



**HAL**  
open science

# Modèles, expérimentations et observations de la physico-chimie des atmosphères exoplanétaires

Olivia Venot

► **To cite this version:**

Olivia Venot. Modèles, expérimentations et observations de la physico-chimie des atmosphères exoplanétaires. Planétologie et astrophysique de la terre [astro-ph.EP]. Université Paris Cité, 2024. tel-04766227

**HAL Id: tel-04766227**

**<https://hal.science/tel-04766227v1>**

Submitted on 4 Nov 2024

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

# HABILITATION À DIRIGER DES RECHERCHES

## UNIVERSITÉ DE PARIS CITÉ

École Doctorale des Sciences de l'Environnement d'Ile de France n°129

Présentée et soutenue par

**Olivia VENOT**

---

**Modèles, expérimentations et observations de la physico-chimie  
des atmosphères exoplanétaires**

---

Soutenue le 21 Juin 2024

Après avis de :                      Valentine Wakelam, Directrice de recherche                      Rapporteurs  
   François Dulieu, Professeur  
   Patrice Coll, Professeur

Devant le jury composé de :

V. Wakelam	Directrice de recherche, Université de Bordeaux, LAB	Rapporteur
F. Dulieu	Professeur, Université de Cergy Paris, LERMA	Rapporteur
P. Coll	Professeur, Université Paris Cité, LISA	Rapporteur
N. Carrasco	Professeure, Univ. de Versailles Saint-Quentin-en-Yv., LATMOS	Examinatrice
A. Coustenis	Directrice de Recherche, Observatoire de Paris, LESIA	Examinatrice
J.P. Beaulieu	Directeur de Recherche, Sorbonne Université, IAP	Examinateur



## Avant-propos

Ce manuscrit a pour objectif de rassembler les principaux travaux que j'ai menés ces 10 dernières années, depuis l'obtention de mon Doctorat. Ces travaux ont été effectués pendant mon post-doctorat à l'Institut d'Astronomie (IvS) de KU Leuven (2013-2016), puis au Laboratoire Interuniversitaire des Systèmes Atmosphériques (LISA) que j'ai rejoint pour un post-doc CNES en 2016, avant d'y être affectée en tant que Chargée de Recherches CNRS en 2017.

Les activités de recherche que j'ai menées durant cette période ont eu comme principal objectif de **1) renforcer et améliorer les modèles** utilisés pour étudier la composition chimique des atmosphères (exo)planétaires, en particulier à haute température. Plus particulièrement, j'ai travaillé sur le développement de schémas chimiques robustes et fiables, validés par des expériences de combustion, permettant d'étudier les atmosphères d'exoplanètes chaudes. J'ai également développé des schémas chimiques réduits, qui ont été le levier pour aboutir au premier modèle cinétique 3D. Grâce à ce modèle 3D, mais aussi à des modèles pseudo-2D, j'ai étudié la variation de composition chimique des exoplanètes avec la longitude. Toutes les études que j'ai menées, ou auxquelles j'ai participé, sur la chimie atmosphérique montrent à quel point elle influence les observations et qu'il est important de considérer sa complexité pour interpréter les observations. J'ai ainsi participé à inclure une chimie complexe dans les modèles d'inversion de données observationnelles. Finalement, ma recherche a aussi un aspect expérimental, puisque j'étudie la dépendance thermique des sections efficaces d'absorption dans l'UV. Dans ce contexte, j'ai développé une plateforme de spectroscopie UV dans le laboratoire dans lequel je suis affecté, le LISA. Ces développements et mon expertise en chimie (exo)planétaire m'ont permis d'appliquer ces modèles à des cas particuliers afin d' **2) interpréter et de prédire des observations d'atmosphères planétaires, aussi bien celles des exoplanètes que des planètes du Système Solaire**. J'ai ainsi étudié la composition chimique de différents types d'exoplanètes, allant des super-terres aux jupiters ultra-chaudes, mais aussi de l'atmosphère d'Uranus, Neptune et Mars. **Mon travail s'inscrit dans un effort international pour comprendre les systèmes planétaires en général, ainsi que la place spéciale de notre Terre et du Système Solaire dans l'Univers**. Dans ce manuscrit, je me concentre sur les études liées aux mondes exoplanétaires et ne détaille pas les recherches qui concernent les planètes du Système Solaire.



# Table des matières

<b>Avant-propos</b>	<b>1</b>
<b>1 Introduction</b>	<b>7</b>
<b>I Comment améliorer la modélisation de la composition atmosphérique des exoplanètes ?</b>	<b>9</b>
<b>2 Développement de schémas chimiques fiables</b>	<b>11</b>
2.1 Introduction et remise en contexte . . . . .	11
2.2 Extension du schéma chimique . . . . .	12
2.3 Mises à jour du schéma . . . . .	15
2.3.1 Sous-mécanisme du Méthanol . . . . .	15
2.3.2 Revisite complète de la base CHON . . . . .	20
2.4 Perspectives et Discussions . . . . .	25
<b>3 Photochimie à haute température</b>	<b>27</b>
3.1 Introduction et mise en contexte . . . . .	27
3.2 Variation thermique de l'absorption de CO <sub>2</sub> . . . . .	28
3.3 Plateforme de spectroscopie UV . . . . .	32
3.4 Etude de la section efficace du monoxyde de carbone . . . . .	33
3.5 Etude de l'acétylène . . . . .	36
3.6 Conclusions et Perspectives . . . . .	37
<b>4 Couplage entre chimie et dynamique, du 1D au 3D</b>	<b>41</b>
4.1 Introduction et mise en contexte . . . . .	41
4.2 Développement d'un schéma réduit . . . . .	41
4.3 Modélisation pseudo-2D . . . . .	45
4.3.1 Circulation atmosphérique des jupiters chaudes . . . . .	45
4.3.2 Circulation atmosphérique des neptunes chaudes . . . . .	46
4.4 Modèle 3D . . . . .	48
4.5 Conclusions et Perspectives . . . . .	49
<b>II Interprétation et prédictions des observations</b>	<b>51</b>
<b>5 Amélioration des modèles d'inversion</b>	<b>53</b>
5.1 Introduction et mise en contexte . . . . .	53
5.2 Comment considérer la chimie dans les modèles d'inversion de données ? . . . . .	53

5.3	Conclusions et Perspectives . . . . .	57
<b>6</b>	<b>Analyses de données du Hubble Space Telescope</b>	<b>59</b>
6.1	Introduction et mise en contexte . . . . .	59
6.2	Détection d'une molécule dans l'atmosphère d'une super-terre . . . . .	59
6.3	Analyser les observations actuelles de d'exoplanètes en orbite proche . . . . .	61
6.4	Analyser la composition chimique des planètes excentriques . . . . .	63
6.5	Etudes de population . . . . .	64
6.5.1	Spectres en émission . . . . .	64
6.5.2	Spectres en transmission . . . . .	66
6.6	Conclusions et Perspectives . . . . .	67
<b>7</b>	<b>Préparation des futurs télescopes et premières données JWST</b>	<b>69</b>
7.1	Introduction et mise en contexte . . . . .	69
7.2	Déterminer des traceurs atmosphériques . . . . .	70
7.2.1	Traceurs du rapport C/O : C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> et HCN . . . . .	70
7.2.2	Les ions . . . . .	72
7.3	Identifier les biais . . . . .	74
7.4	Observations JWST . . . . .	77
7.4.1	WASP-43b . . . . .	78
7.4.2	WASP-39b . . . . .	81
<b>8</b>	<b>Conclusions et Perspectives</b>	<b>85</b>
<b>III</b>	<b>Implication dans la communauté</b>	<b>91</b>
8.1	Introduction . . . . .	93
8.2	Animation de programmes et projets . . . . .	93
8.2.1	EXACT . . . . .	93
8.2.2	Implication dans Ariel . . . . .	94
8.2.3	Organisation de Conférences, Ateliers, Ecoles . . . . .	94
8.3	Responsabilités au sein de conseils et commissions scientifiques . . . . .	94
8.3.1	Déléguée Scientifique INSU-AA . . . . .	94
8.3.2	PNP et CET . . . . .	95
8.3.3	CSAA . . . . .	95
8.3.4	SF2A . . . . .	95
8.3.5	Commission Femmes et Astronomie . . . . .	96
8.3.6	DIM Origines . . . . .	96
8.4	Au sein du LISA . . . . .	97
8.4.1	Conseil de Laboratoire . . . . .	97
8.4.2	Comité Interne des Thèses . . . . .	97
8.5	Jury et Comité de suivi de thèses . . . . .	97
8.5.1	Jury de thèse . . . . .	97
8.5.2	Comité de suivi de thèse . . . . .	97
8.6	Comité de sélection . . . . .	98
8.7	Enseignements et encadrement . . . . .	98
8.7.1	Enseignements . . . . .	98
8.7.2	Encadrement d'étudiants et jeunes chercheurs . . . . .	99

---

8.8 Autres . . . . . 101

**IV Curriculum Vitae, Liste de Publications et Diplôme de  
Doctorat 103**





# Chapitre 1

## Introduction

Une nouvelle ère en astrophysique s'est ouverte il y a presque trente ans avec la découverte des premières exoplanètes (Mayor et Queloz, 1995), bouleversant les idées que nous avons acquises sur la formation des planètes, lorsque nous ne connaissions que le Système Solaire. Depuis, plusieurs milliers de planètes ont été observées autour d'autres étoiles, entraînant une révolution comparable à celle de Copernic. Pour la première fois dans l'histoire de l'humanité, les scientifiques ont obtenu la preuve qu'une grande diversité de mondes existe en dehors du Système Solaire, avec par exemple des planètes de la taille de Jupiter orbitant très près de leur étoile hôte. Les grandes questions qui animent les scientifiques sont maintenant les suivantes : Comment ces planètes ont-elles pu se former ? Comment ont-elles évolué ? De quoi sont faites ces planètes ?

La clé pour répondre à ces questions est d'observer leur atmosphère afin de déterminer leur composition chimique. En effet, les observations spectroscopiques réalisées lors de transit ou d'éclipse (lorsque la planète passe devant ou derrière son étoile) permettent de caractériser à la fois la structure thermique et la composition chimique de l'atmosphère (Madhusudhan, 2019). Même si des progrès ont été réalisés ces dernières années, les techniques d'observation actuelles ne permettent de sonder l'atmosphère que des plus grosses exoplanètes. Orbitant près de leur étoile hôte, ces planètes appelées jupiters chaudes, neptunes chaudes, ou super-terres reçoivent un flux UV très intense au sommet de leur atmosphère ( $\sim 10\,000$  fois celui reçu au sommet de l'atmosphère de Jupiter) et ont par conséquent une température très élevée (500-3000 K). Ainsi, une chimie exotique prend place dans ces atmosphères sans équivalent dans le système solaire. Plus explicitement, l'irradiation intense dans le domaine de l'ultraviolet (UV) déclenche d'importants processus de photodissociation. En outre, la dynamique atmosphérique est très rapide, avec de forts vents horizontaux et un mélange vertical. Ces processus, appelés processus de déséquilibre, éloignent la composition de l'atmosphère de ce qui est prévu par les calculs thermo-chimiques (et initialement attendu dans des environnements à si haute température). Pour en savoir plus sur ces nouveaux mondes fascinants, plusieurs télescopes spatiaux ont été conçus, tels que le JWST (James Webb Space Telescope, lancé en décembre 2021, Gardner *et al.* 2006 et Ariel (Atmospheric Remote-sensing Infrared Exoplanet Large Survey, lancement en 2029, Tinetti *et al.* 2016, 2018, 2021). La large couverture en longueurs d'onde et la grande sensibilité des instruments embarqués à bord de ces télescopes nous permettront d'extraire beaucoup plus d'informations de leurs données que ce qui a été possible jusqu'à présent, ce qui conduira à de nombreuses percées. Cependant, ces percées ne seront possibles que si les modèles utilisés pour interpréter les observations à haute ré-

solution sont robustes et fiables. En effet, la planification, l'analyse et l'interprétation des observations spectroscopiques d'exoplanètes sont réalisées à l'aide de différents modèles atmosphériques. D'une part, les modèles cinétiques calculent la composition chimique de l'atmosphère en tenant compte des réactions chimiques et des processus de déséquilibre. D'autre part, les modèles d'inversion de données sont utilisés pour simuler le transfert radiatif atmosphérique et les spectres planétaires inversés, ce qui permet de retrouver certaines caractéristiques atmosphériques.

Avec les progrès technologiques qu'offriront ces nouveaux moyens d'observations, il est crucial que l'incertitude sur les résultats des modèles ne soit pas plus grande que la précision des observations.

Dans cette optique, les activités de recherche que j'ai menées durant ces dix dernières années ont eu comme principal objectif de **1) renforcer et améliorer les modèles** utilisés pour étudier la composition chimique des atmosphères exoplanétaires, en particulier à haute température. Ces développements et mon expertise en chimie exoplanétaire m'ont permis d'appliquer ces modèles à des cas particuliers afin d' **2) interpréter et de prédire des observations d'atmosphères d'exoplanètes.**

Ces deux grands axes constituent les deux premières parties de ce manuscrit où j'expose mes travaux de recherche. Dans la Partie I, je présente les études ayant pour but d'améliorer les modèles atmosphériques, que ce soit par le développement de schémas chimiques, la mesure de données physico-chimiques, ou bien l'amélioration des modèles. Ensuite, dans la Partie II, je présente les études liées à la préparation et à l'analyse des observations, que ce soit avec les télescopes Hubble, Spitzer, JWST ou Ariel.

Dans la partie III, j'expose mon implication dans la communauté, et finalement la partie IV contient mon Curriculum Vitae, la liste de mes publications et mon diplôme de doctorat.

## Première partie

**Comment améliorer la modélisation  
de la composition atmosphérique des  
exoplanètes ?**



# Chapitre 2

## Développement de schémas chimiques fiables

### 2.1 Introduction et remise en contexte

Les premiers modèles de cinétique chimique développés dans la communauté de planétologie l'ont été pour les planètes et satellites du Système Solaire et avaient pour but de reproduire les observations des satellites, afin de comprendre les processus chimiques à l'oeuvre dans ces atmosphères (e.g. Mueller, 1964; Strobel, 1969, 1974; Strobel *et al.*, 1990; Yung *et al.*, 1977; Pollack *et al.*, 1987; Romani et Atreya, 1988; Romani *et al.*, 1993; Toubanc *et al.*, 1995; Ollivier *et al.*, 2000; Dobrijevic *et al.*, 2003). La proximité de ces objets et les moyens d'observations permettent d'obtenir des mesures à des niveaux précis d'altitude et même des mesures de la variation avec l'altitude et la longitude (e.g. Vinatier *et al.*, 2007; Guerlet *et al.*, 2009). L'accord entre les profils d'abondances atmosphériques mesurés et simulés fournissent alors une « validation » du schéma chimique créé pour étudier une atmosphère planétaire. Dit autrement, les observations sont fiables et permettent de contraindre les modèles développés pour interpréter les observations. La problématique rencontrée avec les planètes extrasolaires est différente, puisque la précision des observations est beaucoup moins bonne. Les spectres de transit planétaire permettent de caractériser les atmosphères (température, rayon, masse, composition ...) mais les informations retrouvées par les méthodes d'inversion de données, notamment les abondances, ont une incertitude très importantes (Rocchetto *et al.*, 2016; Batalha *et al.*, 2019; Changeat *et al.*, 2019, 2020b). Contrairement au cas du Système Solaire, les modèles cinétiques sont en fait plus précis que les observations et ne peuvent donc pas être contraints par des données à reproduire. Ce sont eux qui permettent d'interpréter les observations. Aussi, pour une interprétation correcte des observations, il est indispensable que les modèles cinétiques soient fiables et robustes. Les premiers modèles d'exoplanètes chaudes se sont basés sur des modèles des planètes géantes du Système Solaire, auxquelles des réactions endothermiques (i.e. se déroulant typiquement à haute température) ont été prises en compte : soit elles ont été ajoutées, soit les réactions exothermiques, déjà présentes dans ces schémas chimiques d'atmosphères « froides » ont été reversées pour prendre en compte les deux sens de la réaction (e.g. Zahnle *et al.*, 2009; Moses *et al.*, 2011; Koppa-rapu *et al.*, 2012). Ces schémas chimiques, créés en cumulant les réactions les unes aux autres, semblent adaptés puisqu'ils considèrent des réactions à haute température, mais n'ont souvent aucun point de comparaison avec des données observationnelles ou expéri-

mentales.

L'approche que j'ai décidé d'avoir est différente. Puisqu'il n'est pas possible d'obtenir de façon conjointe des données observationnelles précises sur la pression, la température et l'abondance des molécules, il m'a semblé indispensable de valider les schémas chimiques par des données expérimentales réalisées dans des conditions les plus proches possibles des atmosphères exoplanétaires. Durant ma thèse, je me suis donc rapprochée d'experts dans le domaine de la combustion, au Laboratoire Réactions et Génie des Procédés (LRGP) à Nancy. Nous avons développé ensemble un schéma chimique validé par comparaison à des expériences de combustion, à haute température et haute pression (Venot *et al.*, 2012). En effet, les gammes de températures et pressions, ainsi que les molécules en jeu dans ce domaine sont similaires aux conditions rencontrées dans les atmosphères d'exoplanètes. Cette collaboration interdisciplinaire inédite dans le domaine de la planétologie a ainsi permis de développer un schéma chimique fiable et validé pour l'étude des exoplanètes chaudes. Ce schéma, constitué de 105 espèces et 960 réactions (+ les 960 réactions inverses) est conçu pour les éléments C,H,O,N. C'est un schéma C<sub>0</sub>-C<sub>2</sub>, c'est-à-dire capable de décrire la chimie des espèces ayant jusqu'à 2 atomes de carbone. A ces ~ 2000 réactions, une liste de 34 photodissociations a été ajoutée afin de prendre en compte les processus de photochimie liée à l'irradiation stellaire. Comme nous allons le présenter par la suite, une partie importante des travaux que j'ai menés depuis a consisté à développer et améliorer ce schéma initial.

Il est fondamental que ces développements de base sur la chimie puissent être accessibles à l'ensemble de la communauté. Pour cette raison, tous les schémas que j'ai développés (et que je développerai) sont (et seront) accessibles sur la base de données KIDA : Kinetic Database for Astrochemistry<sup>1</sup> (Wakelam *et al.*, 2012) ainsi que sur le site web de mon ANR EXACT<sup>2</sup>.

## 2.2 Extension du schéma chimique

L'existence d'exoplanètes riches en carbone a été suggérée pour la première fois par Madhusudhan *et al.* (2011) qui a analysé les spectres Spitzer de WASP-12b. Néanmoins, un rapport C/O  $\geq 1$  dans l'atmosphère de cette planète est assez controversé. Plusieurs études ont déterminé que l'atmosphère de WASP-12b pourrait soit avoir un rapport C/O solaire (0,54), soit être riche en C (e.g. Crossfield *et al.*, 2012; Swain *et al.*, 2013; Mandell *et al.*, 2013; Stevenson *et al.*, 2014a; Madhusudhan *et al.*, 2014). Pour conclure clairement sur la composition de cette planète, de nombreuses observations de haute précision ont été effectuées depuis le sol et depuis l'espace (López-Morales *et al.*, 2010; Campo *et al.*, 2011; Croll *et al.*, 2010; Zhao *et al.*, 2011; Cowan *et al.*, 2012; Crossfield *et al.*, 2012; Swain *et al.*, 2013; Föhning *et al.*, 2013), mais les résultats des analyses effectuées ne sont pas similaires (Line *et al.*, 2014; Stevenson *et al.*, 2014a; Oreshenko *et al.*, 2017). Les récents travaux de Himes et Harrington (2022) suggèrent que les différences entre ces analyses, qui utilisent les mêmes jeux de données, sont dues en réalité à l'utilisation de différents pipelines de réduction. Pour cette planète en particulier, la récente arrivée du JWST devrait permettre de lever les mystères qui demeurent encore concernant sa composition atmosphérique.

---

1. <https://kida.astrochem-tools.org/>

2. <https://www.anr-exact.cnrs.fr/fr/chemical-schemes/>

Quoi qu'il en soit, d'autres études (i.e. Madhusudhan 2012; Moses *et al.* 2013) ont étudié l'influence du rapport C/O sur la composition chimique des atmosphères de jupiters chaudes. Il a été constaté que les modèles avec un rapport C/O  $\sim 1$  concordent avec les spectres observés de WASP-12b, XO-1b et CoRoT-2b, ce qui indique qu'une grande variété de rapports C/O pourrait être effectivement possible dans les atmosphères des exoplanètes.

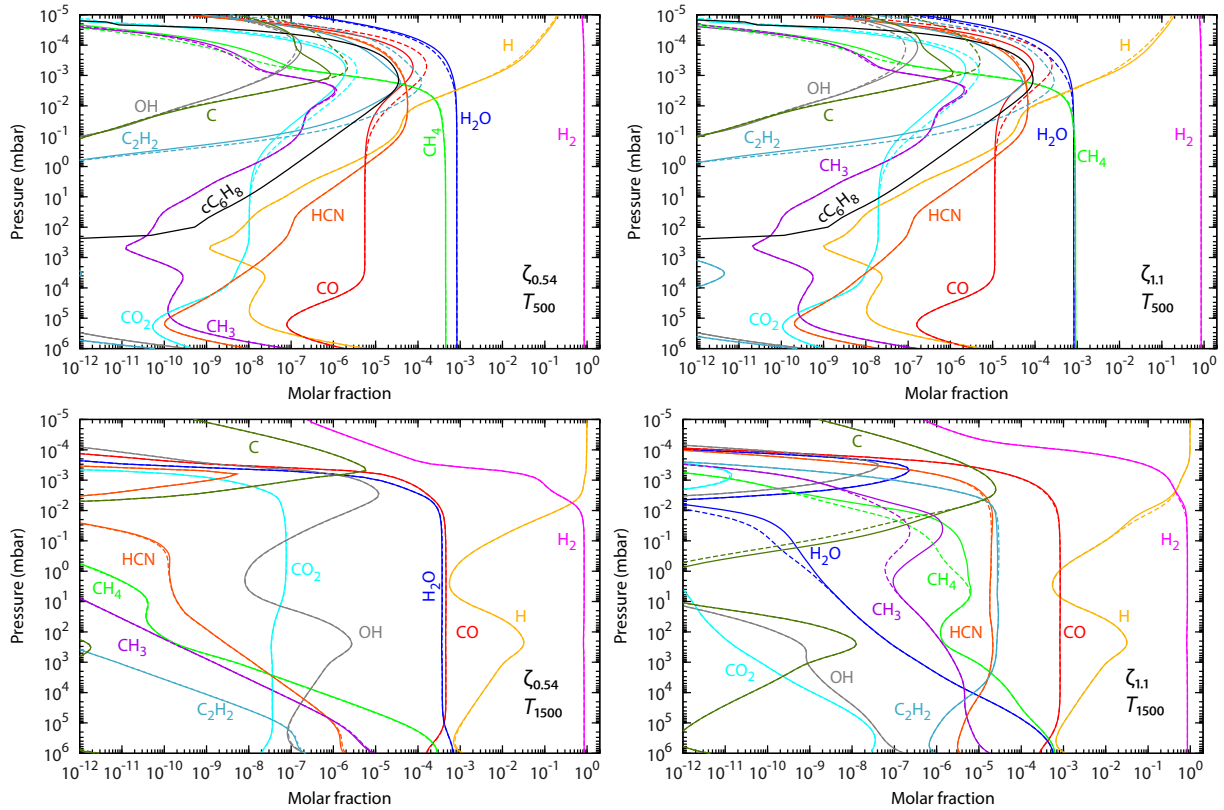
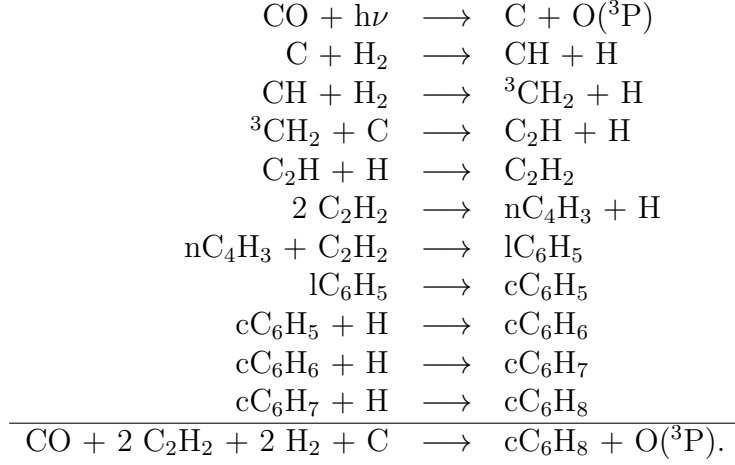
Pour étudier la composition chimique des atmosphères riches en carbone, les modèles cinétiques doivent utiliser des schémas chimiques adaptés à cet enrichissement en carbone. Lorsque le rapport C/O augmente, des espèces carbonées plus complexes sont produites. Ainsi, on s'attend à ce que les atmosphères riches en carbone contiennent des hydrocarbures lourds avec des abondances significatives qui doivent être incluses dans le schéma chimique utilisé dans la modélisation. La plupart des schémas chimiques (principalement construits pour étudier les atmosphères avec des abondances solaires) ne contiennent pas ces espèces complexes et peuvent donc donner des résultats biaisés. Koppapapu *et al.* (2012) a étudié l'atmosphère de WASP-12b avec deux rapports C/O différents (solaire et deux  $\times$  solaire), mais son schéma chimique ne contenait que 31 molécules, l'hydrocarbure le plus lourd étant l'acétylène ( $C_2H_2$ ). Ainsi, l'abondance de certains hydrocarbures peut être sur- ou sous-estimée parce que les molécules les plus lourdes sont absentes du schéma chimique. Une autre étude (Moses *et al.*, 2013) a utilisé un schéma chimique plus complexe (90 espèces), qui s'étend jusqu'à  $C_6H_6$ , ce qui permet de décrire les hydrocarbures les plus importants. Cependant, aucune de ces études ne discute de la validité et de la robustesse des schémas chimiques.

Afin d'avoir un schéma fiable pour l'étude des atmosphères chaudes et riches en carbone, j'ai décidé d'étendre le schéma chimique présenté dans Venot *et al.* (2012), aux espèces ayant jusqu'à six atomes de carbone. Pour cela, nous avons employé la même méthodologie que pour le schéma  $C_0$ - $C_2$ , à savoir la comparaison à diverses expériences de combustion sur une large gamme de pressions et températures ([300 – 2500] K et [0.01 – 100] bar), ce qui lui confère une très bonne fiabilité. Ce schéma  $C_0$ - $C_6$ , présenté dans Venot *et al.* (2015), contient 240 espèces impliquées dans 2001 réactions (et leur 2001 réactions inverses). A celui-ci, une liste de 113 photodissociations a été ajoutée.

Afin de déterminer l'impact de ce développement sur les résultats des modèles atmosphériques, et donc pour quel type d'études l'utilisation de ce schéma chimique étendu est obligatoire, nous avons créé une grille de 12 modèles pour explorer différents profils thermiques et rapports C/O. Pour chacun d'entre eux, nous avons comparé la composition chimique déterminée avec le schéma chimique  $C_0$ - $C_2$  et avec le schéma  $C_0$ - $C_6$ . Nous avons également calculé des spectres synthétiques correspondant à ces 12 modèles. De façon intéressante, nous n'avons trouvé aucune différence dans les résultats obtenus avec les deux schémas lorsque les photolyses sont exclues du modèle, quelle que soit la température de l'atmosphère. En revanche, des différences peuvent apparaître en haute atmosphère ( $P > \sim 1$ -10 mbar) lorsqu'il y a de la photochimie. Ces différences se retrouvent pour tous les profils pression-température testés si le rapport C/O est supérieur à 1, comme nous pouvons le voir sur la Fig. 2.1 (les résultats pour les profils thermiques les plus extrêmes seulement sont présentés ici). Lorsque le rapport C/O de l'atmosphère est solaire, les différences ne sont trouvées que pour des températures inférieures à 1000 K. Une analyse des réactions majoritaires dans chacun des modèles nous a permis de déterminer que la raison principale pour ces différences est liée à  $C_2H_2$ . Cette espèce est impliquée dans des schémas réactionnels avec des hydrocarbures lourds présents uniquement dans le schéma



$C_0$ - $C_6$ , d'où les différences obtenues entre les deux schémas. Par exemple, dans le cas d'atmosphères à 500 K, nous avons déterminé la voie de formation suivante, initiée par la photochimie de CO, possible uniquement avec le schéma  $C_0$ - $C_6$  :



**Figure 2.1** – Profils verticaux d’abondance pour les profils thermiques froid (en haut) et chaud (en bas), avec un rapport C/O solaire (à gauche) et C/O=1,1 (à droite). Les compositions chimiques sont calculées avec le schéma  $C_0$ - $C_2$  (ligne pointillée) et le schéma  $C_0$ - $C_6$  (ligne pleine), avec photodissociation. Issu de Venot *et al.* (2015).

Afin de quantifier l’impact sur l’interprétation des observations, nous avons calculé les spectres synthétiques avec le code de transfert radiatif décrit dans Agúndez *et al.* (2014a). Par rapport à cette étude incluant les opacités de  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$  (Rothman *et al.*, 2010) (HITEMP),  $\text{CH}_4$ ,  $\text{NH}_3$  et  $\text{HCN}$  (Rothman *et al.*, 2009) (HITRAN), celles de  $\text{C}_2\text{H}_2$ ,  $\text{C}_2\text{H}_4$ ,

et  $C_2H_6$  compilées avec HITRAN2012 (Rothman *et al.*, 2013) ont été ajoutées car ces hydrocarbures peuvent potentiellement être abondants dans certaines atmosphères riches en carbone. Cependant, dans les différents modèles testés dans cette étude,  $C_2H_4$  et  $C_2H_6$  ne sont pas suffisamment abondants (toujours inférieurs à  $10^{-6}$ ) pour impacter les spectres synthétiques.

Comme on peut le voir sur la Figure 2.2, nous avons observé que pour le cas d’atmosphère froide, il n’y a presque aucune différence entre les spectres (transmission et émission) des deux différents rapports C/O, alors que pour les profils plus chauds, les spectres sont clairement différents selon le rapport C/O de l’atmosphère. Pour les cas C/O solaire, les spectres sont dominés par l’absorption de  $H_2O$  pour les deux cas les plus chauds et par l’eau et le méthane pour le profil  $T_{500}$ . Pour les cas riches en C, les spectres sont dominés par la collision  $H_2-H_2$ , avec des contributions d’autres espèces, telles que  $C_2H_2$ , HCN, et  $CH_4$ . Dans une étude complémentaire (Rocchetto *et al.*, 2016), dans laquelle nous avons exploré une grille plus fine de C/O, nous avons déterminé que cette transition quand à la forme du spectre arrivait de façon brutale autour de la valeur C/O = 1, dans le cas d’une métallicité solaire.

La Figure 2.2, nous montre que les différences liées à l’utilisation de différents schémas chimiques n’ont finalement pas de forte influence sur les spectres synthétiques.

Comme nous reviendrons dessus dans la Section 7.2.1, cette étude, nous a permis de confirmer que  $C_2H_2$  et HCN sont des traceurs possibles d’atmosphères chaudes riches en carbone (Madhusudhan, 2012), grâce à leurs pics à 7,4, 7,7, 13,6, 13,9, et 14,2  $\mu m$ , respectivement, visibles lorsque C/O = 1,1.

Au vu des résultats obtenus dans cette étude comparative, nous avons pu émettre des conseils quand à l’utilisation du schéma chimique  $C_0-C_6$  (au lieu du  $C_0-C_2$ ) :

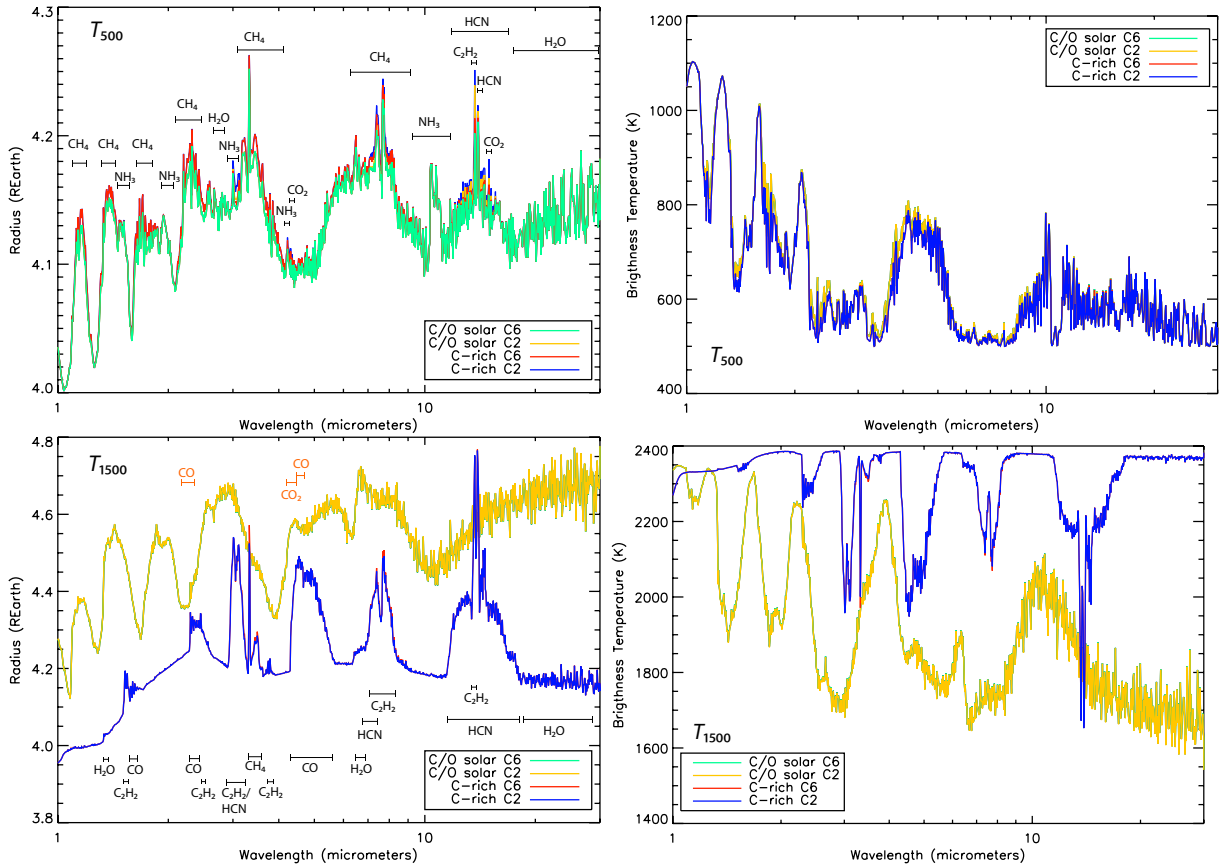
- Dans les atmosphères chaudes ( $T \geq 1000K$ ) avec des rapports C/O solaires, le schéma  $C_0-C_2$  est suffisant.
- Dans les atmosphères plus froides (quel que soit le rapport C/O) ou chaudes avec un rapport C/O supérieur à 1, le choix du schéma chimique dépend de l’objectif de l’étude. Si l’objectif est de calculer des spectres synthétiques, alors l’utilisation du schéma  $C_0-C_2$  est un choix raisonnable car le temps de calcul sera plus court. Mais si la composition chimique doit être étudiée en détail et si les voies chimiques qui se produisent dans l’atmosphère doivent être comprises, il est conseillé d’utiliser le schéma  $C_0-C_6$ , plus complet.

## 2.3 Mises à jour du schéma

Un schéma chimique est voué à être perfectionné au fur et à mesure que de nouvelles données cinétiques sont disponibles. Il est donc important de veiller à ce que les schémas utilisés soit mis à jour régulièrement. Depuis la parution du schéma  $C_0-C_2$  dans Venot *et al.* (2012), celui-ci a subi deux mises à jour importantes.

### 2.3.1 Sous-mécanisme du Méthanol

Lors d’une étude comparant les deux principaux schémas chimiques développés (à l’époque) pour étudier les atmosphères d’exoplanètes chaudes (Venot *et al.* 2012 et Moses *et al.* 2011), Moses (2014) a trouvé des différences dans la chimie des espèces oxygénées, entraînant des divergences importantes dans les abondances de certaines espèces clés (et



**Figure 2.2** – Spectres synthétiques en transmission (gauche) et en émission (droite) correspondant aux deux profils thermiques  $T_{500}$  (haut) et  $T_{1500}$  (bas). Les spectres en transmission sont représentés par leur rayon apparent, alors que les spectres en émission le sont par leur température de brillance (K). Pour chaque profil thermique, les spectres ont été calculés pour les compositions atmosphériques trouvées en utilisant les schémas  $C_0$ - $C_2$  et  $C_0$ - $C_6$  pour les cas  $C/O =$  solaire et  $C/O = 1.1$ , comme indiqué sur chaque figure. Pour les spectres en transmission, les principales caractéristiques moléculaires sont indiquées. Pour le cas  $T_{1500}$ , les caractéristiques des spectres solaires  $C/O$  sont représentées en orange et celles des spectres riches en C en noir. Issu de Venot *et al.* (2015).

observables), comme le monoxyde de carbone (CO), ce qui a été confirmé ultérieurement par Wang *et al.* (2016). Ces différences peuvent avoir des conséquences sur l'interprétation des observations d'exoplanètes et sur notre compréhension de leurs atmosphères, mais aussi pour les planètes géantes du Système Solaire. La composition interne de ces dernières, en particulier l'abondance de l'eau qui est condensée dans les zones observables donc non mesurable, peut être déterminée grâce aux mesures de CO dans la stratosphère. En effet, l'abondance observée de CO est due au quenching<sup>3</sup> et provient donc des couches profondes de la troposphère, là où  $H_2O$  et CO sont en équilibre thermodynamique (Cavalié *et al.*, 2014, 2017; Mousis *et al.*, 2014).

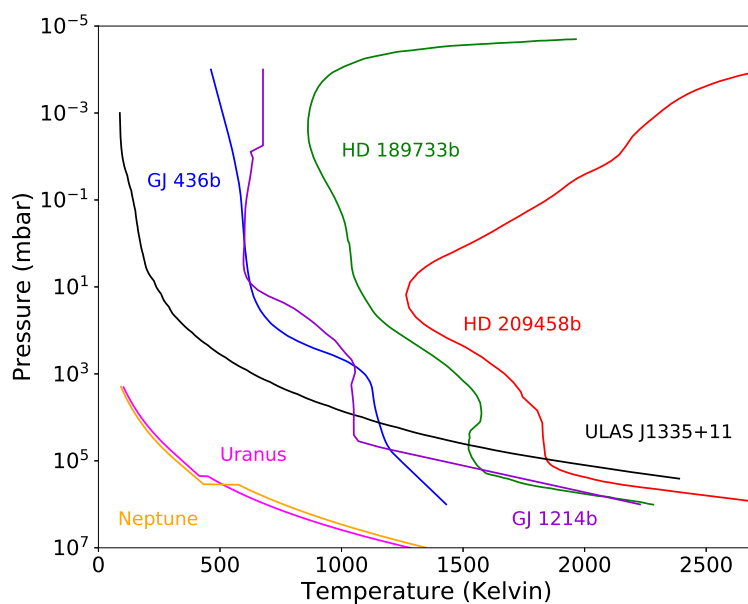
Moses (2014) a identifié la chimie du méthanol ( $CH_3OH$ ) comme étant à l'origine des différences entre les deux schémas, en particulier la réaction entre le méthanol et le radical hydrogène donnant lieu au radical méthyle et à l'eau ( $CH_3OH + H \rightleftharpoons CH_3 + H_2O$ ).

3. Phénomène arrivant lorsque le temps caractéristique dynamique devient plus court que le temps caractéristique chimique. L'abondance des espèces est gelée, et ces espèces sont transportées à plus hautes altitudes en gardant la même abondance. Les espèces s'écartent alors des abondances prédites par l'équilibre thermochimique.

Les données cinétiques de cette réaction, initialement proposée par Hidaka *et al.* (1989), sont sujet à controverses, avec parfois plusieurs ordres de grandeurs d'écart selon les modèles. Motivés par cette étude, nous avons décidé de réévaluer la chimie du  $\text{CH}_3\text{OH}$  utilisée dans le schéma  $\text{C}_0\text{-C}_2$  de Venot *et al.* (2012) (provenant principalement du travail de Barbe *et al.* 1995) et de la mettre à jour grâce aux dernières publications dans le domaine de la combustion. Un important travail de revue nous a permis d'identifier et de sélectionner le modèle chimique construit par Burke *et al.* (2016) sur la chimie du méthanol, qui a été validé spécifiquement par rapport à des données expérimentales sur la combustion de cette espèce. Il est intéressant de souligner que la réaction controversée de Hidaka *et al.* (1989),  $\text{CH}_3\text{OH} + \text{H} \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O}$ , n'est plus explicitement présente dans ce schéma. L'élimination de  $\text{CH}_3\text{OH}$  existe toujours et peut éventuellement conduire à la formation de  $\text{CH}_3$  et de  $\text{H}_2\text{O}$ , mais par d'autres voies de destruction.

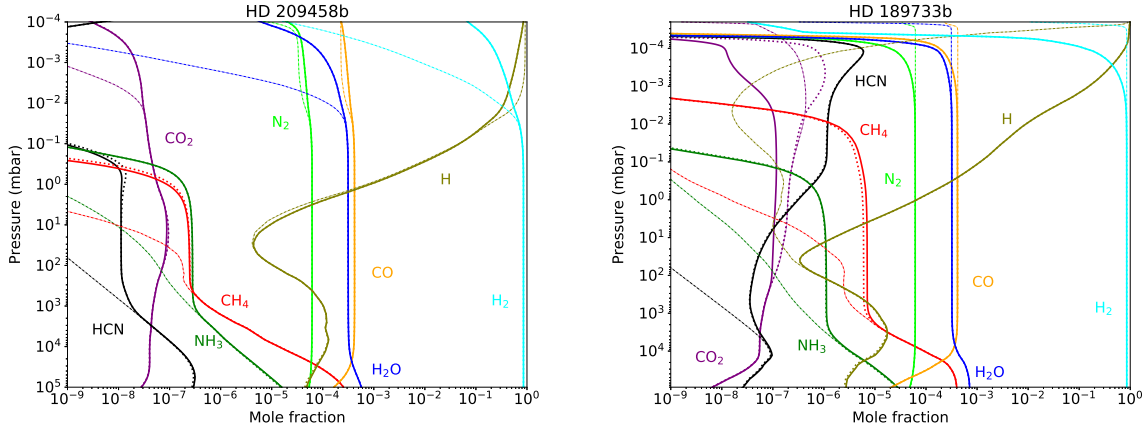
La schéma développé dans Venot *et al.* (2020a) est lui aussi fait pour les espèces en  $\text{C}_2$  et contient 108 espèces et 1906 réactions (948 réactions réversibles et 10 irréversibles), auxquelles ont été ajoutées 55 photodissociations.

Nous avons évalué l'impact de cette mise à jour du schéma en modélisant la composition atmosphérique de différentes planètes avec les schémas Venot *et al.* (2012) et Venot *et al.* (2020a), puis en comparant les résultats obtenus. Nous avons étudié des cas assez variés en terme de température atmosphérique, allant des jupiters chaudes (HD 209458b, HD 189733b) aux géantes glacées du Système Solaire (Uranus, Neptune), en passant par les neptunes chaudes (GJ 436b et GJ 1214b) et les naines brunes (ULAS J1335+11) (Fig. 2.3). En accord avec les modèles/observations actuels (Welbanks *et al.*, 2019; Changeat *et al.*, 2022; Edwards *et al.*, 2022), nous avons supposé une métallicité solaire pour les deux jupiters chaudes, alors que pour les neptunes chaudes, nous avons également explorés des métallicités plus élevées, i.e.  $100\times$  solaire.

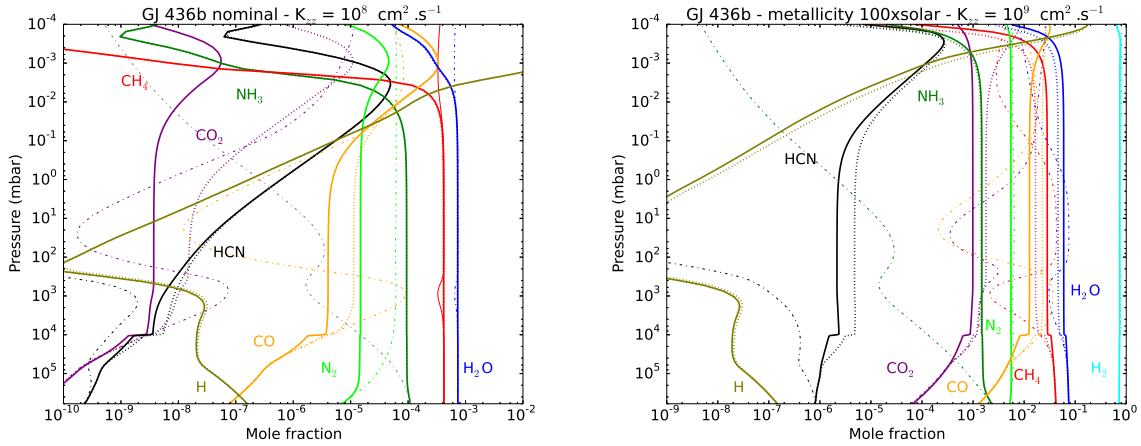


**Figure 2.3** – Profils thermique adoptés dans l'étude de Venot *et al.* (2020a).

Comme on peut le voir sur les Figures 2.4, 2.5 et 2.6, nous avons déterminé que l'effet



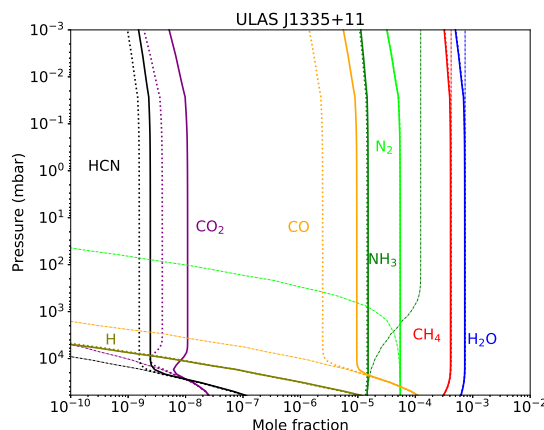
**Figure 2.4** – Profils verticaux d’abondances pour les principaux composés de l’atmosphère des deux jupiters chaudes HD 209458b et HD 189733b. Les abondances obtenues avec le schéma chimique mis à jour de Venot *et al.* (2020a) (traits plein) sont comparés avec ceux obtenus avec le schéma Venot *et al.* (2012) (pointillés). L’équilibre thermochimique est également représenté (tirets-pointillés). Issu de Venot *et al.* (2020a).



**Figure 2.5** – Similaire à la Figure 2.4 pour GJ 436b avec une métallicité solaire et  $K_{zz}=10^8\text{cm}^2\text{s}^{-1}$  (gauche) et avec une métallicité 100 x solaire et  $K_{zz}=10^9\text{cm}^2\text{s}^{-1}$  (droite). Avec le nouveau schéma, l’abondance de CO diminue. Issu de Venot *et al.* (2020a).

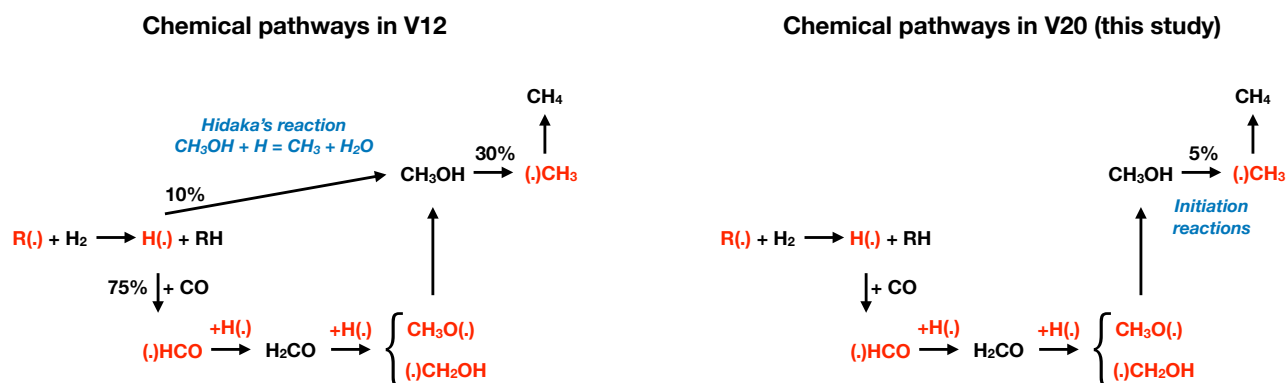
de la mise à jour dépend de la température du niveau de quenching, ainsi que de la forme des profils d’abondance. D’une part, si le quenching se produit à une température supérieure à  $\sim 1500$  K et à une pression assez basse (0.1–1 bar, typiquement ce qui se passe dans les atmosphères des jupiters chaudes testées ici), aucun changement significatif ne se produit. Par contre, si le quenching se produit à une température plus basse mais à une pression plus élevée ( $>10$  bars, comme dans les neptunes chaudes étudiés ici), alors le niveau de quenching est modifié, affectant par conséquent les abondances moléculaires dans les couches supérieures. Dans tous les cas que nous avons testés, nous observons un niveau de quenching plus profond avec le schéma Venot *et al.* (2020a) mis à jour. La façon dont les abondances moléculaires sont affectées par la mise à jour dépend de la pente des profils au niveau du quenching maintenant plus profond : si l’abondance augmente avec l’altitude, l’abondance sera diminuée (par exemple CO et  $\text{CO}_2$  dans GJ 436b) ; et

si l'abondance diminue avec l'altitude, l'abondance sera augmentée (CO dans Uranus, Neptune, et ULAS J1335+11).



**Figure 2.6** – Similaire à la Figure 2.4 pour la naine brune ULAS J1335+11. Issu de Venot *et al.* (2020a).

Nous avons fait une analyse des chemins réactionnels principaux dans les différents modèles et avons déterminé que la clé pour expliquer nos résultats est le taux de production de l'hydrogène. D'un côté, dans un domaine P-T où le taux de production de H est positif (par exemple 10 bars et 1150K, niveau de quenching de CO dans GJ 436b), la réaction de Hidaka *et al.* (1989) jouera un rôle majeur dans le schéma Venot *et al.* (2012) et il y aura donc des différences entre les deux schémas, puisque cette réaction n'est pas présente dans le schéma Venot *et al.* (2020a). Une illustration des voies réactionnelles contrôlant la conversion  $H \leftrightarrow CH_4$  dans ce domaine P-T dans les deux schémas chimiques est représenté Figure 2.7. D'autre part, dans un domaine P-T où le taux de perte de H est positif (0.4 bar et 1500K, niveau de quenching de  $CH_4$  dans HD 209458b), alors la réaction de Hidaka *et al.* (1989) ne joue pas son rôle d'accélérateur de taux dans le schéma Venot *et al.* (2012) et donc les résultats obtenus avec les deux schémas seront très similaires.

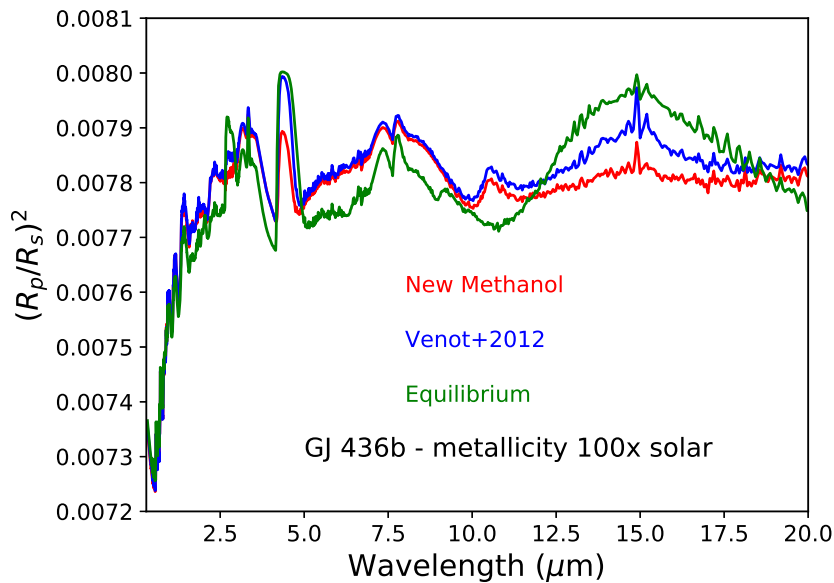


**Figure 2.7** – Chemins réactionnels contrôlant la conversion  $H \leftrightarrow CH_4$  dans le schéma chimique de Venot *et al.* (2012) (à gauche) et dans le schéma de Venot *et al.* (2020a) (à droite) à 10 bars et 1150K. Issu de Venot *et al.* (2020a).

