.105	0.107	0.105	2.143	1.396	1.211
		357 - 653	0.103	0.107	0.106	2.077	1.390	1.266
8P/Tuttle	2008/01/16, 01 :00	0 - 25	0.088	0.092	0.093	2.030	1.481	1.477
		0 - 126	0.090	0.093	0.093	2.084	1.575	1.482
		126 - 377	0.090	0.093	0.094	2.106	1.551	1.517
		377 - 628	0.083	0.092	0.091	1.762	1.501	1.363
		628 - 1305	0.089	0.092	0.091	1.858	1.491	1.411
		2008/01/28, 00 :58	0 - 36	0.089	0.094	0.094	2.068	1.584
	2008/02/04, 00 :57	0 - 181	0.091	0.093	0.095	2.122	1.520	1.597
		181 - 544	0.089	0.088	0.093	2.046	1.261	1.459
		544 - 907	0.088	0.093	0.091	2.014	1.535	1.387
		907 - 1886	0.085	0.093	0.092	1.884	1.530	1.403
		0 - 43	0.090	0.093	0.091	2.093	1.477	1.332
		0 - 216	0.088	0.092	0.092	1.974	1.462	1.396
103P/Hartley 2	2010/11/05, 07 :18	216 - 649	0.089	0.088	0.091	2.038	1.238	1.348
		649 - 1081	0.089	0.092	0.091	2.029	1.420	1.310
		1081 - 2248	0.091	0.093	0.091	2.102	1.493	1.337
		0 - 11	0.094	0.084	0.082	2.395	1.388	1.208
		0 - 54	0.095	0.084	0.086	2.432	1.413	1.428
		54 - 163	0.091	0.087	0.086	2.241	1.513	1.389
	163 - 272	0.092	0.087	0.081	2.292	1.518	1.164	
	272 - 381	0.088	0.084	0.083	2.109	1.403	1.256	
	381 - 696	0.084	0.083	0.084	1.955	1.328	1.324	

Comète	Date UT	Etendue de la distance	FWHM <sub>observée</sub> (Å)			FWHM <sub>intrinsèque</sub> (km s <sup>-1</sup> )		
			5577.339 Å	6300.304 Å	6363.776 Å	5577.339 Å	6300.304 Å	6363.776 Å
	2010/11/05, 08 :19	0 - 12	0.094	0.084	0.085	2.387	1.398	1.339
		0 - 61	2.2	0.087	0.087	2.505	1.536	1.457
		61 - 184	0.097	0.084	0.086	2.505	1.413	1.389
		184 - 306	0.092	0.087	0.080	2.308	1.518	1.119
		306 - 428	0.093	0.083	0.084	2.337	1.349	1.288
		428 - 783	0.085	0.083	0.084	1.991	1.349	1.314
	2010/11/10, 07 :17	0 - 11	0.093	0.082	0.084	2.353	1.316	1.354
		0 - 54	0.092	0.084	0.083	2.312	1.396	1.267
		54 - 163	0.093	0.081	-	2.329	1.249	-
		163 - 272	0.087	0.078	0.082	2.113	1.070	1.209
		272 - 381	0.087	0.081	0.083	2.109	1.249	1.303
		381 - 696	0.083	0.082	0.082	1.915	1.286	1.241
	2010/11/10, 08 :19	0 - 12	0.092	0.081	0.082	2.304	1.222	1.252
		0 - 61	0.094	0.082	0.082	2.407	1.280	1.241
		61 - 184	0.091	0.079	0.082	2.270	1.111	1.241
		184 - 306	0.088	0.081	0.080	2.148	1.270	1.097
		306 - 428	0.091	0.083	0.083	2.262	1.352	1.262
		428 - 783	0.087	0.082	0.083	2.083	1.311	1.278
	2010/11/11, 05 :53	4134	0.079	0.083	0.083	1.739	1.338	1.269
	2010/11/11, 07 :18	2756	0.081	0.082	0.082	1.833	1.300	1.195
	2010/11/11, 08 :16	1378	0.081	0.081	0.081	1.823	1.228	1.183
	2010/11/11, 08 :57	0 - 13	0.094	0.083	0.085	2.372	1.327	1.385
		0 - 65	0.096	0.083	0.090	2.442	1.327	1.600
		65 - 194	0.095	0.079	0.078	2.409	1.111	1.014
		194 - 323	0.095	0.081	0.084	2.401	1.244	1.320
		323 - 452	0.088	0.082	0.082	2.141	1.286	1.204
		452 - 827	0.088	0.082	0.082	2.137	1.296	1.252

**Tableau 5.7** – FWHM observées mesurées en Å et les largeurs intrinsèques en vitesse données en km s<sup>-1</sup> pour les trois raies interdites de l’oxygène pour chaque comète et chaque sous-spectre. Pour les spectres *offsetés*, nous donnons la distance depuis le centre de la fente. Pour le troisième sous-spectre de la troisième observation de la comète 103P/Hartley 2, la raie à 6363.776 Å n’a pas pu être utilisée à cause d’une contamination par un rayon cosmique dans cette zone de pixels.



**FIGURE 5.19** – La largeur intrinsèque en vitesse de la raie à  $5577.339 \text{ \AA}$  en fonction de la distance au noyau donnée pour chaque sous-spectre de chaque comète. Les erreurs définies sur la distance et sur les largeurs sont ajoutées. Une décroissance de la largeur avec la distance nucléocentrique est observée pour toutes les comètes. En deçà de  $\sim 100 \text{ km}$ , nous remarquons un "plateau" dû à la convolution par le seeing.

A partir de celles-ci, nous constatons clairement que la raie verte est plus large que les raies du doublet rouge ( $\sim 2.5 \text{ km s}^{-1}$  contre  $\sim 1.5 \text{ km s}^{-1}$ ). Cette particularité a déjà été notée dans notre analyse précédente (cf. chapitre 4) et s'observe encore ici malgré qu'une soustraction des raies de  $C_2$  a été appliquée. De plus, la plus grande largeur de la raie verte est également observée pour la comète 73P-C alors que cette comète est connue pour être très pauvre en  $C_2$ . Dès lors, la plus grande largeur de la raie à  $5577.339 \text{ \AA}$  ne peut pas uniquement s'expliquer par des blends dus aux raies de  $C_2$ . Un blend avec les raies d'une autre molécule n'est pas exclu mais il est tout de même très peu probable.

La figure 5.19 montre également que la raie verte décroît au fur et à mesure que la distance au noyau augmente. Cette tendance est d'ailleurs plus flagrante pour C/2002 T7 et 103P étant donné que pour ces comètes, des spectres ont été acquis loin du noyau. De

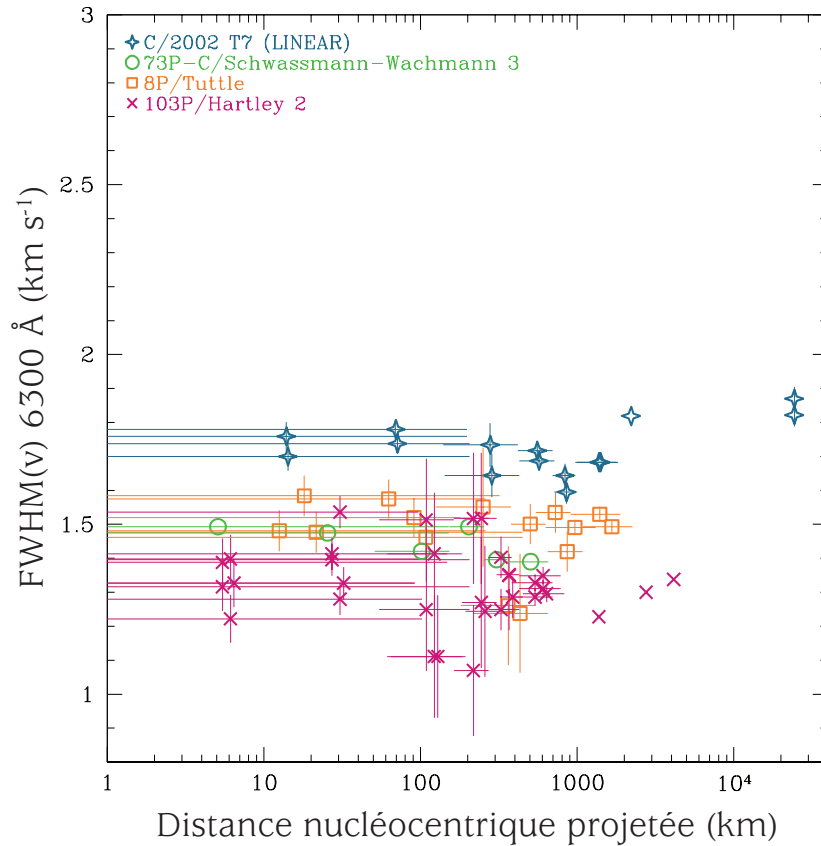


FIGURE 5.20 – Même figure que 5.19 mais pour la raie à 6300.304 Å.

plus, la largeur de la raie à 5577.339 Å mesurée à grande distance nucléocentrique tend vers celle mesurée pour les raies du doublet rouge. Les raies du doublet rouge ont une largeur constante quelle que soit la distance au noyau ( $1.74 \pm 0.04 \text{ km s}^{-1}$  pour C/2002 T7,  $1.40 \pm 0.08 \text{ km s}^{-1}$  pour 73P-C,  $1.45 \pm 0.08 \text{ km s}^{-1}$  pour 8P et  $1.30 \pm 0.09 \text{ km s}^{-1}$  pour 103P). En supposant que la décroissance de la largeur de la raie verte est linéaire, l'analyse de la régression linéaire, présentée dans la figure 5.22, montre que la raie verte devrait être aussi étroite que les raies rouges aux environs de  $\sim 5000 \text{ km}$  pour 103P et de  $\sim 35\,000 \text{ km}$  pour C/2002 T7.

D'autres observations réalisées à de grandes distances nucléocentriques seraient nécessaires pour confirmer cette hypothèse. Signalons que nous ne pouvons pas expliquer le comportement de décroissance par le quenching collisionnel étant donné qu'il n'est pas observé pour les raies rouges. En effet, comme Raghuram & Bhardwaj (2014) l'ont mentionné, les atomes de  $O(^1D)$  subissent davantage de collisions que les atomes de  $O(^1S)$  en raison de leur temps de vie plus long ( $\sim 120 \text{ s}$  pour  $O(^1D)$  et  $\sim 0.8 \text{ s}$  pour  $O(^1S)$ ). Dès

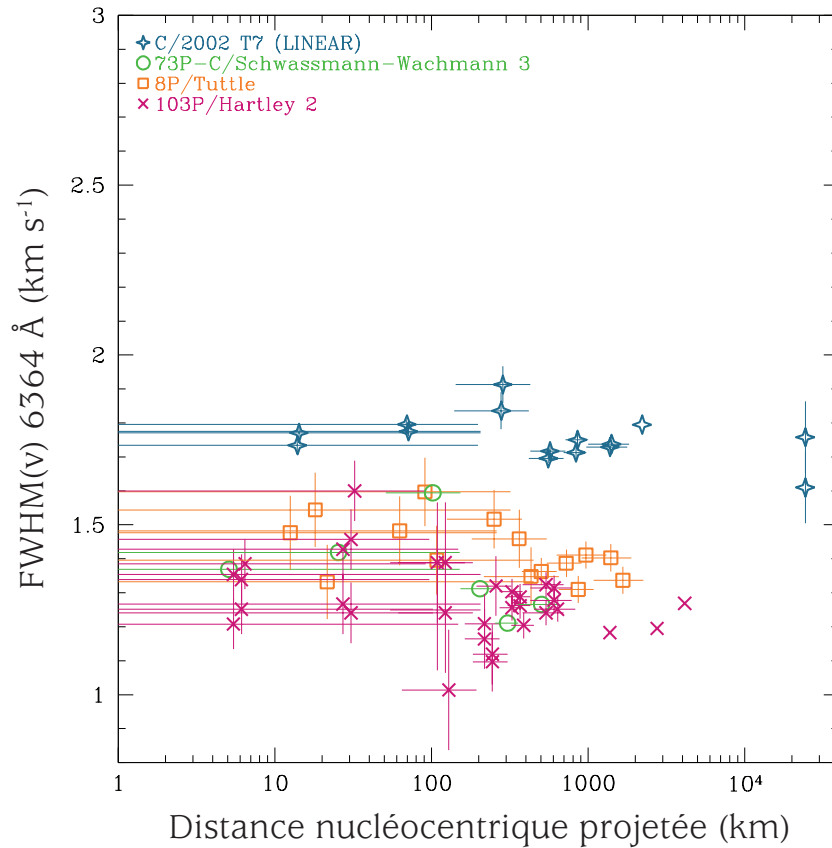
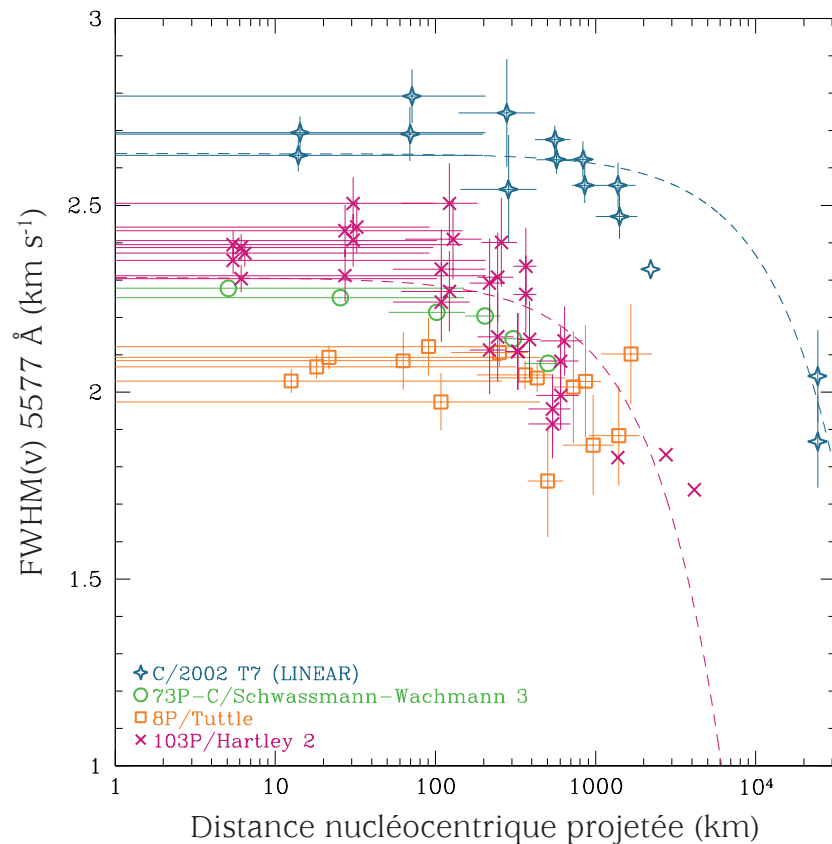


FIGURE 5.21 – Même figure que 5.19 mais pour la raie à 6363.776 Å.

lors, les collisions devraient induire un élargissement des raies rouges et non de la raie verte, ce qui n'est pas observé. La grande largeur de la raie verte mesurée près du noyau pourrait être expliquée par le fait que les atomes de  $O(^1S)$  seraient principalement produits par le  $CO_2$  dans la région proche du noyau. En effet, le flux solaire responsable de la production des atomes de  $O(^1S)$  via la photodissociation du  $CO_2$  provient de la région 955-1165 Å (Bhardwaj & Raghuram, 2012) qui est plus énergétique que les photons Lyman- $\alpha$ , considérés comme la source principale des atomes d'oxygène créés suite à la photodissociation de  $H_2O$ . Ces photons plus énergétiques peuvent en effet pénétrer plus en profondeur que les photons Lyman- $\alpha$  lorsque la coma est optiquement épaisse pour Lyman- $\alpha$ . Etant donné que la largeur de la raie est liée à la valeur de l'excès d'énergie résiduel après la photodissociation, une excitation par des photons plus énergétiques produit des raies plus larges, à l'instar de ce que nous remarquons pour la mesure de la raie verte près du noyau. Les excès énergétiques des différentes molécules parentes ont été évalués par Raghuram & Bhardwaj (2014). Ils ont trouvé que l'excès énergétique après





**FIGURE 5.22** – Régression linéaire pour les comètes 103P/Hartley 2 et C/2002 T7 (LINEAR).

la photodissociation du  $\text{CO}_2$  était plus important que celui mesuré après la photodissociation de  $\text{H}_2\text{O}$ . Par contre, quand les atomes de  $\text{O}^{\text{(I)S}}$  sont observés loin du noyau, ils seraient produits à la fois par la photodissociation de  $\text{CO}_2$  et celle de  $\text{H}_2\text{O}$  mais avec une contribution de plus en plus importante au plus on s'éloigne du noyau. Il en résulte alors une décroissance de la largeur de la raie verte avec l'augmentation de la distance au noyau.

Bisikalo et al. (2014) ont investigué une autre piste pour apporter une explication de la largeur de la raie verte. Le modèle Monte Carlo qu'ils ont utilisé, suggère que le profil de raie dépend également de la thermalisation due aux collisions élastiques existant dans la coma. Cependant, le processus de thermalisation conduit à un élargissement des raies rouges et non de la raie verte. Cela n'est donc pas en accord avec nos observations.

Sur les figures 5.19 à 5.21, nous constatons que la largeur des trois raies interdites de l'oxygène de la comète C/2002 T7 (LINEAR) est toujours plus grande que celle mesurée pour les autres comètes. Ceci s'explique par le taux de production d'eau de cette comète

qui est nettement plus élevé que ceux des trois autres comètes (cf. tableau 5.5). En effet, Tseng et al. (2007) ont montré que la vitesse d'expansion des molécules dans la coma augmentait avec le taux de production d'eau.

## 5.5 Conclusion

---

Quatre comètes d'origines variées ont été observées à de petites distances géocentriques avec le spectrographe UVES (VLT). 17 spectres à haute résolution spectrale et spatiale ont alors été collectés quand ces comètes passaient au plus proche de la Terre ( $<0.65$  ua), permettant d'étudier les raies de [OI] très près du noyau (jusqu'à  $\sim 100$  km de celui-ci). Certains de ces spectres ont été acquis avec la fente du spectrographe positionnée ("*offsetées*") à une certaine distance du noyau, jusqu'à 25 000 km. Les onze spectres centrés ont été spatialement extraits et binnés par zones de pixels dans le but de produire des sous-spectres à une dimension. Dès lors, les raies interdites de l'oxygène ont pu être étudiées dans 63 sous-spectres et 6 spectres offsetés se rapportant à différentes distances du noyau cométaire. Le rapport G/R et les largeurs intrinsèques en vitesse ont été calculés et ceux-ci ont été analysés dans l'optique de mieux comprendre les processus de production des atomes d'oxygène dans la coma. Les résultats obtenus nous amènent aux conclusions suivantes :

- Les blends causés par les raies de  $C_2$  ont été, dans un premier temps, identifiés et ensuite supprimés de la raie d'oxygène à  $5577.339 \text{ \AA}$ . Cette soustraction, effectuée pour la première fois, est importante étant donné que cette contamination modifie à la fois l'intensité et la largeur de la raie verte. Celle-ci est d'autant plus importante pour les comètes riches en  $C_2$  mais aussi pour les analyses effectuées très loin du noyau<sup>1</sup>. Toutefois, ces blends ne permettent pas d'expliquer la différence de largeur de la raie verte et des raies du doublet rouge.
- La haute résolution spatiale des données nous a permis de montrer que le profil du rapport G/R en fonction de la distance au noyau affichait la même tendance pour toutes les comètes étudiées. En effet, nous constatons une diminution rapide du rapport G/R avec la distance. En deçà de 1000 km du noyau, le G/R peut atteindre une valeur de 0.2. A de grandes distances nucléocentriques une valeur constante de G/R de 0.05 est par contre notée. La valeur du G/R de 0.1 mesurée lors de notre pré-

---

1. Notons que la correction du  $C_2$  n'a pas d'influence significative sur les conclusions de l'étude menée dans le chapitre 4

cédente analyse correspond donc bien à la moyenne des valeurs obtenues pour les données acquises proche et loin du noyau. Ce profil particulier est principalement expliqué par la présence de quenching collisionnel qui joue un rôle important dans la destruction des atomes de  $O(^1D)$  dans la coma interne ( $<1000$  km). Les molécules parentes à l'origine des atomes d'oxygène peuvent également contribuer à cette tendance. En effet, les atomes de  $O(^1D)$  sont seulement produits via la photodissociation de  $H_2O$  alors que les atomes de  $O(^1S)$  sont formés à la fois par les molécules de  $CO_2$  et de  $H_2O$ . Plus la distance au noyau augmente, plus la contribution relative de  $H_2O$  dans la production d'atomes  $O(^1S)$  deviendra importante et l'intensité de la raie verte diminuera. Dans la coma externe, tous les atomes d'oxygène sont formés uniquement via la photodissociation des molécules d'eau. Le rapport G/R atteint alors une valeur minimale de  $\sim 0.05$ , qui est en bon accord avec le rapport attendu dans le cas de l'eau seule (tableau 5.1).

- Nous avons ajusté un modèle décrit par Bhardwaj & Raghuram (2012) aux raies d'émission de l'oxygène mesurées. Ce travail nous a montré que les collisions provoquées par les molécules d'eau ne peuvent pas être négligées dans la coma interne. A partir des mesures des rapports G/R obtenues près du noyau, une estimation de l'abondance relative de  $CO_2$  a pu être déterminée pour toutes les comètes de l'échantillon.
- La raie verte d'oxygène est plus large (typiquement  $2.5 \text{ km s}^{-1}$ ) comparée aux raies du doublet rouge ( $1.5 \text{ km s}^{-1}$ ). Cette plus grande largeur est probablement due aux différentes molécules parentes à l'origine des atomes de  $O(^1D)$  et  $O(^1S)$ . Bhardwaj & Raghuram (2012) et Decock et al. (2013) l'avaient déjà suggéré : les raies vertes d'oxygène sont produites par les atomes d'oxygène venant de la photodissociation des molécules de  $CO_2$  et de  $H_2O$  alors que les raies rouges sont, quant à elles, principalement produites par les molécules de  $H_2O$ . Bien que les atomes de  $O(^1S)$  soient principalement créés par le  $CO_2$ , la contribution des molécules d'eau dans la formation de ces atomes  $O(^1S)$  augmente avec la distance nucléocentrique. Ceci explique, dès lors, la décroissance de la largeur de la raie à  $5577.339 \text{ \AA}$  lorsque la distance nucléocentrique devient supérieure à  $500 \text{ km}$ .

L'utilisation du modèle de Raghuram & Bhardwaj (2013) permet de déterminer l'abondance relative de  $CO_2$  dans les comètes. Cette déduction exige néanmoins des données acquises à différentes distances nucleocentriques, une bonne maîtrise de la soustraction des molécules de  $C_2$  et une connaissance précise de la valeur du seeing mesurée au moment

des observations. Une très bonne résolution spatiale est également requise afin de pouvoir extraire différentes zones de pixels et obtenir des mesures au plus proche du noyau.

# 6

---

## Observations de la comète C/2013 R1 (Lovejoy) avec le spectrographe HARPS-N

---

### Sommaire

---

<b>6.1</b>	<b>Introduction</b>	<b>155</b>
<b>6.2</b>	<b>Observations</b>	<b>156</b>
<b>6.3</b>	<b>Réduction</b>	<b>157</b>
<b>6.4</b>	<b>Mesure des raies interdites de l'oxygène [OI]</b>	<b>158</b>

---



## 6.1 Introduction

La comète C/2013 R1 (Lovejoy) est une comète à longue période découverte par Terry Lovejoy le 7 septembre 2013 au moyen d'un télescope de 0.2 m (Guido et al., 2013). La comète se trouvait alors à une distance héliocentrique de  $r = 1.94$  ua. Quelques mois plus tard, la comète a atteint son périhélie, plus précisément le 22 décembre 2013 à 0.81 ua du Soleil. La brillance de la comète l'a rendue visible à l'oeil nu pendant près d'un mois. Sa magnitude est en effet descendue jusque 4.5 lorsqu'elle est passée au plus près de la Terre ( $\Delta = 0.4$  ua). Au vu de sa brillance, les télescopes de 4 mètres et plus étaient suffisamment puissants pour permettre d'étudier sa composition chimique à partir de spectres à haute résolution.



**FIGURE 6.1** – Image de la comète C/2013 R1 (Lovejoy) acquise avec un filtre LRGB. Sa couleur verdâtre est due à la présence de molécules de  $C_2$  dans l'atmosphère de la comète.

Pour cette analyse, nous avons utilisé le télescope italien de 3.5 mètres TNG (*Telescopio Nazionale Galileo*) équipé du spectrographe échelle HARPS-N (*High Accuracy Radial Velocity Planet Search in the North hemisphere*) et installé à l'Observatoire *Roque de Los Muchachos* à La Palma (Cosentino et al., 2012). Cet instrument est une réplique du spectrographe HARPS installé sur le télescope de 3.6 mètres de La Silla (ESO). Les observations ont été menées non seulement dans l'optique d'étudier la composition chimique de cette comète mais aussi pour tester l'efficacité de l'instrument HARPS-N pour des observations cométaires étant donné que ces observations constituent les premiers spectres cométaires acquis avec ce spectrographe. HARPS-N est à la base dédié à la recherche des exoplanètes via la méthode de mesure des vitesses radiales des étoiles hôtes. Ce spectro-

graphe couvre une étendue spectrale de 3830 Å à 6930 Å et possède un pouvoir résolvant de  $R = 115\,000$ . Les observations s'effectuent au moyen d'une fibre dont l'ouverture a un diamètre de une seconde d'arc. Le spectrographe est également muni d'une seconde fibre distante de 114 secondes d'arc. Cette dernière est utilisée pour acquérir un spectre du ciel dans le but de soustraire le ciel des spectres obtenus avec la fibre objet. Notons que les spectres issus des deux fibres sont enregistrés simultanément.

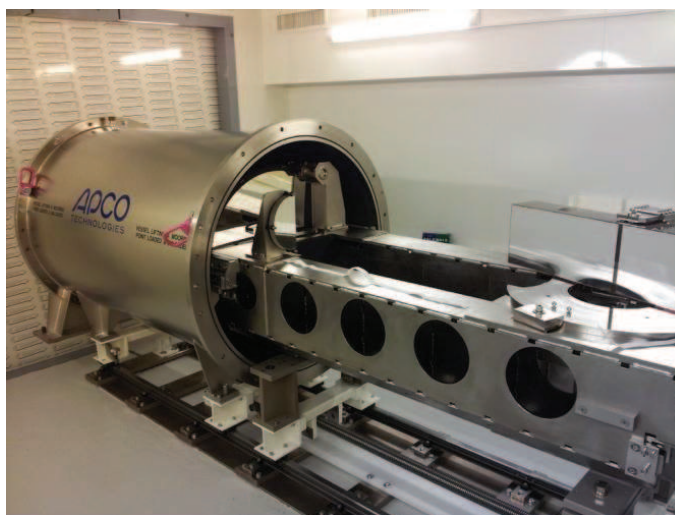


FIGURE 6.2 – Conception mécanique de l'instrument HARPS-North

## 6.2 Observations

Les paramètres observationnels du spectrographe restent fixes quelle que soit la cible afin d'optimiser les résultats scientifiques pour la détection des exoplanètes. Dans notre cas, nous avons donc positionné la fibre objet sur le noyau de la comète. Dès lors, la seconde fibre est placée sur le ciel ou la queue cométaire en fonction de l'orientation de la comète sur le ciel.

Une fois l'acquisition réalisée, les données sont automatiquement pré-traitées par le pipeline de réduction localisé à Trieste en Italie qui produit, à partir des spectres bruts à deux dimensions, des spectres à une dimension calibrés en longueur d'onde. Ils sont ensuite disponibles en ligne quelques heures après la nuit d'observation.

Les observations de la comète C/2013 R1 (Lovejoy) se sont déroulées durant quatre nuits qui ont succédé le passage au périhélie de la comète, c'est-à-dire les nuits du 23 au 26 décembre 2013. A ce moment, la comète était très basse sur l'horizon et les observations ont donc eu lieu juste avant et pendant le crépuscule astronomique. Lors de ces nuits d'observation, la distance héliocentrique de la comète était de 0.81 ua et sa distance géocentrique



valait  $\Delta = 0.95$  ua. La vitesse de la comète par rapport à la Terre était de  $\sim 33$  km s<sup>-1</sup>. Dès lors, le décalage Doppler est suffisant pour étudier les raies de l'oxygène sans qu'elles ne soient blendées avec les raies atmosphériques. Les paramètres observationnels de la comète sont donnés dans le tableau 6.1.

Date UT	Masse d'air	$r$ (ua)	$\dot{r}$ (km s <sup>-1</sup> )	$\Delta$ (ua)	$\dot{\Delta}$ (km s <sup>-1</sup> )	Exptime (s)
2013/12/23 ; 06 :37	3.4	0.81	0.42	0.92	33.68	1200
2013/12/23 ; 06 :57	2.8	0.81	0.43	0.92	33.68	1200
2013/12/23 ; 07 :15	2.4	0.81	0.44	0.92	33.69	925
2013/12/24 ; 06 :34	3.5	0.81	1.19	0.94	33.41	900
2013/12/24 ; 06 :52	2.9	0.81	1.20	0.94	33.41	1200
2013/12/24 ; 07 :12	2.4	0.81	1.21	0.94	33.41	1200
2013/12/25 ; 06 :41	3.2	0.81	1.97	0.96	33.10	900
2013/12/25 ; 06 :59	2.7	0.81	1.98	0.96	33.11	1200
2013/12/25 ; 07 :17	2.3	0.81	1.99	0.96	33.11	1000
2013/12/26 ; 06 :33	3.6	0.81	2.73	0.98	32.77	900
2013/12/26 ; 06 :51	2.9	0.81	2.74	0.98	32.77	1200
2013/12/26 ; 07 :12	2.4	0.81	2.75	0.98	32.78	1200

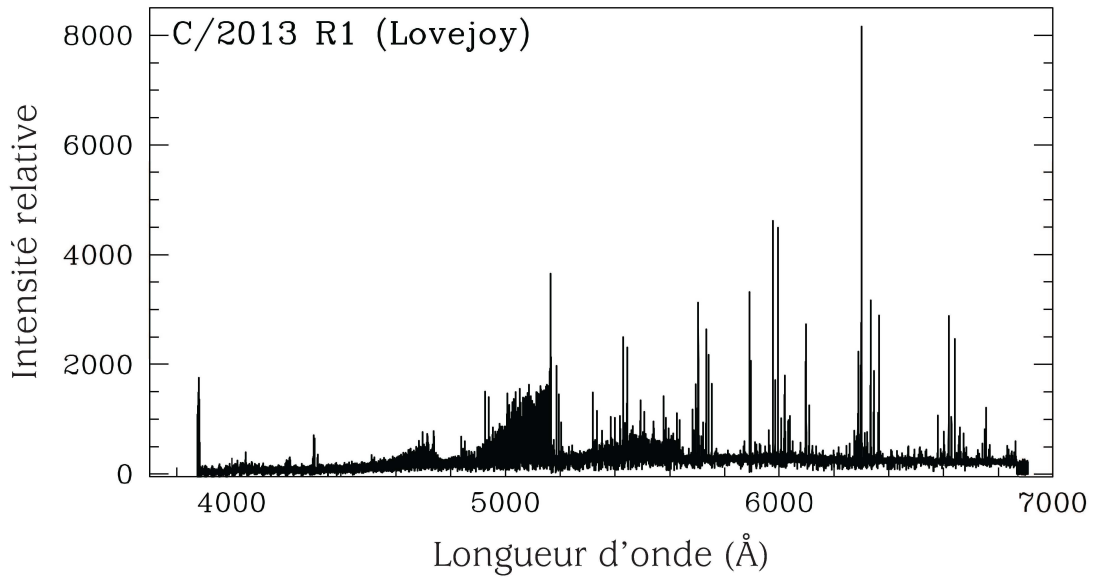
**Tableau 6.1** – Paramètres observationnels pour chaque spectre de la comète C/2013 R1 (Lovejoy). La Date UT correspond à la date d'observation,  $r$  représente la distance héliocentrique (en ua),  $\Delta$  est la distance géocentrique (en au).  $\dot{r}$  et  $\dot{\Delta}$  sont respectivement les vitesses héliocentriques et géocentriques (en km s<sup>-1</sup>). Exptime correspond au temps d'exposition, exprimé en secondes. La masse d'air donnée dans la deuxième colonne équivaut à la valeur mesurée au milieu du temps de pose.

## 6.3 Réduction

A partir des données pré-traitées générées par le pipeline de réduction de Trieste, nous avons calibré les spectres en flux relatif et soustrait le continu solaire. La calibration en flux a été établie en utilisant les spectres d'étoiles standards acquis juste avant les spectres cométaires. L'étoile standard a été choisie de telle sorte que sa masse d'air soit relativement proche de la masse d'air de la comète. La soustraction du continu solaire est réalisée au moyen d'un spectre solaire convolué avec la même résolution spectrale.

Après ce premier travail de réduction, les longueurs d'onde des spectres ont été corrigées des vitesses géocentriques et héliocentriques afin de présenter le spectre avec les raies cométaires dans un référentiel où la comète est au repos.

La courbe de réponse montre une sensibilité assez faible dans la partie bleue du spectre, pour les longueurs d'onde inférieures à 4200 Å. En dessous de 3900 Å, les données sont non utilisables.

