# Minéralogie et spectroscopie visible et proche-infrarouge de la surface de Mars

Le travail de recherche présenté dans cette thèse est centré sur l'étude de la composition de la surface martienne au travers des données visibles et proche-infrarouges de l'imageur hyperspectral OMEGA. Ce specto-imageur, à bord de la sonde Mars Express depuis 2004, permet de détecter le rayonnement électromagnétique réfléchi par la surface après qu'il ait interagi avec cette dernière. Ces interactions laissent leurs empreintes sur le spectre électromagnétique, qui se matérialisent notamment sous la forme de bandes d'absorption caractéristiques des minéraux, poussières ou glaces présentes, et qui permettent de remonter à la composition et aux propriétés physiques de la surface observée. Les domaines du visible et du proche-infrarouge, qui s'étendent d'environ 0.3 à 2.7µm, sont particulièrement bien adaptés à l'étude menée dans cette thèse. Ils sont en effet caractéristiques des transitions électroniques du Fer et de ses ions qui sont responsables des principales bandes d'absorption des minéraux mafiques et des oxydes de fer qui permettent de tracer les régions volcaniques principales et la poussière martienne.

Quelle est la relation liant le rayonnement solaire incident et la composante contenant les informations sur les propriétés de la surface, appelée réflectance, et quels sont les interactions et les acteurs mis en jeu? C'est ce à quoi tentera de répondre la première partie de ce chapitre. Nous verrons que pour obtenir la réflectance de la surface, il est nécessaire de prendre en compte plusieurs effets et notamment ceux dus à la présence de l'atmosphère martienne sur le trajet du rayonnement. De plus, afin de remonter à la composition de la surface à partir d'un spectre électromagnétique, il est nécessaire de relier les bandes d'absorption observées aux minéraux ou autres matériaux qui en sont à l'origine. Pour cela nous présenterons dans la deuxième partie les caractéristiques spectrales de chaque minéral étudié dans cette thèse, leurs origines ainsi que les effets qui peuvent les faire varier. La troisième partie sera consacrée aux techniques de détections de ces minéraux et/ou de la quantification de leur abondance à partir de leurs bandes d'absorption, la majeure partie étant consacrée à la méthode des critères spectraux qui sera utilisée dans cette thèse.

# 2.1 Diffusion de la lumière solaire par une surface planétaire : composante réfléchie observée par un satellite

Entre le moment où le rayonnement solaire est envoyé vers la surface planétaire et le moment où il va être analysé par OMEGA, le signal va être perturbé par les interactions avec l'environnement dans lequel il se propage. Dans le cas de Mars, ces interactions ont principalement lieu au niveau de sa surface et de son atmosphère. Tandis que la première interaction va nous apporter des informations que nous recherchons sur les caractéristiques de la surface, la seconde avec l'atmosphère peut perturber et même masquer ce signal. À noter que la présence de glace et de poussière sur la surface peut également perturber et/ou masquer la composition minéralogique sous-jacente qui est celle qui nous intéresse dans cette thèse. Ces interactions font intervenir différents processus (réflexion et réfraction, diffusion, absorption) et acteurs (composants de surface, gaz, aérosols) qui seront décrits dans cette section afin de mieux comprendre l'origine des variations spectrales et d'isoler celles liées à la surface.

### 2.1.1 L'intensité spécifique ou la radiance

Afin de décrire l'interaction entre le rayonnement et une surface, on utilise souvent une grandeur physique appelée intensité spécifique. Cette grandeur notée I représente l'énergie radiative dE, transportée par les photons émis ou reçus par une surface élémentaire dS, lors d'un intervalle de temps dt, dans un intervalle de longueur d'onde d $\lambda$  et dans un certain angle solide d $\omega$  centré dans la direction  $\vec{d}$  faisant un angle  $\theta$  avec la normale à la surface dS (Eq. 1 et Figure 20)

$$I = \frac{dE}{dt.dS.d\lambda.\cos(\theta).d\omega} \quad (W.m^{-2}.sr^{-1}.\mu m^{-1})$$
 éq. 1

Le facteur  $\cos(\theta)$  est nécessaire pour prendre en compte le fait que le nombre de photons qui sont effectivement émis ou reçus par la surface dans l'angle solide d $\omega$  est déterminé par la surface projetée perpendiculairement à la direction du rayonnement, qui a pour valeur dS. $\cos(\theta)$ , et non la surface réelle dS. Dans la suite, l'angle d'incidence  $\theta$ ' sera noté *i* et l'angle d'émergence  $\theta$  sera noté *e*.



Figure 20. Schéma illustrant les grandeurs utiles à la définition de l'intensité spécifique, dans le cas où la surface reçoit un rayonnement d'intensité  $I(\omega, \theta)$  dans l'angle solide d $\omega$ ' et selon l'angle  $\theta$ ', et dans le cas où elle émet un rayonnement d'intensité  $I(\omega, \theta)$  dans l'angle solide d $\omega$  et selon l'angle  $\theta$ . Il est important de noter que la surface renvoie un rayonnement dans toutes les directions schématisé par la sphère bleue qui entoure la surface dS.

C'est cette intensité spécifique qui va être modifiée par les réflexions et les absorptions qui vont avoir lieu lors de l'interaction du rayonnement avec l'environnement planétaire et qui va donc contenir les informations de surface recherchées.

# 2.1.2 La composante réfléchie par la surface

Comme nous l'avons vu dans les sections précédentes (1.2.2.2, 1.2.3), la surface de Mars est souvent composée d'un sol formé d'une multitude de particules plutôt grossières de différentes compositions, et de roches qui contiennent des minéraux sous forme de cristaux. Particules grossières et cristaux seront regroupés dans la suite sous le terme de grains qui interagissent avec le rayonnement. La surface peut aussi être recouverte par endroits de glaces  $(CO_2 \text{ et eau})$  et de poussières fines.

L'interaction entre le rayonnement incident et la surface est principalement dominée par les processus de réflexion, de diffusion et d'absorption par les grains de différentes compositions, tailles et orientations, qui composent les sols et roches de surface. Une partie de ce rayonnement incident va être directement réfléchi par la surface sans pénétrer dans le milieu. Dans le cas d'une surface totalement plane, le rayonnement serait réfléchi avec un angle d'émergence égal à l'angle d'incidence, on appelle cela la réflexion spéculaire. Cependant, dans le cas de la surface de Mars, les multiples orientations de surface des différents grains qui la composent à grande échelle, vont réfléchir le rayonnement incident non pas dans une seule, mais dans toutes les directions. Ce comportement est considéré comme une diffusion plutôt que comme une réflexion classique, et est appelé « composante réfléchie après diffusion en surface » (Figure 21b). Cette composante ne pénétrant pas dans le milieu, elle ne pourra pas être absorbée par les minéraux et ne contiendra donc pas de bandes d'absorption, elle formera une partie du continuum du spectre. La deuxième partie de ce rayonnement incident va être transmise dans le milieu et interagir avec lui. Les grains présents vont alors représenter autant de dioptres sur lesquels les rayons vont se réfléchir ou être réfractés jusqu'à ce qu'ils soient absorbés, se perdent dans le milieu ou qu'ils émergent à la surface dans une direction quelconque (Figure 21b). Cette interaction est appelée « réflexion diffuse» et la composante du rayonnement qui en émerge est appelée « composante réfléchie après diffusion en volume ». Cette composante a été en partie absorbée par les composants de la surface et permet donc d'en contraindre la composition grâce à leurs bandes d'absorptions caractéristiques.

En plus de cette composante diffusée, la surface émet vers l'espace un autre rayonnement dans l'infrarouge, l'émission thermique. Cette émission, qui n'intervient que pour des longueurs d'onde supérieures à  $3\mu m$ , est due à la température de la surface et suit la loi d'émission d'un corps gris *Jouglet* [2008]. Cependant, dans le cadre de cette thèse, nous n'étudierons la surface que dans les domaines du visible et du proche infrarouge [0.36-2.7 $\mu$ m] dans lesquels la composante thermique n'intervient pas, elle ne sera donc pas développée dans la suite.



Figure 21. Schéma explicitant les processus de diffusion de la surface et de son interaction avec la matière. a) Schéma général illustrant les rayonnements incidents et émergents avec leurs angles d'incidence i et d'émergence e et l'angle de phase  $\varphi$  qui représente l'angle entre les rayonnements incident et émergent. b) Schéma illustrant la diffusion du rayonnement par la multitude de grains qui composent la surface et/ou les roches. Les flèches en pointillées représentent les rayons incidents, les grandes flèches noires représentent les rayons qui sont réfléchis par la surface sans avoir pénétré le milieu, les petites flèches noires représentent les rayons qui ont pénétré le milieu, certains sont absorbés (étoile rouge), d'autres sont transmis en profondeur et se perdent dans le milieu, d'autres finissent par émerger à la surface et représentent la « composante réfléchie après diffusion en volume ».

L'intensité spécifique réfléchie  $I_{réfléchie}$  par une unité de surface est proportionnelle à l'intensité spécifique incidente reçue par cette surface  $I_0.cos(i)$  modulée par la réflectance bidirectionnelle de la surface r.

$$I_{r \neq fl \neq chie}(i, e, \varphi, \lambda) = r(i, e, \varphi, \lambda) I_0(\lambda) \cdot \cos(i) \quad (\text{en W.m}^{-2} \cdot \text{sr}^{-1} \cdot \mu \text{m}^{-1})$$
 éq. 2

La réflectance bidirectionnelle *r* correspond à la proportion de photons incidents qui est renvoyée vers l'espace par la surface (et non absorbée ou perdue) dans une certaine direction et pour une certaine longueur d'onde. C'est elle qui contient les caractéristiques de la surface et c'est donc elle qu'on va chercher à isoler. Elle dépend de la longueur d'onde, des directions d'incidence *i* et d'émergence *e* et de l'angle entre ces deux directions, l'angle de phase  $\varphi$ . Dans le cas de la surface de Mars, nous faisons l'hypothèse que la diffusion par sa surface se fait de façon isotrope, *r* est alors identique dans toutes les directions et I<sub>réfléchie</sub> ne dépend alors plus de la direction d'émission *e*.