Le changement de composition chimique engendré par la mise à jour du schéma chimique peut avoir des conséquences sur les observables, comme le montre la Figure 2.8 pour le cas de GJ 436b, avec une métallicité  $100 \times$  solaire. Avec le modèle de transfert radiatif TauREx (Waldmann *et al.*, 2015b,a), nous avons calculé les spectres synthétiques en transmission correspondant aux compositions atmosphériques calculées avec deux schémas chimiques, ainsi qu'à l'équilibre thermochimique. On observe bien entendu des variations importantes entre les spectres de déséquilibre et celui à l'équilibre entre  $1\text{--}10 \mu\text{m}$  et dans la bande  $\text{NH}_3$  ( $11 \mu\text{m}$ ), qui sont dues à la forte abondance de  $\text{NH}_3$  dans les modèles de déséquilibre, ainsi que dans la bande  $\text{CO}_2$  ( $15 \mu\text{m}$ ). Nous pouvons nous attendre à ce que les futures observations à haute résolution de neptunes chaudes telles que GJ 436b puissent être capables de détecter la possible composition de déséquilibre de ces planètes, même si elles sont nuageuses (Kawashima *et al.*, 2019), ce qui aideraient certainement à contraindre l'intensité du mélange vertical. Mais au delà des différences avec la composition à l'équilibre thermochimique, il est intéressant de voir qu'entre les deux spectres de déséquilibre chimique, des variations importantes sont visibles dans les bandes d'absorption du  $\text{CO}_2$  ( $4\text{--}5 \mu\text{m}$ ,  $15 \mu\text{m}$ ). Comme cette espèce est moins abondante avec le schéma Venot *et al.* (2020a), l'absorption est plus faible dans ces bandes, ce qui se traduit par un  $(R_p/R_s)^2$  plus faible. Un tel écart (jusqu'à 100 ppm) devrait être facilement observable avec les instruments tels que JWST/MIRI. Cette figure prouve bien l'importance d'un schéma chimique fiable, puisque le choix de celui-ci est critique pour une interprétation correcte des observations et par conséquent une contrainte précise sur le mélange vertical. De façon similaire à ce qu'on trouve pour GJ 436b, des variations importantes sont également observées dans le spectre en émission de la Naine Brune ULAS J1335+11 (Fig. 12 de Venot *et al.* 2020a), en particulier dans la fenêtre autour de  $4,7 \mu\text{m}$ , car le CO est un fort absorbeur à ces longueurs d'onde (diminution d'un facteur 2 du flux en raison de l'augmentation de l'abondance du CO avec le nouveau schéma). Une telle différence sera mesurable avec l'instrument JWST/NIRSpec, ce qui permettra de mieux caractériser la force du mélange vertical qui est nécessaire pour reproduire l'abondance hors équilibre du CO dans les naines brunes froides.

### 2.3.2 Revisite complète de la base CHON

La collaboration que j'ai établie avec le LRGP pendant ma thèse et que j'ai développée par la suite, a pris récemment une ampleur plus importante. Dans le cadre de l'ANR JCJC 'EXACT' (ANR-21-CE49-0008-01, 2022-2026) que j'ai obtenue, je partage la direction de la thèse de Roméo Veillet avec Baptiste Sirjean (LRPG) pour le développement d'un schéma chimique incluant plus d'éléments chimiques (voir Paragraphe 2.4). Roméo, dont j'assume la direction principale, passe la première moitié de sa thèse au LRGP, afin de développer le schéma chimique avec la méthodologie qui fait le socle de mes travaux : la comparaison à des données expérimentales de combustion. Dans ce contexte, nous avons entamé une revisite totale du schéma chimique Venot *et al.* (2020a), en comparant les 7 modèles généraux issus du domaine de la combustion. Nous avons comparé les prédictions de ces modèles sur plus de 1600 points expérimentaux. Les données expérimentales utilisées ont été choisies pour couvrir une gamme de conditions aussi large que possible, incluant des points issus de la combustion et de la pyrolyse d'hydrocarbures, d'alcools et de HCN, à basse et haute pression, avec des études de dépendance en température et dans des conditions initiales contenant d'autres espèces comme CO,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{NH}_3$  ou NO.



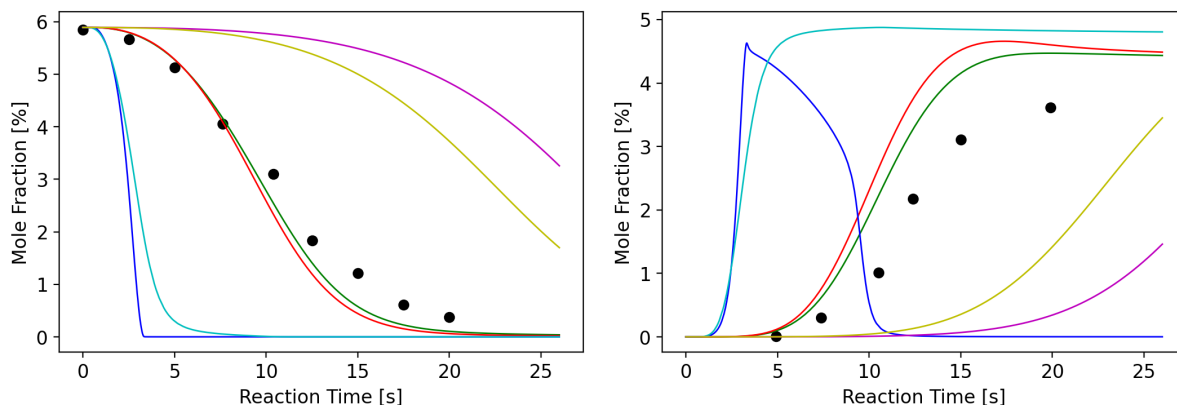
**Figure 2.8** – Spectres synthétiques en transmission de l’atmosphère de GJ 436b avec une métallicité de  $100\times$  solaire. Les différents spectres correspondent aux compositions à l’équilibre thermochimique (vert), et aux compositions en déséquilibre chimique ( $K_{zz}=10^9 \text{ cm}^2\text{s}^{-1}$ ) calculées avec le schéma de Venot *et al.* (2012) (bleu), et avec le schéma Venot *et al.* (2020a) (rouge). Le pouvoir de résolution spectrale est de 300. Issu de Venot *et al.* (2020a).

Les données expérimentales utilisées pour la comparaison comprennent : l’évolution de l’abondance des produits et des intermédiaires de combustion en fonction du temps ou de la température ainsi que les délais d’auto-inflammation. Les conditions expérimentales sont simulées grâce au logiciel de cinétique chimique ChemkinPro (Kee *et al.*, 2006) avec les différents réseaux chimiques.

Parmi les nombreuses expériences que l’on a considérées dans cette nouvelle étude, on peut s’intéresser dans ce manuscrit à un cas précis : l’étude de l’oxydation du méthanol. Nous avons repris les points expérimentaux de Cathonnet *et al.* (1982), qui mesurent l’évolution des abondances de  $\text{CH}_3\text{OH}$  et  $\text{CO}$  pendant l’expérience, se déroulant à 823 K et 0,26 bar. Le mélange initial de gaz contient 5,89% de  $\text{CH}_3\text{OH}$ , 8,84%  $\text{O}_2$  et le reste est du  $\text{N}_2$ . La gamme d’abondances prédites par les différents schémas chimiques testés dans Veillet *et al.* (2023) est assez large (Figure 2.9). On peut notamment voir que le schéma Venot *et al.* (2020a) (en bleu ciel) est moins bon pour reproduire les données expérimentales, alors que d’autres schémas chimiques testés (ici le ‘Burke 2016’ ou ‘NUIGMech1.1’) sont bien meilleurs.

Les nombreuses comparaisons effectuées entre modèles et expériences ainsi que l’analyse statistique des écarts obtenus (voir Veillet *et al.* 2023) nous ont permis de déterminer les meilleurs modèles pour les hydrocarbures et pour les espèces azotées. Nous avons combiné différents modèles pour développer un nouveau schéma inédit, dont la fiabilité a été testée sur une grande variété de conditions. Ce nouveau schéma n’est pas qu’une simple combinaison de modèles existants, puisqu’une analyse des voies réactionnelles nous a permis de déceler et corriger quelques approximations, sans conséquence dans le cadre d’étude en combustion mais pouvant engendrer des erreurs dans un contexte différent, comme celui de l’étude des atmosphères planétaires. Par exemple, dans le modèle de Glarborg *et al.* (2018), l’ammoniac peut réagir avec le méthylidyne pour donner directe-





**Figure 2.9** – Evolution temporelle de l’abondance de CH<sub>3</sub>OH (à gauche) et CO (à droite) dans les conditions expérimentales de Cathonnet *et al.* (1982) avec différent schémas chimiques testés dans Veillet *et al.* (2023) : ‘Burke 2016’ (vert), ‘NUIGMech1.1’ (rouge), ‘Konnov 2005’ (bleu foncé), ‘Venot 2020’ (bleu ciel), ‘Exgas 2014’ (magenta), ‘Garborg 2018’ (jaune). Issu de Veillet *et al.* (2023).

ment deux atomes d’hydrogène et du méthylène amidogène, grâce à la réaction globalisée :  $\text{CH} + \text{NH}_3 \rightarrow \text{H}_2\text{CN} + \text{H} + \text{H}$ . Cette réaction est reversée dans le schéma de Glarborg *et al.* (2018), donnant lieu à la réaction inverse  $\text{H}_2\text{CN} + \text{H} + \text{H} \rightarrow \text{NH}_3 + \text{CH}$ . Il est évident que cette réaction à trois corps est très peu probable et ne devrait pas exister dans un modèle chimique. On comprend qu’avoir omis les étapes intermédiaires (qui sont normalement  $\text{CH} + \text{NH}_3 \rightarrow \text{CH}_2\text{NH} + \text{H}$ , suivi de  $\text{CH}_2\text{NH} \rightarrow \text{H}_2\text{CN} + \text{H}$ ) et autorisé la réaction inverse à trois corps dans le modèle de Glarborg *et al.* (2018) n’est pas problématique pour l’étude des expériences de combustion, puisque dans ces milieux l’hydrogène atomique n’est présent qu’en très faible quantité. Cette réaction sera donc toujours très minoritaire. Cependant, cette approximation n’est plus sans conséquence pour l’étude des atmosphères d’exoplanètes et en particulier dans la haute atmosphère des géantes gazeuses chaudes, qui sont dominées par l’hydrogène atomique. Pour ces planètes, avec le modèle Glarborg *et al.* (2018), cette réaction s’avère être une voie principale pour la production de NH<sub>3</sub>, ce qui n’est pas vraisemblable. L’analyse du modèle Glarborg *et al.* (2018) nous a permis d’identifier des réactions manquantes avec l’hydrogène et nous avons ainsi modifié en conséquence ce modèle. Ces ajouts permettent notamment d’avoir des voies intermédiaires dans la conversion  $\text{NH}_3 \leftrightarrow \text{H}_2\text{CN}$ , qui semble maintenant plus réaliste. En particulier, nous avons décidé de détailler la réaction  $\text{CH} + \text{NH}_3 \leftrightarrow \text{H}_2\text{CN} + \text{H} + \text{H}$  en deux réactions :

$\text{CH} + \text{NH}_3 \leftrightarrow \text{CH}_2\text{NH} + \text{H}$ , pour laquelle nous avons gardé les paramètres de la réaction  $\text{CH} + \text{NH}_3 \leftrightarrow \text{H}_2\text{CN} + \text{H} + \text{H}$ , et  $\text{H}_2\text{CN} + \text{H} \leftrightarrow \text{CH}_2\text{NH}$ . Pour cette dernière réaction, les paramètres de la réaction ont été estimés par analogie avec la réaction  $\text{NH}_2 + \text{H} \leftrightarrow \text{NH}_3$ . En effet, toutes deux sont des recombinaisons d’un radical azoté avec un atome d’hydrogène, et se déroulent donc sans énergie d’activation. Elles partagent également un facteur pré-exponentiel similaire, sans dépendance en température, qui a été estimé à  $1,6 \times 10^{14} \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$ .

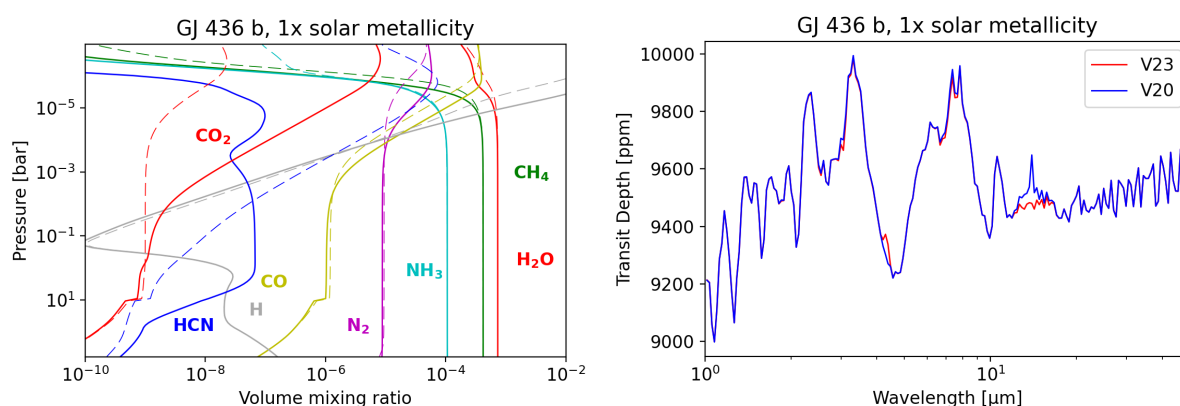
En plus de cette correction, nous avons empêché la reversion de 24 autres réactions globalisées qui menaient à 3 produits, afin d’éviter que des voies de réactions chimiques improbables se produisent dans le modèle.

Non présentes dans les modèles initiaux de combustion, mais indispensables pour l’étude des atmosphères planétaires, les espèces excitées (O<sup>1</sup>D et N<sup>2</sup>D) et leurs réactions

(20 réactions réversibles au total, tirées de Venot *et al.* 2020a) ont été ajoutées. De même, 65 réactions de photodissociations ont été ajoutées.

Finalement, cette revisite de la dernière base CHON de Venot *et al.* (2020a), nous a permis d'aboutir à un schéma chimique contenant 175 espèces et 1313 réactions (1237 réversibles et 76 irréversibles, pour un total de 2550 réactions).

De la même manière que le schéma Venot *et al.* (2020a) a été comparé au schéma Venot *et al.* (2012) en modélisant différentes atmosphères planétaires, le nouveau schéma Veillet *et al.* (2023) a été évalué en étudiant les mêmes planètes (HD 209458b, HD 189733b, GJ 436b, GJ 1214b), et en comparant aux résultats obtenus avec le schéma Venot *et al.* (2020a). Il s'avère que ce nouveau schéma résulte en des différences assez significatives concernant l'abondance d'espèces clés, comme HCN et CO<sub>2</sub> (Figure 2.10, à gauche).



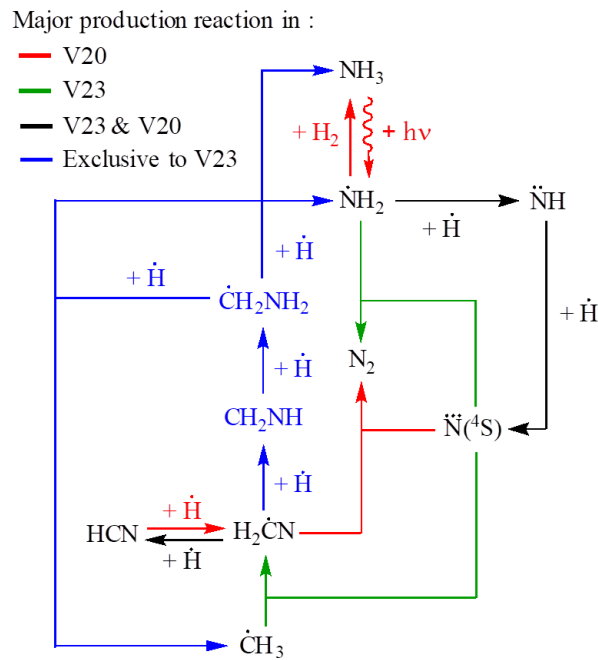
**Figure 2.10** – A gauche : Composition atmosphérique de GJ 436b en supposant une métallicité solaire et un coefficient de diffusion turbulente de  $10^9 \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ , calculée avec le schéma chimique Veillet *et al.* (2023) (trait plein) et avec le schéma Venot *et al.* (2020a) (pointillé). A droite : Spectres synthétiques en transmission correspondant à ces deux compositions chimiques (en rouge avec le schéma Veillet *et al.* (2023) ; en bleu avec le schéma Venot *et al.* (2020a), avec un pouvoir de résolution de 50. Issu de Veillet *et al.* (2023).

Dans Veillet *et al.* (2023), nous avons analysé les voies réactionnelles principales dans les deux schémas (Veillet *et al.* 2023 et Venot *et al.* 2020a) afin de comprendre les différences :

- Concernant la molécule CO<sub>2</sub>, nous avons déterminé que les différences d'abondances étaient dues aux différents paramètres de réaction utilisés dans les modèles pour  $\text{CO} + \text{OH} \leftrightarrow \text{CO}_2 + \text{H}$ . Dans Venot *et al.* (2020a), cette réaction utilise les paramètres de Baulch *et al.* (1994), avec un facteur pré-exponentiel divisé par 6, alors que dans Veillet *et al.* (2023), cette réaction est traitée comme une somme de deux réactions ayant des dépendances en température opposées et les paramètres utilisés proviennent de Joshi et Wang (2006). Cette différence de traitement mène à une différence du taux de production de CO<sub>2</sub> par cette réaction dans la haute atmosphère de trois ordres de grandeurs (elle est plus grande dans Venot *et al.* 2020a). A noter que l'impact de cette réaction, et surtout les différents paramètres de réactions disponibles dans la littérature, avait déjà été noté par Tsai *et al.* (2021).

- Les différences d'abondances de HCN entre les deux schémas s'expliquent par l'ajout de la molécule CH<sub>2</sub>NH dans le réseau Veillet *et al.* (2023) (qui n'était pas présente dans Venot *et al.* 2020a) et les réactions impliquant cette espèce. La réaction  $\text{H}_2\text{CN} + \text{H} \rightarrow$

$\text{CH}_2\text{NH}$  est primordiale car elle est le principal consommateur de  $\text{H}_2\text{CN}$  dans la haute atmosphère ( $P < 10^{-1}$  bar) dans le schéma Veillet *et al.* (2023). En revanche, dans Venot *et al.* (2020a), la principale réaction consommant  $\text{H}_2\text{CN}$  est celle qui produit le plus HCN dans les deux schémas :  $\text{H}_2\text{CN} + \text{H} \rightarrow \text{HCN} + \text{H}_2$ . La présence d'une nouvelle réaction consommant  $\text{H}_2\text{CN}$  pour former autre chose que du HCN explique les différences d'abondance entre les deux schémas chimiques. A plus hautes pressions ( $P > 10^{-1}$  bar), nous avons déterminé que c'était principalement la réaction  $\text{CH}_2\text{NH} + \text{H} \rightarrow \text{H}_2\text{CN} + \text{H}_2$  qui induisait des différences entre les schémas Veillet *et al.* (2023) et Venot *et al.* (2020a). Un schéma synthétisant le mécanisme de production de HCN autour de  $10^{-5}$  bar est présenté Figure 2.11.



**Figure 2.11** – Mécanisme de production de HCN autour de  $10^{-5}$  bar dans les schémas Veillet *et al.* (2023) (V23) et Venot *et al.* (2020a) (V20). Les réactions dominantes dans V20, mais mineures dans V23, sont en rouge ; les réactions dominantes dans V23, mais mineures dans V20, sont en vert ; les réactions dominantes dans les deux schémas sont en noir ; les réactions exclusives à V23 sont en bleu. Issu de Veillet *et al.* (2023).

Ces différences de composition chimique sont tellement importantes qu'elles ont aussi des conséquences sur les spectres observationnels. Pour chaque planète étudiée, nous les avons calculés avec TauREx 3.0 (Al-Refai *et al.*, 2021) en considérant l'opacité des principales espèces ( $\text{H}_2$ , He,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{N}_2$ , CO, HCN, H,  $\text{CO}_2$ ), la diffusion Rayleigh et l'absorption induite par collision (CIA) de  $\text{H}_2$ -He et  $\text{H}_2$ - $\text{H}_2$ , avec les données d'Exomol (Tennyson et Yurchenko, 2012) et de HITRAN (Gordon *et al.*, 2022). Les différences les plus significatives sont observées pour GJ 436b (Figure 2.10, à droite) : par rapport au schéma Venot *et al.* (2020a), la bande d'absorption de HCN à  $13 \mu\text{m}$  est très largement diminuée (environ 200 ppm) avec le schéma Veillet *et al.* (2023) (puisque'il y a moins de HCN). Une autre différence majeure concerne la bande d'absorption de  $\text{CO}_2$  à  $4,2 \mu\text{m}$  qui apparaît avec le schéma Veillet *et al.* (2023) (amplitude de 100 ppm par rapport au schéma Venot *et al.* 2020a), en raison de l'importante abondance prédite pour cette espèce dans la haute atmosphère.

Le développement de ce nouveau schéma, qui est passé par une analyse des réactions clés, l'identification d'approximations non valides pour l'étude des atmosphères riches en hydrogène et donc l'ajout de processus manquants, nous prouve l'intérêt d'une réflexion profonde sur le schéma chimique utilisé pour étudier les atmosphères d'exoplanètes, ainsi que l'intérêt de cette collaboration privilégiée entre le domaine de la planétologie et celui de la combustion. Une simple compilation de réactions chimiques se déroulant à haute température, et reversées selon la constante d'équilibre ne garantit pas de fiabilité quand aux résultats obtenus. Quand on voit l'impact que ces changements ont sur les résultats des modèles atmosphériques (composition et spectre) et compte-tenu de la précision des observations désormais disponibles avec le JWST (voir Chapitre 7), il est crucial qu'une vigilance soit portée sur la méthodologie utilisée pour développer les schémas chimiques et leur validation.

## 2.4 Perspectives et Discussions

Les atmosphères des planètes géantes chaudes ont une composition relativement proche de celle de leur étoile hôte, avec une enveloppe primordiale composée d'hydrogène ( $\sim 83\%$ ) et d'hélium ( $\sim 16\%$ ). Après ces deux éléments principaux, les éléments les plus abondants sont le carbone, l'oxygène et l'azote, avec des concentrations d'environ 0,01-1%. Les schémas que nous avons développés jusqu'à présent ont donc été conçus pour des espèces composées de ces éléments (CHON). Bien que légèrement moins abondants ( $\sim 10^{-5}$ - $10^{-3}\%$ ), le soufre (S) et le phosphore (P) sont également présents dans les étoiles et sont donc aussi présents dans les atmosphères chaudes des exoplanètes. Nous savons également que ces éléments sont très importants pour les planètes de notre Système Solaire. Par exemple, sur Vénus, les espèces soufrées sont remarquablement abondantes (150 ppm) et jouent un rôle critique dans la photochimie de cette planète (par exemple, Krasnopolsky, 2018). Dans Jupiter et Saturne, la principale espèce de phosphore  $\text{PH}_3$  a été détectée avec une abondance moyenne de  $\sim 2$  et  $\sim 6$  ppm, respectivement, qui varie avec la latitude (Fletcher *et al.*, 2009). Avant que les technologies d'observation ne permettent de détecter les espèces soufrées et phosphorées dans les atmosphères des exoplanètes, il a été démontré que ces espèces (par exemple  $\text{H}_2\text{S}$ ,  $\text{PH}_3$ ) pourraient être abondantes dans les atmosphères chaudes des exoplanètes et détectables sur les futures observations à haute résolution telles que celle du JWST (Wang *et al.*, 2017; Baudino *et al.*, 2017).

Les premières observations d'exoplanètes du JWST ont confirmé ces prédictions : la sensibilité de l'instrument NIRSpec a permis de détecter la signature spectrale de  $\text{SO}_2$  dans l'atmosphère de WASP-39b (Tsai *et al.*, 2023). Comme cela sera présenté plus en détails dans le Chapitre 7, pour interpréter ces observations de WASP-39b et comprendre la chimie responsable de la composition chimique de cette atmosphère planétaire, j'ai participé à l'important travail collaboratif entre les modélisateurs impliqués dans le Transiting Exoplanet Community Program, chacun utilisant son code et son schéma chimique. En effet, certains schémas chimiques avec du soufre ont été développés très récemment (Zahnle *et al.*, 2009, 2016; Hobbs *et al.*, 2021; Tsai *et al.*, 2021). Cependant, tous ces schémas chimiques ont été développés de manière assez 'classique', c'est-à-dire en collectionnant plusieurs schémas chimiques différents, sans aucune vérification ni validation globale. Ce problème critique sera abordé dans mon ANR EXACT et plus précisément dans le cadre de la thèse de Roméo Veillet, dont l'objectif ultime est de développer un

schéma CHON+S+P fortement validé par des expériences de combustion, afin d'aboutir au schéma le plus robuste et le plus fiable disponible pour étudier les atmosphères chaudes des exoplanètes.

De par sa validation expérimentale, ce schéma est voué à être le réseau le plus robuste et le plus fiable disponible pour étudier les atmosphères chaudes des exoplanètes. Tout comme les autres schémas développés précédemment, nous le mettrons à disposition sur la base de données KIDA, afin que l'ensemble de la communauté de la planétologie puisse bénéficier de cette avancée. Les premières données du JWST nous ont prouvé que ce schéma CHON+S+P sera bien entendu indispensable pour interpréter les observations d'exoplanètes réalisées avec ce télescope, qui après avoir détecté pour la première fois une espèce soufrées, va certainement déceler également la présence de phosphore dans l'atmosphère d'une exoplanète.

Au delà de l'application aux exoplanètes chaudes, le schéma CHON+S+P trouvera également des applications pour les planètes du Système Solaire. En effet, les atmosphères profondes de Vénus et de Jupiter ont prouvé qu'elles contenaient du soufre et du phosphore. Les températures élevées que l'on y trouve nécessitent l'utilisation de réseaux chimiques adaptés, comme ceux que nous développons. De la même manière que mes réseaux précédents ont pu être appliqués aux géantes du Système Solaire (Cavalié *et al.*, 2014, 2017, 2020, 2023; Mousis *et al.*, 2014; Venot *et al.*, 2020a), le prochain réseau CHON+S+P sera utilisé pour l'étude de ces planètes, notamment dans le cadre de mes collaborations avec les équipes du LAB et du LAM.

# Chapitre 3

## Photochimie à haute température

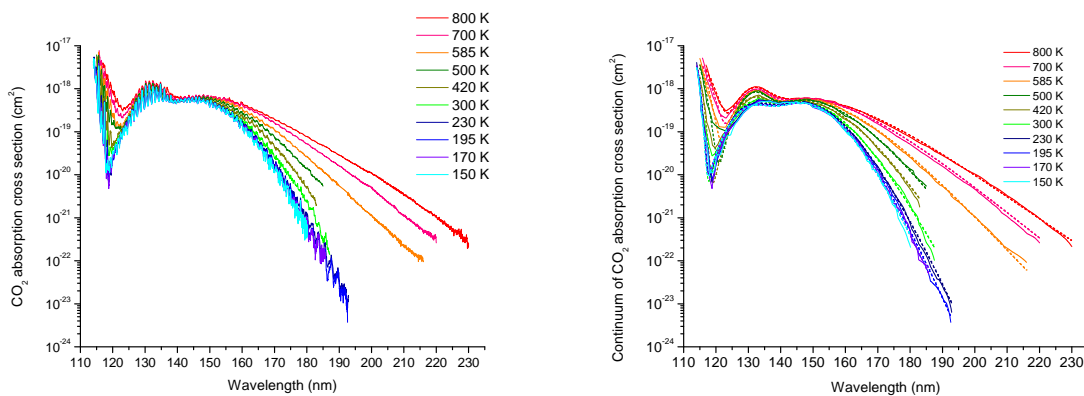
### 3.1 Introduction et mise en contexte

A l'heure actuelle, les exoplanètes dont on peut observer l'atmosphère et caractériser la composition chimique sont très proches de leur étoile. Ces planètes reçoivent alors une très forte irradiation de la part de leur étoile (typiquement, 1000 fois l'irradiation reçue par Jupiter). Les processus de photodissociation sont donc très importants et peuvent être à l'origine de la formation de certaines espèces chimiques, comme l'ont prouvé les premières observations JWST de l'exoplanète WASP-39b dans laquelle se forme du dioxyde de soufre (Tsai *et al.*, 2023). Il est donc indispensable de modéliser avec précision ces processus. Les données indispensables pour modéliser le transfert radiatif et les photodissociations dans une atmosphère planétaire sont les sections efficaces d'absorption ultraviolet (VUV) des molécules. Contrairement aux vitesses de réaction incluses dans le schéma chimique, très bien étudiées et validées expérimentalement à haute température grâce aux études de combustion (voir Chapitre 2), ces sections efficaces ne sont pas bien connues et sont donc une source importante d'incertitudes pour les modèles cinétiques atmosphériques. Les sections efficaces d'absorption UV représentent la probabilité d'absorption d'une molécule d'un rayonnement et jouent un rôle majeur dans le calcul des taux de photodissociation dans les atmosphères planétaires. Dans les modèles atmosphériques, ce calcul est assez complexe, car il nécessite de connaître le flux actinique dans chaque couche atmosphérique, calculé à partir du transfert radiatif du flux stellaire à travers l'atmosphère, qui repose également sur les sections efficaces d'absorption. Ces données essentielles ont une forte dépendance thermique. A température ambiante, elles sont étudiées depuis des décennies et sont maintenant assez bien connues pour les molécules considérées dans nos modèles atmosphériques, mais très peu de mesures à haute température existent. Jusqu'à récemment, les seules données disponibles ont été acquises à des températures moyennement chaudes (inférieures à 400 K) ou à des températures très élevées ( $\sim 2000/3000$  K) et la plupart du temps à des longueurs d'onde très spécifiques ou sur des plages étroites (par exemple Lewis et Carver, 1983; Kessler *et al.*, 1993; Schulz *et al.*, 2002; Oehlschlaeger *et al.*, 2004). Toutes ces données ont confirmé la dépendance thermique des sections d'absorption moléculaire, mais leur gamme de température (trop froide/trop chaude) et de longueur d'onde (trop étroite) n'est pas vraiment appropriée pour étudier les atmosphères des exoplanètes. Ainsi, par manque de données appropriées, les paramètres à température ambiante sont utilisés dans les modèles chimiques des atmosphères chaudes des exoplanètes, ce qui conduit à des incertitudes importantes. J'ai décidé

de m'attaquer à ce manque de données dès ma thèse, ce qui m'a permis de me rapprocher de mon équipe actuelle Exobiologie et Astrochimie. Cette problématique a été le sujet de deux publications (Venot *et al.*, 2013; Venot *et al.*, 2018a), à mener au développement d'une plateforme de spectroscopie UV au sein du LISA et représente un axe de travail de mon ANR EXACT. A part les publications liées à CO<sub>2</sub>, les autres études présentées dans ce chapitre ont été principalement conduites par des personnes que je co-encadre en thèse ou en post-doctorat.

### 3.2 Variation thermique de l'absorption de CO<sub>2</sub>

La première molécule que nous avons décidé d'étudier est le dioxyde de carbone (CO<sub>2</sub>). Pour cela, nous avons réalisé des campagnes de mesures au centre de rayonnement synchrotron BESSY (Allemagne) sur la gamme 115-200 nm, ainsi que sur notre ancien dispositif expérimental au LISA, composé d'une lampe à Deuterium et d'un spectromètre Jobin-Yvon de 1.5 m, sur la gamme 195-230 nm. Nous avons ainsi obtenu des données expérimentales à haute-résolution ( $\Delta\lambda = 0.03$  nm) pour 10 températures entre 150 et 800 K (Venot *et al.*, 2013; Venot *et al.*, 2018a). La première série de données publiées en 2013 était partielle et a été complétée par la suite par d'autres mesures. L'analyse et le traitement des données ont ainsi été améliorés et c'est cette dernière publication que nous détaillerons ici. Grâce aux mesures effectuées, nous avons pu observer que la dépendance thermique de l'absorption du CO<sub>2</sub> est très importante : de 150 à 800 K, l'absorption augmente de 4 ordres de grandeur à 200 nm (Figure 3.1), et d'environ un facteur 10 autour de Lyman  $\alpha$ . Aussi, la plage de longueur d'onde sur laquelle la molécule absorbe le rayonnement augmente vers les grandes longueurs d'onde lorsque la température augmente.



**Figure 3.1** – A gauche : Section efficace d'absorption de CO<sub>2</sub> (cm<sup>2</sup>) entre 150 et 800 K. A droite : Continu de la section efficace d'absorption du CO<sub>2</sub> (cm<sup>2</sup>) (traits pleins). Le continu peut être modélisé par une somme de trois fonctions Gaussiennes (pointillés). Issu de Venot *et al.* (2018a).

Pour analyser nos données, nous avons déterminé que la section efficace d'absorption pouvait être séparée en deux composantes : le continuum, et la structure fine superposée au continuum. La structure fine contient tous les petits pics (avec une largeur spectrale de  $\sim 1$  nm) correspondant aux transitions d'énergie vibrationnelle, et le continuum est la ligne de base qui passe par les minima de tous ces petits pics. À chaque température,

nous avons intégré les deux composantes sur toute la gamme de longueurs d'onde et comparé les valeurs. Comme la contribution de la structure fine à l'absorption totale diminue lorsque la température augmente, nous avons déterminé que cette contribution "fine" devenait négligeable pour les températures supérieures à 500 K car elle représente moins de 20% de l'absorption due au continuum. Nos objets d'intérêt premier étant les exoplanètes chaudes, nous nous sommes focalisés sur l'étude de la variation du continuum. Pour faciliter l'utilisation de ces données dans les modèles atmosphériques, nous avons déterminé une paramétrisation pour modéliser le continuum de la section efficace d'absorption. Nous avons constaté que le continuum de la section efficace d'absorption,  $\sigma_{cont}(\lambda, T)$ , pouvait être représenté comme la somme de trois fonctions Gaussiennes :

$$\sigma_{cont}(\lambda, T) = \sigma_1(\lambda, T) + \sigma_2(\lambda, T) + \sigma_3(\lambda, T). \quad (3.1)$$

Par commodité, chaque fonction Gaussienne  $\sigma_i$  est exprimée en utilisant le nombre d'onde  $\nu$  (cm<sup>-1</sup>), au lieu de la longueur d'onde  $\lambda$  ( $\lambda = 1/\nu$ ), ce qui donne l'expression

$$\sigma_i(\lambda, T) = \sigma_i(\nu, T) = A_i(T) \times \exp\left(-\frac{(\nu - \nu_{ci})^2}{2 \times s_i(T)^2}\right), \quad (3.2)$$

où  $A_i(T)$  est l'amplitude (cm<sup>2</sup>),  $s_i(T)$  l'écart-type (cm<sup>-1</sup>), et  $\nu_{ci}$  le centre de position de la Gaussienne  $i$  (cm<sup>-1</sup>). L'écart-type est lié à la largeur à mi-hauteur (FWHM) selon  $\text{FWHM}(T) = 2\sqrt{2\ln 2} \times s_i(T)$ .

Notre approche est cohérente avec la dissociation rapide du CO<sub>2</sub> après l'excitation VUV et avec le principe dit de réflexion (Herzberg 1989, p. 392, Schinke 1995, p.110-112), qui approxime essentiellement le spectre d'absorption de chaque état électronique participant en termes de Gaussienne dont les paramètres sont contrôlés par l'état fondamental électronique et les propriétés de chaque potentiel dans la région de Franck-Condon.

Les trois fonctions Gaussiennes sont centrées respectivement en  $\nu_{c1} = 88574$  cm<sup>-1</sup> (~112,9 nm),  $\nu_{c2} = 76000$  cm<sup>-1</sup> (~131,58 nm), et  $\nu_{c3} = 68000$  cm<sup>-1</sup> (~147,06 nm). Ces valeurs, qui ne varient pas avec la température, sont assez proches des positions des états électroniques  $1^1\Sigma_u^+$ ,  $1^1\Pi_g$ , et  $1^1\Delta_u$ , respectivement (Cossart-Magos *et al.*, 1987; Grebenshchikov, 2013). Les amplitudes et écarts types des trois fonctions varient avec la température et ont été déterminés par ajustement avec les données expérimentales. Nous avons obtenu les valeurs suivantes :

$$A_1 = 5 \times 10^{-20} \quad (3.3)$$

$$s_1(T) = 877.36 + 10947.81 \times \exp\left(-\frac{1382.63}{T}\right) \quad (3.4)$$

$$A_2(T) = 3.58 + 9.18 \times \exp\left(-\frac{580.92}{T}\right) \quad (3.5)$$

$$s_2(T) = T \times (2.78 + 49.52 \times \exp(-0.00654 \times T)) \quad (3.6)$$

$$A_3(T) = 4.09 + 0.0022 \times T \quad (3.7)$$



$$s_3(T) = T \times (8.17 + 46.12 \times \exp(-0.00813 \times T)) \quad (3.8)$$

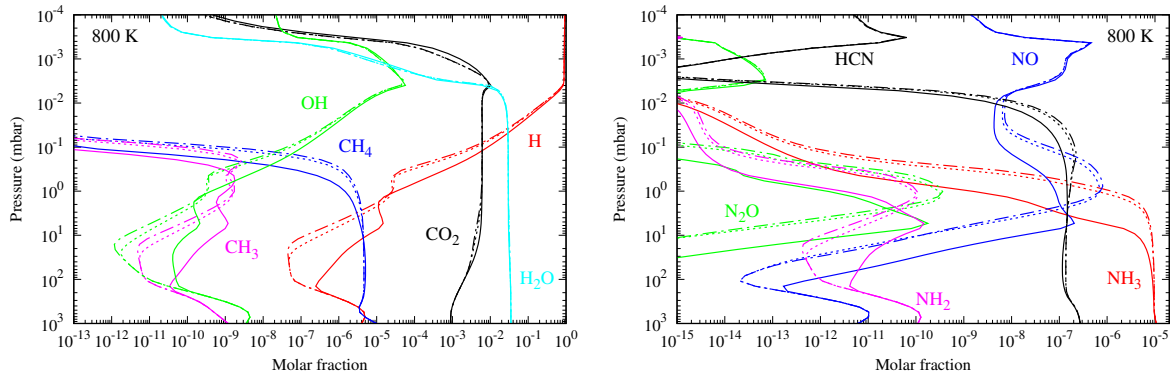
Ces paramètres, combinés et assemblés avec les Eqs. 3.2 et 3.1 permettent de tracer le continu de l'absorption du CO<sub>2</sub> à n'importe quelle température. Comme on peut le voir sur la Figure 3.1 (à droite), l'accord avec les données expérimentales est très bon, avec un écart-type moyen d'environ 15%. Cette paramétrisation permet aussi d'extrapoler la section efficace à des températures trop hautes pour être atteintes de façon expérimentale (dissociation thermique par exemple rendant très difficile les acquisitions).

Ces données à haute température ont bien sûr été intégrées dans notre modèle photochimique afin d'étudier l'impact sur les résultats du modèle (profils d'abondances moléculaires) ainsi que sur les observables en découlant (spectres synthétiques). Nous avons modélisé deux planètes de type neptunes chaudes, avec des caractéristiques physiques (masse et rayon) similaires à GJ 436b (Southworth, 2010), et avec des températures d'équilibre de 1091 K et 2043 K, afin d'avoir des températures respectivement de 800 K et 1500 K dans la partie haute de l'atmosphère (au-dessus de 10 mbars), correspondant aux données d'absorption testées. Nous avons utilisé le modèle analytique de Parmentier *et al.* (2015) pour calculer ces profils. L'atmosphère est modélisée avec des rapports élémentaires C/N/O solaires mais une métallicité  $100 \times$  solaire, correspondant à ce qui est attendu pour ce type de planètes (e.g. Fortney *et al.*, 2013; Moses *et al.*, 2013; Agúndez *et al.*, 2014b). La conséquence est une augmentation de l'abondance de CO<sub>2</sub> d'environ 4 ordres de grandeur par rapport à la métallicité solaire, ce qui se traduit par des fractions molaires de CO<sub>2</sub> ( $y_{CO_2}$ ) de  $6 \times 10^{-3}$  et  $6 \times 10^{-4}$  à 1 mbar pour les deux atmosphères étudiées ici, à 800 K et 1500 K, respectivement. Cela est particulièrement adapté à l'étude qui nous intéresse ici.

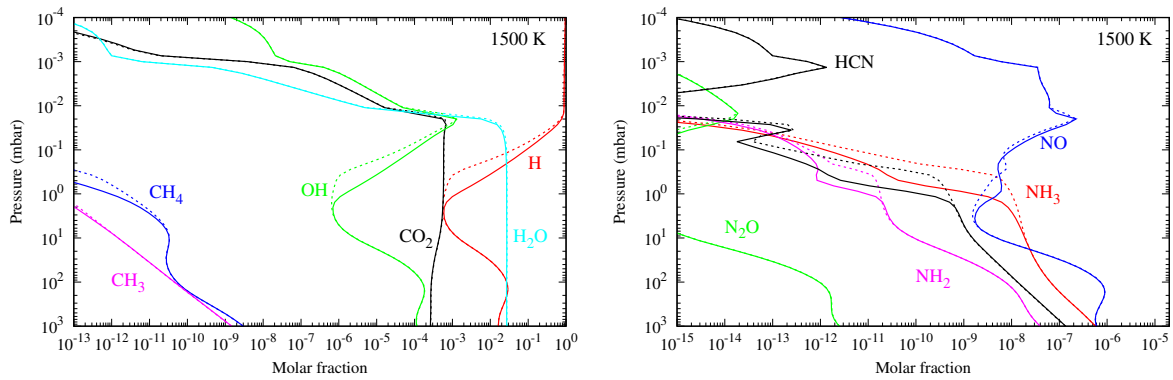
Pour modéliser l'irradiation stellaire, nous avons choisi d'utiliser une étoile de type F (HD 128167) ayant un flux important dans la gamme 130–230 nm. La distance orbitale de chaque planète a été adaptée afin d'obtenir les températures d'équilibre correctes. Le schéma chimique utilisé est celui de (Venot *et al.*, 2012), avec une liste de 55 photodissociations, et le mélange vertical est modélisé avec un coefficient de diffusion turbulente  $K_{zz} = 10^8 \text{ cm}^2\text{s}^{-1}$  constant avec l'altitude.

Pour tester l'impact de la section efficace à haute température, nous avons fait plusieurs modèles : Pour la planète dont la température est de 800 K dans la haute atmosphère, nous avons utilisé (a) la section d'absorption à température ambiante :  $\sigma_{CO_2}(\lambda, 300)$ , (b) la section d'absorption à 800 K :  $\sigma_{CO_2}(\lambda, 800)$ , et (c) le continuum d'absorption calculé avec Eq. 3.1 à 800 K :  $\sigma_{cont}(\lambda, 800)$ . Pour la planète plus chaude, avec une température de 1500 K au sommet de l'atmosphère, nous avons utilisé (a)  $\sigma_{CO_2}(\lambda, 300)$  et (b) le continuum d'absorption calculé avec Eq. 3.1 à 1500 K :  $\sigma_{cont}(\lambda, 1500)$ . Pour ces différents modèles, les profils d'abondances du CO<sub>2</sub>, de H<sub>2</sub>O (qui contribuent le plus aux spectres en transmission) et des espèces les plus impactées (avec une abondance  $> 10^{-10}$ ) par le changement de  $\sigma_{CO_2}(\lambda, T)$  sont représentés sur les Figures 3.2 et 3.3.

La modification de la section d'absorption du CO<sub>2</sub> affecte l'abondance de nombreuses espèces, pas seulement le dioxyde de carbone. La modification de la section d'absorption du dioxyde de carbone a un impact sur l'atmosphère jusqu'à des niveaux de pression de 0,6 bar. Qualitativement, avec  $\sigma_{CO_2}(\lambda, 800)$  les profils verticaux sont décalés vers les basses pressions. Pour un niveau de pression donné, il en résulte des abondances plus faibles qu'avec  $\sigma_{CO_2}(\lambda, 300)$  pour CO<sub>2</sub>, H, et OH, et des abondances plus élevées pour CH<sub>4</sub>, NH<sub>3</sub>,



**Figure 3.2** – Profils d’abondances verticaux de CO<sub>2</sub> et de 10 molécules sélectionnées calculés avec le modèle photochimique en utilisant  $\sigma_{CO_2}(\lambda, 300)$  (traits pleins),  $\sigma_{CO_2}(\lambda, 800)$  (pointillés), et  $\sigma_{cont}(\lambda, 800)$  (tirets-pointillés) pour le profil thermique ‘800 K’. Issu de Venot *et al.* (2018a)



**Figure 3.3** – Profils d’abondances verticaux de CO<sub>2</sub> et de 10 molécules sélectionnées calculés avec le modèle photochimique en utilisant  $\sigma_{CO_2}(\lambda, 300)$  (traits pleins) et  $\sigma_{cont}(\lambda, 1500)$  (pointillés) pour le profil thermique ‘1500 K’. Issu de Venot *et al.* (2018a)

et HCN. Les autres espèces (CH<sub>3</sub>, NO, NH<sub>2</sub>, et N<sub>2</sub>O) ayant des profils verticaux tortueux, la direction du changement (i.e. augmentation ou diminution) des abondances dépend du niveau de pression.

Il s’avère que ces changements d’abondance sont dus aux changements de taux de photodissociation du CO<sub>2</sub> (et taux de perte) induits par le changement de section efficace. Le changement le plus important est observé pour la photodissociation  $CO_2 + h\nu \rightarrow CO + O(^3P)$  (J<sub>1</sub>), qui a un taux de perte multiplié par  $\sim 1200$  à 0,1 mbar, lorsqu’on utilise  $\sigma_{CO_2}(\lambda, 800)$  au lieu de  $\sigma_{CO_2}(\lambda, 300)$  (voir Figure 9 de Venot *et al.* 2018a). Dans le modèle utilisant  $\sigma_{CO_2}(\lambda, 800)$ , la perte due à J<sub>1</sub> représente plus de 90% de la perte totale de CO<sub>2</sub> (pour P < 20 mbar), alors que cette photodissociation n’a qu’une contribution mineure au taux de perte totale de CO<sub>2</sub> (0,5%) lorsqu’on utilise  $\sigma_{CO_2}(\lambda, 300)$ . Par phénomène d’écrantage, les autres molécules de l’atmosphère ayant des domaines spectraux d’absorption en commun avec CO<sub>2</sub> (comme NH<sub>3</sub>) ont leur taux de photodissociations et de perte également impactés. Ce phénomène est de plus amplifié par le fait que les abondances des espèces sont déterminées par un système d’équations différentielles couplées (équation de continuité). Ainsi, chaque variation de l’abondance d’une seule espèce affecte les espèces avec lesquelles elle réagit chimiquement. On remarque ainsi que le maximum du taux de perte de NH<sub>3</sub> par photodissociation ( $NH_3 + h\nu \rightarrow NH_2 + H$ ) varie de 7 mbar, avec

$\sigma_{CO_2}(\lambda, 300)$ , à  $\sim 1,5$  mbar, avec  $\sigma_{CO_2}(\lambda, 800)$  (voir Figure 11 de Venot *et al.* 2018a). Ces pressions correspondent aux niveaux respectifs où l'élimination de l'ammoniac par photolyse n'est plus dominante et où  $NH_3$  atteint une abondance de  $\sim 3 \times 10^{-6}$ , proche de sa valeur aux niveaux plus profonds (Figure 3.2).

Pour l'atmosphère à 1500 K, l'utilisation de  $\sigma_{cont}(\lambda, 1500)$  au lieu de  $\sigma_{CO_2}(\lambda, 300)$  modifie dans une moindre mesure la composition chimique. Le profil vertical d'abondance du  $CO_2$  est à peine modifié. Entre 0,02 et 2 mbar, H et OH ont des abondances plus faibles avec la section d'absorption chaude. Comme pour l'atmosphère à 800 K,  $CH_4$ ,  $NH_3$ , et HCN sont détruits moins profondément par photolyse qu'avec  $\sigma_{CO_2}(\lambda, 300)$ . Par rapport à l'atmosphère de 800 K, l'abondance de NO est beaucoup moins modifiée par le changement de section d'absorption de  $CO_2$ . Dans ce cas aussi, l'explication de ces modifications se trouve dans les changements de taux de photolyses.

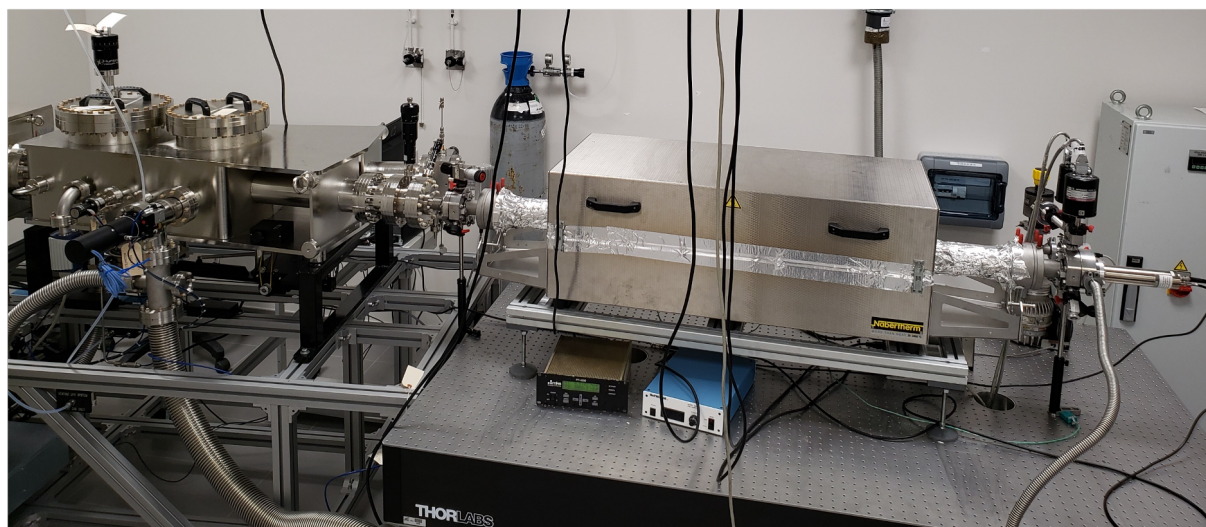
Nous avons calculé les spectres synthétiques correspondant à ces différents modèles avec le code TauREx (Waldmann *et al.*, 2015b,a) pour évaluer l'impact sur les observables et la meilleure interprétation que pourrait amener l'utilisation des données UV adéquates. Nous avons observé que les différences entre les spectres sont assez faibles. Dans le cas '800K', des variations de moins de 5 ppm sont visibles dans les trois bandes d'absorption du  $CO_2$  (2,7  $\mu m$ , 4,3  $\mu m$ , 14,9  $\mu m$ ), ce qui est plus petit que le niveau d'incertitude atteint avec HST pour les planètes de type neptunes chaudes/super-terres (60 ppm pour Kreidberg *et al.* 2014 et 22 ppm pour Tsiaras *et al.* 2016a), et même ceux des différents instruments du JWST (20 ppm pour NIRISS, NIRCAM, Rocchetto *et al.* 2016, 30 ppm pour MIRI Beichman *et al.* 2014).

Il faut toutefois garder à l'esprit que les changements observés dans la composition atmosphérique et les spectres synthétiques sont dus à la modification d'un seul paramètre : la section d'absorption du dioxyde de carbone. Compte tenu du couplage élevé qui existe entre toutes les molécules par le biais de la cinétique chimique et du phénomène d'écrantage, on peut s'attendre à des effets plus importants en prenant en compte les sections efficaces d'absorption de plusieurs espèces. Il est donc nécessaire de déterminer des données à haute température pour toutes les espèces absorbantes des atmosphères planétaires, ce qui constitue un des axes principaux de mes travaux de recherche.

### 3.3 Plateforme de spectroscopie UV

L'étude de cette première molécule et les conclusions que l'on a tirées sur la nécessité de ce genre de données, sont à l'origine de la plateforme de spectroscopie UV développée au LISA. En effet, les données acquises sur synchrotron (BESSY ou SOLEIL) nécessitent généralement plusieurs années car elles requièrent plusieurs campagnes de mesures. Ces temps de faisceaux, accordés suite au dépôt de demandes, sont de l'ordre de quelques jours par an (typiquement 3 pour la ligne DESIRS de SOLEIL). Avec une telle durée, le moindre imprévu (i.e. un tube qui casse par exemple, comme ça nous est déjà arrivé) peut ralentir des études sur des échelles de temps assez long (6-12 mois). Afin de ne plus être tributaires de ces attributions bi-annuelles, nous avons décidé de développer notre propre plateforme de spectroscopie UV à haute résolution ( $\Delta\lambda=0,01nm$ ) au sein même du LISA.

