

L'extension pst-spectra

A. Schmittbuhl

21 décembre 2005

Résumé

Cette extension, basée sur PSTricks, automatise le tracé de spectres dans le visible. Ces spectres peuvent être continus, discrets, d'émission ou d'absorption. Il peut s'agir d'éléments chimiques (les spectres de 99 éléments et de leurs ions sont enregistrés, à partir de données issues de la NASA) ou de réalisations plus personnelles (comme des spectres cannelés, par exemple).

1 Récapitulatif des options

S'il s'agit d'une première lecture, passer à la partie suivante.

Une seule commande est proposée, `\psspectrum`, qui dispose de multiples options, ici rassemblées

Option	Type	Défaut	Description
<code>begin</code>	nombre	380	Longueur d'onde initiale, en nanomètre
<code>end</code>	nombre	780	Longueur d'onde finale, en nanomètre
<code>gamma</code>	nombre	0.8	Correction de couleur en loi de puissance
<code>brightness</code>	nombre	1	Paramètre de brillance du codage CMYK
<code>numlines</code>	nombre	250	Nombre de traits tracés pour afficher un spectre
<code>lines</code>	nombres		Liste de longueurs d'ondes, en nanomètre
<code>element</code>	texte		Liste d'éléments chimiques ou de cations
<code>emission</code>	booléen	true	Demande le tracé du spectre en émission
<code>absorption</code>	booléen	false	Demande le tracé du spectre en absorption
<code>lwidth</code>	longueur	0.2	Précise la largeur des raies tracées, en unités PSTricks (pas en nanomètre)
<code>lmin</code>	nombre	0	Compris entre 0 et 1, ce nombre limite la proportion des raies tracées aux seules dont l'intensité relative (normée par rapport à l'intensité maximale) est supérieure ou égale à <code>lmin</code> .
<code>axe</code>	booléen	false	Demande qu'un axe nanométrique soit tracé
<code>DI</code>	nombre	20	Écart entre deux graduations successives de l'axe nanométrique
<code>axecolor</code>	couleur	black	Couleur de l'axe nanométrique
<code>axewidth</code>	nombre	0.05	Largeur de l'axe nanométrique
<code>wlangle</code>	nombre	0	Angle, en degré, formé par l'écriture des longueurs d'onde avec l'axe
<code>wlcmd</code>	commandes	<code>{\small\sffamily\bfseries}</code>	Commandes appliquées aux longueurs d'onde

2 Installation et premier essai

Il faut placer les fichiers `pst-spectra.sty`, `pst-spectra.tex` et `pst-spectra.pro` à l'emplacement approprié de l'arborescence \TeX , puis mettre à jour le système. Avec la distribution teTeX 3 sous linux, les fichiers précédents doivent être respectivement placés dans les répertoires `texmf-tetex/tex/latex/pstricks`, `texmf-tetex/tex/generic/pstricks` et `texmf-tetex/dvips/pstricks` de votre arborescence, locale de préférence. Ceci fait, la base doit être mise à jour par la commande `texhash`.

Normalement, les programme suivants doivent compiler sans erreurs. Si votre visualiseur `dvi` est capable d'afficher du `PostScript`, vous devez observer le spectre du domaine visible (voir plus bas). Sinon, il faut transformer le `dvi` en `PostScript` (par `dvips`, par exemple) et visualiser le résultat avec un lecteur adapté (`ghostview`, par exemple).