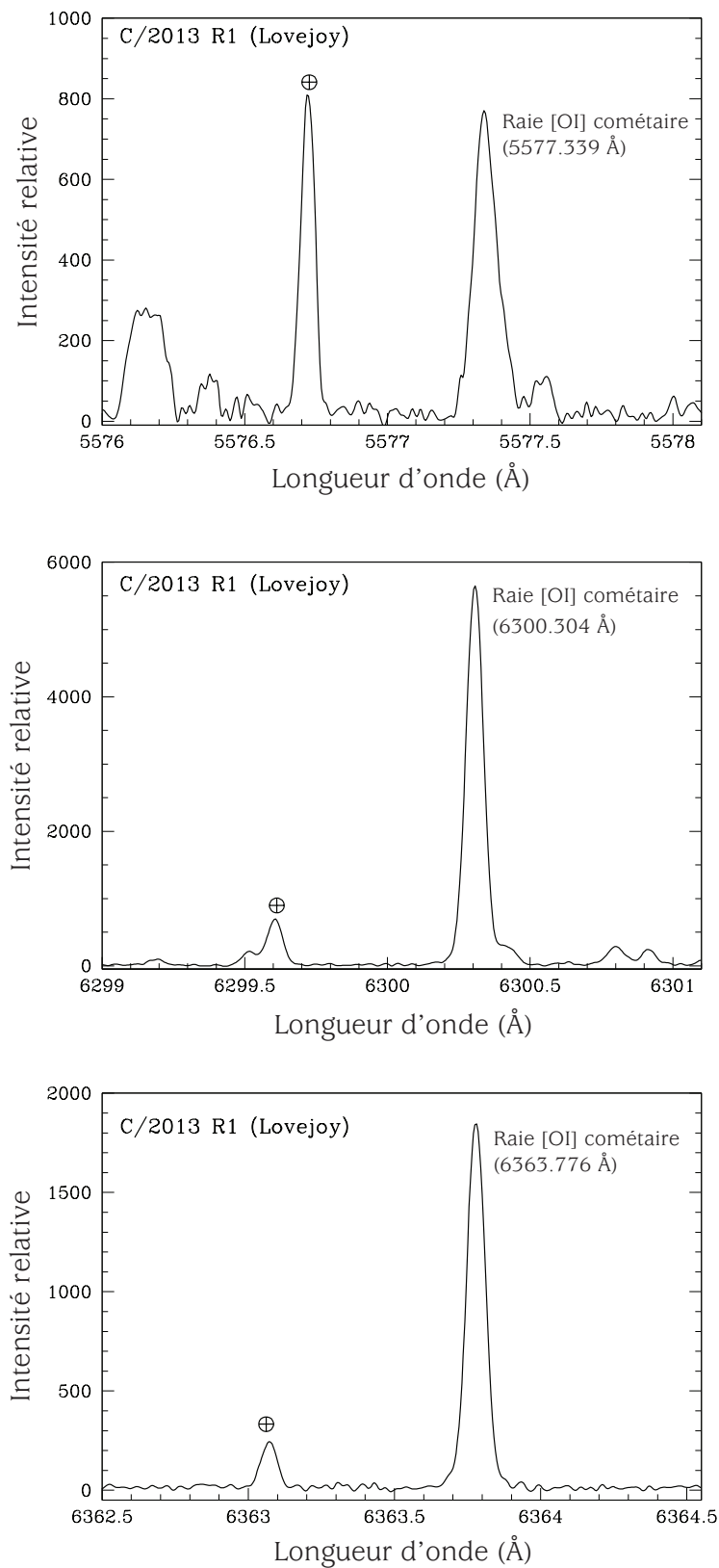


**FIGURE 6.3** – Spectre de la comète C/2013 R1 (Lovejoy) acquis le 25 décembre 2013 à 6h44 et pré-traité par le pipeline de réduction de Trieste.

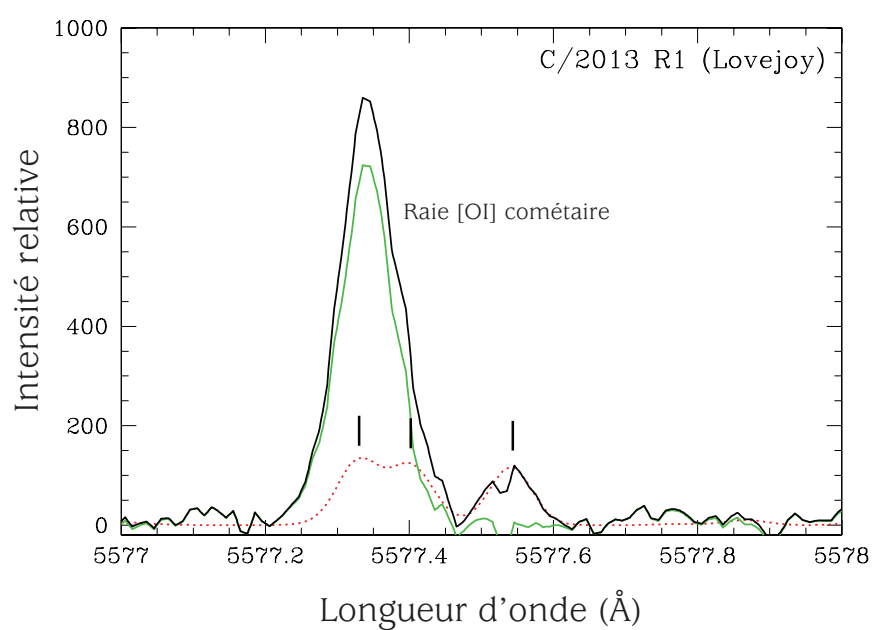
## 6.4 Mesure des raies interdites de l'oxygène [OI]

En premier lieu, nous avons produit des spectres synthétiques de la molécule de  $C_2$  suivant la méthode décrite au chapitre 5 afin de pouvoir soustraire les raies de  $C_2$  présentes en émission aux alentours de la raie d'oxygène à  $5577.339 \text{ \AA}$ . La soustraction de ces raies s'est réalisée en ajustant le spectre synthétique sur la raie de  $C_2$  à  $5577.541 \text{ \AA}$ . Ce travail nous a permis d'obtenir des spectres cométaires décontaminés des raies de  $C_2$  et des mesures précises du flux et de la largeur des raies d'oxygène ont alors pu être déduites. Les résultats obtenus pour les trois raies interdites de l'oxygène sont listés dans le tableau 6.2.

A partir des mesures du flux, les rapports d'intensité des raies du doublet rouge ( $I_{6300}/I_{6364}$ ) et de la raie verte sur la somme des raies rouges (G/R) ont été évalués et l'ensemble des résultats est repris dans le tableau 6.2. Les valeurs moyennes de ceux-ci, obtenues sur tout l'échantillon de spectres, sont de  $3.01 \pm 0.06$  pour le rapport  $I_{6300}/I_{6364}$  et de  $0.10 \pm 0.01$  pour le rapport G/R. Si nous comparons ce dernier résultat avec le tableau théorique 5.1 de Raghuram & Bhardwaj (2013), nous confirmons, une fois de plus, que les atomes d'oxygène proviennent principalement de la photodissociation des molécules de  $H_2O$  lorsque la comète est située à une distance héliocentrique de  $r \sim 1 \text{ ua}$ . La figure 6.6 reprend les résultats obtenus au chapitre 4 pour un échantillon de 12 comètes (en gris). Sur celle-ci, nous avons ajouté les valeurs du rapport G/R acquises à partir des observations de la comète C/2013 R1 (Lovejoy).



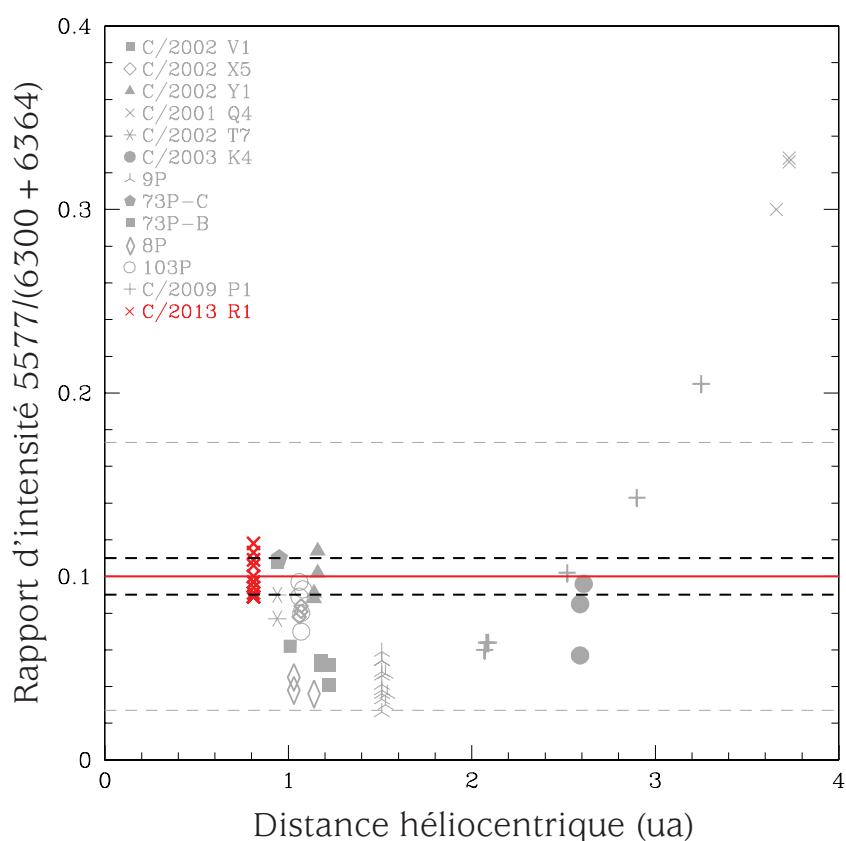
**FIGURE 6.4** – Les raies interdites d’oxygène à 5577.339 Å, 6300.304 Å et 6363.776 Å (telluriques ( $\oplus$ ) et cométaires) pour un spectre de la comète C/2013 R1 (Lovejoy) acquis le 25 décembre 2013 avec un temps de pose de 1200 secondes. La vitesse géocentrique de la comète ( $\Delta \sim 33 \text{ km s}^{-1}$ ) et la haute résolution du spectrographe HARPS-N font que les raies cométaires et telluriques sont bien séparées. Ces spectres ont été corrigés en longueur d’onde de façon à présenter les raies interdites de l’oxygène cométaires dans un référentiel où la comète est au repos.



**FIGURE 6.5** – Soustraction des raies du C<sub>2</sub> dans les spectres de la comète C/2013 R1 (Lovejoy). Le spectre noir correspond au spectre cométaire observé non corrigé du C<sub>2</sub>. Le spectre vert représente les données décontaminées des raies du C<sub>2</sub>. Le spectre synthétique du C<sub>2</sub> est donné en pointillés rouges. La position des raies de C<sub>2</sub> à 5577.331 Å, 5577.401 Å et 5577.541 Å est indiquée.

Date UT	Intensité (ADU)			$\frac{I_{6300}}{I_{6364}}$	G/R	FWHM <sub>observée</sub> (Å)			FWHM <sub>intrinsèque</sub> (km s <sup>-1</sup> )		
	5577.339 Å	6300.304 Å	6363.776 Å			5577.339 Å	6300.304 Å	6363.776 Å	5577.339 Å	6300.304 Å	6363.776 Å
2013/12/23 ; 06 :37	65	503	166	3.04	0.097	0.091	0.074	0.073	2.914	2.090	2.037
2013/12/23 ; 06 :57	70	489	160	3.06	0.109	0.089	0.073	0.073	2.849	2.076	2.046
2013/12/23 ; 07 :15	65	420	135	3.11	0.12	0.089	0.072	0.073	2.836	2.047	2.034
2013/12/24 ; 06 :34	40	314	103	3.05	0.097	0.088	0.072	0.073	2.824	2.036	2.032
2013/12/24 ; 06 :52	61	429	145	2.951	0.106	0.092	0.072	0.074	2.945	2.024	2.072
2013/12/24 ; 07 :12	69	458	153	2.99	0.113	0.092	0.072	0.073	2.928	2.044	2.043
2013/12/25 ; 06 :41	37	299	103	2.90	0.091	0.091	0.073	0.075	2.895	2.053	2.094
2013/12/25 ; 06 :59	59	467	153	3.04	0.094	0.093	0.074	0.073	2.974	2.088	2.034
2013/12/25 ; 07 :17	55	411	137	2.99	0.100	0.091	0.074	0.073	2.892	2.090	2.049
2013/12/26 ; 06 :33	34	286	97	2.94	0.089	0.093	0.072	0.074	2.973	2.036	2.063
2013/12/26 ; 06 :51	49	409	137	2.99	0.089	0.093	0.074	0.075	2.986	2.079	2.103
2013/12/26 ; 07 :12	52	438	-	-	-	0.092	0.073	-	2.943	2.070	-
<b>Moyennes</b>				<b>3.01 ± 0.06</b>	<b>0.10 ± 0.01</b>				<b>2.913 ± 0.055</b>	<b>2.061 ± 0.024</b>	<b>2.055 ± 0.025</b>

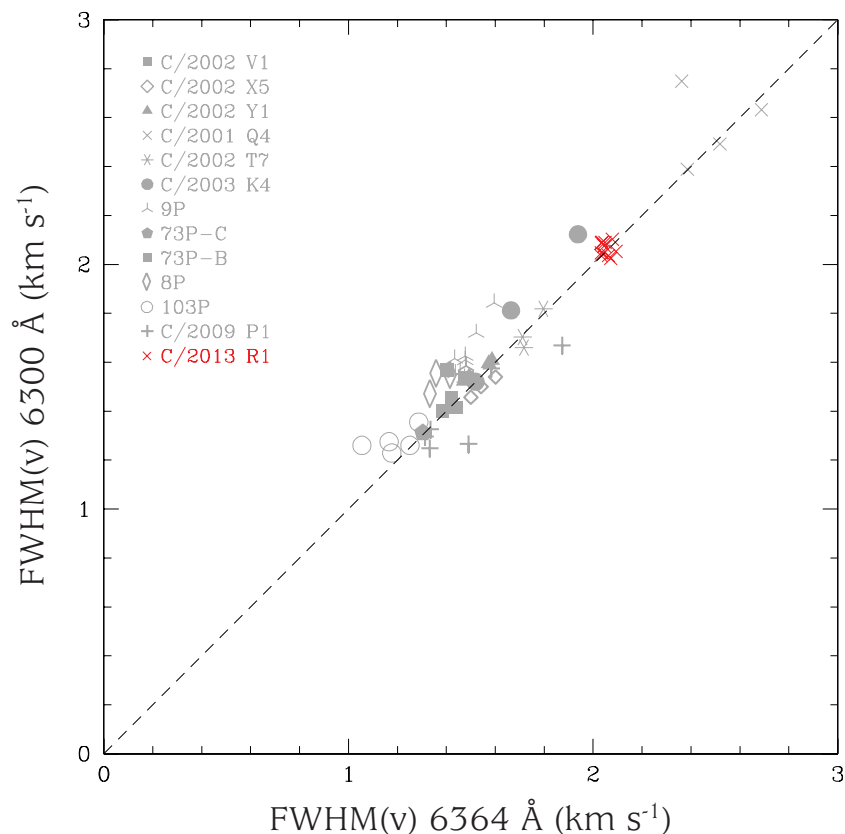
**Tableau 6.2** – Intensités des trois raies interdites de l’oxygène exprimées en ADU (Analog-to-Digital Units). Rapports d’intensité et largeurs (observées et intrinsèques) mesurés pour tous les spectres de la comète C/2013 R1 (Lovejoy). La mesure de l’intensité de la raie à 6363.776 Å du dernier spectre n’a pas été possible en raison d’une contamination de la raie par un rayon cosmique.



**FIGURE 6.6** – Rapports d'intensité G/R obtenus pour la comète C/2013 R1 (Lovejoy) et superposés aux rapports G/R obtenus pour les comètes observées avec le spectrographe UVES (cf. chapitre 4). Le trait plein rouge représente la valeur moyenne des rapports de C/2013 R1 uniquement et la déviation standard correspondante est indiquée par les traits pointillés noirs.

En ce qui concerne les largeurs intrinsèques des raies interdites de l'oxygène, nous constatons à nouveau que les raies rouges sont similaires aux barres d'erreur près ( $2.06 \pm 0.02$  pour la raie à  $6300.309 \text{ \AA}$  et  $2.06 \pm 0.03$  pour la raie à  $6363.776 \text{ \AA}$ ). De plus, la raie verte est également observée plus large que les raies du doublet rouge à l'instar de ce qui a été trouvé pour les comètes observées avec le spectrographe UVES (cf. chapitre 4). Une analyse graphique des largeurs des raies est présentée sur les figures 6.7 et 6.8.

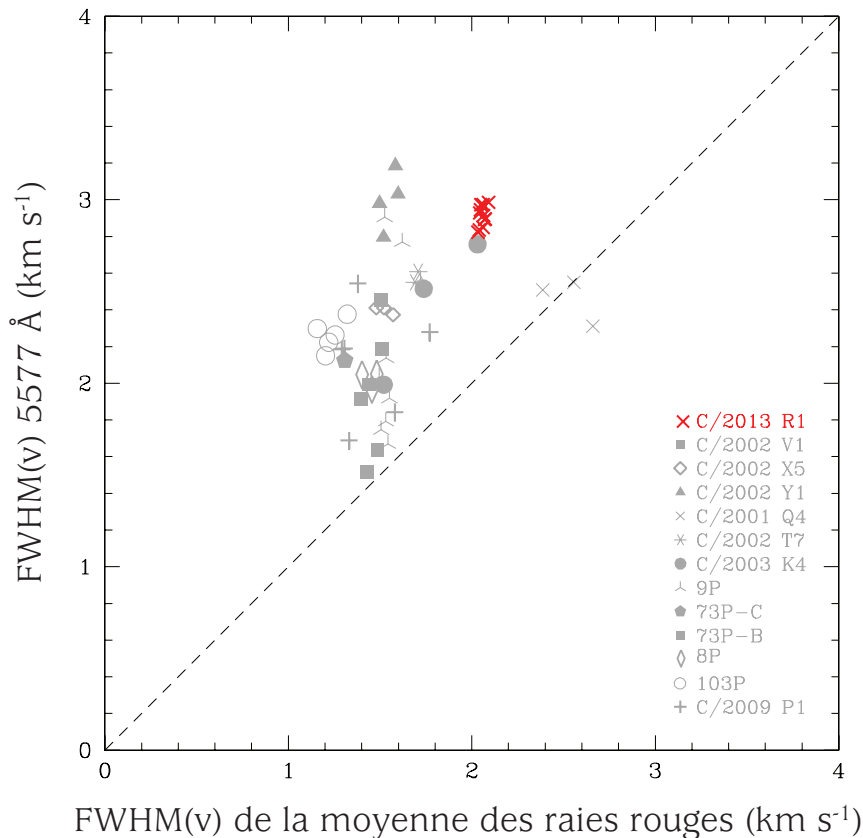
Au vu de la figure 6.7, nous remarquons, qu'en ajoutant les données pour C/2013 R1 (Lovejoy), une dispersion importante est notable pour les largeurs des raies rouges en fonction des comètes. Les largeurs peuvent varier de  $\sim 1.2 \text{ km s}^{-1}$  à presque  $3 \text{ km s}^{-1}$ . La question qui se pose alors est de savoir quel(s) paramètre(s) pourrai(en)t produire cet effet ? Tout d'abord, nous avons pensé que le taux de production d'eau pourrait avoir une influence sur la largeur des raies. Cependant, comme nous l'avons montré au chapitre 4, aucune tendance ne semble ressortir des figures 4.18 et 4.19. La largeur de la raie rouge pourrait aussi dépendre de l'abondance en  $\text{CO}_2$  de la comète. En effet, au plus l'abondance



**FIGURE 6.7** – Largeur de la raie à 6300.304 Å en fonction de la largeur de la raie à 6363.776 Å pour les spectres de la comète C/2013 R1 (Lovejoy). Ces résultats ont été superposés aux résultats obtenus pour l'échantillon de comètes observées avec le spectrographe UVES (cf. chapitre 4).

est élevée, au plus le  $\text{CO}_2$  pourrait jouer un rôle dans la production des atomes de  $\text{O}(^1\text{D})$  et donc produire des raies rouges plus larges. Une étude des largeurs des raies rouges et verte en fonction de l'abondance de  $\text{CO}_2$  dans les comètes serait intéressante. Le problème est que les abondances de  $\text{CO}_2$  sont très peu connues dans les comètes étant donné qu'une mesure précise de cette molécule est uniquement possible depuis l'Espace. Toutefois, nous avons montré au chapitre 4 que le rapport G/R variait avec l'abondance relative du dioxyde de carbone. Dès lors, nous avons analysé les largeurs intrinsèques des raies du doublet rouge entre elles ainsi que la largeur intrinsèque de la raie à 5577.339 Å en fonction de la moyenne des raies rouges pour les comètes observées aux alentours de 1 ua, et en ajoutant à ces graphiques un code couleur représentant la valeur du rapport G/R. Nous pouvons ainsi visualiser l'effet de l'abondance relative du  $\text{CO}_2$  sur la largeur des raies, en supposant évidemment que le rapport G/R reflète le rapport  $\text{CO}_2/\text{H}_2\text{O}$  (cf. figures 6.9 et 6.10).

Deux tendances semblent se manifester sur la figure 6.10. La première, "verticale", indiquerait qu'au plus l'abondance de  $\text{CO}_2$  est importante, au plus le largeur de la raie rouge



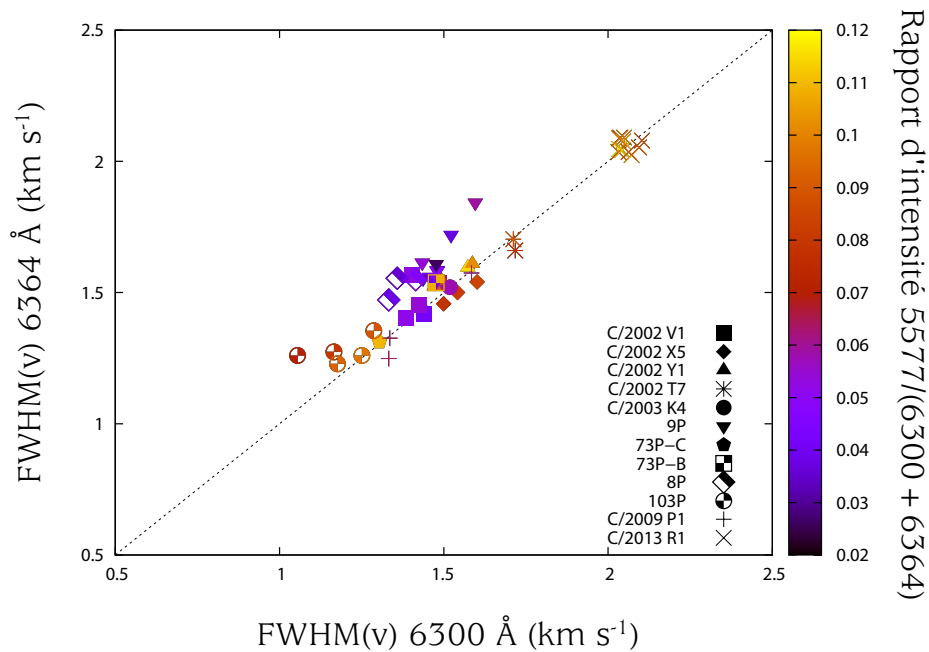
**FIGURE 6.8** – Largeur de la raie verte à 5577.339 Å en fonction de la largeur moyenne des raies du doublet rouge pour les spectres de la comète C/2013 R1 (Lovejoy). Ces valeurs ont été superposées aux résultats obtenus pour l'échantillon de comètes observées avec le spectrographe UVES (cf. chapitre 4).

augmente. Ceci serait assez logique si on considère qu'une abondance en  $\text{CO}_2$  élevée entraînerait la production de  $\text{O}(^1\text{D})$  via la photodissociation de  $\text{CO}_2$ . Ensuite, une deuxième, linéaire, pourrait se dessiner. Cependant, la raison de cette tendance demeure inconnue. Au vu des points de C/2013 R1 (Lovejoy) assez décalés, nous pourrions penser que la largeur instrumentale considérée lors du calcul de la largeur intrinsèque n'est peut-être pas bien définie. Cependant, en regardant l'influence de cette largeur instrumentale sur la largeur des raies rouges (cf. figure 6.11), aucune tendance nette n'est observée.

Comme déjà signalé dans les chapitres précédents, ces résultats nous montrent finalement qu'une résolution instrumentale plus élevée serait souhaitable pour obtenir une mesure plus précise des largeurs des raies.

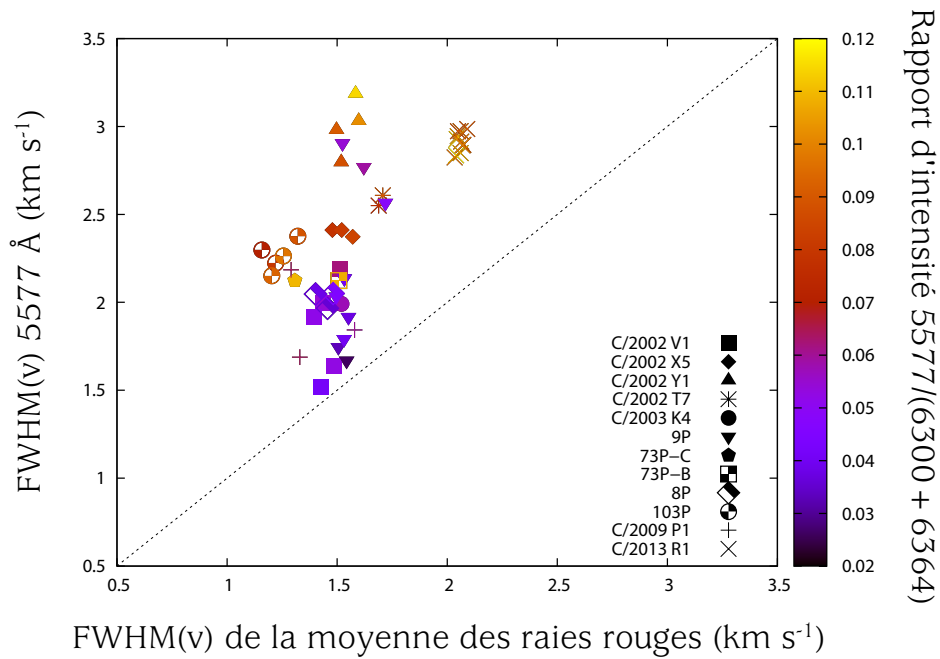
Cela dit, les résultats obtenus pour la comète C/2013 R1 (Lovejoy) montrent que l'utilisation de l'instrument HARPS-North du TNG est concluante pour les observations cométaires. En effet, ce spectrographe à fibre possède les qualités requises pour acquérir des



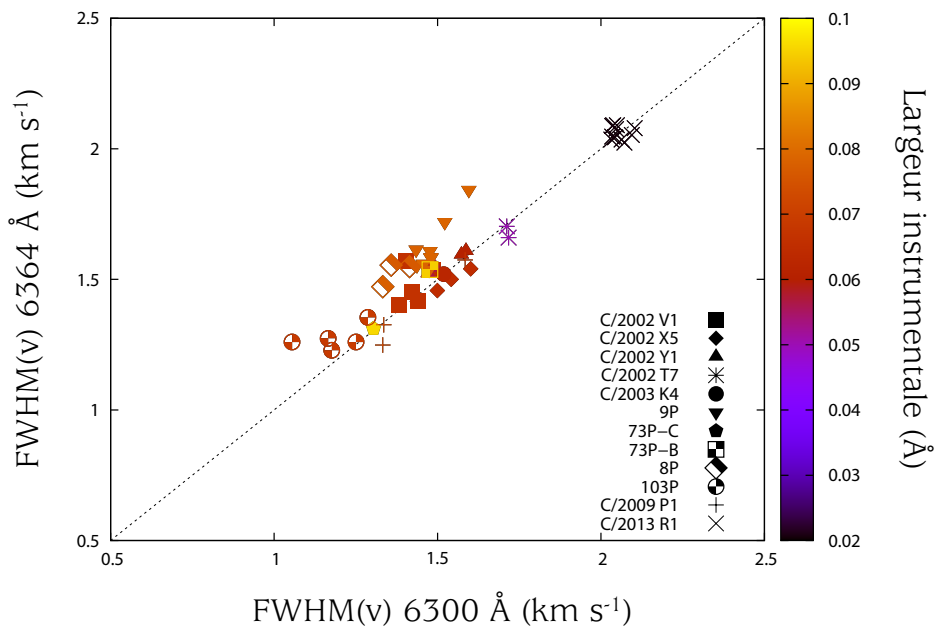


**FIGURE 6.9** – Largeur de la raie à 6363.776 Å en fonction de la largeur de la raie à 6300.304 Å pour les comètes observées aux alentours de  $\sim 1$  ua. Les spectres d’une même comète sont représentés par des symboles identiques. La couleur adoptée par les symboles reflète la valeur du rapport G/R.

spectres cométaires pour lesquels les trois raies interdites de l’oxygène ont été clairement détectées. Dès lors, il représente une bonne alternative pour l’analyse de l’oxygène des comètes de l’hémisphère nord. Notons tout de même que, par rapport à UVES, la fibre de HARPS-North ne peut être décalée facilement de quelques secondes d’arc par rapport au noyau cométaire. Une étude de l’oxygène à différentes distances nucléocentriques ne peut donc être envisagée dans ce cas.



**FIGURE 6.10** – Largeur de la raie verte à  $5577.339 \text{ \AA}$  en fonction de la largeur moyenne des raies du doublet rouge pour les comètes observées aux alentours de  $\sim 1 \text{ ua}$ . Les spectres d'une même comète sont représentés par des symboles identiques. La couleur adoptée par les symboles reflète la valeur du rapport G/R.



**FIGURE 6.11** – Largeur de la raie à  $6363.776 \text{ \AA}$  en fonction de la largeur de la raie à  $6300.304 \text{ \AA}$  pour les comètes observées aux alentours de  $\sim 1 \text{ ua}$ . Les spectres d'une même comète sont représentés par des symboles identiques. La couleur adoptée par les symboles reflète la valeur de la largeur instrumentale ( $\text{\AA}$ ).

## PARTIE III

## RADICAL OH



*"Il est bien des choses qui ne paraissent impossibles que tant qu'on ne les a pas tentées."*

André Gide



# 7

---

## Présentation du code de modélisation du processus de fluorescence de la molécule OH

---

### Sommaire

---

<b>7.1</b>	<b>Introduction</b>	<b>173</b>
7.1.1	Les rapports isotopiques	173
7.1.2	Le fractionnement isotopique, une signature interstellaire dans les comètes ?	176
7.1.3	Comment mesurer les rapports isotopiques ?	177
<b>7.2</b>	<b>Fluorescence de la molécule OH dans les comètes</b>	<b>178</b>
7.2.1	Processus de fluorescence	178
7.2.2	Modélisation du processus de fluorescence	179
<b>7.3</b>	<b>Notre modèle de fluorescence de la molécule OH et ses isotopologues <sup>18</sup>OH et OD</b>	<b>181</b>
7.3.1	Utilité d'un tel outil numérique	181
7.3.2	Description de notre modèle	183
<b>7.4</b>	<b>Validation du code et application à des spectres cométaires</b>	<b>189</b>
7.4.1	Test du modèle de fluorescence de OH sur quelques comètes de notre échantillon	189

---

7.4.2	Analyse des comètes C/2002 T7 (LINEAR) et C/2012 F6 (Lemmon) et mesure des rapports isotopiques . . . . .	196
<b>7.5</b>	<b>Les raies <i>promptes</i> de OH du proche ultraviolet . . . . .</b>	<b>205</b>
<b>7.6</b>	<b>Conclusion . . . . .</b>	<b>207</b>

---



---

## 7.1 Introduction

---

### 7.1.1 Les rapports isotopiques

Comme présenté dans le chapitre 2, les comètes font partie des objets les mieux préservés de la nébuleuse solaire primitive. L'abondance des isotopes stables de leurs éléments légers n'aurait donc pratiquement pas évolué depuis leur formation, il y a 4.57 milliards d'années. Etudier les rapports isotopiques dans la matière cométaire peut donc, d'une part, nous apporter des informations sur les comètes elles-mêmes, comme leur lieu de formation, mais aussi sur les premiers instants de notre Système Solaire, sa formation et son évolution (Jehin et al., 2006, 2009). Dans cette optique, il est important de mesurer les rapports isotopiques dans des comètes d'origines variées, c'est-à-dire provenant de différentes régions du Système Solaire et aussi dans différentes molécules étant donné que les espèces ne se sont pas toutes formées au même moment et peuvent donc avoir été créées sous des conditions physiques et chimiques différentes.

Il y a une cinquantaine d'années, les premières mesures du rapport isotopique du carbone dans la molécule de  $C_2$  ont été réalisées (Stawikowski & Greenstein, 1964; Danks et al., 1974), mais c'est depuis la fin des années nonantes que l'intérêt pour la recherche des rapports isotopiques s'est accru. Ces rapports étant très difficiles à mesurer, l'arrivée de comètes brillantes, comme C/1996 B2 (Hyakutake) et C/1995 O1 (Hale-Bopp), ainsi que la mise en opération des très grands télescopes, comme le VLT, les télescopes américains Keck et japonais Subaru, ont ouvert de nouvelles possibilités. Ainsi, les rapports isotopiques du carbone, de l'azote et du soufre déduits des molécules de HCN, CN,  $C_2$  et CS se sont ajoutés à la liste des mesures isotopiques (Jewitt et al., 1997; Ziurys et al., 1999; Arpigny et al., 2003; Ehrenfreund et al., 2004; Jehin et al., 2004; Bockelée-Morvan et al., 2004, 2008; Jehin et al., 2009; Rousselot et al., 2012). Les résultats amenés par ces analyses ont conduit à la conclusion que les rapports isotopiques du carbone et du soufre sont en très bon accord avec la valeur du Système Solaire. Cela amène à dire que soit le nuage d'origine était de composition solaire, soit que les rapports isotopiques ont été fixés dans la nébuleuse protosolaire. Arpigny et al. (2003) ont par contre montré que le rapport  $^{14}N/^{15}N$  déterminé à partir du CN est enrichi d'un facteur deux par rapport à la valeur terrestre. Plus récemment, Rousselot et al. (2014) et Shinnaka et al. (2014) ont abouti à la même conclusion concernant la valeur du  $^{14}N/^{15}N$  déduite, cette fois, de la molécule de  $NH_2$ . Ces résultats indiquent que le fractionnement isotopique peut différer d'une molécule à l'autre (Ehrenfreund et al., 2004).