Les mesures pourront être plus rapides et plus fréquentes, améliorant ainsi l'avancé du projet. Les financements du DIM-ACAV (PI : Schwell, co-PI : Venot), du CNES (PI : Venot), de l'OSU EFLUVE (PI : Venot) et du LISA (PI : Venot), nous ont permis



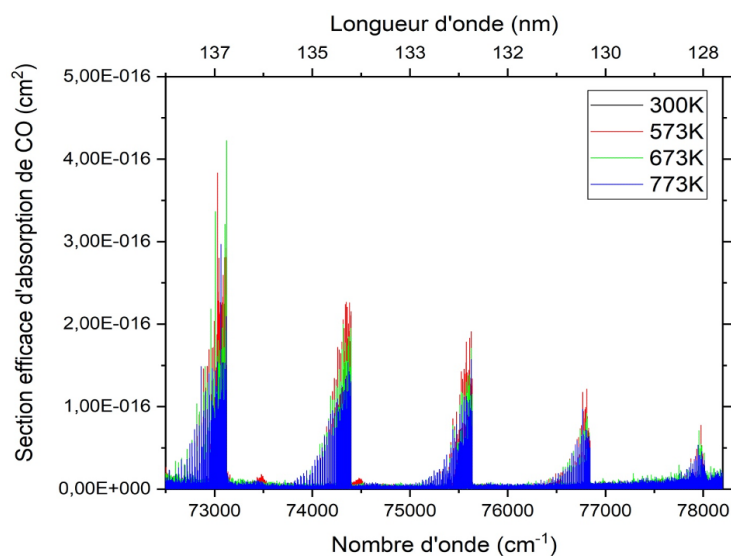
**Figure 3.4** – Dispositif expérimental permettant la mesure des sections efficaces d’absorption UV à haute température au LISA. Les éléments principaux du montage sont le monochromateur McPherson (à gauche), une cellule tubulaire en quartz (entouré d’aluminium) placée dans un four Nabertherm (au centre), et d’un photomultiplicateur (à droite).

de commander l’ensemble du matériel (en particulier le monochromateur) à la société McPherson. La mise en place de la plateforme a débuté dès la livraison du matériel, en août 2021. Pour accompagner ce projet et ce développement, nous avons intégré deux nouveaux membres dans l’équipe : Mathilde Poveda, dont je co-dirige la thèse (2019-2023) avec Yves Bénilan et Pascal Tremblin, et Benjamin Fleury, que je co-supervise également en post-doctorat avec Yves Bénilan (2021-2024). Mathilde et Benjamin, appuyés par le Département Technique du LISA, ont assuré tout le montage, l’alignement des différents éléments avec le faisceau, les tests de calibration . . . Notre dispositif expérimental (Figure 3.4), nous a permis de procéder à quelques mesures sur d’autres molécules que le  $\text{CO}_2$  : CO et  $\text{C}_2\text{H}_2$ , que nous détaillons dans les sections suivantes. Ces mesures ont complétées des mesures que nous avons acquises par le passé au synchrotron SOLEIL, mais dont le jeu de données n’était pas suffisamment complet pour être publié.

### 3.4 Etude de la section efficace du monoxyde de carbone

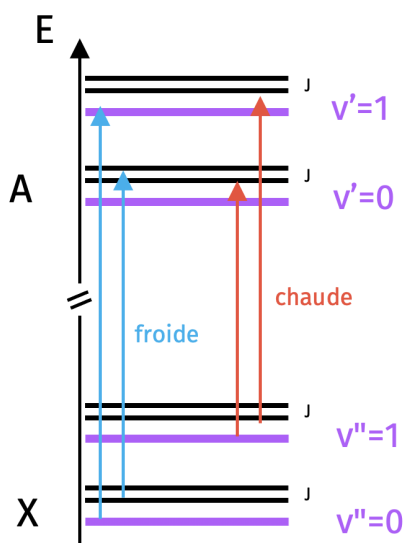
Dans Poveda et al. (en prép), nous avons étudié la variation thermique de la section efficace d’absorption du monoxyde de carbone (CO). Grâce à des mesures acquises à SOLEIL en Juin 2015 (proposals n° 20141255, PI : Venot) entre 128 et 147 nm ( $68000 - 78000 \text{ cm}^{-1}$ ) à haute résolution spectrale ( $0,25 \text{ cm}^{-1}$ ), nous avons étudié en détails la transition  $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$ , pour les niveaux  $3 < \nu' < 10$  et  $\nu'' = 0 - 1$ . En utilisant les mesures à 300, 573, 673 et 773 K, nous avons pu déterminer comment variaient les niveaux d’énergie de la molécule en fonction de la température, ainsi que la population de ces niveaux.

L’intensité des bandes dites ‘froides’ (les Y-0, avec Y de 3 à 10) ne varient pas lorsque la température augmente, car la population du niveau  $X^1\Sigma^+$ ,  $\nu'' = 0$  ne change (presque) pas lorsque la température augmente. On remarque en revanche sur la Figure 3.5 que l’intensité des têtes de bandes diminuent lorsque la température augmente, mais les bandes sont



**Figure 3.5** – Section efficace du CO mesurée à SOLEIL pour des températures entre 300 et 773 K. Issu de la thèse de Mathilde Poveda.

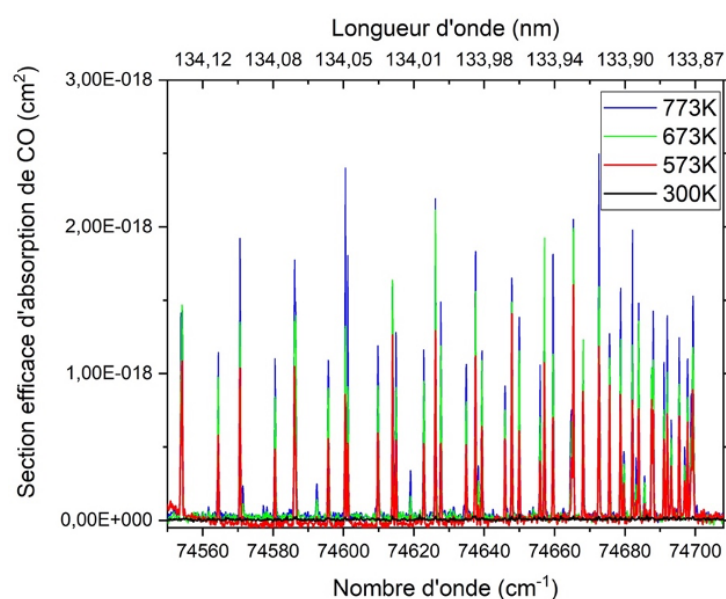
aussi plus étalées en longueur d'onde. La Figure 3.6 est une représentation schématique de la transition  $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$ , avec les différentes transitions.



**Figure 3.6** – Diagramme des différents niveaux d'énergie et transitions entre les niveaux rovibrationnels de l'état électronique fondamental X vers le niveau excité A. Issu de la thèse de Mathilde Poveda.

A l'inverse, lorsque la température augmente, l'intensité des bandes dites 'chaudes' (les Y-1) augmentent car le niveau d'énergie  $X^1\Sigma^+$ ,  $\nu'' = 1$  est plus peuplé et donc les transitions vers le niveau  $A^1\Pi$  depuis  $X^1\Sigma^+$ ,  $\nu'' = 1$  sont possibles. On voit clairement sur la Figure 3.7, que ces bandes deviennent observables à 573 K.

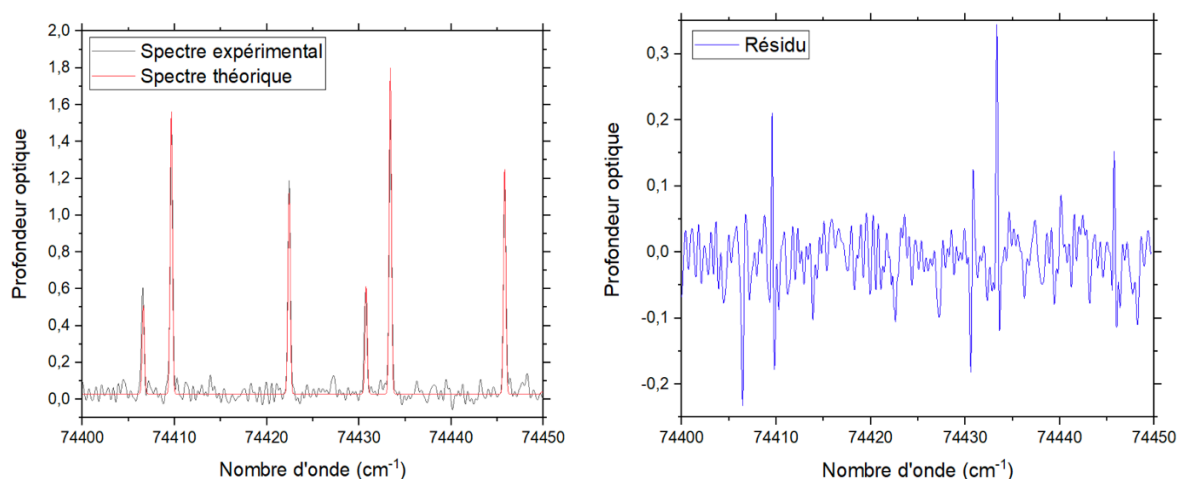
Pour chaque bande, nous avons pu déterminer les positions et les intensités de chaque raie (environ 60 raies par bande, soit 3000 raies au total), donnant les paramètres spec-



**Figure 3.7** – Zoom sur la section efficace de CO pour la bande 9-1 pour des températures entre 300 et 773 K. Issu de la thèse de Mathilde Poveda.

troscopiques ( $B''$ ,  $D''$ ,  $D'$  et  $\nu_0$ , et la force de l'oscillateur). Nous avons ainsi obtenu une liste théorique des raies du CO dans le domaine spectral  $68000 - 78000 \text{ cm}^{-1}$ . Cette liste est en cours de publication dans Poveda et al. (en prép.)

Grâce à cette liste de raies, nous avons pu créer un modèle reproduisant la variation thermique des intensités des raies. Comme on peut le voir sur la Figure 3.8, l'accord entre les mesures et le modèle est assez bon. L'écart le plus important étant pour la bande  $Q_{22}$ , avec un résidu de 0,3 pour une profondeur optique de 1,8, soit 17% d'écart.



**Figure 3.8** – A gauche : Raies du CO simulées (en rouge) et mesurées (en noir) à 673 K, exprimées en terme de profondeur optique. Il s'agit d'une partie de la bande 9-1, entre  $74400$  et  $74450 \text{ cm}^{-1}$ . A droite : Résidu entre les deux spectres. Issu de la thèse de Mathilde Poveda.

### 3.5 Etude de l'acétylène

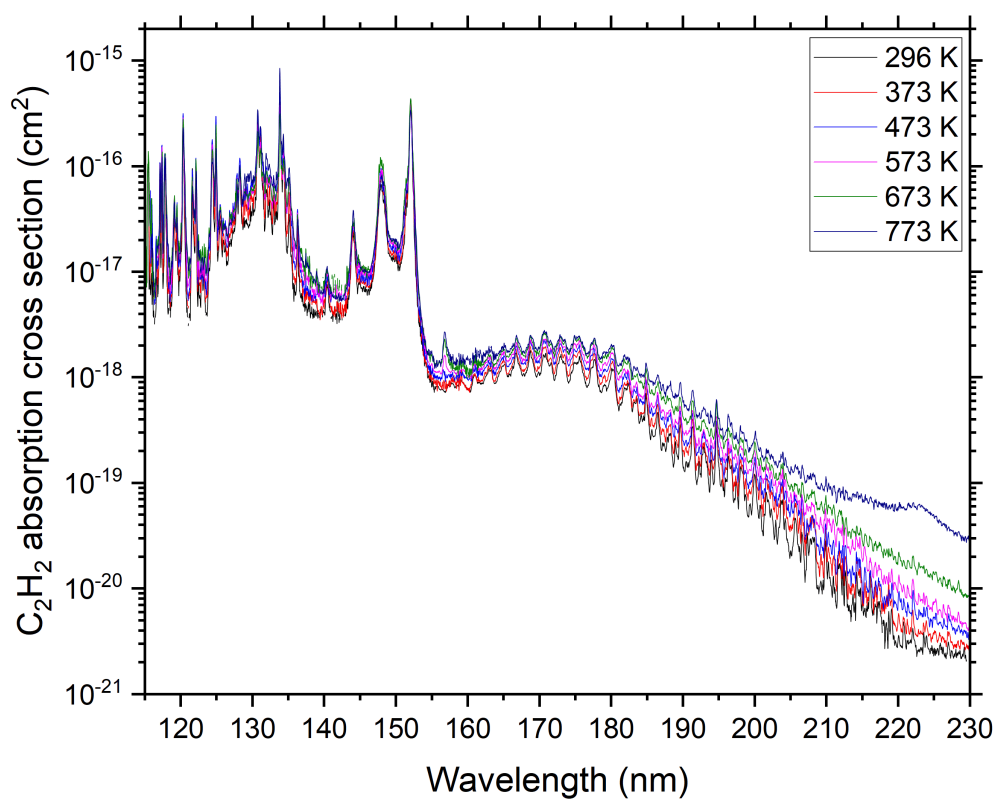
La première molécule pour laquelle nous avons étudié la variation thermique de la section efficace d'absorption avec notre plateforme UV au LISA est  $C_2H_2$ . Les précédentes données acquises à SOLEIL ont été répétées, pour avoir une référence à laquelle comparer, et compléter par nos nouvelles données. Nous avons étudié sept températures : 296 K et de 373 K à 873 K, par pas de 100 K. La température la plus élevée (873 K) n'est cependant pas exploitable en raison d'une dégradation thermique très rapide de l'acétylène, rendant l'acquisition et le traitement des données impossible. Nous présentons donc ici seulement six températures, allant de 296 K à 773 K.

Comme on peut le voir sur la Figure 3.9, nous observons globalement une augmentation de l'absorption avec la température, et que l'amplitude de ces variations dépend de la longueur d'onde.

Pour des longueurs d'onde inférieures à 150 nm, les variations sont assez faibles. En revanche pour les longueurs d'onde plus grandes, on observe des variations plus importantes. On peut observer la bande d'absorption à 157 nm, invisible à température ambiante, mais qui pousse avec la température. Il s'agit d'une bande chaude correspondant au mode de vibration  $\nu_2$  ( $\nu_2 = 1973,5 \text{ cm}^{-1}$ ). L'intensité de cette bande, visible à partir de 473 K, passe de  $1,2 \times 10^{-18} \text{ cm}^2$  à  $2,7 \times 10^{-18} \text{ cm}^2$  à 773 K. À partir de 155 nm, on observe le même phénomène que pour  $CO_2$ , à savoir que le continu de l'absorption augmente avec la température, et que cette augmentation est d'autant plus marquée que la longueur d'onde augmente. On remarque aussi que l'augmentation du continu ne semble pas linéaire avec la température. Elle semble s'accélérer à mesure que la température augmente : on peut voir par exemple à 215 nm, que l'écart entre les courbes à 473 K et 573 K est plus faible qu'entre celles à 573 K et 673 K, lui-même plus faible que l'écart entre les courbes à 673 K et 773 K. De façon quantitative, on voit qu'à 200 nm, il y a environ un facteur 10 entre l'absorption à température ambiante et celle à 773 K.

Finalement, on observe l'apparition d'une bosse aux environs de 225 nm sur le spectre correspondant à la température de 773 K. Nous n'avons pas pu établir l'origine de cette structure. Il pourrait s'agir de contribution de bandes chaudes, mais également de l'absorption d'un composé qui serait produit dans notre cellule par décomposition thermique. En effet, pour les températures à partir de 673 K, nous avons observé une légère augmentation de la pression dans notre cellule, ce qui laisse à penser qu'une modification de la composition du gaz injecté a lieu. Une modification du dispositif expérimental est nécessaire pour analyser le contenu de la cellule et identifier le ou les composés produits par spectrométrie de masse.

Ces nouvelles données de  $C_2H_2$  ont été incluses dans notre modèle cinétique pour évaluer l'impact sur les abondances chimiques prédites. Pour cela, nous avons modélisé une planète de type neptune chaude (GJ 436b), orbitant autour d'une étoile de type F (HD128167, étoile avec un flux intense dans la région VUV). Pour se placer dans le cas d'une atmosphère avec beaucoup d'acétylène, nous avons supposé que l'atmosphère avec une forte métallicité ( $100 \times$  solaire) ainsi qu'un rapport C/O important ( $5 \times$  solaire, soit 2,87). La Figure 3.10 (à gauche) montre la composition chimique de cette planète lorsqu'on utilise la section efficace de  $C_2H_2$  à 296 K, ou bien celle mesurée à 773 K. Comme nous l'avons observé dans notre étude sur la section efficace de  $CO_2$  dans Venot *et al.* (2018a) (voir Section 3.2), on remarque que les abondances de plusieurs espèces sont modifiées par



**Figure 3.9** – Section efficace d’absorption UV de  $C_2H_2$  entre 115 et 230 nm, mesurée au LISA entre 296 K et 773 K.

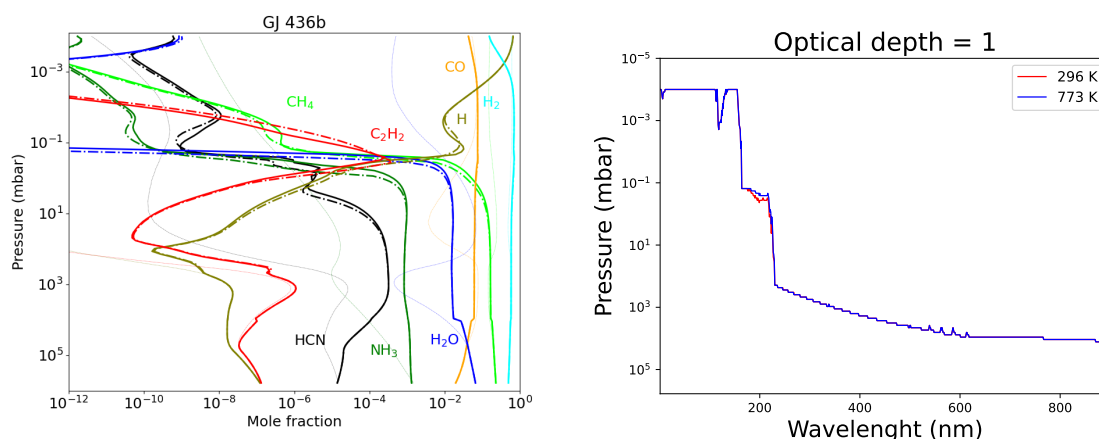
le changement de cette unique donnée, notamment  $C_2H_2$ ,  $CH_4$ ,  $H_2O$ ,  $NH_3$ ,  $H$  et  $HCN$ . L’ampleur des variations est moins importante que ce que nous avons observé pour  $CO_2$ , car l’augmentation de la section efficace de  $C_2H_2$  avec la température est elle aussi plus faible. Les changements d’abondances observés sont localisés principalement autour de la région de 0,1 mbar, ce qui est cohérent avec le changement de pénétration du flux UV dans l’atmosphère, présenté sur la Figure 3.10 (à droite) : avec la section efficace à 773 K, le flux UV dans la gamme 150-230 nm pénètre légèrement moins profondément dans l’atmosphère. En conséquence, les taux de photolyses des espèces absorbant dans cette gamme vont être modifiés.

Ces travaux ont été menés par Mathilde Poveda et Benjamin Fleury, respectivement doctorante et post-doctorant au LISA, et seront présentés dans Fleury, Poveda et al. en préparation.

## 3.6 Conclusions et Perspectives

Les études présentées dans ce chapitre nous prouvent la variation thermique des sections efficaces d’absorption et leur impact sur les modèles atmosphériques. Les observations spectroscopiques d’atmosphères d’exoplanètes ont connu une véritable révolution





**Figure 3.10** – A gauche : Profils d’abondances verticaux d’une sélection d’espèces chimiques dans l’atmosphère d’une planète de type neptune chaude, avec une métallicité  $100 \times$  solaire et un rapport C/O  $5 \times$  solaire, autour d’une étoile de type F. Les abondances calculées avec la section efficace de  $C_2H_2$  à 296 K (tiret - point) sont comparées avec les abondances obtenues avec la section efficace de  $C_2H_2$  à 773 K (trait plein). L’équilibre thermochimique est indiqué pour information en trait pointillé fin. Le mélange vertical est paramétrisé avec un coefficient de diffusion turbulente constant de  $10^9 \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ . A droite : Pénétration du flux UV dans l’atmosphère (niveau où la profondeur optique = 1) en fonction de la longueur d’onde pour les modèles utilisant la section efficace de  $C_2H_2$  à 296 K (rouge) et à 773 K (bleu).

très récemment grâce à la qualité et la résolution des données du JWST, nous prouvant la nécessité d’avoir des modèles atmosphériques précis (Tsai *et al.*, 2023). Les molécules créées par photochimie pouvant désormais être détectables, il est indispensable de modéliser correctement ces processus. Ce projet de spectroscopie UV n’en n’est donc qu’à ses premières années de vie. Après les molécules présentées dans ce manuscrit ( $CO_2$ ,  $C_2H_2$ , CO), de nombreuses espèces restent à étudier. Les prochaines cibles seront :  $NH_3$ , dont l’abondance a été très impactée par le changement de section efficace de  $CO_2$  (Venot *et al.*, 2018a) ; HCN, qui peut être un traceur pour les atmosphères chaudes et riches en carbone et donc pour qui la photochimie doit être modélisée de façon précise (Venot *et al.*, 2015) ;  $SO_2$ , et les espèces soufrées en général, dont la photochimie semble très importante au vu des premières observations du JWST (Tsai *et al.*, 2023). La plateforme que nous avons développée au LISA va permettre de réaliser toutes ces mesures pendant les prochaines années. Pour appuyer ces recherches qui se dérouleront sur le long terme, nous avons notamment développé, dans le cadre de la thèse de Mathilde Poveda, des outils solides permettant le traitement de données de manière automatique et fiable. A l’image de ce qui a été fait pour le  $CO_2$  et  $C_2H_2$ , toutes ces données seront intégrées dans notre modèle cinétique afin d’évaluer l’impact de ces nouvelles données et bien sûr utiliser des données adaptées à l’étude des atmosphères chaudes.

Concernant la disponibilité des données de spectroscopie UV, elles sont mises en ligne sur le site web de l’ANR EXACT<sup>1</sup>, et aussi sur la base de données ExoMol (Tennyson et Yurchenko, 2012), qui a désormais une rubrique pour les données dans l’UV<sup>2</sup>. Nous avons établi une collaboration depuis quelques années avec cette équipe, et partageons notamment nos données expérimentales afin de contribuer au développement de modèles

1. <https://www.anr-exact.cnrs.fr/>

2. [https://exomol.com/data/data-types/xsec\\_VUV/](https://exomol.com/data/data-types/xsec_VUV/)

théoriques.



# Chapitre 4

## Couplage entre chimie et dynamique, du 1D au 3D

### 4.1 Introduction et mise en contexte

Jusqu'à très récemment, il existait globalement deux types de modèles atmosphériques, avec chacun leur limitation. D'une part, on trouvait les modèles à une dimension (e.g. Moses *et al.*, 2011; Venot *et al.*, 2012; Tremblin *et al.*, 2015; Tsai *et al.*, 2017), avec une description détaillée de la cinétique chimique mais une simplification de la circulation atmosphérique. D'autre part, on trouvait les modèles globaux de circulation générale (GCM) à trois dimensions (e.g. Showman *et al.*, 2009; Parmentier *et al.*, 2013; Leconte *et al.*, 2013; Mayne *et al.*, 2014; Charnay *et al.*, 2015; Mendonça *et al.*, 2016; Carone *et al.*, 2020; Lee *et al.*, 2022a), très complexes d'un point de vue physique, mais n'incluant pas de chimie (ou alors une composition chimique à l'équilibre). Les observations spectroscopiques d'exoplanètes fournissent des informations sur la composition chimique moyenne de tout le globe atmosphérique. Or, les courbes de phases obtenues avec les télescopes Spitzer et Hubble peuvent présenter une variabilité importante en fonction de la phase orbitale, ce qui prouve que la température, et donc possiblement la composition chimique, varie en fonction de la longitude sur la planète (e.g. Stevenson *et al.*, 2014b; Kreidberg *et al.*, 2018). Il est donc important, pour interpréter les observations d'exoplanètes, d'étudier les variations longitudinales de la composition atmosphérique. J'ai participé à plusieurs études ayant ce but, avec deux approches différentes. La première approche est la plus simple : utiliser un modèle à deux dimensions, pour simuler le déplacement d'une colonne d'atmosphère le long de l'équateur. La seconde approche est plus complexe, puisqu'il s'agit de coupler un GCM avec un modèle de cinétique chimique, ce qui représente un très grand challenge en terme de temps de calcul. Ma contribution à cette seconde approche a été cruciale et est à l'origine de ces travaux puisqu'elle a consisté à développer un schéma réduit pouvant être inséré dans un modèle à trois dimensions.

### 4.2 Développement d'un schéma réduit

Pour inclure la cinétique chimique dans un modèle à trois dimensions, il est impossible d'utiliser un schéma chimique tel que ceux développés dans le Chapitre 2 car la résolution des équations différentielles 'chimiques' sur toute la surface du globe, cumulée

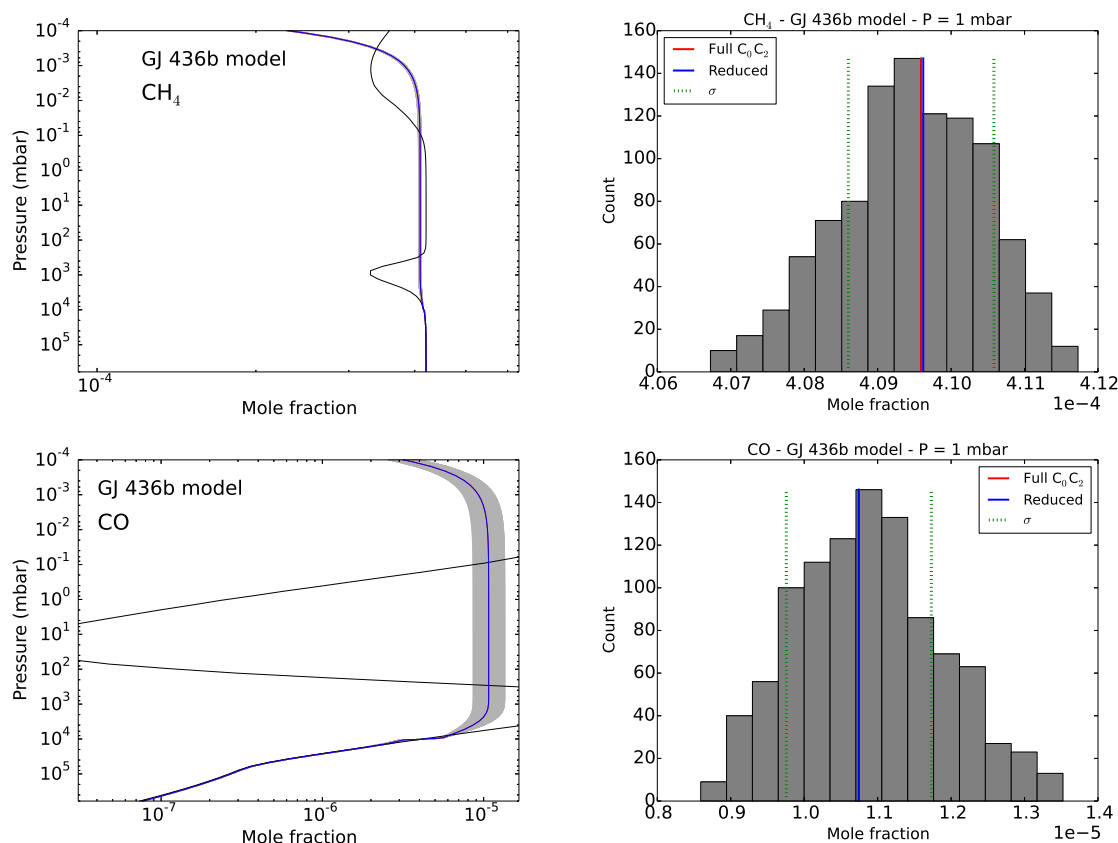
aux équations dynamiques 3D feraient exploser le temps de calcul d'un tel modèle. Une solution est d'inclure un schéma chimique réduit, se focalisant sur les espèces principales de l'atmosphère. Cette méthode a d'ailleurs été utilisée avec succès pour les GCM des planètes terrestres et les satellites du Système Solaire : Titan (Lebonnois *et al.*, 2001), Mars (Lefèvre *et al.*, 2004) et Vénus (Stolzenbach *et al.*, 2014; Stolzenbach, 2016; Gilli *et al.*, 2017). Typiquement, ces schémas réduits ont entre 10 et 40 espèces chimiques et entre 40 et 280 réactions chimiques. Nous avons donc décidé de développer un schéma chimique réduit à partir de mon schéma 'complet' (Venot *et al.*, 2012), qui, avec ses 105 espèces et 1920 réactions, est bien trop grand pour pouvoir être implémenté dans des modèles 3D. Le schéma chimique réduit se focalise uniquement sur la cinétique des espèces observables (en 2019) :  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{NH}_3$  et  $\text{HCN}$ , ce qui permet de réduire sa taille de plusieurs facteurs (Venot *et al.*, 2019). Pour le développer, nous avons réalisé une analyse de sensibilité afin de déterminer les espèces et réactions clés pour une description correcte des molécules d'intérêt dans les atmosphères d'exoplanètes chaudes. De la sorte, nous avons réduit le schéma complet à un schéma de 30 espèces et 362 réactions. Ce travail a abouti au premier schéma réduit pour atmosphères chaudes d'exoplanètes.

Pour vérifier la validité de ce schéma, nous avons réalisé des modèles atmosphériques dans des conditions différentes (températures, rapport d'abondances C/O, métallicités) avec les deux schémas chimiques (réduit et complet) et comparé les résultats obtenus (Figure 4.2, à gauche). Nous avons observé qu'ils étaient très similaires (souvent moins de 1%, voir Table 4.1) dans la gamme de pression sondée par les observations ([0,1–1000] mbar).

Pour aller plus loin qu'une simple comparaison des abondances verticales données par le modèle cinétique, nous avons réalisé une étude de propagation des incertitudes avec le schéma complet afin d'avoir une référence objective. En effet, la précision du modèle cinétique est liée aux incertitudes des coefficients de taux du schéma chimique. Les incertitudes de toutes les réactions se combinent les unes aux autres et se propagent de manière non linéaire dans le modèle cinétique à travers le système d'équations différentielles, résultant des équations de continuité. Pour étudier cette propagation d'incertitude, nous avons utilisé la méthode décrite dans Dobrijevic et Parisot (1998) et Dobrijevic *et al.* (2003), appliquée à un schéma chimique dont les réactions sont réversibles. La constante de vitesse de chaque réaction chimique directe a été estimée de façon pseudo-aléatoire en fonction de ses propres facteurs d'incertitude dépendant de la température Hébrard *et al.* (2015). Les ensembles de taux perturbés ont ensuite été utilisés pour exécuter le modèle cinétique et déterminer des compositions atmosphériques 'alternatives'. Ils représentent l'incertitude sur les abondances prédites. Nous avons effectué 1000 simulations de Monte-Carlo pour un modèle atmosphérique de GJ 436b, ce qui nous permet d'avoir des résultats statistiquement significatifs.

Il faut noter que nous n'avons pas tenu compte de l'incertitude potentiellement associée aux coefficients polynomiaux de la NASA (McBride *et al.*, 1993), utilisés pour calculer la constante d'équilibre. A notre connaissance, aucune incertitude sur ces coefficients n'a été évaluée jusqu'à présent (Goldsmith *et al.*, 2012). Un travail aussi ambitieux de recensement et d'analyse bibliographique serait nécessaire pour une évaluation complète de l'incertitude sur les abondances prédites.

La Figure 4.1 représente les profils verticaux des abondances (à gauche) et les histogramme des abondances à 1 mbar (à droite), avec l'écart-type ( $\sigma$ ) de la distribution. Ce niveau de pression est situé dans la zone où les abondances sont quenchées et est donc



**Figure 4.1** – A gauche : Profils d’abondance verticaux déterminés avec 1000 tirages MC avec le schéma chimique complet (lignes grises) pour CH<sub>4</sub> et CO. Les résultats nominaux du schéma chimique complet (lignes rouges), l’équilibre thermochimique (lignes noires), et les résultats obtenus avec le schéma réduit (lignes bleues) sont également représentés. A droite : Distribution correspondante des abondances à 1 mbar représentée par des barres grises, avec les abondances nominales du schéma complet (lignes rouges), les abondances obtenues avec le schéma réduit (lignes bleues), et les intervalles de 1- $\sigma$  autour des abondances nominales (lignes pointillées vertes). Les lignes bleues et rouges sont très proches sur chaque graphique. Issu de Venot *et al.* (2019).

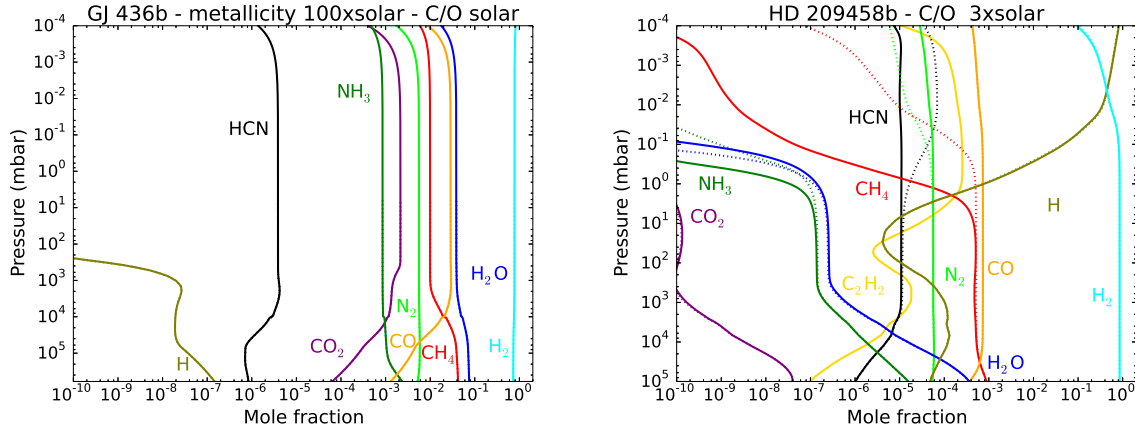
représentatif de la région sondée par les observations infrarouges ([0.1–1000] mbar). On peut voir que la distribution des abondances est fortement dépendante de l’espèce et de l’altitude. Nous avons déterminé que pour toutes les espèces, l’équilibre thermochimique est maintenu dans l’atmosphère profonde. La zone de quenching (propre à chaque espèce) reste la même mais le niveau exact de pression de quenching est légèrement modifié, conduisant à des variations au-dessus de ce point, à des pressions plus faibles. Pour CH<sub>4</sub> (et H<sub>2</sub>O, NH<sub>3</sub>), la largeur de la distribution d’abondance est très faible, alors que cette largeur est plus importante pour des espèces telles que CO (et CO<sub>2</sub>, HCN). Nous avons aussi observé que certaines espèces importantes, bien que ne figurant pas dans la liste des espèces ‘cibles’ du schéma réduit, sont cependant bien reproduites, comme H, N<sub>2</sub>, et CH<sub>3</sub>. Pour chaque espèce du schéma réduit, le schéma chimique réduit donne une abondance bien comprise dans l’intervalle de 1- $\sigma$  autour de l’abondance nominale obtenue avec le schéma chimique complet. Ces résultats nous ont permis de valider notre schéma réduit avec une méthode statistique.

Comme on peut voir sur la Figure 4.2, à droite, la seule limitation de ce schéma concerne les atmosphères chaudes et riches en carbone ( $T > 1000$  K et  $C/O > 1$ ), car

l'acétylène ( $C_2H_2$ ) devient très abondante. Cette espèce n'étant pas incluse dans le schéma réduit, la composition chimique calculée par le modèle réduit dans ce cas particulier n'est pas correct.

**Table 4.1** – Pour les modèles GJ 436b, avec diverses abondances élémentaires, différences maximales d'abondances (en %) pour chaque espèce pour laquelle le schéma réduit est conçu. Le niveau de pression (@pression en mbar) où la variation maximale est atteinte est indiqué entre parenthèses. Ces valeurs sont calculées uniquement dans la région [0,1–1000] mbar, qui est sondée par des observations infrarouges.

Species	Metallicity = 10	Metallicity = 100	C/O = 0.5 $\odot$	C/O = 3 $\odot$
H <sub>2</sub> O	$2 \times 10^{-2}$ (@ $1 \times 10^{-1}$ )	$2 \times 10^{-1}$ (@7)	$4 \times 10^{-4}$ (@ $1 \times 10^3$ )	$3 \times 10^{-3}$ (@ $5 \times 10^{-1}$ )
CH <sub>4</sub>	$6 \times 10^{-2}$ (@ $9 \times 10^2$ )	$6 \times 10^{-1}$ (@ $6 \times 10^2$ )	$2 \times 10^{-2}$ (@ $1 \times 10^3$ )	$6 \times 10^{-3}$ (@7)
CO	$1 \times 10^{-1}$ (@ $5 \times 10^2$ )	$2 \times 10^{-1}$ (@ $5 \times 10^2$ )	$8 \times 10^{-3}$ (@ $1 \times 10^3$ )	$7 \times 10^{-2}$ (@ $6 \times 10^2$ )
CO <sub>2</sub>	$2 \times 10^{-1}$ (@ $1 \times 10^{-1}$ )	$1 \times 10^{-1}$ (@7)	$2 \times 10^{-2}$ (@ $2 \times 10^1$ )	$9 \times 10^{-2}$ (@ $1 \times 10^2$ )
NH <sub>3</sub>	$1 \times 10^{-3}$ (@ $1 \times 10^{-1}$ )	$2 \times 10^{-2}$ (@ $6 \times 10^2$ )	$2 \times 10^{-3}$ (@ $1 \times 10^{-1}$ )	$1 \times 10^{-3}$ (@ $8 \times 10^2$ )
HCN	$1 \times 10^{-1}$ (@ $1 \times 10^{-1}$ )	$3 \times 10^{-1}$ (@ $4 \times 10^2$ )	$1 \times 10^{-2}$ (@ $1 \times 10^3$ )	$3 \times 10^{-2}$ (@ $1 \times 10^{-1}$ )



**Figure 4.2** – Compositions chimiques de GJ 436b avec une métallicité 100×solaire (à gauche) et de HD 209458b avec un rapport C/O = 3 × solaire (à droite), calculées avec le schéma réduit (pointillés) et avec le schéma complet Venot *et al.* (2012) (traits pleins). Issu de Venot *et al.* (2019).

Cette limitation a été résolue avec le développement d'un nouveau schéma chimique réduit, suite à l'actualisation du schéma concernant le sous-mécanisme lié à la chimie du Méthanol (Venot *et al.* 2020a, voir Sect.2.3.1). Nous avons alors développé un schéma chimique réduit actualisé, comprenant 44 composés et 582 réactions. Celui-ci est un peu plus grand que le précédent car il inclut cette fois  $C_2H_2$ . Tout comme le premier schéma réduit, celui-ci donne des résultats très similaires à ceux obtenus avec le schéma complet dont il est issu, avec des variations globalement inférieures à 1% dans la zone sondée par les observations, entre 0.1 et 1000 mbar.

Les nombres d'espèces ( $\sim 30/40$ ) et de réactions ( $\sim 300/500$ ) de ces schémas réduits sont du même ordre de grandeur que les schémas utilisés dans les GCM du Système Solaire (i.e. Lebonnois *et al.*, 2001), ce qui était le critère indispensable pour se lancer dans le développement d'un modèle cinétique à 3 dimensions (voir Section 4.4).

## 4.3 Modélisation pseudo-2D

Il y a une étape intermédiaire entre les modèles à une ou trois dimensions : explorer les variations longitudinales avec un modèle à deux dimensions. L'avantage d'un tel modèle est qu'il peut considérer une chimie complète, et non se contenter de fonctionner avec un schéma réduit. J'ai participé au développement de tous les modèles pseudo-2D actuels, dans lesquels la colonne d'atmosphère à une dimension, tourne le long de l'équateur (et traverse donc des températures différentes) ce qui imite la circulation horizontale. A travers plusieurs collaborations, supervisions et publications, j'ai étudié les atmosphères des jupiters chaudes et des neptunes chaudes.

### 4.3.1 Circulation atmosphérique des jupiters chaudes

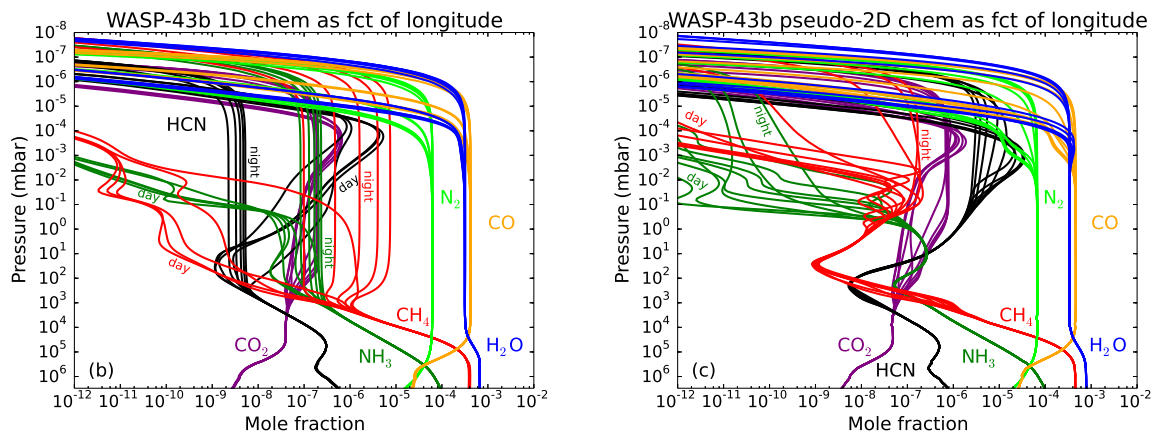
Le premier modèle de ce type (Agúndez *et al.*, 2012) fonctionnait avec le schéma chimique Venot *et al.* (2012), sans photodissociation. Ce modèle a été appliqué à l'étude des jupiters chaudes HD 189733b et HD 209458b. Nous avons par la suite amélioré ce modèle en incluant la photochimie (Agúndez *et al.*, 2014a). Ces modèles nous ont permis de déterminer qu'en plus du quenching vertical dû à la diffusion turbulente (phénomène observé dans les modèles 1D), la circulation horizontale engendre un quenching horizontal des espèces chimiques. La composition chimique est globalement homogénéisée à celle du côté jour, même si des variations d'abondances entre côté jour et côté nuit sont observées dans les couches les plus hautes de l'atmosphère (pressions faibles).

Dans le cadre d'un proposal JWST-Early Release Science de la Transiting Exoplanet Community<sup>1</sup>, j'ai établi une collaboration avec Julie Moses (Space Science Institute, USA), et nous avons développé un modèle pseudo-2D que nous avons appliqué à l'étude de la jupiter chaude WASP-43b (Venot *et al.*, 2020b). En comparant avec les résultats de mon modèle 1D, nous avons observé des résultats similaires à ceux que nous avons mis en évidence dans Agúndez *et al.* (2014a). L'atmosphère de WASP-43b a une composition chimique homogénéisée en longitude à celle du côté jour, en particulier pour les pressions plus grandes que 1 mbar. Pour les pressions plus faibles, on observe tout de même quelques variations d'abondance entre le côté jour et le côté nuit (Figure 4.3). Plus précisément, le modèle pseudo-2D de WASP-43b suggère que CH<sub>4</sub> serait un constituant relativement mineur dans l'atmosphère de cette planète à toutes les longitudes. Ce résultat est très important puisque le modèle 1D prédisait une forte abondance côté nuit (le méthane se reformant la nuit, sans l'effet de l'irradiation stellaire). De façon inverse, le modèle pseudo-2D montre que HCN, produit photochimiquement côté jour, serait plus abondant que CH<sub>4</sub> dans la photosphère infrarouge de WASP-43b à toutes les longitudes, alors que le modèle 1D prédisait une abondance plus faible que CH<sub>4</sub> côté nuit. Le modèle pseudo-2D montre aussi que les espèces clés (i.e. spectralement actives) H<sub>2</sub>O et CO ne varient pas beaucoup avec la longitude sur WASP-43b, en accord avec ce qui est trouvé par le modèle 1D. Finalement, nous avons aussi observé que le benzène (C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>), qui est un substitut des brumes photochimiques dans le modèle pseudo-2D, devient plus abondant aux longitudes nocturnes. Cela suggère que des brumes d'hydrocarbures réfractaires pourraient potentiellement être produites la nuit à partir de radicaux produits pendant les heures du jour, ce qui est en accord avec d'autres études (e.g. Miller-Ricci Kempton

---

1. Très large collaboration internationale regroupant des centaines de chercheurs en exoplanètes





**Figure 4.3** – Profils d’abondances verticaux des principaux constituants de WASP-43b à 10 longitudes différentes prédits à l’équilibre thermodynamique (à gauche) et prédits par le modèle pseudo-2D (à droite). Issu de Venot *et al.* (2020b).

*et al.*, 2012; Morley *et al.*, 2013, 2015). Depuis ce travail théorique, préparatoire aux observations de WASP-43b par JWST, les observations ont eu lieu et seront présentées dans le Chapitre 7, Section 7.4.

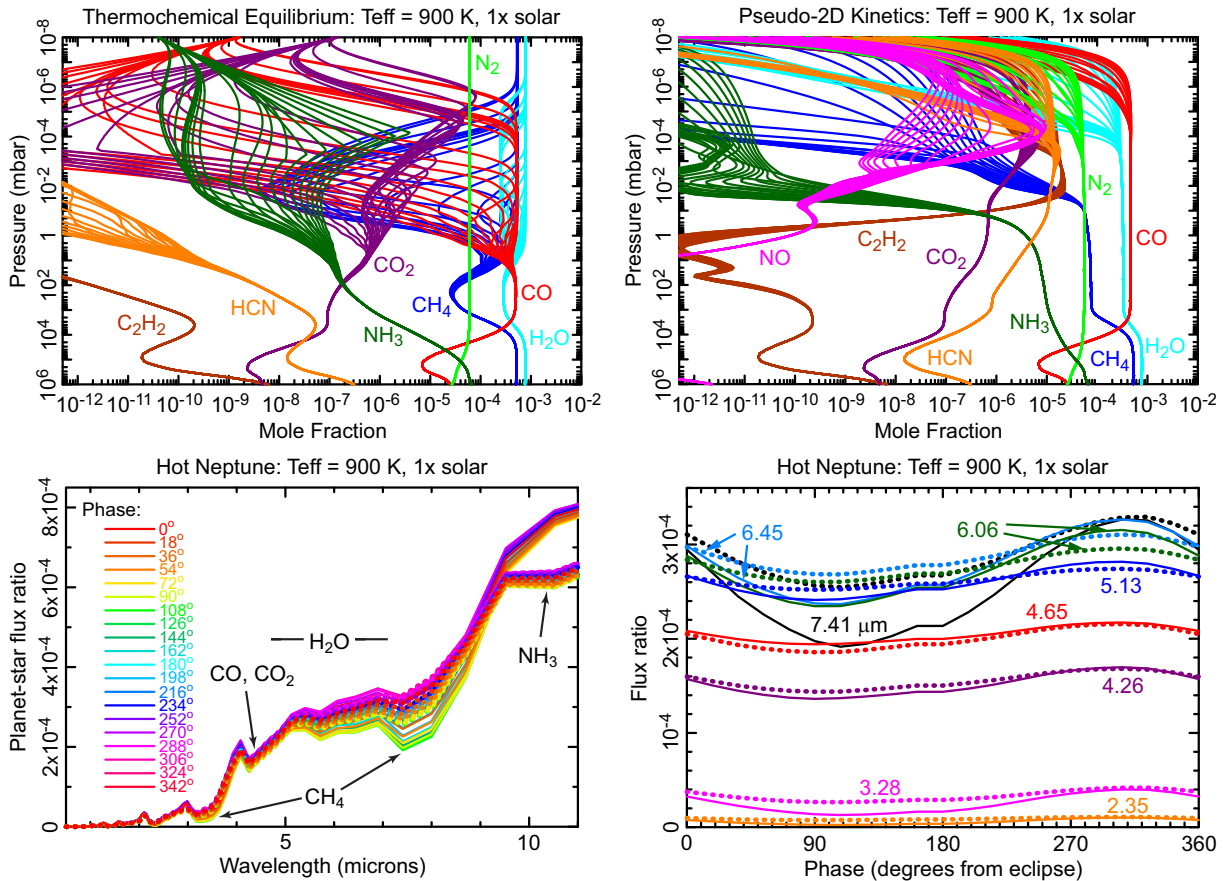
### 4.3.2 Circulation atmosphérique des neptunes chaudes

En parallèle de ces études sur les jupiters chaudes, je me suis intéressée à des planètes un peu plus petites : les neptunes chaudes. En effet, les observations réalisées par le satellite Kepler indiquent que les planètes de la taille de Neptune ou plus petites dominent la population d’exoplanètes dans notre galaxie. Pourtant, nous comprenons peu de choses sur la façon dont ces planètes se forment et évoluent ou sur la diversité de leurs atmosphères. C’est pourquoi, les exo-neptunes représentent une classe importante de planètes qui seront ciblées dans les années futures, que ce soit avec JWST ou Ariel. J’ai étudié ces objets particuliers, les neptunes chaudes, au travers de deux collaborations.

D’un côté, une série de deux papiers (Baeyens *et al.*, 2021, 2022a,b) dans lesquelles on a utilisé le modèle pseudo-2D développé dans Agúndez *et al.* (2014a) et utilisé le schéma chimique mis à jour en 2020 (Venot *et al.*, 2020a). Cette série d’études a été menée par Robin Baeyens, lors de sa thèse à l’Université de Leuven pour laquelle j’ai participé en tant que co-encadrante. Cette collaboration a découlé naturellement suite au post-doctorat que j’ai effectué dans ce laboratoire (2013-2016). Dans ces travaux, un nombre important de paramètres sont étudiés : douze températures effectives ( $T_{eff}$  de 400 à 2600 K), trois gravités de surface ( $\log g = 2, 3, 4$ ) et quatre types stellaires de l’étoile hôte (M, K, G, F), impactant le taux de rotation de la planète. Finalement, ce sont 144 modèles différents qui ont été créés. Les grilles de températures et les paramètres tels que le mélange vertical, la vitesse de rotation horizontale sont déterminés grâce à un GCM (MITgcm; Adcroft *et al.*, 2004). Une première étude (Baeyens *et al.*, 2021, 2022a) s’intéresse particulièrement au rôle des mélanges horizontaux et verticaux dans ces atmosphères, alors que la deuxième publication (Baeyens *et al.*, 2022b), étudie spécifiquement le rôle de la photochimie dans ce contexte à 2 dimensions.

De façon complémentaire à ce couple de papiers, j’ai initié une étude (Moses *et al.*,

2022), au sein du Groupe de travail Chimie de la mission Ariel que je coordonne (voir Section 8.2). Nous avons réalisé des modèles pseudo-2D de neptunes chaudes, sur une grille des paramètres plus petites : pour une étoile de type K, nous avons fait varier  $T_{\text{eff}}$  de 500 à 2100 K, résultant en 9 modèles. Dans cette étude, nous avons calculé la structure thermique de ces planètes grâce au modèle de transfert radiatif 2D-ATMO (Tremblin *et al.*, 2017), puis étudié leur composition chimique avec notre modèle pseudo-2D, utilisant un réseau chimique ‘complet’ (Moses *et al.*, 2011).



**Figure 4.4** – *En haut* : Profils d’abondances verticaux des principaux constituants d’une exoneptune avec  $T_{\text{eff}} = 900$  K à 20 longitudes différentes. La composition chimique prédite à l’équilibre thermodynamique est à *gauche*, celle prédite par le modèle pseudo-2D est à *droite*. *En bas* : Flux d’émission de la planète divisé par le flux d’émission de l’étoile correspondant aux composition ci-dessus. *A gauche* : en fonction de la longueur d’onde sur l’orbite de la planète, avec différents angles de phase orbitale (à partir de la géométrie d’éclipse définie comme la phase  $0^\circ$ ) en différentes couleurs. Les prédictions du modèle d’équilibre thermo-chimique sont représentées en courbes pleines et celles du modèle pseudo-2D en courbes pointillées ; *A droite* : en fonction de la phase orbitale à des longueurs d’onde spécifiques (codées en couleur, comme indiqué). Issus de Moses *et al.* (2022).

