

Titre du projet : RES Observation – SO Base de données GhoSST

Volet : Observation A03

Porteur du projet : Bernard Schmitt

Laboratoires impliqués : IPAG, équipe Planéto

Bilan du projet (2013-2014)

Bilan d'activité

Contexte

Le service GhoSST « Grenoble Astrophysics and Planetology Solid Spectroscopy and Thermodynamics » (<http://ghosst.osug.fr/>) est localisé à l'Institut de Planétologie et d'Astrophysique de Grenoble (OSUG) et fournit à l'ensemble de la communauté scientifique (astrophysique, sciences de la terre, physico-chimie...) des spectres de laboratoire et des informations spectrales (listes de bandes) provenant de tout type de spectroscopies (du proche UV à l'IR lointain) et pour tous les types de solides : glaces, solides moléculaires, minéraux, matière organique, matière/échantillons naturels terrestres (minéraux, charbons, neige, roche...) et extraterrestre (météorites, grains cométaires et interplanétaires...). Ces données sont indispensables pour interpréter les nombreuses observations spectroscopiques et de spectro-imagerie des surfaces planétaires, des surfaces glacées et minérales terrestres, des grains interstellaires ou des aérosols terrestres et planétaires. Elles seront également très utiles pour l'analyse en laboratoire ou sur le terrain de minéraux et matière organique terrestre et extraterrestre. Cette base de données est unique en son genre. Elle va être étendue à un service européen de bases de données, SSHADE.

Activités et encadrement

Grâce au Labex OSUG@2020 (Volet Observation) Alexandre Garenne, doctorant à l'IPAG, a été recruté en « monitorat » d'observation pendant 2 ans pour contribuer au développement du modèle de donnée de GhoSST et à son contenu, et du même coup préparer le futur service européen SSHADE.

Test et validation de la base GhoSST

Une première tâche demandée au doctorant/moniteur a été d'être beta-testeur du modèle de données SSDM de la base GhoSST et des fichiers xml d'ingestion des données fondamentales ('minerals' et 'matters') et des données spectrales ('experiments', 'spectra' et 'sample'). Il a ensuite effectué un beta-test de l'interface de recherche/visualisation/export de GhoSST. Ses commentaires ont été pris en compte grâce à sa participation régulière aux réunions techniques de définition de SSDM et de l'interface de GhoSST.

Préparation et ingestion de données dans la base GhoSST

L'essentiel du travail a constitué dans un premier temps à la préparation, la validation et l'alimentation de la base en données fondamentales (minéraux, et matériaux de référence). Le

doctorant/moniteur a ainsi préparé et testé près de 80 fichiers d'importation de minéraux et groupes minéraux à partir de la compilation de données de plusieurs bases de données minérales et publications, ainsi que 2 matériaux références internationales à partir de l'analyse des publications à leur sujet. Dans une seconde étape il a alimenté la base en données de laboratoire (échantillons, expériences / spectres) et en données sur les publications associées.

- ✓ Acquisition de spectres de différents matériaux (en partie lié à sa thèse)
- ✓ Réduction/validation scientifique de données spectrales (en partie lié à sa thèse) : minéraux, expériences de synthèse minérale
- ✓ Documentation (méta-données) de ces spectres
- ✓ Préparation des fichiers xml d'ingestion des données dans la base GhoSST
- ✓ Contrôle de la qualité des données dans la base

Ce que le SO en a retiré :

- ✓ un apport indispensable pour constituer sa base de données fondamentales en minéraux, matériaux et publications ainsi que la base de données spectrales (échantillons / expériences / spectres).
- ✓ Une vision critique sur le modèle de données, les interfaces d'ingestion et de recherche/visualisation/export

Formation de l'étudiant

Au cours de ce « monitorat » d'observation, le doctorant/moniteur de formation de base en physique a acquis des connaissances en base de données (modèle de données, ingestion, interface, ...), en minéralogie et en spectroscopies des solides qui lui ont aussi été profitables pour une meilleure maîtrise de son sujet de thèse.