Il faut noter que le paramètre de réflectance r décrit ci-dessus contient les signatures spectrales des minéraux présents à la surface qui sont les informations que nous cherchons à obtenir dans cette thèse, mais également les signatures des glaces et poussières qui peuvent recouvrir cette surface en certains endroits. Dans les deux cas, la présence de glace et de poussière va augmenter le continuum et diminuer la profondeur des bandes d'absorption des minéraux de la surface sous-jacente, et peut même les masquer complètement si la couche est assez épaisse comme c'est le cas principalement aux pôles pour les glaces et dans les régions très poussiéreuses de Mars comme Tharsis et Elysium pour la poussière. La présence de glaces d'eau et de  $CO_2$  va également entrainer l'apparition de nouvelles bandes d'absorption dans le spectre qui vont masquer et/ou déformer celles de la surface sous-jacente comme l'illustre la

Figure 22a. La glace de CO2 possède une bande caractéristique à 1.43µm très utile pour la détecter, ainsi que 3 autres à 1.6µm, 2µm et la dernière à 2.64µm dont on ne peut observer que l'aile gauche sur la Figure 22a. La glace d'eau montre une bande caractéristique centrée à 1.5µm et deux autres à 2µm et 3µm (Figure 22). La présence de glace est cependant en grande partie restreinte aux grandes latitudes (>60°) et elle n'est présente aux latitudes faibles et moyennes qu'au cours de certaines saisons et/ou dans des petites régions très localisées (au fond des cratères par exemple où on peut trouver des zones sur les bords, qui restent continuellement à l'ombre permettant à la glace d'y subsister). Étant donné que la plupart des régions de Mars ont été observées plusieurs fois par OMEGA au cours de différentes saisons, les zones dont la composition n'est jamais accessible à cause des glaces, sont très peu nombreuses et n'affectent pas de grandes surfaces excepté aux pôles. Leur présence ne posera donc pas de problèmes majeurs dans la caractérisation des minéraux de surface aux faibles et moyennes latitudes avec les données OMEGA. La poussière, présente en quantité variable sur une grande partie de la surface martienne, ne montre pas de signatures spectrales dans le proche-infrarouge mais possède des bandes d'absorption dans le visible dues à l'ion Fe<sup>3+</sup> présent dans les oxydes ferriques qui la composent (voir section 2.2.2.4). Des phases ferriques pouvant être naturellement présentes dans les roches, la bande la plus intense du Fe3+ à 0.53µm est observable partout à la surface de Mars et est amplifiée par la présence de poussière (Figure 22b). Quand cette poussière est présente en faible abondance et forme un manteau assez diffus, elle peut avoir des propriétés de diffusion assez similaires à celle des aérosols (voir section 2.1.3.2) qui ont pour effet de rougir le spectre. Quand elle est présente en forte abondance, elle va avoir pour effet d'aplatir le spectre infrarouge et d'en faire disparaître toute signature spectrale (Figure 22b). Les effets de la poussière seront donc à prendre en compte dans l'analyse des spectres et dans celle de la distribution globale des minéraux.



Figure 22. a) Illustration des effets de la présence de glaces d'eau (haut) et de CO2 (milieu) sur les spectres observés dans les fonds des cratères (partie continuellement à l'ombre) pour une latitude d'environ 46°S, le spectre du bas est un spectre d'une zone de la surface non couverte de glace dans la même région. b) Illustration de l'effet de la poussière sur les signatures spectrales de minéraux présents sur la surface sous-jacente. Le spectre du bas représente un spectre sans poussière observé dans la région de Syrtis Major où les signatures spectrales à 1 et 2µm du pyroxène sont bien visibles. Plus la quantité de poussière augmente (du bas vers le haut), plus l'albédo augmente et plus les signatures spectrales du pyroxène disparaissent. Le spectre du haut observé dans la zone poussiéreuse au nord de Syrtis Major est typique des régions claires de Mars.

# 2.1.3 Les effets de l'atmosphère

Comme nous l'avons déjà mentionné plus haut, au cours de son trajet dans l'environnement planétaire, le rayonnement peut entrer en interaction avec l'atmosphère. Cette interaction intervient au niveau du rayonnement solaire incident qui traverse l'atmosphère pour atteindre la surface ainsi qu'au niveau de la composante réfléchie par la surface sur le trajet retour depuis la surface jusqu'au satellite, l'atmosphère a donc une double incidence sur l'intensité captée par les instruments. Deux types d'effets atmosphériques sont à considérer : l'apparition de bandes d'absorption dues aux constituants gazeux, et la modification du continuum spectral par la diffusion sur les aérosols (Figure 23). Bien qu'ils soient rares, il existe également des nuages de glace de  $CO_2$  et d'eau dans l'atmosphère martienne qui peuvent également absorber et diffuser le rayonnement. Ces effets d'absorptions et de diffusions seront d'autant plus fort que la quantité d'atmosphère traversée est grande, ils augmentent donc avec l'angle d'incidence *i* et d'émergence *e* et diminuent avec l'altitude. Afin d'isoler la composante de la surface, il est nécessaire de comprendre l'origine de ces effets et de les quantifier afin de pouvoir les extraire du spectre électromagnétique ou, s'ils ne peuvent pas être corrigés, d'exclure les spectres trop affectés.



Figure 23. Interaction des rayons incidents et diffusés par la surface avec l'atmosphère. Ils peuvent être diffusés ou absorbés par les aérosols et/ou absorbés par les gaz atmosphériques. La présence de nuages de glace de CO2 ou d'eau peut également absorber et/ou diffuser le rayonnement, mais leur quantité dans l'atmosphère martienne reste faible. Toutes les flèches représentent les rayons transmis par le milieu et qui ne sont donc pas absorbés par l'atmosphère ou la surface. Les flèches grises représentent les rayons diffusés dans toutes les directions par les aérosols ou la surface, les noires ceux qui émergent dans la direction du satellite et qui vont donc être captés. Le cône bleu représente l'angle solide dans lequel le satellite observe la surface, on remarque que le satellite peut capter des photons provenant d'une surface voisine ainsi que des photons qui ont été diffusés avant d'atteindre la surface. De même, certains photons provenant de la surface observée ne seront pas captés car ils seront diffusés dans une autre direction ou absorbés par l'atmosphère avant d'arriver au satellite.

### 2.1.3.1 Absorption gazeuse

L'atmosphère martienne, dont la composition est donnée dans la section 1.1, est dominée à 95% par le CO<sub>2</sub> et contient une petite quantité de vapeur d'eau et de CO. Les modes de vibrations propres à ces molécules peuvent engendrer des absorptions à plusieurs longueurs d'onde dans l'infrarouge qui vont compliquer l'analyse des signatures spectrales de la surface. Le spectre de la transmission atmosphérique martienne est représenté sur la Figure 24. Il montre des absorptions prononcées dues au CO<sub>2</sub> à  $1.4\mu$ m,  $1.6\mu$ m,  $2\mu$ m et  $2.7\mu$ m dans le domaine du proche infrarouge qui nous intéresse. Les bandes d'absorption de la vapeur d'eau sont beaucoup plus faibles, on peut en discerner une vers  $2.6\mu$ m, une vers  $1.9\mu$ m et  $1.4\mu$ m. La variation de la profondeur de ces bandes va dépendre principalement de la densité des molécules de gaz dans l'atmosphère et de la quantité d'atmosphère traversée.



Figure 24. Spectre typique des absorptions gazeuses de l'atmosphère de Mars. Ce spectre a été obtenu en faisant le rapport entre deux observations, l'une faite à la base d'Olympus Mons et l'autre à son sommet environ 20 km plus haut. Ces terrains étant quasiment identiques (couvert de poussière) les variations sont donc pour l'essentiel dues à la différence d'absorption entre les deux masses d'atmosphère traversées. La zone rouge met en évidence le domaine du proche-infrarouge qui sera étudié dans cette thèse et les bandes d'absorption atmosphériques qui y sont présentes. C'est ce spectre qui sera utilisé pour traiter les données OMEGA.

La relation liant l'intensité du rayonnement avant la traversée  $I_0$  et après la traversée de l'atmosphère I s'écrit :

$$I = I_0 \exp(-kl) \qquad \qquad \text{éq. 3}$$

Avec k le coefficient d'absorption de l'atmosphère qui dépend de la longueur d'onde, des molécules présentes et de leur densité et l le chemin parcouru dans l'atmosphère qui va dépendre de l'altitude et des angles d'incidence et d'émergence. L'expression exp(-kl) représente la quantité d'énergie prélevée au rayonnement par les gaz pour chaque longueur

d'onde lors de la traversée de l'atmosphère, c'est ce qu'on a appelé plus haut la transmission atmosphérique et qui est représentée sur la Figure 24 pour l = L où L est la distance entre le haut et le bas d'Olympus Mons. Bien qu'en réalité la proportion entre les bandes d'absorption puisse varier dans le temps du fait de la variation du rapport entre les concentrations de  $CO_2$  et de vapeur d'eau dans l'atmosphère en fonction de la saison et de la latitude, nous verrons dans la section 3.1.3 que nous pourrons utiliser la transmission atmosphérique présentée sur la Figure 24 de façon systématique pour corriger les effets d'absorptions atmosphériques pour chaque observation, en l'élevant à une puissance dépendante du trajet l des photons dans l'atmosphère pour l'observation donnée.

Les molécules de gaz présentes dans l'atmosphère martienne peuvent également diffuser le rayonnement qui passe à travers. Cependant les molécules étant très petites devant la longueur d'onde, cette diffusion est de type Rayleigh et n'affecte donc que la partie visible du spectre. De plus cette diffusion n'est observable que lorsqu'on observe une très grande quantité d'atmosphère. Ces observations étant à éviter quand on veut observer la surface, cette diffusion ne sera pas considérée dans la suite.