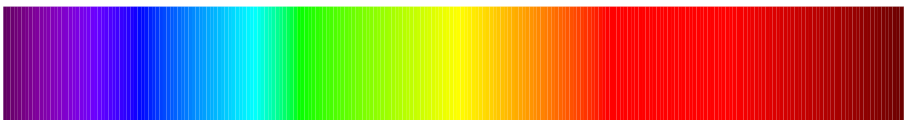
<code>%% Avec LaTeX</code>	<code>%% Avec TeX</code>
<code>\documentclass{minimal}</code>	<code>\input pst-spectra.tex</code>
<code>\usepackage{pst-spectra}</code>	<code>\psspectrum</code>
<code>\begin{document}</code>	<code>\bye</code>
<code>\psspectrum</code>	
<code>\end{document}</code>	

3 Représentation de spectres

3.1 Spectre continu

▷ Commande `\psspectrum`

Il s'agit de l'unique commande de cette extension. Elle permet de tracer des spectres continus ou discrets, selon les options associées. Le tracé d'un spectre continu s'effectue à l'aide de la commande `\psspectrum`. Par défaut, le spectre du domaine visible (compris entre 380 et 780 nm) est représenté.



Pour changer la dimension de ce spectre, on peut lui adjoindre une ou deux paires de coordonnées, `\psspectrum(2,0)(7,1)`

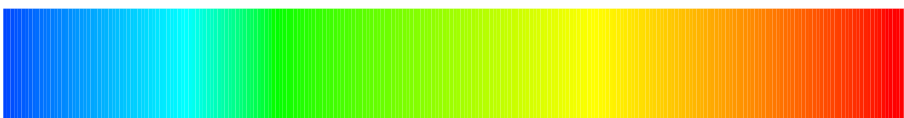


La commande `\psspectrum` est d'ailleurs équivalente à `\psspectrum(0,0)(12,1.5)`.

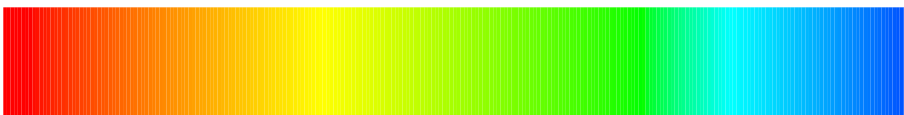
▷ Options `begin` et `end`

Les valeurs extrêmes du spectre sont modifiables par le biais des paramètres `begin` et `end`, pour sélectionner une zone précise ou inverser le sens naturel de tracé. Les valeurs sont des réels dont l'unité par défaut, non modifiable, est le nanomètre.

D'abord `\psspectrum[begin=450,end=650]`



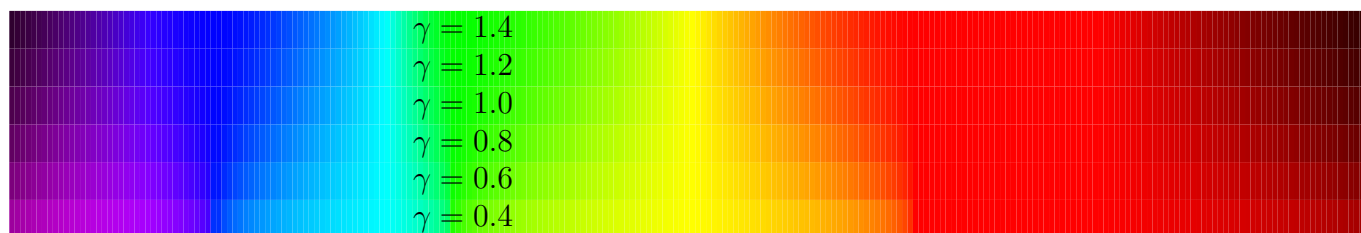
Puis `\psspectrum[begin=650,end=450]`



▷ Option `gamma`

Le paramètre **gamma** contrôle l’extinction de la luminosité aux extrémités du spectre visible. Par défaut, ce paramètre vaut 0.8.