Illustrations - avec légende et crédit (à envoyer également séparément)

The screenshot displays the GhoSST web interface for the mineral Cronstedite. The page is organized into several sections:

- Mineral:** ID 236, UID MINER_cronstedite, Type silicate.
- Names:** Ima Name Cronstedite.
- Chemical composition:** Formula $Fe_2^{2+}Fe^{3+}(SiFe^{2+})O_4(OH)_4$, No hydration, No hydration series, Unique mineral classification level, Chemical formula $(Fe^{2+})_2(Fe^{3+})(SiFe^{2+})O_4(OH)_4$, Chemical functions number 1.
- Atomic composition:** Elemental formula $(Fe^{2+})_2(Fe^{3+})_2SiO_9H_4$, Atomic number 5.
- Oxides composition:** Oxides table showing Fe2O3 (39.97%), FeO (35.97%), H2O (9.02%), and SiO2 (15.04%).
- Classification:** Strunz class silicates (09), Strunz division phyllosilicate (09.E), Strunz family Phyllosilicates with kaolinite layers (09.ED), Strunz code 09.ED.15, Dana major class Silicates (VIII), Dana class phyllosilicate sheets of six-membered rings (71), Dana type with 1:1 layers (71.01), Dana group Serpentine group (Amesite subgroup) (71.01.02c), Dana code 71.01.02c.07.
- Crystallography:** Crystal system trigonal, Crystal class ditrigonal-hexagonal, Crystal class symbol 3m (C3v), Space group P31m.
- Properties:** Molar mass 399.5, Density 3.34, Density range 3.34 - 3.35.
- Optical properties:** Birefringence type biaxial, Birefringence 0.08, Birefringence sign negatif, Indexes n_α 1.72, Indexes n_β 1.8, Indexes n_γ 1.8, Dispersion V range moderate, r < v.
- Optical aspect:** Pure color black, True color black, greenish black, brownish black, dark b, Diaphaneity transparent to translucent, Luster vitreous.
- References and comments:** Lists sources like Wikipedia, Webmineral database, Mindat, and Handbook of Mineralogy (Min. Soc. Am).

Page de GhoSST décrivant les minéraux fondamentaux
Exemple : Cronstedite (crédit : A. Garenne, B. Schmitt, IPAG)



*Page de GhosST présentant les spectres de la base et décrivant les échantillons
Exemple : Spectre IR moyen de la Pentlandite sous vide à -10°C (crédit : A. Garenne, B. Schmitt, IPAG)*

Production scientifique

Garenne, A., G. Montes-Hernandez, P. Beck, B. Schmitt, O. Brissaud and A. Pommerol 2013. Gas-solid carbonation as a possible source of carbonates in cold planetary environments. *Planetary & Space Sciences*, **76**, 28-41

Schmitt, B., D. Albert, P. Volcke, L. Bonal, Ph. Bollard, A. Garenne and the SSDM Expert Working Group 2015. The Solid Spectroscopy Data Model (SSDM) - 1. fundamental species, samples, experiments and spectra. *Planetary & Space Sciences*, in preparation

Présentation à colloque

Schmitt B., D. Albert, P. Bollard, L. Bonal, A. Garenne, M. Gorbacheva, P. Beck, E. Quirico and the SSDM expert working group 2014. GhoSST : une base de données sur la spectroscopie (X-UV-Vis-IR-mm) des solides d'intérêt astrophysique et son extension Européenne SSHADE. 6ème Colloque du Programme National de Planétologie de l'I.N.S.U., Paris, 1-3 Octobre 2014.

Bilan financier succinct (avec suivant les cas : co-financements éventuels, équipements achetés, missions, recrutements divers, fonctionnements divers...)

⇒ Crédits gérés par OSUG

Annexes si besoin ou lien sur des sites existants et pérennes jusqu'à la fin du Labex (2020)

Base de données GhoSST : <http://ghosst.osug.fr>

Base de données Pre-SSHADE <http://pre-sshade.osug.fr/> (accès restreint)

Blog du projet SSHADE de consortium Européen de bases de données de spectroscopie des solides : <http://blog.sshade.eu/>