# 2.1.3.2 Diffusion et absorption par les aérosols et les nuages

Depuis la surface, la présence d'aérosols dans l'atmosphère martienne est facilement observable grâce à la couleur orangeâtre qu'ils lui donnent. Ces aérosols sont principalement constitués de particules de poussières en suspension dont les propriétés spectrales dans le visible et l'infrarouge sont similaires à celles des régions poussiéreuses de Mars [*Bell et al., 2000 ; Goetz et al., 2005*]. Ces poussières atmosphériques proviennent donc probablement du soulèvement et de la redistribution par les vents de la poussière présente en surface.

Pour les rayons traversant l'atmosphère martienne, les aérosols constituent principalement des dioptres qui vont engendrer des processus de réflexion et de diffraction. De par leur petite taille à peu près similaire à la longueur d'onde (~ 1-1.5µm), ces aérosols vont également diffracter les rayons passant à proximité [*Clancy et al., 2003*]. Ces processus sont regroupés au travers du processus de diffusion de Mie qui décrit au premier ordre la diffusion sur des particules sphériques en fonction de leur taille et de la longueur d'onde. Cette diffusion va modifier la direction de propagation du rayonnement ce qui peut avoir plusieurs conséquences : (1) certains photons émis par le soleil peuvent être renvoyés vers l'espace et captés par le satellite avant d'avoir interagi avec la surface, (2) d'autres photons qui sont diffusés par la surface dans la direction du satellite vont être diffusés une deuxième fois par les aérosols dans une direction différente de celle du satellite et ne vont donc jamais l'atteindre, (3) des photons émis par une surface différente de celle observée directement par le satellite peuvent être déviés et captés par celui-ci.

La quantité de photons déviés va dépendre du nombre de particules, mais également de leur section efficace. Au travers des processus de diffraction, cette section efficace va varier en fonction de la longueur d'onde. Des études basées sur la théorie de Mie ont montré que cette section efficace (et donc le taux de diffusion) était maximale pour des longueurs d'onde similaires à la taille de la particule [*Clancy et al., 2003, Vincendon 2008*]. Les photons à cette longueur d'onde seront donc préférentiellement renvoyés vers l'espace, certains avant même d'interagir avec la surface. Ceci a pour effet principal d'augmenter le continuum dans cette gamme de longueurs d'onde et d'y diminuer les bandes d'absorption dues aux minéraux présents en surface. Bien que cet effet diminue avec la longueur d'onde il affecte presque tout le spectre dans le visible et le proche-infrarouge. Les observations acquises quand l'atmosphère contient une concentration importante d'aérosols présenteront donc des spectres avec une pente bleue très marquée et des bandes d'absorption très faibles ou inexistantes. En plus de

jouer sur la pente du spectre, la diffusion par les aérosols peut aussi modifier l'albédo. Ainsi quand on observe des régions sombres la présence d'aérosols va tendre à augmenter l'albédo, tandis qu'elle peut le diminuer légèrement au niveau des régions claires [*Vincendon 2008*].

Les rayons entrant en interaction avec les aérosols peuvent également subir des absorptions. Ces dernières sont principalement situées dans le visible du fait qu'ils soient en grande partie composés d'oxydes ferriques comme la poussière martienne. Cependant, ces absorptions sont très faibles par rapport aux effets dus à la diffusion et ce sont ces derniers qui domineront dans le spectre final. Ainsi, même les bandes d'absorption dans le visible dues à la présence d'oxydes ferriques sur la surface verront leur profondeur de bande diminuée par la présence d'aérosols. Dans le proche-infrarouge, l'absorption des aérosols est très faible (<3%; Vincendon et al., 2007) et n'est donc pas un problème dans ce domaine de longueur d'onde. L'effet des aérosols sur les bandes d'absorption dans le visible et le proche infrarouge au niveau des régions claires et des régions sombres est illustré sur la Figure 25.



Figure 25. Illustration des effets des aérosols sur les spectres de surface dans les régions sombres (a) et claires (b). Le spectre bleu est un spectre de surface non affecté par les effets des aérosols. Les deux autres spectres (jaune et rouge) ont été acquis pour de plus grandes opacités optiques  $\tau$  (voir après) et montrent des pentes entre 1 et 1.5µm plus importantes. À noter que les valeurs d'opacités optiques indiquées sont corrigées de l'altitude du lieu et de l'incidence de l'observation.

À noter que, ayant des compositions et des propriétés physiques similaires, la présence d'aérosols dans l'atmosphère est difficilement différenciable depuis l'orbite de la présence de poussière en surface, ceci rendant difficile le découplage des variations propres à la surface de celles survenant dans l'atmosphère, surtout dans la partie visible du spectre (voir la comparaison des spectres affectés par la poussière (Figure 22b) et ceux affectés par les aérosols (Figure 25)).

Afin de caractériser de façon simple l'extinction due à la présence d'aérosols dans l'atmosphère, on utilise couramment l'épaisseur optique. Cette épaisseur optique  $\tau$  mesure la quantité d'énergie prélevée au rayonnement incident pour chaque longueur d'onde lors de la traversée de la couche d'aérosols. La relation liant l'intensité incidente I<sub>0</sub> et l'intensité émergente de la couche I s'écrit alors :

$$I = I_0 \exp(-\tau_a) \qquad \qquad \acute{eq}. 4$$

Cette épaisseur optique varie principalement en fonction de la longueur d'onde, de la densité d'aérosols et de leur section efficace d'interaction et de la longueur du trajet effectué dans la couche.

La valeur de cette épaisseur optique a pu être mesurée au cours du temps grâce à plusieurs instruments, dont l'instrument TES [Smith, 2006], les instruments mini-TES et PanCam à bord des MERs [Lemmon et al., 2004] et l'instrument CRISM [Wolff et al., 2009]. Cette épaisseur optique a également été modélisée à partir des données OMEGA [Vincendon et al., 2007, 2009]. Les mesures d'opacité optique à 0.9µm obtenues par l'instrument PanCam à bord des MERs pour les 3 années martiennes d'observations OMEGA sont illustrées sur la Figure 26 et montrent que la quantité d'aérosols dans l'atmosphère de Mars est très variable au cours du temps. Cette variation n'est pas identique d'une année sur l'autre, mais on peut cependant discerner de grandes tendances saisonnières : l'épaisseur optique est plutôt faible et stable entre ~Ls 0° et  $\sim$ Ls 140° avec des valeurs dans le visible entre 0.2 et 0.6. Pour de telles profondeurs optiques, entre 20 et 50% du flux solaire incident est intercepté en incidence normale, mais jusqu'à 80% pour une incidence élevée de 70°. Entre ~Ls 140° et ~Ls 360°, de nombreuses tempêtes soulèvent la poussière présente en surface et l'injectent dans l'atmosphère. Dans ces périodes, l'épaisseur optique dans le visible peut dépasser 1 et même atteindre 4 (correspondant à 98% de flux incident intercepté) dans le cas de tempête globale comme c'est le cas à la fin de l'année 2007 (Figure 26). Ces tempêtes globales qui apparaissent environ une fois toutes les trois années martiennes (6 années terrestres) [Zurek et al., 1993] vont obscurcir toute la planète pendant 100 à 200 jours martiens [Cantor, 2007].



Figure 26. Épaisseur optique mesurée à 0.9  $\mu$ m par l'instrument PanCam à bord des MERs pour les 3 années martiennes d'observations OMEGA [*Lemmon et al., 2004 ; communication personnelle*]. Cette opacité optique est une interpolation des deux valeurs d'opacités optiques mesurées par les MERs Spirit et Opportunity et ramenée à une altitude de 0km. À noter que cette interpolation est possible car les valeurs d'opacités optiques mesurées par les deux MERs sont très proches, appuyant ainsi le fait que cette opacité optique ne varie que très peu en fonction de la longitude. Ces variations étant également très faibles pour les faibles et moyennes latitudes, les valeurs d'opacité optique présentées sur cette figure sont valables pour toute la surface de Mars quelque soit la longitude et latitude excepté aux grandes latitudes (>60°). On peut observer une augmentation de l'opacité optique très importante à la fin de l'année 2007 ( ~Ls = 300) qui correspond à une tempête globale de poussière.

Une étude menée par Mathieu Vincendon [*Vincendon*, 2008; *Vincendon et al., 2009*] a montré que les variations de l'opacité optique restaient faibles en fonction de la longitude et

pour les moyennes et faibles latitudes (<60°). Pour une même date, l'opacité optique peut donc être considérée comme identique pour toute la surface de Mars, exceptée aux grandes latitudes, et égale à celle mesurée par les MERs à l'équateur. L'opacité optique des observations OMEGA ne dépendra donc que de sa longitude solaire et de son année d'acquisition, ainsi que de l'angle d'incidence et de l'altitude de la surface observée qui augmentent tous deux la quantité d'atmosphère traversée.

L'évolution de la quantité d'aérosols au niveau des régions polaires est moins bien connue et diffère parfois de celle aux latitudes moyennes. Ainsi les augmentations d'épaisseur optique détectées aux latitudes moyennes ne se propagent pas toujours au niveau des pôles, de même la profondeur optique au bord des calottes est souvent plus élevée qu'à l'équateur.

Une méthode permettant de corriger les spectres des effets des aérosols a été mise au point par *Vincendon et al.*, [2007, 2010]. Lors de ma thèse, cette méthode n'était cependant pas encore adaptée pour être appliquée sur un grand nombre de données comme cela aurait été nécessaire dans le cadre de ma thèse. De plus, une étude de François Poulet [*Poulet et al., 2009b*] a montré que la présence d'aérosols en petite quantité (opacité optique faible) avait un effet relativement faible sur la profondeur des bandes d'absorption et la plupart des données pourront donc être utilisées telles quelles pour la caractérisation de la composition de la surface. Afin de s'affranchir des données qui sont trop altérées par les effets des aérosols, nous mettrons néanmoins au point un filtre basé sur l'opacité optique mesurée par les MERs (voir section 3.2.3.2).