L'étude portée sur le sujet s'est également étendue à l'analyse des rapports isotopiques D/H et  $^{16}O/^{18}O$  dans les comètes. La détermination du rapport D/H est particulièrement

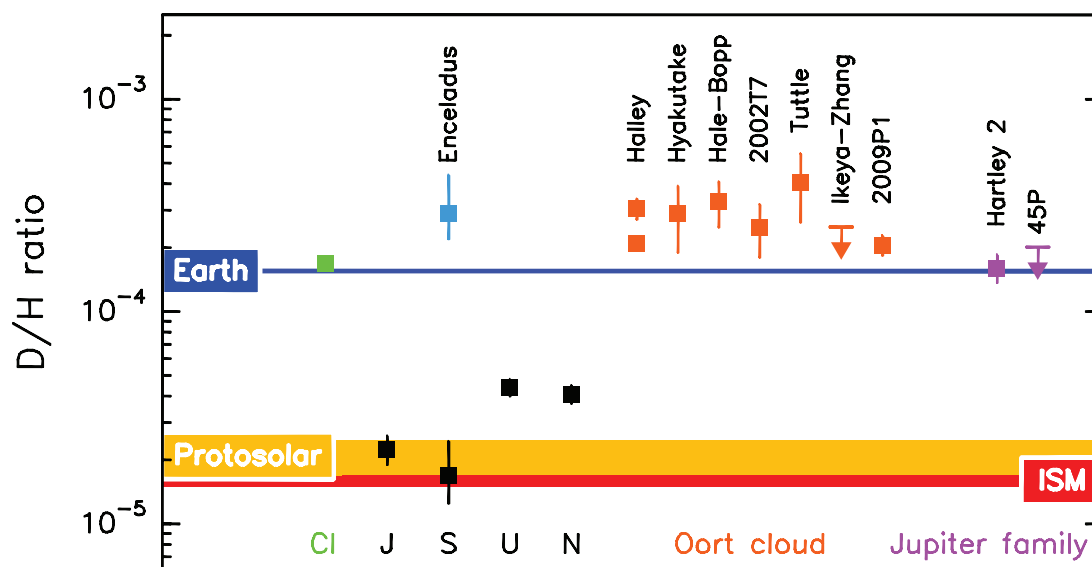
intéressante car elle se place au coeur des recherches actuelles sur l'origine des océans terrestres. En effet, Oró (1961) et Owen et al. (1992) ont proposé un modèle selon lequel la proto-Terre, sèche, aurait accrété l'eau au cours de son évolution suite aux impacts reçus d'astéroïdes et de comètes. Afin de conforter cette hypothèse, l'idée est de mesurer le rapport D/H dans les comètes et les astéroïdes et de le comparer au D/H des océans terrestres ( $D/H \text{ (SMOW)}^1 = 1.556 \cdot 10^{-4}$ ). La détermination du D/H dans les comètes peut être amenée au moyen de différentes méthodes. Premièrement, Eberhardt et al. (1995) et Balsiger et al. (1995) ont déterminé le D/H dans la comète 1P/Halley grâce à des mesures *in situ* de l'abondance des isotopes de  $H_2O$  obtenues par le spectromètre de masse placé à bord de la sonde Giotto ( $D/H_{\text{Eberhardt}} = (3.16 \pm 0.34) \cdot 10^{-4}$  et  $D/H_{\text{Balsiger}} = (3.08^{+0.38}_{-0.53}) \cdot 10^{-4}$ ). L'observation des comètes avec les télescopes sub-millimétriques de pointe a conduit à l'obtention de la valeur de D/H pour des comètes brillantes comme C/1996 B2 (Hyakutake) (Bockelée-Morvan et al., 1998) et C/1995 O1 (Hale-Bopp) (Meier et al., 1998a,b). A partir des spectres obtenus au sol avec le spectrographe à haute résolution UVES (ESO, VLT), Hutsemékers et al. (2008) ont pu déduire la valeur du D/H dans la comète C/2002 T7 (LINEAR) à partir des isotopes de la molécule OH. Une dernière mesure de D/H a été obtenue grâce à l'instrument HIFI du télescope spatial Herschel pour la comète C/2009 P1 (Garradd) (Bockelée-Morvan et al., 2012).

Toutes ces mesures viennent de comètes en provenance du nuage de Oort et présentent un D/H plus élevé que celui mesuré au niveau terrestre. Cela amène à la conclusion que les comètes ne pourraient avoir contribué que pour au maximum 10 % des océans terrestres. Cependant, plus récemment, Hartogh et al. (2011) ont trouvé un rapport D/H similaire au rapport terrestre dans la comète de la famille de Jupiter 103P/Hartley 2, dont l'origine n'est pas le nuage de Oort mais la ceinture de Kuiper (cf. figure 7.1.) Cette découverte a donc relancé le débat sur la possible contribution cométaire à l'origine des océans sur Terre.

La mesure du rapport isotopique  $^{16}O/^{18}O$  est également primordiale pour en apprendre davantage sur les origines du Système Solaire et sur les comètes elles-mêmes, mais également pour la mesure du D/H de certaines comètes, obtenue à partir des isotopes de  $H_2O$ . En effet, lorsque la comète est brillante, la raie de  $H_2^{16}O$  est optiquement épaisse (Zakharov et al., 2007) et non utilisable avec les modèles habituels. La valeur du rapport  $^{16}O/^{18}O$  obtenue de façon indépendante permet alors de déterminer le D/H en connaissant uniquement l'intensité de la raie de  $H_2^{18}O$  qui est, quant à elle, optiquement fine, vu la plus faible abondance de cet élément. Pour l'analyse de la comète 103P/Hartley 2 menée par Hartogh et al. (2011), le rapport  $^{16}O/^{18}O$  n'a malheureusement pas été déterminé de façon indépendante et celui-ci a été supposé égal à  $500 \pm 50$  afin de pouvoir fournir la valeur

---

1. SMOW est l'acronyme de Standard Mean Ocean Water



**FIGURE 7.1** – Le rapport D/H pour différentes comètes du nuage de Oort et de la famille de Jupiter. Ces mesures tiennent compte de la valeur revisitée pour 1P/Halley par Brown et al. (2012) et sont présentées en comparaison avec les valeurs du D/H des météorites carbonées (CI), de l’eau des océans terrestres et d’Encelade. Le D/H déterminé à partir de la molécule  $H_2$  est également fourni pour les planètes, le milieu interstellaire (ISM) et la nébuleuse protosolaire. Figure extraite de l’article de Lis et al. (2013).

du D/H. Diverses méthodes peuvent conduire à l’obtention du rapport  $^{16}O/^{18}O$ . Le spectromètre de masse de la sonde Giotto a, par exemple, permis la mesure de  $^{16}O/^{18}O$  pour la comète 1P/Halley (Eberhardt et al., 1995; Balsiger et al., 1995). Les observations menées par le satellite Odin ont conduit à la détermination du rapport  $^{16}O/^{18}O$  pour les comètes Ikeya-Zhang, C/2001 Q4 (NEAT), C/2002 T7 (LINEAR) et C/2004 Q2 (Machholz) (Biver et al., 2007). Enfin, lorsque la comète n’est pas trop active, la raie de  $H_2^{16}O$  n’est pas saturée et la mesure des intensités des raies de  $H_2^{16}O$  et  $H_2^{18}O$  nous offre la détermination du rapport  $^{16}O/^{18}O$ . C’est ainsi que le rapport  $^{16}O/^{18}O$  a été obtenu pour la comète C/2009 P1 (Garradd) grâce aux observations HIFI du télescope spatial Herschel (Bockelée-Morvan et al., 2012). Toutes ces mesures sont consistantes avec le rapport  $^{16}O/^{18}O$  défini sur Terre ( $^{16}O/^{18}O$  (SMOW) = 499).

Vu l’intérêt de la mesure des rapports isotopiques et plus particulièrement du rapport D/H, nous proposons de mener à bien la création d’un modèle de fluorescence pour la molécule OH et ses isotopologues  $^{18}OH$  et OD dans le but de déterminer les rapports D/H et  $^{16}O/^{18}O$  à partir des spectres obtenus avec le spectrographe UVES (VLT).

### 7.1.2 Le fractionnement isotopique, une signature interstellaire dans les comètes ?

Le fractionnement isotopique décrit la répartition des isotopes d'un élément et peut varier en fonction non seulement de la molécule considérée mais aussi pour une même molécule mais provenant de régions diverses. Différentes molécules du milieu interstellaire offrent par exemple un large panel de valeurs pour le rapport D/H. Ceccarelli (2002) a en effet montré qu'en fonction de la molécule d'origine, ce rapport pouvait valoir entre  $1 \cdot 10^{-4}$  pour  $\text{H}_2\text{O}$  et 0.5 pour le formaldéhyde ( $\text{CH}_2\text{O}$ ). Certaines molécules présentent donc un enrichissement en deutérium, nommé *superdeutériation*. D'autres analyses ont montré qu'une telle *superdeutériation* était observée dans coeurs préstellaires à l'origine des étoiles de faibles masses (Roberts et al., 2002) alors que le D/H mesuré à partir des molécules présentes dans des régions de formation d'étoiles massives est généralement plus faible et comparable à celui des comètes. Pourtant, les régions de formations d'étoiles de faibles masses ressemblent physiquement davantage au type de nébuleuse protosolaire dans laquelle les comètes sont nées. Une première hypothèse qui peut être avancée serait que le rapport D/H du nuage protosolaire se soit en quelques sortes "dilué" par réactions chimiques durant la phase d'accrétion du disque (Ehrenfreund et al., 2004). Si tel est le cas, nous devrions observer des rapports D/H différents entre l'enveloppe du disque et l'endroit où la proto-étoile s'est formée. Cependant, à ce jour, seule une mesure du D/H à partir de l'ion  $\text{DCO}^+$  a été réalisée dans le disque par van Dishoeck et al. (2003) et ils ont trouvé un D/H comparable aux régions de formation des étoiles de faibles masses, donc plus élevé que celui des comètes.

A ce stade, les comètes semblent dès lors moins enrichies en deutérium que le matériel à partir duquel elles se sont formées dans la nébuleuse protosolaire. Toutefois, avant de tirer des conclusions hâtives, il faudrait d'abord intensifier les mesures en déterminant, notamment, le D/H des comètes à partir de molécules observées dans le milieu interstellaire comme le formaldéhyde ( $\text{CH}_2\text{O}$ ), l'ammoniac ( $\text{NH}_3$ ) ou encore le méthanol ( $\text{CH}_3\text{OH}$ ). Si le D/H déduit de ces molécules dans les comètes est faible, alors une explication pourrait être que le D/H des comètes serait le résultat d'une "érosion" du D/H primitif. Une autre supposition, proposée par Aikawa & Herbst (1999) serait que la chimie des molécules dans la nébuleuse pourrait aussi contribuer à la diminution du fractionnement interstellaire. Au final, tout ceci est loin d'être aisé. Afin d'apporter une explication précise, il serait pertinent d'acquérir des mesures du rapport D/H dans les comètes à partir de molécules pour lesquelles une mesure du D/H dans le milieu interstellaire est connue et élevée. La connaissance du rapport D/H dans les comètes permet donc de rendre compte des liens

qui pourraient exister entre les comètes et le milieu interstellaire.

Comme nous l'avons déjà signalé, au sein des comètes, la mesure des rapports isotopiques amène à des résultats différents. Ces variations sont liées au parent d'origine qui a subi un fractionnement plus ou moins important. De plus, la mesure des rapports isotopiques obtenue dans différentes matières peut nous permettre d'établir un lien entre elles. Par exemple, le rapport  $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$  estimé à partir des isotopes de  $\text{NH}_2$  dans les comètes est similaire à la valeur trouvée pour Titan, une des lunes de Saturne. Cela semble donc montrer que les comètes et Titan se sont sans doute assemblés à partir de blocs ayant subi une formation commune dans la nébuleuse (Rousselot et al., 2014). Cette idée est renforcée par la mesure du D/H obtenue pour les panaches d'Encelade, également un satellite de Saturne, qui est similaire au D/H évalué dans les comètes du nuage de Oort (Waite et al., 2009; Kavelaars et al., 2011).

### 7.1.3 Comment mesurer les rapports isotopiques ?

La mesure des rapports isotopiques se base sur des observations cométaires provenant soit des spectromètres de masse soit de spectres acquis par des spectrographes installés sur les télescopes spatiaux ou implantés au sol. La majorité des données disponibles à l'heure actuelle pour les analyses isotopiques découle de ces spectrographes. L'étude de celles-ci a permis de déterminer que les isotopes se manifestent sous la forme de raies plus ou moins intenses. Le rapport attendu entre OH et ses isotopes  $^{18}\text{OH}$  et OD est, respectivement de  $\sim 150$  et  $\sim 2000$ . Dans le cadre de ce travail, nous nous limiterons aux spectres obtenus grâce aux télescopes au sol. A partir de là, il nous restera à déterminer comment mesurer l'intensité des raies des molécules et leurs isotopologues afin de fournir la valeur des rapports isotopiques.

Le cas idéal pour toutes les molécules serait de réaliser un spectre de fluorescence, c'est-à-dire de calculer les populations des niveaux à l'équilibre en fonction du rayonnement solaire. Cette méthode s'applique très bien à la molécule OH et c'est celle-ci que nous adopterons en vue d'en déduire les rapports D/H et  $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$  (cf. section 7.4). Cependant, ce cas idéal n'est malheureusement pas adapté à toutes les molécules. En effet, certaines molécules mettent beaucoup de temps avant d'atteindre leur équilibre. C'est notamment le cas du  $\text{C}_2$  qui possède des transitions rotationnelles et vibrationnelles pures interdites, ce qui entraîne une désexcitation très lente, de l'ordre du millier de secondes (Arpigny, 1966). Le traitement de ce type de molécule passe alors par une approximation qui consiste à considérer des distributions boltzmaniennes avec des températures différentes pour des populations différentes. Pour  $\text{C}_2$ , Rousselot et al. (2012) ont divisé la population en deux et ont utilisé pour chacune d'elles une distribution de Boltzman différente, l'une avec une

température faible et l'autre avec une température élevée.

Deuxièmement, lorsque la molécule est triatomique, un nombre trop important de niveaux doit être intégré au calcul de fluorescence et souvent trop peu de probabilités de transition sont connues. Le nombre de degrés de liberté vibrationnels devient ingérable. Une astuce pour traiter les molécules triatomiques est de se contenter d'intégrer une seule transition vibronique, comme Rousselot et al. (2001) l'ont fait pour le cas de la molécule de  $C_3$ . Une autre méthode consiste à appliquer des distributions de Boltzman différentes aux populations relatives des différents niveaux. Cette approche a été utilisée par Shinnaka et al. (2014) pour l'étude du  $^{14}N/^{15}N$  dans la molécule de  $NH_2$ . Rousselot et al. (2014) ont adopté une autre procédure pour déterminer le  $^{14}N/^{15}N$ . Ils ont évalué ce rapport en effectuant un simple rapport direct des raies des isotopes  $^{14}NH_2$  et  $^{15}NH_2$  en moyennant sur plusieurs raies et sur plusieurs spectres cométaires. L'identification des raies isotopiques s'est réalisée en se référant à des spectres de laboratoire. Enfin, en ce qui concerne la mesure du rapport D/H à partir des isotopes de  $H_2O$ , l'épaisseur optique de  $H_2^{16}O$  doit être prise en compte dans le modèle de processus d'excitation. L'utilisation de la méthode de Sobolev décrite par Bockelée-Morvan (1987) qui inclut du pompage vibrationnel infrarouge par la radiation solaire a ainsi été adoptée pour la mesure de  $H_2^{16}O$ ,  $H_2^{18}O$  et HDO (cf. par exemple, Biver et al. (2007); Hartogh et al. (2011); Bockelée-Morvan et al. (2012)).

## 7.2 Fluorescence de la molécule OH dans les comètes

### 7.2.1 Processus de fluorescence

La fluorescence est un processus d'émission spontanée correspondant à la phase de désexcitation d'un atome ou d'une molécule. Suite à l'interaction avec le rayonnement solaire, la molécule ou l'atome absorbe des photons et se voit alors entraîné(e) du niveau fondamental vers un état supérieur excité. Ensuite, selon la durée de son temps de vie, la molécule ou l'atome excité(e) finit par retomber vers un niveau d'énergie inférieur en émettant un photon. On parle de phénomène de fluorescence. Si le photon émis possède la même fréquence que le photon absorbé, la fluorescence est dite *résonnante*. S'il possède une fréquence différente par rapport à celle du photon absorbé, il y aura des changements d'états d'énergie de rotation ou de vibration, ce qui conduira à l'obtention d'un spectre de fluorescence *riche*.

Dans les spectres cométaires, les raies d'émission sont principalement dues au phénomène de fluorescence résonnante. Le taux de fluorescence dépend du rayonnement solaire

ainsi que des rapports de branchement des différents canaux de désexcitation possibles. Ce processus a été mis en évidence pour la première fois dans des spectres cométaires par Swings (1941) pour la molécule CN et également supposé à l'époque pour les molécules OH, NH et CH. L'origine fluorescente des raies spectrales de OH a été confirmée quelques années plus tard par Hunaerts (1953). En utilisant un modèle simple de fluorescence, il a en effet pu reproduire les raies de OH observées. Qui plus est, il a confirmé que le flux solaire disponible pour la fluorescence dépendait de la longueur d'onde étant donné que des raies de Fraunhofer sont présentes dans le spectre. Dès lors, ce flux dépend du décalage Doppler des raies induit par la vitesse héliocentrique de la comète.

L'étude des raies de OH dans les spectres cométaires est importante car elle peut nous apporter des informations sur l'eau, telle son abondance, OH étant une molécule de  $H_2O$ . De plus, l'analyse de OH est particulièrement intéressante car sa bande de raies spectrales constitue, avec la bande de CN, l'une des bandes les plus intenses observée dans les spectres cométaires (cf. figure 7.2). L'hydroxyle est formé d'un atome d'oxygène et d'un atome d'hydrogène. Ces deux atomes offrent à OH un intérêt privilégié de par leurs abondances et de par le fait que de nombreuses molécules cométaires sont formées à partir de O et H. Toutefois, l'observation depuis le sol des raies de OH est difficile étant donné que celles-ci se situent dans l'ultraviolet proche, vers  $3000 \text{ \AA}$ .

### 7.2.2 Modélisation du processus de fluorescence

Dans la coma cométaire, les molécules interagissent avec la radiation solaire en absorbant ou en émettant des photons suite au principe de fluorescence. La modélisation de ce processus se réalise en déterminant la population des différents niveaux de la molécule considérée.

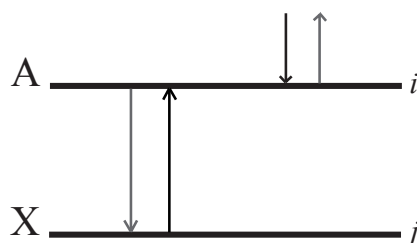
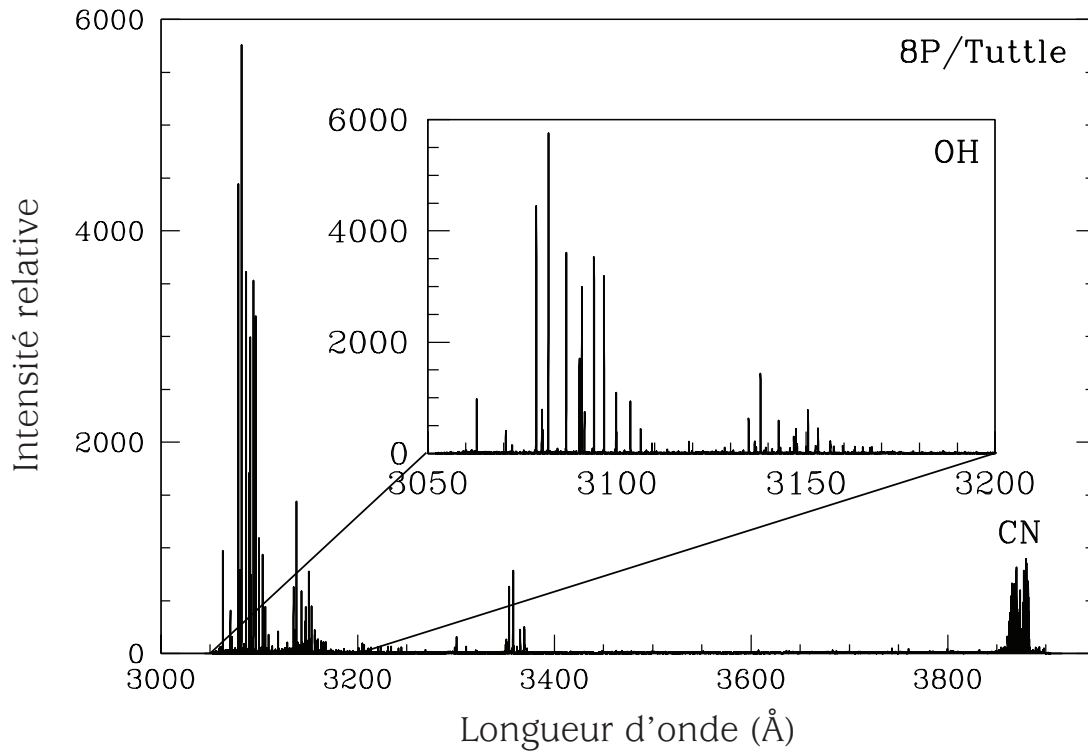


FIGURE 7.3 – Population de l'état  $i$  à un instant donné pour un cas général.

Soit, considérons le niveau  $i$  représenté dans la figure 7.3 pour une transition quel-



**FIGURE 7.2** – Spectre de la comète 8P/Tuttle obtenu au VLT le 16 janvier 2008 avec le spectrographe UVES. Les bandes ultraviolettes des raies de OH  $A^2\Sigma^+ - X^2\Pi_i$  à 3086 Å (0,0) et 3143 Å (1,1) sont les plus intenses du spectre. La bande de raies associée à CN localisée aux alentours de 3875 Å se repère également aisément.

conque<sup>2</sup>. L'évolution de la population de l'état  $i$  au cours du temps se définit par la différence entre les populations qui arrivent sur ce niveau  $i$  et celles qui en partent :

$$\frac{dn_i}{dt} = \underbrace{\sum_{j=1, j \neq i}^N n_j p_{ji}}_{\text{ce qui arrive sur } i} - n_i \underbrace{\sum_{j=1, j \neq i}^N p_{ij}}_{\text{ce qui part de } i} \quad i = 1, \dots, N \quad (7.1)$$

avec  $n_i$  et  $n_j$ , les populations relatives des niveaux  $i$  et  $j$ ,  $p_{ij}$  ( $p_{ji}$ ) les probabilités de transition du niveau  $i$  ( $j$ ) vers  $j$  ( $i$ ) et  $N$  étant le nombre de niveaux moléculaires. Ce système d'équations satisfait à l'équation de conservation :

$$\sum_{i=1}^N n_i = 1 \quad (7.2)$$

Celui-ci peut également se réécrire sous forme matricielle de la sorte :

2. Notons que pour les transitions électroniques,  $i$  peut correspondre à un état X.



$$\dot{\mathbf{n}} = \mathbf{T} \mathbf{n} \quad (7.3)$$

avec  $\mathbf{T}$ , une matrice  $N \times N$  qui se décrit par :

$$T_{ij} = p_{ji} - \delta_{ij} \sum_{k=1}^N p_{ik} \quad (7.4)$$

où  $\delta_{ij}$  correspond au symbole de Kronecker. En considérant que les niveaux électroniques  $\mathbf{n}$  peuvent se distinguer entre les niveaux de l'état fondamental  $\mathbf{n}_X$  et ceux de l'état excité notés  $\mathbf{n}_E$ , l'équation matricielle (7.3) se réécrit :

$$\begin{pmatrix} \dot{n}_X \\ \dot{n}_E \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{XX} & T_{XE} \\ T_{EX} & T_{EE} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_X \\ n_E \end{pmatrix} \quad (7.5)$$

Modéliser le processus de fluorescence consiste à déterminer la population des différents niveaux à l'état d'équilibre, c'est-à-dire à résoudre le système d'équations (7.1) lorsque  $\frac{dn_i}{dt} = 0$ . La solution de ce système est donnée par :

$$x = -A^{-1} b \quad \text{avec } x = (n_1, n_2, \dots, n_{N_X-1}) \quad (7.6)$$

où

$$\begin{aligned} A_{ij} &= (T_{XX} - T_{XE} T_{EE}^{-1} T_{EX})_{ij} - b_i & j &= 1, N_X - 1 \\ b_i &= (T_{XX} - T_{XE} T_{EE}^{-1} T_{EX})_{iN_X} & i &= 1, N_X - 1 \end{aligned} \quad (7.7)$$

avec  $N_X$  représentant le nombre de niveaux de l'état électronique fondamental.

Le détail du calcul qui amène à cette solution est explicité dans l'article de Zucconi & Festou (1985).

Dès lors, la population  $n$  des différents niveaux d'énergie d'une molécule est déterminée en évaluant le produit de la matrice inverse des probabilités de transition  $A$  avec la matrice colonne des niveaux d'énergie  $b$ .

## 7.3 Notre modèle de fluorescence de la molécule OH et ses isotopologues <sup>18</sup>OH et OD

### 7.3.1 Utilité d'un tel outil numérique

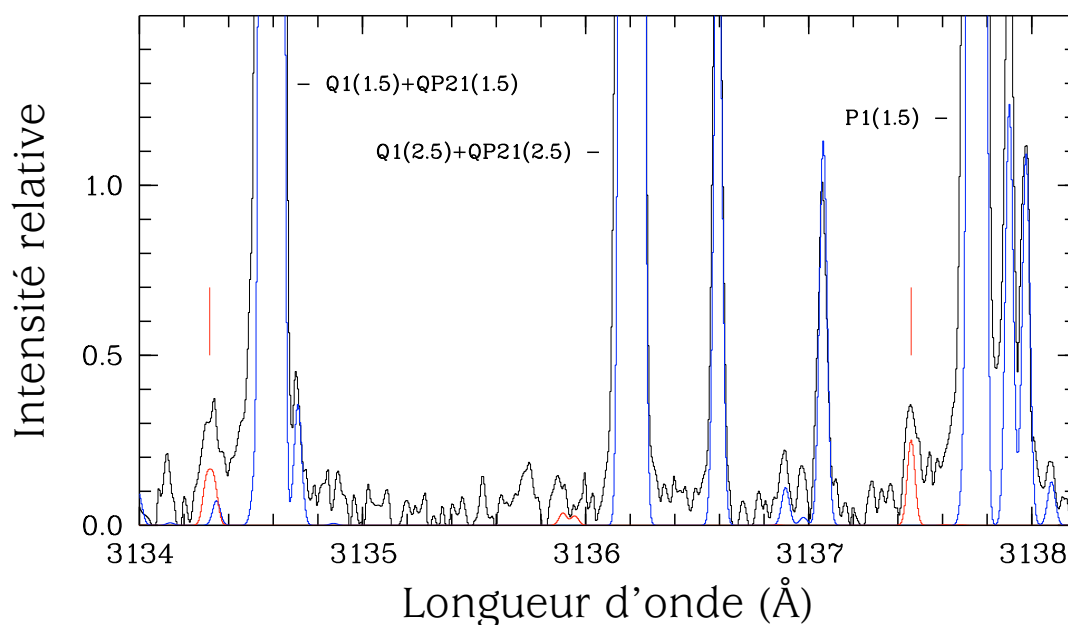
Modéliser le processus de fluorescence d'une molécule, dans l'optique d'analyser cette molécule à partir de spectres cométaires obtenus depuis le sol, a débuté il y a une

trentaine d'années. A l'époque, l'intérêt d'un tel travail numérique consistait à déterminer, entre autres, la luminosité de la comète afin d'analyser la variation de celle-ci en fonction, notamment, de la vitesse de la comète et de sa distance héliocentrique (Tatum & Gillespie, 1977; Mumma et al., 1978; Schleicher, 1983, et références comprises). L'utilité d'un tel outil s'est accrue avec l'amélioration des instruments d'observation qui a conduit à atteindre une résolution spectrale suffisante pour détecter, en plus des raies des molécules principales, les raies de leurs isotopologues bien plus rares. La modélisation des isotopologues a débuté dans le but de pouvoir déduire les rapports isotopiques dans les comètes. Cependant, la mesure des rapports isotopiques est généralement une tâche difficile. Dans le domaine visible, elle requiert l'obtention de spectres de grande qualité, ce qui est souvent uniquement possible dans le cas des comètes brillantes, et acquis avec une très haute résolution spectrale. Les isotopologues diffèrent de leur molécule par la masse de leur noyau. Leur fréquence vibrationnelle  $\nu$  s'en retrouve donc modifiée, en première approximation, d'un facteur :

$$\nu_{\text{isotope}} = \sqrt{\frac{\mu_{\text{isotope}}}{\mu_{\text{molécule}}}} \nu_{\text{molécule}} \quad (7.8)$$

où  $\mu$  correspond à la masse réduite. Cela induit un léger décalage en longueur d'onde pour les raies isotopiques, qui est d'autant plus important que  $\nu_{\text{molécule}}$  est grand, donc que sa longueur d'onde est petite. Ainsi, les raies des isotopes étudiés dans le rayonnement X sont parfaitement distinguables de la raie moléculaire correspondante alors que dans le domaine du visible elles ne sont décalées que de quelques dixièmes d'angströms seulement (cf. figure 7.4). Notons également que l'intensité des raies des isotopologues est beaucoup plus faible que celles des raies de l'isotope principal en raison de l'abondance généralement beaucoup plus faible des isotopes rares. La mesure des rapports isotopiques exige donc un très bon rapport signal-sur-bruit dans les spectres.

La détection des isotopologues de OH, et en particulier OD (vu son rapport OH/OD  $\sim 2000$ ), est extrêmement difficile (Hutsemékers et al., 2008). Il s'ensuit que la création d'un modèle de fluorescence pour les isotopes de OH exige une très bonne maîtrise des niveaux d'énergie afin d'obtenir une excellente concordance entre les longueurs d'onde théoriques des raies et celles observées dans le but de déterminer les rapports D/H et  $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$ . L'intérêt d'un tel modèle est aussi de traiter en détail l'effet Swings. Ce dernier est causé par le décalage Doppler du spectre solaire dû au mouvement relatif de la comète par rapport au Soleil. La prise en compte de l'effet Swings nous permet de mieux reproduire le flux des raies de OH qui varie à cause à la modulation du flux solaire.

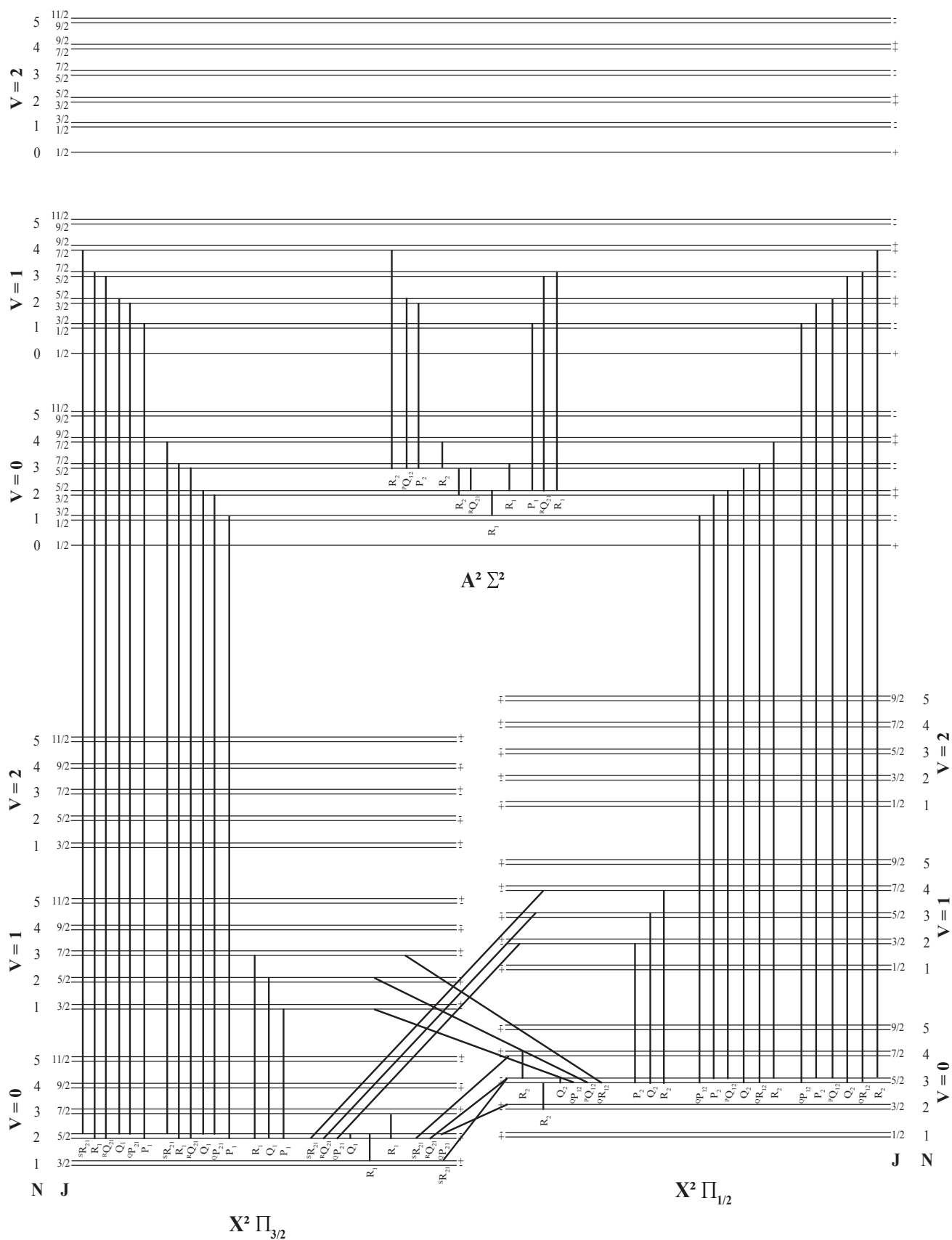


**FIGURE 7.4** – Vue d’une partie de la bande (1,1) de la molécule OH observée dans un spectre de la comète C/2002 T7 (LINEAR) obtenu avec le spectrographe échelle UVES du VLT. Des spectres synthétiques de  $^{16}\text{OH}$  (bleu) et  $^{18}\text{OH}$  (rouge) sont superposés au spectre cométaire observé (noir). Deux raies de  $^{18}\text{OH}$  sont identifiées et indiquées par les traits verticaux rouges. On note la position de ces raies isotopiques à quelques dixièmes d’angströms des raies de  $^{16}\text{OH}$  correspondantes. Cette analyse est tirée de l’article de Hutsemékers et al. (2008).