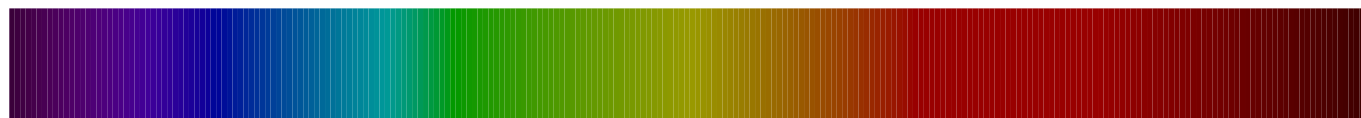
```
\multido{\ng=1.4+-0.2,\Rb=0+-0.5,\Re=-0.5+-0.5,\Rm=-0.25+-0.5}{6}{%
  \psspectrum[gamma=\ng](0,\Rb)(\linewidth,\Re)\rput(6,\Rm){$\gamma=\ng$}}
```



▷ Option **brightness**

L’option **brightness** permet de modifier la luminosité d’ensemble du spectre. Elle vaut 1 par défaut. Représenter une fond continu de faible luminosité peut être utilisé pour situer les raies d’un spectre d’émission (voir dans le paragraphe des exemples).

Ici, `\psspectrum[brightness=0.6](\linewidth,1.5)`



▷ Option **numlines**

Elle détermine le nombre de segments verticaux qui sont tracés pour dessiner le spectre. Plus ce nombre est élevé, plus le tracé sera fin mais plus les calculs pourront être longs... Par défaut, **numlines**=250. Si l’affichage des spectres ne vous semble pas satisfaisant, pensez à modifier l’antialias de votre visualiseur (gv, xpdf,...) avant d’augmenter ce paramètre. En dernier recours, vérifiez l’impression.

3.2 Spectre discret

▷ Option **lines**

S’il l’on souhaite tracer un spectre discret, et que l’on connaît les longueurs d’onde correspondantes, il suffit d’en stocker la liste dans le paramètre **lines**. Par exemple

```
\psspectrum[lines={400,750,589.0,589.6}]
```



▷ Option **element**

La plupart des éléments chimiques (99 pour un total de 16 880 radiations!) sont disponibles. Le tableau périodique suivant les rassemble, ceux placés entre crochets n’étant pas référencés.

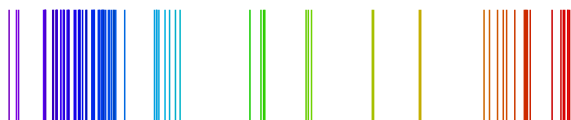
H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	[At]	Rn
[Fr]	Ra	Ac															
			Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu	
			Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	[Fm]	[Md]	[No]	[Lr]	

Par défaut, tracer le spectre d'un élément trace toutes les radiations disponibles, c'est-à-dire celles de l'élément non ionisé et tous ses cations.

Pour tracer le spectre d'un élément, on place son nom dans le paramètre **element**. Par exemple, `\psspectrum[element=Na]`. S'il s'agit d'un cation, on ajoute la charge et le signe + (par exemple, Na^{2+} , Sc^{+} ...). Enfin, pour afficher le spectre de l'élément neutre, on adjoint à l'élément le nombre zéro 0 (pas la lettre o majuscule!).

Dans la base de donnée exploitée, aucun élément n'est ionisé plus de 4 fois dans le visible et certaines données de charge sont absentes. Seul le tracé complet de l'élément (ni neutre, ni chargé, donc) permettra de les visualiser.

Spectre d'un élément : `\psspectrum[element=N]`.



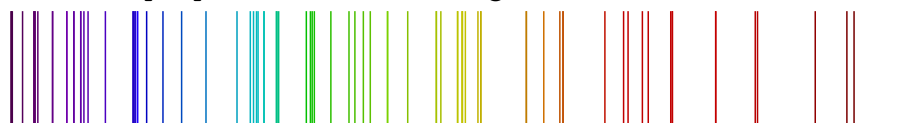
Spectre d'un cation `\psspectrum[element=Fe+]`.



Spectre d'un élément neutre `\psspectrum[element=Li0]`.



Selon le même mécanisme qu'avec l'option **lines**, il est possible de superposer les spectres de plusieurs éléments `\psspectrum[element={Hg,Cd2+,W+}]`

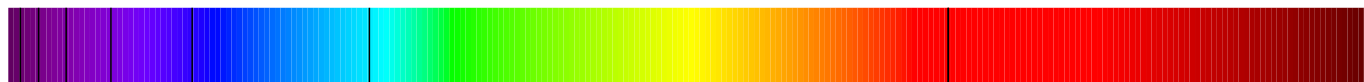


Les options **lines** et **element** peuvent être utilisées conjointement.