Les cristaux de glace d'eau et de CO2 sont parfois aussi considérés comme des aérosols. De même que la glace en surface, la présence de ces cristaux de glace va engendrer des bandes d'absorption à ~1.4-1.5  $\mu$ m et ~2 $\mu$ m (voir section 2.1.2). Ils présentent également des propriétés diffusives similaires aux aérosols de poussières. Ces cristaux peuvent se regrouper pour former des nuages d'altitudes et d'opacités différentes dont la distribution va être variable suivant la saison. Les données affectées par ces glaces atmosphériques pourront cependant être exclues en même temps que celles affectées par les glaces présentes en surface grâce au processus de filtrage mis en place dans cette thèse (section 3.2.3.1).

# 2.1.4 Intensité spécifique reçue par un satellite et réflectance.

En se basant sur les sections précédentes, il est maintenant possible de donner une expression de l'intensité spécifique reçue par un satellite observant la surface de Mars. L'intensité spécifique solaire incidente arrivant au niveau de l'atmosphère de Mars *Is* peut s'écrire comme l'intensité spécifique solaire vue par la terre  $Is_{(1 \text{ U},A)}$ , ramenée à la distance Soleil-Mars en U.A. Cette intensité spécifique solaire incidente va interagir avec les gaz et les aérosols de l'atmosphère une première fois avant d'atteindre la surface. Les photons ayant atteint la surface vont alors être absorbés et/ou diffusés selon les caractéristiques des minéraux présents. Les photons diffusés vont alors subir une nouvelle interaction avec l'atmosphère avant d'être captés par le satellite. L'intensité spécifique reçue par un satellite peut finalement se mettre sous cette forme :

$$I_{OMEGA}(\lambda) = r(\lambda) \cdot H_{abu}(\lambda) \cdot \frac{I_{s(1 \cup A)}}{D_{Mar}^2} \cdot \cos(i) \quad (\text{en W.m}^{-2} \, \text{sr}^{-1} \cdot \mu \text{m}^{-1}) \qquad \text{éq. 5}$$

Avec  $H_{atm}$  le terme regroupant les effets de l'atmosphère (gaz et aérosols) et *r* la réflectance de la surface dépendant de sa composition. Ont peut alors en tirer la valeur de la réflectance corrigée des effets de l'atmosphère et de l'intensité spécifique solaire, qui s'écrit :

$$r(\lambda) = I_{OMEGA} \cdot \frac{D_{Mars}^2}{H_{ativ}(\lambda) I_{a(1,U,\Lambda)}(\lambda) \cdot \cos(i)}$$
 (sans unité) éq. 6

# 2.2 Les minéraux étudiés et leurs signatures spectrales dans le visible et l'infrarouge proche

Nous avons vu dans la section précédente que les signatures des interactions entre le rayonnement et la surface sont contenues dans le facteur de réflectance r. Les spectres de réflectance sont constitués d'un continuum qui peut varier en intensité et en fonction de la longueur d'onde, sur lequel viennent s'ajouter les bandes d'absorption caractéristiques des minéraux et autres composants présents. Le continuum correspond à la valeur que le spectre de réflectance aurait s'il n'y avait pas de bandes d'absorption, on peut l'interpréter physiquement comme le nombre de photons disponibles pour l'absorption. Ce continuum est généralement inférieur à 1 car les coefficients d'absorption des minéraux et autres composants de surface ne sont en réalité jamais nuls quelle que soit la longueur d'onde. De plus, certains photons peuvent être transmis en profondeur sous la surface et se perdre. Les bandes d'absorption peuvent être caractérisées par la position de leur centre, leur forme, et leur intensité. La position de leur centre va nous donner des informations sur la quantité d'énergie échangée lors de l'interaction entre l'espèce absorbante et le rayonnement et donc nous renseigner sur le type de transition mise en jeu, l'espèce présente et sa composition chimique. La forme d'une absorption est également caractéristique de la transition mise en jeu et de la composition chimique, mais peut aussi varier en fonction des caractéristiques physiques des minéraux et de leur environnement. L'intensité de la bande, évaluée par rapport au continuum, permet de contraindre la quantité de l'espèce absorbante.

Le travail de cette thèse étant basé sur la détection des minéraux grâce à leurs bandes d'absorption caractéristiques, les phénomènes à l'origine de ces bandes, leurs caractérisations pour chaque minéral étudié ainsi que les facteurs qui peuvent les influencer seront décrits en détail dans cette partie.

# 2.2.1 Les processus à l'origine des bandes d'absorption : les transitions électroniques

L'absorption est le phénomène par lequel l'énergie d'un photon est transmise à une autre particule. Ce transfert d'énergie peut se faire de plusieurs façons : par transition électronique, vibrationnelle ou rotationnelle. Les transitions électroniques qui engendrent des transmissions d'énergie de l'ordre de l'eV vont plutôt générer des bandes dans le visible et le proche infrarouge, tandis que les transitions vibrationnelles et rotationnelles de plus faible énergie (10-1-10-3 eV) présenteront des bandes d'absorption à plus grandes longueurs d'onde dans l'infrarouge moyen et lointain.

Dans le cas des minéraux mafiques, tels que l'olivine et le pyroxène, et des oxydes de fer, qui seront les principaux minéraux étudiés dans cette thèse, les bandes d'absorption sont principalement dues aux transitions électroniques des ions ferriques  $Fe^{3+}$  ou ferreux  $Fe^{2+}$  qui sont présents en quantités variables dans ces minéraux. Les autres éléments présents dans ces minéraux tels que le magnésium, le calcium, le silicium ou l'oxygène ne présentent pas d'absorptions dans le visible et le proche-infrarouge mais peuvent influencer la position du centre et la forme des bandes d'absorptions dues aux ions  $Fe^{2+}$  et  $Fe^{3+}$ .

Le Fer ainsi que ses ions sont appelés des métaux de transition, i. e. ils présentent leurs orbitales externes 3d incomplètes. Ces orbitales externes, qui contrôlent les niveaux d'énergie de

l'atome, présentent toutes le même niveau d'énergie quand les atomes sont sous leur forme libre, elles sont dégénérées. Cette dégénérescence disparait quand ces métaux s'associent avec d'autres éléments qu'on appelle alors des ligands pour former une structure cristallographique. Cette association qui consiste en la mise en commun d'une ou plusieurs paires d'électrons va engendrer une dissociation des orbitales 3d en 2 sous-niveaux : un niveau triplement dégénéré t<sub>2g</sub> et un niveau doublement dégénéré eg (Figure 27, Burns 1993). L'existence de ces 2 sous niveaux permet aux électrons de se déplacer du sous-niveau de plus faible énergie vers le sousniveau de plus haute énergie lors de l'absorption d'un photon ayant une énergie égale à la différence d'énergie entre ces 2 états, créant une bande d'absorption à la longueur d'onde correspondante. L'énergie respective des sous-niveaux va dépendre de la structure cristalline et plus précisément de la structure du site cristallographique, formé par le cation entouré de ses ligands, qui dépend principalement du nombre de ligands et de leur arrangement autour du cation. Dans le cas d'un site cristallographique complètement octaédrique, qui est composé de 6 ligands répartis de façon équidistante autour du cation (Figure 27a), les deux sous-niveaux eg et  $t_{2g}$  sont séparés par une énergie  $\Delta_o$  engendrant une bande d'absorption vers 1.10  $\mu m$  dans le cas de l'ion Fe<sup>2+</sup>. Cependant dans la nature, la plupart des minéraux présentent des petites distorsions dans la symétrie de leurs sites qui engendrent une dissociation des sous-niveaux e<sub>g</sub> et t<sub>2g</sub> en niveaux d'énergies plus ou moins espacés (Figure 27b,c,d). La différence d'énergie entre les deux niveaux eg formés par cette dissociation pourra dans certains cas être assez importante pour permettre la dissociation de la bande principale à ~  $1.10 \mu m$  en deux bandes d'absorption distinctes tel que nous le verrons dans le cas du pyroxène et de l'olivine (Figure 27c,d). Les bandes d'absorption des minéraux dépendent donc en grande partie de la symétrie de leurs sites cristallographiques et le même ion Fe<sup>2+</sup> ou Fe<sup>3+</sup> peut donc engendrer des bandes d'absorption à des longueurs d'onde différentes.



Figure 27. Énergies de transition relatives pour un métal de transition tel que les ions Fe2+ et Fe3+ présent dans différentes symétries de sites cristallographiques (issue de Burns [1993]). (a) Symétrie octaédrique régulière (e.g. ~ site M1 du pyroxène); (b) symétrie octaédrique distordue trigonnallement (e.g. ~ site M2 de l'olivine, hématite); (c) symétrie octaédrique distordue tétragonallement (e.g. ~ site M1 de l'olivine); (d) site très distordu à 6 liaisons métal-ligand (e.g. site M2 du pyroxène). On peut noter que la séparation du sous-niveau  $e_g$  en deux niveaux d'énergies très espacés dans les cas (c) et (d) va permettre la formation des bandes doubles à 1 et 2 µm du pyroxène et 0.9 et 1.25µm de l'olivine [Burns 1993].