### 7.3.2 Description de notre modèle

L’hydroxyle est une molécule diatomique hétéronucléaire. Elle possède deux états électroniques :  $A^2\Sigma^+$  et  $X^2\Pi$ . Les différentes raies de OH engendrées par le phénomène de fluorescence correspondent à l’ensemble des transitions possibles entre les états  $\Sigma$ - $\Pi$ ,  $\Sigma$ - $\Sigma$  et  $\Pi$ - $\Pi$ . L’état fondamental est divisé en deux sous-niveaux,  $^2\Pi_{1/2}$  et  $^2\Pi_{3/2}$ . Cette subdivision est due à l’interaction de la rotation de la molécule et du spin électronique (1/2), amenant à un moment angulaire  $J = N \pm 1/2$ , où  $N$  est le nombre quantique de rotation. Chaque état rotationnel est également scindé en doublet  $\Lambda$  à cause de l’interaction magnétique entre le moment angulaire orbital électronique  $L$  et le moment angulaire de la rotation de la molécule  $J$ . Dans la construction de notre modèle, nous avons interprété ces deux sous-niveaux comme deux niveaux distincts.

Comme mentionné précédemment, la réalisation d’un tel modèle de fluorescence pour OH s’établit en définissant toutes les transitions possibles qui peuvent s’opérer au sein de cette molécule. Une partie de celles-ci sont présentées dans la figure 7.5.



**FIGURE 7.5** – Diagramme des niveaux d'énergie pour les états électroniques  $A^2\Sigma^+$  et  $X^2\Pi_i$  de la molécule OH. Les niveaux rotationnels jusque  $N = 5$  sont représentés. Seules certaines transitions sont représentées. Réalisation personnelle produite d'après le schéma donné à la page 14 de la thèse de Schleicher (1983).

Ces transitions, qui nous permettront de former la matrice  $A$ , se décrivent en résolvant un système où chaque équation d'état représente un niveau d'énergie à l'équilibre de fluorescence. Les coefficients de chaque équation correspondent aux probabilités de transition de chaque niveau de départ vers le niveau d'arrivée. Ces équations sont de la forme :

$$\sum_{i=j+1}^N (A_{ij} X_i - B_{ji} \rho_{vij} X_j) - \sum_{i=1}^{j-1} (A_{ji} X_j - B_{ij} \rho_{vij} X_i) = 0 \quad (7.9)$$

où  $N$  correspond au nombre de niveau d'énergie,  $i$  se rapporte au niveau de départ et  $j$  au niveau d'arrivée,  $X$  est la population relative,  $A$  et  $B$  sont respectivement les coefficients d'émission spontanée et d'absorption et  $\rho_\nu$  représente la densité de radiation pour la fréquence de transition  $\nu$ . Les transitions permises sont gouvernées par les règles de sélection. Pour une molécule diatomique, les transitions électroniques doivent satisfaire un changement de parité ainsi qu'un  $\Delta J = 0, \pm 1$ . Le nombre de ces transitions dépend du nombre de niveaux électroniques, vibrationnels et rotationnels. Pour OH, deux états électroniques regroupent chacun trois niveaux vibrationnels ( $v=0,1,2$ ). Chacun de ces niveaux vibrationnels contient lui-même  $N$  niveaux rotationnels que nous considérerons égal à cinq dans notre présent modèle. Dès lors la matrice de probabilités de transitions contiendra 93 lignes correspondant aux 30 niveaux d'énergie pour l'état  $X^3\Pi_{3/2}$ , aux 30 autres de l'état  $X^2\Pi_{1/2}$  et aux 33 niveaux de l'état supérieur  $A^2\Sigma$ . Les probabilités des transitions de l'état  $i$  vers l'état  $j$  décriront les émissions spontanées et seront notées  $A_{\text{raie}}$ . Les absorptions nommées  $B_{\text{raie}}$  seront définies par les probabilités de transitions  $j$  vers  $i$ . Dans le cas des probabilités de transitions rovibroniques,  $A_{\text{raie}}$  et  $B_{\text{raie}}$  sont définies par :

$$A_{\text{raie}} = \frac{8 \pi^2 e^2 \nu_{\text{raie}}^3 (2 - \delta_{0,\Lambda''}) f_{\nu'\nu''} S_{\Sigma p J}}{m_e c^3 \nu_{\nu'\nu''} (2 - \delta_{0,\Lambda'+\Lambda''}) (2J' + 1)} \quad (7.10)$$

$$B_{\text{raie}} = \frac{c^3 (2J' + 1)}{8 \pi h \nu_{\text{raie}}^3 (2J'' + 1)} A_{\text{raie}} \quad (7.11)$$

où  $e$  est la charge de l'électron,  $m_e$  se rapporte à la masse de celui-ci,  $c$  est la vitesse de la lumière,  $\delta$  représente le symbole de Kronecker,  $\nu_{\nu'\nu''}$  correspond à la fréquence entre deux bandes de transition,  $\nu_{\text{raie}}$  se rapporte à la fréquence entre deux niveaux de transition,  $f_{\nu'\nu''}$  est la force d'oscillateur de la bande valable pour une bande donnée (même  $\nu'$  et  $\nu''$ ) et  $S_{\Sigma p J}$  représente les facteurs de Hönl-London. Notons que la force d'oscillateur de la bande décrit la probabilité relative d'avoir une transition vibratoire donnée dans une transition électronique et le facteur de Hönl-London désigne la probabilité relative qu'une transition  $J'$  à  $J''$  se réalise dans une bande.

Les équations correspondantes pour les probabilités de transitions électroniques et vibrationnelles d'une bande entre les deux états électroniques A et X se décrivent comme tel :

$$A_{v'v''} = \frac{8 \pi^2 e^2 \nu_{v'v''}^2 (2 - \delta_{0,\Lambda''})}{m_e c^3 (2 - \delta_{0,\Lambda'})} f_{v'v''} \quad (7.12)$$

$$B_{v'v''} = \frac{\pi e^2}{h m_e \nu_{v'v''}} f_{v'v''}. \quad (7.13)$$

L'équation (7.12) nous permet d'en extraire la valeur de la force d'oscillateur de la bande  $f_{v'v''}$  que nous pouvons ensuite intégrer dans l'équation (7.10). Les matrices de probabilités de transitions rovibroniques pour les émissions spontanées et les absorptions deviennent :

$$A_{\text{raie}} = \frac{\nu_{\text{raie}}^3}{\nu_{v'v''}^3} A_{v'v''} \frac{S_{\Sigma pJ}}{(2J'+1)} \frac{2 - \delta_{0,\Lambda'}}{2 - \delta_{0,\Lambda'+\Lambda''}} \quad (7.14)$$

$$B_{\text{raie}} = \frac{c^3 (2J'+1)}{8 \pi h \nu_{\text{raie}}^3 (2J''+1)} A_{\text{raie}}. \quad (7.15)$$

Les probabilités de transitions vibrationnelles pures, c'est-à-dire des transitions partant de l'état électronique de base  $X^2\Pi$  et arrivant dans le même état électronique mais avec une valeur de  $v$  différente, sont directement extraites de l'article de Mies (1974).

Les probabilités de transitions rotationnelles pures caractérisées par un même état vibrationnel de l'état électronique X se définissent quant à elles par :

$$A_{\text{raie}} = \frac{3.21 \cdot 10^{-38} \nu_{\text{raie}}^3 S_{\Sigma pJ}}{(2J'+1)}. \quad (7.16)$$

Ensuite, pour les probabilités de transitions entre les deux doublets  $\Lambda$ , nous considérons dans notre modèle la valeur de  $9 \cdot 10^{-11} \text{ s}^{-1}$  pour l'état de base  $X^2\Pi_{3/2}$  avec  $v=0, N=1$  et  $\rightarrow -$ , et celle de  $1 \cdot 10^{-8} \text{ s}^{-1}$  pour les autres cas.

Enfin, nous adoptons les valeurs de  $10 \text{ s}^{-1}$  et  $0.1 \text{ s}^{-1}$ , respectivement pour les transitions vibrationnelles et rotationnelles existant à l'intérieur de l'état supérieur A.

Le but de notre modèle est donc de déterminer les coefficients  $A_{\text{raie}}$  et  $B_{\text{raie}}$  pour les différentes transitions permises. Dans les cas où les valeurs numériques ne sont pas encore référencées dans la littérature, nous devons déterminer tous les paramètres intervenant dans les équations (7.14), (7.15) et (7.16). Premièrement, comme dans notre cas,  $\Lambda' = 0$  et  $\Lambda'' = 1$ , le dernier terme de l'équation (7.14) vaut  $1/2$ . Les paramètres  $A_{v'v''}$  correspondent aux coefficients d'Einstein. La valeur de ces derniers est donnée dans Luque & Crosley

(1998). Les facteurs de Hönl-London  $S_{\Sigma p J}$  se notent :

$$\sum_{p'p''} \sum_{\Sigma'\Sigma''} \sum_{J''} S_{\Sigma p J} = (2 - \delta_{0,\Lambda'+\Lambda''}) (2S + 1) (2J' + 1) \quad (7.17)$$

avec  $S$  représentant le spin de la molécule,  $J$  est le moment angulaire de rotation,  $\Sigma$  est le sous-état électronique dû à la multiplicité du spin et  $p$  correspond à la parité. Les équations des facteurs de Hönl-London pour les différentes transitions existant au sein de la molécule OH sont fournies à la page 136 de la thèse de Schleicher (Schleicher, 1983).

Comme  $\Delta E = h\nu$ , avec  $h$  la constante de Planck, la fréquence  $\nu_{v'v''}$  peut s'exprimer au moyen de l'écart d'énergie entre deux bandes de transitions. La fréquence  $\nu_{\text{raie}}$  est également définie à partir des énergies des niveaux et correspond, quant à elle, à l'écart d'énergie entre deux niveaux de transitions considérés. Dès lors, la détermination de  $\nu_{v'v''}$  et  $\nu_{\text{raie}}$  requiert de connaître l'énergie des niveaux. L'énergie totale d'un niveau se décompose en une partie électronique et vibrationnelle (T) et une partie rotationnelle (F).

L'énergie T d'un niveau se définit par :

$$T = T_e + T(\Pi) \quad \text{pour l'état inférieur X} \quad (7.18)$$

et

$$T = T_e + T(\Sigma) \quad \text{pour l'état supérieur A} \quad (7.19)$$

où  $T_e$  correspond à l'énergie vibronique initiale, autrement dit à la différence d'énergie entre les deux potentiels minimums et maximums des états X et A. Elle est nulle pour l'état inférieur  $\Pi$  et vaut  $32\,683.97 \text{ cm}^{-1}$  pour l'état supérieur  $\Sigma$  (Luque & Crosley, 1998). L'énergie vibrationnelle des états est décrite par la formule de Luque & Crosley (1998), à savoir :

$$T_{\text{molécule}}(\text{état}) = \sum_k y_k (v + 1/2)^k \quad (7.20)$$

Les valeurs numériques des  $y_k$  sont fournies dans le tableau I de Luque & Crosley (1998) et diffèrent entre l'état  $\Pi$  et l'état  $\Sigma$ . Pour les isotopes de OH, l'énergie vibrationnelle des états reste identique à un facteur  $\varepsilon$  près, correspondant au rapport de la masse réduite de OH et de l'isotopologue considéré :

$$T_{\text{isotope}}(\text{état}) = \sum_k \varepsilon^k y_k (v + 1/2)^k \quad \text{avec } \varepsilon_{^{18}\text{OH}} = \sqrt{\frac{\mu_{\text{OH}}}{\mu_{^{18}\text{OH}}}}$$

$$\text{et } \varepsilon_{\text{OD}} = \sqrt{\frac{\mu_{\text{OH}}}{\mu_{\text{OD}}}} \quad (7.21)$$

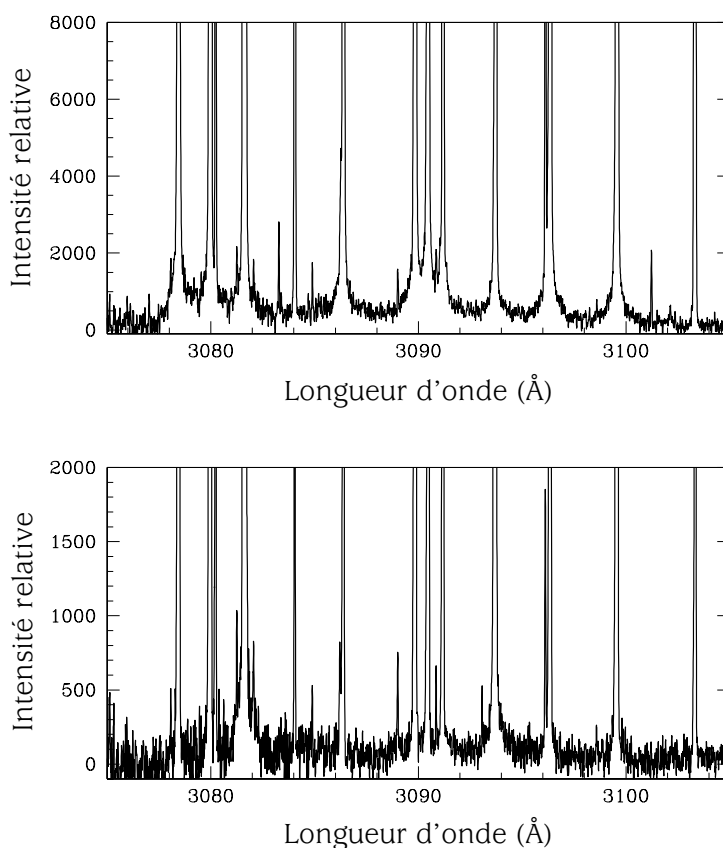
Les valeurs des énergies rotationnelles  $F$  des états inférieurs  $\Pi_{3/2}$  et  $\Pi_{1/2}$  sont directement reprises de Abrams et al. (1994). L'énergie rotationnelle de l'état supérieur  $\Sigma$  est, quant à elle, évaluée à partir des éléments de la matrice hamiltonienne développée dans Stark et al. (1994).

$$F(\Sigma) = B x (x \pm 1) - D x^2 (x \pm 1)^2 + H x^3 (x \pm 1)^3 - L x^4 (x \pm 1)^4 + M x^5 (x \pm 1)^5 - \frac{1}{2} \left( \gamma + \gamma_D J(J + 1) + \gamma_H J^2 (J + 1)^2 \right) (1 \pm x) \quad (7.22)$$

où  $x = J + 1/2$  et où les valeurs des paramètres  $A, B, D, H, L, M, \gamma, \gamma_D, \gamma_H$  sont données dans Stark et al. (1994). Le signe adopté dans l'équation de  $F(\Sigma)$  dépend du doublet  $\Lambda$  considéré. Le signe positif sera utilisé pour le doublet  $\Lambda$  supérieur et le signe négatif pour le doublet  $\Lambda$  inférieur.

Une fois que tous les paramètres sont déterminés, la matrice de probabilité de transitions  $A$  est formulée. Un code d'inversion de matrice nous permet ensuite d'obtenir  $A^{-1}$  et le produit matriciel de  $A^{-1}$  avec le vecteur colonne des niveaux d'énergie nous fournira un fichier contenant les populations des différents niveaux d'énergie. Grâce à celles-ci, nous pouvons déterminer l'intensité des raies P, Q et R et associer chacun de ces pics d'intensité avec sa longueur d'onde correspondante. La convolution de ces pics par une gaussienne nous fournira un spectre synthétique présentant les raies de la molécule OH et ses isotopes. Toutefois, lors de la comparaison entre le spectre synthétique et les spectres cométaires, nous remarquons qu'une simple convolution par une gaussienne ne rend pas convenablement compte des pieds de raies de OH qui sont plus étalés, ajoutant des sortes d'*ails* aux raies de OH (cf. figure 7.6). Ce profil spécifique est actuellement incompris mais pour ajuster au mieux les raies, un profil généré à partir des pieds des raies cométaires observées sera adopté.





**FIGURE 7.6** – Observation du profil particulier des pieds des raies de OH de la bande (0,0) pour la comète C/2002 T7 (LINEAR) (haut) et C/2012 F6 (Lemmon) (bas).

## 7.4 Validation du code et application à des spectres cométaires

### 7.4.1 Test du modèle de fluorescence de OH sur quelques comètes de notre échantillon

Une fois que le code de fluorescence de la molécule OH est établi, nous le confrontons à des spectres observés dans le but de vérifier la bonne concordance entre l'intensité des raies de OH observées et celle produite par le modèle de fluorescence. Cette comparaison sera effectuée pour différentes comètes afin de valider le code pour différentes distances héliocentriques par exemple. Pour chaque cas, une analyse séparée des bandes de OH (0,0) et (1,1) sera fournie.

### La comète 8P/Tuttle

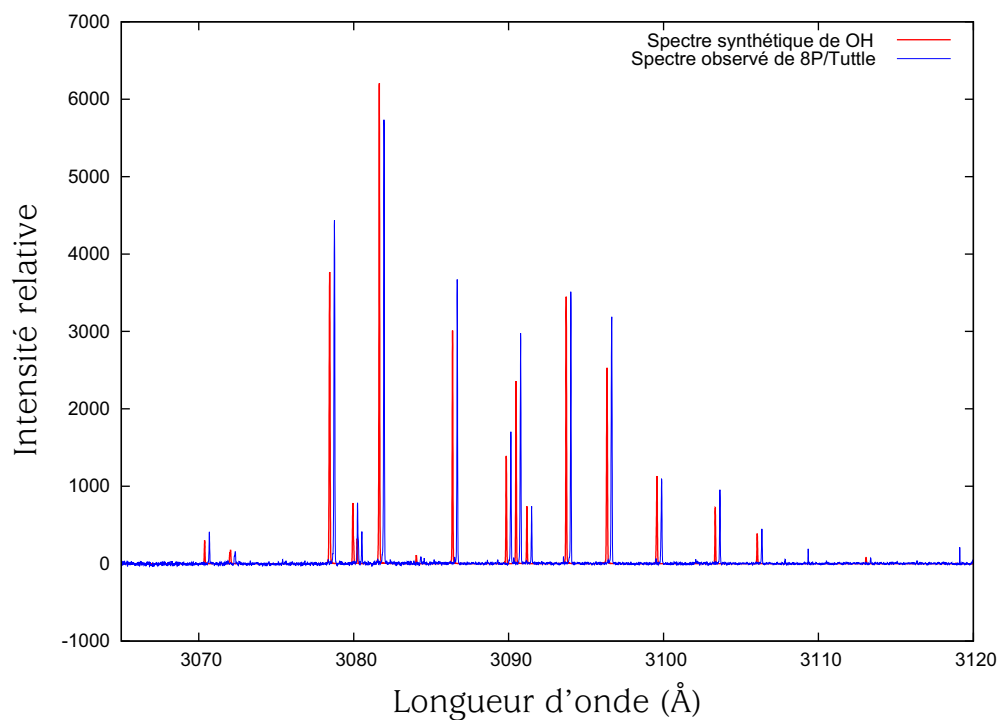
Date d'observation : 2008/01/16 - 00h29

$r = 1.04$  ua

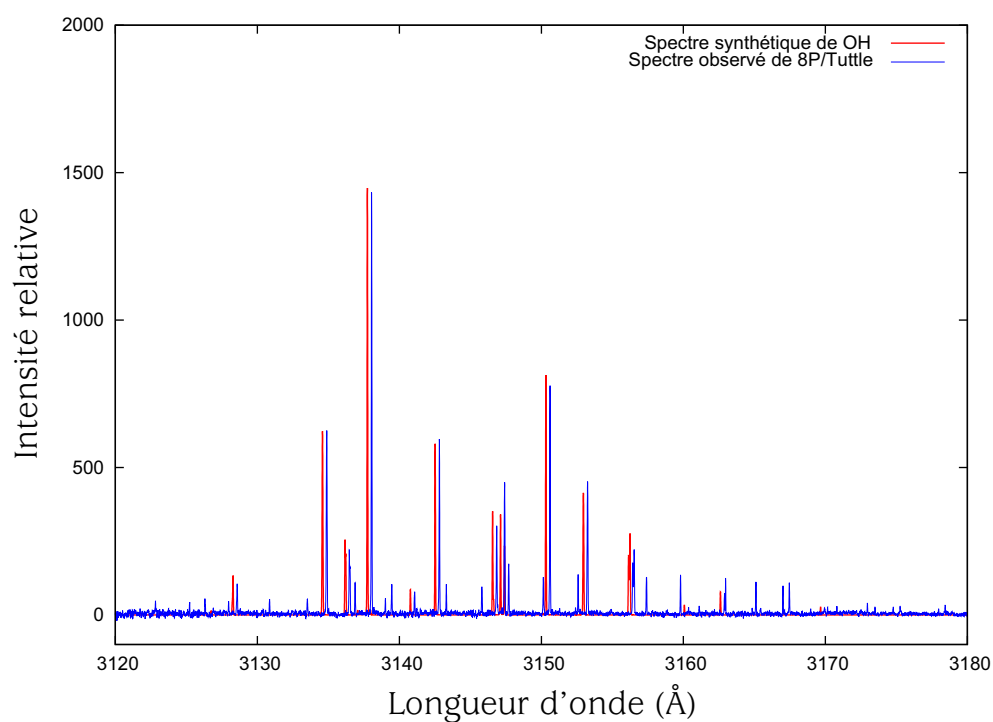
$\dot{r} = -4.29$  km s<sup>-1</sup>

$\Delta = 0.36$  ua

$\dot{\Delta} = 21.64$  km s<sup>-1</sup>



**FIGURE 7.7** – Comparaison du spectre observé de la comète 8P/Tuttle (en bleu) et du spectre synthétique de OH (bande (0,0)) fourni par notre modèle de fluorescence (en rouge). Le spectre cométaire a été volontairement décalé de 0.3 angströms pour une meilleure visualisation des intensités.



**FIGURE 7.8** – Comparaison du spectre observé de la comète 8P/Tuttle (en bleu) et du spectre synthétique de OH (bande (1,1)) fourni par notre modèle de fluorescence (en rouge). Le spectre cométaire a été volontairement décalé de 0.3 angströms pour une meilleure visualisation des intensités.

### La comète 9P/Tempel 1

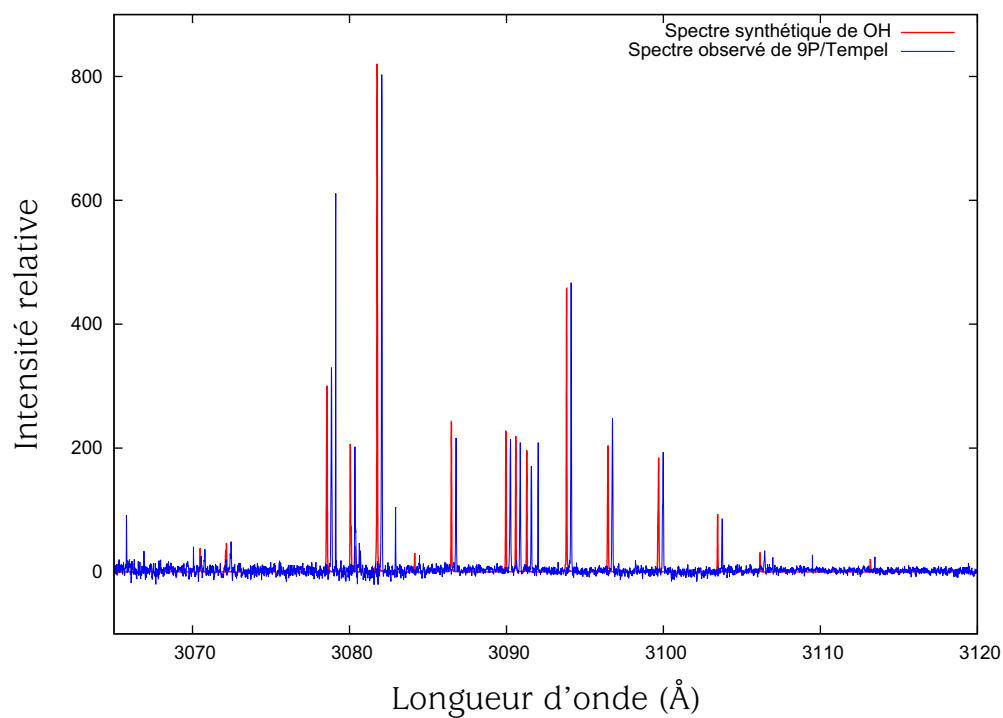
Date d'observation : 2005/07/11 - 22h54

$r = 1.51$  ua

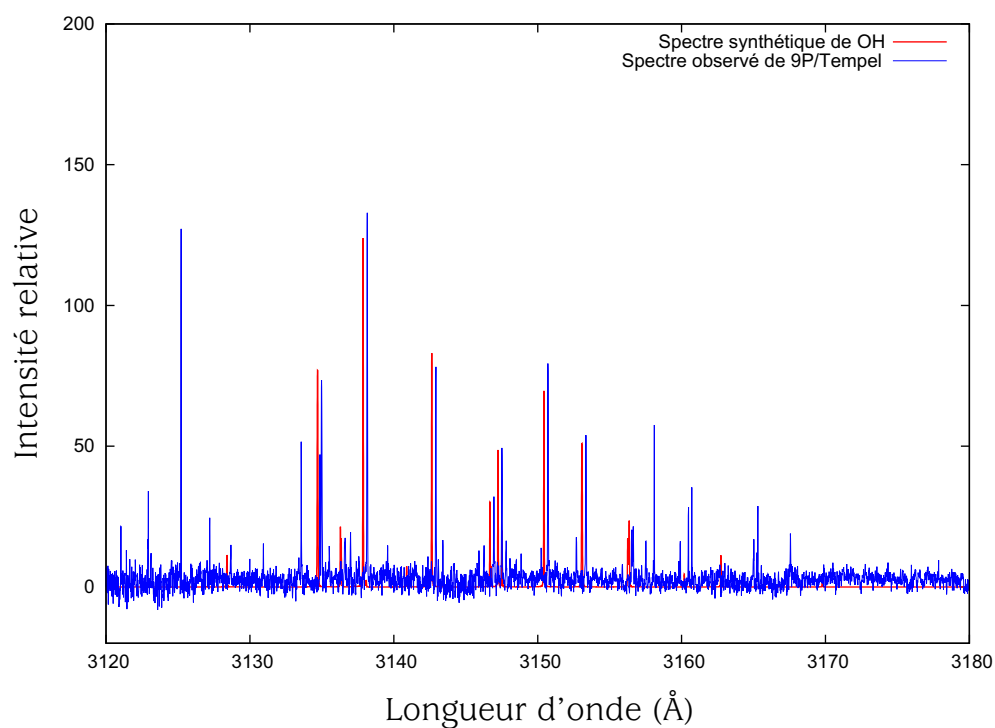
$\dot{r} = 0.78$  km s<sup>-1</sup>

$\Delta = 0.94$  ua

$\dot{\Delta} = 10.04$  km s<sup>-1</sup>



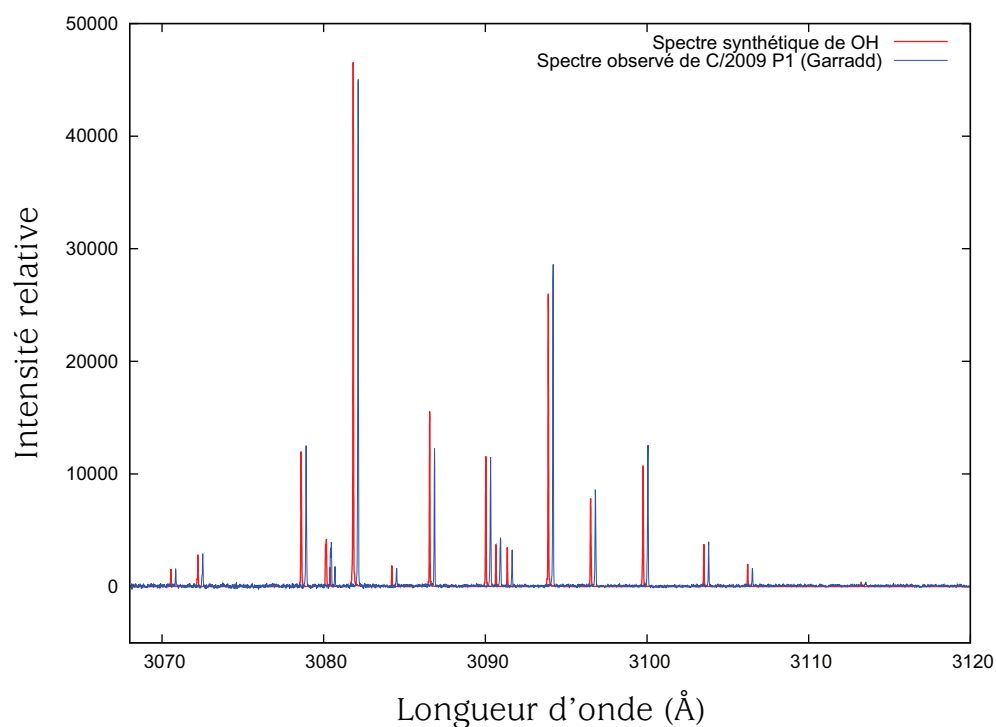
**FIGURE 7.9** – Comparaison du spectre observé de la comète 9P/Tempel 1 (en bleu) et du spectre synthétique de OH (bande (0,0)) fourni par notre modèle de fluorescence (en rouge). Le spectre cométaire a été volontairement décalé de 0.3 angströms pour une meilleure visualisation des intensités.



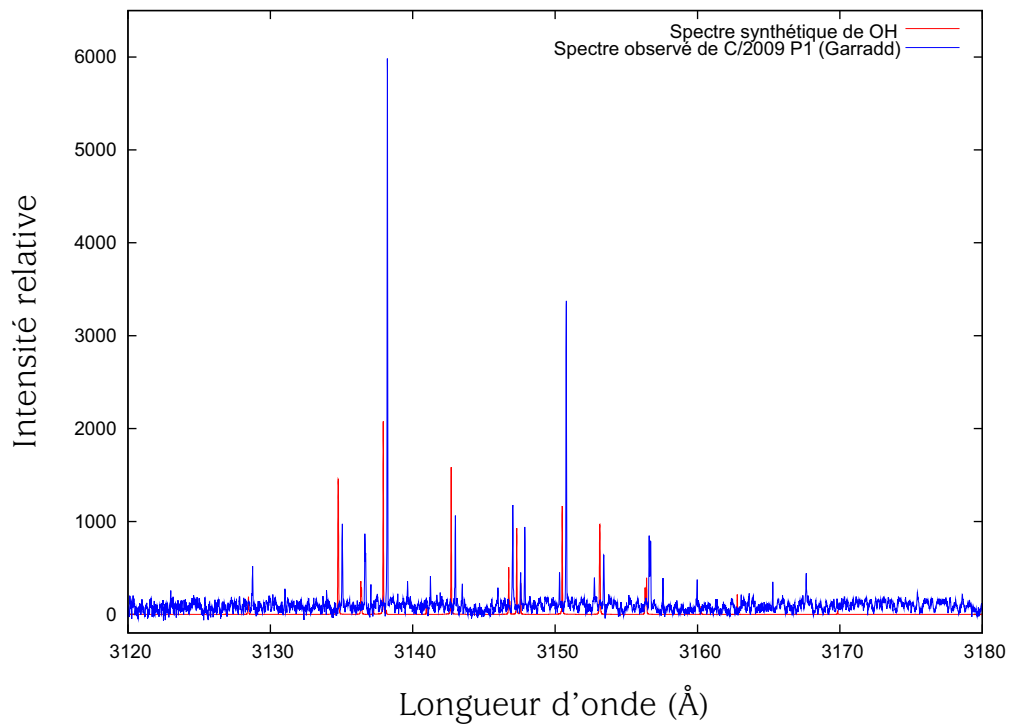
**FIGURE 7.10** – Comparaison du spectre observé de la comète 9P/Tempel 1 (en bleu) et du spectre synthétique de OH (bande (1,1)) fourni par notre modèle de fluorescence (en rouge). Le spectre cométaire a été volontairement décalé de 0.3 angströms pour une meilleure visualisation des intensités.

**La comète C/2009 P1 (Garradd)**

Date d'observation : 20011/09/12 - 00h54

 $r = 2.07$  ua $\dot{r} = -14.71$  km s<sup>-1</sup> $\Delta = 1.49$  ua $\dot{\Delta} = 15.84$  km s<sup>-1</sup>

**FIGURE 7.11** – Comparaison du spectre observé de la comète C/2009 P1 (Garradd) (en bleu) et du spectre synthétique de OH (bande (0,0)) fourni par notre modèle de fluorescence (en rouge). Le spectre cométaire a été volontairement décalé de 0.3 angströms pour une meilleure visualisation des intensités.



**FIGURE 7.12** – Comparaison du spectre observé de la comète 9P/Tempel 1 (en bleu) et du spectre synthétique de OH (bande (1,1)) fourni par notre modèle de fluorescence (en rouge). Le spectre cométaire a été volontairement décalé de 0.3 angströms pour une meilleure visualisation des intensités. Notons que pour cette distance héliocentrique, la bande (1,1) est moins bien reproduite par le modèle.

## Commentaires

Pour les trois comètes présentées ci-dessus, nous constatons que l'ajustement entre le spectre cométaire et le spectre synthétique est généralement très bon. Notre modèle est fiable à 10% près pour la moyenne des raies. La concordance entre le modèle et les observations est donc jugée correcte pour une gamme de distances héliocentriques assez large (1 à 2 ua). Dès lors, nous pouvons utiliser ce code pour la mesure des rapports isotopiques. Des raies non identifiées apparaissent dans le spectre de 9P/Tempel 1. Il s'agit d'artefacts produits par des rayons cosmiques. Ceux-ci sont plus présents en raison du très long temps de pose (7200 s). Notons que dans la coma interne, les transitions entre doublets  $\Lambda$  peuvent également être dues aux collisions qui vont également peupler les niveaux + et -. La prise en compte des collisions dans le modèle de fluorescence améliorerait donc les résultats mais la détermination des populations de niveaux d'énergie de ces transitions devient complexe. Cela dit, les collisions n'affecteraient pas beaucoup les résultats étant donné que celles-ci ne sont efficaces que très près du noyau cométaire.