Dans ces trois études, nous avons exploré comment les températures et la composition chimique changent dans les régions équatoriales de ces exoplanètes et avons trouvé des résultats globalement semblables. Nous avons constaté que le quenching induit par le transport horizontal est très efficace dans les atmosphères d’exoneptunes, comme dans celles des jupiters chaudes (Agúndez *et al.*, 2014a; Venot *et al.*, 2020b). Les profils verticaux d’abondance sont homogénéisés avec la longitude, sauf à haute altitude dans la

stratosphère, où les processus photochimiques dominant (Figure 4.4, en haut). Cette homogénéisation horizontale est d'autant plus efficace que la température effective de la planète est faible. Dans les deux études, nous avons observé une dichotomie dans nos grilles de modèles. La composition chimique des planètes les plus froides ( $T_{eff} \leq 1100 - 1300$  K) présentent peu de variations en longitude, car la composition chimique du côté jour est quenchée et 'contamine' ainsi le côté nuit. Ces planètes présentent donc de fortes différences entre la composition chimique 2D calculée par nos modèles de chimie hors-équilibre et les prédictions d'équilibre thermochimique. Pour les planètes plus chaudes en revanche ( $T_{eff} \geq 1300 - 1400$  K) les températures atmosphériques sont suffisamment grandes pour que l'équilibre thermochimique puisse être maintenu par la cinétique chimique. Il y a donc peu de différences entre les abondances à l'équilibre et celles prédites par le modèle cinétique. On observe des variations longitudinales d'abondances (notamment  $\text{CH}_4$ ) qui suivent les variations de la température. Ces résultats ont des conséquences sur les observations attendues de ces planètes. Les spectres en émission que nous avons calculés pour les différents modèles (Figure 4.4, en bas) nous ont montré que les contrastes de température jour-nuit et l'amplitude des courbes de phase augmentent avec l'augmentation de la température effective. Nous avons déterminé que les exo-neptunes étaient de bonnes candidates pour les observations spectroscopiques, mais, en fonction de leurs températures atmosphériques effectives et d'autres propriétés atmosphériques telles que la métallicité et le régime chimique (c'est-à-dire équilibre thermochimique ou chimie hors-équilibre), elles ne sont pas toutes adaptées à tous les types d'observation.

- Les exo-neptunes avec une  $T_{eff} = 500 - 700$  K présentent des différences intéressantes dans les spectres d'émission selon que leurs atmosphères sont à l'équilibre thermochimique ou hors-équilibre, faisant d'elles des candidates appropriées pour la spectroscopie d'éclipse, dont le but serait de déterminer la composition atmosphérique, de contraindre les scénarios de formation planétaire et d'identifier les processus chimiques dominants dans les atmosphères.

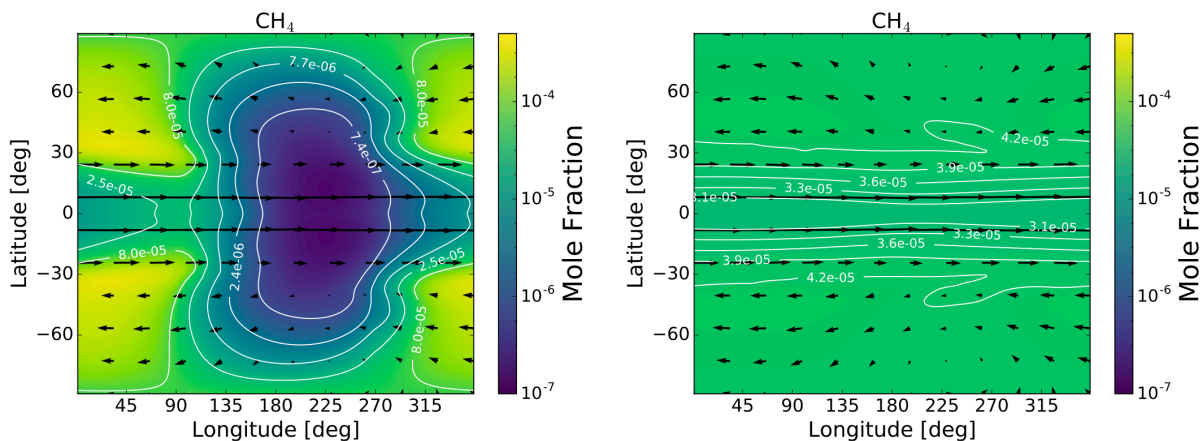
- Les exo-neptunes avec  $T_{eff} \geq 1300$  K ont des spectres d'émission qui varient fortement avec la phase orbitale, en raison de grandes variations diurnes des températures stratosphériques. Ces planètes sont donc de bonnes candidates pour les observations de courbes de phase afin d'améliorer notre compréhension de la structure thermique, du bilan énergétique et de la dynamique atmosphérique sur ces planètes. Cependant, la composition chimique de ces planètes chaudes présentant très peu de variation par rapport à l'équilibre thermodynamique, elles sont des cibles moins intéressantes d'un point de vue chimie.

- Nous avons déterminé que le régime de température intermédiaire  $T_{eff} = 900 - 1100$  K pourrait être idéal car les amplitudes des courbes de phase ne sont pas triviales (surtout aux grandes longueurs d'onde), et peuvent permettre de déterminer si l'atmosphère est dans un régime d'équilibre ou de déséquilibre chimique. Ces planètes de température intermédiaire semblent être d'excellentes cibles pour les observations de courbe de phase afin de contraindre les processus chimiques atmosphériques ainsi que les processus radiatifs et dynamiques.

## 4.4 Modèle 3D

Pour aller plus loin qu'un modèle 2D, dans lequel seule la composition à l'équateur est représentée, nous avons voulu étudier les variations de composition chimique avec la

latitude. Pour cela, il a fallu réaliser un modèle en 3 dimensions. Cela a été possible grâce au premier schéma réduit que j'ai publié (Venot *et al.*, 2019), qui a permis de développer le premier modèle 3D chimique-radiatif-hydrodynamique d'exoplanètes (Drummond *et al.*, 2020). J'ai commencé à collaborer avec Benjamin Drummond pendant sa thèse préparée à l'Université d'Exeter, pendant laquelle il a implémenté le schéma chimique que j'ai développé (Venot *et al.*, 2012) dans le code de transfert radiatif-convectif ATMO (Drummond *et al.*, 2016). Cette collaboration établie s'est naturellement poursuivie dans le cadre de ce projet. Le modèle 3D utilisé (the Met Office Unified Model) qui fonctionnait jusqu'à présent avec une chimie très simplifiée (méthode de relaxation chimique, Drummond *et al.* 2018) a été couplé au réseau chimique réduit. Il s'agit du premier modèle 3D chimique-radiatif-hydrodynamique. Le modèle cinétique 3D a été appliqué aux deux jupiters chaudes de référence HD 209458b et HD 189733b. Les résultats nous permettent de voir l'homogénéisation de la composition chimique avec la longitude à l'équateur, confirmant les résultats des modèles pseudo-2D de ces deux planètes que nous avons développés (Agúndez *et al.*, 2012, 2014a), mais également de voir pour la première fois les variations de la composition chimique avec la latitude (voir Figure 4.5).

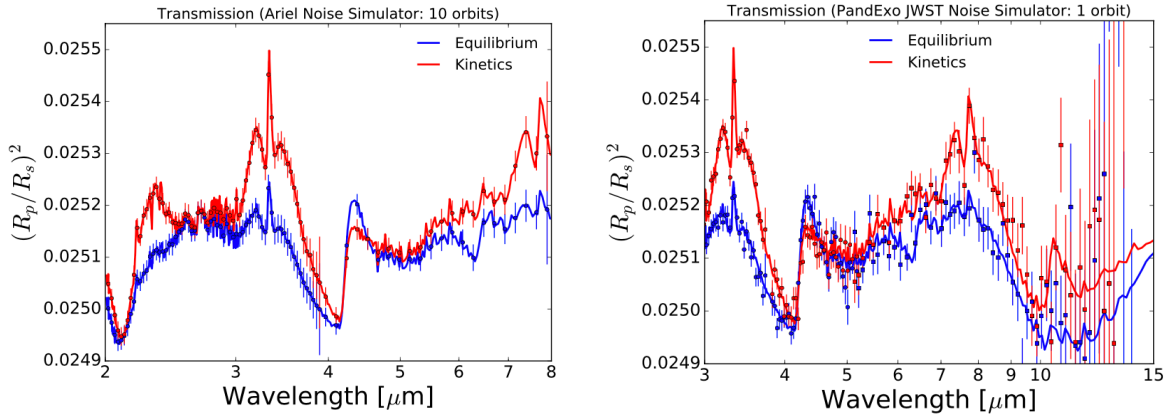


**Figure 4.5** – Cartes d'abondance de  $\text{CH}_4$  à l'équilibre thermochimique (à gauche) et déterminée avec le modèle cinétique 3D (à droite) dans HD 189733b au niveau de pression 0.1 bar. Issu de Drummond *et al.* (2020).

Le modèle 3D conduit à des cartes de composition chimique différentes de ce qui aurait pu être déterminé en supposant un équilibre thermochimique ou calculé par des modèles cinétiques 1D/2D, ce qui montre l'importance d'utiliser des modèles cinétiques 3D. Nous avons déterminé que  $\text{CH}_4$ ,  $\text{CO}_2$  et  $\text{NH}_3$  sont des espèces chimiques particulièrement intéressantes car elles engendrent des signatures prouvant la présence d'une chimie hors-équilibre dans les spectres en émission et transmission, détectables en théorie avec les télescopes JWST et Ariel (Figure 4.6).

## 4.5 Conclusions et Perspectives

Le développement de schémas chimiques réduits adaptés aux hautes températures des planètes géantes gazeuses chaudes a permis d'aboutir au premier modèle chimique en trois dimensions. Les résultats obtenus, différents des prédictions des modèles 1D et 2D,



**Figure 4.6** – Spectres en transmission pour les simulations de HD 189733b à l’équilibre thermochimique (bleu) et avec la cinétique chimique (rouge). Ceux-ci simulent les observations obtenues par Ariel (à gauche) et par JWST (à droite) avec des nombres variables de transits observés. Issu de (Drummond *et al.*, 2020).

prouvent la nécessité de développer de tels modèles sophistiqués, surtout dans le contexte actuel où les observations ont (et vont) grandement gagné(er) en précision (JWST, ELT, Ariel). Je compte poursuivre mes recherches dans cet axe en développant des schémas chimiques réduits au fur et à mesure que les schémas complets seront mis à jour, afin de garantir une mise à niveau optimale pour les modèles 3D. En particulier, dès l’ajout de nouveaux éléments chimiques (comme S et P, voir Chapitre 2), un schéma chimique réduit correspondant sera développé. Des perspectives de collaboration dans ce but sont en train d’émerger, en particulier avec une équipe de l’Université de Leuven.

A l’heure actuelle, l’équipe de l’Université d’Exeter, avec laquelle j’échange régulièrement, est la seule à avoir développé avec succès un modèle chimique 3D. En parallèle de cette collaboration, je travaille également avec les équipes du LESIA et du LMD pour implémenter mon réseau chimique réduit dans le modèle de circulation générale du LMD, le PCM générique (Forget *et al.*, 2022). Nous avons commencé ce projet dans le cadre d’un stage de Master 2, réalisé entre mars et juin 2021 par Roméo Veillet, que j’ai co-encadré avec Benjamin Charnay et Yassin Jaziri. Le réseau réduit a été implémenté, mais les temps de calcul s’avèrent trop grand pour réaliser des simulations de façon raisonnable. Un travail sur le système de résolution numérique est nécessaire et est actuellement en cours.

Bien sûr, les modèles 2D, comme ceux présentés ici sont moins coûteux en terme de temps de calcul et permettent de faire des études plus générales. Ces modèles restent donc tout à fait intéressants pour faire des études de population et avoir des premières idées des variations en longitude. Les résultats obtenus avec ce type d’études en 2D ont des implications importantes pour la planification et la priorisation des observations de courbes de phase avec Ariel et d’autres missions spectroscopiques telles que le JWST.

## Deuxième partie

### Interprétation et prédictions des observations



# Chapitre 5

## Amélioration des modèles d'inversion

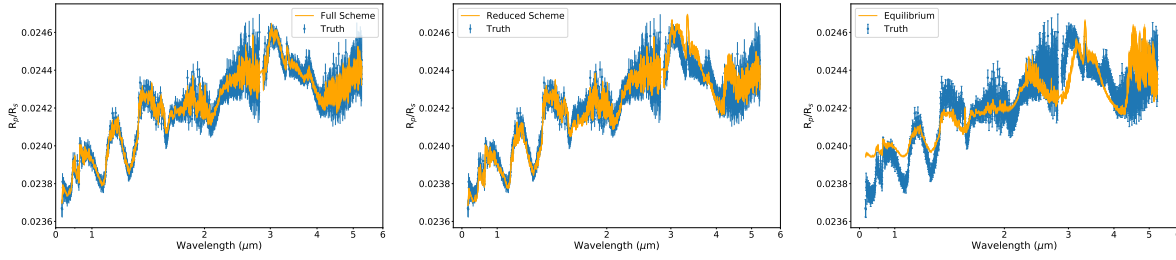
### 5.1 Introduction et mise en contexte

Les spectres infrarouges des exoplanètes sont analysés à l'aide de modèles d'inversion de données (*retrieval models*), permettant de retrouver les caractéristiques de l'atmosphère des exoplanètes, comme le profil thermique, et de contraindre les abondances des principales molécules. D'importantes recherches ont été menées ces dernières années pour évaluer et réduire les biais associés à l'interprétation des données spectroscopiques des exoplanètes (Rocchetto *et al.*, 2016; Baudino *et al.*, 2017, qui seront détaillés dans le Chapitre 7, Section 7.3). Dans Rocchetto *et al.* (2016), nous avons déterminé que le fait de considérer un profil isotherme engendrait des biais importants sur les abondances moléculaires retrouvées qui étaient surestimées d'environ un ordre de grandeur. Une solution est d'utiliser une méthode qui consiste à paramétriser le profil thermique. Quand cette méthode est utilisée, le profil thermique retrouvé est lui aussi bien meilleur. Concernant l'hypothèse des profils d'abondance verticaux constants avec l'altitude, nous avons trouvé qu'elle pouvait s'avérer être plutôt bonne pour les atmosphères avec des rapports C/O < ou > 1, mais pas pour le cas C/O = 1. Cette étude nous a démontré qu'il était nécessaire d'utiliser des profils d'abondance chimique plus complexe dans les modèles d'inversion.

### 5.2 Comment considérer la chimie dans les modèles d'inversion de données ?

D'énormes progrès ont été réalisés ces dernières années pour améliorer les modèles d'inversion de données et prendre en compte différents effets et processus influençant les spectres planétaires. Ces développements prennent en compte les effets des nuages (Min *et al.*, 2020) ou bien la géométrie particulière des observations d'exoplanètes (Blecic *et al.*, 2017; Pluriel *et al.*, 2020b). Avec mes collègues de l'Université de Londres (UCL), qui sont les leaders dans le domaine du *retrieval*, nous nous sommes concentrés sur la représentation de la chimie qui est souvent approximée de façon simpliste (profils verticaux d'abondances constants) ce qui peut mener à des biais importants, comme nous l'avons montré dans Rocchetto *et al.* (2016). J'ai ainsi collaboré à inclure des représentations un peu plus complexes de la composition chimique dans le modèle d'inversion TauREx, à travers tout d'abord une paramétrisation 'à deux niveaux', afin de reproduire le quenching (Changeat *et al.*, 2019), puis en considérant une composition à l'équilibre thermo-chimique (Al-Refae





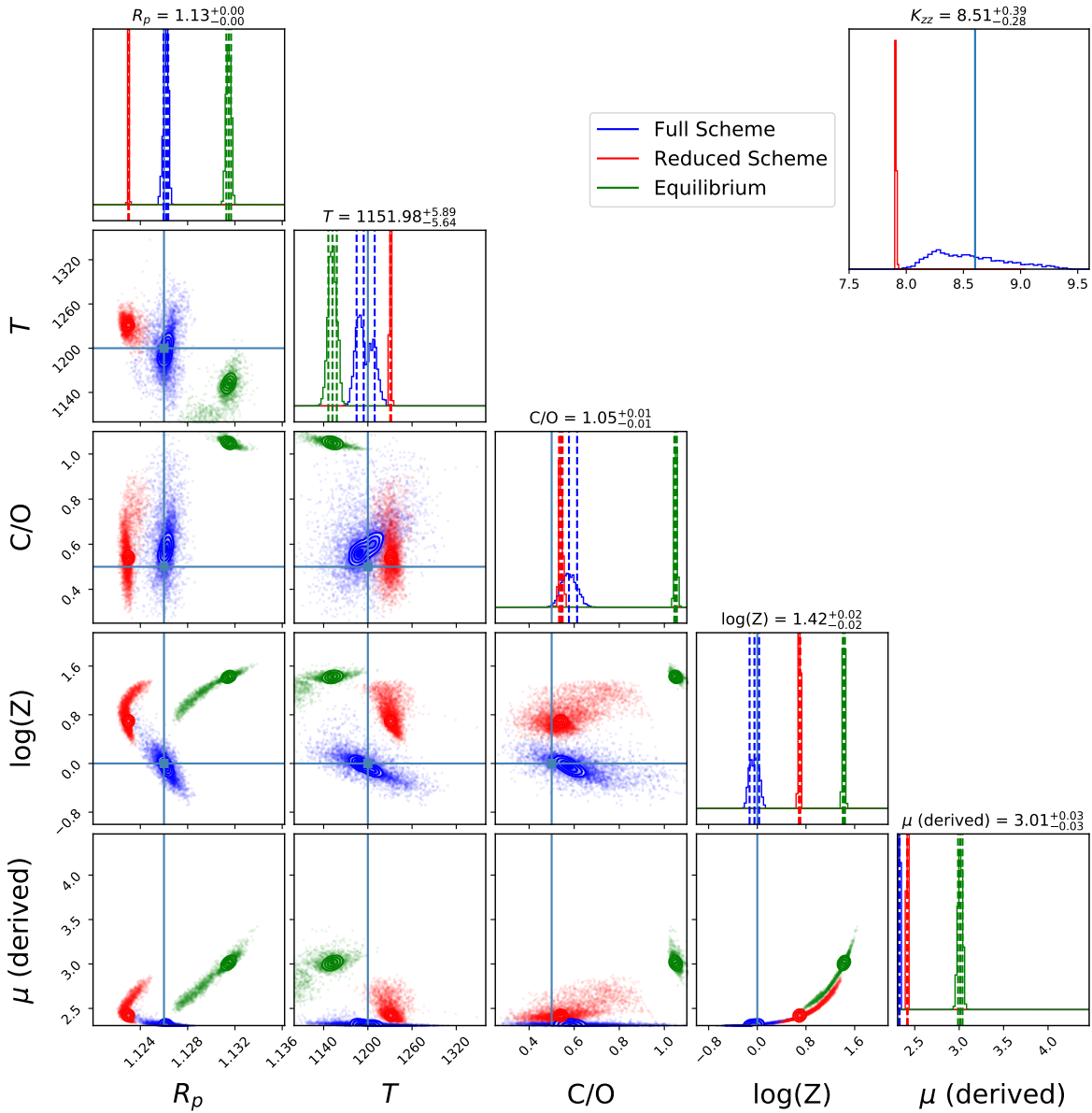
**Figure 5.1** – Observations simulées de HD 189733b avec JWST (bleu) avec les meilleurs ajustements retrouvés par TauREx (orange) en utilisant une chimie hors-équilibre avec le schéma complet (à gauche), avec le schéma réduit (au centre) et en supposant l’équilibre thermochimique (à droite). Issu de Al-Refaie *et al.* (2022b)

*et al.*, 2022a). Après ces développements qui représentent déjà d’importants progrès, nous avons développé un modèle d’inversion encore plus sophistiqué, en incluant le calcul de la chimie hors-équilibre dans TauREx (Al-Refaie *et al.*, 2022b). Cette étape a été réalisée en couplant mon modèle cinétique (réécrit en Python, alors qu’initialement en Fortran 90, et baptisé par la même occasion FRECKLL) au modèle TauREx. Ce couplage a été possible grâce au système de ‘plugin’ implémenté dans TauREx 3.1.

Nous avons testé et validé ce modèle en prenant HD 189733b comme cas d’étude. Après avoir simulé sa composition chimique hors-équilibre (en 1D), nous avons généré le spectre en transmission correspondant en haute-résolution, qui a ensuite été convolué avec la réponse des instruments du JWST, NIRISS GR700XD et NIRSpec G395M. Les barres d’erreur ont été obtenues en utilisant le simulateur d’instrument ExoWebb (Edwards *et al.* en prép), qui est basé sur le modèle radiométrique de Edwards et Stotesbury (2021).

Ces observations simulées ont ensuite été analysées avec TauREx en utilisant l’hypothèse de chimie à l’équilibre et celle d’une chimie hors-équilibre, en utilisant deux schémas chimiques, le complet et le réduit (Venot *et al.*, 2020a). Il faut noter que le schéma réduit n’inclut pas de photodissociation. Le spectre simulé et les meilleurs ajustements avec chaque modèle sont représentés sur la Figure 5.1. Les distributions postérieures et les profils d’abondances correspondants sont respectivement sur les Figures 5.2 et 5.3.

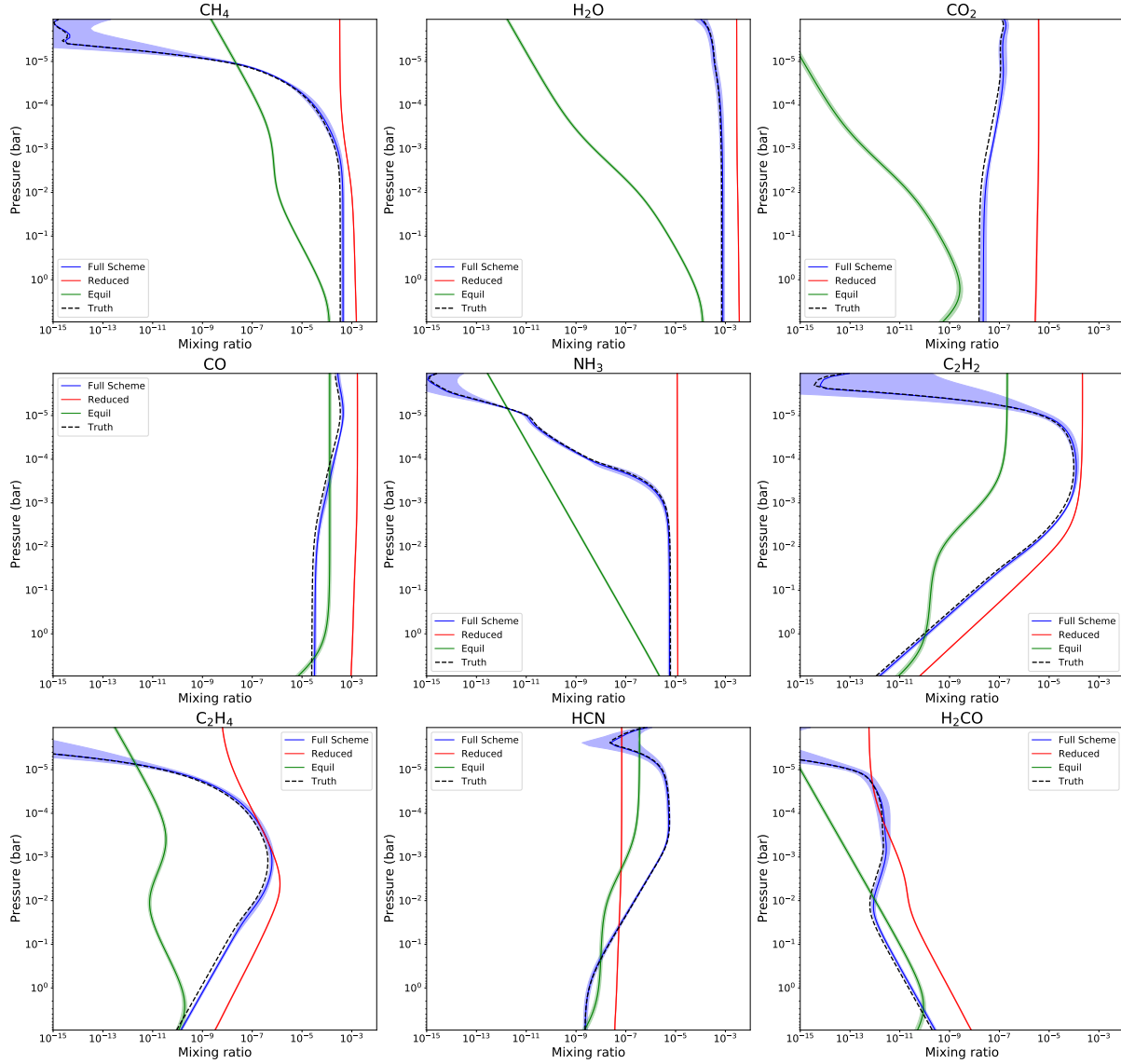
Nous voyons que, comme espéré, le spectre ajusté avec le schéma complet correspond aux observations. De plus, les paramètres libres retrouvés sont proches de la vraie valeur choisie (voir Figure 5.2), et les profils chimiques récupérés correspondent aux entrées dans les limites des incertitudes (voir Figure 5.3). Notamment, le mélange vertical  $K_{zz}$  est bien défini et récupéré avec précision lorsqu’on utilise la chimie hors-équilibre avec le schéma complet, ce qui implique que les processus de déséquilibre sont observables avec le JWST. Cela avait également été démontré dans des travaux antérieurs (e.g. Greene *et al.*, 2016; Blumenthal *et al.*, 2018; Molaverdikhani *et al.*, 2019; Drummond *et al.*, 2020; Venot *et al.*, 2020b). La métallicité retrouvée ( $Z = 1,42$ ) est très proche de la valeur d’entrée qui était



**Figure 5.2** – Postérieurs de l’inversion du spectre JWST simulé de HD 189733 b en utilisant les réseaux chimiques complet (bleu) et réduit (rouge) de Venot *et al.* (2020a) et la chimie à l’équilibre (vert) de Agúndez *et al.* (2012). Issu de Al-Refaie *et al.* (2022b).

la métallicité solaire ( $Z = 1$ ).

Pour l’inversion de données utilisant le schéma réduit, le spectre le mieux ajusté est à la plupart des longueurs d’onde capable de reproduire les observations, mais nous observons de grands écarts à certaines bandes. Par exemple, la bande du méthane à 3,6  $\mu\text{m}$  n’est pas bien ajustée par le schéma réduit, ce qui résulte ici en une abondance de méthane surestimée. En raison du couplage entre molécules lié à la cinétique chimique et l’absence de photodissociation, l’inversion de données utilisant le schéma réduit est incapable de déduire l’abondance de  $\text{CH}_4$  sans affecter les autres molécules importantes de l’atmosphère, comme le prouve la Figure 5.3. Pour la plupart des paramètres que l’on cherche à retrouver, les valeurs réelles sont en dehors des valeurs retrouvées à plus de  $1\sigma$ .



**Figure 5.3** – Profils d’abondances chimiques retrouvés en utilisant le modèle de chimie réduite (rouge), de chimie complète (bleu) et de chimie à l’équilibre (vert) pour les simulations de HD 189733 b. Issu de Al-Refaeie *et al.* (2022b).

Par exemple, la métallicité retrouvée est d’environ  $Z = 6$  alors que la métallicité réelle était solaire ( $Z = 1$ ). Ceci est problématique car cela pourrait conduire à des interprétations incorrectes, d’autant plus que ce paramètre est couramment utilisé pour relier la composition atmosphérique à la formation planétaire (Öberg *et al.*, 2011; Moses *et al.*, 2013; Madhusudhan *et al.*, 2016; Line *et al.*, 2021).

Finalement, en ce qui concerne l’inversion de données utilisant l’hypothèse d’équilibre thermochimique, nous trouvons également que les paramètres récupérés sont la plupart du temps en dehors des vraies valeurs à plus de  $1\sigma$ . Si on prend comme exemple la métallicité à nouveau, l’inversion de données supposant une chimie à l’équilibre, retrouve une valeur de  $Z = 32$ !

## 5.3 Conclusions et Perspectives

Notre étude montre qu'un modèle d'inversion de données utilisant une hypothèse d'équilibre thermochimique ou utilisant un schéma cinétique réduit (sans photodissociation) conduit à de forts biais. Les profils chimiques récupérés, comme le montre la Figure 5.3, présentent de grands écarts par rapport aux données d'entrée, les principales molécules étant souvent différentes de plus de deux ordres de grandeur. Dans les deux cas, les prédictions sont trop confiantes et ne reflètent pas l'information brute contenue dans le spectre. Cela est dû aux hypothèses (chimie à l'équilibre ou liste présélectionnée de réactions) introduites dans ces modèles. Ces résultats confirment qu'il est important d'investiguer les biais induits par l'utilisation de fortes hypothèses dans les modèles d'inversion. Ici, nous nous sommes intéressés aux hypothèses sur la composition à l'équilibre thermochimique ou utilisation de modèles cinétiques chimiques réduits, mais ces questions avaient déjà été soulevées dans d'autres études (Changeat *et al.*, 2019, 2020a; Al-Refaeie *et al.*, 2022a) et même sur les inversions de données unidimensionnelles (Feng *et al.*, 2016; Caldas *et al.*, 2019; Taylor *et al.*, 2020; Changeat et Al-Refaeie, 2020; MacDonald *et al.*, 2020; Skaf *et al.*, 2020; Pluriel *et al.*, 2020b).

Cette étude, qui couple pour la première fois un modèle d'inversion de données et un modèle de cinétique chimique, montre qu'une telle analyse de données complexe permet une meilleure compréhension des observations d'exoplanètes que ce qui était possible auparavant et de surmonter les biais de l'hypothèse plus traditionnelle de l'équilibre thermochimique. Avec la précision des observations JWST, et les futures observations d'Ariel, une telle analyse des données sera très certainement nécessaire. Je compte approfondir l'utilisation de ce type de modèle d'inversion de données sophistiqué, afin que son utilisation soit plus généralisée. Cela se fera dans un premier temps grâce au post-doctorat de Déborah Bardet, financé sur mon ANR EXACT. Ensemble, nous allons utiliser ce modèle sur différentes cibles JWST, ainsi que sur des simulations préparatoires aux observations d'Ariel.

Le seul point limitant à l'utilisation d'un tel modèle sera le temps de calcul. Pour les modèles d'inversion sur le spectre de HD189733b, les temps de calcul nécessaires ont été de : 24 h pour le modèle cinétique avec schéma complet, 8 h pour le schéma chimique réduit, et 20 minutes pour le modèle considérant l'équilibre thermochimique. Pour remédier à cela, je compte explorer les possibilités qu'offre l'Intelligence Artificielle, et en particulier le Machine Learning. Des études récentes montrent que des algorithmes de réseaux de neurones sont très prometteurs pour accélérer la cinétique chimique (e.g. Owoyele et Pal, 2022; Grassi *et al.*, 2022; Hendrix *et al.*, 2023). J'ai commencé à ouvrir cette nouvelle voie dans le cadre de stage d'Ingénieur de Lorenzo Buizza, dont l'encadrement a été partagé avec Orphée Faucoz (CNES), Pascale Danto (CNES) et Adriana Coman (LISA). Les résultats de ce stage encouragent à poursuivre les études dans cette voie.



# Chapitre 6

## Analyses de données du Hubble Space Telescope

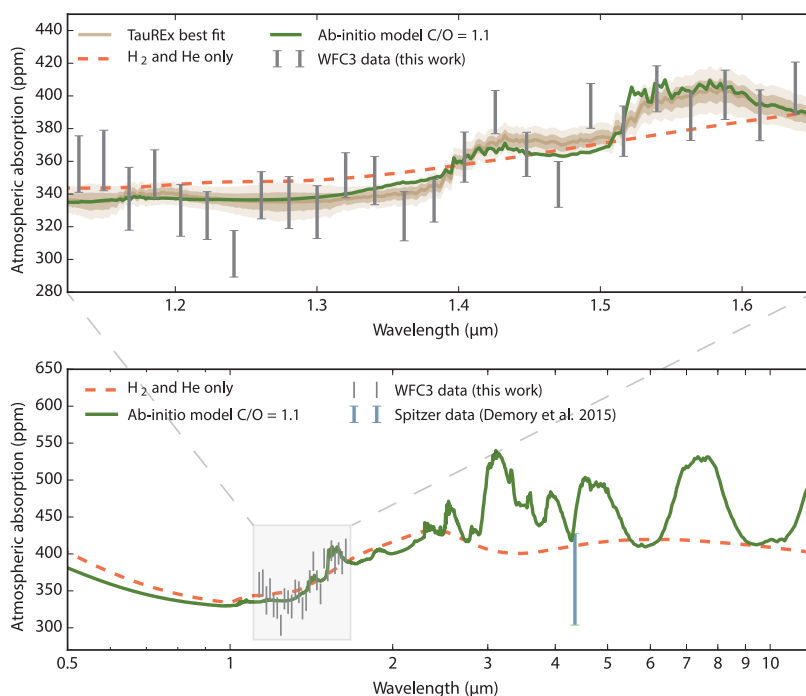
### 6.1 Introduction et mise en contexte

A l'heure actuelle, sur les  $\sim 5000$  exoplanètes connues, environ 80 d'entre elles ont été observées par spectroscopie grâce aux télescopes spatiaux Hubble (HST) et Spitzer, mais aussi des télescopes au sol (e.g. VLT, IRTF, Subaru, Magellan). Ces jeux de données ont fait l'objet de nombreuses analyses, et ré-analyses, permettant de déceler des signatures de molécules chimiques. Bien que les gammes spectrales accessibles avec ces instruments soient limitées et aboutissent parfois à des dégénérescences sur les modèles ou des désaccords entre analyses (Himes et Harrington, 2022), ces observations ont tout de même permis des avancées et découvertes majeures concernant les atmosphères exoplanétaires. Les observations, et leur analyse, ne constituent pas le coeur de mes recherches, cependant, leur interprétation requière des modèles et une expertise en chimie atmosphérique. J'ai donc participé, à plusieurs études sur des données observationnelles d'exoplanètes. Depuis les analyses 'individuelles' de planètes, ces études ont évoluées vers des études de populations afin de tirer des tendances globales sur la composition chimique des exoplanètes. Dans ce chapitre, je reviens sur les études principales dans lesquelles j'ai été impliquée.

### 6.2 Détection d'une molécule dans l'atmosphère d'une super-terre

Dans Tsiaras *et al.* (2016a), nous avons analysé les observations infrarouge de la super-terre 55 Cancri e obtenu avec l'instrument Wide Field Camera 3 (WFC3) du HST (ID : 13665, PI : Benneke). Avant cette analyse, les seules précédentes observations spectroscopiques de super-terres/mini-neptunes (GJ 1214b et HD 97658b) ne semblaient pas présenter de modulation de la profondeur de transit avec la longueur d'onde (Knutson *et al.*, 2014; Kreidberg *et al.*, 2014). Ces résultats suggéraient donc que les atmosphères de ces planètes étaient soit couvertes de nuages épais, soient constituées de molécules très lourdes. Les données que nous avons analysées dans cette étude sont comprises entre 1,1 et 1,7  $\mu\text{m}$ . Nous avons procédé à une analyse de données avec le logiciel qui s'appelle désormais Iraclis (Tsiaras *et al.*, 2016b), puis nous avons effectué une inversion de don-

nées avec TauREx (Waldmann *et al.*, 2015a,b). Nous avons pu détecter une modulation du spectre, à  $6\sigma$  d'un modèle de ligne droite, suggérant donc que cette planète possède une atmosphère. Selon les meilleurs ajustements du modèle d'inversion de données, cette atmosphère est légère, constituée en majorité d'hydrogène et d'hélium. Nous n'avons pas pu détecter la présence de vapeur d'eau, cependant les signatures spectrales à 1,42 et 1,54  $\mu\text{m}$  suggèrent la présence de la molécule de HCN dans l'atmosphère, avec une abondance relativement importante, supérieure à  $10^{-5}$ . Afin d'affiner l'abondance de HCN nécessaire pour reproduire les observations et interpréter cette découverte, nous avons réalisé des modèles atmosphériques pour cette planète, en utilisant le modèle cinétique de Venot *et al.* (2012). Comme indiqué par l'inversion de données, nous avons supposé une atmosphère riche en hydrogène. Pour les différents modèles réalisés, des spectres synthétiques ont été calculés et comparés aux données d'observations. Le meilleur s'est révélé être celui d'une atmosphère contenant une abondance de HCN de  $\sim 10^{-5}$ , correspondant à un rapport  $\text{C/O} = 1,1$  (Figure 6.1).



**Figure 6.1** – En haut : spectre de transmission infrarouge de la super-terre chaude 55 Cancri e (barres d'erreur grises), meilleur ajustement obtenu avec TauREx (ligne brune), modèle ajusté contenant uniquement de l'hydrogène et de l'hélium (ligne orange pointillée), et un modèle ab-initio avec  $\text{C/O}=1,1$  (ligne verte). Les régions ombragées montrent les intervalles de confiance de 1 et  $2\sigma$  dans le spectre récupéré. En bas : les mêmes modèles hydrogène/hélium et ab-initio  $\text{C/O}=1,1$  représentés dans une gamme de longueurs d'onde plus large. Comme nous pouvons le voir, les deux modèles peuvent être mieux distingués à de plus grandes longueurs d'onde. La profondeur de transit moyenne de 55 Cancri e à 4,5  $\mu\text{m}$  obtenue avec le télescope spatial Spitzer (Demory *et al.*, 2016) est également représentée en bleu clair. Issu de Tsiaras *et al.* (2016a).

Cette étude confirme que HCN peut être utilisé comme traceur du rapport  $\text{C/O}$ , comme cela avait été proposé dans une de mes précédentes études (Venot *et al.* 2015, voir Sect. 7.2.1). Des atmosphères aussi riches n'ont pas d'équivalent dans le Système Solaire et sont de formidables objets d'études pour contraindre les scénarios de formation pla-

nétaires (Öberg *et al.*, 2011; Turrini *et al.*, 2021). Cependant, les données traitées dans cette étude ne représentent qu'une toute petite partie du spectre et des données à plus grandes longueurs d'onde permettraient de confirmer les résultats trouvés. En particulier, on voit sur la Figure 6.1 (en bas) que les modèles C/O=1,1 et contenant uniquement de l'hydrogène/hélium sont aisément différenciables au delà de  $3 \mu\text{m}$ . Cette étude s'avère être la première détection d'une molécule dans l'atmosphère d'une super-terre et a fait l'objet d'un 'highlight Nature', ainsi que de nombreux communiqués de presse, dont un ESA/HST. Depuis, des nouvelles observations à haute résolution de 55 Cnc e remettent en question cette possible détection de HCN (Deibert *et al.*, 2021). Pour une atmosphère légère, comme nous l'avons supposé dans Tsiaras *et al.* (2016a), la présence de HCN avec une abondance supérieure à  $10^{-5}$  est exclue. En revanche, une telle abondance pourrait être possible si la masse moléculaire de l'atmosphère est plus élevée. Des nouvelles observations avec notamment le JWST seraient intéressantes pour contraindre la composition de cette planète.

### 6.3 Analyser les observations actuelles de d'exoplanètes en orbite proche

Beaucoup d'exoplanètes sont observées à l'heure actuelle grâce au télescope spatial Hubble (HST) et notamment avec l'instrument WFC3. Certaines de ces données sont maintenant tombées dans le domaine public et peuvent être analysées par des équipes différentes des proposaux originaux. J'ai pu participer à l'analyse de plusieurs jeux de données, notamment dans le cadre de la thèse d'Emilie Panek dont je co-encadre la thèse à l'IAP, mais aussi dans le cadre de projets d'analyses initiés à l'école ARES, à laquelle j'ai participé en tant d'enseignante (Biarritz, septembre 2019). Plusieurs types d'exoplanètes ont été étudiées : jupiter chaude et ultra-chaude, neptune chaude et mini-neptune, super-terre chaude. Dans tous les cas, nous avons analysé les données HST, obtenues avec l'instrument WFC3, avec le logiciel Iraclis et le code d'inversion de données TauREx. Mon implication dans ces papiers issus de l'école ARES a été de l'ordre de la supervision et de l'expertise, aussi, je ne rentrerai pas dans les détails de chacune de ces publications. J'en donne ici les grandes lignes et principaux résultats.

Dans Edwards *et al.* (2020), nous avons réanalysé les spectres en transmission et émission de la jupiter ultra-chaude WASP-76b, en prenant en compte la présence d'un compagnon stellaire plus faible que ce qui avait été supposé précédemment. En supprimant les effets de cette étoile, la signature des absorbeurs TiO et VO (observée sur les précédentes analyses) disparaît sur les spectres en transmission. Cependant la signature de TiO apparaît toujours sur les spectres en émission. Des observations plus approfondies de cette planète s'avèrent donc nécessaires afin de mieux comprendre la nature de son atmosphère, et de confirmer ou non la présence de TiO.

Nous avons également étudié les jupiters chaudes WASP-127b, WASP-79b et WASP-62b dans Skaf *et al.* (2020). Les analyses des données spectroscopiques de ces trois planètes permettent de détecter dans tous les cas la présence de H<sub>2</sub>O et de FeH. En revanche, il n'est pas possible de détecter la présence d'autres molécules sur la gamme de longueur d'onde assez réduite des données (1,088-1,68  $\mu\text{m}$ ). Ces planètes sont donc, elles aussi, des



cibles intéressantes pour de futures observations, notamment avec JWST et Ariel afin de mieux caractériser leur atmosphère et comprendre l'origine de FeH.

Une autre jupiter chaude, KELT-7b, a été étudiée dans Pluriel *et al.* (2020a). Alors que le spectre en transmission a permis de déterminer que l'atmosphère de cette planète était sans nuage et contenait de la vapeur d'eau et des ions  $\text{H}^-$ , le spectre en émission ne présente aucune signature spectrale. Nous avons tenté une nouvelle analyse en ajoutant d'autres observations disponibles pour cette planète (obtenues avec les télescopes TESS et Spitzer) et observé que les conclusions changeaient. Avec ces nouvelles données, la molécule CO devient alors détectable en transmission, mais la détection de  $\text{H}^-$  disparaît, au profit de FeH. Concernant les données en émission,  $\text{H}_2\text{O}$  devient détectable. Cette étude montre qu'il faut être prudent lorsqu'on combine des données de sources différentes et qu'une analyse préalable des jeux individuels est fortement conseillé pour détecter d'éventuels biais. Cette planète nécessite elle aussi des observations complémentaires, sur un domaine spectral plus grand afin de mieux caractériser son atmosphère.

Dans Guilluy *et al.* (2021), nous nous sommes également intéressés à des plus petites planètes, de la taille de Neptune, voir plus petite, avec HD 106315c et HD 3167c. L'analyse des courbes de phases de ces deux planètes ont révélé la présence de  $\text{H}_2\text{O}$  dans les deux cas. Des différences apparaissent néanmoins entre les deux planètes : les données de l'atmosphère de HD 106315c révèlent la présence de  $\text{NH}_3$  tandis que celle de HD 3167c indiquent la présence de  $\text{CO}_2$ . Il est intéressant de noter que la présence de dioxyde de carbone n'est pas expliquée par les modèles atmosphérique de chimie à l'équilibre. Nous restons donc prudent quand à cette détection, qui pourrait être dû à de la systématique sur les données. En revanche, si la détection de  $\text{CO}_2$  est réelle, la présence de cette molécule pourrait être expliquée par des phénomènes de chimie hors-équilibre. Cette planète est donc une cible tout à fait intéressante pour de futures observations.

Finalement, nous avons étudié GJ 1132b, une planète de type super-terre chaude dans Mugnai *et al.* (2021). Il n'a pas été possible de déceler de signature moléculaire sur le spectre en transmission de cette planète, ce qui suggère que cette planète n'a pas d'atmosphère primordiale dominée par de l'hydrogène. Plusieurs hypothèses, compatibles avec les observations, sont possibles pour cette planète : elle pourrait avoir une atmosphère d'hydrogène, mais très nuageuse ; elle pourrait également avoir une atmosphère secondaire enrichie ; elle pourrait avoir une atmosphère très fine qui n'a pas été détectée ; et finalement cette planète pourrait ne pas avoir d'atmosphère du tout. De nouvelles observations permettraient dans ce cas aussi d'éclaircir la nature de l'atmosphère de GJ 1132b.

Dans Panek *et al.* (2023), le travail a été un peu différent car la réanalyse des données de cinq jupiters chaudes avait pour but de déterminer les biais induits par les différentes hypothèses ou approximations faites par les modèles. Pour chaque planète, nous avons comparé les résultats des modèles d'inversion utilisant différentes combinaison de molécules, considérant ou non la présence de nuages/brumes. En résumé, il n'y a pas un modèle se démarquant des autres et donnant le meilleur ajustement dans tous les cas.

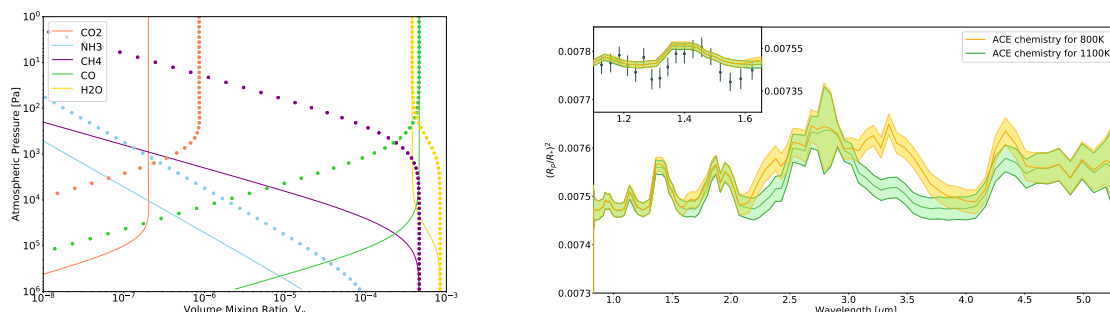
Finalement, nous nous sommes aussi intéressé à l'impact de prendre en compte ou non des atomes de sodium (Na) et de potassium (K). En effet, des publications récentes (Casasayas-Barris, N. *et al.*, 2020; Casasayas-Barris *et al.*, 2021; Morello *et al.*, 2022) ont

remis en question la détection à haute résolution des raies atomiques de Na et K dans les spectres de HD 209458b, en raison de l'interférence stellaire avec les raies planétaires dans l'effet Rossiter-McLaughlin. Nous avons voulu savoir si la prise en compte de ces deux éléments avec un impact sur les autres paramètres retrouvés par les modèles d'inversion. Nous avons donc fait des analyses en enlevant les points potentiellement contaminés et réalisé une inversion de données sans prendre en compte Na et K. Nos résultats montrent que les informations retrouvées pour les autres abondances ou d'autres paramètres ne sont pas affectées. Il n'y a donc pas de contraindeur concernant la poursuite des analyses des jeux de données en dehors de la gamme spectrale de ces lignes d'absorption, qui sont actuellement encore en cours de réanalyse. Ce travail indique de façon rassurante que même si la détection d'espèces alcalines s'avère fautive, les autres résultats des études qui les ont prises en compte resteront à priori corrects.

## 6.4 Analyser la composition chimique des planètes excentriques

Les planètes excentriques sont des objets particulièrement fascinants en raison du caractère très variable de leur orbite. Les fluctuations du flux stellaire reçu par la planète lorsqu'elle parcourt son orbite engendrent une variation importante de la température atmosphérique, qui peut à son tour provoquer des variations dans la composition chimique de l'atmosphère. Peu d'exoplanètes excentriques ont été découvertes à ce jour et parmi celles-ci, on peut citer la saturne chaude WASP-117b (Lendl *et al.*, 2014) qui possède une excentricité de 0,3 et une période orbitale assez longue de 10 jours. De par l'excentricité élevée de WASP-117b, sa température atmosphérique pourrait osciller durant son orbite entre 800 et 1100 K (à l'apoastre et au périastre), ce qui fait que WASP-117b rencontrerait alternativement deux régimes de composition chimique. A haute température ( $T > 1000$  K), en supposant l'équilibre thermochimique, l'espèce majoritaire de carbone serait CO, et à plus basse température ( $T < 1000$  K), ce serait CH<sub>4</sub>. Cependant, en fonction des temps de vie dynamique et chimique de la planète (Visscher, 2012), la composition chimique du périastre pourrait être quenchée et être visible au moment du transit, bien que ne correspondant pas à l'équilibre thermochimique attendu à la température plus faible du terminateur. Cette planète a été observée par le télescope spatial Hubble, avec l'instrument WFC3 (proposal 15301 ; PI : L. Carone) et j'ai participé à deux analyses de ces données (Anisman *et al.*, 2020; Carone *et al.*, 2021) pour lesquelles j'ai été sollicitée pour mon expertise en chimie atmosphérique. Les deux analyses indépendantes montrent des preuves robustes de vapeur d'eau, mais en raison de la couverture spectrale très étroite des observations de HST (1,088-1,688  $\mu\text{m}$ ) il est très difficile de contraindre les abondances d'autres molécules comme CH<sub>4</sub>, CO et CO<sub>2</sub>. Seule l'analyse réalisée dans Carone *et al.* (2021) suggère une faible abondance de méthane. Pourtant, ce sont ces molécules carbonées (en particulier CH<sub>4</sub>) qui pourraient donner des indications sur les variations de composition chimique au cours de l'orbite de WASP-117b. En effet, dans ces deux études, nous avons réalisé des modèles d'atmosphères considérant les différentes compositions chimiques possibles (hors équilibre et à l'équilibre à 800 K et 1100 K) et simulé les spectres que l'on pourrait observer dans les différents cas (Figure 6.2). La variation d'abondance de CH<sub>4</sub> entre les différents scénarios est clairement visible sur les spectres dans les bandes spectrales du méthane à 2,3, 3,3 et 7,66  $\mu\text{m}$ . C'est finalement une planète cible idéale

pour de futures observations puisque les télescopes JWST et Ariel auront la précision et la couverture spectrale nécessaires pour distinguer les différents scénarios possibles.



**Figure 6.2** – *A gauche* : Profils d’abondance moléculaire à l’équilibre en fonction de la pression atmosphérique pour deux simulations différentes de l’atmosphère de WASP-117 b : les lignes pointillées indiquent une chimie plus froide (abondances de 800 K) ; les lignes pleines affichent une chimie plus chaude (abondances de 1100 K). *A droite* : Spectres en transmission de WASP-117 b, tel qu’observés par JWST avec 4 transits. Alors que les deux spectres considèrent la température retrouvée du terminateur à 833 K, le modèle en jaune considère la composition chimique à l’équilibre à 800 K et celui en vert la composition chimique à 1100K. En insert : zoom sur la gamme de longueurs d’onde du HST avec les observations tracées en surimpression (non ajustées). Issus de Anisman *et al.* (2020).

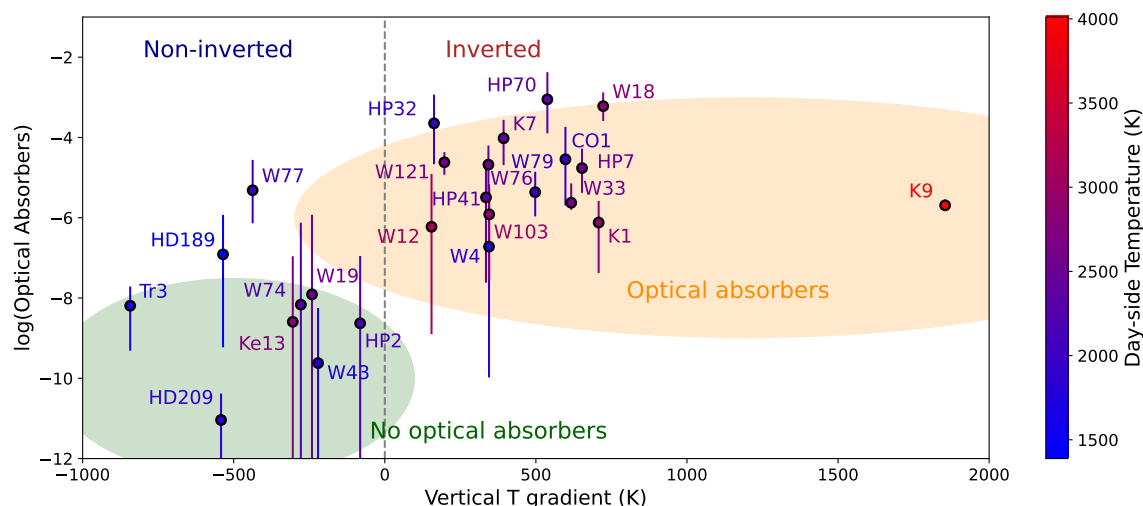
## 6.5 Etudes de population

Les études présentées ci-dessus s’intéressent à analyser et interpréter des données pour des objets individuels. Cependant, pour comprendre de façon globale comment les exoplanètes se forment, comment leurs atmosphères évoluent, il est nécessaire de réaliser des études de population afin d’en déduire des propriétés statistiques. Jusqu’à présent, des études générales ont été principalement limitées aux paramètres planétaires, orbitaux et stellaires extraits, par exemple, des données des satellites Kepler et Gaia (e.g. Howard *et al.*, 2012; Fulton et Petigura, 2018; Hsu *et al.*, 2019). Le nombre de données observationnelles sur les atmosphères ayant grandement augmenté ces dernières années, de telles études statistiques sur les atmosphères sont maintenant possible. Quelques études globales ont ainsi commencées (Sing *et al.*, 2016; Tsiaras *et al.*, 2018; Pinhas *et al.*, 2019; Mansfield *et al.*, 2021). J’ai participé à un duo d’articles faisant des études de population de jupiters chaudes grâce à des données observationnelles de transit (Changeat *et al.*, 2022; Edwards *et al.*, 2022). Dans ces deux publications, afin de supprimer les biais liés à des méthodes d’analyses différentes et assurer la fiabilité des tendances trouvées (ce qui est rarement le cas dans ce type d’études), toutes les données ont été traitées et analysées de la même manière.

### 6.5.1 Spectres en émission

Dans Changeat *et al.* (2022), ce sont 25 jupiters chaudes qui ont été étudiées, grâce à des données spectroscopiques et photométriques en émission obtenus avec HST et Spitzer.