En plus de la symétrie des sites cristallographiques, d'autres paramètres peuvent engendrer des modifications dans la position des bandes d'absorption des minéraux comme le type de ligand, qui dans le cas des silicates est principalement l'atome d'oxygène, la distance R entre le cation et le ligand, qui est reliée à l'énergie de la transition selon la relation suivante  $\Delta$ ~  $1/R^5$ , ainsi que la pression et la température [*Burns, 1993*]. Ainsi le remplacement de l'ion Mg<sup>2+</sup> par l'ion Fe<sup>2+</sup> de plus gros rayon ionique dans un site cristallographique engendre une augmentation de la distance cation-liguant, et donc d'après l'équation la reliant à l'énergie de la transition , le déplacement des bandes vers les plus grandes longueurs d'onde ; à l'inverse si l'ion Fe<sup>2+</sup> remplace l'ion Ca<sup>2+</sup> de plus gros rayon ionique, les bandes vont être déplacées vers les plus faibles longueurs d'onde. Ce type d'échanges est important dans les minéraux tels que le pyroxène et l'olivine et peut expliquer certaines de leurs variations spectrales. Les cristaux formant les minéraux étant formés à partir d'une maille de plusieurs sites cristallographiques, la longueur cation-liguant va de plus varier selon le site autour d'une valeur moyenne et va être responsable de la largeur des bandes d'absorption. La température peut amplifier cet effet en engendrant des vibrations qui vont également modifier les distances métal-ligant [*Burns 1993*].

En plus de leur longueur d'onde centrale, les bandes d'absorption sont caractérisées par leur intensité. Les transitions entre les sous-niveaux  $e_g$  et  $t_{2g}$  décrites précédemment sont en fait des transitions interdites car elles ont lieu au sein d'une même orbitale. Ces transitions sont même doublement interdites quand elles ont lieu au sein de l'ion Fe<sup>3+</sup> du fait de la configuration électronique de ce dernier [*Burns 1993*]. Les bandes d'absorption associées à ces transitions devraient donc avoir une intensité très faible. Cependant, ces interdictions sont affaiblies quand la position du cation dans le site cristallographique est légèrement décalée par rapport à son centre de symétrie, ce qui est généralement le cas dans les minéraux. Dans le cas de l'ion Fe<sup>3+</sup>, ces bandes d'absorption peuvent être intensifiées par le couplage magnétique avec les ions Fe<sup>3+</sup> présent dans des sites cristallographiques voisins [*Sherman and Waite, 1985*]. Ce couplage peut également permettre une excitation simultanée des deux ions Fe<sup>3+</sup> par le même photon engendrant la formation d'une nouvelle bande d'absorption à une longueur d'onde différente des précédentes, on parlera alors de transitions jumelées [*Sherman and Waite, 1985*].

Un second processus électronique, appelé transfert de charges, peut également provoquer des absorptions. Dans ce cas, l'absorption d'un photon permet à un électron de se déplacer entre deux ions voisins, ou entre un ion et un ligand [*Burns 1993*]. Ces transferts nécessitent beaucoup plus d'énergie et impliquent donc des photons de plus hautes énergies que pour les transitions électroniques. Les longueurs d'onde concernées se situent dans le domaine ultraviolet et seule l'aile de l'absorption peut s'étendre dans la partie visible du spectre.

# 2.2.2 Caractéristiques spectrales des bandes d'absorption des minéraux étudiés2.2.2.1 Le pyroxène

Le pyroxène est un des minéraux les plus communs et abondants dans les roches ignées et est observé dans la quasi-totalité des terrains sombres de la surface de Mars. C'est un silicate ferromagnésien formé de chaines simples de SiO<sub>4</sub> dont la formule générale est exprimée sous la forme XYSi<sub>2</sub>O<sub>6</sub> où X représente en général des gros cations tels que Na+, Ca<sup>2+</sup>, Mn<sup>2+</sup>, Fe<sup>2+</sup>, Mg<sup>2+</sup> ou Li<sup>+</sup> et Y représente des cations de tailles moyennes telles que Mn<sup>2+</sup>, Fe<sup>2+</sup>, Mg<sup>2+</sup>, Fe<sup>3+</sup>, Al<sup>3+</sup>, Cr<sup>3+</sup> ou Ti<sup>3+</sup>. Parmi tous ces cations, les plus souvent présents sont les ions Ca<sup>2+</sup>, Fe<sup>2+</sup>, Mg<sup>2+</sup> et Na<sup>+</sup>.

La structure cristalline des pyroxènes est composée de tétraèdres  $[SiO_4]$  qui forment des chaines simples en partageant deux de leurs oxygènes avec les tétraèdres adjacents. Ces chaines sont reliées par des cations qui forment des liaisons avec les atomes d'oxygène qui jouent alors le rôle de ligand. Les cations peuvent occuper deux types de sites cristallographiques M1 et M2 (Figure 28). Certains cations comme le  $Fe^{2+}$  ou le  $Mg^{2+}$  peuvent s'intégrer aux deux sites.

Le site M1, est occupé par les cations de types Y qui forment 6 liaisons avec des oxygènes « libres » i.e. non partagés par les tétraèdres [SiO<sub>4</sub>]. La distance entre les oxygènes libres et le cation étant d'une taille à peu près similaire, le site est peu distordu et peut être considéré comme octaédrique (Figure 27 a). La présence de l'ion Fe<sup>2+</sup> dans ce site va alors engendrer des bandes d'absorptions faibles autour de 1µm, une à ~0.98µm et une autre à ~1.08µm.

Le site M2, est occupé par les cations de types X et principalement le Ca<sup>2+</sup> et le Fe<sup>2+</sup>. Ces cations vont former des liaisons avec 6 ou 8 oxygènes suivant le cation (6 pour le Fe<sup>2+</sup>, 8 pour la Ca<sup>2+</sup>), 4 liaisons avec des oxygènes partagés par les tétraèdres [SiO<sub>4</sub>] et 4 ou 2 liaisons avec des oxygènes non partagés. Les distances entre ces deux types d'oxygènes n'étant pas de la même taille, le site va être fortement distordu engendrant la dissociation du sous-niveau e<sub>g</sub> de l'ion Fe<sup>2+</sup> en deux niveaux d'énergies largement espacés (Figure 27d). Ces deux niveaux d'énergies vont engendrer la formation des deux fameuses bandes d'absorption caractéristiques du pyroxène à ~1µm et ~2µm. À cause de la grande distorsion du site M2, ces bandes d'absorption ont des intensités beaucoup plus fortes que celles engendrées par le site M1 et vont en grande partie les recouvrir [*Burns 1993*].

La position exacte de ces deux bandes va dépendre principalement de la concentration en Ca<sup>2+</sup> du pyroxène. En effet, dans les pyroxènes riches en calcium HCP (High Calcium Pyroxène), les cations Ca<sup>2+</sup> vont occuper les sites M2 et les ions Fe<sup>2+</sup> seront surtout présents dans le site M1 (Figure 28a). Si le Ca<sup>2+</sup> occupe la totalité des sites M2, le pyroxène ne montrera pas de bande à 2µm et seulement les bandes d'absorptions liées au site M1 autour de 1µm. Si quelques ions Fe<sup>2+</sup> occupent les sites M2, ils vont générer des bandes à ~1.03µm et ~2.3µm. Avec la diminution de la quantité en calcium, les ions Fe<sup>2+</sup> vont prendre la place des ions Ca<sup>2+</sup> dans les sites M2, les ions Fe<sup>2+</sup> ayant des rayons plus petits que les ions Ca<sup>2+</sup>, la taille du site cristallographique sera réduite et les bandes d'absorption seront donc décalées vers les plus petites longueurs d'onde. Les pyroxènes pauvres en calcium LCP (Low Calcium Pyroxène) auront des bandes de pyroxènes à ~0.9µm et ~1.85µm (Figure 28b). Bien que son effet soit plus faible, la teneur en Mg peut aussi jouer sur la position des bandes d'absorption du pyroxène, la substitution des ions Mg<sup>2+</sup> par les ions Fe<sup>2+</sup> ayant pour effet de décaler les bandes d'absorption vers les plus grandes longueurs d'onde [*Burns 1993*].



Figure 28. a) Structure cristalline d'un clinopyroxène. Les tétraèdres bleus représentent les tétraèdres [SiO4], les atomes jaunes représentent les cations de type X dans le site M2, ici ce sont des ions  $Ca^{2+}$  avec 8 liaisons  $Ca^{2+}-O^{2-}$ , les atomes roses représentes les cations de type Y dans le site M1 avec 6 liaisons  $Fe^{2+}-O^{2-}$ . b) Spectres de différents types de pyroxènes : l'enstatite qui est un LCP orthopyroxène, la pigeonite qui est un LCP clinopyroxène, la diopside qui est un HCP clinopyroxène et l'hedenbergite qui est un clinopyroxène saturé en  $Ca^{2+}$ , il ne montre pas les bandes à 1 et 2µm dues à la présence de l'ion  $Fe^{2+}$  dans le site M2.

Les pyroxènes peuvent aussi être classés en fonction de leur système cristallin. Les clinopyroxènes présentent un système cristallin monoclinique qui permet une large gamme de composition avec des quantités variables en Ca<sup>2+</sup>, Fe<sup>2+</sup> et Mg<sup>2+</sup> ainsi qu'en Na+. La deuxième famille de pyroxène, les orthopyroxènes, présente une structure orthorhombique. La formation de cette structure n'est pas possible en présence d'une trop grosse quantité de Ca<sup>2+</sup>, les orthopyroxènes seront donc préférentiellement pauvres en calcium et leur composition variera en fonction des quantités de Mg<sup>2+</sup> et de Fe<sup>2+</sup>. À noter que les bandes d'absorption des orthopyroxènes liées au site M1 sont généralement d'intensités très faibles tandis que celles liées au site M2 sont d'intensités importantes par rapport aux clinopyroxènes. Ceci est dû au fait que dans les orthopyroxènes, le Fe<sup>2+</sup> occupe préférentiellement le site M2 alors que dans les clinopyroxène il occupe plutôt le site M1, le site M2 étant préférentiellement occupé par le Ca<sup>2+</sup>[*Burns 1993*].

Suivant leur teneur en Magnésium, en Fer et en Calcium, les pyroxènes peuvent être classés dans le système Ca-Mg-Fe illustré sur la Figure 29. Ainsi, les LCP vont regrouper la pigeonite, l'enstatite et la ferrosilite, alors que les HCP vont regrouper le diopside, l'hedenbergite et l'augite. D'autre part, la famille des clinopyroxènes va regrouper l'ensemble de ces espèces tandis que la famille des orthopyroxènes ne regroupe que la série enstatite-ferrosilite. On peut noter que ces deux derniers types de pyroxènes peuvent se former selon les deux types de système cristallin et donc appartenir aux deux familles.