### 7.4.2 Analyse des comètes C/2002 T7 (LINEAR) et C/2012 F6 (Lemmon) et mesure des rapports isotopiques

Détectée par le télescope de surveillance *Lincoln Near Earth Asteroid* (LINEAR) en octobre 2002, la comète C/2002 T7 (LINEAR) atteignait à ce moment-là une magnitude de 17.5. Son passage au périhélie ( $r = 0.61$  ua) date d'avril 2004 et l'obtention de deux spectres par le spectrographe UVES s'est faite un peu plus tard, en fin mai 2004.

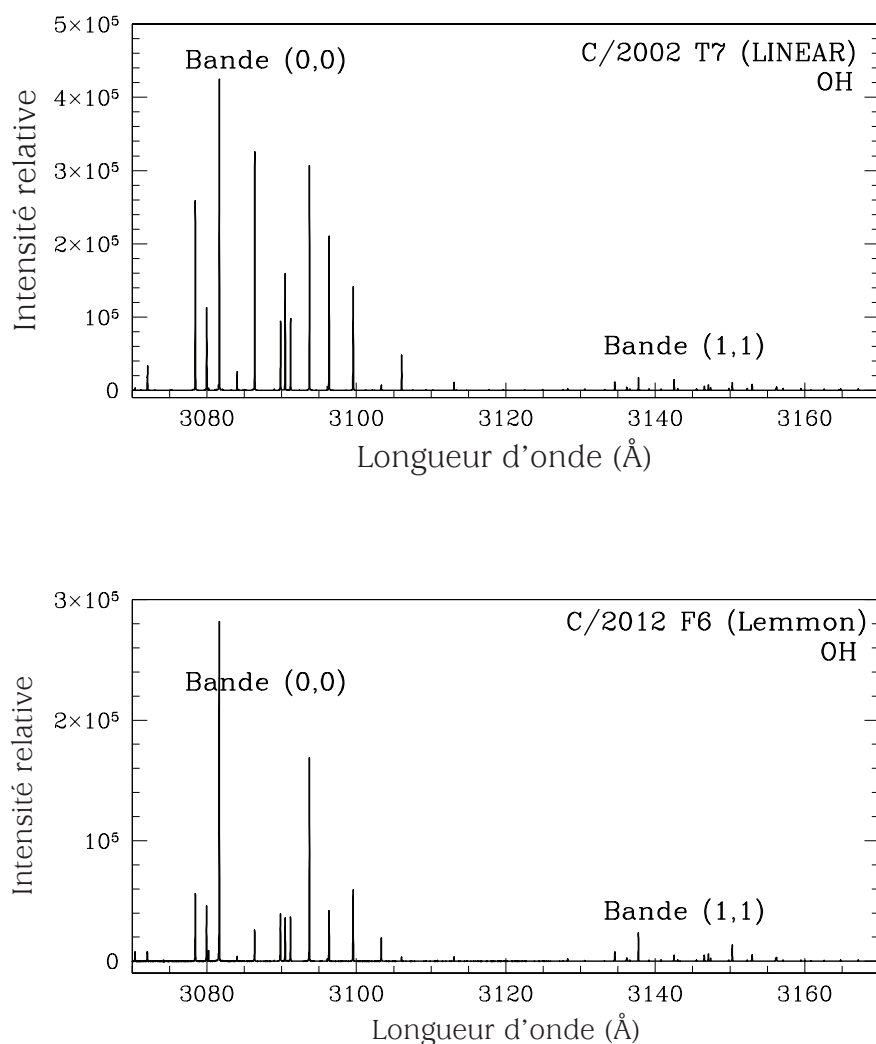
La comète C/2012 F6 (Lemmon) est une comète à grande période découverte par le projet de recherche d'objets géocroiseurs du "*Mount Lemmon*" qui fait partie du "*Catalina Sky Survey*". Sa découverte date du 23 mars 2012 lorsqu'elle était située à une distance de 5 ua du Soleil (Birtwhistle et al., 2012). La comète a ensuite atteint un an plus tard, le 24 mars 2013, son périhélie en passant à une distance de 0.73 ua du Soleil. Trois spectres de haute qualité ont été acquis par notre équipe début février 2013 grâce au spectrographe à haute résolution UVES (ESO, VLT). A ce moment là, C/2012 F6 (Lemmon) était située à 1.2 ua du Soleil.

Les circonstances observationnelles des comètes sont regroupées dans le tableau 7.1.

Comète	Date UT d'observation	Temps d'exposition (s)	$r$ (ua)	$\dot{r}$ (km s <sup>-1</sup> )	$\Delta$ (ua)	$\dot{\Delta}$ (km s <sup>-1</sup> )	Masse d'air
C/2002 T7 (LINEAR)	2004/05/26 - 23 :25	2700	0.94	25.58	0.41	54.98	1.3
	2004/05/27 - 00 :51	1800	0.94	25.59	0.42	55.20	2.1
C/2012 F6 (Lemmon)	2012/02/02 - 06 :43	990	1.20	-24.03	0.99	-4.60	2.1
	2012/02/02 - 07 :20	2800	1.20	-24.02	0.99	-4.49	2.0
	2012/02/04 - 07 :27	6600	1.20	-23.86	0.99	-1.61	2.3

**Tableau 7.1** – Données observationnelles des comètes C/2002 T7 (LINEAR) et C/2012 F6 (Lemmon)

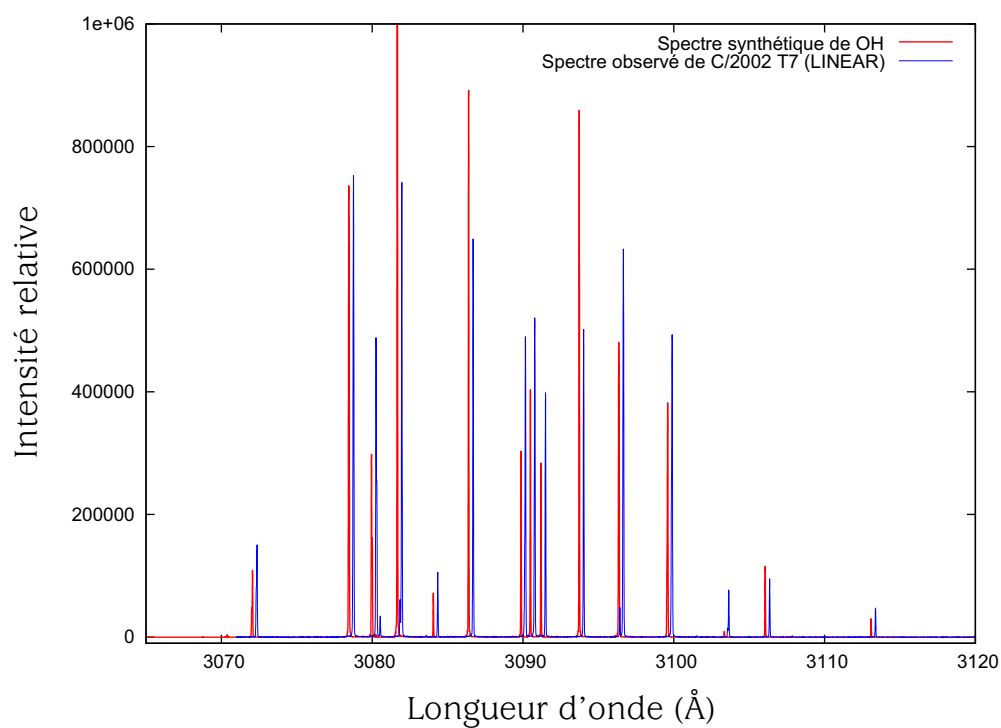




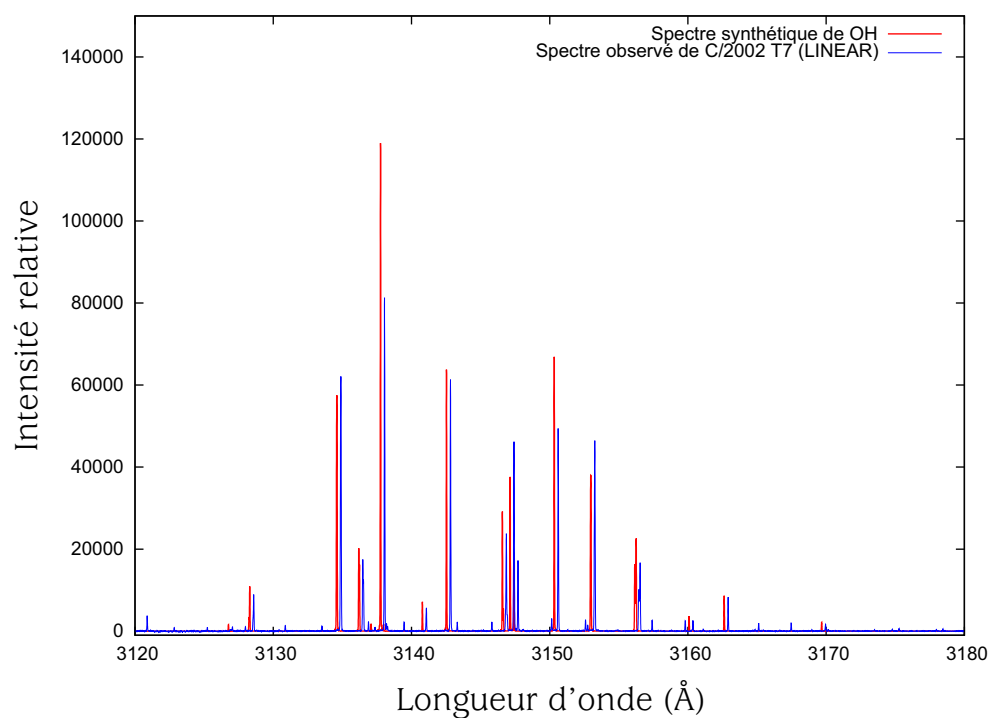
**FIGURE 7.13** – Visualisation d’une partie des spectres des comètes C/2002 T7 (LINEAR) et C/2012 F6 (Lemmon) respectivement obtenus les 26 mai 2004 et 4 février 2012. Les bandes de OH (0,0) et (1,1) sont très bien détectées.

Comme on peut le constater sur la figure 7.13, la bande de OH (0,0) est la plus intense du spectre. Estimant de prime abord que les raies de  $^{18}\text{OH}$  sont  $\sim 500$  fois plus faibles en intensité que les raies de  $^{16}\text{OH}$  correspondantes (en faisant l’hypothèse que le rapport  $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$  est le même que sur Terre), c’est la détection des raies de  $^{18}\text{OH}$  à  $3086.272 \text{ \AA}$  et  $3091.046 \text{ \AA}$  qui est la plus évidente. Cependant, la forte intensité des raies de  $^{16}\text{OH}$  et le faible écart les séparant des raies de  $^{18}\text{OH}$  ( $\sim 0.1 \text{ \AA}$ ) entraînent que les raies isotopiques sont blendées. Cela nous empêche donc de définir une mesure précise des intensités des raies de  $^{18}\text{OH}$  pour la bande (0,0). Bien que de plus faible intensité, la bande de OH (1,1) se présente dès lors comme un meilleur candidat pour la détection des raies de  $^{18}\text{OH}$  et l’obtention du rapport  $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$ . En effet, d’une part, la raie principale se distance davantage de

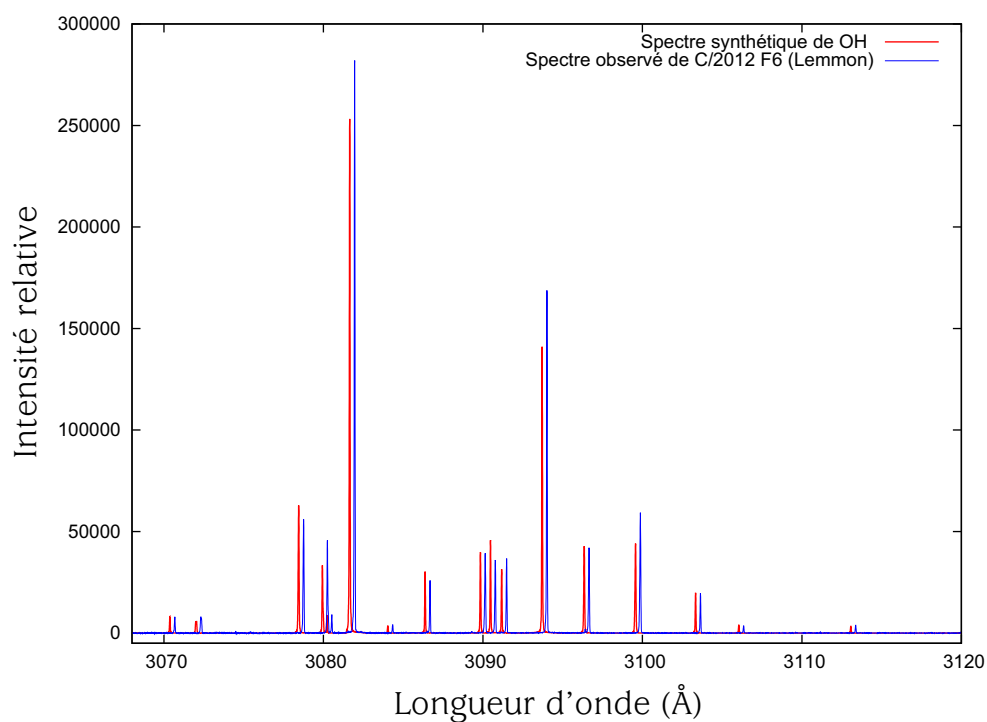
sa correspondante isotopique ( $\sim 0.3 \text{ \AA}$ ) et, d'autre part, les plus grandes longueurs d'onde nous offrent un meilleur signal-sur-bruit étant donné que (1) le spectrographe UVES atteint une meilleure sensibilité et (2) l'extinction atmosphérique est plus faible. Notre analyse s'est donc portée sur les raies de  $^{18}\text{OH}$  dans la bande (1,1), c'est-à-dire localisées à  $3134.135 \text{ \AA}$  et  $3137.459 \text{ \AA}$ . Pour C/2002 T7 (LINEAR), ces deux raies sont détectées dans les deux spectres cométaires. De ceux-ci, un rapport  $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$  de  $450 \pm 100$  a été déterminé. Nous remarquons que cette valeur est semblable aux barres d'erreur près à celle mesurée par Hutsemékers et al. (2008). Ces derniers ont défini ce rapport en analysant les raies des isotopes de OH dans ces mêmes spectres mais avec le modèle de fluorescence décrit par Zucconi (Zucconi & Festou 1985) qui tient compte des collisions. Une remarque en découle donc, à savoir que les collisions ne semblent pas avoir d'effet significatif sur la mesure du rapport  $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$ . En ce qui concerne la comète C/2012 F6 (Lemmon), le temps de pose des deux premières observations est insuffisant pour détecter les deux raies de  $^{18}\text{OH}$  qui sont perdues dans le bruit. Par contre, et comme nous pouvons le constater sur la figure 7.19, le troisième spectre totalisant plus d'une heure de pose nous a permis de détecter au moins une raie de  $^{18}\text{OH}$ . Le rapport  $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$  a ainsi été estimé à  $300 \pm 150$ . Cette mesure a été établie à partir de la raie de  $^{18}\text{OH}$  à  $3137.459 \text{ \AA}$ . Que ce soit pour l'étude de C/2002 T7 (LINEAR) ou C/2012 F6 (Lemmon), l'erreur a été déterminée après différents tests d'ajustement du spectre synthétique combiné  $^{16}\text{OH}$ - $^{18}\text{OH}$ .



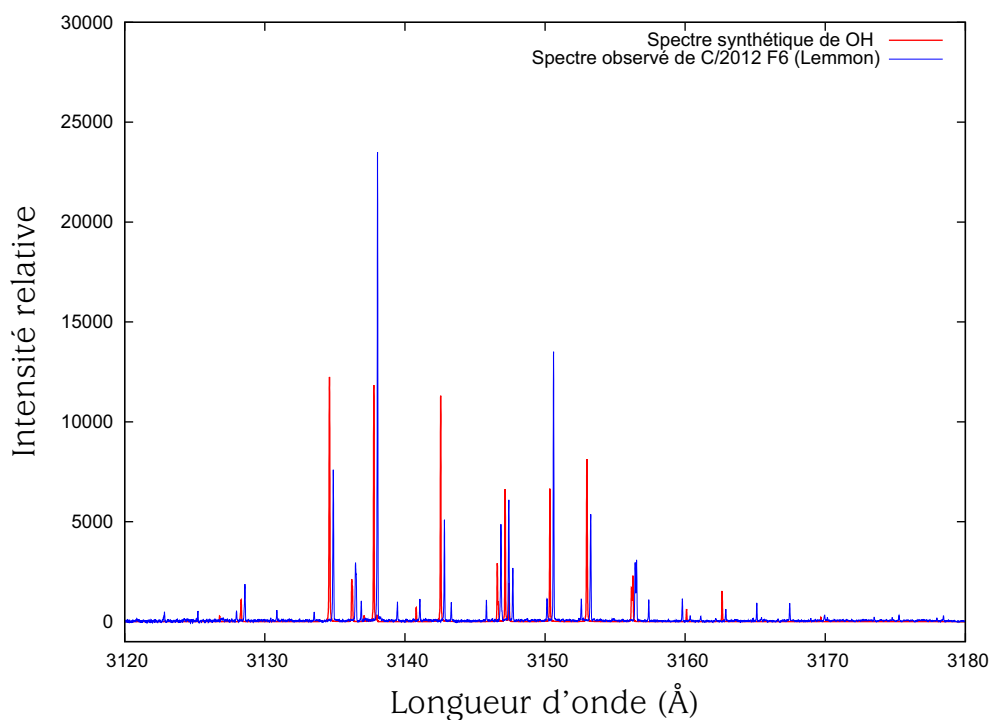
**FIGURE 7.14** – Comparaison du spectre observé de la comète C/2002 T7 (LINEAR) (en bleu) et de la bande (0,0) du spectre synthétique de OH fourni par notre modèle de fluorescence (en rouge). Le spectre cométaire a été volontairement décalé de 0.3 angströms pour une meilleure visualisation des intensités.



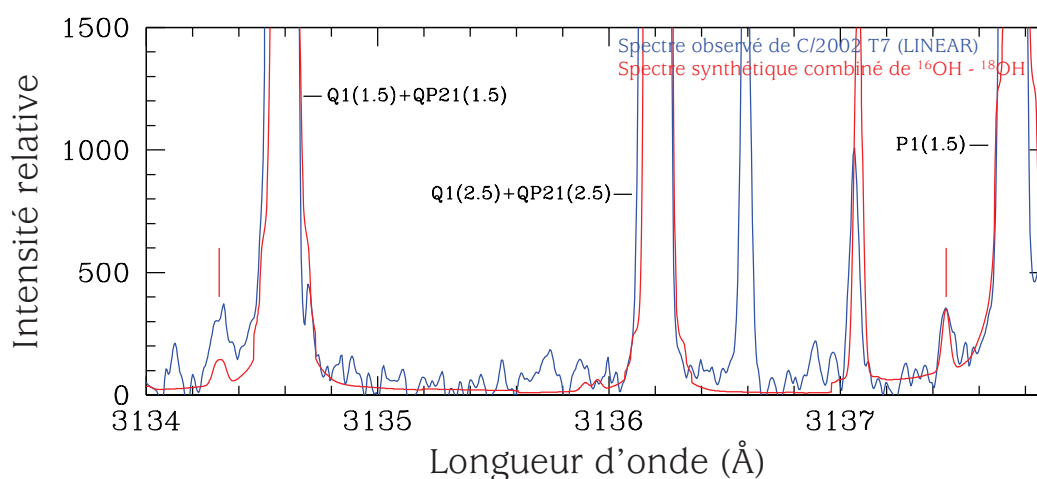
**FIGURE 7.15** – Comparaison du spectre observé de la comète C/2002 T7 (LINEAR) (en bleu) et de la bande (1,1) du spectre synthétique de OH fourni par notre modèle de fluorescence (en rouge). Le spectre cométaire a été volontairement décalé de 0.3 angströms pour une meilleure visualisation des intensités.



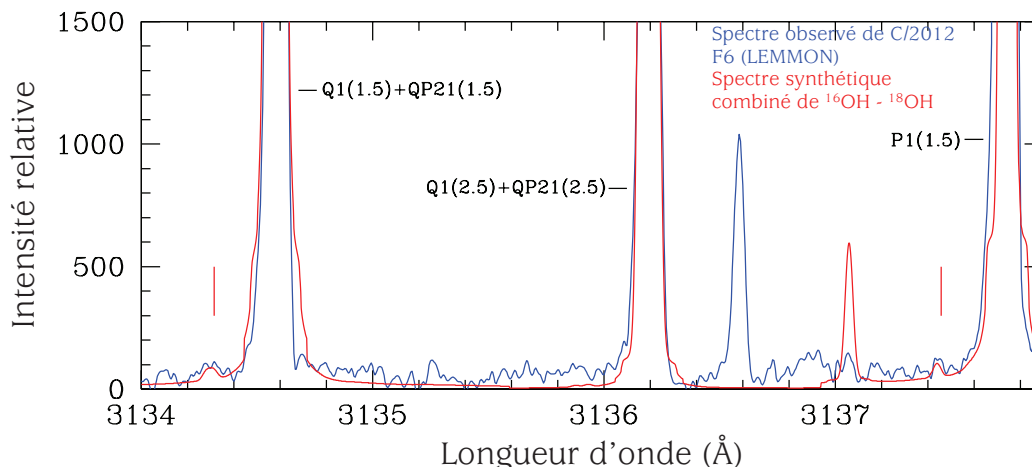
**FIGURE 7.16** – Comparaison du spectre observé de la comète C/2012 F6 (Lemmon) (en bleu) et de la bande (0,0) du spectre synthétique de OH fourni par notre modèle de fluorescence (en rouge). Le spectre cométaire a été volontairement décalé de 0.3 angströms pour une meilleure visualisation des intensités.



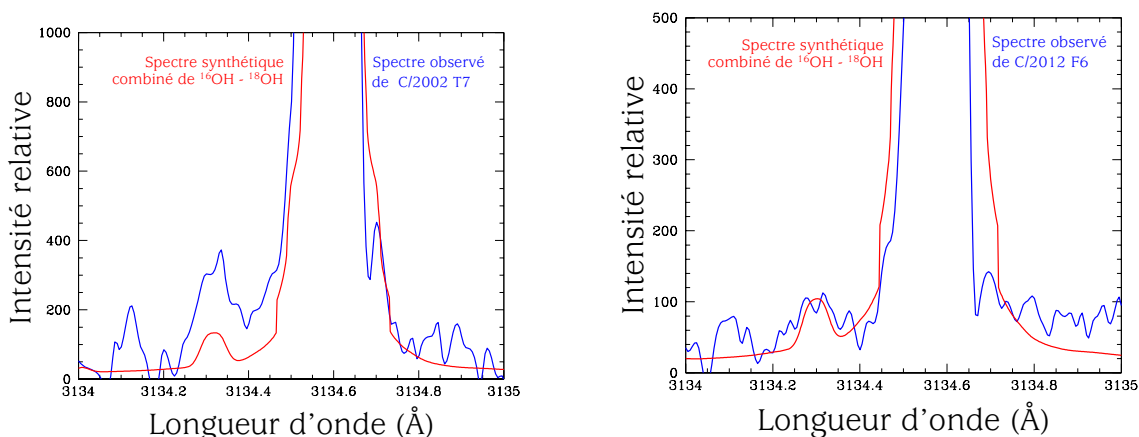
**FIGURE 7.17** – Comparaison du spectre observé de la comète C/2012 F6 (Lemmon) (en bleu) et de la bande (1,1) du spectre synthétique de OH fourni par notre modèle de fluorescence (en rouge). Le spectre cométaire a été volontairement décalé de 0.3 angströms pour une meilleure visualisation des intensités.



**FIGURE 7.18** – Vue d'une partie de la bande de OH (1,1) de la comète C/2002 T7 (LINEAR). Le spectre observé est représenté en bleu et le spectre rouge correspond au spectre synthétique de fluorescence combiné pour les isotopes  $^{16}\text{OH}$  et  $^{18}\text{OH}$ . La position des raies de  $^{18}\text{OH}$  à 3134.315 Å et 3137.459 Å est indiquée.

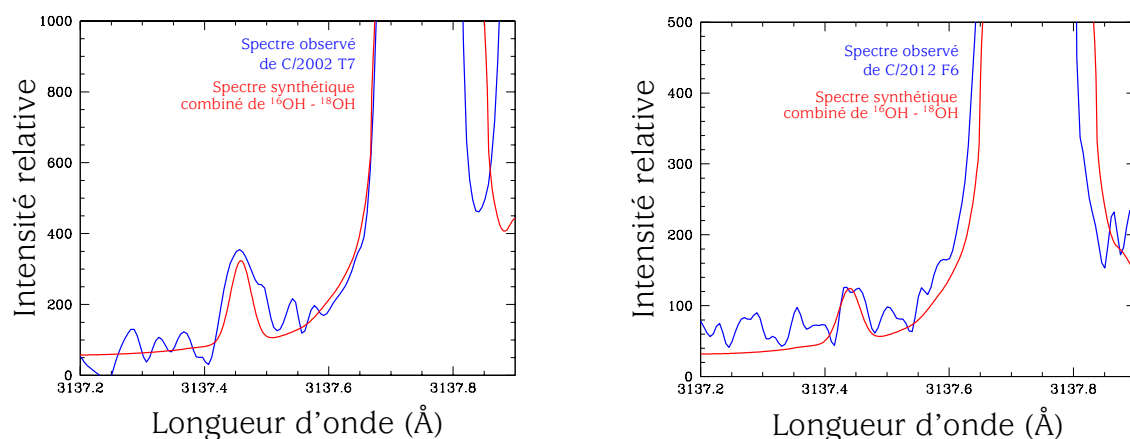


**FIGURE 7.19** – Vue d’une partie de la bande de OH (1,1) de la comète C/2012 F6 (Lemmon). Le spectre observé est représenté en bleu et le spectre rouge correspond au spectre synthétique de fluorescence combiné pour les isotopes  $^{16}\text{OH}$  et  $^{18}\text{OH}$ . La position des raies de  $^{18}\text{OH}$  à 3134.315 Å et 3137.459 Å est indiquée.



**FIGURE 7.20** – Zoom sur l’ajustement de la raie de  $^{18}\text{OH}$  à 3134.315 Å. Cet ajustement considère un rapport  $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$  égal à  $450 \pm 100$  pour la comète C/2002 T7 (LINEAR) et à  $300 \pm 150$  pour C/2012 F6 (Lemmon).

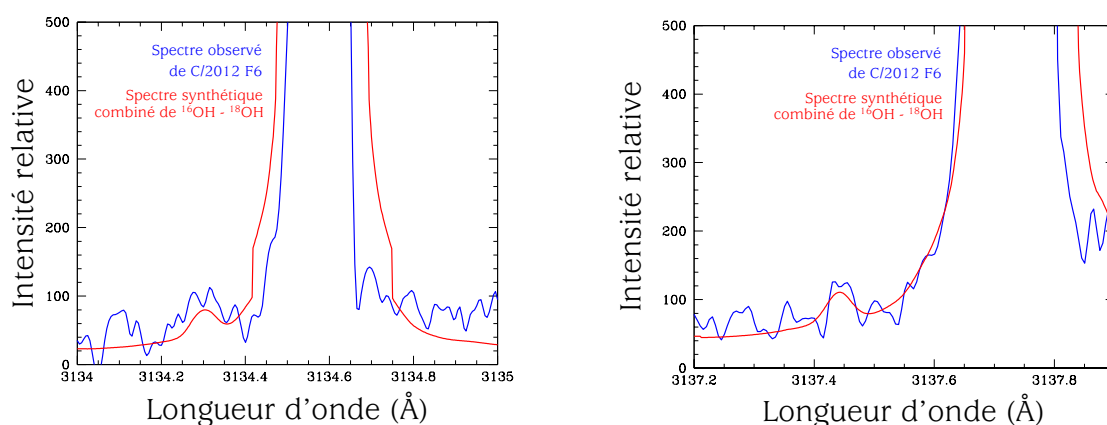
Etant donné que la molécule OH est principalement un produit de photodissociation de  $\text{H}_2\text{O}$ , le rapport  $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$  déduit des isotopes de OH reflète la valeur de  $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$  dans l’eau des comètes. Ceci suppose tout de même que les sections efficaces de  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  et de  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  sont identiques mais cette hypothèse est tout à fait réaliste. Contrairement au résultat obtenu pour C/2002 T7 (LINEAR), la valeur de  $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$  mesurée pour la comète C/2012 F6 (Lemmon) semble plus petite que la valeur terrestre ( $^{16}\text{O}/^{18}\text{O} = 499$ ) ainsi que celles estimées par le satellite Odin sur un échantillon de 4 comètes ( $^{16}\text{O}/^{18}\text{O} = 550 \pm 75$ ) (Biver et al., 2007) via la mesure de  $\text{H}_2^{16}\text{O}$  et  $\text{H}_2^{18}\text{O}$  dans les données submillimétriques.



**FIGURE 7.21** – Zoom sur l’ajustement de la raie de  $^{18}\text{OH}$  à  $3137.459 \text{ \AA}$ . Cet ajustement considère un rapport  $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$  égal à  $450 \pm 100$  pour la comète C/2002 T7 (LINEAR) et à  $300 \pm 150$  pour C/2012 F6 (Lemmon).

Une simulation de l’ajustement des raies de  $^{18}\text{OH}$  avec un rapport  $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$  terrestre nous montre que ce dernier n’est pas compatible avec nos observations (cf. figure 7.22).

Bien que notre mesure  $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$  soit entachée d’une importante incertitude, on peut se demander si la comète C/2012 F6 (Lemmon) n’est pas particulière au niveau des rapports isotopiques. Nous avons donc également mesuré les rapports isotopiques du carbone et de l’azote à partir des molécules de CN et de  $\text{NH}_2$  dans le but de comparer les résultats avec les valeurs déjà proposées dans la littérature. Suite à ce travail, dont les détails sont fournis en Annexe C, nous avons déduit que le rapport  $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$  valait  $95 \pm 25$  et celui de  $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$  était égal à  $137 \pm 45$ .



**FIGURE 7.22** – Ajustement des raies de  $^{18}\text{OH}$  pour la comète C/2012 F6 (Lemmon) en considérant la valeur terrestre pour  $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$ . Cela nous permet de constater que cette valeur n’est pas compatible avec nos observations.



Ces analyses montrent que la comète C/2012 F6 (Lemmon) semble tout à fait analogue aux autres comètes en ce qui concerne les rapports isotopiques. Dès lors, la plus petite valeur de  $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$  comme mesurée dans C/2002 T7 (LINEAR) est intéressante dans le contexte actuel de la mesure du D/H dans les comètes et de l'origine cométaire de l'eau des océans sur Terre. En effet, Hartogh et al. (2011) ont relancé l'idée que les comètes provenant de la ceinture de Kuiper pourraient faire partie des sources d'eau sur Terre. Cependant cette conclusion a été amenée en supposant un rapport  $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$  égal à  $500 \pm 50$  en référence aux précédentes mesures (Biver et al., 2007; Hutsemékers et al., 2008). L'étude réalisée par la comète C/2012 F6 (Lemmon) semble cependant montrer que ce rapport pourrait varier d'une comète à l'autre. Si celui-ci était plus petit dans 103P/Hartley 2, la valeur du rapport D/H augmenterait et se rapprocherait des valeurs de D/H obtenues pour les comètes du nuage de Oort qui ont un rapport D/H de  $\sim 3 \cdot 10^{-4}$ .

Dès lors, une similarité entre le D/H des comètes et le D/H des océans terrestres n'est pas encore certaine. L'eau des comètes comme source d'origine de l'eau des océans terrestres n'est pas encore prouvée ni réfutée. Pour amener des éléments de réponses à cette question qui fait débat depuis de nombreuses années, il serait essentiel d'obtenir des mesures à la fois du D/H et du  $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$  pour une autre comète provenant de la ceinture de Kuiper. Dans ce contexte, le modèle de fluorescence décrit dans le présent chapitre apporte une méthode supplémentaire pour permettre ce genre de mesure. Celle-ci a l'avantage de se baser sur des spectres acquis avec des télescopes au sol. Cependant, la détection des isotopes de OH requiert des spectres acquis non seulement avec une résolution instrumentale élevée et à airmass faible mais aussi provenant de comètes très brillantes (magnitude  $< 5$ ) ayant des taux de production élevés ( $Q_{\text{H}_2\text{O}} \sim 10^{30}$  molécules/secondes).

## 7.5 Les raies *promptes* de OH du proche ultraviolet

---

Lorsque la molécule d'eau est dissociée par le rayonnement Lyman- $\alpha$ , un petit pourcentage de radicaux OH est produit dans des états de rotation très élevés (niveau électronique  $A^2\Sigma^+$ ), comme le montrent des expériences menées en laboratoire (Carrington, 1964). La désexcitation très rapide vers le niveau  $X^2\Pi_i$  qui s'en suit donne naissance au système de raies de OH dites "*promptes*" localisées aux alentours de 3100 Å.

Ce mécanisme d'émission spontanée impliquerait une augmentation de l'intensité de OH au niveau du noyau ( $R < 33$  km) par rapport à celle qui serait atteinte en ne considérant que le processus de fluorescence (Bertaux, 1986).