Le but de cette étude est d’avoir une vision d’ensemble de la population d’exoplanètes et notamment de répondre à des questions clés telles que : Les oxydes et hydrures métalliques provoquent-ils des inversions thermiques dans les atmosphères des exoplanètes ? Les spectres d’éclipse des atmosphères les plus chaudes sont-ils compatibles avec les courbes de corps noir ? Quel est le contraste entre le côté jour et le terminator dans les atmosphères d’exoplanètes ? La métallicité et le rapport C/O sont-ils des observables viables pour comprendre la formation des planètes ? Les éléments réfractaires peuvent-ils nous aider à comprendre la formation des exoplanètes ?



**Figure 6.3** – Corrélations entre les abondances retrouvées des absorbeurs optiques (TiO, VO, FeH et  $H^-$ ) et le gradient thermique dans l’atmosphère. Les abondances des absorbeurs optiques sont estimées en utilisant la moyenne pondérée des abondances récupérées individuellement pour les molécules détectées. Si aucun absorbeur optique n’est détecté, seule une limite supérieure est disponible. Le gradient thermique est la différence entre les températures atmosphériques à 5% et 95% de la fonction de contribution atmosphérique. Les couleurs sur les points de données représentent les températures moyennes récupérées. Globalement, les planètes avec des profils thermiques inversés ont des températures supérieures à 2000 K et possèdent des absorbeurs optiques (région orange ombragée). Les planètes sans inversion thermique ont des températures inférieures à 2500 K et ne possèdent pas d’absorbeurs optiques (région verte ombragée). Issu de Changeat *et al.* (2022).

L’analyse de cet échantillon assez important de jupiters chaudes a permis de dégager des tendances importantes pour notre compréhension des exoplanètes. Nos principales conclusions, et qui répondent aux questions initiales, sont que :

1. Les planètes les plus froides de notre échantillon ( $T < 2000$  K) ont des profils thermiques non inversés avec des signatures spectrales d’absorption d’eau (Figure 6.3).
2. Les planètes les plus chaudes de notre échantillon ( $T > 2000$  K) ont des profils thermiques inversés avec des signatures spectrales de dissociation thermique ( $H^-$ ) et d’espèces réfractaires (TiO, VO ou FeH). Leurs spectres dans la gamme de longueurs d’onde de HST ne sont pas compatibles avec une simple émission de corps noir (Figure 6.3)
3. Le gradient thermique entre le côté jour et le terminator ne semble pas corrélé ni avec la température d’équilibre, ni avec l’opacité de  $H^-$ .
4. La métallicité et le rapport C/O sont des quantités difficiles à contraindre à partir des inversions de données ‘libres’ sur les données actuelles. Cependant, nos résultats suggèrent que l’abondance de l’eau peut être entre solaire et subsolaire dans l’échantillon étudié.
5. Les oxydes et hydrures métalliques sont trouvés en excès par rapport aux abondances

solaires dans les planètes les plus chaudes, ce qui contraste avec nos résultats sur les abondances d'eau.

6. Pour un certain nombre de planètes de notre échantillon, l'inversion de données en faisant l'hypothèse d'une composition à l'équilibre thermochimique n'est pas la meilleure solution. Bien que nous ne puissions pas rejeter fermement cette composition chimique à l'équilibre, ces résultats suggèrent que les mécanismes de déséquilibre pourraient être importants dans ces atmosphères. Cela souligne l'importance d'utiliser des approches d'inversion de données 'libres' et non biaisées. Comme la méthode d'inversion de données avec la cinétique chimique a été développée depuis cette étude (Al-Refaie *et al.* 2022b, voir Section 5.2), il serait également intéressant de refaire cette étude statistique en réalisant les inversions de données avec cette chimie hors-équilibre.

Ces résultats, en particulier les tendances liées aux abondances de l'eau et des éléments réfractaires s'ils sont confirmés, sont très importants pour la formation des planètes géantes (Öberg *et al.*, 2011; Turrini *et al.*, 2021).

### 6.5.2 Spectres en transmission

Dans une seconde étude compagne (Edwards *et al.*, 2022), nous nous sommes focalisés sur les observations en transit, et plus spécifiquement sur les données de l'instrument WFC3 de HST. Notre échantillon de planètes est plus grand que pour l'étude des spectres en émission (Changeat *et al.*, 2022) est contient 70 jupiters chaudes. Parmi ces planètes, nous retrouvons des planètes dont les analyses individuelles ont été publiées indépendamment notamment dans les papiers ARES (Edwards *et al.*, 2020; Skaf *et al.*, 2020; Pluriel *et al.*, 2020a; Guilluy *et al.*, 2021; Mugnai *et al.*, 2021). Là aussi, l'objectif est d'obtenir une vue d'ensemble des exoplanètes et de déterminer des corrélations, notamment :

- entre l'abondance de H<sub>2</sub>O et les paramètres de la planète telle que la masse et la température.
- entre les amplitudes des signatures spectrales et la température ou la gravité de surface.

Pour plus de la moitié des planètes étudiées, nous avons détecté des signatures spectrales qui peuvent être attribuées à la présence d'espèces chimiques dans l'atmosphère. Parmi ces planètes nous avons tenté de trouver les corrélations mentionnées ci-dessous, mais sans succès. La seule tendance trouvée est que pour les planètes les plus chaudes de notre échantillon, nous avons déterminé, grâce à l'opacité de H<sup>-</sup>, qu'il y avait de la dissociation thermique du dihydrogène et de l'eau.

Nous pensons que l'absence de tendances générales de cette étude pourrait être due à plusieurs facteurs :

1. la couverture spectrale insuffisante offerte par le HST WFC3,
2. l'absence d'une tendance simple dans l'ensemble de la population,
3. la nature essentiellement aléatoire de la sélection des cibles pour cette étude,
4. une combinaison de tous ces facteurs.

Le 'non-résultat' de cette étude (ou tout du moins pas celui espéré initialement) n'est cependant pas inintéressant car il nous informe sur la façon de procéder pour des études de population dans le futur, notamment avec les télescopes tels que JWST (Gardner *et al.*, 2006), Twinkle Edwards *et al.* (2019) et Ariel (Tinetti *et al.*, 2016, 2018, 2021). Les principales conclusions tirées sont qu'une couverture spectrale simultanée plus large est

nécessaire ainsi qu'une approche plus structurée de la sélection des cibles.

## 6.6 Conclusions et Perspectives

Les données du Hubble Space Telescope et Spitzer ont permis ces dernières années de caractériser un nombre important d'atmosphères exoplanétaires. En raison du domaine spectral couvert, ces données ont principalement montré la présence (ou non-présence) d' $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{TiO}$  et  $\text{VO}$ , et pour certains cas également la possible présence de  $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{HCN}$ , et  $\text{NH}_3$ . Cependant pour ces dernières molécules, des données supplémentaires sont nécessaires pour confirmer ces détections. En raison du nombre important de planètes observées, ces études de cibles individuelles ont même pu évoluer vers des études de population plus générales (Changeat *et al.*, 2022; Edwards *et al.*, 2022). Ces études ont permis de tirer quelques tendances, notamment sur la présence ou non d'inversion de température dans les profils thermiques (présent pour les planètes les plus chaudes, avec une  $T > 2000$  K).

Un point très important soulevé dans Changeat *et al.* (2022) est que les modèles d'inversion de données supposant une composition à l'équilibre thermochimique ne sont souvent pas la meilleure solution pour interpréter les données. Cela suggère que les atmosphères ont souvent une composition hors équilibre, due aux processus de déséquilibre chimique, tels que le mélange et la photodissociation. C'est donc un argument supplémentaire qui appuie le besoin de développer des modèles d'inversion de données prenant en compte la cinétique chimique comme on a développé dans Al-Refaie *et al.* (2022b) (voir Chapitre 5).

Finalement, la conclusion générale des différentes études, que ce soit individuelle ou de population, est que des données de meilleure résolution et avec une couverture plus large sont nécessaires. En ce sens, le JWST, qui donne des données depuis juillet 2023, et Ariel, qui sera lancé en 2029, vont permettre des études bien plus poussées et détaillées des atmosphères exoplanétaires.



# Chapitre 7

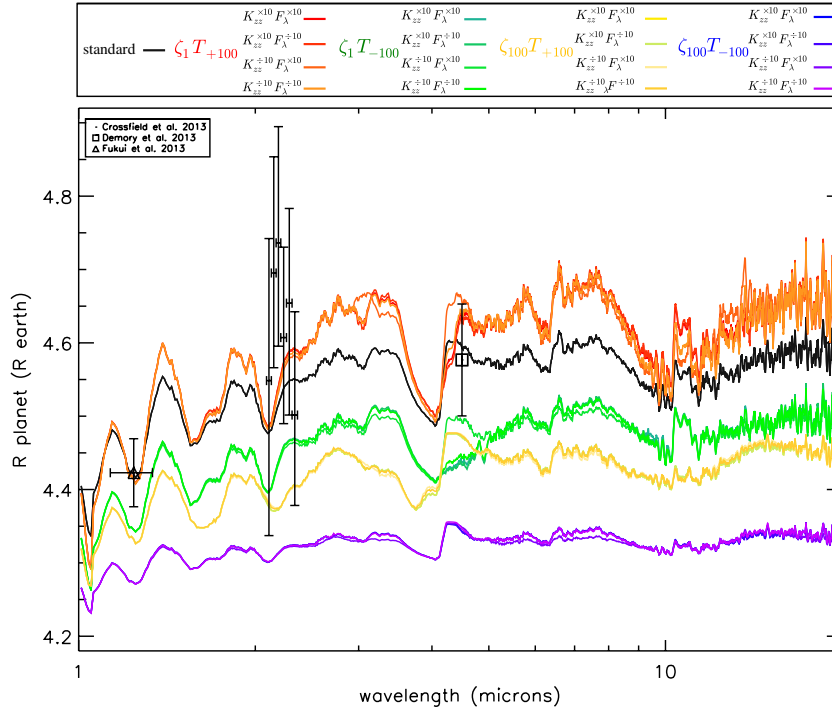
## Préparation des futurs télescopes et premières données JWST

### 7.1 Introduction et mise en contexte

Nos modèles atmosphériques permettent de simuler une variété de configurations potentielles et ainsi étudier comment varient les observables en fonction des paramètres. Dans beaucoup de cas, la résolution et la couverture spectrale des télescopes Hubble ou Spitzer n'étaient pas suffisantes pour lever la dégénérescence entre plusieurs modèles et avoir des informations certaines sur la composition atmosphériques des exoplanètes. Par exemple, dans Venot *et al.* (2014), nous avons étudié comment variait la composition chimique de la neptune chaude GJ 3470b (et les spectres synthétiques associés) en fonction de la métallicité, la température, le mélange vertical, l'irradiation UV. Nous avons trouvé des variations très importantes, surtout pour les espèces carbonées, telles que CO et CH<sub>4</sub>. Si la planète a une forte métallicité (100 × solaire) et une température importante, l'espèce majoritaire de carbone peut devenir CO, alors que dans la plupart des autres cas, le méthane sera plus abondant. Cependant, les observations de cette planète (Demory *et al.*, 2013; Fukui *et al.*, 2013; Crossfield *et al.*, 2013) n'avaient pas une résolution suffisante pour déterminer de façon certaine la vraie nature de cette atmosphère (Figure 7.1).

La nouvelle génération de télescopes (JWST, Ariel) aura des capacités bien meilleure et pourra ainsi permettre une compréhension bien plus fine des atmosphères d'exoplanètes. En tant que membre d'un Groupe de Travail pour l'instrument MIRI du JWST (mené par P.-O. Lagage) et en tant que coordinatrice du Groupe de Travail Chimie de la mission Ariel, j'ai participé à plusieurs travaux visant à préparer les observations de ces télescopes. Dans Venot *et al.* (2018b), nous avons notamment déterminé le signal sur bruit (SNR) nécessaire pour lever la dégénérescence entre les différents modèles de GJ 3470b de Venot *et al.* (2014). Nous avons trouvé qu'un SNR de 20 était nécessaire, ce qui est atteignable en combinant plusieurs transits avec Ariel. Certains des travaux auxquels j'ai participé ont déjà été mentionnés précédemment dans ce manuscrit, comme par exemple l'étude des variations longitudinales d'abondances et leur conséquences sur les courbes de phases (Chapitre 4, Section 4.3). Nous ne reviendrons pas sur ces études dans ce chapitre, mais aborderons plutôt d'autres études ayant permis d'identifier quels étaient les biais possibles induits par nos méthodes d'analyses, mais aussi définir des outils de diagnostics, des molécules précises pouvant servir de traceurs atmosphériques de certains paramètres. Nous présenterons également des travaux en lien direct avec les observations du JWST : le





**Figure 7.1** – Spectres synthétiques de GJ 3470b, en terme de rayon apparent pour différents modèles explorant une grille de métallicité, température, irradiation et mélange vertical (voir la Table 2 de Venot *et al.* 2014 pour la signification des symboles). Les observations (références dans la légende) sont ajoutées pour comparaison. Issu de Venot *et al.* (2014).

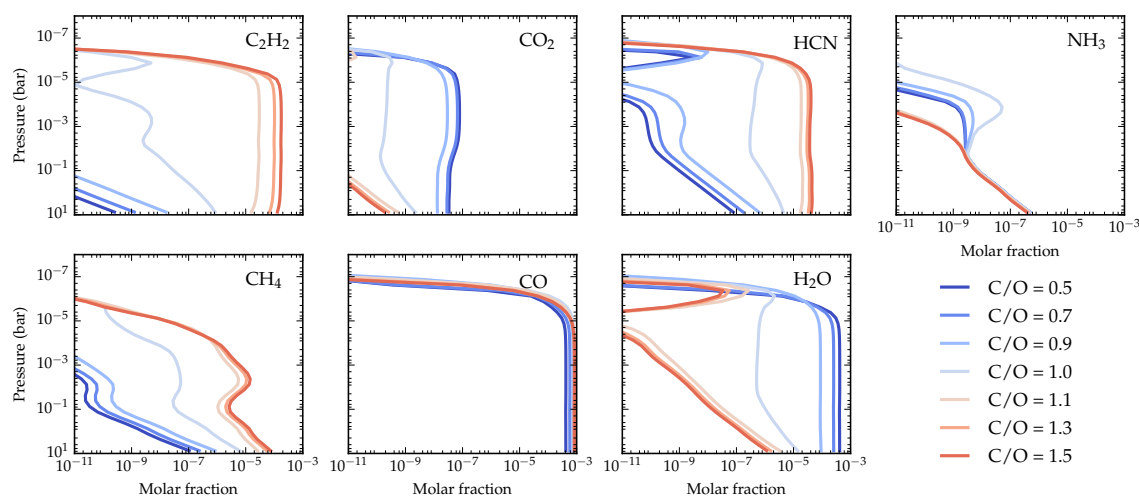
travail préparatoire, que j’ai mené, aux observations de WASP-43b, ainsi que les premières observations de WASP-39b, pour lesquelles j’ai collaboré à l’analyse.

## 7.2 Déterminer des traceurs atmosphériques

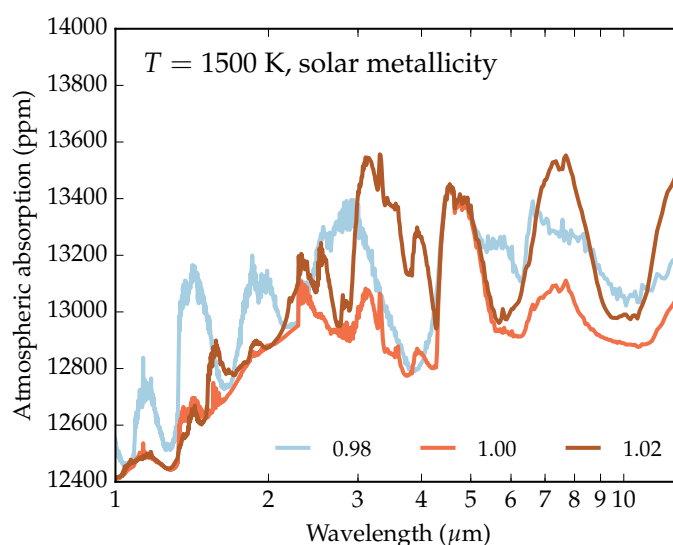
### 7.2.1 Traceurs du rapport C/O : C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> et HCN

Dans Venot *et al.* (2015), nous avons développé un schéma chimique C<sub>0</sub>-C<sub>6</sub> adaptée à l’étude des atmosphères riches en Carbone (voir Section 2.2). Afin d’estimer dans quels cas l’utilisation de ce schéma était indispensable, et les biais engendrés par l’utilisation d’un schéma plus petit, nous avons modélisé des atmosphères avec différentes températures effectives et différents rapports C/O (0,5 et 1,1). En comparant ces différents modèles, nous avons clairement vu que la composition change entre les différents rapports C/O lorsque la température de l’atmosphère. Comme nous l’avons montré dans la Section 2.2, lorsque la température est relativement faible (500 K), il y a peu de variation de composition atmosphérique quand le rapport C/O augmente, et donc pas de différences non plus sur les observables de ces atmosphères. En revanche, pour les atmosphères plus chaudes (1000 et 1500 K), la composition chimique de l’atmosphère change de façon importante quand le rapport C/O passe de 0,5 et 1,1. L’abondance des hydrocarbures augmente lorsque le rapport C/O est supérieur à 1, en particulier HCN, CH<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>, alors qu’à l’inverse on voit diminuer la quantité de H<sub>2</sub>O. Le calcul des spectres synthétiques (Figure 2.2) correspondant à ces différents modèles nous a permis de déterminer que HCN

et  $C_2H_2$ , grâce à leurs signatures spectrales importantes vers 7,4, 7,7, 13,6, 13,9, et 14,2  $\mu m$ , pouvaient servir de traceurs au rapport C/O pour les atmosphères chaudes. Nous avons poursuivi cette étude dans Rocchetto *et al.* (2016), en étudiant les variations de composition chimique des exoplanètes chaudes avec des rapports C/O entre 0,5 et 1,5 par pas de 0,1 (Figure 7.2). Cette étude plus approfondie nous a permis de déterminer que, pour des atmosphères avec une métallicité solaire, le changement de composition chimique et aussi d'allure de spectres étaient brutale à la valeur C/O = 1, comme le montre la Figure 7.3. Ces travaux théoriques réalisés en amont des observations avec la nouvelle génération de télescopes que sont le JWST ou Ariel, permettent d'identifier les gammes spectrales clés permettant de caractériser les atmosphères d'exoplanètes et de comprendre quelles sont les molécules responsables des variations observées.



**Figure 7.2** – Profils verticaux d'abondances en fonction du rapport C/O pour une atmosphère avec une température de 1500 K. Tiré de Rocchetto *et al.* (2016).



**Figure 7.3** – Spectres en transmission pour une atmosphère avec une température de 1500 K lorsque le rapport C/O est de 0,98 (bleu), 1,0 (orange) et 1,02 (marron).

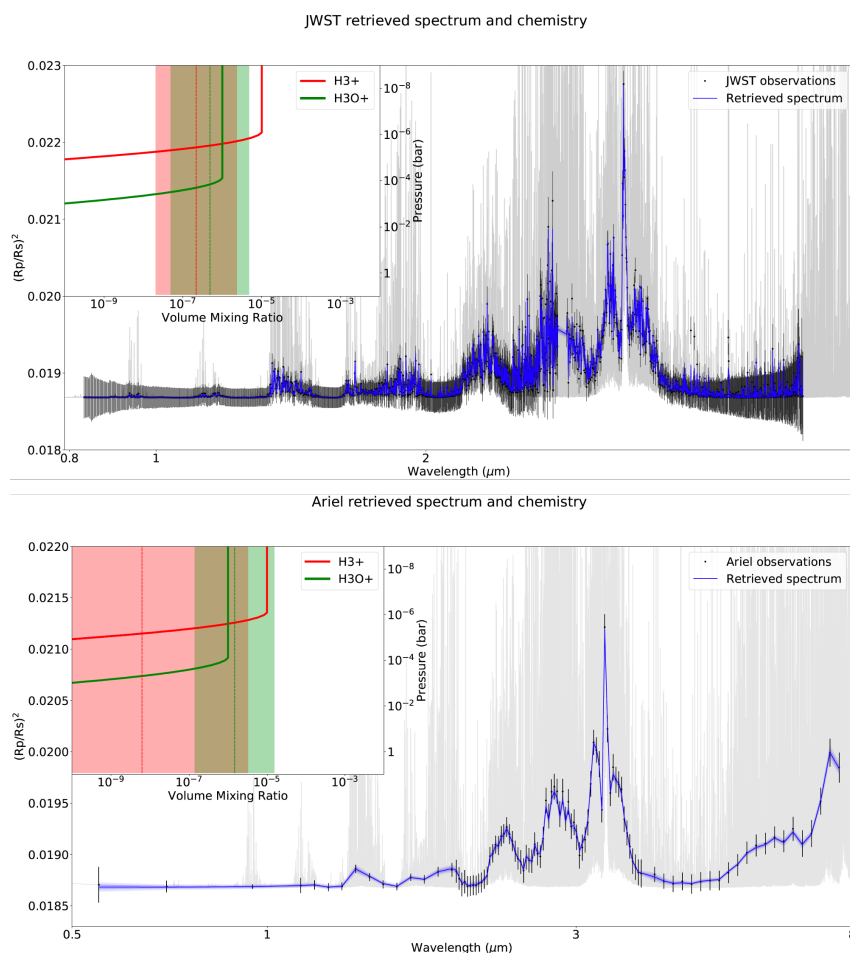
### 7.2.2 Les ions

La mission Kepler a montré que la majorité des exoplanètes avait une taille comprise entre celles de la Terre et de Neptune (Coughlin *et al.*, 2016). Beaucoup de ces objets semblent avoir un atmosphère épaisse composée d'hydrogène et d'hélium (de type mini-neptune), mais la diversité de densité observée suggère qu'il existe aussi des planètes telluriques (super-terres) avec une atmosphère fine, composée de molécules plus lourdes telles que  $N_2$ ,  $CO$ ,  $H_2O$  (Elkins-Tanton et Seager, 2008; Schaefer *et al.*, 2012; Moses *et al.*, 2013; Hu et Seager, 2014; Rimmer et Rugheimer, 2019). Certaines de ces petites planètes sont recouvertes de brumes et de nuages rendant particulièrement difficile la détection de molécules chimiques dans la troposphère et la détermination de la présence d'une surface. Afin de répondre à cette problématique, nous avons mené une étude très complète dans Bourgalais *et al.* (2020), qui combine expériences de laboratoire, modélisations chimiques, simulations d'observations et inversion de données.

Tout d'abord, nous avons reproduit des atmosphères simplifiées de super-terre et mini-neptune dans un réacteur photochimique, déjà utilisé pour reproduire des environnements planétaires (Carrasco *et al.*, 2013; Peng *et al.*, 2014; Bourgalais *et al.*, 2019). La cellule de gaz est remplie avec un mélange gazeux constitué de  $H_2$ ,  $CO$  et  $N_2$ , dans des proportions variables pour reproduire une atmosphère soit riche (type mini-neptune) soit pauvre (type super-terre) en hydrogène, avec respectivement 96% ou 1% de  $H_2$ . Les gaz  $CO$  et  $N_2$  complètent ce mélange dans des proportions équitables. La cellule de gaz est ensuite irradiée avec une source EUV, qui consiste en une décharge plasma micro-ondes d'un gaz rare. Ici, c'est une décharge de type surfatron avec un flux de gaz néon qui a été utilisée, résultant en une irradiation à 73.6 nm. L'analyse des espèces chimiques présentes dans le réacteur est ensuite réalisée grâce à un spectromètre de masse quadripolaire (Hiden Analytical EQP 200 QMS) qui permet de mesurer les composés neutres et les ions positifs avec une grande sensibilité en dessous du niveau des parties par million (ppm) (Bourgalais *et al.*, 2019; Dubois *et al.*, 2019). Dans les deux types d'atmosphère, nous avons observé que les mêmes ions principaux ( $H_3O^+$  et  $HCO^+$ ) étaient produits. Une comparaison et analyse avec un modèle photochimique 0D nous a permis de déterminer que les voies de formation étaient différentes dans les deux cas. Cependant, nous avons observé que certains ions ne sont produits que dans l'un ou l'autre des cas. Dans le milieu pauvre en hydrogène, nous avons observé une production d'ions  $N_2^+$  et  $CO^+$ , alors que dans le milieu riche en hydrogène, nous avons observé que l'ion  $H_3^+$  était un des plus abondants. Ces résultats expérimentaux sont très intéressants pour la caractérisation d'exoplanètes chaudes, car ils fournissent un outils potentiel de diagnostic pour différencier les planètes de type super-terre et mini-neptune; les ions se formant généralement au dessus de la couche nuageuse, problématique de ces planètes. Ainsi, la détection d'ions  $H_3^+$  pourrait indiquer que l'exoplanète est de type mini-neptune.

Pour confirmer la pertinence de cet outils de diagnostic pour l'interprétation des observations JWST et Ariel, nous avons évalué la capacité de ces télescopes à détecter les ions  $H_3O^+$  et  $H_3^+$ . Nous avons simulé l'atmosphère d'une planète de type GJ 1214b, avec comme principaux absorbeurs  $H_2O$  et  $CH_4$  avec des abondances fixées à 10 ppm (Miller-Ricci Kempton *et al.*, 2012; Venot *et al.*, 2014; Hu, 2015; Tinetti *et al.*, 2018; Changeat *et al.*, 2019). A ces deux molécules, nous avons ajouté les ions  $H_3O^+$  et  $H_3^+$  dans la haute atmosphère, avec des abondances inspirés du travail de Helling et Rimmer (2019). Avec le

code TauREx 3 (Waldmann *et al.*, 2015a,b), nous avons calculé les spectres synthétiques que l'on obtiendrait pour une telle planète si elle était observée par JWST, avec 2 visites, et par Ariel, avec 10 visites. Nous avons ensuite procédé à des analyses d'inversion de données pour déterminer quelles informations nous serions en mesure de retrouver avec ces deux instruments. Nous avons trouvé que dans les deux cas,  $\text{H}_3\text{O}^+$  était détectable grâce à sa large signature vers  $2,8 \mu\text{m}$ . Concernant l'ion  $\text{H}_3^+$ , cela s'avère plus difficile car ses signatures sont plus faibles et généralement masquées par les nuages (dans le cas le plus pessimiste que nous avons simulé). Cependant, la haute résolution atteignable pour les spectres JWST permet de détecter avec succès  $\text{H}_3^+$ . Avec les spectres Ariel, la détection de  $\text{H}_3^+$  n'est pas claire, et seule une limite haute sur l'abondance ( $10^{-5}$ ) peut être déduite. Une détection de cet ion avec Ariel serait possible s'il était plus abondant ou en cumulant plus de transits. En résumé,  $\text{H}_3\text{O}^+$  sera facilement observable par les deux télescopes ; détecter  $\text{H}_3^+$  sera possible par JWST à haute résolution, mais sera un plus grand challenge pour Ariel. Les spectres simulés, retrouvés, et les profils d'abondances ioniques sont présentés sur la Figure 7.4.



**Figure 7.4** – Spectres retrouvés et abondances retrouvées pour les simulations d'une planète type GJ 1214b. Les simulations correspondant à JWST sont en haut, et celles pour Ariel en bas. Pour les abondances, la vraie valeur est représentée par un trait plein, la valeur moyenne retrouvée est le trait en pointillé, et la partie colorée représente la zone à  $1\sigma$ . Issu de Bourgalais *et al.* (2020).

Cette étude pionnière nous permet de suggérer que les ions pourraient être des outils de diagnostics très intéressants pour interpréter les observations de la nouvelle génération

de télescopes, comme JWST et Ariel, et caractériser les exoplanètes. Notre étude suggère en particulier que la détection/non-détection de  $\text{H}_3^+$ , associée à l'observation de  $\text{H}_3\text{O}^+$  permettrait de différencier les planètes de type super-terre et mini-neptune. Des études supplémentaires sont nécessaires pour déterminer si d'autres ions, comme  $\text{HCO}^+$  et  $\text{N}_2\text{H}^+$ , pouvant être abondants dans les atmosphères riches en CO et  $\text{N}_2$  pourraient aussi jouer un rôle de traceurs. Cependant, pour ces éléments, des travaux théoriques sur liste de raies d'absorption infrarouge sont nécessaires, car elles sont manquantes actuellement, à notre connaissance. Finalement, une autre conclusion importante de cette étude, est qu'il serait nécessaire de coupler la chimie des ions et des espèces neutres dans les modèles photo-thermochimique d'exoplanètes, ce qui n'est que très rarement fait (e.g. Lavvas *et al.*, 2014; Rimmer et Helling, 2016).

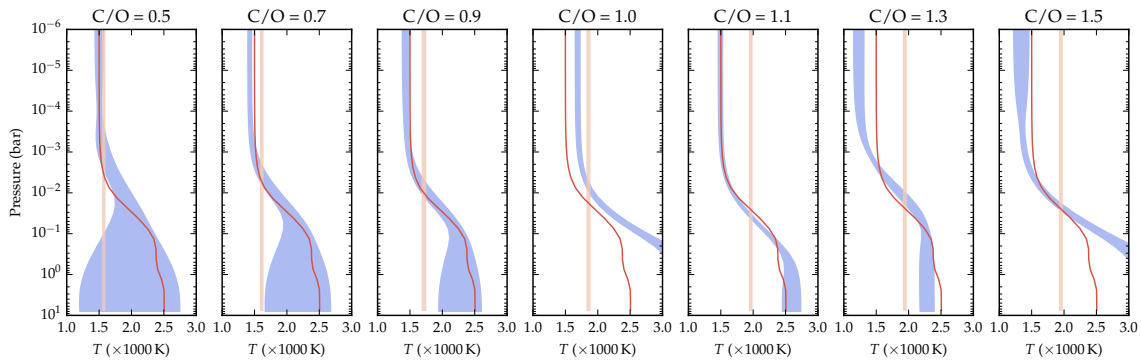
### 7.3 Identifier les biais

Dans le cadre de la préparation de la mission JWST, je me suis également intéressée à l'identification des biais possibles concernant l'interprétation des observations, dues aux approximations faites par les méthodes d'inversions de données. J'ai réalisée cette étude dans le cadre d'une collaboration avec mes collègues d'UCL (Rocchetto *et al.*, 2016). Notre but était de déterminer si les approximations faites à cette époque, et qui étaient valides, ou tout du moins acceptables pour analyser les données HST ou Spitzer, le seraient encore pour observer les données du JWST, présentant une plus large couverture spectrale et une meilleure résolution. Pour cela, nous avons simulé les observations les plus réalistes possibles et tenté de retrouver les caractéristiques des exoplanètes simulées. Nous avons commencé par calculer la composition chimique de l'atmosphère de plusieurs jupiters chaudes typiques (sans nuages) grâce à mon modèle cinétique 1D. En gardant un profil thermique identique et une métallicité solaire, nous avons exploré plusieurs rapports d'abondances élémentaires C/O (de 0,5 à 1,5). Ensuite, nous avons calculé les spectres synthétiques correspondants grâce au code TauREx (Waldmann *et al.*, 2015a,b). A cette étape, ces spectres sont à haute résolution ( $R=10\,000$ ) et en transmission. Finalement, nous avons simulé la dégradation de ces spectres par les instruments du JWST (NIRISS, NIRCам et MIRI) en utilisant un modèle de bruits qui considère le bruit de photon de l'étoile, les bruits de fond zodiacal et du télescope, ainsi que le courant d'obscurité et le bruit du détecteur. Nous avons également dégradé la résolution des spectres à  $R = 100$ .

A partir de ces spectres, nous avons ensuite réalisé un travail d'inversion de données avec TauREx, pour évaluer notre capacité à retrouver les informations contenues dans les spectres. Nous avons procédé suivant deux approches qui diffèrent uniquement dans la façon dont le profil thermique est paramétrisé :

- La première approche consiste à supposer un profil thermique isotherme ; approche couramment utilisée dans les analyses de spectres en transmission.
- La deuxième approche consiste à supposer un profil thermique plus complexe décrit selon 5 paramètres : le flux de chaleur interne de la planète, le flux d'irradiation stellaire, les opacités dans l'optique et l'infrarouge, et un facteur de pondération entre les opacités optiques (voir Line *et al.* 2013 pour plus de détails). Cette approche est assez répandue dans l'analyse des spectres en émission (très sensible aux variations de température avec l'altitude), mais ne l'est pas pour les spectres en transmission.

Nous avons trouvé que la méthode du profil thermique paramétrisé donnait de meilleurs



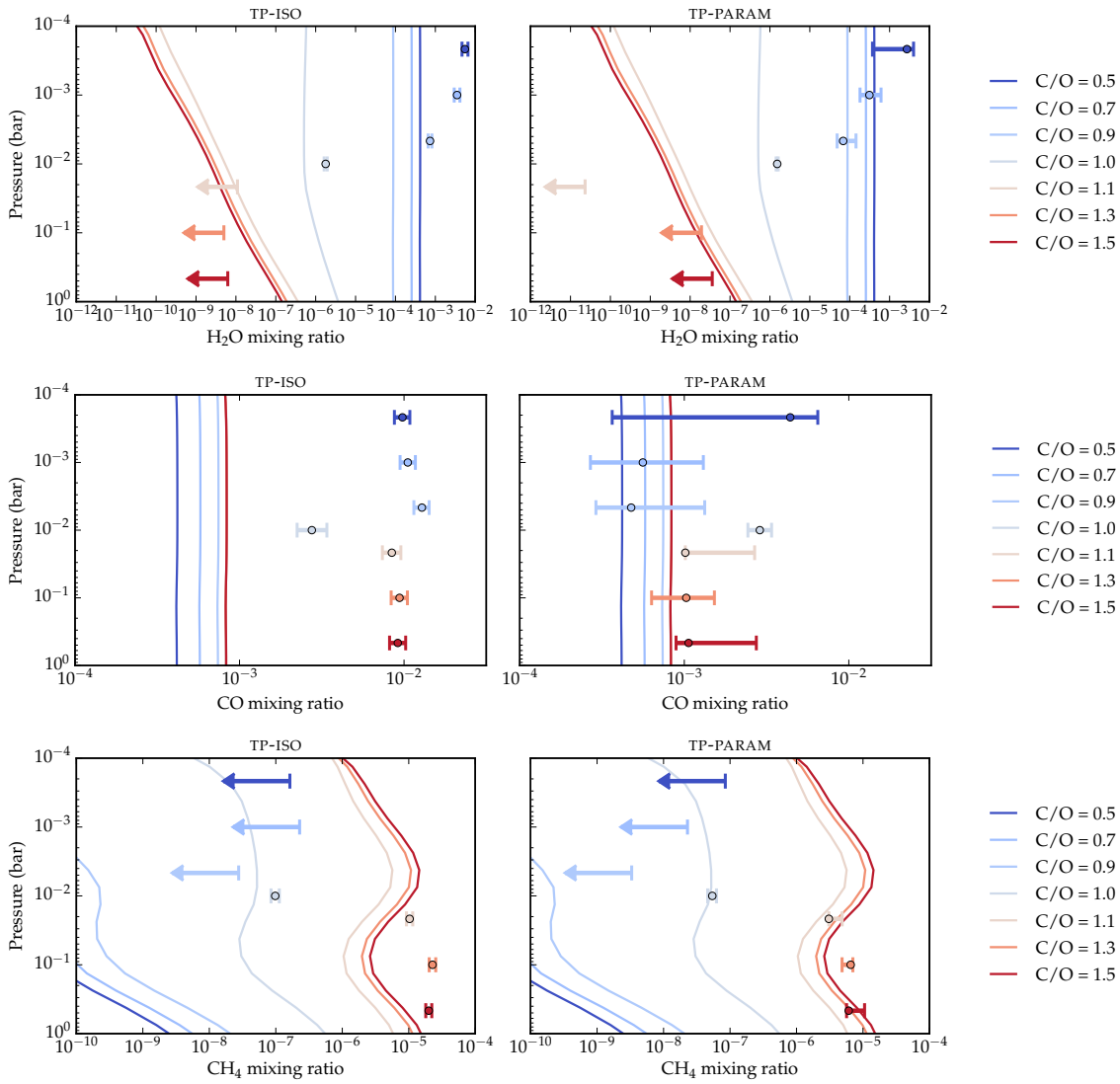
**Figure 7.5** – Profils thermiques retrouvés selon l’approche avec profil isotherme (rose) et profil paramétrisé (bleu) pour différents rapports C/O. Le profil ‘réel’ (d’entrée) est représenté en rouge. Les zones ombrées indiquent le niveau de confiance de  $1\sigma$ . Issu de Rochetto *et al.* (2016).

résultats que la méthode du profil thermique isotherme. La méthode paramétrisée de retrouver avec une précision d’environ  $1\sigma$  le profil thermique non-uniforme de la planète, excepté dans le cas  $C/O = 1$  (Figure 7.5). Dans ce dernier cas, le profil thermique est difficile à retrouver, car le modèle d’inversion de données suppose que les profils d’abondances sont constants avec l’altitude, ce qui est incorrect pour la plupart des molécules. Les signatures spectrales de ces molécules observées à différentes longueurs d’ondes proviennent en réalité de différentes régions de l’atmosphère, où elles ont donc des abondances différentes. Une façon d’améliorer les résultats serait d’utiliser des profils d’abondances complexes, ajustés selon l’altitude, ce qui dépassait les objectifs de cette étude. Comme nous l’avons présenté dans le Chapitre 5, ce travail a néanmoins été entrepris par la suite avec le couplage entre TauREx et FRECKLL pour réaliser des inversions de données prenant en compte la cinétique chimique (Al-Refaei *et al.*, 2022b).

Concernant la récupération des abondances moléculaires, nous avons observé que l’approche qui suppose un profil isotherme conduisait à des biais importants. En moyenne, les abondances retrouvées avec cette méthode sont surestimées d’environ un ordre de grandeur et les barres d’erreur sont sous-estimées. L’approche considérant un profil thermique paramétrisé conduit à des contraintes bien meilleures, avec des abondances retrouvées à moins de  $1\sigma$ - $2\sigma$  des valeurs d’entrée dans la plupart des cas. Ceci s’explique notamment par le fait que les incertitudes retrouvées sont généralement plus importantes (Figure 7.6).

Cette étude nous a permis d’évaluer également les biais induits par l’hypothèse selon laquelle les profils d’abondance sont constants avec l’altitude. Il s’avère que cette hypothèse est une bonne approximation pour les atmosphères  $C/O < 1$  et  $C/O > 1$ , mais pas pour  $C/O = 1$ . Comme nous l’avons dit précédemment, dans ce dernier cas, la plupart des profils d’abondance présentent de fortes variations, et supposer un profil d’abondance uniforme entraîne des biais importants.

Finalement, bien que nous ayons observé que la différenciation entre  $C/O < 1$ ,  $C/O = 1$  et  $C/O > 1$  était simple, nous avons également constaté qu’il était plus difficile d’obtenir des contraintes plus précises étant donné que les différences entre les spectres de transmission sont relativement faibles. Pour pallier cette limite, nous suggérons dans cette étude que des observations avec un rapport signal/bruit plus élevé pourraient conduire à de meilleures contraintes, mais mettons en garde que d’autres biais, dus à des incertitudes systématiques par exemple, pourraient devenir plus dominants. Les observations des spectres d’émission, éventuellement combinées avec les spectres de transmission, pour-



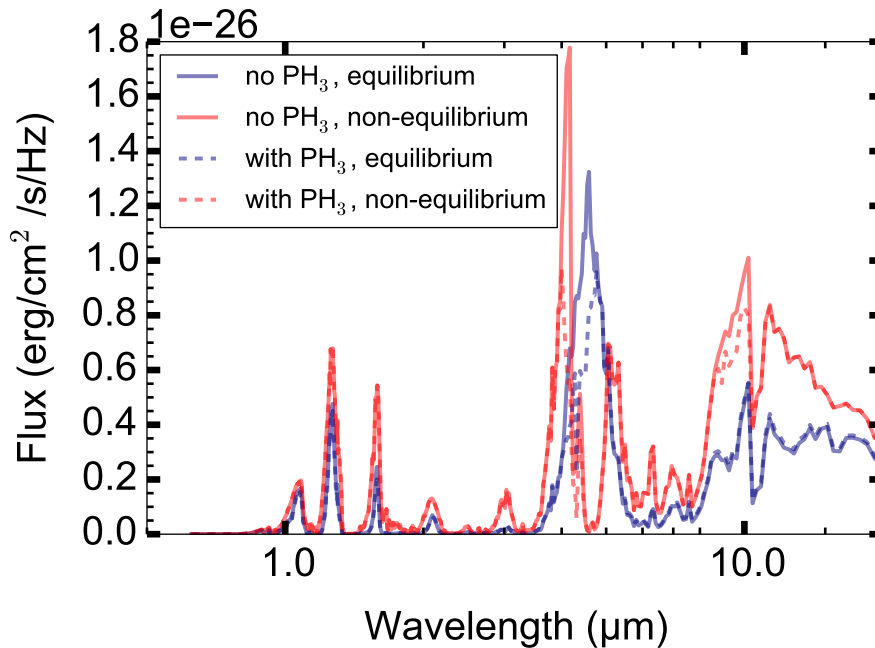
**Figure 7.6** – Abondances retrouvées de  $\text{H}_2\text{O}$  (en haut),  $\text{CO}$  (au milieu), et  $\text{CH}_4$  (en bas) pour les atmosphères avec un rapport  $\text{C}/\text{O}=[0,5-1,5]$  en utilisant l’approche avec un profil isotherme (à gauche) et celle avec un profil paramétrisé (à droite). Les lignes continues montrent les profils des abondances d’entrée pour différents  $\text{C}/\text{O}$ , avec des couleurs différentes correspondant à différents  $\text{C}/\text{O}$ , comme indiqué dans la légende. Les abondances récupérées pour les différents  $\text{C}/\text{O}$  sont indiqués avec des barres d’erreur. Les profils d’abondances récupérés sont constants en fonction de l’altitude; la position verticale des valeurs récupérées est arbitraire. Issu de Rocchetto *et al.* (2016).

raient donner de meilleures contraintes que les spectres de transmission seuls.

Dans la lignée de cette étude, j’ai également participé à une étude comparative (Baudino *et al.*, 2017) de plusieurs modèles atmosphériques européens : trois modèles d’équilibre radiatif-convectif d’un côté (ATMO, Tremblin *et al.* 2015 ; Exo-REM, Baudino, J.-L. *et al.* 2015 ; petitCODE, Mollière *et al.* 2015, 2017) et deux modèles chimiques de l’autre (Exo-REM et le mien, Venot *et al.* 2012) qui a permis d’identifier les sources de divergence de chaque modèle. Concernant les modèles d’équilibre radiatif-convectif, une des différences majeure est le traitement de la forme des ailes de raies pour les alcalins. Les différentes approches utilisées peuvent par exemple engendrer des différences de plus de

100 K. Cette étude n'a cependant pas permis de déterminer quelle était la meilleure approche. Des travaux complémentaires, théoriques et expérimentaux, dans des conditions de haute pression et de haute température sont nécessaires pour améliorer la fiabilité de ces modèles. En effet, les différentes approches et paramètres utilisés par les modèles ont des impacts sur les spectres synthétiques plus grands que les incertitudes du JWST.

Concernant les modèles chimiques, cette étude a confirmé qu'Exo-REM n'était pas adapté aux planètes irradiées, car ce code n'inclut pas de réseau chimique. Le niveau de quenching est calculé grâce une paramétrisation basée sur un travail de Zahnle et Marley (2014). Sous ce niveau les abondances sont à l'équilibre thermochimique et au-dessus, les abondances sont constantes. Les effets des photodissociations et de la diffusion moléculaire ne sont pas pris en compte. En revanche, cette étude a montré qu'une des limitations de mon code était de ne pas considérer les espèces phosphorées, en particulier  $\text{PH}_3$ , qui a un impact sur les spectres synthétiques (Figure 7.7). Le développement d'un schéma avec du phosphore fait donc partie de mon projet ANR EXACT et sera réalisé dans le cadre de la thèse de Roméo Veillet.



**Figure 7.7** – Spectres de GJ 504b, calculés par Exo-REM avec et sans  $\text{PH}_3$ , en supposant un équilibre thermochimique ou dans des conditions de déséquilibre ( $K_{zz}=10^{11} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ ) avec le même profil thermique. Issu de Baudino *et al.* (2017).

## 7.4 Observations JWST

Après un lancement idéal le 25 décembre 2021, une mise en orbite et une phase de commissioning d'environ six mois sans encombre, le JWST a délivré ses premières images le 12 juillet 2022 témoignant de la qualité des observations que ce télescope est capable de fournir.

Il a été décidé que les cinq premiers mois d'opérations scientifiques seraient des observations sans temps propriétaire (rendues publiques immédiatement) dans le but que la



communauté scientifique apprend rapidement à utiliser les instruments et les capacités du JWST. Dans ce but, le Space Telescope Science Institute (STScI) et le comité consultatif du JWST ont mis en place le programme Director’s Discretionary-Early Release Science (DD-ERS). La sélection des propositions d’observations a eu lieu en novembre 2017.

Plusieurs communautés se sont ainsi regroupées pour proposer de larges programmes d’observations. Pour ma part, j’ai rejoint en tant que co-I la ‘Transiting Exoplanet Community’ (PI : Natalie Batalha, Co-PIs : Jacob Bean et Kevin Stevenson), qui a proposé un programme (ID 1366) ayant pour but d’accélérer l’acquisition et la diffusion de l’expertise technique pour l’observation des exoplanètes en transit. Ce programme, accepté, utilise les quatre instruments du JWST (NIRISS, NIRCам, NIRSpec et MIRI) et observe toutes les géométries qui permettent de caractériser les exoplanètes en transit (transits, éclipses et courbes de phase).

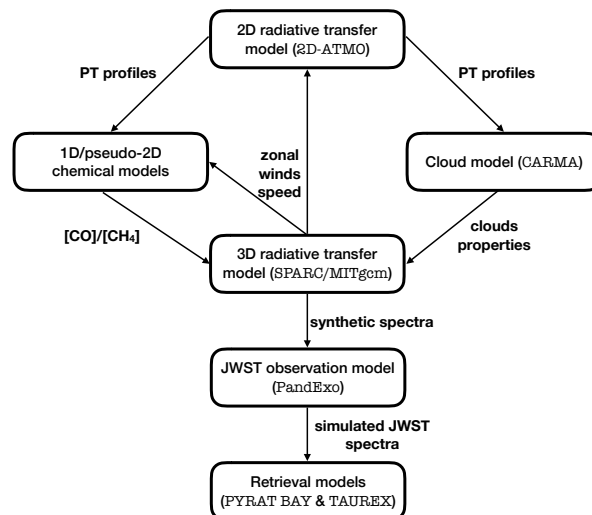
Ce programme est divisé en 3 sous-programmes avec chacun une planète cible :

1. Des observations du transit de WASP-39b en utilisant les trois instruments NIR.
2. Une observation de la courbe de phase de WASP-43b en utilisant MIRI.
3. Une observation de l’éclipse secondaire de WASP-18b, dont l’étoile hôte est brillante, à l’aide de NIRISS.

J’ai été particulièrement impliquée dans les deux premiers sous-programmes, pour la préparation et l’interprétation des observations.

### 7.4.1 WASP-43b

La préparation des observations de la jupiter chaude WASP-43b a demandé un travail très important de modélisation, avec une large variété de codes : transfert radiatif, cinétique chimique, microphysique des nuages, circulation générale, simulateur d’observations JWST et inversion de données. Comme le montre la Figure 7.8, les différents modèles sont liés les uns aux autres en fournissant des données d’entrées. De nombreuses exper-



**Figure 7.8** – Stratégie de modélisation représentant le lien entre tous les modèles. Issu de Venot *et al.* (2020b).

tises étaient donc indispensables pour mener à bien cette étude que j’ai coordonnée (Venot *et al.*, 2020b) et dont voici les principaux résultats :

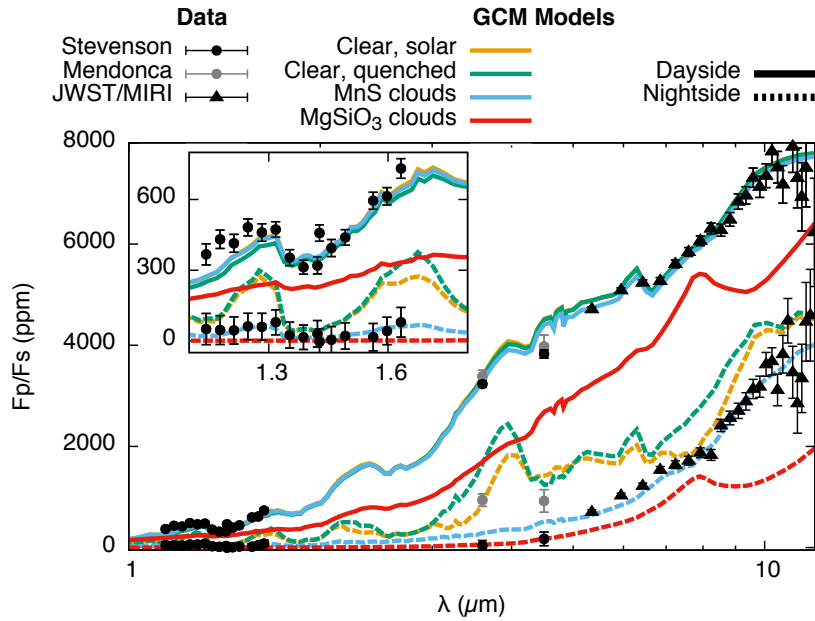
- Les profils thermiques aux différentes longitudes ont été calculés avec le modèle 2D-ATMO (Tremblin *et al.*, 2017). Les résultats obtenus ont été comparés avec le modèle de circulation générale 3D SPARC-MITgcm (Showman *et al.*, 2009). Sans aucune tentative d'ajustement, il s'avère que l'accord entre les deux modèles est plutôt très bon dans la haute atmosphère, bien que les modèles soient basés sur des approches physiques très différentes (voir Fig. 4 de Venot *et al.* 2020b). Une différence est toutefois observée dans la basse atmosphère ( $P > 10$  bars), mais qui s'explique probablement par le fait que la modèle 3D n'a pas complètement convergé pour cette zone de pression. Etant donné que les temps de calculs du modèle 2D sont plus courts, ce résultat est intéressant car il montre que l'utilisation de ce type de modèle peut représenter une très bonne alternative aux modèles 3D.

- J'ai été particulièrement plus impliquée dans la modélisation de la cinétique chimique, qui a été détaillée dans le Chapitre 4, Sect. 4.3.1 et sur laquelle je ne reviendrai que très brièvement. En utilisant les profils thermiques calculés par 2D-ATMO, le modèle de cinétique chimique pseudo-2D de WASP-43b montre que la circulation horizontale engendre une homogénéisation horizontale des abondances. Au vu de ce modèle, on s'attend à ce que WASP-43b ait globalement une composition similaire à celle du côté jour, avec peu de méthane à toutes les longitudes (voir Figure 4.3).

- Pour déterminer la couverture nuageuse sur WASP-43b, nous avons utilisé le code CARMA (Turco *et al.*, 1979; Toon *et al.*, 1988; Jacobson et Turco, 1994; Ackerman *et al.*, 1995). Nous avons trouvé que la couverture nuageuse de WASP-43b dépendait du type de nuages formé par les silicates. Si les silicates condensent en forstérite ( $\text{Mg}_2\text{SiO}_4$ ) du côté jour, cela se déroule profondément dans l'atmosphère ( $P > 100$  bars), ce qui permet de sonder les couches atmosphériques supérieures. Une alternative possible serait que les silicates forment des nuages d'enstatite ( $\text{MgSiO}_3$ ). Dans ce cas, la condensation aurait lieu à plus faible température, et donc à des pressions plus faibles, ce qui créerait une couche nuageuse (à  $P < 100$  bars) rendant le côté jour opaque. Dans les deux cas, le côté nuit atteint des températures suffisamment basses pour que des nuages épais de  $\text{MnS}$  et  $\text{Na}_2\text{S}$  se forment (impactant le spectre jusqu'à  $7 \mu\text{m}$ ) ainsi que des nuages de forstérite (impactant les plus grandes longueurs d'ondes).

- Les résultats obtenus concernant la chimie et la couverture nuageuse de WASP-43b ont été utilisés par le modèle 3D SPARC/MITgcm afin de déterminer la structure thermique et les spectres en émission. Plusieurs hypothèses ont été considérées pour évaluer l'effet sur les spectres et notre capacité à les différencier : deux compositions chimiques (équilibre thermochimique et déséquilibre) et trois types de couverture nuageuse (claire,  $\text{MnS}$  et  $\text{MgSiO}_3$ <sup>1</sup>). On voit clairement sur la Figure 7.9 que l'observation du côté jour ne permet pas à lui seul de distinguer les deux cas de composition chimique, le rapport  $[\text{CH}_4]/[\text{CO}]$  (utilisé par le modèle 3D pour simuler la composition hors équilibre) étant faible dans les deux cas. En revanche, le spectre côté nuit présente des différences importantes : les bandes d'absorption du méthane entre 3 et  $4 \mu\text{m}$  disparaissent dans le cas de déséquilibre, et celles entre 7 et  $9 \mu\text{m}$  sont bien atténuées. On s'attend à ce que de telles différences soient détectables lors des observations avec l'instrument MIRI. Concernant la couverture nuageuse, nous avons déterminé que la composition des nuages ( $\text{MnS}$  ou  $\text{MgSiO}_3$ ) pouvait être distinguée sur le spectre en émission du côté nuit grâce à la bande d'absorption autour de  $10 \mu\text{m}$  (voir aussi Wakeford et Sing 2015).