Figure 29. Composition et nomenclature des pyroxènes dans le système Ca-Mg-Fe. À noter que la « wollastonite » n'est pas un minéral réel, mais le nom donné à l'hypothétique pôle pur en calcium du pyroxène. Le calcium ne pouvant pas occuper le site M1, une composition > 50% en Ca est impossible.

*Poulet et al.*, [2009b] a montré que la plupart des spectres des terrains martiens pouvaient être modélisés par un mélange de pigeonite (LCP) et de diopside (HCP) dans des quantités variables. L'utilisation de l'augite, qui est le HCP le plus rependu dans les météorites martiennes, à la place du diopside est aussi possible pour modéliser la surface martienne, dans ce cas sa concentration modélisée sera cependant plus faible. À noter que l'utilisation de l'orthopyroxène dans ces modélisations ne permet jamais un bon ajustement, leurs bandes d'absorption étant trop fortes [*Poulet et al., 2009b*].

# 2.2.2.2 L'olivine

L'olivine est un silicate ferromagnésien de formule générale (Mg,Fe)<sub>2</sub>[SiO<sub>4</sub>], dont la composition varie entre 2 pôles la forstérite (MgSiO<sub>4</sub>) riche en magnésium et la fayalite (FeSiO<sub>4</sub>) riche en fer. Les cristaux d'olivine sont formés de tétraèdres [SiO<sub>4</sub>] libres reliés par des cations Fe<sup>2+</sup> ou Mg<sup>2+</sup> qui forment des liaisons avec six oxygènes, non partagés par les tétraèdres [SiO<sub>4</sub>], en deux sites M1 et M2 (Figure 30a). Ces sites sont légèrement distordus par rapport à une symétrie octaédrique parfaite et la présence de l'ion Fe<sup>2+</sup> dans ces sites va engendrer la formation de trois bandes d'absorption qui se chevauchent autour de 1µm. La structure du site cristallographique M1 est illustrée sur la Figure 27c, on peut observer qu'elle engendre, tout comme dans le cas du site M2 du pyroxène, une dissociation du sous-niveau e<sub>g</sub> en deux niveaux d'énergies espacés qui vont permettre la formation des deux petites bandes d'absorption extérieures à 0.9 et 1.25µm. La bande d'absorption centrale, plus intense, est située entre 1.04 et 1.08µm et est due à la présence de l'ion Fe<sup>2+</sup> dans le site cristallographique M2 (Figure 30b).

La variation de la composition de l'olivine du pôle forsterite (riche en magnésium) au pôle fayalite (riche en fer), se matérialise par la substitution des ions Mg<sup>2+</sup> par les ions Fe<sup>2+</sup>, ce qui va augmenter la taille des sites cristallographiques et donc diminuer l'énergie des transitions. Une augmentation en Fer dans la composition de l'olivine va donc se matérialiser par un décalage vers les grandes longueurs d'onde de ses bandes d'absorption comme illustré sur la Figure 30b, une fayalite pouvant avoir une signature spectrale s'étendant jusqu'à 1.8µm contre environ

1.5µm pour une forsterite. On peut également observer une augmentation de la profondeur de bande et de sa largeur, ainsi qu'une baisse du continuum due au fait que le coefficient d'absorption de l'olivine n'est jamais totalement nul. La fayalite pure montre cependant une profondeur de bande plus faible qu'une olivine un peu moins riche en Fer (Fo11 par exemple), ce qui s'explique par le fait que le continuum continu de diminuer avec l'augmentation de la quantité de fer tandis que la bande d'absorption sature. Il faut noter qu'une olivine purement magnésienne ne présentera pas de bandes d'absorption.

Le rapport Mg/(Mg+Fe) permet de déterminer la composition de l'olivine par rapport aux deux pôles Fayalite-Forsterite. Il se note en pourcentage de Forsterite Fo et varie entre 0 et 100%.



Figure 30. a) Structure cristalline de l'olivine. Les tétraèdres bleus représentent les tétraèdres [SiO4], les atomes jaunes représente les cations (Fe<sup>2+</sup> ou Mg<sup>2+</sup>) dans le site M2, les atomes bleus les cations (Fe<sup>2+</sup> ou Mg<sup>2+</sup>) dans le site M1. b) Spectres d'olivine montrant la variation de sa bande d'absorption à ~1µm en fonction de sa composition variant de la Forstérite en bleue (Fo99) à la Fayalite en rouge (Fo01). \*

Nous verrons dans la suite qu'il est cependant très dur de contraindre la composition de l'olivine à partir de ses bandes d'absorption, celles-ci étant généralement en partie masquées par la bande de pyroxène à  $1\mu m$  et très dépendantes des caractéristiques physiques de la surface comme la taille des grains (voir section 2.2.3)

# 2.2.2.3 Les plagioclases

Les plagioclases sont de la famille des feldspaths et constituent un des principaux minéraux des roches ignées avec l'olivine et le pyroxène. Les plagioclases ont une composition variant entre les deux pôles purs que sont l'albite NaAlSi<sub>3</sub>O<sub>8</sub> et l'anorthite CaAl<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>O<sub>8</sub>. Ils sont formés à partir de tétraèdres de [SiO4] reliés par leurs quatre coins et dont chaque O est relié à deux cations. Cependant, leur faible teneur en fer laisse leurs spectres dans le visible et le proche-infrarouge pauvres en signatures spectrales, les rendant difficilement détectables depuis l'orbite. La substitution de l'ion Ca<sup>2+</sup> par l'ion Fe<sup>2+</sup> peut créer une petite bande d'absorption située autour de ~1.25µm, qui restera toutefois peu profonde comparée aux bandes d'absorption d'olivine et de pyroxène. Cette petite bande a cependant permis de détecter la présence d'anorthosite, qui contient ~2% de Fer, sur la surface de la Lune.

# 2.2.2.4 Les oxydes ferriques

La présence d'oxydes ferriques est facilement détectable depuis l'orbite grâce à la baisse rapide de leur réflectance entre le visible et l'UV, qui peut atteindre une valeur quasi nulle à ~0.4µm. Cette diminution rapide de réflectance était historiquement identifiée comme étant l'aile droite d'une paire d'intenses bandes d'absorption dues à des transferts de charges entre l'ion Fe<sup>3+</sup> et son ligand 0<sup>2-</sup>. À cette aile droite venaient s'ajouter les bandes dues aux absorptions électroniques interdites entre les sous-niveaux  $t_{2g}$  et  $e_g$  de l'ion Fe<sup>3+</sup> dont les intensités étaient amplifiées par le couplage des ions Fe<sup>3+</sup> voisins. Deux de ces bandes étant situées entre 0.86-0.96µm et 0.64-0.66µm, et trois autres entre 0.3 et 0.4µm. Cependant, l'origine de cette pente a été par la suite reconsidérée par *Sherman* [1985] comme étant le résultat de ces mêmes absorptions dues aux transitions électroniques interdites, et d'une absorption intense entre 0.49 et 0.53µm due à des transitions jumelées entre ions Fe<sup>3+</sup> voisins. La bande d'absorption due aux transferts de charges Fe<sup>3+</sup>-O<sup>2-</sup> a été recalculée comme moins large et centrée à plus courtes longueurs d'onde entre 0.24 et 0.26µm.

La position exacte de ces bandes d'absorption et leurs intensités vont dépendre principalement de la structure cristalline du minéral et du type de ligand présent (0<sup>2-</sup> ou OH<sup>-</sup>) qui peuvent varier en fonction du type d'oxyde ferrique. La présence du ligand O<sup>2-</sup> par exemple (et non OH<sup>-</sup>) va favoriser les couplages et donc permettre des bandes d'absorption plus intenses. La teneur en fer et la taille des grains peuvent également jouer sur ces couplages, une augmentation de ses paramètres va favoriser les couplages et engendrer des bandes d'absorption plus intenses [Burns 1993].

Il existe plusieurs types d'oxydes ferriques à la surface de Mars dont certains hydratés. Lors de cette thèse, nous ne nous intéresserons cependant principalement à l'hématite qui est un oxyde ferrique anhydre et qui, sous sa forme nanocristalline, est le meilleur analogue spectral de la poussière surfacique et atmosphérique martienne [*Morris et al., 1989; Poulet et al., 2007*].

Dans le cas de l'hématite, de formule Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, les ions Fe<sup>3+</sup> occupent 2/3 des sites octaédriques légèrement distordus (Figure 27b) où ils sont liés à 6 oxygènes. Chaque site étant relié par 3 oxygènes comme illustré sur la Figure 31a. Le spectre de l'hématite, présenté sur la Figure 31b montre des bandes d'absorption caractéristiques à 0.86µm, 0.65µm et 0.53µm. La présence du ligand O<sup>2-</sup> (et non OH<sup>-</sup>) favorise les couplages et permet donc des bandes d'absorptions assez intenses. La Figure 31c montre l'évolution des signatures spectrales pour des mélanges d'hématites avec des concentrations en fer et des cristallinités variable. On observe que le spectre d'une hématite à petits grains (<10nm) et avec une faible teneur en fer va présenter un spectre constitué d'une pente importante dans le visible, mais pauvre en signature spectrale. Ces spectres sont très similaires aux spectres des régions claires de Mars confirmant la nature nanocristalline de l'hématite formant la poussière martienne. Le passage d'une hématite nanophasée à une hématite cristalline se matérialise alors en l'intensification de toutes les bandes d'absorption et principalement la bande à 0.86µm (Figure 31c (gauche), Morris et al., [1989]). Le passage d'une hématite pauvre en fer à une hématite riche en fer semble par contre jouer essentiellement sur la pente du spectre et moins sur la bande à 0.86µm (Figure 31c (droite), Morris et al., [1989]). La bande à 0.86µm semble donc être principalement dépendante de la cristallinité de l'hématite. La bande à 0.53µm semble quant à elle augmenter principalement avec la teneur en fer.