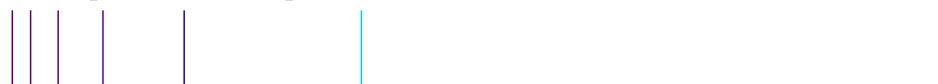
▷ Options **emission** et **absorption**

Pour réaliser des spectres d'absorption, il suffit de placer l'option **absorption** (c'est un booléen, vrai s'il est appelé sans affectation). Pour basculer en émission, il suffit de placer le paramètre **emission** (booléen également) dans les options. Si des valeurs antagonistes sont saisies, la dernière bascule l'emporte. Par défaut, les tracés sont des spectres d'émission.

`\psspectrum[absorption,element=H](\linewidth,1)`



À comparer avec le spectre d'émission :



▷ Option **lwidth**

La largeur des raies d'émission est contrôlée par le paramètre **lwidth**, de valeur par défaut 0.02. L'unité par défaut est le centimètre et cette largeur n'est pas liée à l'étendue spectrale. Par exemple, dans le cas de la radiation du laser He-Ne, sur fond de spectre visible,

`\psspectrum[lwidth=0.25,lines={632.8}](\linewidth,1)`



▷ Options **begin** et **end**

Les spectres s'affichent toujours dans le sens des longueurs d'onde allant de la valeur de **begin** à celle de **end**. Par défaut, l'affichage se fait des faibles longueurs d'ondes vers les grandes, mais il est simple de faire l'échange

```
\psspectrum[element=F](\linewidth,1)
```



```
\psspectrum[begin=780,end=380,element=F](\linewidth,1)
```



▷ Option **lmin**

La base de données exploitée contient, pour la plupart des raies, une intensité relative. Le paramètre **lmin**, compris entre 0 et 1, permet d'afficher les raies dont l'intensité (ramenée entre 0 et 1 en normant par l'intensité maximale de l'élément) est supérieure à la valeur proposée.

Illustration par l'exemple

```
\psspectrum[element=Si](\linewidth,1)
```



```
\psspectrum[element=Si,lmin=0.7](\linewidth,1)
```



▷ Options **gamma**, **brightness** et **numlines**

Le fonctionnement des options **gamma**, **brightness** et **numlines** est identique à celui décrit dans la partie précédente, dédiée au tracé de spectres. Dans ce contexte, leur intérêt est moindre.

3.3 Graduation nanométrique

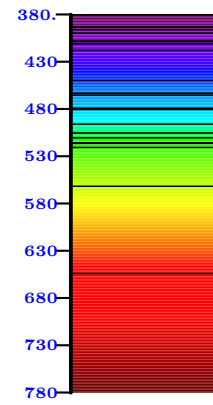
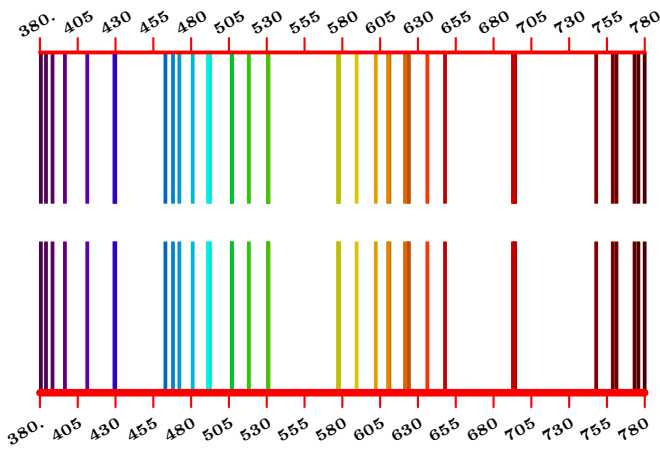
▷ Options **axe**, **Dl**, **axecolor**, **wlangle** et **wlcmd**

Le recours à l'option **axe** place une graduation au-dessus ou en-dessous de la représentation du spectre. L'intervalle couvre les valeurs comprises entre **begin** et **end** avec, par défaut, un pas de 20 nm. La modification de ce pas se fait par le paramètre **Dl**. Si la composante *y* du premier couple de coordonnées est supérieure à la composante *y* du second couple, la graduation sera placée au dessus du spectre.