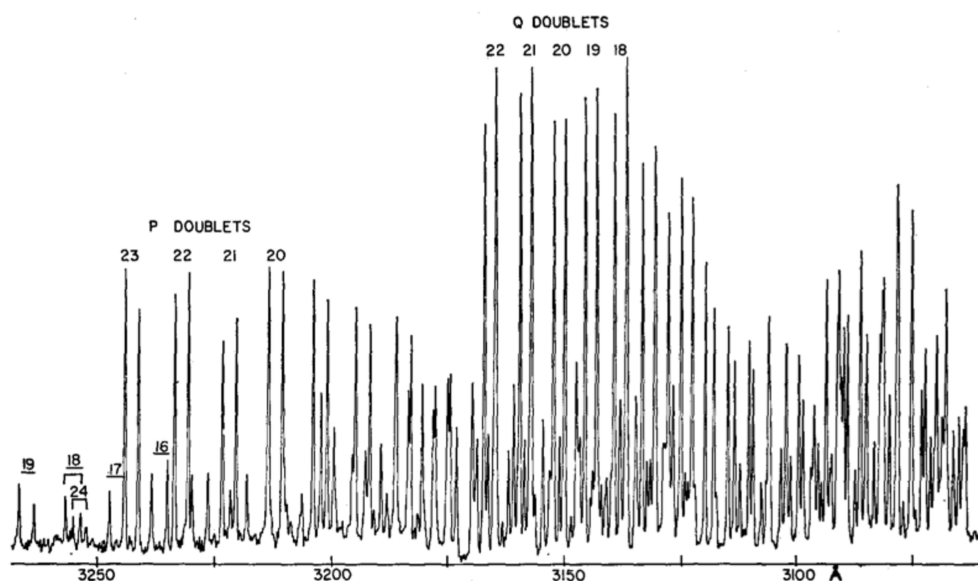
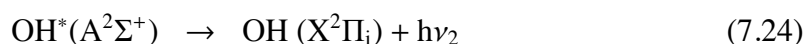
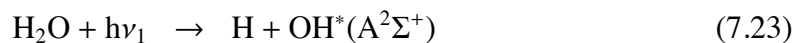


FIGURE 7.23 – Spectre d'émission des raies de OH *promptes* obtenues en laboratoire. Toutes les raies correspondent à la bande (1,1) sauf celles pour lesquelles le nombre quantique de rotation N est souligné. Ce spectre est extrait de l'article de Carrington (1964).

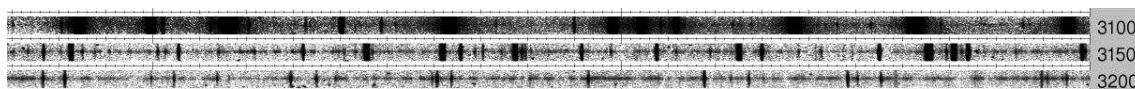
Les raies *promptes* de OH se décrivent suivant les réactions suivantes :



Le temps de vie du radical OH ( $\text{A}^2\Sigma^+$ ) vaut  $0.83 \cdot 10^{-6}$  secondes. Sachant que les vitesses d'éjection de  $\text{H}_2\text{O}$  et de OH valent, respectivement,  $0.78 \text{ km s}^{-1}$  et  $1.05 \text{ km s}^{-1}$ , le photon  $h\nu_2$  est donc émis à  $\sim 1 \text{ mm}$  de distance du lieu où la molécule de  $\text{H}_2\text{O}$  s'est photodissociée. L'étude des raies *promptes* de OH peut donc servir à construire la carte de distribution de  $\text{H}_2\text{O}$  dans la coma cométaire. L'émission *prompte* de OH se distingue de l'émission induite par l'équilibre de fluorescence car le pic d'intensité des raies se trouve à  $3130 \text{ \AA}$  contre  $3090 \text{ \AA}$  pour la fluorescence. Cependant, bien que ces raies soient prédites par la théorie pour les comètes, il n'existe pas encore beaucoup d'observations et d'analyses détaillées de ces raies. En effet, jusqu'à présent, Budzien & Feldman (1991) ont présenté une observation de ce phénomène, à la limite de sensibilité des données obtenues, dans des spectres de la comète IRAS-Araki-Alcock acquis par le satellite IUE. Rousselot et al. (1993) avaient également abordé le problème de la détection des raies de OH *promptes* dans les spectres de la comète 1P/Halley acquis par le sonde Vega 2 et ont montré que, sur base de leurs observations, l'intensité des raies *promptes* était négligeable par rapport à celle induite par le processus de fluorescence. Plus récemment, A'Hearn et al. (2007) ont observé les raies *promptes* des branches P et Q dans les spectres

de la comète C/1996 B2 (Hyakutake) obtenus avec télescope Mayall de l'observatoire du Kitt Peak. Les raisons de ce peu d'études sont nombreuses. Premièrement, étant situées dans le proche UV, l'observation de ces raies n'est pas toujours facilement accessible depuis le sol. Deuxièmement, les raies *promptes* sont de faible intensité, avec un facteur de l'émission *prompte* de  $\sim 5.5 \cdot 10^{-7}$  photons  $s^{-1}$  molécules $^{-1}$  comparé au facteur de fluorescence estimé à  $1.67 \cdot 10^{-3}$  photons  $s^{-1}$  molécules $^{-1}$ . Troisièmement, une bonne résolution spectrale et spatiale est essentielle pour détecter ces raies qui se manifestent à proximité du noyau cométaire (moins de 100 km pour une comète d'activité normale) (Budzien & Feldman, 1991).

Les spectres cométaires acquis avec le spectrographe UVES possèdent une qualité suffisante pour entreprendre une telle recherche systématique où nous avons déjà identifié un grand nombre de raies *promptes* (cf. figures 7.24 et 7.25).

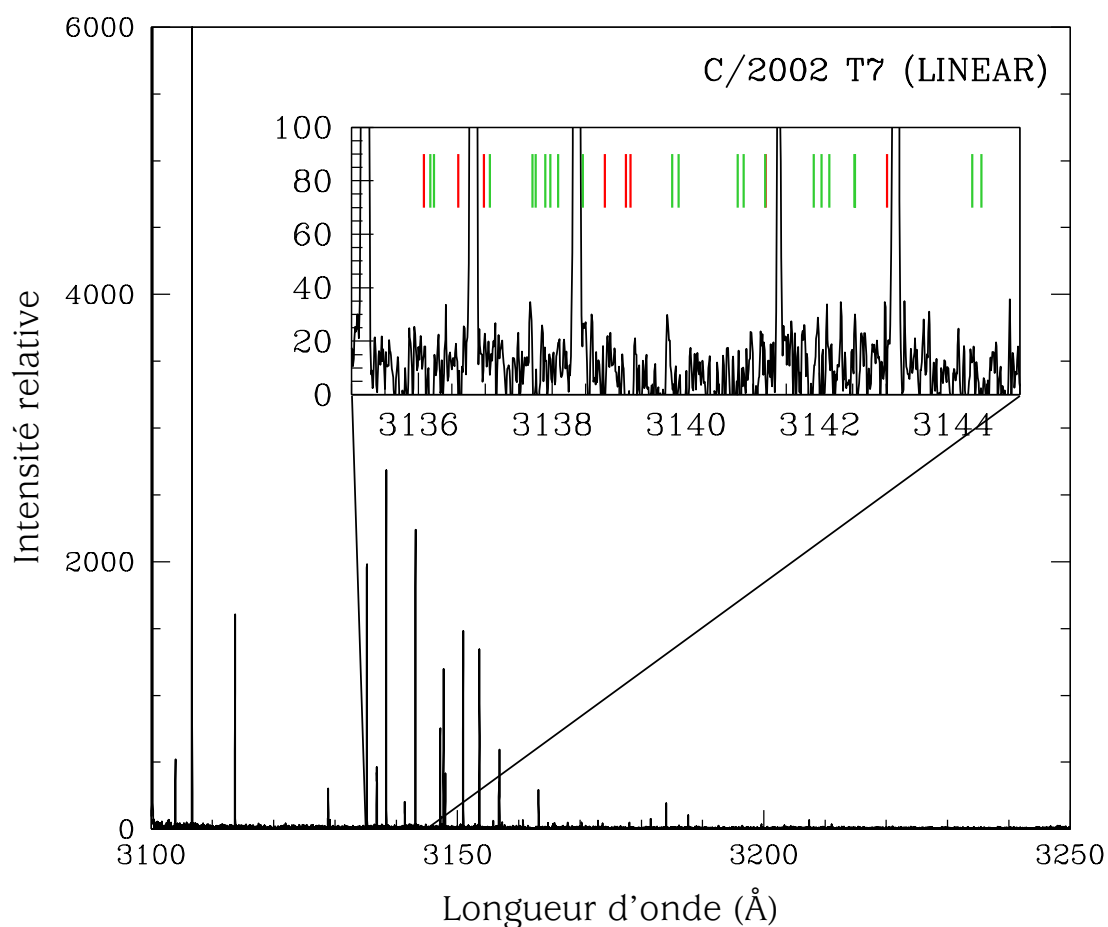


**FIGURE 7.24** – Détection des raies de OH *promptes* dans un spectre 2D de la comète C/2002 T7 (LINEAR). Elles correspondent aux raies sans extension superposées au continu.

Au vu du spectre de la comète C/2002 T7 (LINEAR), nous constatons que les raies de OH *promptes* se mêlent aux raies de OH de la bande (1,1) produites par le phénomène de fluorescence à l'équilibre. Ceci explique pourquoi des raies observées n'étaient pas reproduites par notre modèle de fluorescence dans la section 7.4.1. Il s'agissait des raies *promptes* de OH. Dès lors, dans le but de parfaire notre modèle, nous pourrions inclure ces raies particulières de OH. Ce travail demande de connaître l'énergie des niveaux pour les transitions créant les raies de OH *promptes*. La détermination de celle-ci constitue l'étape suivante de notre travail de modélisation. Notons que ces raies *promptes* ont déjà été identifiées et implémentées au modèle de Zucconi dans le cas de l'analyse de la comète C/2002 T7 (LINEAR) (Hutsemékers et al., 2008). Malheureusement, peu de détail concernant le modèle de Zucconi est fourni. La modélisation des raies de OH *promptes* sera également intéressante car elle permettra de définir le nombre de molécules de OH présentes dans la coma des comètes et donc, en finalité, le taux de production de H<sub>2</sub>O.

## 7.6 Conclusion

Ce chapitre décrit le modèle de fluorescence de la molécule OH et de ses isotopologues <sup>18</sup>OH et OD. Ce modèle a été réalisé dans le but de fournir une méthode de détermination des rapports isotopiques <sup>16</sup>O/<sup>18</sup>O et D/H. Les spectres synthétiques générés prennent en compte les bandes de séquences  $\Delta v=0, 1$  et  $2$ . Certaines raies de la bande (1,1) ne sont pas



**FIGURE 7.25** – Détection des raies de OH *promptes* dans un spectre 1D de la comète C/2002 T7 (LINEAR) acquis le 26 mai 2004 avec un temps de pose de  $\sim 2500$  secondes. Les traits rouges indiquent la position des raies *promptes* de OH dans la bande (0,0) et les traits verts se rapportent aux raies de OH *promptes* dans la bande (1,1). La bande (1,1) de OH se superpose aux raies de OH *promptes* aux alentours de 3140 Å.

toujours bien reproduites par le spectre synthétique. La raison demeure encore inconnue mais fera l'objet de recherches supplémentaires très prochainement. Cela dit, l'essentiel des intensités relatives des raies des bandes (0,0) et (1,1) est correctement modélisé. La confrontation de notre modèle avec des spectres cométaires nous a donc permis de valider la fiabilité de celui-ci. Des améliorations pourront évidemment encore être apportées. Premièrement, les intensités relatives de deux raies différentes appartenant au même doublet  $\Lambda$  sont supposées ici avoir la même transition de probabilité. Afin d'atteindre une précision plus élevée, il sera nécessaire de considérer les doublets  $\Lambda$  comme des niveaux distincts. Deuxièmement, les transitions impliquant les niveaux de base  $X^2\Pi_{3/2}$  et  $X^2\Pi_{1/2}$ , appelées transitions *satellites* ne sont pas considérées dans cette analyse. Leur probabilité de transition est très faible mais l'intégration de ces transitions dans le code de fluorescence contribuerait à son amélioration. Notons que dans ce modèle, seules les transitions

induites par le phénomène de fluorescence sont considérées. Le peuplement des niveaux d'énergie peut également se faire via les collisions. Comme l'atmosphère cométaire est un milieu peu dense, celles-ci ne sont pas très fréquentes mais néanmoins existantes. Même si l'effet des collisions semble de prime abord négligeable, l'ajout de celui-ci dans le modèle apporterait une meilleure estimation des populations des niveaux d'énergie.

De plus, lors de la confrontation de nos spectres synthétiques aux spectres cométaires, nous avons constaté que les pieds des raies de OH s'étalaient en formant un pseudo-continuum, comme montré sur la figure 7.6. La raison de ce profil en *ails* n'est pas encore clairement identifiée. Cet étalement de la raie ne semble pas provenir d'un effet instrumental étant donné que les raies de Thorium-Argon ne présentent pas cette particularité mais rien n'est moins sûr. Sachant que la photodissociation de H<sub>2</sub>O ne produit que 90% des radicaux OH, une hypothèse explicative serait que les 10% restant soient formés via des mécanismes impliquant des ions possédant une vitesse plus élevée. Pour confirmer cette supposition, il serait donc utile de comparer la largeur du pied des raies de OH avec la vitesse que possèderaient ces radicaux engendrés par la photodissociation de l'ion H<sub>3</sub>O<sup>+</sup> tel que :



La mesure de cette vitesse est toutefois complexe car elle exige la maîtrise d'un modèle prenant en compte les différentes réactions amenant à la production de H<sub>3</sub>O<sup>+</sup> à l'origine des radicaux OH.



*"Chaque progrès donne un nouvel espoir, suspendu à la solution d'une nouvelle difficulté. Le dossier n'est jamais clos."*

Claude Lévi-Strauss





# 8

---

## Conclusions et perspectives

---

La spectroscopie constitue un outil essentiel pour l'étude des comètes, et plus particulièrement, pour l'analyse de leur composés chimiques issus de la sublimation des glaces du noyau. Etudier la composition chimique et isotopique des comètes permet de fournir de précieux renseignements sur les origines du Système Solaire. En effet, les comètes sont parmi les spécimens les mieux conservés de la nébuleuse solaire primitive, ce qui leur confère un rôle unique pour comprendre les premiers instants de notre Système Solaire. Dans cette optique, nous nous sommes penchés, au cours de cette thèse, sur l'étude de l'eau présente dans les comètes. Partant du fait que  $\text{H}_2\text{O}$  est la molécule la plus abondante dans les glaces cométaires, son analyse nous fournira donc des informations supplémentaires quant à la nature même des comètes. L'eau n'ayant toutefois pas de transition dans le domaine visible (excepté son ion  $\text{H}_2\text{O}^+$ ), nous avons axé nos recherches sur l'analyse de deux de ses produits de dissociation, à savoir l'oxygène atomique et le radical OH qui sont, quant à eux, observables dans ce domaine.

La première partie de cette thèse s'est concentrée sur le premier sous-produit de l'eau, à savoir l'oxygène atomique à partir des trois raies interdites de l'oxygène situées à 5577.339 Å pour la raie verte ( $\text{O}({}^1\text{S})$ ), à 6300.304 Å et à 6363.776 Å pour les raies du doublet rouge ( $\text{O}({}^1\text{D})$ ). Cette étude est basée sur une série de spectres collectés par le spectrographe à haute résolution UVES installé sur l'UT2 du VLT (ESO). Un long travail de réduction et de nettoyage des spectres a d'abord été entrepris en vue d'obtenir des données fiables ne possédant que des raies d'émissions produites dans la coma. Seuls ont

été conservés les spectres pour lesquels les raies d'oxygène telluriques ne contaminaient pas les raies cométaires. A partir de ceux-ci, deux mesures ont été réalisées : d'une part, l'évaluation des rapports d'intensité des raies et d'autre part, l'estimation des largeurs intrinsèques en vitesse de ces raies. Cette première partie comprend deux études distinctes.

Premièrement, les analyses ont été menées sur un échantillon de 48 spectres provenant de douze comètes différentes observées à différentes distances héliocentriques. Notre investigation a montré que le rapport d'intensité des raies rouges ( $3.11 \pm 0.10$ ) était compatible avec le rapport de branchement prédit par la mécanique quantique (Galavis et al., 1997). De plus le rapport de l'intensité de la raie verte sur la somme des intensités des raies rouges (rapport G/R) a été évalué en moyenne à  $0.09 \pm 0.02$ . Ces résultats nous ont amené à confirmer que l'oxygène était majoritairement originaire de la molécule parente  $H_2O$ . Suite à cette étude globale, nous nous sommes ensuite penchés sur des données plus spécifiques, à savoir sur les spectres acquis à de grandes distances héliocentriques. Nous avons alors remarqué que lorsque la distance au Soleil excède 2.5 ua, le rapport G/R change rapidement, indiquant qu'une ou plusieurs autres molécules commencent à contribuer à la production d'atomes d'oxygène. Après  $H_2O$ , les espèces les plus abondantes de la coma sont le monoxyde et le dioxyde de carbone. Nous avons montré que la molécule de  $CO_2$  pouvait contribuer à la production d'oxygène lorsque la comète est éloignée du Soleil. Le rapport G/R a dès lors été utilisé pour estimer l'abondance relative de  $CO_2/H_2O$  et nous avons trouvé que celle de la comète C/2001 Q4 (NEAT), observée à  $\sim 4$  ua, pouvait atteindre une valeur de 70%, indiquant que le dioxyde de carbone devient également parent de l'oxygène au-delà de 2.5 ua. L'abondance de CO joue par contre un rôle insignifiant sur la valeur du rapport G/R. L'examen des largeurs intrinsèques a montré une excellente correspondance entre les deux raies rouges comme annoncé dans la théorie ( $1.61 \pm 0.34 \text{ km s}^{-1}$  pour la raie à  $6300.304 \text{ \AA}$  et  $1.56 \pm 0.54 \text{ km s}^{-1}$  pour la raie à  $6363.776 \text{ \AA}$ ). En contre-partie, nous avons noté que la raie verte ( $2.44 \pm 0.28 \text{ km s}^{-1}$ ) était plus large d'environ  $\sim 1 \text{ km s}^{-1}$  par rapport aux raies du doublet rouge alors que les calculs théoriques annonçaient le résultat inverse. Cette largeur indique en réalité la vitesse la plus probable des atomes d'oxygène. Pour expliquer ce désaccord, nous avons proposé que la plus grande largeur de la raie verte pouvait être due à la nature de la source d'excitation ou à une contribution plus importante de  $CO_2$  comme parent de  $O(^1S)$ . Par contre, à  $\sim 4$  ua, nous avons constaté que les largeurs des raies verte et rouges de la comète C/2001 Q4 (NEAT) étaient similaires aux barres d'erreur près. Cette particularité s'explique en considérant la molécule de  $CO_2$  comme parent principal dans la production des atomes  $O(^1S)$  et  $O(^1D)$  à de grandes distances héliocentriques.

L'étude des raies interdites de l'oxygène à différentes distances héliocentriques pourra être

approfondie grâce à des observations cométaires acquises à de très grandes distances du Soleil. La détection des raies de [OI] à plus de 3 ua n'est cependant pas assurée. En effet, celle-ci est contrainte, non seulement par la précision et la résolution des instruments d'observation, mais aussi par l'activité et la brillance de la comète. Un cas idéal serait d'observer une comète de magnitude inférieure ou égale à 15, située à 5-6 ua et ayant assez de matière volatile à sublimer à de telles distances, libérant ainsi les molécules à l'origine des atomes d'oxygène. Localisée à ~6 ua du Soleil, la comète 29P/Schwassmann-Wachmann, observée pendant l'un de ses outbursts, serait une candidate intéressante.

La deuxième étude s'est focalisée sur 17 spectres de l'échantillon initial appartenant aux comètes C/2002 T7, 73P-C, 8P et 103P. La particularité de ces spectres est qu'ils ont été acquis lorsque ces comètes passaient très près de la Terre, à moins de 0.6 ua. Cela nous a permis d'atteindre une résolution spatiale importante, de moins de 60 km par pixel. Nous avons extrait spatialement les spectres afin d'acquérir une résolution encore plus élevée. Ainsi, la distance nucléocentrique projetée minimale atteinte est de 100 à 400 km, la valeur dépendant de la distance géocentrique de la comète. Afin de gagner en précision, nous avons également soustrait des spectres, un spectre synthétique de la molécule de  $C_2$  défini sous les mêmes conditions physiques que la comète observée. En effet, nous avons identifié au préalable la présence de deux raies de  $C_2$  au niveau de la raie d'oxygène verte. Cette étape est nécessaire car la contamination croît au plus on s'éloigne du noyau, l'intensité des raies d'oxygène diminuant plus rapidement que celle des raies de  $C_2$ . Finalement, nous avons découvert que le rapport G/R variait en fonction de la distance nucléocentrique projetée. En effet, sa valeur chute de ~0.25 à ~0.05 dans les mille premiers kilomètres. Le quenching collisionnel de  $O(^1S)$  et  $O(^1D)$  par les molécules de  $H_2O$  dans la coma interne en est la cause principale. Qui plus est, nous avons constaté que la largeur intrinsèque de la raie verte s'affine au plus la distance au noyau augmente. Cette variation de profil peut s'expliquer par une contribution plus ou moins importante de la molécule de  $CO_2$  dans la production des atomes de  $O(^1S)$  au niveau de la coma interne. En effet, la photodissociation de  $CO_2$  semble produire la plupart des atomes de  $O(^1S)$  très près du noyau alors que tous les atomes de  $O(^1S)$  et  $O(^1D)$  sont formés par la molécule de  $H_2O$  au-delà de 1000 km. Suite à ces observations, nous avons conclu que les espèces parentes principales à l'origine des atomes d'oxygène dans la coma changent en fonction de la distance au noyau. Ces observations ont également été interprétées dans le cadre du modèle d'émission de Bhardwaj & Raghuram (2012). Grâce à celui-ci, nous avons déterminé une limite supérieure pour l'abondance relative du  $CO_2$  des comètes à partir de la mesure des rapports G/R.

Dès lors, ces deux approches complémentaires nous amènent à une conclusion importante, à savoir que la mesure des raies interdites de l'oxygène offre un nouveau moyen d'obtenir l'abondance relative de  $\text{CO}_2$  dans les comètes à partir des données acquises depuis le sol, alors qu'une mesure directe de cette molécule est uniquement possible depuis l'Espace. Cela dit, les mystères des raies interdites de l'oxygène dans les spectres cométaires n'ont pas encore tout dévoilé et de nombreuses questions demeurent sans réponse. Les observations menées sur la comète C/2013 R1 (Lovejoy) montrent qu'il existe une grande dispersion au sein des largeurs des raies rouges pour des distances géocentrique et héliocentrique d'environ 1 ua et cette dernière est toujours inconnue. Une perspective à court terme dans ce but serait d'obtenir des données acquises avec une résolution instrumentale encore plus élevée. Il serait judicieux de consacrer du temps, par exemple sur le télescope AAT (*Anglo-Australian Telescope*) à l'observation d'une comète de magnitude inférieure ou égale à 6 avec le spectrographe UHRF (*Ultra-High Resolution Facility*) qui peut atteindre une résolution spectrale de 300 000. Même si la surface du miroir est 4 fois plus petite que celle du VLT, une comète de magnitude 6 située à une distance géocentrique de  $\sim 1$  ua observée pendant un temps de pose de  $\sim 1$  heure nous fournirait un rapport signal-sur-bruit d'environ 50, ce qui est plus que suffisant pour l'analyse des raies interdites de l'oxygène.

La deuxième partie de cette thèse a été dédiée à la réalisation d'un modèle de fluorescence du second produit de dissociation de l'eau, le radical OH. Un code numérique a été mis en place afin de produire des spectres synthétiques de fluorescence du radical OH et de ses isotopologues  $^{18}\text{OH}$  et OD. L'objectif de la construction de tels modèles est de pouvoir reproduire le spectre de OH et de détecter les raies de  $^{18}\text{OH}$  et de OD afin d'en déduire les rapports D/H et  $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$  dans des comètes provenant de différentes régions du Système Solaire. Comme les raies de ces radicaux sont situées dans le proche ultraviolet (3000 - 3200 Å), juste à la limite du *cut-off* atmosphérique, l'observation de celles-ci depuis le sol requiert un spectrographe de haute résolution caractérisé par une grande efficacité dans la partie bleue. UVES possède ces qualités. Cependant, cela ne suffit pas. La comète doit être brillante (magnitude  $< 5$ ) pour pouvoir détecter les raies des isotopes rares ( $^{18}\text{OH}$  et surtout OD). Les spectres de la comète C/2012 F6 (Lemmon) acquis avec le spectrographe UVES ont été utilisés par notre modèle et ont permis de le valider. Seule une estimation du rapport  $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$  ( $300 \pm 150$ ) a toutefois pu être déterminée, les raies de OD étant complètement perdues dans le bruit. Signalons que, actuellement, ce modèle ne tient compte que des raies de OH produites par le phénomène de fluorescence. Bien que de plus faible importance, la prise en compte des raies de OH dites *promptes* sera envisagée afin de parfaire notre modèle. Le rapport  $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$  est très utile car celui-ci

est requis pour contraindre la valeur du rapport D/H déduit des raies des molécules de H<sub>2</sub>O observées dans le domaine infrarouge. D'autre part, comme la valeur du D/H est potentiellement liée à la région de naissance des comètes, une telle mesure établie pour un grand nombre de comètes pourrait nous permettre d'obtenir des informations sur l'origine de chacune d'entre elles. De plus, la mesure du rapport D/H dans les comètes peut nous apporter des indices pour répondre à la question de l'origine des océans terrestres. Jusqu'à présent, la majorité des comètes pour lesquelles le D/H a été mesuré proviennent du nuage de Oort. En effet, ces comètes sont généralement plus brillantes et donc plus facilement observables. Celles-ci présentent un D/H trop élevé par rapport à la valeur terrestre mais ceci n'est pas le cas pour la mesure du D/H de la comète 103P/Hartley 2 appartenant à la famille de Jupiter. Dans la continuité de ce travail, il serait donc pertinent d'étendre les recherches aux différentes familles de comètes et d'acquérir un certain nombre de données pour chacune d'elles afin de pouvoir tirer des conclusions sur un échantillon représentatif et significatif. L'étude du D/H cométaire comparé au D/H terrestre s'inscrit également dans une quête plus large, celle de l'étude de l'eau dans notre Système Solaire. L'eau, sous sa forme liquide, a joué un rôle indispensable dans l'apparition et le maintien de la vie sur Terre. Sachant que les comètes possèdent, en plus de leur glace d'eau, des composés organiques et des acides aminés, elles pourraient constituer le chaînon manquant pour la compréhension de l'émergence de la vie. Tel est l'un des nombreux défis relevés par l'Astrobiologie depuis ces dix dernières années. Dans ce contexte, nous pouvons même envisager l'idée suivante : si les comètes sont maîtresses de la vie sur Terre, pourquoi les *exocomètes* n'auraient-elles pas engagé le même impact dans les autres systèmes exoplanétaires ?

De façon générale, ajoutons que les spectres UVES constituent encore à eux seuls une mine d'informations. En effet, seules ont été traitées dans ce travail les raies appartenant à l'oxygène et au radical OH. Or, ces spectres comprennent des centaines d'autres raies non encore étudiées. Nous pensons notamment aux raies de sodium et de potassium qui n'ont fait l'objet que de peu d'études jusqu'à ce jour (Cochran et al., 2013).

Si tout au long de cette thèse, nos recherches ont apporté quelques pièces au grand puzzle de la nature des comètes et de l'histoire de notre Système Solaire, les comètes n'ont pas encore dévoilé tous leurs secrets. Un travail de recherche a toujours un début mais rarement une fin. Les avancées scientifiques amènent souvent à de nouvelles observations ou à la nécessité d'améliorer les modèles théoriques existants. Au final, chaque nouvelle connaissance constitue une source de questionnements qui nourrissent toujours un peu plus l'esprit scientifique - et parfois même créatif - des chercheurs passionnés, comme dans ce cas par la compréhension de ces petits corps de glaces et de roches ren-

fermant des secrets datant de plusieurs milliards d'années.

L'étude de quelques comètes, comme il en a été question dans cette thèse, ne permet néanmoins pas de tirer des conclusions globales et strictes sur l'ensemble de la population des comètes. Les comètes restent des objets uniques. Gardons donc à l'esprit que la mission Rosetta, bien que très prometteuse pour l'avancée de la science cométaire, ne constitue au final qu'un premier pas. Certes, une telle mission spatiale est extrêmement importante puisqu'elle peut fournir une composition chimique précise du noyau *in situ* de 67P/Churyumov Gerasimenko mais elle ne concerne qu'une comète parmi des milliards d'autres. A partir des données Rosetta, des généralités ne pourront donc être tirées qu'avec beaucoup de précautions. Méfions-nous toujours de plans tirés sur la comète !

## PARTIE IV

## ANNEXES





---

# Bibliographie

---

Abrams, M. C., Davis, S. P., Rao, M. L. P., Engleman, Jr., R., & Brault, J. W. : 1994, *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **93**, 351

A'Hearn, M. F. : 2012, in *American Astronomical Society Meeting Abstracts 220*, Vol. 220 of *American Astronomical Society Meeting Abstracts*, p. 120.04

A'Hearn, M. F., Belton, M. J. S., Delamere, W. A., Feaga, L. M., Hampton, D., Kissel, J., Klaasen, K. P., McFadden, L. A., Meech, K. J., Melosh, H. J., Schultz, P. H., Sunshine, J. M., Thomas, P. C., Veverka, J., Wellnitz, D. D., Yeomans, D. K., Besse, S., Bodewits, D., Bowling, T. J., Carcich, B. T., Collins, S. M., Farnham, T. L., Groussin, O., Hermelyn, B., Kelley, M. S., Kelley, M. S., Li, J.-Y., Lindler, D. J., Lisse, C. M., McLaughlin, S. A., Merlin, F., Protopapa, S., Richardson, J. E., & Williams, J. L. : 2011, *Science* **332**, 1396

A'Hearn, M. F., Krishna Swamy, K. S., & Wellnitz, D. D. : 2007, in *AAS/Division for Planetary Sciences Meeting Abstracts #39*, Vol. 39 of *Bulletin of the American Astronomical Society*, p. 507

A'Hearn, M. F., Millis, R. L., & Birch, P. V. : 1979, *Astron. J.* **84**, 570

A'Hearn, M. F., Millis, R. L., Schleicher, D. G., Osip, D. J., & Birch, P. V. : 1995, *Icarus* **118**, 223

Aikawa, Y. & Herbst, E. : 1999, *Astrophys. J.* **526**, 314

Anders, E. & Grevesse, N. : 1989, **53**, 197

Anderson, Jr., D. E., Meier, R. R., Feldman, P. D., & Gentieu, E. P. : 1980, **7**, 1057

Arpigny, C. : 1966, *Astrophys. J.* **144**, 424

- Arpigny, C. : 1979, in A. Boury, N. Grevesse, & L. Remy-Battiau (eds.), *Liege International Astrophysical Colloquia*, Vol. 22 of *Liege International Astrophysical Colloquia*, pp 189–197
- Arpigny, C., Jehin, E., Manfroid, J., Hutsemékers, D., Schulz, R., Stüwe, J. A., Zucconi, J.-M., & Ilyin, I. : 2003, *Science* **301**, 1522
- Atkinson, R., Baulch, D. L., Cox, R. A., Crowley, J. N., Hampson, R. F., Hynes, R. G., Jenkin, M. E., Rossi, M. J., & Troe, J. : 2004, *Atmospheric Chemistry & Physics* **4**, 1461
- Balsiger, H., Altwegg, K., & Geiss, J. : 1995, *Journal of Geophysical Research* **100**, 5827
- Barber, R. J., Miller, S., Dello Russo, N., Mumma, M. J., Tennyson, J., & Guio, P. : 2009, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **398**, 1593
- Barth, C. A., Hord, C. W., Pearce, J. B., Kelly, K. K., Anderson, G. P., & Stewart, A. I. : 1971, *Journal of Geophysical Research* **76**, 2213
- Becker, H. H. & Haaks, D. : 1973, *Zeitschrift Naturforschung Teil A* **28**, 249
- Belton, M. J. S., Thomas, P., Veverka, J., Schultz, P., A’Hearn, M. F., Feaga, L., Farnham, T., Groussin, O., Li, J.-Y., Lisse, C., McFadden, L., Sunshine, J., Meech, K. J., Delamere, W. A., & Kissel, J. : 2007, *Icarus* **187**, 332
- Bertaux, J. L. : 1986, *Astron. & Astrophys.* **160**, L7
- Bertaux, J. L., Costa, J., Quémerais, E., Lallement, R., Berthé, M., Kyrölä, E., Schmidt, W., Summanen, T., Makinen, T., & Goukenleuque, C. : 1998, *Planet. Space Sci.* **46**, 555
- Bhardwaj, A., Elsner, R. F., Randall Gladstone, G., Cravens, T. E., Lisse, C. M., Dennerl, K., Branduardi-Raymont, G., Wargelin, B. J., Hunter Waite, J., Robertson, I., Østgaard, N., Beiersdorfer, P., Snowden, S. L., & Kharchenko, V. : 2007, *Planet. Space Sci.* **55**, 1135
- Bhardwaj, A. & Haider, S. A. : 2002, *Advances in Space Research* **29**, 745
- Bhardwaj, A. & Raghuram, S. : 2012, *Astrophys. J.* **748**, 13
- Biraud, F., Bourgois, G., Crovisier, J., Fillit, R., Gerard, E., & Kazes, I. : 1974, *Astron. & Astrophys.* **34**, 163