Figure 31.a) Structure cristalline de l'hématite. b) spectre de l'hématite cristalline où on peut observer ses 3 bandes caractéristiques à 0.53, 0.65 et 0.86 µm. c) Spectres montrant l'évolution des signatures spectrales de l'hématite en fonction de sa cristallinité et de sa teneur en Fer (gauche), et en fonction de sa teneur en Fer uniquement pour une hématite nanocristalline (droite) (issue de *Morris et al.*, [1989]). Le spectre (1) dans les deux cas représente une hématite nanocristalline.

Il faut noter que les bandes d'absorption liées aux transitions électroniques du fer ne sont pas forcément indicatives de la présence d'oxydes ferriques et peuvent être dues à la présence de l'ion Fe<sup>3+</sup> dans d'autres minéraux présent à la surface.

## 2.2.3 Variations spectrales des minéraux étudiés

Nous avons vu au cours des sections précédentes que les variations de la composition chimique au sein d'un même minéral pouvaient amener à des variations dans ses signatures spectrales. Ces variations sont très utiles pour pouvoir contraindre la composition et l'espèce du minéral observé depuis l'orbite. Cependant, nous allons voir dans cette section que cette composition chimique n'est pas le seul paramètre faisant varier les bandes d'absorption. Des paramètres reliés aux caractéristiques physiques de la surface, tels que la taille des grains des minéraux ou les mélanges, peuvent intervenir et modifier les bandes d'absorption. Ceci rend la détection et la détermination de la composition des minéraux présents à la surface depuis l'orbite beaucoup plus complexe.

## 2.2.3.1 Variations liées à la taille des grains

La surface de Mars est en général constituée de minéraux sous forme de grains de différentes tailles. Ces grains peuvent être pris au piège dans une roche sous forme de cristaux, ou libres, formant alors un tapis de particules aux formes grossières. Comme nous l'avons vu précédemment, ces grains forment des dioptres avec lesquels vont interagir les photons incidents. Plus le grain est gros, plus le photon a de chance de se faire absorber avant d'être

réfléchi ou réfracté au fond du grain et d'éventuellement sortir du milieu. L'augmentation de la taille des grains se traduit donc par une augmentation de l'intensité des bandes d'absorption comme illustré pour le pyroxène et l'olivine sur la Figure 32. Cependant, on peut observer sur cette figure qu'à partir d'une certaine taille de grains, nommée « optimale » par différents auteurs [e.g. *Mustard and Hays, 1997*; *Milliken and Mustard, 2007*], la profondeur de bande atteint un maximum, puis diminue lorsque la taille de grains augmente. Ce phénomène s'explique par le fait que le fond de bande ne varie plus car l'absorption est saturée, alors que le continuum diminue légèrement avec la taille des grains puisque le chemin optique dans le milieu augmente, donnant un effet d'écrasement de la bande d'absorption.

La large bande d'olivine à 1 µm étant formée à partir de 3 bandes d'absorption distinctes, la variation en intensité de ces différentes bandes et leur saturation vont modifier non seulement la profondeur de la bande, mais également sa forme générale. Ces variations vont poser un réel problème au niveau de la détermination de la composition de l'olivine à partir de ses signatures spectrales. En effet, si on observe l'évolution de la bande d'olivine en fonction de sa teneur en fer (Figure 30) et en fonction de la taille de ses grains (Figure 32), on s'aperçoit qu'outre le léger décalage des bandes d'absorption vers le rouge dans le cas d'une augmentation de la teneur en Fer, le spectre d'une olivine riche en fer est très similaire au spectre d'une olivine pauvre en fer, mais avec des gros grains, on y retrouve d'ailleurs le même effet de saturation de la bande. Nous verrons dans la suite que malgré l'adaptation et la diversité des méthodes utilisées, la discrimination entre la teneur en fer et la taille des grains restera un problème pour l'étude de l'olivine dans le visible et le proche infrarouge.



Figure 32. a) Effet de la taille des grains sur la bande à ~1µm d'une olivine de composition Fo88 (riche en magnésium) (acquisition avec un ASD Fieldspec® au laboratoire, DTP/UMR5562/OMP), on peut remarquer que la bande d'absorption pour une taille de grains > 500µm est très similaire à celle d'une fayalite (Fo01) (voir Figure 30b). b) Spectres de laboratoires montrant l'effet de la taille des grains sur les bandes d'absorption à 1 et 2 µm du pyroxène.

### 2.2.3.2 Variations spectrales liées aux mélanges

Comme nous l'avons à plusieurs reprises (voir section 1.2.3; 2.1.2; 2.2.3.1), les roches et les sols martiens sont formés de particules grossières et de cristaux, appelés grains. Ces grains peuvent avoir une composition homogène, dans ce cas le spectre de la surface sera directement comparable aux spectres du minéral en question obtenus en laboratoires. Cependant dans la réalité, les sols et les roches de Mars sont plutôt constitués d'un mélange de minéraux. Dans ce cas, le spectre de la surface va être une combinaison des signatures spectrales de chaque minéral présent, cette combinaison étant dépendante du type de mélange des minéraux de surface. Il existe trois principaux types de mélanges macroscopiques qui sont illustrés sur la Figure 33 : Les mélanges spatiaux, les mélanges intimes et les mélanges entre couches multiples.



Figure 33. Illustration des différents types de mélanges des minéraux en surface, les grains représentés ici sont sous forme de particules à la surface, dans la réalité ils peuvent bien sûr aussi être présent sous forme de cristaux dans les roches. a) mélange spatiaux : le rayonnement reçu par le satellite est composé de deux rayonnements n'ayant chacun interagi qu'avec une seule des unités. b) Mélange intime : le rayonnement interagit avec des minéraux différents sur le même chemin optique. c) mélange entre couches multiples : le rayonnement interagit en premier avec une couche de surface et peut éventuellement interagir avec la couche sous-jacente au cours du même chemin optique suivant la nature du matériau et l'épaisseur de la couche.

Les **mélanges spatiaux** interviennent quand la surface observée par un pixel du détecteur contient deux unités, optiquement séparées, et de compositions distinctes renvoyant chacune un rayonnement vers le satellite. Dans ce type de mélange, nous faisons l'hypothèse qu'il n'y a pas de diffusion multiple entre les différentes unités, chaque rayonnement n'ayant donc interagi qu'avec une seule des unités. Le spectre final est alors une composition linéaire des spectres de chaque unité modulés par la fraction surfacique occupée par chacune d'entre elles.

Dans le cas de roche ou de sable de composition inhomogène, qui sont formés de multiples grains de compositions différentes associés de manières aléatoires, on parle de **mélange intime**. Le rayonnement entrant en interaction avec cette roche ou ce sable interagit avec un certain type de grains avant d'être réfracté ou réfléchi vers le grain voisin qui peut avoir une composition différente. Il peut alors interagir avec ce grain avant d'être à nouveau renvoyé vers un autre minéral et ainsi de suite avant de sortir de la roche. Le spectre final capté par le satellite est alors une composition non linéaire des signatures spectrales des minéraux rencontrés sur le chemin optique du faisceau lumineux. Ce type de mélange est à priori le plus rencontré à la surface de Mars, il est typique des roches formées de cristaux de différentes compositions et des sol qui recouvrent la surface, composés de différents types de particules.

Certaines unités observées à la surface de Mars peuvent être recouvertes d'une fine couche de matériau de composition différente. Cette couche peut être une couche de poussière, une couche de sable ou de fines particules provenant d'un terrain adjacent ou encore une couche d'altération formant une sorte de vernis ou patine autour des roches. Dans ces cas, ce sont les **mélanges entre couches multiples** qui interviennent. Comme dans le cas des mélanges intimes, lors de mélanges entre couches multiples le rayonnement incident va interagir avec chacune des couches de composition différentes au cours d'un seul chemin optique, étant à chaque fois soit réfléchi, soit réfracté, soit absorbé. Ce type de mélange est typique des zones un peu poussiéreuses de la surface de Mars où le rayonnement va être diffusé par la couche de poussière et/ou interagir avec la surface sous-jacente. Le spectre final sera alors une combinaison non-linéaire du spectre de diffusion et d'absorption de la poussière, et du spectre d'absorption de la surface. Cependant, selon la nature du matériau et l'épaisseur de la couche de surface, le rayonnement peut ne jamais atteindre la couche sous-jacente avec laquelle il n'interagira donc pas. C'est par exemple le cas dans les régions de Tharsis et d'Elysium où la couche de poussière fait plusieurs mètres d'épaisseur. Au cours de mon travail de recherche, on retrouvera également ce type de mélange dans le cas de fines particules riches en pyroxènes recouvrant une unité riche en olivine.

À noter que ces types de mélanges sont tous dépendants de la longueur d'onde et de la taille des grains et que, étant donné la complexité de la surface martienne, les pixels observés par le satellite contiennent généralement plusieurs types de mélanges, le spectre final étant souvent bien plus complexe que les simples combinaisons exposées ci-dessus.