L'option **axecolor** est explicite, je pense. L'option **wlangle** est appliquée à la numérotation de la graduation.

L'option **wlcmd** permet de passer des commandes qui seront appliquées aux longueurs d'ondes (pour en changer la fonte, la couleur, la taille...).

```
\begin{pspicture}(0,-0.75)(\linewidth,4.75)
\psspectrum[axe,axecolor=red,wlangle=30,Dl=25,wlcmd={\tiny\bfseries}
,element=Zn,lwidth=0.05](1,4.5)(0.5\linewidth,2.5)
\psspectrum[axe,axecolor=red,wlangle=30,Dl=25
,wlcmd={\tiny\bfseries\hspace*{-0.35cm}}
,element=Zn,lwidth=0.05](1,0)(0.5\linewidth,2)
\rput{90}(0.85\linewidth,0){%
\psspectrum[axe,Dl=50,wlangle=-90,wlcmd={\tiny\bfseries\color{blue}}
,element=Es,absorption](5,2)(0,0)}
\end{pspicture}
```



Le système de graduation intégré restant plutôt rudimentaire (pas de sous graduation, par exemple), la partie « exemples » explique comment tracer des graduations personnalisées.

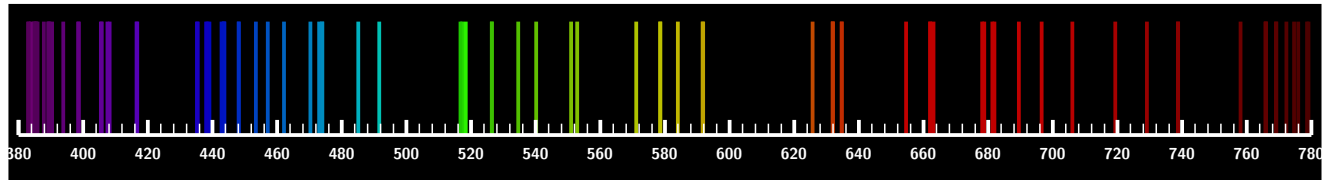
3.4 Quelques exemples

Certaines commandes utilisées ci-dessous proviennent de l'extension `pstricks-add`.

▷ Placer une graduation nanométrique

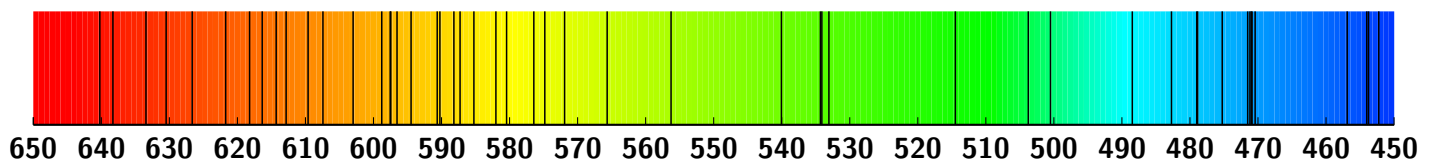
Le tracé du spectre du Manganèse est ici représenté sur fond noir.

```
\renewcommand\pslabel{\tiny\bfseries\sffamily\color{white}}
\psframebox[fillstyle=solid,linecolor=black,fillcolor=black]{%
\begin{pspicture}(0,-0.5)(0.95\linewidth,1.6)
\psspectrum[element=Mg,lwidth=0.05](0.95\linewidth,1.5)
\psaxes[linecolor=white,linewidth=0.5mm,0x=380,Dx=20,dx=0.855
,yAxis=false,ticks=x,ticks=0 2mm,tickwidth=0.5mm,tickcolor=white
,subticks=5,subtickwidth=0.2mm,subtickcolor=white]%
(0.95\linewidth,0.01)
\end{pspicture}}
```



Ici, le spectre du Néon, sur une étendue plus faible de longueurs d'ondes et en sens décroissant.