- Birtwhistle, P., Buzzi, L., Holmes, R., Devore, H., Foglia, S., Vorobjov, T., Sato, H., & Williams, G. V. : 2012, *Central Bureau Electronic Telegrams* **3070**, 1
- Bisikalo, D. V., Shematovich, V. I., Gerard, J.-C., Jehin, E., Decock, A., Hutsemekers, D., Manfroid, J., & Hubert, B. : 2014, *submitted to Astrophys. J.*
- Biver, N., Bockelée-Morvan, D., Crovisier, J., Davies, J. K., Matthews, H. E., Wink, J. E., Rauer, H., Colom, P., Dent, W. R. F., Despois, D., Moreno, R., Paubert, G., Jewitt, D., & Senay, M. : 1999, *Astron. J.* **118**, 1850
- Biver, N., Bockelée-Morvan, D., Crovisier, J., Lecacheux, A., Frisk, U., Hjalmarson, Å., Olberg, M., Florén, H.-G., Sandqvist, A., & Kwok, S. : 2007, *Planet. Space Sci.* **55**, 1058
- Biver, N., Bockelée-Morvan, D., Debout, V., Crovisier, J., Boissier, J., Lis, D. C., Dello Russo, N., Moreno, R., Colom, P., Paubert, G., Vervack, R., & Weaver, H. A. : 2014, *Astron. & Astrophys.* **566**, L5
- Biver, N., Bockelée-Morvan, D., Lis, D. C., Paubert, G., Swinyard, B., Crovisier, J., Moreno, R., Gicquel, A., Colom, P., Lellouch, E., Hartogh, P., Boissier, J., Cordiner, M., Courtin, R., de Val-Borro, M., Dello Russo, N., Kidger, M., Küppers, M., Milam, S., Rengel, M., Szutowicz, S., Vervack, R. J., Weaver, H. A., HssO Team, & OT1 dbockellee 1 Team : 2012, *LPI Contributions* **1667**, 6330
- Bockelée-Morvan, D. : 1987, *Astron. & Astrophys.* **181**, 169
- Bockelée-Morvan, D., Biver, N., Jehin, E., Cochran, A. L., Wiesemeyer, H., Manfroid, J., Hutsemekers, D., Arpigny, C., Boissier, J., Cochran, W., Colom, P., Crovisier, J., Milutinovic, N., Moreno, R., Prochaska, J. X., Ramirez, I., Schulz, R., & Zucconi, J.-M. : 2008, *Astrophys. J., Lett.* **679**, L49
- Bockelée-Morvan, D., Biver, N., Swinyard, B., de Val-Borro, M., Crovisier, J., Hartogh, P., Lis, D. C., Moreno, R., Szutowicz, S., Lellouch, E., Emprechtinger, M., Blake, G. A., Courtin, R., Jarchow, C., Kidger, M., Küppers, M., Rengel, M., Davis, G. R., Fulton, T., Naylor, D., Sidher, S., & Walker, H. : 2012, *Astron. & Astrophys.* **544**, L15
- Bockelée-Morvan, D., Brooke, T. Y., & Crovisier, J. : 1995, *Icarus* **116**, 18
- Bockelée-Morvan, D., Colom, P., Crovisier, J., Despois, D., & Paubert, G. : 1991, *Nature* **350**, 318
- Bockelée-Morvan, D., Crovisier, J., Colom, P., & Despois, D. : 1994, *Astron. & Astrophys.* **287**, 647

- Bockelée-Morvan, D., Crovisier, J., Colom, P., Despois, D., & Paubert, G. : 1990a, in B. Battrock (ed.), *ESA Special Publication*, Vol. 315 of *ESA Special Publication*, pp 143–148
- Bockelée-Morvan, D., Crovisier, J., & Gerard, E. : 1990b, *Astron. & Astrophys.* **238**, 382
- Bockelée-Morvan, D., Crovisier, J., Mumma, M. J., & Weaver, H. A. : 2004, *The composition of cometary volatiles*, pp 391–423
- Bockelée-Morvan, D., Gautier, D., Lis, D. C., Young, K., Keene, J., Phillips, T., Owen, T., Crovisier, J., Goldsmith, P. F., Bergin, E. A., Despois, D., & Wootten, A. : 1998, *Icarus* **133**, 147
- Bockelée-Morvan, D., Hartogh, P., Crovisier, J., Vandenbussche, B., Swinyard, B. M., Biver, N., Lis, D. C., Jarchow, C., Moreno, R., Hutsemékers, D., Jehin, E., Küppers, M., Lara, L. M., Lellouch, E., Manfroid, J., de Val-Borro, M., Szutowicz, S., Banaszkiwicz, M., Bensch, F., Blecka, M. I., Emprechtinger, M., Encrenaz, T., Fulton, T., Kidger, M., Rengel, M., Waelkens, C., Bergin, E., Blake, G. A., Blommaert, J. A. D. L., Cernicharo, J., Decin, L., Encrenaz, P., de Graauw, T., Leeks, S., Medvedev, A. S., Naylor, D., Schieder, R., & Thomas, N. : 2010, *Astron. & Astrophys.* **518**, L149
- Bockelée-Morvan, D., Lis, D. C., Wink, J. E., Despois, D., Crovisier, J., Bachiller, R., Benford, D. J., Biver, N., Colom, P., Davies, J. K., Gérard, E., Germain, B., Houde, M., Mehringer, D., Moreno, R., Paubert, G., Phillips, T. G., & Rauer, H. : 2000, *Astron. & Astrophys.* **353**, 1101
- Bockelée-Morvan, D., Wink, J., Despois, D., Colom, P., Biver, N., Crovisier, J., Gautier, D., Gérard, E., Lellouch, E., Moreno, R., Paubert, G., Rauer, H., Davies, J. K., & Dent, W. R. F. : 1997, *Earth Moon and Planets* **78**, 67
- Bockelée-Morvan, D., Woodward, C. E., Kelley, M. S., & Wooden, D. H. : 2009, *Astrophys. J.* **696**, 1075
- Bodewits, D., Christian, D. J., Torney, M., Dryer, M., Lisse, C. M., Dennerl, K., Zurbuchen, T. H., Wolk, S. J., Tielens, A. G. G. M., & Hoekstra, R. : 2007, *Astron. & Astrophys.* **469**, 1183
- Boehnhardt, H., Pompei, E., Tozzi, G. P., Hainaut, O., Ageorges, N., Bagnulo, S., Barrera, L., Bonev, T., Käufl, H. U., Kerber, F., Locurto, G., Marco, O., Pantin, E., Rauer, H., Saviane, I., Selman, F., Sterken, C., & Weiler, M. : 2007, *Astron. & Astrophys.* **470**, 1175

- Bönnhardt, H., Kaufl, H. U., Keen, R., Camilleri, P., Carvajal, J., & Hale, A. : 1995, *IAU Circ.* **6274**, 1
- Bonev, B. P., Mumma, M. J., Gibb, E. L., DiSanti, M. A., Villanueva, G. L., Magee-Sauer, K., & Ellis, R. S. : 2009, *Astrophys. J.* **699**, 1563
- Bonev, B. P., Mumma, M. J., Radeva, Y. L., DiSanti, M. A., Gibb, E. L., & Villanueva, G. L. : 2008, *Astrophys. J., Lett.* **680**, L61
- Bonev, B. P., Mumma, M. J., Villanueva, G. L., Disanti, M. A., Ellis, R. S., Magee-Sauer, K., & Dello Russo, N. : 2007, *Astrophys. J., Lett.* **661**, L97
- Bonev, T., Borisov, G., & Ivanova, A. : 2002, *Publications de l'Observatoire Astronomique de Beograd* **73**, 73
- Bonev, T. & Jockers, K. : 1994, *Icarus* **107**, 335
- Briggs, R., Ertem, G., Ferris, J. P., Greenberg, J. M., McCain, P. J., Mendoza-Gomez, C. X., & Schutte, W. : 1992, *Origins of Life and Evolution of the Biosphere* **22**, 287
- Britt, D. T., Consolmagno, G. J., & Merline, W. J. : 2006, in S. Mackwell & E. Stansbery (eds.), *37th Annual Lunar and Planetary Science Conference*, Vol. 37 of *Lunar and Planetary Science Conference*, p. 2214
- Brown, M., Johns, C. M., & Spinrad, H. : 1993, **20**, 1003
- Brown, R. H., Lauretta, D. S., Schmidt, B., & Moores, J. : 2012, *Planet. Space Sci.* **60**, 166
- Budzien, S. A. & Feldman, P. D. : 1991, *Icarus* **90**, 308
- Campins, H. & Swindle, T. D. : 1998, *Meteoritics and Planetary Science* **33**, 1201
- Capria, M. T., Cremonese, G., & de Sanctis, M. C. : 2010, *Astron. & Astrophys.* **522**, A82
- Carrington, T. : 1964, **41**, 2012
- Ceccarelli, C. : 2002, *Planet. Space Sci.* **50**, 1267
- Chyba, C. F. : 1987, *Nature* **330**, 632
- Chyba, C. F. : 1990, *Nature* **343**, 129
- Cochran, A. L. : 2008, *Icarus* **198**, 181
- Cochran, A. L. & Cochran, W. D. : 2001, *Icarus* **154**, 381

- Cochran, A. L. & Cochran, W. D. : 2002, *Icarus* **157**, 297
- Cochran, A. L., Wooden, D. H., McKay, A. J., Cauzzi, G., Reardon, K., & Tozzi, G. : 2013, in *AAS/Division for Planetary Sciences Meeting Abstracts*, Vol. 45 of *AAS/Division for Planetary Sciences Meeting Abstracts*, p. 502.05
- Cochran, W. D. : 1984, *Icarus* **58**, 440
- Code, A. D., Houck, T. E., & Lillie, C. F. : 1970, *IAU Circ.* **2201**, 1
- Combes, M., Crovisier, J., Encrenaz, T., Moroz, V. I., & Bibring, J.-P. : 1988, *Icarus* **76**, 404
- Combi, M. R., Boyd, Z., Lee, Y., Patel, T. S., Bertaux, J.-L., Quémerais, E., & Mäkinen, J. T. T. : 2011, *Icarus* **216**, 449
- Combi, M. R., Brown, M. E., Feldman, P. D., Keller, H. U., Meier, R. R., & Smyth, W. H. : 1998, *Astrophys. J.* **494**, 816
- Combi, M. R., Cochran, A. L., Cochran, W. D., Lambert, D. L., & Johns-Krull, C. M. : 1999, *Astrophys. J.* **512**, 961
- Combi, M. R. & Feldman, P. D. : 1992, *Icarus* **97**, 260
- Combi, M. R. & Feldman, P. D. : 1993, *Icarus* **105**, 557
- Combi, M. R., Harris, W. M., & Smyth, W. H. : 2004, *Gas dynamics and kinetics in the cometary coma : theory and observations*, pp 523–552
- Combi, M. R., Mäkinen, J. T. T., Bertaux, J.-L., Lee, Y., & Quémerais, E. : 2009, *Astron. J.* **137**, 4734
- Combi, M. R., Mäkinen, J. T. T., Bertaux, J.-L., & Quemérais, E. : 2005, *Icarus* **177**, 228
- Cosentino, R., Lovis, C., Pepe, F., Collier Cameron, A., Latham, D. W., Molinari, E., Udry, S., Bezawada, N., Black, M., Born, A., Buchschacher, N., Charbonneau, D., Figueira, P., Fleury, M., Galli, A., Gallie, A., Gao, X., Ghedina, A., Gonzalez, C., Gonzalez, M., Guerra, J., Henry, D., Horne, K., Hughes, I., Kelly, D., Lodi, M., Lunney, D., Maire, C., Mayor, M., Micela, G., Ordway, M. P., Peacock, J., Phillips, D., Piotto, G., Pollacco, D., Queloz, D., Rice, K., Riverol, C., Riverol, L., San Juan, J., Sasselov, D., Segransan, D., Sozzetti, A., Sosnowska, D., Stobie, B., Szentgyorgyi, A., Vick, A., & Weber, L. : 2012, in *Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference Series*, Vol. 8446 of *Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference Series*

- Crovisier, J., Bockelée-Morvan, D., Colom, P., Biver, N., Despois, D., Lis, D. C., & Team for target-of-opportunity radio observations of comets : 2004, *Astron. & Astrophys.* **418**, 1141
- Crovisier, J., Brooke, T. Y., Leech, K., Bockelée-Morvan, D., Lellouch, E., Hanner, M. S., Altieri, B., Keller, H. U., Lim, T., Encrenaz, S., Griffin, M., de Graauw, T., van Dishoeck, E., & Knacke, R. F. : 2000, *Thermal Emission Spectroscopy and Analysis of Dust, Disks, and Regoliths* **196**, 109
- Crovisier, J., Colom, P., Gérard, E., Bockelée-Morvan, D., & Bourgois, G. : 2002, *Astron. & Astrophys.* **393**, 1053
- Crovisier, J. & Encrenaz, T. (eds.) : 2000, *Comet science : the study of remnants from the birth of the solar system*
- Crovisier, J., Encrenaz, T., Lellouch, E., Bockelée-Morvan, D., Altieri, B., Leech, K., Salama, A., Griffin, M. J., de Graauw, T., van Dishoeck, E. F., Knacke, R., & Brooke, T. Y. : 1999, in P. Cox & M. Kessler (eds.), *The Universe as Seen by ISO*, Vol. 427 of *ESA Special Publication*, p. 161
- Crovisier, J., Leech, K., Bockelée-Morvan, D., Brooke, T. Y., Hanner, M. S., Altieri, B., Keller, H. U., & Lellouch, E. : 1997, *Science* **275**, 1904
- Danks, A. C., Lambert, D. L., & Arpigny, C. : 1974, *Astrophys. J.* **194**, 745
- Davies, J. K., Green, S. F., & Geballe, T. R. : 1991, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **251**, 148
- Decock, A., Jehin, E., Hutsemékers, D., & Manfroid, J. : 2013, *Astron. & Astrophys.* **555**, A34
- Decock, A., Jehin, E., Manfroid, J., & Hutsemékers, D. : 2011, in *EPSC-DPS Joint Meeting 2011*, p. 1126
- Dekker, H., D'Odorico, S., Kaufer, A., Delabre, B., & Kotzlowski, H. : 2000, in M. Iye & A. F. Moorwood (ed.), *Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference Series*, Vol. 4008 of *Presented at the Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference*, pp 534–545
- Dello Russo, N., Bonev, B. P., DiSanti, M. A., Mumma, M. J., Gibb, E. L., Magee-Sauer, K., Barber, R. J., & Tennyson, J. : 2005, *Astrophys. J.* **621**, 537
- Dello Russo, N., Mumma, M. J., DiSanti, M. A., Magee-Sauer, K., Novak, R., & Rettig, T. W. : 2000, *Icarus* **143**, 324

- Delsemme, A. H. : 1982, in L. L. Wilkening (ed.), *IAU Colloq. 61 : Comet Discoveries, Statistics, and Observational Selection*, pp 85–130
- Despois, D., Gerard, E., Crovisier, J., & Kazes, I. : 1981, *Astron. & Astrophys.* **99**, 320
- DiSanti, M. A., Bonev, B. P., Magee-Sauer, K., Dello Russo, N., Mumma, M. J., Reuter, D. C., & Villanueva, G. L. : 2006, *Astrophys. J.* **650**, 470
- Disanti, M. A., Fink, U., & Schultz, A. B. : 1990, *Icarus* **86**, 152
- Donn, B. : 1963, *Icarus* **2**, 396
- Donn, B. & Hughes, D. : 1986, in B. Battrick, E. J. Rolfe, & R. Reinhard (eds.), *ESLAB Symposium on the Exploration of Halley's Comet*, Vol. 250 of *ESA Special Publication*, pp 523–524
- Duxbury, T. C., Newburn, R. L., & Brownlee, D. E. : 2004, *Journal of Geophysical Research (Planets)* **109**, 12
- Eberhardt, P., Reber, M., Krankowsky, D., & Hodges, R. R. : 1995, *Astron. & Astrophys.* **302**, 301
- Ehrenfreund, P. & Charnley, S. B. : 2000, *Annual Review of Astronomy and Astrophysics* **38**, 427
- Ehrenfreund, P., Charnley, S. B., & Wooden, D. : 2004, *From interstellar material to comet particles and molecules*, pp 115–133
- Feaga, L. M., A'Hearn, M. F., Farnham, T. L., Bodewits, D., Sunshine, J. M., Gersch, A. M., Protopapa, S., Yang, B., Drahus, M., & Schleicher, D. G. : 2014, *Astron. J.* **147**, 24
- Feaga, L. M., A'Hearn, M. F., Sunshine, J. M., Groussin, O., & Farnham, T. L. : 2007a, *Icarus* **190**, 345
- Feaga, L. M., A'Hearn, M. F., Sunshine, J. M., Groussin, O., & Farnham, T. L. : 2007b, *Icarus* **191**, 134
- Feldman, P. D. & Brune, W. H. : 1976, *Astrophys. J., Lett.* **209**, L45
- Feldman, P. D., Cochran, A. L., & Combi, M. R. : 2004a, *Spectroscopic investigations of fragment species in the coma*, pp 425–447
- Feldman, P. D., Festou, M. C., Tozzi, G. P., & Weaver, H. A. : 1997, *Astrophys. J.* **475**, 829



- Feldman, P. D., Weaver, H. A., Christian, D., Combi, M. R., Krasnopolsky, V., Lisse, C. M., Mumma, M. J., Shemansky, D. E., & Stern, S. A. : 2004b, in *AAS/Division for Planetary Sciences Meeting Abstracts 36*, Vol. 36 of *Bulletin of the American Astronomical Society*, p. 1121
- Fernández, J. A., Tancredi, G., Rickman, H., & Licandro, J. : 1999, *Astron. & Astrophys.* **352**, 327
- Festou, M. & Feldman, P. D. : 1981, *Astron. & Astrophys.* **103**, 154
- Festou, M. C. : 1981, *Astron. & Astrophys.* **96**, 52
- Festou, M. C., Feldman, P. D., A'Hearn, M. F., Arpigny, C., Cosmovici, C. B., Danks, A. C., McFadden, L. A., Gilmozzi, R., Patriarchi, P., Tozzi, G. P., Wallis, M. K., & Weaver, H. A. : 1986, *Nature* **321**, 361
- Furusho, R., Kawakita, H., Fuse, T., & Watanabe, J. : 2006, *Advances in Space Research* **38**, 1983
- Galavis, M. E., Mendoza, C., & Zeippen, C. J. : 1997, *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.* **123**, 159
- Gérard, E. : 1990, *Astron. & Astrophys.* **230**, 489
- Gérard, E., Crovisier, J., Colom, P., Biver, N., Bockelée-Morvan, D., & Rauer, H. : 1998, *Planet. Space Sci.* **46**, 569
- Gicquel, A., Bockelée-Morvan, D., Zakharov, V. V., Kelley, M. S., Woodward, C. E., & Wooden, D. H. : 2012, *Astron. & Astrophys.* **542**, A119
- Gombosi, T. I. & Houppis, H. L. F. : 1986, *Nature* **324**, 43
- Gomes, R., Levison, H. F., Tsiganis, K., & Morbidelli, A. : 2005, *Nature* **435**, 466
- Greenberg, J. M. : 1998, *Astron. & Astrophys.* **330**, 375
- Greenstein, J. L. : 1958, *Astrophys. J.* **128**, 106
- Guido, E., Howes, N., Sato, H., Lister, T., Hug, G., Novichonok, A., Kadota, K., Ligustri, R., Hale, A., & Williams, G. V. : 2013, *Central Bureau Electronic Telegrams* **3649**, 1
- Hartogh, P., Lis, D. C., Bockelée-Morvan, D., de Val-Borro, M., Biver, N., Küppers, M., Emprechtinger, M., Bergin, E. A., Crovisier, J., Rengel, M., Moreno, R., Szutowicz, S., & Blake, G. A. : 2011, *Nature* **478**, 218

- Helbert, J., Rauer, H., Boice, D. C., & Huebner, W. F. : 2005, *Astron. & Astrophys.* **442**, 1107
- Herzberg, G. & Lew, H. : 1974, *Astron. & Astrophys.* **31**, 123
- Huebner, W. F., Buhl, D., & Snyder, L. E. : 1974, *Icarus* **23**, 580
- Huebner, W. F. & Carpenter, C. W. : 1979, *NASA STI/Recon Technical Report N* **80**, 24243
- Huebner, W. F., Keady, J. J., & Lyon, S. P. : 1992, *Astrophys. & Space Sci.* **195**, 1
- Hunaerts, J. : 1953, *Mem. Soc. Roy. Sci. Liège*
- Hutsemékers, D., Manfroid, J., Jehin, E., Zucconi, J.-M., & Arpigny, C. : 2008, *Astron. & Astrophys.* **490**, L31
- Jaumann, R., Tirsch, D., Hauber, E., Erkeling, G., Hiesinger, H., Le Deit, L., Sowe, M., Adeli, S., Petau, A., & Reiss, D. : 2014, *Planet. Space Sci.* **98**, 128
- Jehin, E., Manfroid, J., Cochran, A. L., Arpigny, C., Zucconi, J.-M., Hutsemékers, D., Cochran, W. D., Endl, M., & Schulz, R. : 2004, *Astrophys. J., Lett.* **613**, L161
- Jehin, E., Manfroid, J., Hutsemékers, D., Arpigny, C., & Zucconi, J.-M. : 2009, *Earth Moon and Planets* **105**, 167
- Jehin, E., Manfroid, J., Hutsemékers, D., Cochran, A. L., Arpigny, C., Jackson, W. M., Rauer, H., Schulz, R., & Zucconi, J.-M. : 2006, *Astrophys. J., Lett.* **641**, L145
- Jewitt, D., Matthews, H. E., Owen, T., & Meier, R. : 1997, *Science* **278**, 90
- Jockers, K. : 1991, *Washington DC American Geophysical Union Geophysical Monograph Series* **61**, 139
- Jockers, K. & Bonev, T. : 1997, *Astron. & Astrophys.* **319**, 617
- Jorda, L., Crovisier, J., & Green, D. W. E. : 1991, *LPI Contributions* **765**, 108
- Kavelaars, J. J., Mousis, O., Petit, J.-M., & Weaver, H. A. : 2011, *Astrophys. J., Lett.* **734**, L30
- Kawakita, H., Dello Russo, N., Furusho, R., Fuse, T., Watanabe, J.-i., Boice, D. C., Sadakane, K., Arimoto, N., Ohkubo, M., & Ohnishi, T. : 2006, *Astrophys. J.* **643**, 1337
- Kawakita, H. & Kobayashi, H. : 2009, *Astrophys. J.* **693**, 388

- Kawakita, H., Watanabe, J.-i., Furusho, R., Fuse, T., Capria, M. T., De Sanctis, M. C., & Cremonese, G. : 2004, *Astrophys. J.* **601**, 1152
- Keller, H. U., Arpigny, C., Barbieri, C., Bonnet, R. M., Cazes, S., Coradini, M., Cosmovici, C. B., Delamere, W. A., Huebner, W. F., Hughes, D. W., Jamar, C., Malaise, D., Reitsema, H. J., Schmidt, H. U., Schmidt, W. K. H., Seige, P., Whipple, F. L., & Wilhelm, K. : 1986, *Nature* **321**, 320
- Keller, L. P., Bajt, S., Baratta, G. A., Borg, J., Bradley, J. P., Brownlee, D. E., Busemann, H., Brucato, J. R., Burchell, M., Colangeli, L., D'Hendecourt, L., Djouadi, Z., Ferrini, G., Flynn, G., Franchi, I. A., Fries, M., Grady, M. M., Graham, G. A., Grossemy, F., Kearsley, A., Matrajt, G., Nakamura-Messenger, K., Mennella, V., Nittler, L., Palumbo, M. E., Stadermann, F. J., Tsou, P., Rotundi, A., Sandford, S. A., Snead, C., Steele, A., Wooden, D., & Zolensky, M. : 2006, *Science* **314**, 1728
- Knacke, R. F., Brooke, T. Y., & Joyce, R. R. : 1986, *Astrophys. J., Lett.* **310**, L49
- Knight, M. M. & Schleicher, D. G. : 2012, *ArXiv e-prints*
- Knowles, S. H., Mayer, C. H., Cheung, A. C., Rank, D. M., & Townes, C. H. : 1969, in *Bulletin of the American Astronomical Society*, Vol. 1 of *Bulletin of the American Astronomical Society*, p. 249
- Kobayashi, H., Bockelée-Morvan, D., Kawakita, H., Dello Russo, N., Jehin, E., Manfroid, J., Smette, A., Hutsemékers, D., Stüwe, J., Weiler, M., Arpigny, C., Biver, N., Cochran, A., Crovisier, J., Magain, P., Sana, H., Schulz, R., Vervack, R. J., Weaver, H., & Zucconi, J.-M. : 2010, *Astron. & Astrophys.* **509**, A80
- Krankowsky, D., Lammerzahl, P., Herrwerth, I., Woweries, J., Eberhardt, P., Dolder, U., Herrmann, U., Schulte, W., Berthelier, J. J., Illiano, J. M., Hodges, R. R., & Hoffman, J. H. : 1986, *Nature* **321**, 326
- Krasnopolsky, V. A., Gogoshev, M., Moreels, G., Moroz, V. I., Krysko, A. A., Gogosheva, T., Palazov, K., Sargoichev, S., Clairemidi, J., Vincent, M., Bertaux, J. L., Blamont, J. E., Troshin, V. S., & Valnicek, B. : 1986, *Nature* **321**, 269
- Krasnopolsky, V. A., Maillard, J. P., & Owen, T. C. : 2004, *Icarus* **172**, 537
- Laufer, D., Kochavi, E., & Bar-Nun, A. : 1987, *Phys. Rev. B* **36**, 9219
- Leblanc, F., Chaufray, J. Y., Lilensten, J., Witasse, O., & Bertaux, J.-L. : 2006, *Journal of Geophysical Research (Planets)* **111**, 9

- Leech, K., Crovisier, J., Bockelée-Morvan, D., Brooke, T. Y., Hanner, M. S., Altieri, B., Keller, H. U., Lellouch, E., & Lim, T. : 1997, *Earth Moon and Planets* **78**, 81
- Lellouch, E., Crovisier, J., Lim, T., Bockelee-Morvan, D., Leech, K., Hanner, M. S., Altieri, B., Schmitt, B., Trotta, F., & Keller, H. U. : 1998, *Astron. & Astrophys.* **339**, L9
- Levison, H. F. : 1996, in T. Rettig & J. M. Hahn (ed.), *Completing the Inventory of the Solar System*, Vol. 107 of *Astronomical Society of the Pacific Conference Series*, pp 173–191
- Levison, H. F., Morbidelli, A., Van Laerhoven, C., Gomes, R., & Tsiganis, K. : 2008, *Icarus* **196**, 258
- Lis, D. C., Biver, N., Bockelée-Morvan, D., Hartogh, P., Bergin, E. A., Blake, G. A., Crovisier, J., de Val-Borro, M., Jehin, E., Küppers, M., Manfroid, J., Moreno, R., Rengel, M., & Szutowicz, S. : 2013, *Astrophys. J., Lett.* **774**, L3
- Lisse, C. M., Cravens, T. E., & Dennerl, K. : 2004, *X-ray and extreme ultraviolet emission from comets*, pp 631–643
- Lisse, C. M., Dennerl, K., Englhauser, J., Harden, M., Marshall, F. E., Mumma, M. J., Petre, R., Pye, J. P., Ricketts, M. J., Schmitt, J., Trumper, J., & West, R. G. : 1996, *Science* **274**, 205
- Lodders, K. & Osborne, R. : 1999, *Space Sci. Rev.* **90**, 289
- Lupu, R. E., Feldman, P. D., Weaver, H. A., & Tozzi, G.-P. : 2007, *Astrophys. J.* **670**, 1473
- Luque, J. & Crosley, D. R. : 1998, **109**, 439
- Lyttleton, R. A. : 1951, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **111**, 268
- Manfroid, J., Jehin, E., Hutsemékers, D., Cochran, A., Zucconi, J.-M., Arpigny, C., Schulz, R., & Stüwe, J. A. : 2005, *Astron. & Astrophys.* **432**, L5
- Manfroid, J., Jehin, E., Hutsemékers, D., Cochran, A., Zucconi, J.-M., Arpigny, C., Schulz, R., Stüwe, J. A., & Ilyin, I. : 2009, *Astron. & Astrophys.* **503**, 613
- Marsden, B. G. : 1969, *Astron. J.* **74**, 720
- Marsden, B. G., Sekanina, Z., & Yeomans, D. K. : 1973, *Astron. J.* **78**, 211

- Matson, D. L., Veeder, G. J., Tedesco, E. T., & Lebofsky, L. A. : 1986, in *Lunar and Planetary Science Conference*, Vol. 17 of *Lunar and Planetary Science Conference*, pp 522–523
- McKay, A. J., Chanover, N. J., Morgenthaler, J. P., Cochran, A. L., Harris, W. M., & Russo, N. D. : 2012, *Icarus* **220**, 277
- McKay, A. J., Chanover, N. J., Morgenthaler, J. P., Cochran, A. L., Harris, W. M., & Russo, N. D. : 2013, *Icarus* **222**, 684
- Meech, K. J., A’Hearn, M. F., Adams, J. A., Bacci, P., Bai, J., Barrera, L., Battelino, M., Bauer, J. M., Becklin, E., Bhatt, B., Biver, N., Bockelée-Morvan, D., Bodewits, D., Bönhardt, H., Boissier, J., Bonev, B. P., Borghini, W., Brucato, J. R., Bryssinck, E., Buie, M. W., Canovas, H., Castellano, D., Charnley, S. B., Chen, W. P., Chiang, P., Choi, Y.-J., Christian, D. J., Chuang, Y.-L., Cochran, A. L., Colom, P., Combi, M. R., Coulson, I. M., Crovisier, J., Dello Russo, N., Dennerl, K., DeWahl, K., DiSanti, M. A., Facchini, M., Farnham, T. L., Fernández, Y., Florén, H. G., Frisk, U., Fujiyoshi, T., Fusho, R., Fuse, T., Galli, G., García-Hernández, D. A., Gersch, A., Getu, Z., Gibb, E. L., Gillon, M., Guido, E., Guillermo, R. A., Hadamcik, E., Hainaut, O., Hammel, H. B., Harker, D. E., Harmon, J. K., Harris, W. M., Hartogh, P., Hashimoto, M., Häußler, B., Herter, T., Hjalmarsen, A., Holland, S. T., Honda, M., Hosseini, S., Howell, E. S., Howes, N., Hsieh, H. H., Hsiao, H.-Y., Hutsemékers, D., Immler, S. M., Jackson, W. M., Jeffers, S. V., Jehin, E., Jones, T. J., de Juan Ovelar, M., Kaluna, H. M., Karlsson, T., Kawakita, H., Keane, J. V., Keller, L. D., Kelley, M. S., Kinoshita, D., Kiselev, N. N., Kleyna, J., Knight, M. M., Kobayashi, H., Kobulnicky, H. A., Kolokolova, L., Kreiny, M., Kuan, Y.-J., Küppers, M., Lacruz, J. M., Landsman, W. B., Lara, L. M., Lecacheux, A., Lvasseur-Regourd, A. C., Li, B., Licandro, J., Ligustri, R., Lin, Z.-Y., Lippi, M., Lis, D. C., Lisse, C. M., Lovell, A. J., Lowry, S. C., Lu, H., Lundin, S., Magee-Sauer, K., Magain, P., Manfroid, J., Mazzotta Epifani, E., McKay, A., Melita, M. D., Mikuz, H., Milam, S. N., Milani, G., Min, M., Moreno, R., Mueller, B. E. A., Mumma, M. J., Nicolini, M., Nolan, M. C., Nordh, H. L., Nowajewski, P. B., Odin Team, Ootsubo, T., Paganini, L., Perrella, C., Pittichová, J., Prosperi, E., Radeva, Y. L., Reach, W. T., Remijan, A. J., Rengel, M., Riesen, T. E., Rodenhuis, M., Rodríguez, D. P., Russell, R. W., Sahu, D. K., Samarasinha, N. H., Sánchez Caso, A., Sandqvist, A., Sarid, G., Sato, M., Schleicher, D. G., Schwieterman, E. W., Sen, A. K., Shenoy, D., Shi, J.-C., Shinnaka, Y., Skvarc, J., Snodgrass, C., Sitko, M. L., Sonnett, S., Sosseini, S., Sostero, G., Sugita, S., Swinyard, B. M., Szutowicz, S., Takato, N., Tanga, P., Taylor, P. A., Tozzi, G.-P., Trabatti, R., Trigo-Rodríguez, J. M., Tubiana, C., de Val-Borro, M., Vacca, W., Vandenbussche, B., Vaubaillon, J., Velichko, F. P., Velichko, S. F., Vervack, Jr., R. J.,

- Vidal-Nunez, M. J., Villanueva, G. L., Vinante, C., Vincent, J.-B., Wang, M., Wasserman, L. H., Watanabe, J., Weaver, H. A., Weissman, P. R., Wolk, S., Wooden, D. H., Woodward, C. E., Yamaguchi, M., Yamashita, T., Yanamandra-Fischer, P. A., Yang, B., Yao, J.-S., Yeomans, D. K., Zenn, T., Zhao, H., & Ziffer, J. E. : 2011, *Astrophys. J., Lett.* **734**, L1
- Meech, K. J., Pittichová, J., Bar-Nun, A., Notesco, G., Laufer, D., Hainaut, O. R., Lowry, S. C., Yeomans, D. K., & Pitts, M. : 2009, *Icarus* **201**, 719
- Meier, R., Owen, T. C., Jewitt, D. C., Matthews, H. E., Senay, M., Biver, N., Bockelee-Morvan, D., Crovisier, J., & Gautier, D. : 1998a, *Science* **279**, 1707
- Meier, R., Owen, T. C., Matthews, H. E., Jewitt, D. C., Bockelee-Morvan, D., Biver, N., Crovisier, J., & Gautier, D. : 1998b, *Science* **279**, 842
- Meisel, D. D. & Berg, R. A. : 1974, *Icarus* **23**, 454
- Mies, F. H. : 1974, *Journal of Molecular Spectroscopy* **53**, 150
- Morbidelli, A. : 2005, *ArXiv Astrophysics e-prints*
- Morbidelli, A., Levison, H. F., Tsiganis, K., & Gomes, R. : 2005, *Nature* **435**, 462
- Morrison, N. D., Knauth, D. C., Mulliss, C. L., & Lee, W. : 1997, *Publ. Astron. Soc. Pacific* **109**, 676
- Mumma, M. J., Blass, W. E., Weaver, H. A., & Larson, H. P. : 1988, in *Bulletin of the American Astronomical Society*, Vol. 20 of *Bulletin of the American Astronomical Society*, p. 826
- Mumma, M. J. & Charnley, S. B. : 2011, *Annual Review of Astronomy and Astrophysics* **49**, 471
- Mumma, M. J., Cody, R., & Schleicher, D. : 1978, in *Bulletin of the American Astronomical Society*, Vol. 10 of *Bulletin of the American Astronomical Society*, p. 587
- Mumma, M. J., McLean, I. S., DiSanti, M. A., Larkin, J. E., Dello Russo, N., Magee-Sauer, K., Becklin, E. E., Bida, T., Chaffee, F., Conrad, A. R., Figer, D. F., Gilbert, A. M., Graham, J. R., Levenson, N. A., Novak, R. E., Reuter, D. C., Teplitz, H. I., Wilcox, M. K., & Xu, L.-H. : 2001, *Astrophys. J.* **546**, 1183
- Mumma, M. J., Weaver, H. A., & Larson, H. P. : 1987, *Astron. & Astrophys.* **187**, 419