Dans mon travail de thèse, nous serons souvent confrontés aux mélanges entre olivine et pyroxène. Des exemples des spectres obtenus dans le cas de mélanges intimes et de mélanges spatiaux en fonction de la quantité de pyroxène et d'olivine sont présentés sur la Figure 34. Pour les exemples de mélange spatiaux, nous avons utilisé le spectre de la météorite martienne Shergotty qui est assez représentatif des spectres de pyroxène observés à la surface de Mars (composée à 33% de HCP et 36% de LCP [McFadden and Cline, 2005], voir chapitre 5). Tout d'abord, on peut observer que les spectres de mélanges intimes et spatiaux de pyroxène et de forsterite sont très similaires et montrent les mêmes tendances générales dans l'évolution de leurs signatures spectrales avec la variation des proportions en olivine et pyroxène. La présence d'olivine a deux principaux effets sur la bande de pyroxène qui peuvent nous permettre de détecter sa présence dans un mélange : (1) l'olivine a tendance à creuser la bande à 1µm du pyroxène autour de 1.3-1.4µm pour la forsterite et 1.4-1.5µm pour la fayalite, ce qui à pour effet global de décaler le pic de réflectance entre les deux bandes d'absorption du pyroxène aux plus grandes longueurs d'onde ; (2) Ce décalage est accompagné d'une diminution de la profondeur de bande à 2µm du pyroxène. À noter que ce décalage semble d'autant plus important quand le pyroxène est un orthopyroxène ou qu'il est en présence de fayalite, et que la diminution de la bande à 2µm du pyroxène semble moins importante dans le cas d'un mélange intime que pour un mélange spatial. Si on regarde maintenant les effets de la bande de pyroxène sur la bande d'olivine, on peut observer qu'elle a pour effet de décaler l'aile droite de l'olivine vers les petites longueurs d'onde. Ceci va rendre des spectres de mélange pyroxène-fayalite et pyroxèneforsterite assez similaires pour des concentrations d'olivine <50% et peut dans le cas d'une très grande abondance en pyroxène masquer en grande partie la bande d'olivine, compliquant la détection de cette olivine à la surface de Mars et la détermination de sa composition exacte.



Figure 34. Illustrations de mélanges entre olivine et pyroxène. Mélange intime entre Forstérite et clinopyroxène (a) ou orthopyroxène (b) [*Singer 1981*]. Mélange spatial entre le spectre de la météorite martienne Shergotty qui est assez représentatif de la plupart des spectres de pyroxène observé à la surface de Mars (voir chapitre 5) et un spectre de forsterite (c) ou de fayalite (d).

# 2.3 Méthodes de détection des minéraux

Afin de détecter les minéraux présents sur la surface martienne, il est communément utilisé des critères de détections appelés "critères spectraux". Ces critères sont basés sur la position et la forme des bandes d'absorption caractéristiques des minéraux étudiés et permettent de les détecter et de quantifier leur profondeur de bande.

Ces critères comparent le fond de la bande avec son continuum qui correspond au flux qui aurait été reçu à la longueur d'onde correspondant au fond de la bande s'il n'y avait pas eu d'absorption, et permettent donc d'obtenir la proportion du flux prélevé par l'absorption (équation 7). En pratique, ces critères se calculent selon l'équation :

$$CS = \frac{continuum(\lambda_b) - r(\lambda_b)}{continuum(\lambda_b)}$$
éq. 7

où  $\lambda_b$  est la longueur d'onde centrale de la bande d'absorption. De façon pratique, la valeur du continuum ne pouvant être mesurée pour la longueur d'onde  $\lambda_b$ , elle est souvent obtenue à partir de la moyenne entre les valeurs du continuum prises pour des longueurs d'onde situées de part et d'autre de la bande d'absorption. Il n'est également pas rare que les critères soient calculés à partir de plusieurs valeurs pour le continuum (plus de 2) et pour le fond de la bande, permettant de diminuer les effets du bruit. Les valeurs de réflectance pour les longueurs d'onde correspondant à la bande d'absorption peuvent également être pondérées ce qui peut permettre de prendre en compte la forme de la bande. La profondeur de bande obtenue est exprimée en pourcentage.

Certains critères calculent la force de la pente caractérisant l'une des ailes de la bande d'absorption considérée plutôt que sa profondeur de bande. Ce type de critère est souvent utilisé quand la totalité de la bande d'absorption n'est pas visible sur le spectre, ce qui est le cas pour les spectres OMEGA de la bande d'olivine à 1µm qui se trouve à la séparation entre le détecteur visible et proche infrarouge. Ces critères peuvent tout simplement se calculer en faisant le rapport entre la valeur de la réflectance en haut de la pente et sa valeur en bas de la pente. Cependant, pour ce type de critère, il est souvent important de caractériser la forme de l'aile de la bande d'absorption qui peut, dans le cas de la bande d'olivine par exemple, différencier entre une olivine riche en Fer et une olivine riche en Magnésium (en passant outre les effets de tailles de grains), ou même la différencier d'une bande de pyroxène à 1 $\mu$ m. Ces critères sont donc souvent calculés à partir de plusieurs valeurs de réflectance prises tout au long de la pente et pondérées afin de tenir compte de la forme de l'aile de la bande d'absorption.

Les critères spectraux ne font que donner une profondeur de bande et leur utilisation pour la détection des minéraux à la surface de Mars nécessite donc de définir un seuil de détection représentant une profondeur de bande limite au-dessus de laquelle on estime que le minéral est présent. L'estimation de ce seuil de détection se fait généralement de façon empirique en les testant sur des spectres réels ou modélisés. Ces seuils de détections doivent prendre en compte le bruit et d'autres effets instrumentaux qui peuvent soit affecter la profondeur de bande, soit créer de fausses bandes d'absorptions aux mêmes longueurs d'onde que le minéral étudié. Il doit également permettre de détecter les minéraux dans les mélanges, mais éviter de détecter les bandes d'absorption des autres minéraux qui peuvent être présents. L'estimation du seuil de détection est donc une étape importante dans la détection des minéraux, il sera généralement choisi assez restrictif dans le cas de détection systématique et globale afin d'éviter le plus de faux positifs, il pourra cependant être baissé et adapté aux conditions d'observations dans le cas d'analyses plus locales où les détections peuvent être vérifiées manuellement.

La méthode des critères spectraux pour la détection des minéraux présents sur la surface de Mars est une méthode très rapide et est donc très bien adaptée au grand nombre de données OMEGA qui sera utilisé lors de ma thèse pour la confection et l'analyse de cartes globales minéralogiques. Cependant, il faut noter que parce que la profondeur des bandes d'absorption peut dépendre de beaucoup de paramètres comme la quantité de poussière atmosphérique ou surfacique, les autres minéraux présents ou encore la taille des grains, il n'est pas possible de relier directement la valeur des critères spectraux à l'abondance de l'espèce minérale étudiée et celle-ci ne nous en donnera qu'une indication.

Il existe d'autres méthodes qui permettent de détecter les minéraux, mais aussi d'en quantifier l'abondance. La méthode de déconvolution linéaire, très utilisée pour la détection des minéraux à partir des données TES, consiste par exemple à ajuster le spectre observé avec les spectres de laboratoires des minéraux supposés présents à la surface pondérés par un terme correspondant à leur abondance [Ramsey and Christensen, 1998, Bandfield et al., 2000]. Cette méthode suppose cependant que le mélange des minéraux à la surface soit linéaire ce qui n'est pas toujours le cas. Elle est de plus très dépendante du choix initial des spectres de laboratoires. La méthode du modèle gaussien modifié (MGM), détaillée dans Sunshine et al.,[1990] ainsi que dans les thèses de Aline Gendrin [2004] et Harold Clenet [2009] dans le cas d'une application aux données OMEGA, a l'avantage de ne pas faire de supposition sur les minéraux présents ni sur la position de leurs bandes d'absorption. Elle est basée sur le fait que les bandes d'absorption dans le visible et le proche infrarouge sont formées à partir de transitions électroniques qui dépendent de la symétrie des sites cristallographiques et donc de la longueur des liaisons cation-liguant. Du fait du grand nombre de sites cristallographiques, cette dernière va avoir une distribution statistique gaussienne. Il est alors suggéré par Sunshine et al., [1990] que cette distribution gaussienne des longueurs de liaisons peut être transformée en une distribution gaussienne des énergies et donc que les bandes d'absorptions engendrées peuvent être assimilées à des gaussiennes. Dans cette méthode, les bandes d'absorptions présentes sur le spectre sont donc ajustées par des gaussiennes dont les longueurs d'onde centrales, les profondeurs et les largeurs à mi-hauteur peuvent être rapportées à des bandes d'absorptions caractéristiques correspondant à des minéraux de composition chimique et d'abondance donnée. Cependant, si cette méthode est très bien adaptée à la déconvolution des spectres de laboratoire, elle est beaucoup plus difficile à appliquer aux spectres de surfaces planétaires qui nécessitent alors des étapes d'initialisation telle que la soustraction du continuum, qui sont très dépendantes des paramètres choisis. Cette méthode se heurte également au problème de la taille des grains, qui dans le cas où ils sont trop gros peuvent saturer et complètement écraser les bandes d'absorption rendant difficile la détermination de leurs longueurs d'onde centrales et donc de la composition chimique de la ou les espèces observées. Un dernier type de méthode existe qui consiste en la modélisation des spectres par des modèles de transfert radiatif dont plusieurs ont déjà été développés [*Hapke, 1981, 2002 ; Shkuratov et al., 1999*]. Ces modèles permettent de modéliser l'interaction entre une onde lumineuse et une surface au travers des phénomènes d'absorptions et de diffusions. Un de ces modèles, développé par *Shkuratov et al.,* [1999], a été repris et adapté aux surfaces basaltiques, granulaires et à composants multiples par *Poulet and Erard* [2004]. Il permet ainsi de contraindre le type de mélange observé ainsi que la composition et la taille des grains des minéraux observés permettant en théorie de dissocier les effets de ces deux facteurs. Ce modèle demande cependant un choix au préalable des minéraux intervenant dans le modèle ainsi que leurs constantes optiques qui doivent être obtenues à partir d'expériences en laboratoire.

Il faut cependant noter que ces méthodes demandent un temps de calcul beaucoup plus important que dans le cas des critères spectraux et sont donc moins adaptées à la grande quantité de données utilisée dans cette thèse. Dans certains cas particuliers, nous utiliserons cependant le modèle de transfert radiatif proposé par *Poulet and Erard*, [2004], afin de quantifier et de mieux contraindre la composition de certains dépôts spécifiques étudiés dans cette thèse.