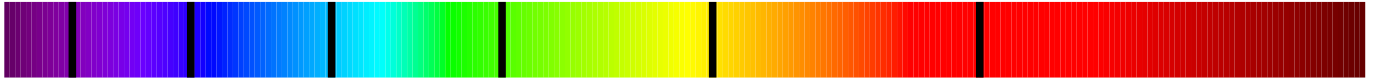
```
\renewcommand\pslabel{\small\bfseries\sffamily}
\begin{pspicture}(0,-0.5)(\linewidth,1.6)
\psset{begin=650,end=450,gamma=1}
\psspectrum[absorption,element=Ne](\linewidth,1.5)
\psaxes[0x=650,Dx=-10,dx=0.8999,yAxis=false,ticks=0 1mm,ticks=x,subticks=0]%
(\linewidth,0.01)
\end{pspicture}
```



▷ Réalisation d'un spectre cannelé

Il suffit de tracer un ensemble de raies en absorption (en interne, les cannelures sont obtenues en mettant à zéro le paramètre `brightness`).

```
\begin{pspicture}(\linewidth,1.1)
\psspectrum[absorption,lines={400,434.8,476.2,526.3,588.2,666.7},lwidth=0.1]
(\linewidth,1)
\end{pspicture}
```



▷ Spectre d'émission sur fond diffus du visible

Jouer avec le paramètre **brightness**, précédemment évoqué, permet de tracer le spectre du visible avec une faible luminosité. On y superpose ensuite le spectre de raies souhaité.

```
\psspectrum[brightness=0.5,gamma=0.5](\linewidth,1)
\psspectrum[brightness=5,element=B,lwidth=0.05](\linewidth,1)
```

Bore

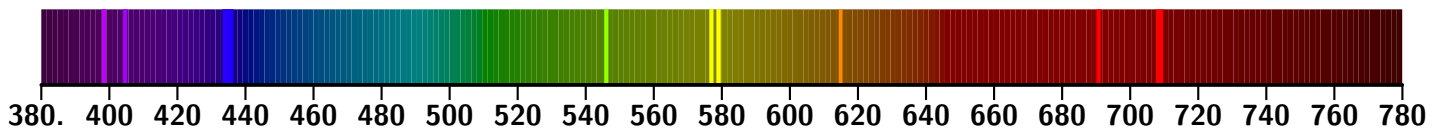


▷ Spectres « classiques »

On trouve, dans les salles de travaux pratiques, des posters où seules les radiations principales sont représentées. Il faut alors jouer sur le paramètre **lmin**.

```
\psspectrum[brightness=0.5,gamma=0.6](\linewidth,1)
\psspectrum[axe,brightness=5,element=Hg,lwidth=0.05,lmin=0.05](\linewidth,1)
```

Mercur



4 Sources

L'algorithme de conversion des longueurs d'ondes nanométriques en couleur selon le codage RGB est issu du code FORTRAN de Dan Bruton (<http://www.physics.sfasu.edu/astro/color/spectra.html>).

Les radiations des éléments sont issues de la base de donnée *Line Spectra of the Elements* de l'*Astronomical Data Center* de la NASA (lien en France <http://cdsweb.u-strasbg.fr/viz-bin/Cat?VI/16>).

Pour une présentation interactive réalisée à partir des mêmes données, il faut consulter le site de M. Noblet <http://jf-noblet.chez-alice.fr/spectres/index2.htm>.

Dernière source et non des moindres, Manuel Luque, intarissable sur tout sujet touchant à PSTricks, et sans qui cette extension n'aurait pas vu le jour.