1. La forstérite et l'enstatite ayant des opacités et des courbes de condensation très similaires, une seule de ces espèces de silicates a été incluse.



**Figure 7.9** – Spectres en émission du côté jour (trait plein) et du côté nuit (tiret) de WASP-43b calculé par le SPARC/MITgcm pour différentes hypothèses : sans nuages avec composition à l’équilibre thermochimique (jaune), sans nuages avec déséquilibre chimique (vert), avec des nuages de MnS (bleu), avec des nuages de MgSiO<sub>3</sub> (rouge). Les observations de HST et Spitzer (Stevenson *et al.*, 2017; Mendonça *et al.*, 2018) sont représentés par des points, tandis que les observations attendues du JWST/MIRI sont représentés par des triangles. Tiré de Venot *et al.* (2020b).

- Ces spectres ‘idéaux’ ont ensuite été dégradés par le code PandExo (Batalha *et al.*, 2017), afin de simuler les spectres bruités que l’on obtiendra du JWST.

- Après, la dernière étape de l’étude a consisté à effectuer une analyse d’inversion de données, afin de déterminer si les observations (et nos outils actuels) seraient capables de remonter aux caractéristiques atmosphériques. En particulier, nous avons voulu savoir si 1) dans un cas sans nuage, nous serions capable de déterminer la présence d’une composition en déséquilibre chimique et 2) dans un cas nuageux nous serions capable de déterminer leur composition. Pour effectuer cette étape, deux codes ont été utilisés : TauREx (Waldmann *et al.*, 2015a,b; Rocchetto *et al.*, 2016) et Pyrat Bay (Cubillos et Bleic, 2021).

Dans le cas où WASP-43b ne présente pas de nuage, les deux codes d’inversion de données donnent des résultats similaires et ont montré que l’observation de la courbe de phase obtenue avec MIRI devrait permettre de contraindre la structure thermique du côté nuit et de retrouver les abondances de H<sub>2</sub>O, CH<sub>4</sub> et CO. Ainsi, grâce à la bande d’absorption du méthane entre 7 et 9 μm, nous devrions être capable de conclure quant à la présence d’une composition de déséquilibre chimique due à la circulation horizontale.

Dans le cas où l’atmosphère de WASP-43b est nuageuse, l’inversion de données est beaucoup plus complexe. Il sera possible de détecter la présence de nuages, de déterminer la composition chimique des nuages et même de contraindre la taille moyenne des particules en utilisant des modèles qui incluent la diffusion de Mie. Cependant, déterminer la composition atmosphérique côté nuit, la structure thermique et l’abondance des nuages sera plus délicat et demandera une attention vraiment particulière et minutieuse.

La préparation des observations de WASP-43b a été effectuée de 2017 à 2020. Les observations avec JWST ont eu lieu entre le 30 novembre 2022 et le 2 décembre 2022. Les données ont été traitées et les résultats sont actuellement en cours de publication (Bell et al. 2023). Les observations confirment les prédictions de nos modèles à savoir que le côté nuit est nuageux (à des  $P > 100$  mbar). L'observation du côté jour semble indiquer qu'il n'y a pas de nuage au-dessus de la photosphère dans l'infrarouge moyen. Comme attendu, nous n'avons pas détecté de méthane du côté nuit, ce qui indique que l'atmosphère de cette planète est bien hors-équilibre, en raison de la circulation horizontale.

A noter que l'accord entre les observations et les modèles de circulation générale avec nuage n'est pas parfaite (concernant l'amplitude et le décalage de la courbe de phase, ainsi que les caractéristiques spectrales), ce qui indique qu'il faut encore approfondir notre compréhension concernant le couplage entre la dynamique, le rayonnement et la formation des nuages dans les atmosphères de jupiters chaudes. Les données du JWST sont très précises, bien plus que celles du HST. Elles exigent une plus grande sophistication des modèles, et cela souligne l'importance de prendre en compte les effets complexes de déséquilibre.

### 7.4.2 WASP-39b

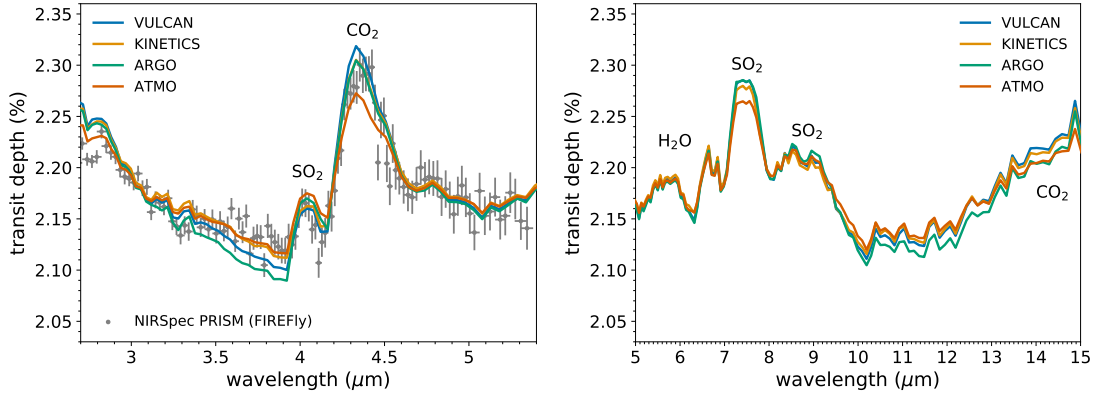
Les premières observations du programme ERS du Transiting Exoplanet Community Program ont été celles de la saturne chaude WASP-39b et ont eu lieu du 10 au 31 juillet 2022. Ces observations, qui étaient celles du premier programme scientifique concernant les exoplanètes, ont largement comblées les attentes et les ont même dépassées. En effet, avec cette unique cible, le JWST a permis de réaliser plusieurs premières détections :

- première détection sans équivoque de  $\text{CO}_2$
- première détection d'une molécule soufrée ( $\text{SO}_2$ )
- première preuve de photochimie dans l'atmosphère d'une exoplanète

L'analyse et l'interprétation des données ont été le fruit d'un travail collaboratif de grande ampleur entre presque tous les membres de la communauté exoplanète internationale, réunit au sein du Transiting Exoplanet Community, et ont fait l'objet, à l'heure actuelle, de six articles publiés dans Nature (JWST Transiting Exoplanet Community Early Release Science Team *et al.*, 2023; Ahrer *et al.*, 2023; Rustamkulov *et al.*, 2023; Alderson *et al.*, 2023; Feinstein *et al.*, 2023; Tsai *et al.*, 2023). Impliquée dans chacun d'eux, ma contribution principale a été pour l'étude concernant la détection de  $\text{SO}_2$ , molécule créée par photochimie (Tsai *et al.*, 2023).

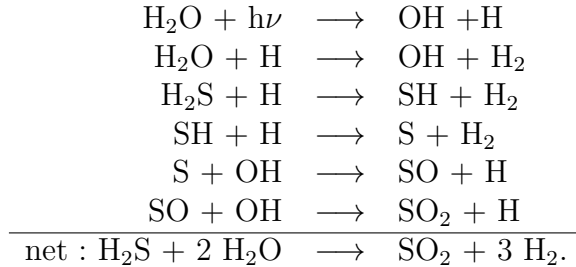
Les observations réalisées avec l'instrument NIRSpec (Rustamkulov *et al.*, 2023; Alderson *et al.*, 2023) présentent une signature spectrale très distincte entre 4 et  $4,2 \mu\text{m}$ . Les modèles classiques (équilibre radiatif-convectif-thermochimique) utilisés pour interpréter les observations n'arrivent pas expliquer cette caractéristique spectrale avec les paramètres supposés de cette planète (métallicité entre 1 et  $100 \times$  solaire et rapport C/O entre 0,3 et 0,9). En revanche, les modèles photochimiques de l'atmosphère de cette planète ont permis de lever le mystère et expliquer les observations (Figure 7.10) : les signatures spectrales sont dues au dioxyde de soufre ( $\text{SO}_2$ ).

Pour cette étude, plusieurs modèles photochimiques ont été utilisés : ARGO (Rimmer et Helling, 2016; Rimmer et Rugheimer, 2019; Rimmer *et al.*, 2021), ATMO (Tremblin



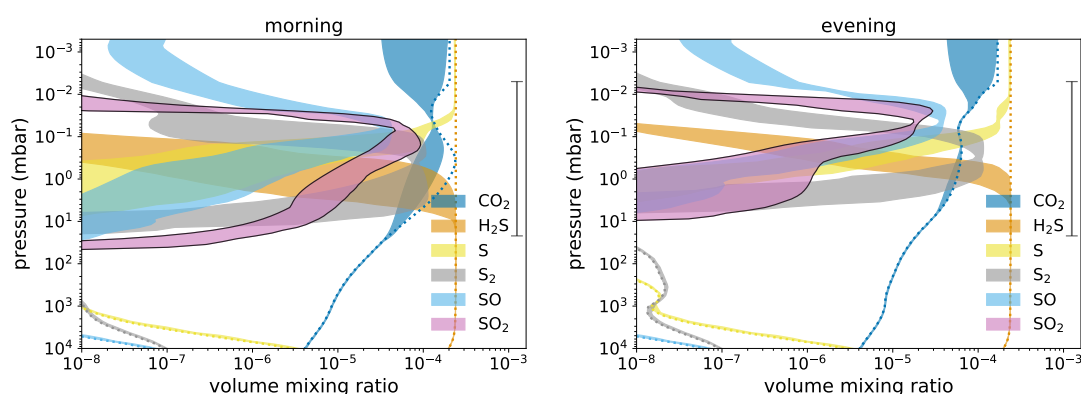
**Figure 7.10** – Spectres théoriques en transmission, calculés à partir des résultats des modèles photo-thermochimiques, avec les compositions moyennées des terminateurs jour et nuit. A gauche, ces spectres sont comparés aux observations NIRSpect PRISM (Rustamkulov *et al.*, 2023). A droite, ces spectres sont des prédictions pour des observations avec l’instrument MIRI. Issu de Tsai *et al.* (2023).

*et al.*, 2015), KINETIC (Moses *et al.*, 2011) et VULCAN (Tsai *et al.*, 2017), avec chacun leur réseau chimique contenant du soufre. Les résultats issus de ces modèles (Figure 7.11) montrent que du  $\text{SO}_2$  est produit dans le haut de l’atmosphère. Il est clairement visible que le  $\text{SO}_2$  ne provient pas des couches profondes puis transporté à plus haute altitude, comme pourrait l’être  $\text{HCN}$  et  $\text{CH}_4$  dans WASP-43b (voir Figure 4.3). Ici,  $\text{SO}_2$  est absent de la basse atmosphère ( $P > 100$  mbar) et l’équilibre thermochimique prédit une abondance très faible de cette molécule dans la zone observable ( $\sim 5 \times 10^{-3}$ -20 mbar) : moins de  $10^{-12}$  pour une métallicité  $10 \times$  solaire et moins de  $10^{-9}$  pour une métallicité  $100 \times$  solaire, ce qui est beaucoup trop faible pour expliquer les observations du JWST. En revanche, les modèles photo-thermochimiques, considérant une métallicité  $10 \times$  solaire et un rapport C/O solaire (0,55) prédisent une abondance de  $\text{SO}_2$  comprises entre 10 et 100 ppm, ce qui permet de reproduire les observations (Figure 7.10). L’analyse des voies réactionnelles ayant lieu dans l’atmosphère montre que la production de  $\text{SO}_2$  est réalisée à partir de  $\text{H}_2\text{S}$  et initiée par la photodissociation de  $\text{H}_2\text{O}$ , qui produit de l’hydrogène atomique, selon le chemin suivant :



Il est intéressant de noter que la signature de  $\text{SO}_2$  pourra également être observée à plus grandes longueur d’onde, dans la gamme couverte par l’instrument MIRI, qui n’a pas été utilisé pour le moment pour cette planète (Figure 7.10).

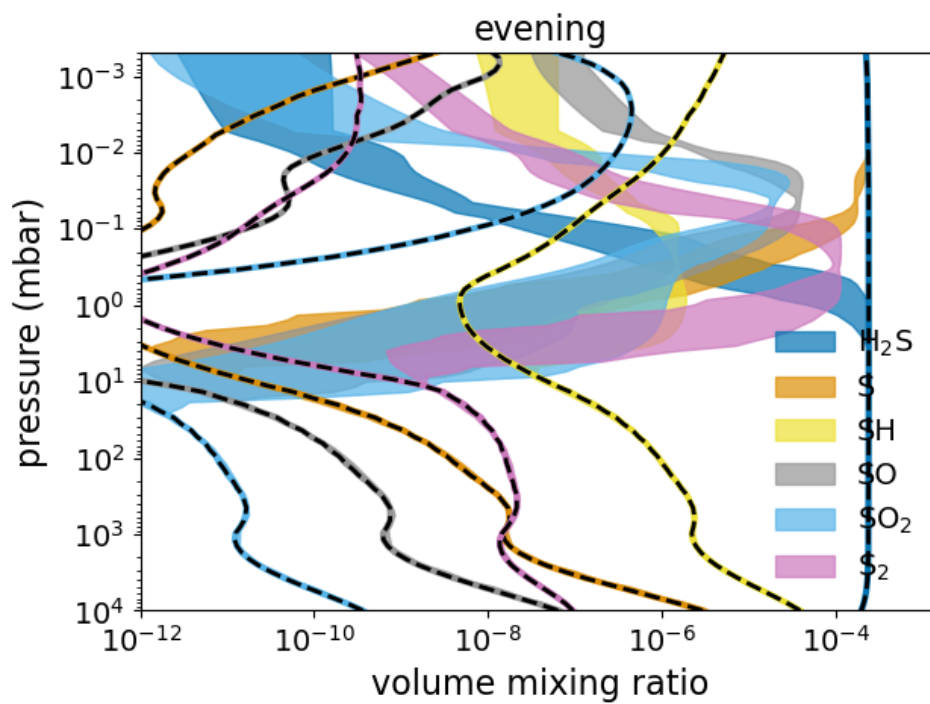
Finalement, il est important de mentionner que le schéma chimique soufré sur lequel nous travaillons était encore en phase de développement à cette époque. Avec cette version préliminaire, j’ai pu participer à l’intercomparaison de modèles pour WASP-39b.



**Figure 7.11** – Profils d’abondances des espèces soufrées et de  $\text{CO}_2$  dans l’atmosphère de WASP-39b pour le terminateur matin (gauche) et le terminateur soir (droite). Les régions colorées indiquent la gamme d’abondances possibles déterminées par les différents modèles photo-thermochimiques utilisés. L’équilibre thermochimique est indiqué par des traits pointillés. La barre verticale à droite indique la gamme de pressions sondée par les observations JWST/NIRSpec. Issu de Tsai *et al.* (2023).

Comme on peut le voir sur la Figure 7.12, cette version donnait des résultats assez éloignés des quatre autres. En utilisant les mêmes paramètres de métallicité ( $10 \times$  solaire) et d’abondances élémentaires ( $\text{C/O} = 0,55$ ), on voit que  $\text{H}_2\text{S}$  n’est pas détruit dans la haute atmosphère avec mon modèle, et que le  $\text{SO}_2$  n’est donc pas produit suffisamment pour atteindre des valeurs expliquant les observations. Pour reproduire la même quantité de  $\text{SO}_2$  produite, mon modèle impliquait une métallicité plus importante de l’atmosphère ( $100 \times$  solaire). Au vu de l’incertitude sur ces résultats (le processus de validation avec des expériences n’étant pas fini), il a été décidé de ne pas inclure les résultats de mon modèle dans la publication finale. En revanche, nous avons construit un schéma chimique hybride combinant le schéma chimique de Tsai *et al.* (2021) avec mes données de photo-dissociations pour les espèces soufrées, qui a été utilisé avec le code ATMO.

Je trouve cependant intéressant de montrer ces résultats non publiés afin d’illustrer la variation de résultats que l’on peut obtenir avec des schémas chimiques, et l’importance d’avoir un système de validation du réseau chimique. Ils prouvent également la difficulté de développer un schéma chimique et d’estimer sa fiabilité. Il faut préciser qu’aucun des autres schémas utilisés dans Tsai *et al.* (2023) n’a non plus été validé. La force de ces résultats provient du fait que les quatre modèles prédisent globalement les mêmes gammes d’abondances pour les espèces soufrées. Cependant, est-ce que le fait que quatre autres schémas chimiques, construits selon la même méthodologie (collection de réactions) est une preuve suffisante de leur véracité? Nous aurons plus d’éléments pour répondre à cette question dans les mois qui viennent avec le schéma  $\text{CHON+S+P}$  que Roméo Veillet développe pendant sa thèse. Dès que ce réseau soufré sera validé de façon définitive, une des premières applications sera l’étude de WASP-39b et la comparaison à ces résultats.



**Figure 7.12** – Profils d’abondances des espèces sulfurées dans l’atmosphère de WASP-39b pour le terminateur soir. Les régions colorées indiquent la gamme d’abondances possibles déterminées par les différents modèles photo-thermochimiques utilisés dans Tsai *et al.* (2023). Les traits colorés superposés de traits tirets noirs sont les résultats obtenus avec mon modèle cinétique utilisant un schéma sulfuré en cours de construction.

# Chapitre 8

## Conclusions et Perspectives

Nous avons vu dans ce manuscrit que mon travail de recherche au cours de ces dix dernières années s'est grandement focalisé sur l'amélioration des données physico-chimiques pour les modèles de cinétique atmosphérique. Etant donné que nous ne pourrons jamais aller faire des mesures in-situ dans les atmosphères d'exoplanètes, notre seul moyen de connaître et comprendre ces atmosphères, repose sur des observations à distance, leur analyse et leur interprétation grâce à des modèles. La fiabilité de ces derniers est donc cruciale.

C'est une opportunité formidable pour la communauté exoplanète, encore très jeune, de pouvoir profiter de dizaines d'années d'expériences et de recherches faite dans le domaine de la combustion, concernant la cinétique chimique à haute température. La forte collaboration tissée avec des chercheurs de ce domaine m'a permis d'avoir un socle solide sur lequel faire reposer mes travaux, dont les résultats principaux sont le développement de schémas chimiques validés à haute température (Venot *et al.*, 2012, 2015, 2020a; Veillet *et al.*, 2023). Ces schémas construits pour les espèces C, H, O, N vont évoluer à l'avenir et inclure d'autres éléments, comme le Soufre et le Phosphore, éléments indispensables à prendre en compte désormais, compte tenu de la qualité des observations que fournit désormais le JWST, et que fournira les observatoires du futur tels que Ariel et l'E-ELT. Ces développements sont déjà prévus dans le cadre de mon ANR EXACT, en particulier avec la thèse de Roméo Veillet. Ces schémas sont voués à évoluer et seront régulièrement mis à jour au fur et à mesure des publications de cinétique chimique de combustion.

Après l'ajout de ces éléments, il sera intéressant de travailler sur le couplage avec la chimie ionique, qui peut s'avérer très pertinente pour l'interprétation des observations du futur, comme nous l'avons montré dans Bourgalais *et al.* (2020).

Bien sûr ces schémas complets contenant un grand nombre de réactions (plus de 2000) et d'espèces chimiques (100/150), ils sont inutilisables par les modèles de circulation générale à 3 dimensions. Ces modèles étant déjà assez gourmands en terme de temps de calcul rien que pour la partie dynamique, y rajouter la résolution des équations différentielles pour la partie chimie pour autant d'espèces chimiques n'est pas envisageable. La solution qui a été trouvée est de se focaliser sur les espèces majoritaires des atmosphères et de développer un schéma réduit valide pour ce nombre restreint de molécules. Ainsi, les schémas réduits que j'ai développés (Venot *et al.*, 2019, 2020a) ont permis au premier modèle chimique à 3 dimensions de voir le jour, et ce grâce à une collaboration, de longue date, avec l'Université d'Exeter (Drummond *et al.*, 2020). Tous les futurs schémas qui seront développés auront leur pendant 'réduit' pour permettre aux modèles 3D d'être à



la pointe concernant la chimie.

Les autres données physico-chimiques indispensables aux modèles cinétiques et sur lesquelles je travaille sont les sections efficaces de photodissociation. De par leur proximité à leur étoile, ce processus de déséquilibre chimique est très important dans les atmosphères d'exoplanètes chaudes et la preuve de son existence a d'ailleurs été observé récemment par le JWST (Tsai *et al.*, 2023). Ces données étant extrêmement mal connues, j'ai monté un projet de recherche visant à étudier leur dépendance thermique. Après l'étude du dioxyde de carbone (Venot *et al.*, 2013; Venot *et al.*, 2018a), nous avons monté une plateforme de spectroscopie UV au LISA afin de pouvoir étudier les autres molécules d'intérêt atmosphérique, telles que  $C_2H_2$ ,  $NH_3$ ,  $HCN$ ,  $SO_2$ ,... Certaines molécules sont étudiées dans l'ANR EXACT, notamment par Mathilde Poveda (doctorante) et Benjamin Fleury (post-doctorant). Les autres molécules occuperont encore plusieurs années de recherche, dans le cadre notamment de stage, thèses ou post-docs. Parmi les développements possibles du montage expérimental actuel, il serait intéressant de brancher un spectromètre de masse sur la cellule afin de suivre la composition du gaz et notamment étudier l'évolution de sa composition dans le cas de dissociation. A plus long terme, on pourrait aussi transformer cette cellule en chambre de simulation atmosphérique, en y ajoutant un spectromètre infrarouge, dans la lignée de la plateforme CAAPSE ('Cell for Atmospheric and Aerosol Photochemistry Simulations of Exoplanets') montée au JPL (Fleury *et al.*, 2019). Un tel montage inédit en Europe nous permettrait de reproduire diverses compositions atmosphériques d'exoplanètes chaudes afin d'étudier la cinétique chimique s'y produisant de façon expérimentale.

Avant d'utiliser des modèles de cinétique chimique, les observations d'exoplanètes sont généralement analysées par des modèles d'inversion de données. Ceux-ci sont obligés de faire des approximations concernant la température ou la composition atmosphérique, ce qui biaise les informations retrouvés par ces modèles. Dans la continuité de mes recherches qui visent à améliorer les modèles cinétiques, il s'est avéré logique pour moi de chercher à rendre plus réalistes les modèles d'inversion de données. J'ai ainsi collaboré avec l'équipe de l'Université College London pour réaliser le premier couplage entre un modèle cinétique et un modèle d'inversion de données (Al-Refaie *et al.*, 2022b). Les résultats de ce couplage inédit sont vraiment bons et encouragent à utiliser des modèles sophistiqués pour analyser les spectres infrarouges observés d'exoplanètes. La seule limitation actuelle d'un tel modèle est son temps de calcul un peu élevé pour rendre facile son utilisation (plusieurs jours). Pour pallier ce problème, l'utilisation de l'Intelligence Artificielle (IA) pourrait être la solution.

En effet depuis quelques années, son usage s'est beaucoup développé et démocratisé. Les algorithmes de Machine Learning (ML), en particulier les réseaux neuronaux, sont de plus en plus utilisés pour traiter des jeux de données volumineux. Concernant les modèles chimiques, plusieurs premières tentatives voient le jour, notamment en utilisant la méthode des Auto Encoder (Grassi *et al.*, 2022; Tempke et Musho, 2022) qui s'avère très prometteuse pour accélérer le calcul de la cinétique chimique dans les modèles d'exoplanètes (Hendrix *et al.*, 2023). J'ai commencé très récemment à explorer cette nouvelle méthode en bénéficiant de l'expertise d'Adriana Coman (LISA) et d'Orphée Faucoz (CNES). Ensemble, nous avons encadré un stagiaire d'école d'Ingénieur (Lorenzo Buizza) afin d'étudier quelle méthode de ML serait la plus adéquate pour améliorer le temps de calcul de mon

modèle cinétique, et ce dans le cadre de la préparation de la mission Ariel. En effet, pour un modèle d'exoplanète unique, le temps de calcul est tout à fait acceptable (1–30 minutes typiquement), mais lors de son utilisation en couplage avec le modèle d'inversion de données TauREx, ce temps de calcul a besoin d'être réduit. Il est probable que l'utilisation du ML soit la clé et représente une part importante de mes futures recherches. Cette première étude nous a donné des résultats encourageants et nécessite d'être poursuivie afin de déterminer plus précisément comment orienter nos futures recherches sur cette thématique.

Bien que le nombre d'exoplanètes connues soit très important ( $\sim 5500$  à ce jour), le nombre de planètes dont on a pu observer l'atmosphère et détecter la présence de molécules est beaucoup plus faible (une centaine). Même si la couverture spectrale et la résolution des observations réalisées avec Spitzer et HST (notamment l'instrument WFC3) sont relativement faibles, des informations sur la composition chimique des exoplanètes ont pu être obtenues, comme la présence d'eau et d'espèces réfractaires (TiO, VO). Les études de populations auxquelles j'ai participé (Changeat *et al.*, 2022; Edwards *et al.*, 2022) ont permis de dégager certaines tendances générales. Parmi celles-ci, on peut noter qu'il semble que les planètes les plus froides ( $T < 2000$  K) ne présentent pas d'inversion de température dans leur profils thermiques, à l'inverse des planètes chaudes ( $T > 2000$  K) qui semblent en avoir. Ces études ont ouvert la voie aux futures études qui seront possibles avec la future génération de télescopes, notamment JWST et Ariel. Ces missions, dont les résolutions et couvertures spectrales sont/seront bien meilleures, fourniront des données de grande qualité pour des milliers d'exoplanètes, permettant d'étudier de façon détaillée la composition chimique et la dynamique atmosphérique. Les premières données du JWST obtenues pour WASP-39b en sont la preuve, puisqu'elles ont permis de détecter pour la première fois : 1. du dioxyde de carbone de façon certaine, 2. une molécule soufrée (SO<sub>2</sub>) et 3. la preuve de l'existence de processus de photochimie dans les atmosphères d'exoplanète (JWST Transiting Exoplanet Community Early Release Science Team *et al.*, 2023; Tsai *et al.*, 2023).

De nombreuses questions qui animent la communauté scientifique depuis plusieurs années vont certainement pouvoir trouver des réponses dans la prochaine décennie. Par exemple, la métallicité et les rapports d'abondances élémentaires pourront enfin être déterminés (ce qui était très difficile avec HST), ce qui permettra de contraindre les scénarios de formation planétaire (Öberg *et al.*, 2011; Turrini *et al.*, 2021). On pourra aussi comprendre pourquoi le méthane n'a pas été observé dans les jupiters chaudes (avec  $T < 1200$  K) jusqu'à présent alors que les modèles prédisent sa présence en quantité détectable dans les atmosphères (Baeyens *et al.*, 2021). Est-ce une vraie tendance ? un biais observationnel ? Cela peut-il être expliqué par une métallicité ou un rapport C/O particuliers ? Une autre grande question est de comprendre pourquoi une planète d'une dizaine de masse terrestre peut devenir une super-terre (atmosphère pauvre en H<sub>2</sub>) ou une mini-neptune (atmosphère riche en H<sub>2</sub>) ? Comment ces deux types de planètes se forment (Bourgalais *et al.*, 2020) ? Aussi, on sait que l'influence de l'étoile hôte sur la composition chimique est très importante. Mais qu'en est-il dans le cas d'étoiles très actives, qui subissent des sursauts d'énergie très brusques (des 'flares') ? J'ai été l'une des premières à me pencher sur la question pour les jupiters chaudes (Venot *et al.*, 2016). J'avais trouvé que les flares pouvaient engendrer des variations de composition très importantes, visibles sur les observations. Récemment, ce sujet a connu un nouvel engouement (Chadney *et al.*, 2017;

Konings *et al.*, 2022; Louca *et al.*, 2023; Nicholls *et al.*, 2023; Ridgway *et al.*, 2023) et toutes les études montrent que les flares peuvent impacter le spectres observés. Dans le cadre de la préparation de la mission Ariel, je vais continuer à étudier cet aspect, en collaborant notamment sur des observations d'étoiles actives et de planètes autour d'étoiles actives.

Toutes les questions mentionnées ci-dessus trouveront probablement des réponses, ou des pistes de réponses avec le JWST, mais peut-être plus certainement grâce à la mission Ariel, qui sera entièrement dédiée à l'étude des exoplanètes, et dont le but sera justement d'observer un très large échantillon de planètes afin de réaliser des études statistiques.

La future génération de télescopes et les données d'une qualité sans précédent qu'ils fourniront nous permettront de mieux comprendre la diversité de mondes planétaires qui nous entourent, ainsi que l'origine de cette diversité. Ces télescopes contribueront notamment à répondre à un des quatre thèmes ambitieux du programme Cosmic Vision (2015-2025) de l'ESA : 'Quelles sont les conditions de formation d'une planète et d'émergence de la vie?' Il est également certain que dans quelques années, à mesure que nous approfondirons nos connaissances sur les planètes extrasolaires et l'interaction avec leur environnement, de nouvelles questions encore plus précises seront soulevées, auxquelles nous continuerons de tenter d'y répondre avec l'approche que nous avons développée couplant modèles, expériences et observations. Nos modèles et nos montages expérimentaux évolueront pour répondre au besoin des futures données observationnelles que fourniront les prochains télescopes encore plus performant ; le thème des planètes extrasolaires, notamment tempérées, ayant été annoncé comme prioritaire pour les missions de classes L pour le programme Voyage 2050 de l'ESA. Pour aller en ce sens, une évolution logique de mes travaux serait d'aller vers l'étude des planètes terrestres et tempérées. J'ai d'ailleurs commencé cette évolution dans le cadre du stage de Master 2 Recherche de Guillaume Petzold.

Finalement, j'ai choisi d'aborder mes travaux se rapportant uniquement aux exoplanètes, mais nombre de mes travaux de recherche trouvent des applications au-delà, ou plutôt bien plus proche que ces mondes lointains.

Les schémas chimiques validés à haute température peuvent être appliqués aux atmosphères de certaines planètes du Système Solaire. Par exemple, nous nous sommes servis des abondances observées de monoxyde de carbone dans les planètes géantes pour contraindre l'abondance en eau dans la troposphère de ces planètes, car cette dernière, condensant, ne peut être observée directement (Cavalié *et al.*, 2014, 2017, 2020; Mousis *et al.*, 2014). Les résultats obtenus de modèles 1D et 2D utilisant nos schémas chimiques servent d'ailleurs de support à la proposition d'envoyer une sonde vers Uranus (Mousis *et al.*, 2018, 2022; Cavalié *et al.*, 2020; Cavalié, 2022). Aussi, le schéma soufré, une fois développé, pourra être appliqué à l'étude de l'atmosphère de Vénus, dont la chimie du soufre n'est pas encore très bien comprise (Krasnopolsky, 2018; Shao *et al.*, 2022; Stolzenbach *et al.*, 2023).

Concernant les sections efficaces d'absorption, nous nous sommes focalisés dans ce manuscrit sur les hautes températures, mais la dépendance thermique est aussi visible lorsque l'on va sur des gammes de température plus froides que la température ambiante. Nos mesures de CO<sub>2</sub> jusqu'à 150 K sont d'ailleurs utilisées dans les modèles atmosphériques de Mars, notamment pour interpréter les observations du spectromètre SPICAM à bord de la sonde Mars Express (Lefèvre *et al.*, 2021) mais aussi des observations UV de l'atmosphère de Vénus (Lee *et al.*, 2022b). Le dispositif expérimental actuellement en place au

LISA ne permet pas de faire des mesures à froid, mais nous possédons tout le matériel de refroidissement de la cellule. Après quelques années d'études à haute température, nous pourrions facilement installer notre système de refroidissement afin d'étudier les molécules d'intérêt atmosphérique à basse température, telles que SO ou (SO)<sub>2</sub> pour répondre aux besoins des modélisateurs.



## Troisième partie

### Implication dans la communauté



## 8.1 Introduction

Faire de la recherche ne consiste pas uniquement à publier des articles scientifiques. Une part importante de ce métier est lié à des services et une organisation de la communauté. Dans cette dernière partie, je présente les différents institutions, organisations, comités. . . dans lesquels je me suis impliquée ces dernières années. Je mentionne également les différents enseignements que j'ai eu l'opportunité de donner.

## 8.2 Animation de programmes et projets

### 8.2.1 EXACT

Je suis **PI** du projet de recherche **EXACT (EXoplanetary Atmospheric Chemistry at high Temperature)**. Ce projet a été financé initialement via deux organismes : le PNP (4 k€ en 2019 et 5 k€ en 2020) et le CNES, via son Appel à Projet de Recherche (68 k€ en 2019, 16 k€ en 2020, 11 k€ en 2021, 2023), ce qui m'a permis de faire grandir le projet jusqu'à obtenir le soutien de l'Agence Nationale de la Recherche, dans le cadre de l'instrument de financement Jeune Chercheur - Jeune Chercheuse en janvier 2022 (565 k€, ANR-21-CE49-0008-01).

Ce projet a pour but d'améliorer la compréhension de la composition chimique des atmosphères des exoplanètes à partir des futures observations réalisées avec les (futurs) télescopes JWST et Ariel. L'impact de ce projet est donc très important, car il contribue à la définition des planètes cibles qui seront observées par Ariel. Pour atteindre l'objectif du projet, nous effectuons des développements sur les modèles numériques (modèles cinétiques d'atmosphère et modèles de retrieval) et également des mesures expérimentales de données physico-chimiques. Le projet EXACT a été divisé en quatre axes de travail (Work Package - WP) :

- Déterminer la composition des atmosphères des exoplanètes (WP1) : L'objectif était de coupler notre modèle de cinétique chimique avec notre code d'inversion TauREx afin de prendre en compte la composition dite hors-équilibre de l'atmosphère directement pendant l'étape d'analyse des données. Il s'agit maintenant d'utiliser ce modèle couplé et de l'améliorer.
- Représenter la diversité chimique des atmosphères (WP2) : L'objectif est d'ajouter les éléments chimiques soufre (S) et phosphore (P) à notre schéma chimique, contenant actuellement carbone, hydrogène, oxygène et azote (C, H, O, N).
- Déterminer les variations longitudinales et latitudinales de la composition chimique des atmosphères (WP3) : L'objectif était d'inclure une chimie complexe dans un modèle à trois dimensions. Ce WP a été finalisé et n'apparaît pas dans le projet financé par l'ANR.
- Mesurer expérimentalement des données physico-chimiques à températures élevées pour une modélisation représentatives des atmosphères des exoplanètes chaudes (WP4) : Nous mesurons et analysons la dépendance thermique des sections efficaces d'absorption dans l'UV des principales molécules d'intérêt atmosphérique.



## 8.2.2 Implication dans Ariel

Depuis une dizaine d'années, je suis très impliquée dans la mission spatiale Ariel : **je suis membre du Consortium Scientifique et coordinatrice du Groupe de travail Chimie avec Yamila Miguel (SRON, Leiden)**. Nous coordonnons les différentes activités de recherche menées par les membres du Groupe de travail (environ 80 membres, dont une trentaine vraiment actifs) afin de préparer les futures observations de ce télescope. Nous organisons des réunions (en visioconférence) toutes les six semaines afin de suivre l'avancement des différents projets menés par notre groupe. Plusieurs publications traitant de la chimie dans les atmosphères d'exoplanètes ont ainsi vu le jour (i.e. Venot *et al.* 2018b; Moses *et al.* 2022; Bourgalais *et al.* 2020; Rodgers-Lee *et al.* 2023). Nous avons également des réunions avec les coordinateurs des autres Groupes de Travail afin de créer et gérer les interactions entre les différentes thématiques. Depuis avril 2021, **je suis également membre du Science Team d'Ariel**, dont le rôle est notamment de maximiser le retour scientifique de la mission, d'optimiser les performances scientifiques du télescope, de finaliser la liste des cibles qui seront observées.

## 8.2.3 Organisation de Conférences, Ateliers, Ecoles

J'ai participé à l'organisation de nombreuses manifestations en tant que SOC. La liste est donnée ci-dessous :

2019, 2021, 2023 : Membre du SOC de l'Ecole ARES

2019 – 2023 : Membre du SOC des Journées de la SF2A

2022 : Membre du SOC d'une Ecole des Houches : *Characterization of Exoplanets : From Transitional Planets to Jupiters with JWST, Ariel and Ground-based Observatories*, Septembre 2022

2022 : Membre du SOC du 5<sup>th</sup> *Chianti Topics Workshop : Atmospheres*

2021 : Chair du SOC de l'atelier PNP des Journées de la SF2A

2020 – 2022 : Membre du SOC de *European Planetary Science Congress (EPSC)* et Coordinatrice du Programme Group *Exoplanets and Origins*

2020 : Membre du SOC du Workshop *ExoSystèmes 1 : Evolution*

2019 : Membre du SOC du Workshop *ExoJC 2019* (première rencontre annuelle des jeunes chercheurs en exoplanétologie)

2019 : Membre du SOC du Workshop *Planets in Laboratory* (repoussé en raison de la crise sanitaire)

2019 – 2022 : Covener et co-covener de plusieurs sessions *Exoplanets and Origins* à EPSC

2013 – 2018 : Co-covener et Chairperson d'une session *Exoplanets and Origins* à EPSC

2016 : Membre du SOC du Workshop *Exoplanets and Disks*

## 8.3 Responsabilités au sein de conseils et commissions scientifiques

### 8.3.1 Déléguée Scientifique INSU-AA

Depuis janvier 2023, j'ai pris la fonction de Déléguée Scientifique pour l'Institut National des Sciences de l'Univers, domaine Astronomie et Astrophysique (INSU-AA), à

hauteur de 25% de mon temps de travail. Je suis en charge du périmètre ‘Planétologie et Origines’. Mes missions sont d’évaluer au fil de l’eau des demandes de financements, des requêtes pour des Communiqués de Presse, de suivre le déroulé de missions spatiales en développement, notamment en participant aux CIOs (Commissions Inter-Organisations) avec le CNES. Je suis également le réseau de référents égalité dans les laboratoires, mis en place de façon pilote dans le domaine AA pour l’INSU. En tant que Déléguée Scientifique, j’assure également le suivi de proximité des laboratoires LPC2E, LAB, SYRTE, IMCCE et UTINAM. Finalement, un des rôles des Délégués Scientifiques est de préparer la prospective de l’INSU.

### 8.3.2 PNP et CET

- De 2019 à fin 2022, j’ai été membre du Conseil Scientifique du Programme National de Planétologie (PNP), plus particulièrement le thème *Systèmes extrasolaires*. En plus des diverses tâches qui incombent au CS (évaluation des demandes annuelles de financements, attribution des crédits, avis sur les demandes de labellisation de tâches de service, proposition de médailles CNRS, ...), j’ai pris en charge l’organisation de l’atelier PNP lors des journées de la SF2A 2021, point fort de l’animation de la communauté française de planétologie.

- De 2020 à fin 2022, j’ai fait partie du Comité Exoplanètes Transverse, qui a été créé suite à la prospective INSU AA 2019. Il regroupe les membres de la thématique *Exoplanètes* des différents CS des Programme Nationaux et Actions Spécifiques de l’INSU (PNP, PNPS, PCMI, PNST, ASHRA). Son rôle est d’évaluer tous les dossiers (demande soumise à l’AO de l’INSU, à la CSAA, ...) liés au thème *Exoplanètes* et également d’animer une prospective scientifique de cette thématique.

J’ai quitté ce conseil et ce comité en prenant mes fonctions de Déléguée Scientifique INSU-AA en janvier 2023.

### 8.3.3 CSAA

J’ai été nommée membre de la Commission Spécialisée Astronomie-Astrophysique en 2019 pour mes compétences en astrophysique de laboratoire et dans le domaine des exoplanètes. Entre autres, nous examinons des demandes de financement et répartissons les crédits concernant des équipements ou des actions nouvelles ne relevant pas des programmes nationaux. Nous évaluons également les Services Nationaux d’Observation : proposition de labellisation ou de délabellisation, suivi des services en cours. Depuis janvier 2023, je fais partie de la CSAA en tant que Déléguée Scientifique.

### 8.3.4 SF2A

**J’ai été élue au Conseil de la SF2A en 2018 pour un premier mandat durant lequel j’ai pris la responsabilité de trésorière. En 2022, j’ai été réélue pour un second mandat et assure désormais le rôle de Vice-Présidente.** L’événement principal que nous organisons sont les Journées de la SF2A, qui regroupent toutes les communautés de l’astrophysique en France. J’ai pris une part active à l’organisation de

ces journées depuis que j'ai rejoint le Conseil et à la publication des Proceedings qui y sont associés. Lors de ces journées, nous remettons le prix de la meilleure thèse, du (de la) meilleur(e) Jeune Chercheur(se) et le prix Gemini, récompensant une collaboration entre professionnels et amateurs. En amont des Journées nous avons donc des dossiers de candidature à lire et évaluer. Nous avons de nombreuses autres tâches, plus ou moins ponctuelles. Pour n'en citer que quelques unes, nous évaluons et finançons des projets de diffusion scientifique, nous sommes en relation avec l'Union Astronomique Internationale et proposons des nominations pour les divers appels<sup>1</sup>, nous prenons position sur des sujets "grand public" parfois mal traités par les médias afin de rétablir une vérité scientifique (par exemple, la pollution lumineuse induites par le projet de constellations de Starlinks<sup>2</sup> et le phénomène de la "Super Lune Rose"<sup>3</sup>)...

### 8.3.5 Commission Femmes et Astronomie

Le Conseil de la SF2A a créé en 2020 la **Commission Femmes et Astronomie, que j'ai tenu à intégrer**. Cette commission rassemble quelques membres du Conseil de la SF2A, mais aussi d'autres membres de la communauté qui ont à coeur d'agir pour lutter contre les problèmes de genre (par exemple, 24% de Femmes seulement en Section 17 du CNRS). En effet, le but de notre commission est de promouvoir la visibilité des problèmes de genre au sein de notre communauté et inciter à les résoudre. Lors des deux dernières éditions des Journées SF2A, nous avons organisé une séance plénière et un atelier sur les inégalités entre les Femmes et les Hommes en Astronomie. Ces deux événements (plénière et atelier) sont parmi ceux qui ont rassemblé le plus de participants de la semaine (en 2022 : 220 en plénière et 108 à l'atelier). Ce fort succès montre que ce sujet intéresse beaucoup les membres de notre communauté et nous ont confirmé l'importance de mener ce type d'actions. Suite à ces événements, nous avons écrit des proceedings, afin de publier les études que nous avons menées, notamment sur la représentativité des Femmes dans nos laboratoires d'Astrophysique (Ouazzani *et al.*, 2022) ou sur le sexisme et le harcèlement sexuel dans la communauté européenne de physiciens (Manchon *et al.*, 2023). La commission est également à l'origine de d'une campagne d'affiche pour lutter contre le harcèlement, ainsi qu'à l'origine de la mise en place des référents égalité dans les laboratoires INSU-AA. Plus d'informations sont disponibles sur le site de la SF2A.<sup>4</sup>

### 8.3.6 DIM Origines

Depuis 2022, je fais partie du Conseil Scientifique du Domaine d'Innovation Majeur (DIM) Origines. En particulier, je suis co-coordinatrice de la Commission thématique 'Origines du milieu interstellaire, des étoiles et des systèmes exoplanétaires'. Nous évaluons tous les ans les dossiers de réponse aux Appels d'Offre *Thèses et Post-doc* et *Équipement* pour des financements en région Ile de France.

1. Par exemple le représentant français E-ROAD (branche Europe de l'Office of Astronomy for Development), le coordinateur national pour le volet diffusion des connaissances...

2. <https://www.industrie-techno.com/article/les-industriels-des-mega-constellations-doivent-prendre-64764>

3. <https://twitter.com/EricLagadec/status/1386956100642213889>

4. [https://sf2a.eu/website2023/commission\\_femmes\\_et\\_astronomie/](https://sf2a.eu/website2023/commission_femmes_et_astronomie/)

## 8.4 Au sein du LISA

### 8.4.1 Conseil de Laboratoire

Je suis membre élue du Conseil Scientifique du LISA depuis Janvier 2020. Nous avons un rôle consultatif pour la direction pour diverses décisions. En tant que membre du CL, j'ai récemment participé au groupe de travail qui était en charge de réécrire le Règlement Intérieur du Laboratoire. J'ai également souhaité, suggéré et suivi la mise en place de deux référents égalité dans notre laboratoire. L'écriture de la lettre de mission et le recrutement s'est fait avec Béatrice Marticorena, Directrice Adjointe du LISA.

### 8.4.2 Comité Interne des Thèses

Depuis 2018, je suis membre du Comité Interne des Thèses au LISA. Nous organisons des séminaires donnés par les doctorants de 1ère et 2ème années, ainsi que la Journée des nouveaux entrants, qui permet aux nouveaux arrivants de se familiariser avec le fonctionnement du laboratoire. Nous jouons également un rôle important en cas de problèmes ou conflits pendant une thèse, afin de trouver des solutions permettant de les résoudre. Nous avons d'ailleurs été sollicités à plusieurs reprises en 2021 et avons trouvé dans la plupart des cas, des solutions satisfaisant toutes les personnes concernées afin que les thèses aillent jusqu'à la soutenance.

## 8.5 Jury et Comité de suivi de thèses

### 8.5.1 Jury de thèse

J'ai été membre de deux jury de thèse en tant qu'examinatrice :

- William Pluriel a soutenu sa thèse intitulée *Effet de la structure tridimensionnelle des atmosphères d'exoplanètes chaudes sur les observations et les modèles d'inversion de données* le 9 novembre 2020 à l'Université de Bordeaux. En raison de la situation sanitaire, seul son directeur de thèse et la présidente du jury ont assisté en présentiel à la soutenance. Les autres membres du jury étaient en visioconférence.

- Benjamin Benne a soutenu sa thèse intitulée *Modélisation photochimique de l'atmosphère de Triton* le 25 septembre 2023 à l'Université de Bordeaux.

### 8.5.2 Comité de suivi de thèse

J'ai fait et je fais partie de deux Comités de Suivi de thèse :

- Louis Maratrat, qui a débuté sa thèse au LATMOS en octobre 2022 sous la direction de Nathalie Carrasco. Le sujet de sa thèse est 'La photochimie du soufre dans les atmo-

sphères exoplanétaires : contribution du volcanisme à la chimie prébiotique.’

- Gwenaël Milcareck, qui a effectué sa thèse entre le LATMOS et le LMD sous la direction de Franck Montmessin et Sandrine Guerlet entre octobre 2020 et novembre 2023. J’ai intégré le Comité de Suivi pour la troisième année seulement, en remplacement de Jérémy Leconte qui collabore désormais de façon étroite avec Gwenaël.

## 8.6 Comité de sélection

J’ai fait partie de deux Comités de Sélection pour des postes de Maître de Conférence :

- Au printemps 2020, j’ai fait partie du Comité de Sélection n° 4754 pour un poste au LISA, sur le profil *Recherche de structures moléculaires et développement d’instrumentations innovantes pour les missions spatiales d’exploration in-situ des environnements planétaires et cométaires*. Nous avons examiné les dossiers de candidature reçus, auditionnés (en visioconférence) une partie des candidats, et sélectionné la candidate lauréate.

- Au printemps 2022, j’ai fait partie du Comité de Sélection n° 402 pour un poste à l’IAP, sur le profil *Recherche et Caractérisation d’Exoplanètes*. Nous avons examiné les dossiers de candidature reçus, auditionnés (en présentiel) une partie des candidats, et sélectionné le candidat lauréat.

## 8.7 Enseignements et encadrement

### 8.7.1 Enseignements

En tant que chercheuse CNRS, je n’ai pas de tâche d’enseignement. Cependant, j’ai eu l’opportunité de donner quelques cours, dont je donne la liste ci-dessous.

2023	Chemistry Planetary Atmospheres, Ariel School, Doctorants/Post-Doctorants, 1,5h de Cours
2023	Exoplanètes, University of Science and Technology of Hanoi, M1 Space, 5h de Cours
2023	Exoplanètes, University of Science and Technology of Hanoi, M2 Space, 10h de Cours
2022	Chemistry in exoplanet atmospheres, Ecole de Physique des Houches « Exo-Atmosphere », Doctorants/Post-Doctorants, 2h de Cours
2022	University of Science and Technology of Hanoi, M2 Space, 15h de Cours sur les Exoplanètes
2021	Planetary Atmospheres & Chemistry and Molecular Spectroscopy, Ariel School, Doctorants/Post-Doctorants, 3h de Cours + 3h TD
2019	Planetary Atmospheres & Chemistry and Molecular Spectroscopy, Ariel School, Doctorants/Post-Doctorants, 3h de Cours
2017	Outils Mathématiques et Physiques, Université Paris-Est Créteil, L1 Sciences et Vie de la Terre, 18h de TD
2015	Formation stellaire, KU Leuven, M2 Astronomie, 9h de TD
2010 – 2012	Université du Temps Libre, Laboratoire d’Astrophysique de Bordeaux, Adultes, 9h de Cours
2009	Méthodologie en Sciences Expérimentales, Université Bordeaux 1, L1 Mathématiques, Informatique, Sciences de la Matière et Ingénierie, 18h de Cours/TD

### 8.7.2 Encadrement d’étudiants et jeunes chercheurs

Voici la liste des étudiants ou jeunes chercheurs et chercheuses que j’ai encadré :

#### Post-Doctorat :

2023 – 2025 Deborah Bardet, LISA

« Modèles d’inversion de données d’exoplanètes »

2020 – 2024 Benjamin Fleury, LISA

« Mesures de sections efficaces à haute température »

1 article : Fleury et al., *Experimental Investigation of the Photochemical Production of Hydrocarbons in Warm Gas Giant Exoplanet Atmospheres*, ApJ, 956, 2, 134 (2023).

#### Doctorat :

2022 – 2025 Roméo Veillet, LISA, *co-direction* avec B. Sirjean

« Développent d’un schéma chimique CHON+PS validé à haute température avec des applications en planétologie »

1 article : Veillet et al., *An extensively validated C/H/O/N chemical network for hot exoplanets disequilibrium chemistry*, A&A, 682, A52 (2024)

- 2021 – 2024 Emilie Panek, IAP, *co-direction* avec P. Drossart et J.P. Beaulieu  
« Comparaison des atmosphères de naines brunes et d'exoplanètes gazeuses chaudes »  
1 article : Panek et al., *A re-analysis of equilibrium chemistry in five hot Jupiters*, A&A ; 677 A51 (2023).
- 2019 – 2023 Mathilde Poveda, LISA, *co-direction* avec Y. Bénilan et P. Tremblin  
« Détermination de sections efficaces à hautes températures et modélisation représentative des atmosphères des exoplanètes chaudes ciblées par Ariel »  
6 articles en co-auteur
- 2017 – 2021 Robin Baeyens, IvS, KU Leuven, *co-encadrement* avec L. Decin et L. Carone  
« 2D variations in exoplanet atmospheres »  
3 articles + 14 en co-auteur : Baeyens et al., *Grid of pseudo-2D chemistry models for tidally locked exoplanets - I. The role of vertical and horizontal mixing*, MNRAS, 505, 5603-5653 (2021) ; Baeyens et al., *Grid of pseudo-2D chemistry models for tidally locked exoplanets - II. The role of photochemistry*, MNRAS, 512, 4877-4892 (2022) ; Baeyens et al., Erratum : Grid of pseudo-2D chemistry models for tidally locked exoplanets - I. The role of vertical and horizontal mixing, MNRAS, 2, 1839-1840 (2022).

#### Master et Licence :

- 2023 Lorenzo Buizza, CNES, *co-encadrement* avec Ophée Faucoz, Ingénieur (6 mois)  
« Machine Learning for the atmospheric characterization of exoplanets »
- 2023 Maxime Daugeron, LISA, Licence 3 (6 semaines)  
« Etude de la composition chimique d'atmosphères d'exoplanètes en fonction de leur scénario de formation planétaire »
- 2022 Guillaume Petzold, LISA, Master 2 (5 mois)  
« Développement d'un modèle atmosphérique de Super-Terres »
- 2021 Emilie Panek, IAP, *co-encadrement* avec P. Drossart et J.P. Beaulieu, Master 2 (4 mois)  
« Spectroscopy of exoplanets from transit space and ground based observations »
- 2021 Roméo Veillet, LESIA, *co-encadrement* avec B. Charnay, Master 2 (4 mois)  
« Modélisation 3D de la chimie des atmosphères de mini-Neptunes chaudes »
- 2019 Mathilde Poveda, LISA, Master 2 (5 mois)  
« Analyse de données spectroscopiques VUV et applications aux atmosphères d'exoplanètes »
- 2018 Thy-My-Ngan Le, LISA, Master 2 (6 mois)  
« VUV-absorption cross section at high temperature and warm exoplanet atmosphere modeling »
- 2018 Romain Lhoussaine Ben Brahim, LISA, Licence 3 (5 semaines)  
« Comparaison de deux schémas chimiques pour la modélisation de l'atmosphère des exoplanètes chaudes »
- 2017 Aida El Haouat, LISA, Master 2 (3 mois)  
« Mesure de sections efficaces d'absorption VUV de CO<sub>2</sub> et HCN à hautes températures et leur application à l'atmosphère chaude des exoplanètes »
- 2017 Robin Baeyens, IvS, KU Leuven, Master 2 (6 mois)  
« Modeling hot Jupiter atmospheres : coupling between 3D GCM and disequilibrium chemistry »
- 2013 Bram Buysschaert, IvS, KU Leuven, Licence 3 (2 mois)  
« Influence of different parameters on 1D abundance simulations of hot Jupiters »

## 8.8 Autres

En octobre 2019, **j'ai participé à la prospective INSU AA et tenu le rôle d'animatrice de groupe**, en binôme avec Marc Ferrari. Pendant cette semaine de prospective, des présentations et discussions étaient organisées en plénière le matin, et des ateliers en petit groupe ( $\sim 50$  personnes) avaient lieu dans l'après-midi. Des questions spécifiques étaient traitées et débattues dans ces ateliers, afin de connaître le point de vue des membres de la communauté AA sur les thématiques et organisation de l'INSU, sur les moyens, les ressources humaines, ... Nos rôles en tant qu'animateurs étaient de présenter les questions, animer les discussions et cadrer les débats. A la fin du séminaire, nous avons synthétisé ces échanges et faire la restitution des discussions à tous les participants de la prospective. Ce fut un travail très intense (se poursuivant bien après les ateliers pour en faire une synthèse) mais très enrichissant. Le travail d'animateur s'est poursuivi dans les mois suivants, puisque nous avons participé à la rédaction du rapport de prospective.