- Mumma, M. J., Weaver, H. A., Larson, H. P., Williams, M., & Davis, D. S. : 1986, *Science* **232**, 1523
- Mumma, M. J., Weissman, P. R., & Stern, S. A. : 1993, in E. H. Levy & J. I. Lunine (eds.), *Protostars and Planets III*, pp 1177–1252
- Murakami, H., Baba, H., Barthel, P., Clements, D. L., Cohen, M., Doi, Y., Enya, K., Figueredo, E., Fujishiro, N., Fujiwara, H., Fujiwara, M., Garcia-Lario, P., Goto, T., Hasegawa, S., Hibi, Y., Hirao, T., Hiromoto, N., Hong, S. S., Imai, K., Ishigaki, M., Ishiguro, M., Ishihara, D., Ita, Y., Jeong, W.-S., Jeong, K. S., Kaneda, H., Kataza, H., Kawada, M., Kawai, T., Kawamura, A., Kessler, M. F., Kester, D., Kii, T., Kim, D. C., Kim, W., Kobayashi, H., Koo, B. C., Kwon, S. M., Lee, H. M., Lorente, R., Makiuti, S., Matsuhara, H., Matsumoto, T., Matsuo, H., Matsuura, S., Müller, T. G., Murakami, N., Nagata, H., Nakagawa, T., Naoi, T., Narita, M., Noda, M., Oh, S. H., Ohnishi, A., Ohyama, Y., Okada, Y., Okuda, H., Oliver, S., Onaka, T., Ootsubo, T., Oyabu, S., Pak, S., Park, Y.-S., Pearson, C. P., Rowan-Robinson, M., Saito, T., Sakon, I., Salama, A., Sato, S., Savage, R. S., Serjeant, S., Shibai, H., Shirahata, M., Sohn, J., Suzuki, T., Takagi, T., Takahashi, H., Tanabé, T., Takeuchi, T. T., Takita, S., Thomson, M., Uemizu, K., Ueno, M., Usui, F., Verdugo, E., Wada, T., Wang, L., Watabe, T., Watarai, H., White, G. J., Yamamura, I., Yamauchi, C., & Yasuda, A. : 2007, *Publ. Astron. Soc. Japan* **59**, 369
- Ootsubo, T., Kawakita, H., Hamada, S., Kobayashi, H., Yamaguchi, M., Usui, F., Nakagawa, T., Ueno, M., Ishiguro, M., Sekiguchi, T., Watanabe, J.-i., Sakon, I., Shimonishi, T., & Onaka, T. : 2012a, *Astrophys. J.* **752**, 15
- Ootsubo, T., Kawakita, H., Kobayashi, H., Usui, F., & AKARI SOSOS Team : 2012b, *Publication of Korean Astronomical Society* **27**, 161
- Oró, J. : 1961, *Nature* **190**, 389
- Owen, T. & Bar-Nun, A. : 1995, *Icarus* **116**, 215
- Owen, T., Bar-Nun, A., & Kleinfeld, I. : 1992, *Nature* **358**, 43
- Paganini, L., Mumma, M. J., Villanueva, G. L., DiSanti, M. A., Bonev, B. P., Lippi, M., & Boehnhardt, H. : 2012, *Astrophys. J., Lett.* **748**, L13
- Raghuram, S. & Bhardwaj, A. : 2013, *Icarus* **223**, 91
- Raghuram, S. & Bhardwaj, A. : 2014, *Astron. & Astrophys.* **566**, A134

- Rauer, H. & Jockers, K. : 1990, in C. I. Lagerkvist, H. Rickman, & B. A. Lindblad (eds.), *Asteroids, Comets, Meteors III*, p. 417
- Rauer, H., Weiler, M., Sterken, C., Jehin, E., Knollenberg, J., & Hainaut, O. : 2006, *Astron. & Astrophys.* **459**, 257
- Reyes-Ruiz, M., Vázquez, R., & Pérez-de-Tejada, H. : 2010, *Astrophys. J.* **717**, 481
- Roberts, H., Fuller, G. A., Millar, T. J., Hatchell, J., & Buckle, J. V. : 2002, *Astron. & Astrophys.* **381**, 1026
- Ross, S. C., Birss, F. W., Vervloet, M., & Ramsay, D. A. : 1988, *Journal of Molecular Spectroscopy* **129**, 436
- Rothman, L. S. : 1978, *Optika Atmosfery* pp 2–5
- Rousselot, P., Arpigny, C., Rauer, H., Cochran, A. L., Gredel, R., Cochran, W. D., Manfroid, J., & Fitzsimmons, A. : 2001, *Astron. & Astrophys.* **368**, 689
- Rousselot, P., Clairemidi, J., & Moreels, G. : 1993, *Astron. & Astrophys.* **277**, 653
- Rousselot, P., Jehin, E., Manfroid, J., & Hutsemékers, D. : 2012, *Astron. & Astrophys.* **545**, A24
- Rousselot, P., Pirali, O., Jehin, E., Vervloet, M., Hutsemékers, D., Manfroid, J., Cordier, D., Martin-Drumel, M.-A., Gruet, S., Arpigny, C., Decock, A., & Mousis, O. : 2014, *Astrophys. J., Lett.* **780**, L17
- Schleicher, D. G. : 1983, *Ph.D. thesis*, Maryland Univ., College Park.
- Schleicher, D. G. & Bair, A. N. : 2011, *Astron. J.* **141**, 177
- Schleicher, D. G., Birch, P. V., & Bair, A. N. : 2006, in *AAS/Division for Planetary Sciences Meeting Abstracts #38*, Vol. 38 of *Bulletin of the American Astronomical Society*, p. 485
- Schmidt, B. E., Blankenship, D. D., Patterson, G. W., & Schenk, P. M. : 2011, *Nature* **479**, 502
- Schultz, D., Scherb, F., & Roesler, F. L. : 1993, *Icarus* **104**, 185
- Schwarzschild, K. & Kron, E. : 1911, *Astrophys. J.* **34**, 342
- Shinnaka, Y., Kawakita, H., Kobayashi, H., Boice, D. C., & Martinez, S. E. : 2012, *Astrophys. J.* **749**, 101



- Shinnaka, Y., Kawakita, H., Kobayashi, H., Jehin, E., Manfroid, J., Hutsemékers, D., & Arpigny, C. : 2011, *Astrophys. J.* **729**, 81
- Shinnaka, Y., Kawakita, H., Kobayashi, H., Nagashima, M., & Boice, D. C. : 2014, *Astrophys. J., Lett.* **782**, L16
- Slanger, T. G., Cosby, P. C., Sharpee, B. D., Minschwaner, K. R., & Siskind, D. E. : 2006, *Journal of Geophysical Research (Space Physics)* **111**, 12318
- Slaughter, C. D. : 1969, *Astron. J.* **74**, 929
- Snyder, L. E., Buhl, D., & Huebner, W. F. : 1974, in *Bulletin of the American Astronomical Society*, Vol. 6 of *Bulletin of the American Astronomical Society*, p. 389
- Spinrad, H., Brown, M. E., & Johns, C. M. : 1994, *Astron. J.* **108**, 1462
- Stark, G., Brault, J. W., & Abrams, M. C. : 1994, *Journal of the Optical Society of America B Optical Physics* **11**, 3
- Stawikowski, A. & Greenstein, J. L. : 1964, *Astrophys. J.* **140**, 1280
- Stern, S. A., Slater, D. C., Festou, M. C., Parker, J. W., Gladstone, G. R., A'Hearn, M. F., & Wilkinson, E. : 2000, *Astrophys. J., Lett.* **544**, L169
- Storey, P. J. & Zeippen, C. J. : 2000, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **312**, 813
- Stuhl, F. & Welge, K. H. : 1969, *Can. J. Chem.*
- Swings, P. : 1941, *Lick Observatory Bulletin* **19**, 131
- Swings, P. : 1962, *Annales d'Astrophysique* **25**, 165
- Swings, P. & Greenstein, J. L. : 1958, *Academie des Sciences*
- Swings, P. & Page, T. : 1950, *Astrophys. J.* **111**, 530
- Takahashi, K., Takeuchi, Y., & Matsumi, Y. : 2005, *Chemical Physics Letters* **410**, 196
- Tancredi, G., Rickman, H., & Greenberg, J. M. : 1994, *Astron. & Astrophys.* **286**, 659
- Tatum, J. B. & Gillespie, M. I. : 1977, *Astrophys. J.* **218**, 569
- Tielens, A. G. G. M. & Allamandola, L. J. : 1987, in D. J. Hollenbach & H. A. Thronson, Jr. (eds.), *Interstellar Processes*, Vol. 134 of *Astrophysics and Space Science Library*, pp 397–469

- Tozzi, G. P., Feldman, P. D., & Weaver, H. A. : 1994, *Astron. & Astrophys.* **285**, L9
- Tseng, W.-L., Bockelée-Morvan, D., Crovisier, J., Colom, P., & Ip, W.-H. : 2007, *Astron. & Astrophys.* **467**, 729
- Tsiganis, K., Gomes, R., Morbidelli, A., & Levison, H. F. : 2005, *Nature* **435**, 459
- Turner, B. E. : 1974, *Astrophys. J., Lett.* **189**, L137
- van Dishoeck, E. F., Thi, W.-F., & van Zadelhoff, G.-J. : 2003, *Astron. & Astrophys.* **400**, L1
- Waite, Jr., J. H., Lewis, W. S., Magee, B. A., Lunine, J. I., McKinnon, W. B., Glein, C. R., Mousis, O., Young, D. T., Brockwell, T., Westlake, J., Nguyen, M.-J., Teolis, B. D., Niemann, H. B., McNutt, R. L., Perry, M., & Ip, W.-H. : 2009, *Nature* **460**, 487
- Weaver, H. A. & Feldman, F. D. : 1992, in P. Benvenuti & E. Schreier (eds.), *European Southern Observatory Conference and Workshop Proceedings*, Vol. 44 of *European Southern Observatory Conference and Workshop Proceedings*, p. 475
- Weaver, H. A., Feldman, P. D., A'Hearn, M. F., Dello Russo, N., & Stern, S. A. : 2011, *Astrophys. J., Lett.* **734**, L5
- Weaver, H. A., Feldman, P. D., McPhate, J. B., A'Hearn, M. F., Arpigny, C., & Smith, T. E. : 1994, *Astrophys. J.* **422**, 374
- Wegmann, R., Jockers, K., & Bonev, T. : 1999, *Planet. Space Sci.* **47**, 745
- Wehinger, P. & Wyckoff, S. : 1974, *Astrophys. J., Lett.* **192**, L41
- Weissman, P. R. : 1986, *Nature* **320**, 242
- Whipple, F. L. : 1950, *Astrophys. J.* **111**, 375
- Williams, D. M., Mason, C. G., Gehrz, R. D., Jones, T. J., Woodward, C. E., Harker, D. E., Hanner, M. S., Wooden, D. H., Witteborn, F. C., & Butner, H. M. : 1997, *Astrophys. J., Lett.* **489**, L91
- Woodward, C. E., Kelley, M. S., Bockelée-Morvan, D., & Gehrz, R. D. : 2007, *Astrophys. J.* **671**, 1065
- Zakharov, V., Bockelée-Morvan, D., Biver, N., Crovisier, J., & Lecacheux, A. : 2007, *Astron. & Astrophys.* **473**, 303

---

Ziurys, L. M., Savage, C., Brewster, M. A., Apponi, A. J., Pesch, T. C., & Wyckoff, S. :  
1999, *Astrophys. J., Lett.* **527**, L67

Zucconi, J. M. & Festou, M. C. : 1985, *Astron. & Astrophys.* **150**, 180





---

## Liste des publications

---

### Articles dans des journaux à comité de lecture

---

**Decock, A.**; Jehin, E.; Rousselot, P.; Hutsemékers, D.; Manfroid, J.; Raghuram, S.; Bhardwaj, A. : *Forbidden oxygen lines in comets at various nucléocentric distances*, (2014) A&A 555, A34

Bisikalo, D.V.; Shematovitch, V.I.; Gérard, J.-C.; Jehin, E.; **Decock, A.**; Hutsemékers, D.; Manfroid, J.; Hubert, B. : *Monte Carlo simulation of metastable oxygen photochemistry in cometary atmospheres*, (2014) submitted to APJ

Rousselot, P.; Pirali, O.; Jehin, E.; Vervloet, M.; Hutsemékers, D.; Manfroid, J.; Cordier, D.; Martin-Drumel, M.-A.; Gruet, S.; Arpigny, C.; **Decock, A.**; Mousis, O. : *Toward a unique nitrogen isotopic ratio in cometary ices*, (2013) APJ Letters, 780 :L17

**Decock, A.**; Jehin, E.; Hutsemékers, D.; Manfroid, J. : *Forbidden oxygen lines in comets at various heliocentric distances*, (2013) A&A 555, A34

Mousis, O.; Hueso, R.; Beaulieu, J-P.; Bouley, S.; Carry, B.; Colas, F.; Klotz, A.; Pellier, C.; Petit, J.-M.; Rousselot, P.; Ali Dib, M.; Beisker, W.; Birlan, M.; Buil, C.; Delsanti, A.; Frappa, E.; Hammel, H. B.; Levasseur-Regourd, A.-C.; Orton, G. S.; Sanchez-Lavega, A.; Santerne, A.; Tanga, P.; Vaubaillon, J.; Zanda, B.; Baratoux, D.;

Boěhm, T.; Boudon, V.; Bouquet, A.; Buzzi, L.; Dauvergne, J.-L.; **Decock, A.**; Delcroix, M.; Drossart, P.; Esseiva, N.; Fischer, G.; Fletcher, L. N.; Foglia, S.; Gómez-Forrellad, J. M.; Guarro-Fló, J.; Herald, D.; Jehin, E.; Kugel, F.; Lebreton, J.-P.; Lecauchaux, J.; Leroy, A.; Maquet, L.; Masi, G.; Maury, A.; Meyer, F.; Pérez-Hoyos, S.; Rajpurohit, A. S.; Rinner, C.; Rogers, J. H.; Roques, F.; Schmude, R. W.; Sicardy, B.; Tregon, B.; Vanhuyse, M.; Wesley, A.; Widemann, T. : *Instrumental Methods for Professional and Amateur Collaborations in Planetary Astronomy*, (2014) Experimental Astronomy

## Actes de conférence dans des journaux sans comité de lecture

---

**Decock, A.**; Rousselot, P.; Jehin, E.; Hutsemékers, D.; Manfroid, J.; Bhardwaj, A.; Raghuram, S. : *Study of the forbidden oxygen lines in comets at various heliocentric and nucleocentric distances*, (2013) in American Astronomical Society, DPS meeting #45, #502.08

Rousselot, P.; Pirali, O.; Jehin, E.; Vervloet, M.; Hutsemékers, D.; Manfroid, J.; Cordier, D.; Martin-Drumel, M.-A.; Gruet, S.; Arpigny, C.; **Decock, A.** : *A search for 15NH<sub>2</sub> emission lines in comets*, (2013) in American Astronomical Society, DPS meeting #45, #505.06

**Decock, A.**; Jehin, E.; Hutsemékers, D.; Manfroid, J. : *Study of the forbidden oxygen lines in a dozen comets observed at the VLT (ESO)*, (2011) in EPSC-DPS, Joint Meeting 2011, 1126

Jehin, E.; Hutsemékers, D.; Manfroid, J.; **Decock, A.**; Weiler, M.; Kawakita, H.; Shinnaka, Y.; Hashimoto, M.; Bockelée-Morvan, D.; Biver, N.; Crovisier, J.; Hartog, P. : *A Multi-wavelength study with the ESO VLT of comet 103P/Hartley2 at the time of the EPOXI encounter*, (2011) in EPSC-DPS, Joint Meeting 2011, 1463

*B*

---

La formule de la largeur des raies en  
vitesse

---





Dans la coma cométaire, nous supposons que la vitesse des particules suit une distribution maxwellienne. Le long de la ligne de visée, cette distribution se décrit par une courbe de Gauss du type :

$$f(v_x) = C e^{-\frac{v_x^2}{\alpha^2}} \quad (\text{B.1})$$

où  $\alpha$  est la vitesse la plus probable, comme nous le verrons plus loin.

Cette distribution est entièrement déterminée par les hypothèses très générales adoptées par l'étude des gaz parfaits c'est-à-dire, pour des milieux dilués, homogènes et isotropes. Le préfacteur  $C$  est défini par la condition de normalisation de la probabilité :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(v_x) d(v_x) = 1 \quad (\text{B.2})$$

qui décrit la probabilité que le module de la vitesse soit compris entre 0 et  $\infty$ .

$$\int_{-\infty}^{+\infty} C e^{-\frac{v_x^2}{\alpha^2}} d(v_x) = 1 \quad (\text{B.3})$$

Par la formule de l'intégrale de Gauss, nous en déduisons :

$$C = \frac{1}{\alpha \sqrt{\pi}}. \quad (\text{B.4})$$

Dès lors, la distribution de la vitesse est décrite par l'équation :

$$f(v_x) = \frac{1}{\alpha \sqrt{\pi}} e^{-\frac{v_x^2}{\alpha^2}}. \quad (\text{B.5})$$

Appliquée à toutes les directions spatiales, cette distribution devient :

$$df(v_x, v_y, v_z) = \frac{1}{\alpha^3 \pi^{3/2}} e^{-\frac{v^2}{\alpha^2}} d(v_x) d(v_y) d(v_z) \quad (\text{B.6})$$

où  $v^2 = \sqrt{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2}$ .

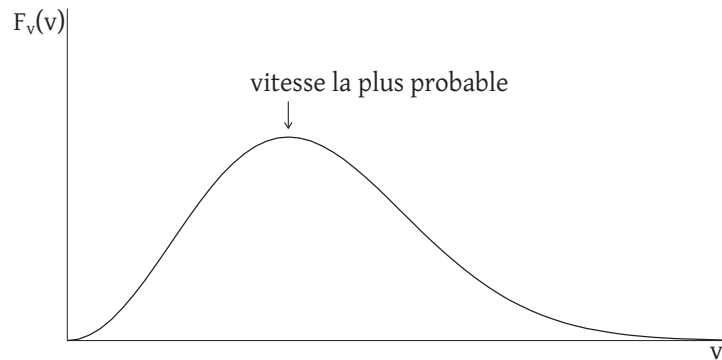
Le passage en coordonnées polaires nous permet de réécrire l'équation précédente de la manière suivante :

$$df(v_x, v_y, v_z) = \frac{1}{\alpha^3 \pi^{3/2}} e^{-\frac{v^2}{\alpha^2}} v^2 \sin(\theta) d\theta d\varphi dv. \quad (\text{B.7})$$

La distribution maxwellienne de vitesse totale s'écrit alors :

$$F_v(v) dv = \frac{4}{\alpha^3 \sqrt{\pi}} v^2 e^{-\frac{v^2}{\alpha^2}} dv, \text{ sachant que } \int_0^\pi \sin(\theta) d\theta = 2 \text{ et } \int_0^{2\pi} d\varphi = 2\pi. \quad (\text{B.8})$$

et sa représentation graphique est donnée dans la figure B.1.



**FIGURE B.1** – Distribution maxwellienne de vitesse totale. La vitesse la plus probable correspond au maximum de la fonction.

A partir de cette fonction, nous pouvons déterminer la valeur de la vitesse *la plus probable*, qui correspond au maximum de la fonction. Sa valeur se déduit donc en calculant la dérivée de  $F_v$  et en égalant cette dernière à zéro. Après ce calcul, nous trouvons que la vitesse la plus probable vaut  $\alpha$ , comme annoncé plus haut. En utilisant l'équation de l'énergie cinétique moyenne d'une particule,

$$\frac{1}{2} m v^2 = \frac{3}{2} k_B T, \quad (\text{B.9})$$

où  $k_B$ , la constante de Boltzmann et  $T$  la température, la vitesse quadratique moyenne est déduite et vaut :

$$v = \sqrt{\frac{3 k_B T}{m}} \quad (\text{B.10})$$

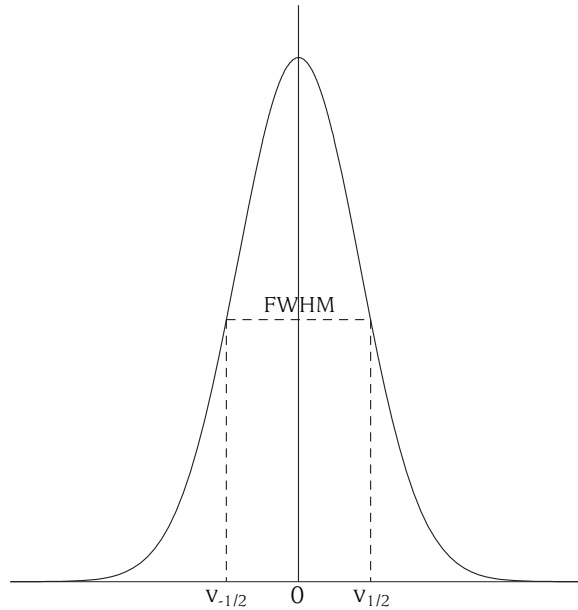
A partir de l'équation (B.8), la vitesse quadratique peut également être définie par :

$$v = \sqrt{\int_0^\infty v^2 F_v dv} = \sqrt{\frac{3}{2}} \alpha \quad (\text{B.11})$$

Dès lors, nous en déduisons que :

$$\alpha = \sqrt{\frac{2kT}{m}} \quad (\text{B.12})$$

Considérons maintenant le profil des raies schématisé dans la figure B.2 et écrivons désormais  $v$  pour  $v_x$



**FIGURE B.2** – Profil des raies et définition de la largeur à mi-hauteur (FWHM)

Ce profil est assimilé à une gaussienne et sa fonction est décrite par :

$$f(v) dv = \frac{1}{\alpha \sqrt{\pi}} e^{-\frac{v^2}{\alpha^2}} dv \quad (\text{B.13})$$

Pour  $v_{1/2}$  définissant la demi-largeur à mi-hauteur de la gaussienne,  $e^{-\frac{v_{1/2}^2}{\alpha^2}} = \frac{1}{2}$  et il en résulte :

$$v_{1/2} = \sqrt{\ln 2} \alpha. \quad (\text{B.14})$$

Dès lors, la largeur totale de la raie à mi-hauteur vaut :

$$\text{FWHM} = 2 \sqrt{\ln 2} \alpha \quad (\text{B.15})$$

Pour obtenir le profil de la raie en termes de longueur d'onde, nous utilisons la relation Doppler :

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda_0} = \frac{v}{c} \quad (\text{B.16})$$

où  $\Delta\lambda = \lambda - \lambda_0$  pour une raie centrée sur  $\lambda_0$  et  $c$  est la vitesse de la lumière.  
D'où  $dv = c/\lambda_0 d(\Delta\lambda) = c/\lambda_0 d\lambda$ . Le *profil Doppler* s'écrira donc :

$$P(\lambda) d\lambda = \frac{c}{\lambda_0} \frac{1}{\alpha \sqrt{\pi}} e^{-\left(\frac{c}{\lambda_0} \Delta\lambda\right)^2 / \alpha^2} d\lambda \quad (\text{B.17})$$

ou encore, en introduisant

$$\Delta\lambda_D = \frac{\lambda_0}{c} \alpha \quad (\text{B.18})$$

souvent appelée dans la littérature, de façon inappropriée, "largeur Doppler",

$$P(\lambda) d\lambda = \frac{c}{\lambda_0} \frac{1}{\alpha \sqrt{\pi}} e^{-\left(\frac{\Delta\lambda}{\Delta\lambda_D}\right)^2} d\lambda \quad (\text{B.19})$$

Par analogie avec (B.14), nous voyons que la demi largeur à mi-hauteur vaut ici :

$$\Delta\lambda_{1/2} = \sqrt{\ln 2} \Delta\lambda_D \quad (\text{B.20})$$

et que, par conséquent, la largeur totale de la raie à mi-hauteur, en longueur d'onde à présent, est en réalité :

$$\text{FWHM} = 2 \sqrt{\ln 2} \Delta\lambda_D \quad (\text{B.21})$$

Enfin en reprenant la formule Doppler sous sa forme (B.18), nous écrivons la relation entre  $\alpha$ , qui est en correspondance avec la largeur de la raie en vitesse, via l'équation (B.15), et FWHM, cette largeur mesurée cette fois en longueur d'onde :

$$\alpha = \frac{c}{\lambda_0} \Delta\lambda_D = \frac{c}{\lambda_0} \frac{\text{FWHM}}{2 \sqrt{\ln 2}}, \quad (\text{B.22})$$

qui représente la *vitesse la plus probable* des particules dans le milieu étudié.

C

---

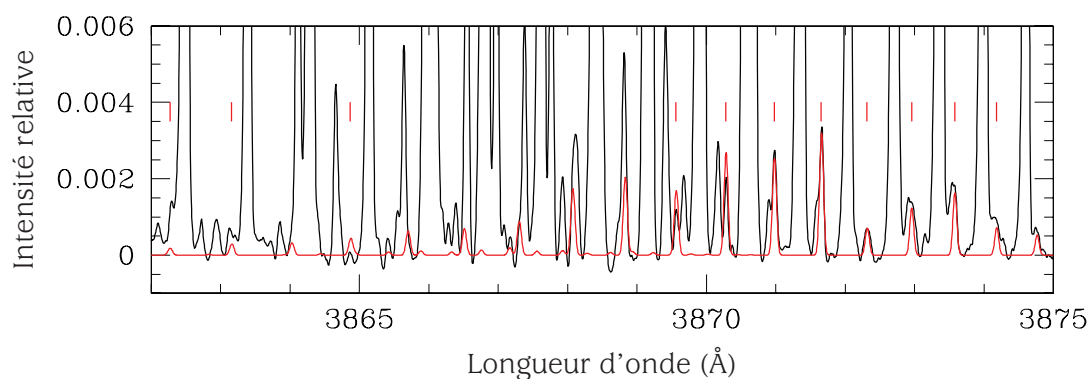
Rapports isotopiques du CN et du NH<sub>2</sub>  
pour la comète C/2012 F6 (Lemmon)

---



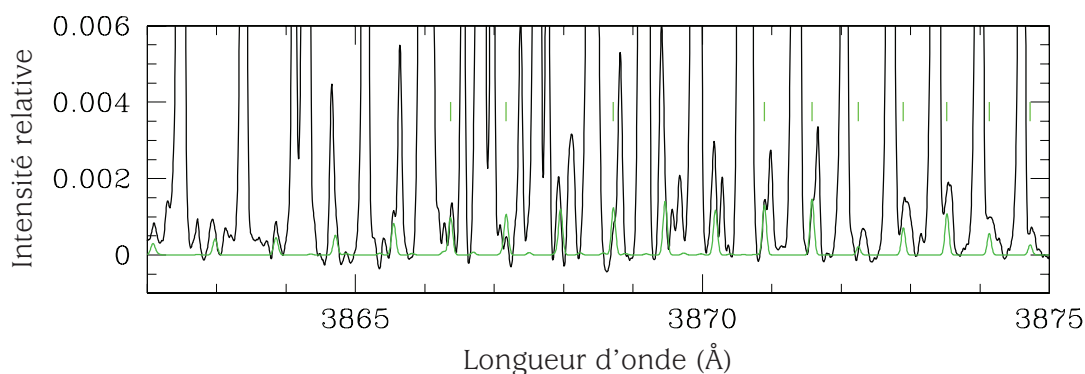
## C.1 Rapports isotopiques du CN

Des spectres synthétiques de la bande violette B-X (0,0) du CN, fournis par les modèles de Zucconi & Festou (1985), ont été calculés pour certains isotopes du CN de la comète C/2012 F6 (Lemmon), à savoir pour  $^{12}\text{C}^{14}\text{N}$ ,  $^{13}\text{C}^{14}\text{N}$  et  $^{12}\text{C}^{15}\text{N}$ . L'élaboration de ces spectres a pris en compte les vitesses héliocentrique et géocentrique de la comète. L'ajustement de ceux-ci avec les spectres observés a été réalisé selon la méthode décrite par Manfroid et al. (2009). Les résultats de ce travail sont présentés sur les figures C.1 à C.3.

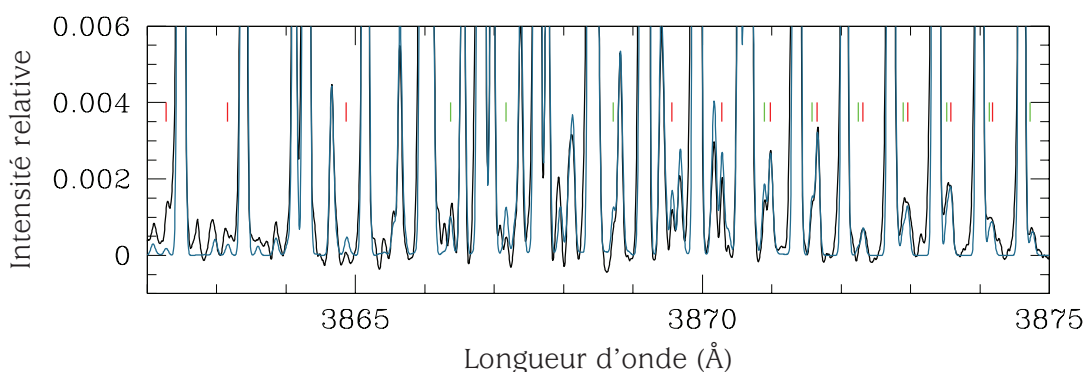


**FIGURE C.1** – Ajustement du spectre synthétique de  $^{13}\text{C}^{14}\text{N}$  (en rouge) sur le spectre observé de la comète C/2012 F6 (Lemmon) (en noir). Cet ajustement considère un rapport  $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$  égal à  $95 \pm 25$ .

Pour le carbone, un rapport  $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$  de  $95 \pm 25$  a été déduit. Celui-ci est en très bon accord avec la valeur terrestre de 89 définie par Anders & Grevesse (1989). Grâce à la mesure des isotopes de l'azote, un rapport  $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$  de  $140 \pm 30$  a été trouvé. Dans ce cas, la valeur cométaire pour le rapport de l'azote est deux fois moins élevée que la valeur terrestre (272, Anders & Grevesse (1989)). Cette différence serait liée à l'existence d'un fractionnement lors des premiers instants du Système Solaire ou au niveau de la nébuleuse protosolaire (Manfroid et al., 2009). Cela dit, le rapport  $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$  déterminé dans C/2012 F6 (Lemmon) est similaire aux rapports mesurés dans d'autres comètes à partir du CN et du HCN (Jehin et al., 2004; Bockelée-Morvan et al., 2008; Jehin et al., 2009; Manfroid et al., 2009, et références comprises).



**FIGURE C.2** – Ajustement du spectre synthétique de  $^{12}\text{C}^{15}\text{N}$  (en vert) sur le spectre observé de la comète C/2012 F6 (Lemmon) (en noir). Cet ajustement considère un rapport  $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$  égal à  $140 \pm 30$ .



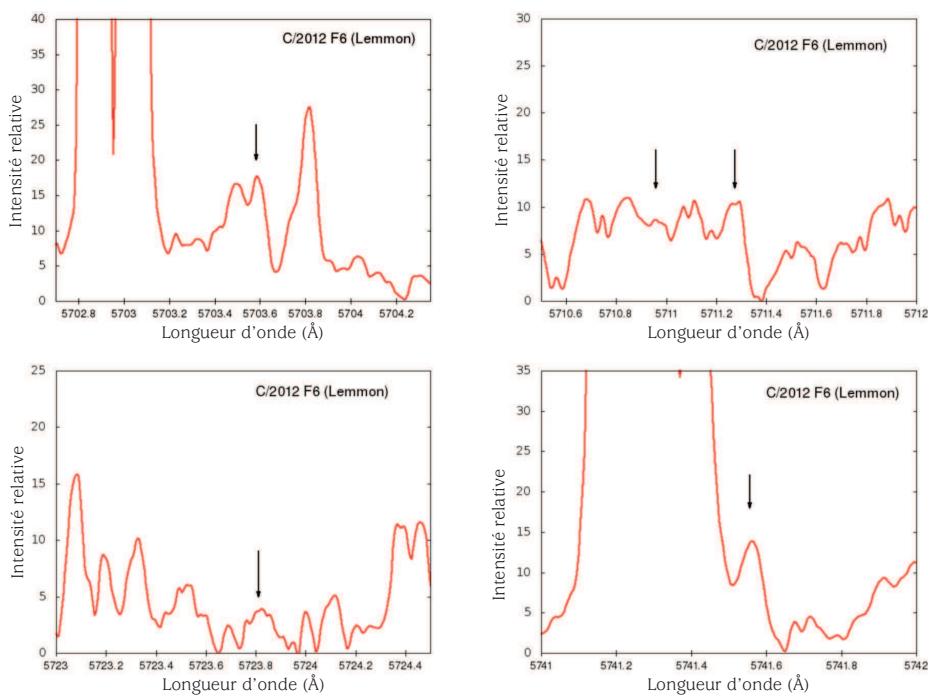
**FIGURE C.3** – Ajustement du spectre synthétique combiné de  $^{12}\text{C}^{14}\text{N}$ - $^{13}\text{C}^{14}\text{N}$ - $^{12}\text{C}^{15}\text{N}$  (en bleu) sur le spectre observé de la comète C/2012 F6 (Lemmon) (en noir).

## C.2 Rapports isotopiques du $\text{NH}_2$

En se basant sur la méthode décrite dans Rousselot et al. (2014), des raies en émission du  $^{15}\text{NH}_2$  ont été identifiées dans les spectres de la comète C/2012 F6 (Lemmon). En effectuant un simple rapport d'intensité des raies de  $^{15}\text{NH}_2$  avec les raies équivalentes de  $^{14}\text{NH}_2$ , un rapport  $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$  égal à  $137 \pm 45$  a été déterminé pour la molécule de  $\text{NH}_3$ ,



parente de  $\text{NH}_2$ . Cette mesure est très proche de la valeur obtenue à partir du CN et est donc également en désaccord avec la valeur terrestre. Cette estimation est basée sur l'hypothèse que les efficacités de photodissociation du  $^{14}\text{NH}_3$  et du  $^{15}\text{NH}_3$  dans la production des radicaux  $^{14}\text{NH}_2$  et  $^{15}\text{NH}_2$  sont identiques. De plus, les probabilités de transitions pour les isotopologues  $^{14}\text{NH}_2$  et  $^{15}\text{NH}_2$  ont été supposées similaires.



**FIGURE C.4** – Identification des raies en émission de  $^{15}\text{NH}_2$  de la bande (0,10,0)-(0,0,0) pour le spectre moyenné à partir des trois spectres observés de la comète C/2012 F6 (Lemmon).