## Quatrième partie

# Curriculum Vitae, Liste de Publications et Diplôme de Doctorat



# Olivia VENOT



Laboratoire Interuniversitaire des Systèmes Atmosphériques (LISA)  
Université Paris Est Créteil  
61 avenue du Général de Gaulle  
94010 Créteil Cedex

Tél. : +33(0)1 45 17 15 89  
Mobile : +33(0)6 30 92 70 07  
Mail : olivia.venot@lisa.ipsl.fr

Nationalité française  
Née le 13/09/1986

---

## Thèmes de Recherche

---

Étude de la composition chimique des atmosphères planétaires :

- Modélisation cinétique d'atmosphères
- Développement de schémas chimiques
- Mesures expérimentales de données physico-chimiques

---

## Postes & Coursus

---

Depuis Oct. 2017 **Chargée de Recherche CNRS**, LISA, Créteil.  
2016 – 2017 **Post-doctorat Fellowship CNES**, LISA, Créteil.  
2013 – 2016 **Post-doctorat Fellowship FWO/Interdisciplinary Research Grant**, Instituut voor Sterrenkunde, Louvain, Belgique. **Bourse de mobilité à l'étranger FWO** (6 mois) au LISA  
2012 – 2013 **Post-doctorat**, ERC E<sub>3</sub>ARTHS, Lab. d'Astrophysique de Bordeaux, Floirac.  
2012 **Doctorat**, ERC E<sub>3</sub>ARTHS/Région Aquitaine, Lab. d'Astrophysique de Bordeaux, Floirac.  
2009 **Master Astrophysique et Physique des Corpuscules**, Univ. Bordeaux 1, *mention Bien*

---

## Activités de Recherche

---

**Publications et communications :**

- **63 articles publiés** dans des revues à comité de lecture, dont **11 en première auteur**
- **51 contributions orales** (dont **20 invitées**) et **5 posters** lors de congrès et séminaires

**Campagnes expérimentales en synchrotron :**

- PI de 3 proposal SOLEIL/DESIRS (3 x 72h) - co-PI de 3 proposal BESSY/3m-NIM (66 jours)

**Observations :**

- co-PI de proposals HST, JWST, GEMINI, CFHT (Spirou), SOPHIE, HARPS
- observations au T193 (SOPHIE) de l'OHP

---

## Financement de projets

---

2019 – 2023 **PI APR CNES**, *EXACT* (109 k€)  
2022 – 2025 **PI ANR JCJC**, *EXACT : EXoplanetary Atmospheric Chemistry at high Temperature* (565 k€)  
2020 **PI AO INSU - PNP**, *EXACT* (5 k€)  
2019 **co-PI** thèse CNES, *Sections efficaces à hautes T et modèles d'exoplanètes chaudes ciblées par Ariel*  
2019 **PI AO INSU - PNP**, *EXACT* (4 k€)  
2019 **co-PI** ISSI Project, *An intercomparison of 1D chemical kinetics code for exoplanet atmospheres*  
2018 **PI AO interne LISA**, *Plateforme Spectroscopie UV* (16 k€)  
2018 **PI AO INSU - PNP**, *Préparation de la mission spatiale JWST* (5 k€)

---

## Responsabilités, animation scientifiques et activités d'administration

---

### Responsabilités pour la communauté :

- 2023 – ... Déléguée Scientifique INSU-AA, périmètre Planétologie et Origines
- 2022 – ... Membre du DIM ORIGINES, coordinatrice de la commission *Origine du milieu interstellaire, des étoiles et des systèmes exoplanétaires*
- 2020 – ... Membre élue du Conseil d'Unité du LISA
- 2019 – ... Membre de la Commission Spécialisée Astronomie et Astrophysique (CSAA)
- 2018 – ... Membre élue du Conseil d'Administration de la SF2A (Vice-Présidente (2022- ...) / Trésorière (2018-2022))
- 2018 – ... Membre du Comité Interne des Thèses au LISA
- 2020 – 2023 Membre du Comité Exoplanètes Transverse
- 2019 – 2023 Membre du Conseil Scientifique du PNP (Thème Systèmes extrasolaires)
- 2019 Coordinatrice d'atelier lors du séminaire de prospective INSU Astronomie-Astrophysique
- 2014 – 2016 Responsable de la base de données Lirias pour les publications de l'Institut voor Sterrenkunde

### Activités en lien avec les missions spatiales :

- 2021 – ... Membre du ESA Ariel Science Team
- 2015 – ... Responsable du Working Group *Chimie* d'Ariel
- 2015 – ... Membre du Consortium Scientifique d'Ariel et de plusieurs Working Groups (*Spectral Retrieval, Spectroscopic Database*)
- 2015 – ... Membre de Working Groups JWST (*MIRI Modeling, Early Release Science - Direct Imaging, Early Release Science - Transiting*)

### Organisation de conférences :

- 2019, 2021, 2023 Membre du SOC de l'Ecole ARES
- 2019 – 2023 Membre du SOC des Journées de la SF2A
- 2022 Membre du SOC d'une Ecole des Houches : *Characterization of Exoplanets : From Transitional Planets to Jupiters with JWST, Ariel and Ground-based Observatories*, Septembre 2022
- 2022 Membre du SOC du *5<sup>th</sup> Chianti Topics Workshop : Atmospheres*
- 2021 Chair du SOC de l'atelier PNP des Journées de la SF2A
- 2020 – 2022 Membre du SOC de *European Planetary Science Congress* (EPSC) et Coordinatrice du Programme Group *Exoplanets and Origins*
- 2020 Membre du SOC du Workshop *ExoSystèmes 1 : Evolution*
- 2019 Membre du SOC du Workshop *ExoJC 2019* (première rencontre annuelle des jeunes chercheurs en exoplanétologie)
- 2019 Membre du SOC du Workshop *Planets in Laboratory* (repoussé en raison de la crise sanitaire)
- 2019 – 2022 Covener et co-covener de plusieurs sessions *Exoplanets and Origins* à EPSC
- 2013 – 2018 Co-covener et Chairperson d'une session *Exoplanets and Origins* à EPSC
- 2016 Membre du SOC du Workshop *Exoplanets and Disks*
- 2011, 2013 Membre du LOC des Journées Portes Ouvertes de l'Observatoire de Floirac

### Activité de relecture :

*Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, The Astrophysical Journal, Astronomy & Astrophysics, Icarus*

---

## Encadrement d'étudiants

---

- 2022-2025 Roméo Veillet, LISA, *direction principale, co-direction* avec B. Sirjean, Doctorat  
2021-2024 Emilie Panek, IAP, *co-direction* avec P. Drossart et J.P. Beaulieu, Doctorat  
2019-2023 Mathilde Poveda, LISA, *co-direction* avec Y. Bénilan, Doctorat  
2017-2021 Robin Baeyens, IvS, KU Leuven, *co-encadrement* avec L. Decin, Doctorat  
2023 Lorenzo Buizza, CNES, *co-encadrement* avec O. Faucoz, Ingénieur (6 mois)  
2023 Maxime Daugeron, LISA, Licence 3 (6 semaines)  
2022 Guillaume Petzold, LISA, Master 2 (5 mois)  
2021 Emilie Panek, IAP, *co-encadrement* avec P. Drossart et J.P. Beaulieu, Master 2 (4 mois)  
2021 Roméo Veillet, LESIA, *co-encadrement* avec B. Charnay, Master 2 (4 mois)  
2019 Mathilde Poveda, LISA, Master 2 (5 mois)  
2018 Thy-My-Ngan Le, LISA, Master 2 (6 mois)  
2018 Romain Lhoussaine Ben Brahim, LISA, Licence 3 (5 semaines)

---

## Prix et distinctions

---

- 2022 RIPEC catégorie 3  
2017 Prime d'Encadrement Doctoral et de Recherche  
2011 Prix de la meilleure présentation orale lors de la "Journée de l'Ecole Doctorale des Sciences Physiques et de l'Ingénieur"

---

## Activités d'enseignement

---

- 2023 Planetary Atmospheres & Chemistry, Ariel School, Doctorants/Post-Doctorants, 1,5 h de Cours  
2023 University of Science and Technology of Hanoi, M2 Space, 10h de Cours sur les Exoplanètes  
2023 University of Science and Technology of Hanoi, M1 Space, 5h de Cours sur les Exoplanètes  
2022 Chemistry in exoplanet atmospheres, Ecole de Physique des Houches « Exo-Atmosphere », Doctorants/Post-Doctorants, 2h de Cours  
2021 University of Science and Technology of Hanoi, M2 Space, 15h de Cours sur les Exoplanètes  
2021 Planetary Atmospheres & Chemistry and Molecular Spectroscopy, Ariel School, Doctorants/Post-Doctorants, 3h de Cours + 3h TD  
2019 Planetary Atmospheres & Chemistry and Molecular Spectroscopy, Ariel School, Doctorants/Post-Doctorants, 3h de Cours  
2017 Outils Mathématiques et Physiques, Université Paris-Est Créteil, L1 Sciences et Vie de la Terre, 18h de TD  
2015 Formation stellaire, KU Leuven, M2 Astronomie, 9h de TD  
2010 – 2012 Université du Temps Libre, Laboratoire d'Astrophysique de Bordeaux, Adultes, 9h de Cours  
2009 Méthodologie en Sciences Expérimentales, Université Bordeaux 1, L1 Mathématiques, Informatique, Sciences de la Matière et Ingénierie, 18h de Cours/TD

---

## Diffusion des connaissances scientifiques

---

- 2023 Interview enregistrée pour l'émission de radio *La Science CQFD* (<https://www.radiofrance.fr/franceculture/podcasts/la-science-cqfd/exoplanetes-qui-a-une-gueule-d-atmosphere-7314643>)
- 2023 Cours-Vidéo pour AstroBio-Education « Détecter les exoplanètes » (<https://astrobioeducation.org/fr/video/61>)
- 2022 Interview filmée pour le JT France 3 et interview pour le magazine *Ciel & Espace* sur la découverte du CO<sub>2</sub> par le JWST dans l'atmosphère de WASP-39b.
- 2020 Fête de la Science IPSL - Webinaire « Voyage dans les atmosphères des exoplanètes » (<https://youtu.be/2Eq4kMi3Ivk>)
- 2019 Interview filmée pour l'émission web *Esprit Sorcier* sur les méthodes de détection des exoplanètes (<https://youtu.be/5nUhMBtvuYs>)
- 2019 Pastilles *Brève de Science* du CNRS "Exoplanète et modèle numérique" (<https://youtu.be/Hi2Bc8SB7hg>)
- 2018 Interview pour documentaire France TV/BBC/Discovery Science sur le JWST
- 2016 Interview pour le journal *Flanders Today* sur la détection de HCN dans l'atmosphère de 55 Cnc e
- 2012 Interview dans le cadre de Travaux Personnels Encadrés (TPE) de 1<sup>ère</sup> S sur *Les exoplanètes*
- 2011 Conférence grand public, *À la recherche d'autres Terres*, Jalle Astronomie (33)
- 2010, 2012 Animation de stands scientifiques aux Journées Portes Ouvertes de l'Observatoire de Floirac
- 2010 – 2012 Enseignement et soirées d'observations pour l'Université du Temps Libre (33)
- 2009 – 2012 Animation de visites de l'Observatoire de Floirac (adultes et scolaires)

## Liste de publications et conférences

### 1 Publications à comité de lecture

63 publications dont 11 en premier auteur :

- Veillet, R., **Venot, O.**, Sirjean, B., Bounaceur, R., Glaude, P-A., Al-Refaie, A., Hébrard, E., *An extensively validated C/H/O/N chemical network for hot exoplanet disequilibrium chemistry*, A&A, 682, A52 (2024), Open Access : <https://doi.org/10.1051/0004-6361/202346680>.
- Debras, F., Klein, B., Donati, J.-F., Hood, T., Moutou, C., Carmona, A., Charnay, B., Bézard, B., Fouqué, P., Masson, A., Vinatier, S., Baruteau, C., Boisse, I., Bonfils, X., Chiavassa, A., Delfosse, X., Hébrard, G., Leconte, J., Martioli, E., Ould-elkhim, M., Parmentier, V., Petit, P., Pluriel, W., Selsis, F., Teinturier, L., Tremblin, P., Turbet, M., **Venot, O.**, *ATMOSPHERIX : II- Characterising exoplanet atmospheres through transmission spectroscopy with SPIRou*, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 527, 1, 566-582 (2024), Open Access : <https://doi.org/10.48550/arXiv.2308.14511>.
- Klein, B., Debras, F., Donati, J.-F., Hood, T., Moutou, C., Carmona, A., Ould-elkhim, M., Bézard, B., Charnay, B., Fouqué, P., Masson, A., Vinatier, S., Baruteau, C., Boisse, I., Bonfils, X., Chiavassa, A., Delfosse, X., Dethier, W., Hébrard, G., Kiefer, F., Leconte, J., Martioli, E., Parmentier, V., Petit, P., Pluriel, W., Selsis, F., Teinturier, L., Tremblin, P., Turbet, M., **Venot, O.**, *ATMOSPHERIX : I- An open source high resolution transmission spectroscopy pipeline for exoplanets atmospheres with SPIRou*, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 527, 1, 544-565 (2024), Open Access : <https://doi.org/10.48550/arXiv.2308.14510>.
- Al-Refaie, A. F., **Venot, O.**, Changeat, Q., Edwards, B., *FRECKLL : Full and Reduced Exoplanet Chemical Kinetics distiLLed*, The Astrophysical Journal, 967, 2, 132 (2024), Open Access : <https://doi.org/10.3847/1538-4357/ad3dee>.
- Fleury, B., Bénilan, Y., **Venot, O.**, Henderson, B. L., Swain, M., Gudipati M. S., *Experimental Investigation of the Photochemical Production of Hydrocarbons in Warm Gas Giant Exoplanet Atmospheres*, The Astrophysical Journal, 956, 2, 134 (2023), Open Access : <https://doi.org/article/10.3847/1538-4357/acf71b>.
- Panek, E., Beaulieu, J.-P., Drossart, P., **Venot, O.**, Changeat, Q., Al-Refaie, A., Gressier, A., *A re-analysis of equilibrium chemistry in five hot Jupiters*, Astronomy & Astrophysics, 677, A51 (2023), Open Access : <https://doi.org/10.1051/0004-6361/202345975>.
- Coulombe, L.-P. et al. 76 authors, *A broadband thermal emission spectrum of the ultra-hot Jupiter WASP-18b*, Nature, 620, 7973, 292-298 (2023), Open Access : <https://doi.org/10.1038/s41586-023-06230-1>.
- Edwards, B., Changeat, Q., Tsiaras, A., Hou Yip, K., Al-Refaie, A. F., Anisman, L., Bieger, M. F., Gressier, A., Shibata, S., Skaf, N., Bouwman, J., Cho, J. Y. K., Ikoma, M., Venot, O., Waldmann, I., Lagage, P.-O., Tinetti, G., *Exploring the Ability of HST WFC3 G141 to Uncover Trends in Populations of Exoplanet Atmospheres Through a Homogeneous Transmission Survey of 70 Gaseous Planets*, The Astrophysical Journal Series, 269, 1, 31 (2023), Open Access : <https://doi.org/article/10.3847/1538-4365/ac9f1a>.



- Nicholls, H., Hébrard, Er., **Venot, O.**, Drummond, B., Evans, E., *Temperature-chemistry coupling in the evolution of gas giant atmospheres driven by stellar flares*, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 523, 4, 5681-5702 (2023), Open Access : <https://doi.org/10.48550/arXiv.2306.03673>.
- Rodgers-Lee, D., Rimmer, P. B., Vidotto, A. A., Louca, A. J., Taylor, A. M., Mesquita, A. L., Miguel, Y., **Venot, O.**, Helling, C., Barth, P., Lacy, E., *The energetic particle environment of a GJ 436 b-like planet*, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 521, 4, 5880-5891 (2023), Open Access : <https://doi.org/10.48550/arXiv.2303.07058>.
- Tsai, S.-M., Lee, E. K. H., Powell, D., Gao, P., Zhang, X., Moses, J., Hébrard, E., **Venot, O.**, et al. 85 authors, *Direct Evidence of Photochemistry in an Exoplanet Atmosphere*, Nature, 617, 7961, 483-487 (2023), Open Access : <https://doi.org/10.1038/s41586-023-05902-2>.
- Feinstein, A. D. et al. 89 authors, *Early Release Science of the exoplanet WASP-39b with JWST NIRISS*, Nature, 614, 7949, 670-675 (2023), Open Access : <https://doi.org/10.1038/s41586-022-05674-1>.
- Alderson, L. et al. 92 authors, *Early Release Science of the Exoplanet WASP-39b with JWST NIRSpec G395H*, Nature, 614, 7949, 664-669 (2023), Open Access : <https://doi.org/10.1038/s41586-022-05591-3>.
- Rustamkulov, Z. et al. 94 authors, *Early Release Science of the exoplanet WASP-39b with JWST NIRSpec PRISM*, Nature, 614, 7949, 659-663 (2023), Open Access : <https://doi.org/10.1038/s41586-022-05677-y>.
- Ahrer, E.-M. et al. 99 authors, *Early Release Science of the exoplanet WASP-39b with JWST NIRCам*, Nature, 614, 7949, 614, 653-658 (2023), Open Access : <https://doi.org/10.1038/s41586-022-05590-4>.
- The JWST Transiting Exoplanet Community Early Release Science Team (131 authors), *Identification of carbon dioxide in an exoplanet atmosphere*, Nature, 614, 7949, 649-652 (2023), Open Access : <https://doi.org/10.1038/s41586-022-05269-w>.
- Baeyens, R., Decin, L., Carone, L., **Venot, O.**, Agúndez, M., Mollière, P., *Erratum : Grid of pseudo-2D chemistry models for tidally locked exoplanets - I. The role of vertical and horizontal mixing*, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 515, 2, 1839-1840 (2022)
- Baeyens, R., Konings, T., **Venot, O.**, Carone, L., Decin, L., *Grid of pseudo-2D chemistry models for tidally locked exoplanets - II. The role of photochemistry*, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 512, 4, 4877-4892 (2022), Open Access : <https://doi.org/10.48550/arXiv.2203.11233>.
- Al-Refaie, A. F., Changeat, Q., **Venot, O.**, Waldmann, I. P., Tinetti, G., *A comparison of chemical models of exoplanet atmospheres enabled by TauREx 3.1*, The Astrophysical Journal, 932, 2, 123 (2022), Open Access : <https://doi.org/article/10.3847/1538-4357/ac6dcd>.
- Changeat, Q., Edwards, B., Al-Refaie, A. F., Tsiaras, A., Skinner, J. W., Cho, J. Y. K., Yip, K. H., Anisman, L., Ikoma, M., Bieger, M. F., **Venot, O.**, Shibata, S., Waldmann, I. P., Tinetti, G., *Five key exoplanet questions answered via the analysis of 25 hot-Jupiter atmospheres in eclipse*, The Astrophysical Journal Supplement Series, 260, 1, 3 (2022), Open Access : <https://doi.org/article/10.3847/1538-4365/ac5cc2>.

- Moses, J. I., Tremblin, P., **Venot, O.**, Miguel, Y., *Chemical variation with altitude and longitude on exo-Neptunes : Predictions for Ariel phase-curve observations*, *Experimental Astronomy*, 53, 2 , pp. 279-322 (2022), Open Access : <https://doi.org/10.48550/arXiv.2103.07023>.
- Bourgalais, J., Carrasco, N., Miguel, Y., Venot, O., Pernot, P., *Ion-driven organic chemistry for Titan-like atmospheres : Implications for N-dominated super-Earth exoplanets*, *Astronomy & Astrophysics*, 654, A171 (2021), Open Access : <https://doi.org/10.1051/0004-6361/202141328>.
- Baeyens, R., Decin, L., Carone, L., **Venot, O.**, Agúndez, M., Mollière, P., *Grid of pseudo-2D chemistry models for tidally locked exoplanets - I. The role of vertical and horizontal mixing*, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 505, 4, 5603-5653 (2021), Open Access : <https://doi.org/10.48550/arXiv.2105.02245>.
- Mugnai, L. V., Modirrousta-Galian, D., Edwards, B., Changeat, Q., Bouwman, J., Morello, G., Al-Refaie, A., Baeyens, R., Bieger, M. F., Blain, D., Gressier, A., Guilluy, G., Jaziri, Y., Kiefer, F., Morvan, M., Pluriel, W., Poveda, M., Skaf, N., Whiteford, N., Wright, S., Hou Yip, K., Zingales, T., Charnay, B., Drossart, P., Leconte, J., **Venot, O.**, Waldmann, I., Beaulieu, J.-P., *ARES V : No evidence for molecular absorption in the HST WFC3 spectrum of GJ 1132 b*, *The Astronomical Journal*, 161, 6, 284 (2021), Open Access : <https://doi.org/article/10.3847/1538-3881/abf3c3>.
- Lefèvre, F., Trokhimovskiy, A., Fedorova, A., Baggio, L., Lacombe, G., Määttänen, A., Bertaux, J. -L., Forget, F., Millour, E., Venot, O., Bénilan, Y., Korablev, O., Montmessin, F., *Relationship between the ozone and water vapor columns on Mars as observed by SPICAM and calculated by a Global Climate Model*, *Journal of Geophysical Research (Planets)*, 126, 4, e06838 (2021), Open Access : <https://doi.org/10.1029/2021JE006838>.
- Carone, L., Mollière, P., Zhou, Y., Bouwman, J., Yan, F., Baeyens R., Apai, D., Espinoza, N., Rackham, B. V., Jordán, A., Angerhausen, D., Decin, L., Lendl, M., **Venot, O.**, Henning, T., *Indications for very high metallicity and absence of methane for the eccentric exo-Saturn WASP-117b*, *Astronomy & Astrophysics*, 646, A168 (2021), Open Access : <https://doi.org/10.1051/0004-6361/202038620>.
- Guilluy, G., Gressier, A., Wright, S., Santerne, A., Yassin J. A., Edwards, B., Changeat, Q., Modirrousta-Galian, D., Skaf, N., Al-Refaie, A., Baeyens, R., Bieger, M. F., Blain, D., Kiefer, F., Morvan, M., Mugnai, L. V., Pluriel, W., Poveda, M., Tsingales, T., Whiteford, N., Hou Yip, K., Charnay, B., Leconte, J., Drossart, P., Sozzetti, A., Marcq, E., Tsiaras, A., **Venot, O.**, Waldmann, I., Beaulieu, J.-P., *ARES IV : Probing the atmospheres of the two warm small planets HD 106315 c and HD 3167 c with the HST/WFC3 camera*, *The Astronomical Journal*, 161, 1, 19 (2021), Open Access : <https://doi.org/article/10.3847/1538-3881/abc3c8>.
- Anisman, L. O., Edwards, B., Changeat, Q., **Venot, O.**, Al-Refaie, A. F., Tsiaras, A., Tinetti, G., *WASP-117 b : an eccentric hot-Saturn as a future complex chemistry laboratory*, *The Astronomical Journal*, 160, 5, 233 (2020), Open Access : <https://doi.org/article/10.3847/1538-3881/abb9b0>.
- Pluriel, W., Whiteford, N., Edwards, B., Changeat, Q., Hou Yip, K., Baeyens, R., Al-Refaie, A., Bieger, M. F., Blain, D., Gressier, A., Guilluy, G., Jaziri, A. Y., Kiefer, F., Modirrousta-Galian, D., Morvan, M., Mugnai, L. V., Poveda, M., Skaf, N., Zingales, T., Wright, S., Charnay, B., Drossart, P., Leconte, J., Tsiaras, A., **Venot, O.**, Waldmann, I., Beaulieu, J.-P., *ARES III :*

- unveiling the two faces of KELT-7 b with HST WFC3*, The Astronomical Journal, 160, 3, 112 (2020), Open Access : <https://doi.org/article/10.3847/1538-3881/aba000>.
- Skaf, N., Bieger, M. F., Edwards, B., Changeat, Q., Morvan, M., Kiefer, F., Blain, D., Zingales, T., Poveda, M., Al-Refaie, A., Baeyens, R., Gressier, A., Guilluy, G., Yassin J. A., Modirrousta-Galian, D., Mugnai, L. V., Pluriel, W., Whiteford, N., Wright, S., Hou Yip, K., Charnay, B., Leconte, J., Drossart, P., Tsiaras, A., **Venot, O.**, Waldmann, I., Beaulieu, J.-P., *ARES II : characterising the hot Jupiters WASP-127 b, WASP-79 b and WASP-62 b with HST*, The Astronomical Journal, 160, 3, 109 (2020), Open Access : <https://doi.org/article/10.3847/1538-3881/ab94a3>.
  - Edwards, B., Changeat, Q., Baeyens, R., Tsiaras, A., Al-Refaie, A., Taylor, J., Hou Yip, K., Bieger, M. F.; Blain, D., Gressier, A., Guilluy, G., Yassin J. A., Kiefer, F., Modirrousta-Galian, D., Morvan, M., Mugnai, L. V., Pluriel, W., Poveda, M., Skaf, N., Whiteford, N., Wright, S., Zingales, T., Charnay, B., Drossart, P., Leconte, J., **Venot, O.**, Waldmann, I., Beaulieu, J.-P., *ARES I : WASP-76 b, a tale of two HST spectra*, The Astronomical Journal, 160, 1, 8 (2020), Open Access : <https://doi.org/article/10.3847/1538-3881/ab9225>.
  - Carone, L., Baeyens, R., Mollière, P., Barth, P., Vazan, A., Decin, L., Sarkis, P., **Venot, O.**, Henning, T., *Equatorial retrograde flow in WASP-43b elicited by deep wind jets ?*, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 496, 3, 3582-3614 (2020), Open Access : <https://doi.org/10.1093/mnras/staa1733>.
  - Bourgalais, J., Carrasco, N., Changeat, Q., **Venot, O.**, Jovanović, L., Pernot, P., Tennyson, J., Chubb, K. L., Yurchenko, S. N., Tinetti, G., *Ions in the thermosphere of exoplanets : observable constraints revealed by innovative laboratory experiments*, The Astrophysical Journal, 895, 2, 77 (2020), Open Access : <https://doi.org/article/10.3847/1538-4357/ab8e2d>.
  - Cavalié, T., **Venot, O.**, Miguel, Y., Fletcher, L. N., Wurz, P., Mousis, O., Bounaceur, R., Hue, V., Leconte, J., Dobrijevic, M., *The deep composition of Uranus and Neptune from in situ exploration and thermochemical modeling*, Space Science Reviews, 216, 4, 58 (2020), Open Access : <https://doi.org/10.48550/arXiv.2004.13987>.
  - Drummond, B., Hébrard, E., Mayne, N. J., **Venot, O.**, Ridgway, R., J., Changeat, Q., Tsai S.-M., Manners, J., Tremblin, P., Abraham, N. L., Sing, D., Kohary, K., *Implications of three-dimensional chemical transport in hot Jupiter atmospheres : results from a consistently coupled chemistry-radiation-hydrodynamics model*, Astronomy & Astrophysics, 636, A68 (2020), Open Access : <https://doi.org/10.1051/0004-6361/201937153>.
  - **Venot, O.**, Parmentier, V., Blečić, J., Cubillos, P. E., Waldmann, I. P., Changeat, Q., Moses, J. I., Tremblin, P., Crouzet, N., Gao, P., Powell, D., Lagage, P.-O., Dobbs-Dixon, I., Steinrueck, M. E., Kreidberg, L., Batalha, N., Bean, J. L., Stevenson, K. B., Casewell, S., Carone, L., *Global chemistry and thermal structure models for the hot Jupiter WASP-43b and predictions for JWST*, The Astrophysical Journal, 890, 176 (2020), Open Access : <https://doi.org/article/10.3847/1538-4357/ab6a94>.
  - **Venot, O.**, Cavalié, T., Bounaceur, R., Tremblin, P., Brouillard, L., Lhoussaine Ben Brahim, R., *New chemical scheme for giant planet thermochemistry. Update of the methanol chemistry and new reduced chemical scheme*, Astronomy & Astrophysics, 634, A78 (2020), Open Access : <https://doi.org/10.1051/0004-6361/201936697>.

- **Venot, O.**, Bounaceur, R., Dobrijevic, M., Hébrard, E., Cavalié, T., Tremblin, P., Drummond, B., Charnay, B., *A reduced chemical scheme for modelling warm to hot hydrogen-dominated atmospheres*, *Astronomy & Astrophysics*, 624, A58 (2019), Open Access : <https://doi.org/10.1051/0004-6361/201834861>.
- Tinetti, G., et al. 243 authors, *A chemical survey of exoplanets with Ariel*, *Experimental Astronomy*, 46, Issue 1, pp. 135-209 (2018), Open Access : <https://doi.org/10.1007/s10686-018-9598-x>.
- Bean, J. L., et al. 101 authors, *The Transiting Exoplanet Community Early Release Science Program for JWST*, *Publications of the Astronomical Society of the Pacific*, 130, 114402 (2018), Open Access : <https://doi.org/article/10.1088/1538-3873/aadbf3>.
- **Venot, O.**, Drummond, B., Miguel, Y., Waldmann, I. P., Pascale, E., Zingales, T., *A better characterization of the chemical composition of exoplanets atmospheres with Ariel*, *Experimental Astronomy*, 46, Issue 1, pp. 101-134 (2018), Open Access : <https://doi.org/10.48550/arXiv.1711.08433>.
- Mousis, O., Atkinson, D. H., Cavalié, T., Fletcher, L. N., Amato, M. J., Aslam, S., Ferri, F., Renard, J.-B., Spilker, T., Venkatapathy, E., Wurz, P., Aplin, K., Coustenis, A., Deleuil, M., Dobrijevic, M., Fouchet, T., Guillot, T., Hartogh, P., Hewagama, T., Hofstadter, M. D., Hue, V., Hueso, R., Lebreton, J.-P., Lellouch, E., Moses, J., Orton, G. S., Pearl, J. C., Sanchez-Lavega, A., Simon, A., **Venot, O.**, et al., *Scientific rationale for Uranus and Neptune in situ explorations*, *Planetary and Space Science*, 155, 12-40 (2018), Open Access : <https://doi.org/10.48550/arXiv.1708.00235>.
- **Venot, O.**, Bénilan, Y., Fray, N., Gazeau, M.-C., Lefèvre, F., Es-sebbar, Et-t., Hébrard, E., Schwell, M., Bahrini, C., Montmessin, F., Lefèvre, M., Waldmann, I. P., *VUV-absorption cross section of carbon dioxide from 150 to 800 K and applications to warm exoplanetary atmospheres*, *Astronomy & Astrophysics*, 609, A34 (2018), Open Access : <https://doi.org/10.1051/0004-6361/201731295>.
- Baudino, J.-L., Mollière, P., **Venot, O.**, Tremblin, P., Bézard, B., Lagage, P.-O., *Toward the analysis of JWST exoplanet spectra : Identifying troublesome model parameters*, *The Astrophysical Journal*, 850, 150 (2017), Open Access : <https://doi.org/article/10.3847/1538-4357/aa95be>.
- Cavalié, T., **Venot, O.**, Selsis, F., Hersant, F., Hartogh, P., Leconte, J., *Thermochemistry and vertical mixing in the tropospheres of Uranus and Neptune : How convection inhibition can affect the derivation of deep oxygen abundances*, *Icarus*, 291 (2017), Open Access : <https://doi.org/10.48550/arXiv.1703.04358>.
- Rocchetto, M., Waldmann, I. P., **Venot, O.**, Lagage, P.-O., Tinetti, G., *Exploring biases of atmospheric retrievals in simulated JWST transmission spectra of hot Jupiters*, *The Astrophysical Journal*, 833, 120 (2016), Open Access : <https://doi.org/article/10.3847/1538-4357/833/1/120>.
- **Venot, O.**, Rocchetto, M., Carl, S., Hashim, A. R., Decin, L., *Influence of stellar flares on the chemical composition of exoplanets and spectra*, *The Astrophysical Journal*, 830, 77 (2016), Open Access : <https://doi.org/article/10.3847/0004-637X/830/2/77>.
- Drummond, B., Tremblin, P., Baraffe, I., Amundsen, D. S., Mayne, N. J., **Venot, O.**, Goyal, J., *The Effects of Consistent Chemical Kinetics Calculations on the Pressure-Temperature Pro-*

- files and Emission Spectra of Hot Jupiters*, *Astronomy & Astrophysics*, 594, A69 (2016), Open Access : <https://doi.org/10.1051/0004-6361/201628799>.
- Tsiaras, A., Rocchetto, M., Waldmann, I. P., **Venot, O.**, Varley, R., Morello, G., Tinetti, G., Barton, E. J., Yurchenko, S. N., Tennyson, J., *Detection of an atmosphere around the super-Earth 55 Cancri e*, *The Astrophysical Journal*, 820, 99 (2016), Open Access : <https://doi.org/10.3847/0004-637X/820/2/99>.
  - Tremblin, P., Amundsen, D. S., Chabrier, G., Baraffe, I., Drummond, B., Hinkley, S., Mourier, P., **Venot, O.**, *Cloudless atmospheres for L/T dwarfs and extrasolar giant planets*, *The Astrophysical Journal Letters*, 817, L19 (2016), Open Access : <https://doi.org/10.1088/2041-8205/804/1/L17>.
  - Tinetti, G., et al. (350 co-authors) *The EChO science case*, *Experimental Astronomy*, 40, Issue 2-3, pp. 329-391 (2015), Open Access : <https://doi.org/10.48550/arXiv.1502.05747>.
  - **Venot, O.** & Agúndez, M., *Chemical modeling of exoplanet atmospheres*, *Experimental Astronomy*, 40, Issue 2-3, pp. 469-480 (2015), Open Access : <https://doi.org/10.48550/arXiv.1406.6566>.
  - Tremblin, P., Amundsen, D. S., Mourier, P., Baraffe, I.; Chabrier, G., Drummond, B., Homeier, D., **Venot, O.**, *Fingering Convection and Cloudless Models for Cool Brown Dwarf Atmospheres*, *The Astrophysical Journal Letters*, 804, L17 (2015), Open Access : <https://doi.org/article/10.1088/2041-8205/804/1/L17>.
  - **Venot, O.**, Hébrard, E., Agúndez, M., Decin, L., Bounaceur, R., *A new chemical scheme to study carbon-rich exoplanet atmospheres*, *Astronomy & Astrophysics*, 577, A33 (2015), Open Access : <https://doi.org/10.1051/0004-6361/201425311>.
  - Loison, J. C., Hébrard, E., Dobrijevic, M., Hickson, K. M., Caralp, F., Hue, V., Gronoff, G., **Venot, O.**, Bénilan, Y., *The neutral photochemistry of nitriles, amines and imines in the atmosphere of Titan*, *Icarus*, 247, 218 (2015).
  - Mousis, O., Fletcher, L. N., Lebreton, J.-P., Wurz, P., Cavalié, T., Coustenis, A., Courtin, R., Gautier, D., Helled, R., Irwin, P. G. J., Morse, A. D., Nettelmann, N., Marty, B., Rousselot, P., **Venot, O.**, et al., *Scientific rationale of Saturn's in situ exploration*, *Planetary and Space Science*, 104 Part A, 29-47 (2014), Open Access : <https://doi.org/10.48550/arXiv.1404.4811>.
  - Agúndez, M., Parmentier, V., **Venot, O.**, Hersant, F., Selsis, F., *A pseudo 2D chemical model of hot Jupiter atmospheres : application to HD 209458b and HD 189733b*, *Astronomy & Astrophysics*, 564, A73 (2014), Open Access : <https://doi.org/10.1051/0004-6361/201322895>.
  - **Venot, O.**, Agúndez, M., Selsis, F., Tessenyi, M., Iro, N., *The atmospheric chemistry of the warm Neptune GJ 3470b : influence of metallicity and temperature on the CH<sub>4</sub>/CO ratio*, *Astronomy & Astrophysics*, 562, A51 (2014) Open Access : <https://doi.org/10.1051/0004-6361/201322485>.
  - Agúndez, M., **Venot, O.**, Selsis, F., Iro, N., *The puzzling chemical composition of GJ 436b's atmosphere : influence of tidal heating on the chemistry*, *The Astrophysical Journal*, 781, 68 (2014), Open Access : <https://doi.org/10.1088/0004-637X/781/2/68>.

- Cavalié, T., Moreno, R., Lellouch, E., Hartogh, P., **Venot, O.**, Orton, G. S., Jarchow, C., Encrenaz, T., Selsis, F., Hersant, F., Fletcher, L. N., *First submillimeter observation of CO in the stratosphere of Uranus*, *Astronomy & Astrophysics*, 562, A33 (2014), Open Access : <https://doi.org/10.1051/0004-6361/201322297>.
- **Venot, O.**, Fray, N., Bénilan, Y., Gazeau, M.-C., Hébrard, E., Larcher, G., Dobrijevic, M., Selsis, F., *High temperature measurements of VUV absorption cross sections of CO<sub>2</sub> and application to exoplanets*, *Astronomy & Astrophysics*, 551, A131 (2013), Open Access : <https://doi.org/10.1051/0004-6361/201220945>.
- Agúndez, M., **Venot, O.**, Iro, N., Selsis, F., Hersant, F., Hébrard, E., Dobrijevic, M., *The impact of circulation winds on the atmospheric chemistry of the hot Jupiter HD 209458b*, *Astronomy & Astrophysics*, 548, A73 (2012), Open Access : <https://doi.org/10.1051/0004-6361/201220365>.
- **Venot, O.**, Hébrard, E., Agúndez, M., Dobrijevic, M., Selsis, F., Hersant, F., Iro, N., Bounameur, R., *A chemical model for the atmosphere of hot Jupiters*, *Astronomy & Astrophysics*, 546, A43 (2012), Open Access : <https://doi.org/10.1051/0004-6361/201219310>.

## 2 Publications sans comité de lecture

- Tinetti, G. et al. (317 co-authors), *Ariel : Enabling planetary science across light-years*, The Ariel Red Book, arXiv :2104.04824, (2021)
- Savin, D. W. et al. (64 co-authors), *State of the Profession Considerations for Laboratory Astrophysics*, Astro2020 : Decadal Survey on Astronomy and Astrophysics, APC White Papers ; Bulletin of the American Astronomical Society, Vol. 51, Issue 7, id. 7 (2019)
- Fortney, J., et al. (86 co-authors), *The Need for Laboratory Measurements and Ab Initio Studies to Aid Understanding of Exoplanetary Atmospheres*, Astro2020 : Decadal Survey on Astronomy and Astrophysics, Science White Papers, id. 146, eprint arXiv :1905.07064 (2019).
- Beichman, C., et al. (86 co-authors), *Direct Imaging and Spectroscopy of Exoplanets with the James Webb Space Telescope*, Astro2020 : Decadal Survey on Astronomy and Astrophysics, Science White Papers, Bulletin of the American Astronomical Society, Vol. 51, Issue 3, id. 58 (2019).
- Pascale, E., et al. (46 co-authors), *The Ariel space mission*, Space Telescopes and Instrumentation 2018 : Optical, Infrared, and Millimeter Wave, Vol. 10698 (2018)
- Tinetti, G., Drossart, P., Eccleston, P., Hartogh, P., Heske, A., Leconte, J., Micela, G., Ollivier, M., Pilbratt, G., Puig, L., Turrini, D., Vandenbussche, B., Wolkenberg, P., Pascale, E., Beaulieu, J.-P., Güdel, M., Min, M., Rataj, M., Ray, T., Ribas, I., Barstow, J., Bowles, N., Coustenis, A., Coudé du Foresto, V., Decin, L., Encrenaz, T., Forget, F., Friswell, M., Griffin, M., Lagage, P.-O., Malaguti, P., Moneti, A., Morales, J. C., Pace, E., Rochetto, M., Sarkar, S., Selsis, F., Taylor, W., Tennyson, J., **Venot, O.**, Waldmann, I. P., Wright, G., Zingales, T., Zapatero-Osorio, M. R., *The science of Ariel (Atmospheric Remote-sensing Infrared Exoplanet Large-survey)*, *Proceedings of the SPIE*, Vol. 9904 (2016)
- Fortney, J., Robinson, T. Domagal-Goldman, S., Skålid Amundsen, D., Brogi, M., Claire, M., Crisp, D., Hébrard, E., Imanaka, H., de Kok, R., Marley, M., Teal, D., Barman, T., Bernath, P., Burrows, A., Charbonneau, D., Freedman, R., Gelino, D., Helling, C., Heng, K., Jensen,

A., Kane, S., Kempton, E., Kopparapu, R., Lewis, N., Lopez-Morales, M., Lyons, J., Lyra, W., Meadows, V., Moses, J., Pierrehumbert, R., **Venot, O.**, Wang, S., Wright, J., *The need for laboratory work to aid in the understanding of exoplanetary atmospheres*, White paper NASA's Nexus for Exoplanet System Science (NExSS), eprint arXiv :1602.06305 (2016).

### 3 Actes de colloques avec comité de lecture

- **Venot, O.**, Tsai, S. -M., Veillet, R., Fleury, B., Poveda, M., *Chemical characterisation of warm exoplanetary atmospheres : revelations from JWST about WASP-39b and much more*, SF2A-2023 : Proceedings of the Annual meeting of the French Society of Astronomy and Astrophysics, p. 357-361 (2023).
- Fleury, B., Poveda, M., Bénilan, Y., **Venot, O.**, *High Temperature Measurement of Acetylene UV Absorption Cross Section for the Study of Hot Exoplanet Atmospheres*, SF2A-2023 : Proceedings of the Annual meeting of the French Society of Astronomy and Astrophysics, p. 377-380 (2023).
- Manchon, L., Ouazzani, R. -M., Vauglin, I., Bot, C., Brau-Nogué, S., Briot, D., Ciesla, L., Lagarde, N., de Laverny, P., Leboulleux, L., Nesvadba, N., Malzac, J., **Venot, O.**, *COMMISSION FEMMES ET ASTRONOMIE DE LA SF2A : sexism and sexual harassment for European physicists*, SF2A-2023 : Proceedings of the Annual meeting of the French Society of Astronomy and Astrophysics, p. 25-30 (2023).
- Ouazzani, R. -M., Bot, C., Brau-Nogué, S., Briot, D., Laverny, P., Lagarde, N., Nesvadba, N., Malzac, J., Vauglin, I., **Venot, O.**, *Commission Femmes et Astronomie de la SF2A : Women participation in French Astronomy*, SF2A-2022 : Proceedings of the Annual meeting of the French Society of Astronomy and Astrophysics, p. 23-28 (2022), arXiv :2301.03658 .
- Meunier, N., Baruteau, C., Boisse, I., Bonfils, X., Chapillon, E., Charnoz, S., Choquet, E., Guillot, T., Kral, Q., Langlois, M., Mary, D., Strugarek, A., Turbet, M., **Venot, O.**, *Comité Exoplanètes Transverse : presentation and survey results*, SF2A-2022 : Proceedings of the Annual meeting of the French Society of Astronomy and Astrophysics, p.19-22 (2022).
- **Venot, O.**, Agúndez, M., Selsis, F., Tessenyi, M., Decin, L., *Influence of different parameters on the chemical composition of warm neptunes*, SF2A-2014 : Proceedings of the Annual meeting of the French Society of Astronomy and Astrophysics, p.77-81 (2015).
- **Venot, O.**, Fray, N., Bénilan, Y., Gazeau, M.-C., Hébrard, E., Larcher, G., Schwell, M., Dobrijevic, M., Selsis, F., *VUV-absorption cross section of CO<sub>2</sub> at high temperatures and impact on exoplanet atmospheres*, BIO Web of Conferences, Vol. 2, EPOV 2012 : From Planets to Life – Colloquium of the CNRS Interdisciplinary Initiative “Planetary Environments and Origins of Life” (2014).
- **Venot, O.**, Hébrard, E., Agúndez, M., Dobrijevic, M., Selsis, F., Hersant, F., Iro, N., Bounameur, R., *The nitrogen chemistry in hot Jupiters atmosphere*, The early evolution of the atmospheres of terrestrial planets, Ed. Springer New York, p. 67-83 (2013).

### 4 Activité éditoriale

- SF2A-2023 : Proceedings of the Annual meeting of the French Society of Astronomy and Astrophysics. Eds. : M. N'Diaye, A. Siebert, N. Lagarde, **O. Venot**, K. Baillié, M. Béthermin, E.

- Lagadec, J. Malzac, J. Richard. (2023)
- SF2A-2022 : Proceedings of the Annual meeting of the French Society of Astronomy and Astrophysics. Eds. : J. Richard, A. Siebert, E. Lagadec, N. Lagarde, **O. Venot**, J. Malzac, J.-B. Marquette, M. N'Diaye, D. Briot (2022)
  - SF2A-2021 : Proceedings of the Annual meeting of the French Society of Astronomy and Astrophysics. Eds. : A. Siebert, K. Baillié, E. Lagadec, N. Lagarde, J. Malzac, J.-B. Marquette, M. N'Diaye, J. Richard, **O. Venot** (2021)
  - SF2A-2019 : Proceedings of the Annual meeting of the French Society of Astronomy and Astrophysics. Eds. : P. Di Matteo, O. Creevey, A. Crida, G. Kordopatis, J. Malzac, J.-B. Marquette, M. N'Diaye, **O. Venot** (2019)

## 5 Conférences et ateliers

51 communications orales, dont 20 invitées

- [Séminaire invité](#), Laboratoire Interuniversitaire des Systèmes Atmosphériques, 30 juin 2023.  
*Présentation orale* : Investiguer la photochimie des atmosphères d'exoplanètes chaudes par une approche couplée exp./obs./model.  
**Venot, O.**
- Journées de la SF2A, Atelier PNP, Strasbourg, 20-23 juin 2023.  
*Présentation orale (invitée)* : Caractérisation chimique des atmosphères d'exoplanètes chaudes : révélations du JWST sur WASP-39b et plus encore  
**Venot, O.**
- [Séminaire invité](#), Laboratoire Réactions et Génie des Procédés, 19 juin 2023.  
*Présentation orale* : Les atmosphères d'exoplanètes chaudes  
**Venot, O.**
- Exosystèmes III, Marseille, 10-12 janvier 2023.  
*Présentation orale (invitée)* : La chimie des atmosphères d'exoplanètes  
**Venot, O.**
- [Séminaire invité](#), Université d'Exeter, Royaume-Uni, 16 novembre 2022.  
*Présentation orale* : On the importance of chemical data for warm exoplanet atmospheres  
**Venot, O.**
- Workshop "The First Six Months of Exoplanet Atmospheres with JWST", Ringberg Castle, Allemagne, 7-11 novembre 2022.  
*Présentation orale (invitée)* : Atmospheric modelling of the first JWST target exoplanets, WASP-43b and WASP-39b  
**Venot, O.**
- [Séminaire invité](#), Laboratoire d'Astrophysique de Bordeaux, 25 octobre 2022.  
*Présentation orale* : On the importance of chemical data for warm exoplanet atmospheres  
**Venot, O.**
- Réunion du Consortium Scientifique d'Ariel, Bologne, 10 octobre 2022.  
*Présentation orale* : The target wish list of the Chemistry Working Group  
**Venot, O.**, Miguel, Y.
- Colloque quadriennal du PNP, Lyon, 29 juin-1 juillet 2022.  
*Présentation orale* : EXACT, EXoplanetary Atmospheric Chemistry at high Temperature  
**Venot, O.**
- Réunion du Consortium Scientifique d'Ariel, Orsay, 14 juin 2022.  
*Présentation orale* : Understanding the chemical composition of exoplanet atmospheres  
**Venot, O.**, Miguel, Y.



- 1/2 journée IPSL « Expériences de laboratoire », Paris, 26 novembre 2021.  
*Présentation orale* ([invitée](#)) : N’oubliez pas votre crème solaire lors de vos prochaines vacances dans HD 209458b.  
**Venot, O.**
- European Astronomical Society Annual Meeting, Virtual, 28 Juin-2 Juillet 2021.  
*Présentation orale* ([invitée](#)) : Disequilibrium chemistry in exoplanetary atmospheres  
**Venot, O.**
- Exoplanets-A Meeting, Virtual, 9-12 Mars 2021.  
*Présentation orale* : Will JWST be able to retrieve the chemical composition of WASP-43b?  
**Venot, O.**, Parmentier, V., Blecic, J., Cubillos, P. E., Waldmann, I. P., Changeat, Q., Moses, J. I., Tremblin, P., Crouzet, N., Gao, P., Powell, D., Lagage, P.-O., Dobbs-Dixon, I., Steinrueck, M. E., Kreidberg, L., Batalha, N., Bean, J. L., Stevenson, K. B., Casewell, S., Carone, L.
- Réunion du Consortium Scientifique d’Ariel, Virtual, 10-12 Février 2021.  
*Présentation orale* : CO<sub>2</sub>-based atmospheric photochemistry in habitable zone  
**Venot, O.**, Carrasco, N., Bourgalais, J., Pernot, P., Heng, K.
- Réunion du Consortium Scientifique d’Ariel, Virtual, 10-12 Février 2021.  
*Présentation orale* : 2D Chemical and Thermal Modelling of Neptune-Class Exoplanets and predictions for Ariel Phase-Curve Observations  
**Venot, O.**, Moses, J., Tremblin, P., Miguel, Y.
- Journée Ariel France, Virtual, 28 janvier 2021.  
*Présentation orale* : 2D Chemical and Thermal Modelling of Neptune-Class Exoplanets and predictions for Ariel Phase-Curve Observations  
**Venot, O.**, Moses, J., Tremblin, P., Miguel, Y.
- [Séminaire invité](#), Observatoire de Genève, Genève, Suisse, 18 Février 2020.  
*Présentation orale* : Towards a better characterisation of warm exoplanetary atmospheres  
**Venot, O.**
- Ariel Open Conference, ESA/ESTEC, Noordwijck, Pays-bas, 14-16 Janvier 2020.  
*Présentation orale* : Understanding the chemical composition of exoplanet atmospheres  
**Venot, O.** and Miguel, Y.
- Réunion du Consortium Scientifique d’Ariel, Varsovie, Pologne, 8-9 Octobre 2019.  
*Présentation orale* : Update on chemistry working group  
**Venot, O.**
- European Planetary Science Congress 2019, Genève, Suisse, 16-20 Septembre 2019.  
*Présentation orale* : New chemical schemes for atmospheric modelling : update of the methanol chemistry and reduced scheme  
**Venot, O.**, Cavalié, T., Bounaceur, R., Tremblin, P., Dobrijevic, M., Hébrard, E., Drummond, B., Charnay, B., *EPSC Abstracts* Vol. 13, 1984
- Réunion du Consortium Scientifique d’Ariel, Varsovie, Pologne, 17-20 Juin 2019.  
*Présentation orale* : Update on chemistry working group  
**Venot, O.**
- [Séminaire invité](#), Laboratoire Groupe de Spectrométrie Moléculaire et Atmosphérique, Reims, 13 Juin 2019.  
*Présentation orale* : Vers une meilleure caractérisation d’atmosphères (exo)planétaires chaudes  
**Venot, O.**
- Atelier PLATO France, synergie Ariel, Bordeaux, 26-27 Mars 2019.  
*Présentation orale* : Déterminer la composition chimique des atmosphères d’exoplanètes avec Ariel  
**Venot, O.**, Miguel, Y., Drummond, B., Waldmann, I., Pascale, E., Zingales, T., & Ariel Chemistry Working Group
- [Séminaire invité](#), Laboratoire d’Astrophysique de Marseille, Marseille, 6 Mars 2019.  
*Présentation orale* : Vers une meilleure caractérisation d’atmosphères (exo)planétaires chaudes  
**Venot, O.**

- European Planetary Science Congress 2018, Berlin, Allemagne, 16-21 Septembre 2018.  
*Présentation orale* : Global chemistry and thermal structure models for the hot Jupiter WASP-43b and predictions for JWST  
**Venot, O.**, Crouzet, N., Carone, L., Tremblin, P., Parmentier, V., Moses, J., Cubillos, P., Blečić, J., Mollière, P., Kreidberg, L., Stevenson, K. B., *EPSC Abstracts* Vol. 12, 1026
- Workshop Spectroscopy of Exoplanets, Windsor, Royaume-Uni, 8-11 Juillet 2018.  
*Présentation orale (invitée)* : Improvements and developments in chemical modelling of exoplanet atmospheres  
**Venot, O.**
- European Week of Astronomy and Space Science, Liverpool, Royaume-Uni, 3-6 Avril 2018.  
*Présentation orale (invitée)* : A review on modelling 1D kinetic gas-chemistry  
**Venot, O.**
- European Week of Astronomy and Space Science, Liverpool, Royaume-Uni, 3-6 Avril 2018.  
*Poster* : Thermal dependency of VUV absorption cross section  
**Venot, O.**, Bénilan, Y., Fray, N., Gazeau, M.-C., Lefèvre, F., Es-sebbar, Et., Hébrard, E., Schwell, M., Bahrini, C., Montmessin, F., Lefèvre, M., Waldmann, I. P
- [Séminaire invité](#), University College London, Londres, Royaume-Uni, 16 Novembre 2017.  
*Présentation orale* : Warm (exo)planetary atmospheres : modeling and experiments  
**Venot, O.**
- European Planetary Science Congress 2017, Riga, Lettonie, 17-22 Septembre 2017.  
*Présentation orale* : Thermal dependency of CO<sub>2</sub> VUV absorption cross section and application to warm exoplanetary atmospheres  
**Venot, O.**, Bénilan, Y., Fray, N., Gazeau, M.-C., Montmessin, F., Lefèvre, F., Bahrini, C., Es-sebbar, Et., Schwell, M., Hébrard, E., Lefèvre, M., Waldmann, I. P., *EPSC Abstracts* Vol. 11, 42
- Journée du LABEX ESEP (Exploration Spatiale des Environnements Planétaires), Paris, 29 Novembre 2016.  
*Présentation orale* : Atmosphères d'exoplanètes chaudes : modèles et expériences  
**Venot, O.**
- Ariel Open Conference, Bruxelles, Belgique, 22 Novembre 2016.  
*Présentation orale* : Modeling of exoplanet atmospheres  
**Venot, O.**
- Atelier JWST France, Paris, 8-10 Novembre 2016.  
*Présentation orale* : Quels besoins pour améliorer la modélisation chimique ?  
**Venot, O.**
- Réunion du Consortium Scientifique d'Ariel, Paris, 27 Septembre 2016.  
*Présentation orale* : Technical Notes : Chemistry in exoplanetary atmospheres  
**Venot, O.**, Drummond, B., Miguel, Y.
- IMAMPC, Le Havre, 27-30 Juin 2016.  
*Conférence plénière (invitée)* : Temperature dependency of absorption cross section  
**Venot, O.**
- [Séminaire invité](#), Laboratoire Interuniversitaire des Systèmes Atmosphériques, Créteil, 15 Février 2016.  
*Présentation orale* : Atmosphères d'exoplanètes chaudes : de la modélisation à l'expérience  
**Venot, O.**
- The Astrophysics of Planetary Habitability, Vienne, Autriche, 8-12 Février 2016.  
*Poster* : Effect of a stellar flare on the chemical composition of an exoplanet and on the synthetic spectra  
**Venot, O.**, Rocchetto, M., Carl, S., Hashim A. R., Decin, L.
- Réunion du Consortium Scientifique d'Ariel, Barcelone, Espagne, 20-21 Janvier 2016.  
*Présentation orale* : Chemical composition of warm exoplanets  
**Venot, O.**

- Workshop "Exoplanetary Atmospheres and Habitability", Thermodynamics, Disequilibrium and Evolution focus group, Nice, France, 12-16 Octobre 2015.  
*Présentation orale* : Disequilibrium chemistry and stellar flares in exoplanet atmospheres  
**Venot, O.**, Rocchetto, M., Decin, L., Agúndez, M., Hébrard, E. Bounaceur, R., Selsis, F., Dobrijevic, M., Hersant, F., Tessenyi, M., Carl, S., Hashim, A. R.
- Réunion du Consortium Scientifique d'Ariel, Londres, Royaume-Uni, 7-8 Octobre 2015.  
*Présentation orale* : Chemical composition of warm exoplanets  
**Venot, O.**
- European Planetary Science Congress 2015, Nantes, France, 28 Septembre-2 Octobre 2015.  
*Présentation orale (keynote talk)* : Influence of stellar flares on the chemical composition of exoplanets and spectra  
**Venot, O.**, Rocchetto, M., Decin, L., Carl, S., Hashim R., A., *EPSC Abstracts* Vol. 10, 475
- Atelier KIDA, Paris, France, 5-7 Mai 2015.  
*Présentation orale (invitée)* : High temperature chemistry and photochemistry  
**Venot, O.**
- Workshop "Photodissociation in astrochemistry", Leiden, Pays-Bas, 3-5 Février 2015.  
*Présentation orale (invitée)* : Photodissociation in hot exoplanet's atmospheres  
**Venot, O.**, Bénilan, Y., Fray, N., Gazeau, M.-C.
- *Séminaire invité*, Université d'Exeter, Royaume-Uni, 17 Septembre 2014.  
*Présentation orale* : Photochemistry of hot exoplanets : modelling and experiments  
**Venot, O.**
- European Planetary Science Congress 2014, Cascais, Portugal, 7-12 Septembre 2014.  
*Présentation orale (keynote talk)* : A new chemical scheme to study exoplanets atmospheres  
**Venot, O.**, Hébrard, E., Bounaceur, R., Decin, L., *EPSC Abstracts* Vol. 9, 341
- Research@Dept 2013, Louvain, Belgique, 26 Novembre 2013.  
*Présentation poster* : Hot exoplanets photo-thermo-chemistry : from experimental measurements to numerical modelling  
**Venot, O.**, Hébrard, E., Dobrijevic, M., Selsis, F., Hersant, F., Bounaceur, R., Bénilan, Y., Fray, N., Gazeau, M.-C.
- Atelier EChO France, Paris, France, 22 Novembre 2013.  
*Présentation orale* : Chemical composition of warm exoplanets  
**Venot, O.** Agúndez, M., Selsis, F., Tessenyi, M., Parmentier, V., Hersant, F., Iro, N., Bénilan, Y., Gazeau, M.-C., Fray, N.
- European Planetary Science Congress 2013, Londres, Royaume-Uni, 8-13 Septembre 2013.  
*Présentation orale* : The CH<sub>4</sub>/CO ratio of the hot Uranus GJ 3470b  
**Venot, O.**, Agúndez, M., Selsis, F., Tessenyi, M., Iro, N., *EPSC Abstracts* Vol. 8, 125
- Environnements Planétaires et Origines de la Vie 2012 : Des Planètes à la Vie, Paris, France, 29-30 Novembre 2012.  
*Présentation orale* : UV absorption cross section at high temperature and application to exoplanets.  
**Venot, O.**, Bénilan, Y., Dobrijevic, M., Fray, N., Gazeau, M.-C., Hébrard, E., Selsis, F.
- European Planetary Science Congress 2012, Madrid, Espagne, 23-28 Septembre 2012.  
*Présentation orale* : Photo-thermo-chemistry of hot atmospheres.  
**Venot, O.**, Hébrard, E., Agúndez, M., Dobrijevic, M., Selsis, F., Hersant, F., Bounaceur, R., Bénilan, Y., Gazeau, M.-C., Fray, N., Iro, N., *EPSC Abstracts* Vol. 7, 223
- XXXIIème Réunion annuelle du Groupe de Cinétique et Photochimie, Bordeaux, France, 5-6 Juin 2012.  
*Présentation orale* : La modélisation atmosphérique des Jupiters chauds et les mécanismes de combustion.  
**Venot, O.**, Hébrard, E., Agúndez, M., Selsis, F., Dobrijevic, M., Hersant, F., Iro, N., Bounaceur, R.

- European Planetary Science Congress - Division for Planetary Science Joint Meeting 2011, Nantes, France, 2-7 Octobre 2011.  
*Présentation orale* : Photo-thermo-chemistry of hot Jupiters : application to HD 209458b.  
**Venot, O.**, Hébrard, E., Dobrijevic, M., Selsis, F., Hersant, F., Bounaceur, R., Bénilan, Y., Gazeau, M.-C., Fray, N., *EPSC-DPS Abstracts* Vol. 6, 439
- Origins 2011, Montpellier, France, 3-8 Juillet 2011.  
*Présentation poster* : Hot Jupiters photo-thermo-chemistry : from experimental measurements to numerical modelling.  
**Venot, O.**, Hébrard, E., Dobrijevic, M., Selsis, F., Hersant, F., Bounaceur, R., Bénilan, Y., Gazeau, M.-C., Fray, N.
- European Planetary Science Congress 2010, Rome, Italie, 20-24 Septembre 2010.  
*Présentation orale* : A new chemical model of the atmosphere of HD 209458b.  
**Venot, O.**, Dobrijevic, M., Selsis, F., Hébrard, E., Bounaceur, R., *EPSC Abstracts* Vol.5, 265
- Faraday Discussion 147 : Chemistry of the Planets , Saint Jacut de la Mer, France, 14-16 Juin 2010.  
*Présentation poster* : Thermo-photochemistry of exoplanet atmospheres.  
**Venot, O.**, Dobrijevic, M., Selsis, F., Hébrard, E., Bounaceur, R., Y. Bénilan, Y., Gazeau, M.-C., Champion, N.
- European Research Course on Atmospheres (ERCA) 2010, Grenoble, France, 11 Janvier-12 Février 2010.  
*Présentation orale et poster* : Photochemistry of exoplanet atmospheres.  
**Venot, O.**, Dobrijevic, M., Selsis, F., Hébrard, E., Bounaceur, R.

R É P U B L I Q U E F R A N Ç A I S E

Ministère de l'éducation nationale, de l'enseignement supérieur, et de la recherche

UNIVERSITE DE BORDEAUX

# DOCTORAT

Vu le code de l'éducation, notamment son article L.612-7 ;

Vu le code de la recherche, notamment son article L.412-1 ;

Vu le décret n° 2002-481 du 8 avril 2002 relatif aux grades et titres universitaires et aux diplômes nationaux ;

Vu l'arrêté du 3 septembre 1998 relatif à la charte des thèses ;

Vu l'arrêté du 27 juin 1985 modifié fixant la liste des établissements autorisés à délivrer, seuls, le doctorat ;

Vu l'arrêté du 7 août 2006 relatif à la formation doctorale ;

Vu les pièces justificatives produites par Mme OLIVIA VENOT, née le 13 septembre 1986 à TOULON (083), en vue de son inscription au doctorat ;

Vu le procès-verbal du jury attestant que l'intéressée a soutenu, le 6 novembre 2012 une thèse portant sur le sujet suivant : Photochimie des exoplanètes chaudes : modélisations et expériences,

préparée au sein de l'école doctorale DES SCIENCES PHYSIQUES ET DE L'INGENIEUR, devant un jury présidé par Marie-Claire GAZEAU, PROFESSEUR DES UNIVERSITES et composé de Regis COURTIN, Chargé de recherche (HDR), Michel DOBRIJEVIC, Maître de conférences (HDR), Franck LEFEVRE, DIRECTEUR DE RECHERCHE AU CNRS, Franck SELSIS, Chargé de recherche (HDR), Giovanna TINETTI, PROFESSEUR EN ETABLISSEMENT ETRANGER ;

Vu la délibération du jury ;

Le **DIPLÔME DE DOCTEUR** en "ASTROPHYSIQUE, PLASMAS, NUCLEAIRE", *mention très honorable*

est délivré à **Mme OLIVIA VENOT**

et confère le **grade de docteur**,

pour en jouir avec les droits et prérogatives qui y sont attachés.

Fait à Bordeaux, le 3 octobre 2014

Le titulaire

Le Président

Le Recteur d'Académie,  
Chancelier des universités

N° UNIVBOR 10965575  
/2014201103367

Manuel TUNON DE LARA

Olivier DUGRIP

# Bibliographie

ACKERMAN, A. S., TOON, O. B. et HOBBS, P. V. (1995). Numerical modeling of ship tracks produced by injections of cloud condensation nuclei into marine stratiform clouds. *JGR*, 100:7121–7133.

ADCROFT, A., CAMPIN, J.-M., HILL, C. et MARSHALL, J. (2004). Implementation of an Atmosphere Ocean General Circulation Model on the Expanded Spherical Cube. *Monthly Weather Review*, 132:2845.

AGÚNDEZ, M., PARMENTIER, V., VENOT, O., HERSANT, F. et SELSIS, F. (2014a). Pseudo 2D chemical model of hot-Jupiter atmospheres : application to HD 209458b and HD 189733b. *A&A*, 564:A73.

AGÚNDEZ, M., VENOT, O., IRO, N., SELSIS, F., HERSANT, F., HÉBRARD, E. et DOBRIJEVIC, M. (2012). The impact of atmospheric circulation on the chemistry of the hot Jupiter HD 209458b. *A&A*, 548:A73.

AGÚNDEZ, M., VENOT, O., SELSIS, F. et IRO, N. (2014b). The Puzzling Chemical Composition of GJ 436b's Atmosphere : Influence of Tidal Heating on the Chemistry. *ApJ*, 781:68.

AHRER, E.-M., STEVENSON, K. B., MANSFIELD, M., MORAN, S. E., BRANDE, J., MORELLO, G., MURRAY, C. A., NIKOLOV, N. K., PETIT DIT DE LA ROCHE, D. J. M., SCHLAWIN, E., WHEATLEY, P. J., ZIEBA, S., BATALHA, N. E., DAMIANO, M., GOYAL, J. M., LENDL, M., LOTHINGER, J. D., MUKHERJEE, S., OHNO, K., BATALHA, N. M., BATTLE, M. P., BEAN, J. L., BEATTY, T. G., BENNEKE, B., BERTA-THOMPSON, Z. K., CARTER, A. L., CUBILLOS, P. E., DAYLAN, T., ESPINOZA, N., GAO, P., GIBSON, N. P., GILL, S., HARRINGTON, J., HU, R., KREIDBERG, L., LEWIS, N. K., LINE, M. R., LÓPEZ-MORALES, M., PARMENTIER, V., POWELL, D. K., SING, D. K., TSAI, S.-M., WAKEFORD, H. R., WELBANKS, L., ALAM, M. K., ALDERSON, L., ALLEN, N. H., ANDERSON, D. R., BARSTOW, J. K., BAYLISS, D., BELL, T. J., BLECIC, J., BRYANT, E. M., BURLEIGH, M. R., CARONE, L., CASEWELL, S. L., CHANGEAT, Q., CHUBB, K. L., CROSSFIELD, I. J. M., CROUZET, N., DECIN, L., DÉSSERT, J.-M., FEINSTEIN, A. D., FLAGG, L., FORTNEY, J. J., GIZIS, J. E., HENG, K., IRO, N., KEMPTON, E. M. R., KENDREW, S., KIRK, J., KNUTSON, H. A., KOMACEK, T. D., LAGAGE, P.-O., LECONTE, J., LUSTIG-YAEGER, J., MACDONALD, R. J., MANCINI, L., MAY, E. M., MAYNE, N. J., MIGUEL, Y., MIKAL-EVANS, T., MOLAVERDIKHANI, K., PALLE, E., PIAULET, C., RACKHAM, B. V., REDFIELD, S., ROGERS, L. K., ROY, P.-A., RUSTAMKULOV, Z., SHKOLNIK, E. L., SOTZEN, K. S., TAYLOR, J., TREMBLIN, P., TUCKER,

- G. S., TURNER, J. D., DE VAL-BORRO, M., VENOT, O. et ZHANG, X. (2023). Early Release Science of the exoplanet WASP-39b with JWST NIRCam. *Nature*, 614(7949):653–658.
- AL-REFAIE, A. F., CHANGEAT, Q., VENOT, O., WALDMANN, I. P. et TINETTI, G. (2022a). A Comparison of Chemical Models of Exoplanet Atmospheres Enabled by TauREx 3.1. *ApJ*, 932(2):123.
- AL-REFAIE, A. F., CHANGEAT, Q., WALDMANN, I. P. et TINETTI, G. (2021). TauREx 3 : A Fast, Dynamic, and Extendable Framework for Retrievals. *ApJ*, 917(1):37.
- AL-REFAIE, A. F., VENOT, O., CHANGEAT, Q. et EDWARDS, B. (2022b). FRECKLL : Full and Reduced Exoplanet Chemical Kinetics distiLLed. *arXiv e-prints*, page arXiv :2209.11203.
- ALDERSON, L., WAKEFORD, H. R., ALAM, M. K., BATALHA, N. E., LOTHINGER, J. D., ADAMS REDAI, J., BARAT, S., BRANDE, J., DAMIANO, M., DAYLAN, T., ESPINOZA, N., FLAGG, L., GOYAL, J. M., GRANT, D., HU, R., INGLIS, J., LEE, E. K. H., MIKAL-EVANS, T., RAMOS-ROSADO, L., ROY, P.-A., WALLACK, N. L., BATALHA, N. M., BEAN, J. L., BENNEKE, B., BERTA-THOMPSON, Z. K., CARTER, A. L., CHANGEAT, Q., COLÓN, K. D., CROSSFIELD, I. J. M., DÉSSERT, J.-M., FOREMAN-MACKEY, D., GIBSON, N. P., KREIDBERG, L., LINE, M. R., LÓPEZ-MORALES, M., MOLAVERDI-KHANI, K., MORAN, S. E., MORELLO, G., MOSES, J. I., MUKHERJEE, S., SCHLAWIN, E., SING, D. K., STEVENSON, K. B., TAYLOR, J., AGGARWAL, K., AHRER, E.-M., ALLEN, N. H., BARSTOW, J. K., BELL, T. J., BLECIC, J., CASEWELL, S. L., CHUBB, K. L., CROUZET, N., CUBILLOS, P. E., DECIN, L., FEINSTEIN, A. D., FORTNEY, J. J., HARRINGTON, J., HENG, K., IRO, N., KEMPTON, E. M. R., KIRK, J., KNUTSON, H. A., KRICK, J., LCONTE, J., LENDL, M., MACDONALD, R. J., MANCINI, L., MANSFIELD, M., MAY, E. M., MAYNE, N. J., MIGUEL, Y., NIKOLOV, N. K., OHNO, K., PALLE, E., PARMENTIER, V., PETIT DIT DE LA ROCHE, D. J. M., PIAULET, C., POWELL, D., RACKHAM, B. V., REDFIELD, S., ROGERS, L. K., RUSTAMKULOV, Z., TAN, X., TREMBLIN, P., TSAI, S.-M., TURNER, J. D., DE VAL-BORRO, M., VENOT, O., WELBANKS, L., WHEATLEY, P. J. et ZHANG, X. (2023). Early Release Science of the exoplanet WASP-39b with JWST NIRSpec G395H. *Nature*, 614(7949):664–669.
- ANISMAN, L. O., EDWARDS, B., CHANGEAT, Q., VENOT, O., AL-REFAIE, A. F., TSIRAS, A. et TINETTI, G. (2020). WASP-117 b : An Eccentric Hot Saturn as a Future Complex Chemistry Laboratory. *The Astronomical Journal*, 160(5):233.
- BAEYENS, R., DECIN, L., CARONE, L., VENOT, O., AGÚNDEZ, M. et MOLLIÈRE, P. (2021). Grid of pseudo-2D chemistry models for tidally locked exoplanets - I. The role of vertical and horizontal mixing. *MNRAS*, 505(4):5603–5653.
- BAEYENS, R., DECIN, L., CARONE, L., VENOT, O., AGÚNDEZ, M. et MOLLIÈRE, P. (2022a). Erratum : Grid of pseudo-2D chemistry models for tidally locked exoplanets - I. The role of vertical and horizontal mixing. *MNRAS*, 515(2):1839–1840.
- BAEYENS, R., KONINGS, T., VENOT, O., CARONE, L. et DECIN, L. (2022b). Grid of pseudo-2D chemistry models for tidally locked exoplanets - II. The role of photochemistry. *MNRAS*, 512(4):4877–4892.

- BARBE, P., BATTIN-LECLERC, F. et CÔME, G. M. (1995). Experimental and modelling study of methane and ethane oxidation between 773 and 1573 K. *J. Chim. Phys.*, 92:1666–1692.
- BATALHA, N. E., LEWIS, T., FORTNEY, J. J., BATALHA, N. M., KEMPTON, E., LEWIS, N. K. et LINE, M. R. (2019). The Precision of Mass Measurements Required for Robust Atmospheric Characterization of Transiting Exoplanets. *ApJL*, 885(1):L25.
- BATALHA, N. E., MANDELL, A., PONTOPPIDAN, K., STEVENSON, K. B., LEWIS, N. K., KALIRAI, J., EARL, N., GREENE, T., ALBERT, L. et NIELSEN, L. D. (2017). PandExo : A Community Tool for Transiting Exoplanet Science with JWST & HST. *Publications of the Astronomical Society of the Pacific*, 129(6):064501.
- BAUDINO, J.-L., MOLLIÈRE, P., VENOT, O., TREMBLIN, P., BÉZARD, B. et LAGAGE, P.-O. (2017). Toward the Analysis of JWST Exoplanet Spectra : Identifying Troublesome Model Parameters. *ApJ*, 850(2):150.
- BAUDINO, J.-L., BÉZARD, B., BOCCALETTI, A., BONNEFOY, M., LAGRANGE, A.-M. et GALICHER, R. (2015). Interpreting the photometry and spectroscopy of directly imaged planets : a new atmospheric model applied to toris b and sphere observations. *A&A*, 582:A83.
- BAULCH, D., COBOS, C., COX, R., FRANK, P., HAYMAN, G., JUST, T., KERR, J., MURRELLS, T., PILLING, M., TROE, J., WALKER, R. et WARNATZ, J. (1994). Evaluated kinetic data for combustion modeling supplement-i. *Journal of physical and chemical reference data*, 23(6):847–1033.
- BEICHMAN, C., BENNEKE, B., KNUTSON, H., SMITH, R., LAGAGE, P.-O., DRESSING, C., LATHAM, D., LUNINE, J., BIRKMANN, S., FERRUIT, P., GIARDINO, G., KEMPTON, E., CAREY, S., KRICK, J., DEROO, P. D., MANDELL, A., RESSLER, M. E., SHPORER, A., SWAIN, M., VASISHT, G., RICKER, G., BOUWMAN, J., CROSSFIELD, I., GREENE, T., HOWELL, S., CHRISTIANSEN, J., CIARDI, D., CLAMPIN, M., GREENHOUSE, M., SOZZETTI, A., GOUDFROOIJ, P., HINES, D., KEYES, T., LEE, J., MCCULLOUGH, P., ROBERTO, M., STANSBERRY, J., VALENTI, J., RIEKE, M., RIEKE, G., FORTNEY, J., BEAN, J., KREIDBERG, L., EHRENREICH, D., DEMING, D., ALBERT, L., DOYON, R. et SING, D. (2014). Observations of Transiting Exoplanets with the James Webb Space Telescope (JWST). *Publications of the Astronomical Society of the Pacific*, 126:1134.
- BLECIC, J., DOBBS-DIXON, I. et GREENE, T. (2017). The Implications of 3D Thermal Structure on 1D Atmospheric Retrieval. *ApJ*, 848(2):127.
- BLUMENTHAL, S. D., MANDELL, A. M., HÉBRARD, E., BATALHA, N. E., CUBILLOS, P. E., RUGHEIMER, S. et WAKEFORD, H. R. (2018). A Comparison of Simulated JWST Observations Derived from Equilibrium and Non-equilibrium Chemistry Models of Giant Exoplanets. *ApJ*, 853(2):138.
- BOURGALAIS, J., CARRASCO, N., CHANGEAT, Q., VENOT, O., JOVANOVIĆ, L., PERNOT, P., TENNYSON, J., CHUBB, K. L., YURCHENKO, S. N. et TINETTI, G. (2020). Ions in the Thermosphere of Exoplanets : Observable Constraints Revealed by Innovative Laboratory Experiments. *ApJ*, 895(2):77.



- BOURGALAIS, J., CARRASCO, N., VETTIER, L. et PERNOT, P. (2019). Low-Pressure EUV Photochemical Experiments : Insight on the Ion Chemistry Occurring in Titan's Atmosphere. *Journal of Geophysical Research (Space Physics)*, 124(11):9214–9228.
- BURKE, U., METCALFE, W. K., BURKE, S. M., HEUFER, K. A., DAGAUT, P. et CURRAN, H. J. (2016). A detailed chemical kinetic modeling, ignition delay time and jet-stirred reactor study of methanol oxidation. *Combust. Flame*, 165:125–136.
- CALDAS, A., LECONTE, J., SELSIS, F., WALDMANN, I. P., BORDÉ, P., ROCCHETTO, M. et CHARNAY, B. (2019). Effects of a fully 3D atmospheric structure on exoplanet transmission spectra : retrieval biases due to day-night temperature gradients. *A&A*, 623:A161.
- CAMPO, C. J., HARRINGTON, J., HARDY, R. A., STEVENSON, K. B., NYMEYER, S., RAGOZZINE, D., LUST, N. B., ANDERSON, D. R., COLLIER-CAMERON, A., BLECIC, J., BRITT, C. B. T., BOWMAN, W. C., WHEATLEY, P. J., LOREDO, T. J., DEMING, D., HEBB, L., HELLIER, C., MAXTED, P. F. L., POLLACO, D. et WEST, R. G. (2011). On the orbit of exoplanet wasp-12b. *The Astrophysical Journal*, 727(2):125.
- CARONE, L., BAEYENS, R., MOLLIÈRE, P., BARTH, P., VAZAN, A., DECIN, L., SARKIS, P., VENOT, O. et HENNING, T. (2020). Equatorial retrograde flow in WASP-43b elicited by deep wind jets? *MNRAS*, 496(3):3582–3614.
- CARONE, L., MOLLIÈRE, P., ZHOU, Y., BOUWMAN, J., YAN, F., BAEYENS, R., APAI, D., ESPINOZA, N., RACKHAM, B. V., JORDÁN, A., ANGERHAUSEN, D., DECIN, L., LENDL, M., VENOT, O. et HENNING, T. (2021). Indications for very high metallicity and absence of methane in the eccentric exo-Saturn WASP-117b. *A&A*, 646:A168.
- CARRASCO, N., GIULIANI, A., CORREIA, J.-J. et CERNOGORA, G. (2013). VUV photochemistry simulation of planetary upper atmosphere using synchrotron radiation. *Journal of Synchrotron Radiation*, 20(4):587–590.
- CASASAYAS-BARRIS, N., PALLE, E., STANGRET, M., BOURRIER, V., TABERNERO, H. M., YAN, F., BORSA, F., ALLART, R., OSORIO, M. R. Z., LOVIS, C., SOUSA, S. G., CHEN, G., OSHAGH, M., SANTOS, N. C., PEPE, F., REBOLO, R., MOLARO, P., CRISTIANI, S., ADIBEKYAN, V., ALIBERT, Y., PRIETO, C. A., BOUCHY, F., DEMANGEON, O. D. S., MARCANTONIO, P. D., D'ODORICO, V., EHRENREICH, D., FIGUEIRA, P., SANTOS, R. G., HERNÁNDEZ, J. I. G., LAVIE, B., LILLO-BOX, J., CURTO, G. L., MARTINS, C. J. A. P., MEHNER, A., MICELA, G., NUNES, N. J., PORETTI, E., SOZZETTI, A., MASCAREÑO, A. S. et UDRY, S. (2021). The atmosphere of HD 209458b seen with ESPRESSO. *A&A*, 647:A26.
- CASASAYAS-BARRIS, N., PALLÉ, E., YAN, F., CHEN, G., LUQUE, R., STANGRET, M., NAGEL, E., ZECHMEISTER, M., OSHAGH, M., SANZ-FORCADA, J., NORTMANN, L., ALONSO-FLORIANO, F. J., AMADO, P. J., CABALLERO, J. A., CZESLA, S., KHALAFINEJAD, S., LÓPEZ-PUERTAS, M., LÓPEZ-SANTIAGO, J., MOLAVERDIKHANI, K., MONTES, D., QUIRRENBACH, A., REINERS, A., RIBAS, I., SÁNCHEZ-LÓPEZ, A. et ZAPATERO OSORIO, M. R. (2020). Is there nan the atmosphere of hd 209458b? - effect of the centre-to-limb variation and rossiter-mclaughlin effect in transmission spectroscopy studies. *A&A*, 635:A206.

- CATHONNET, M., BOETTNER, J. C. et JAMES, H. (1982). Etude de l'oxydation et de l'auto-inflammation du méthanol dans le domaine de températures 500-600°C. *J. Chim. Phys.*, 79:475–478.
- CAVALIÉ, T. (2022). The Deep Composition of Giant Planets from Thermochemical Modeling and In Situ Exploration. In *LPI Contributions*, volume 2686 de *LPI Contributions*, page 4027.
- CAVALIÉ, T., LUNINE, J. et MOUSIS, O. (2023). A subsolar oxygen abundance or a radiative region deep in Jupiter revealed by thermochemical modelling. *Nature Astronomy*, 7:678–683.
- CAVALIÉ, T., MORENO, R., LELLOUCH, E., HARTOGH, P., VENOT, O., ORTON, G. S., JARCHOW, C., ENCRENAZ, T., SELSIS, F., HERSANT, F. et FLETCHER, L. N. (2014). The first submillimeter observation of CO in the stratosphere of Uranus. *A&A*, 562:A33.
- CAVALIÉ, T., VENOT, O., MIGUEL, Y., FLETCHER, L. N., WURZ, P., MOUSIS, O., BOUNACEUR, R., HUE, V., LECONTE, J. et DOBRIJEVIC, M. (2020). The Deep Composition of Uranus and Neptune from In Situ Exploration and Thermochemical Modeling. *Space Sc. Rev.*, 216(4):58.
- CAVALIÉ, T., VENOT, O., SELSIS, F., HERSANT, F., HARTOGH, P. et LECONTE, J. (2017). Thermochemical modeling of Uranus and Neptune atmospheres to constrain their deep oxygen abundance. *Icarus, soumis*.
- CHADNEY, J. M., KOSKINEN, T. T., GALAND, M., UNRUH, Y. C. et SANZ-FORCADA, J. (2017). Effect of stellar flares on the upper atmospheres of HD 189733b and HD 209458b. *A&A*, 608:A75.
- CHANGEAT, Q. et AL-REFAIE, A. (2020). TauREx3 PhaseCurve : A 1.5D Model for Phase-curve Description. *ApJ*, 898(2):155.
- CHANGEAT, Q., AL-REFAIE, A., MUGNAI, L. V., EDWARDS, B., WALDMANN, I. P., PASCALE, E. et TINETTI, G. (2020a). Alfnor : A Retrieval Simulation of the Ariel Target List. *The Astronomical Journal*, 160(2):80.
- CHANGEAT, Q., EDWARDS, B., AL-REFAIE, A. F., TSIARAS, A., SKINNER, J. W., CHO, J. Y. K., YIP, K. H., ANISMAN, L., IKOMA, M., BIEGER, M. F., VENOT, O., SHIBATA, S., WALDMANN, I. P. et TINETTI, G. (2022). Five Key Exoplanet Questions Answered via the Analysis of 25 Hot-Jupiter Atmospheres in Eclipse. *ApJS*, 260(1):3.
- CHANGEAT, Q., EDWARDS, B., WALDMANN, I. P. et TINETTI, G. (2019). Toward a More Complex Description of Chemical Profiles in Exoplanet Retrievals : A Two-layer Parameterization. *ApJ*, 886(1):39.
- CHANGEAT, Q., KEYTE, L., WALDMANN, I. P. et TINETTI, G. (2020b). Impact of Planetary Mass Uncertainties on Exoplanet Atmospheric Retrievals. *ApJ*, 896(2):107.
- CHARNAY, B., MEADOWS, V. et LECONTE, J. (2015). 3D Modeling of GJ1214b's Atmosphere : Vertical Mixing Driven by an Anti-Hadley Circulation. *ApJ*, 813(1):15.

- COSSART-MAGOS, C., JUNGEN, M. et LAUNAY, F. (1987). High resolution absorption spectrum of co2 between 10 and 14 ev : Assignment of nf rydberg series leading to a new value of the first ionization potential. *Molecular Physics*, 61(5):1077–1117.
- COUGHLIN, J. L., MULLALLY, F., THOMPSON, S. E., ROWE, J. F., BURKE, C. J., LATHAM, D. W., BATALHA, N. M., OFIR, A., QUARLES, B. L., HENZE, C. E., WOLFGANG, A., CALDWELL, D. A., BRYSON, S. T., SHPORER, A., CATANZARITE, J., AKESON, R., BARCLAY, T., BORUCKI, W. J., BOYAJIAN, T. S., CAMPBELL, J. R., CHRISTIANSEN, J. L., GIROUARD, F. R., HAAS, M. R., HOWELL, S. B., HUBER, D., JENKINS, J. M., LI, J., PATIL-SABALE, A., QUINTANA, E. V., RAMIREZ, S., SEADER, S., SMITH, J. C., TENENBAUM, P., TWICKEN, J. D. et ZAMUDIO, K. A. (2016). Planetary candidates observed by kepler. vii. the first fully uniform catalog based on the entire 48-month data set (q1-q17 dr24). *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 224(1):12.
- COWAN, N. B., MACHALEK, P., CROLL, B., SHEKHTMAN, L. M., BURROWS, A., DEMING, D., GREENE, T. et HORA, J. L. (2012). Thermal phase variations of wasp-12b : Defying predictions. *The Astrophysical Journal*, 747(1):82.
- CROLL, B., LAFRENIERE, D., ALBERT, L., JAYAWARDHANA, R., FORTNEY, J. J. et MURRAY, N. (2010). Near-infrared thermal emission from wasp-12b : Detections of the secondary eclipse in ks, h, and j\*. *The Astronomical Journal*, 141(2):30.
- CROSSFIELD, I. J. M., BARMAN, T., HANSEN, B. M. S. et HOWARD, A. W. (2013). Warm ice giant GJ 3470b. I. A flat transmission spectrum indicates a hazy, low-methane, and/or metal-rich atmosphere. *A&A*, 559:A33.
- CROSSFIELD, I. J. M., BARMAN, T., HANSEN, B. M. S., TANAKA, I. et KODAMA, T. (2012). Re-evaluating WASP-12b : Strong Emission at 2.315  $\mu\text{m}$ , Deeper Occultations, and an Isothermal Atmosphere. *ApJ*, 760(2):140.
- CUBILLOS, P. E. et BLECIC, J. (2021). The PYRAT BAY framework for exoplanet atmospheric modelling : a population study of Hubble/WFC3 transmission spectra. *MNRAS*, 505(2):2675–2702.
- DEIBERT, E. K., de MOOIJ, E. J. W., JAYAWARDHANA, R., RIDDEN-HARPER, A., SIVANANDAM, S., KARJALAINEN, R. et KARJALAINEN, M. (2021). A near-infrared chemical inventory of the atmosphere of 55 cancri e. *The Astronomical Journal*, 161(5):209.
- DEMORY, B.-O., GILLON, M., MADHUSUDHAN, N. et QUELOZ, D. (2016). Variability in the super-Earth 55 Cnc e. *MNRAS*, 455(2):2018–2027.
- DEMORY, B.-O., TORRES, G., NEVES, V., ROGERS, L., GILLON, M., HORCH, E., SULLIVAN, P., BONFILS, X., DELFOSSE, X., FORVEILLE, T., LOVIS, C., MAYOR, M., SANTOS, N., SEAGER, S., SMALLEY, B. et UDRY, S. (2013). Spitzer Observations of GJ 3470 b : A Very Low-density Neptune-size Planet Orbiting a Metal-rich M Dwarf. *ApJ*, 768:154.
- DOBRIJEVIC, M., OLLIVIER, J. L., BILLEBAUD, F., BRILLET, J. et PARISOT, J. P. (2003). Effect of chemical kinetic uncertainties on photochemical modeling results : Application to Saturn’s atmosphere. *A&A*, 398:335–344.

- DOBRIJEVIC, M. et PARISOT, J. P. (1998). Effect of chemical kinetics uncertainties on hydrocarbon production in the stratosphere of Neptune. *P&SS*, 46:491–505.
- DRUMMOND, B., HÉBRARD, E., MAYNE, N. J., VENOT, O., RIDGWAY, R. J., CHANGEAT, Q., TSAI, S.-M., MANNERS, J., TREMBLIN, P., ABRAHAM, N. L., SING, D. et KOHARY, K. (2020). Implications of three-dimensional chemical transport in hot Jupiter atmospheres : Results from a consistently coupled chemistry-radiation-hydrodynamics model. *A&A*, 636:A68.
- DRUMMOND, B., MAYNE, N. J., BARAFFE, I., TREMBLIN, P., MANNERS, J., AMUNDSEN, D. S., GOYAL, J. et ACREMAN, D. (2018). The effect of metallicity on the atmospheres of exoplanets with fully coupled 3D hydrodynamics, equilibrium chemistry, and radiative transfer. *A&A*, 612:A105.
- DRUMMOND, B., TREMBLIN, P., BARAFFE, I., AMUNDSEN, D. S., MAYNE, N. J., VENOT, O. et GOYAL, J. (2016). The effects of consistent chemical kinetics calculations on the pressure-temperature profiles and emission spectra of hot Jupiters. *A&A*, 594:A69.
- DUBOIS, D., CARRASCO, N., PETRUCCIANI, M., VETTIER, L., TIGRINE, S. et PERNOT, P. (2019). In situ investigation of neutrals involved in the formation of Titan tholins. *Icarus*, 317:182–196.
- EDWARDS, B., CHANGEAT, Q., BAEYENS, R., TSIARAS, A., AL-REFAIE, A., TAYLOR, J., YIP, K. H., BIEGER, M. F., BLAIN, D., GRESSIER, A., GUILLUY, G., JAZIRI, A. Y., KIEFER, F., MODIRROUSTA-GALIAN, D., MORVAN, M., MUGNAI, L. V., PLURIEL, W., POVEDA, M., SKAF, N., WHITEFORD, N., WRIGHT, S., ZINGALES, T., CHARNAY, B., DROSSART, P., LECONTE, J., VENOT, O., WALDMANN, I. et BEAULIEU, J.-P. (2020). ARES I : WASP-76 b, A Tale of Two HST Spectra. *The Astronomical Journal*, 160(1):8.
- EDWARDS, B., CHANGEAT, Q., TSIARAS, A., HOU YIP, K., AL-REFAIE, A. F., ANISMAN, L., BIEGER, M. F., GRESSIER, A., SHIBATA, S., SKAF, N., BOUWMAN, J., Y-K. CHO, J., IKOMA, M., VENOT, O., WALDMANN, I., LAGAGE, P.-O. et TINETTI, G. (2022). Exploring the Ability of HST WFC3 G141 to Uncover Trends in Populations of Exoplanet Atmospheres Through a Homogeneous Transmission Survey of 70 Gaseous Planets. *arXiv e-prints*, page arXiv :2211.00649.
- EDWARDS, B., RICE, M., ZINGALES, T., TESSENYI, M., WALDMANN, I., TINETTI, G., PASCALE, E., SAVINI, G. et SARKAR, S. (2019). Exoplanet spectroscopy and photometry with the Twinkle space telescope. *Experimental Astronomy*, 47(1-2):29–63.
- EDWARDS, B. et STOTESBURY, I. (2021). Terminus : A Versatile Simulator for Space-based Telescopes. *The Astronomical Journal*, 161(6):266.
- ELKINS-TANTON, L. T. et SEAGER, S. (2008). Ranges of atmospheric mass and composition of super-earth exoplanets. *The Astrophysical Journal*, 685(2):1237.
- FEINSTEIN, A. D., RADICA, M., WELBANKS, L., MURRAY, C. A., OHNO, K., COULOMBE, L.-P., ESPINOZA, N., BEAN, J. L., TESKE, J. K., BENNEKE, B., LINE, M. R., RUS-TAMKULOV, Z., SABA, A., TSIARAS, A., BARSTOW, J. K., FORTNEY, J. J., GAO, P., KNUTSON, H. A., MACDONALD, R. J., MIKAL-EVANS, T., RACKHAM, B. V., TAYLOR,

- J., PARMENTIER, V., BATALHA, N. M., BERTA-THOMPSON, Z. K., CARTER, A. L., CHANGEAT, Q., DOS SANTOS, L. A., GIBSON, N. P., GOYAL, J. M., KREIDBERG, L., LÓPEZ-MORALES, M., LOTHINGER, J. D., MIGUEL, Y., MOLAVERDIKHANI, K., MORAN, S. E., MORELLO, G., MUKHERJEE, S., SING, D. K., STEVENSON, K. B., WAKEFORD, H. R., AHRER, E.-M., ALAM, M. K., ALDERSON, L., ALLEN, N. H., BATALHA, N. E., BELL, T. J., BLECIC, J., BRANDE, J., CACERES, C., CASEWELL, S. L., CHUBB, K. L., CROSSFIELD, I. J. M., CROUZET, N., CUBILLOS, P. E., DECIN, L., DÉSSERT, J.-M., HARRINGTON, J., HENG, K., HENNING, T., IRO, N., KEMPTON, E. M. R., KENDREW, S., KIRK, J., KRICK, J., LAGAGE, P.-O., LENDL, M., MANCINI, L., MANSFIELD, M., MAY, E. M., MAYNE, N. J., NIKOLOV, N. K., PALLE, E., PETIT DIT DE LA ROCHE, D. J. M., PIAULET, C., POWELL, D., REDFIELD, S., ROGERS, L. K., ROMAN, M. T., ROY, P.-A., NIXON, M. C., SCHLAWIN, E., TAN, X., TREMBLIN, P., TURNER, J. D., VENOT, O., WAALKES, W. C., WHEATLEY, P. J. et ZHANG, X. (2023). Early Release Science of the exoplanet WASP-39b with JWST NIRISS. *Nature*, 614(7949):670–675.
- FENG, Y. K., LINE, M. R., FORTNEY, J. J., STEVENSON, K. B., BEAN, J., KREIDBERG, L. et PARMENTIER, V. (2016). The Impact of Non-uniform Thermal Structure on the Interpretation of Exoplanet Emission Spectra. *ApJ*, 829(1):52.
- FLETCHER, L. N., ORTON, G. S., TEANBY, N. A. et IRWIN, P. G. J. (2009). Phosphine on Jupiter and Saturn from Cassini/CIRS. *Icarus*, 202(2):543–564.
- FLEURY, B., GUDIPATI, M. S., HENDERSON, B. L. et SWAIN, M. (2019). Photochemistry in Hot H<sub>2</sub>-dominated Exoplanet Atmospheres. *ApJ*, 871(2):158.
- FÖHRING, D., DHILLON, V. S., MADHUSUDHAN, N., MARSH, T. R., COPPERWHEAT, C. M., LITTLEFAIR, S. P. et WILSON, R. W. (2013). ULTRACAM z-band detection of the secondary eclipse of WASP-12b. *MNRAS*, 435(3):2268–2273.
- FORGET, F., MILLOUR, E., BIERJON, A., DELAVOIS, A., FAN, S., LANGE, L., LIU, J., MATHE, C., NAAR, J., PIERRON, T., VANDEMEULEBROUCK, R., SPIGA, A., MONTABONE, L., CHAUFRAY, J. Y., LEFÈVRE, F., MÄTTÄNEN, A., MONTMESSIN, F., ROSSI, L., VALS, M., GONZALEZ-GALINDO, F., LOPEZ-VALVERDE, M. A., WOLFF, M. J., YOUNG, R., LEWIS, S. R. et READ, P. L. (2022). Challenges in Mars Climate Modelling with the LMD Mars Global Climate Model, Now Called the Mars “Planetary Climate Model” (PCM). In *Seventh International Workshop on the Mars Atmosphere : Modelling and Observations*, page 1102.
- FORTNEY, J. J., MORDASINI, C., NETTELMANN, N., KEMPTON, E. M.-R., GREENE, T. P. et ZAHNLE, K. (2013). A Framework for Characterizing the Atmospheres of Low-mass Low-density Transiting Planets. *ApJ*, 775:80.
- FUKUI, A., NARITA, N., KUROSAKI, K., IKOMA, M., YANAGISAWA, K., KURODA, D., SHIMIZU, Y., TAKAHASHI, Y. H., OHNUKI, H., ONITSUKA, M., HIRANO, T., SUENAGA, T., KAWAUCHI, K., NAGAYAMA, S., OHTA, K., YOSHIDA, M., KAWAI, N. et IZUMIURA, H. (2013). Optical-to-near-infrared Simultaneous Observations for the Hot Uranus GJ3470b : A Hint of a Cloud-free Atmosphere. *ApJ*, 770:95.

- FULTON, B. J. et PETIGURA, E. A. (2018). The California-Kepler Survey. VII. Precise Planet Radii Leveraging Gaia DR2 Reveal the Stellar Mass Dependence of the Planet Radius Gap. *The Astronomical Journal*, 156(6):264.
- GARDNER, J. P., MATHER, J. C., CLAMPIN, M., DOYON, R., GREENHOUSE, M. A., HAMMEL, H. B., HUTCHINGS, J. B., JAKOBSEN, P., LILLY, S. J., LONG, K. S., LUNINE, J. I., MCCAUGHREAN, M. J., MOUNTAIN, M., NELLA, J., RIEKE, G. H., RIEKE, M. J., RIX, H.-W., SMITH, E. P., SONNEBORN, G., STIAVELLI, M., STOCKMAN, H. S., WINDHORST, R. A. et WRIGHT, G. S. (2006). The James Webb Space Telescope. *Space Sc. Rev.*, 123(4):485–606.
- GILLI, G., LEBONNOIS, S., GONZÁLEZ-GALINDO, F., LÓPEZ-VALVERDE, M. A., STOLZENBACH, A., LEFÈVRE, F., CHAUFRAY, J. Y. et LOTT, F. (2017). Thermal structure of the upper atmosphere of Venus simulated by a ground-to-thermosphere GCM. *Icarus*, 281:55–72.
- GLARBORG, P., MILLER, J. A., RUSCIC, B. et KLIPPENSTEIN, S. J. (2018). Modeling nitrogen chemistry in combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, 67:31–68.
- GOLDSMITH, C. F., MAGOON, G. R. et GREEN, W. H. (2012). Database of small molecule thermochemistry for combustion. *The Journal of Physical Chemistry A*, 116(36):9033–9057.
- GORDON, I., ROTHMAN, L., HARGREAVES, R., HASHEMI, R., KARLOVETS, E., SKINNER, F., CONWAY, E., HILL, C., KOCHANOV, R., TAN, Y., Wcisłowski, P., FINENKO, A., NELSON, K., BERNATH, P., BIRK, M., BOUDON, V., CAMPARGUE, A., CHANCE, K., COUSTENIS, A., DROUIN, B., FLAUD, J., GAMACHE, R., HODGES, J., JACQUEMART, D., MLAWER, E., NIKITIN, A., PEREVALOV, V., ROTGER, M., TENNYSON, J., TOON, G., TRAN, H., TYUTEREV, V., ADKINS, E., BAKER, A., BARBE, A., CANÈ, E., CSÁSZÁR, A., DUDARYONOK, A., EGOROV, O., FLEISHER, A., FLEURBAEY, H., FOLTYNOWICZ, A., FURTENBACHER, T., HARRISON, J., HARTMANN, J., HORNEMAN, V., HUANG, X., KARMAN, T., KARNS, J., KASSI, S., KLEINER, I., KOFMAN, V., KWABIA-TCHANA, F., LAVRENTIEVA, N., LEE, T., LONG, D., LUKASHEVSKAYA, A., LYULIN, O., MAKHNEV, V., MATT, W., MASSIE, S., MELOSSO, M., MIKHAILENKO, S., MONDELAIN, D., MÜLLER, H., NAUMENKO, O., PERRIN, A., POLYANSKY, O., RADAOUI, E., RASTON, P., REED, Z., REY, M., RICHARD, C., TÓBIÁS, R., SADIEK, I., SCHWENKE, D., STARIKOVA, E., SUNG, K., TAMASSIA, F., TASHKUN, S., VANDER AUWERA, J., VASILENKO, I., VIGASIN, A., VILLANUEVA, G., VISPOEL, B., WAGNER, G., YACHMENEV, A. et YURCHENKO, S. (2022). The hitran2020 molecular spectroscopic database. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 277:107949.
- GRASSI, T., NAUMAN, F., RAMSEY, J. P., BOVINO, S., PICO GNA, G. et ERCOLANO, B. (2022). Reducing the complexity of chemical networks via interpretable autoencoders. *A&A*, 668:A139.
- GREBENSHCHIKOV, S. Y. (2013). Photodissociation of carbon dioxide in singlet valence electronic states. ii. five state absorption spectrum and vibronic assignment. *J. Chem. Phys.*, 138(22):224107.

- GREENE, T. P., LINE, M. R., MONTERO, C., FORTNEY, J. J., LUSTIG-YAEGER, J. et LUTHER, K. (2016). Characterizing Transiting Exoplanet Atmospheres with JWST. *ApJ*, 817(1):17.
- GUERLET, S., FOUCHET, T., BÉZARD, B., SIMON-MILLER, A. A. et MICHAEL FLASAR, F. (2009). Vertical and meridional distribution of ethane, acetylene and propane in Saturn's stratosphere from CIRS/Cassini limb observations. *Icarus*, 203(1):214–232.
- GUILLOY, G., GRESSIER, A., WRIGHT, S., SANTERNE, A., JAZIRI, A. Y., EDWARDS, B., CHANGEAT, Q., MODIRROUSTA-GALIAN, D., SKAF, N., AL-REFAIE, A., BAEYENS, R., BIEGER, M. F., BLAIN, D., KIEFER, F., MORVAN, M., MUGNAI, L. V., PLURIEL, W., POVEDA, M., ZINGALES, T., WHITEFORD, N., YIP, K. H., CHARNAY, B., LECONTE, J., DROSSART, P., SOZZETTI, A., MARCQ, E., TSIARAS, A., VENOT, O., WALDMANN, I. et BEAULIEU, J.-P. (2021). ARES IV : Probing the Atmospheres of the Two Warm Small Planets HD 106315c and HD 3167c with the HST/WFC3 Camera. *The Astronomical Journal*, 161(1):19.
- HÉBRARD, E., TOMLIN, A. S., BOUNACEUR, R. et BATTIN-LECLERC, F. (2015). Determining predictive uncertainties and global sensitivities for large parameter systems : A case study for n-butane oxidation. *Proceedings of the Combustion Institute*, 35(1):607 – 616.
- HELLING, C. et RIMMER, P. B. (2019). Lightning and charge processes in brown dwarf and exoplanet atmospheres. *Philosophical Transactions of the Royal Society A*, 377(2154): 20180398.
- HENDRIX, J. L. A. M., LOUCA, A. J. et MIGUEL, Y. (2023). Using a neural network approach to accelerate disequilibrium chemistry calculations in exoplanet atmospheres. *MNRAS*.
- HERZBERG, G. (1989). *Molecular Spectra and Molecular Structure : I. Spectra of diatomic molecules*. Molecular Spectra and Molecular Structure. R.E. Krieger Publishing Company.
- HIDAKA, Y., OKI, T., KAWANO, H. et HIGASHIHARA, T. (1989). Thermal decomposition of methanol in shock waves. *J. Phys. Chem.*, 93:7134–7139.
- HIMES, M. D. et HARRINGTON, J. (2022). On the Dayside Atmosphere of WASP-12b. *ApJ*, 931(2):86.
- HOBBS, R., RIMMER, P. B., SHORTTLE, O. et MADHUSUDHAN, N. (2021). Sulfur chemistry in the atmospheres of warm and hot Jupiters. *MNRAS*, 506(3):3186–3204.
- HOWARD, A. W., MARCY, G. W., BRYSON, S. T., JENKINS, J. M., ROWE, J. F., BATALHA, N. M., BORUCKI, W. J., KOCH, D. G., DUNHAM, E. W., GAUTIER, Thomas N., I., VAN CLEVE, J., COCHRAN, W. D., LATHAM, D. W., LISSAUER, J. J., TORRES, G., BROWN, T. M., GILLILAND, R. L., BUCHHAVE, L. A., CALDWELL, D. A., CHRISTENSEN-DALSGAARD, J., CIARDI, D., FRESSIN, F., HAAS, M. R., HOWELL, S. B., KJELDSSEN, H., SEAGER, S., ROGERS, L., SASSELOV, D. D., STEFFEN, J. H.,

- BASRI, G. S., CHARBONNEAU, D., CHRISTIANSEN, J., CLARKE, B., DUPREE, A., FABRYCKY, D. C., FISCHER, D. A., FORD, E. B., FORTNEY, J. J., TARTER, J., GIROUARD, F. R., HOLMAN, M. J., JOHNSON, J. A., KLAUS, T. C., MACHALEK, P., MOORHEAD, A. V., MOREHEAD, R. C., RAGOZZINE, D., TENENBAUM, P., TWICKEN, J. D., QUINN, S. N., ISAACSON, H., SHPORER, A., LUCAS, P. W., WALKOWICZ, L. M., WELSH, W. F., BOSS, A., DEVORE, E., GOULD, A., SMITH, J. C., MORRIS, R. L., PRSA, A., MORTON, T. D., STILL, M., THOMPSON, S. E., MULLALLY, F., ENDL, M. et MACQUEEN, P. J. (2012). Planet Occurrence within 0.25 AU of Solar-type Stars from Kepler. *ApJS*, 201(2):15.
- HSU, D. C., FORD, E. B., RAGOZZINE, D. et ASHBY, K. (2019). Occurrence Rates of Planets Orbiting FGK Stars : Combining Kepler DR25, Gaia DR2, and Bayesian Inference. *The Astronomical Journal*, 158(3):109.
- HU, R. (2015). Photochemistry of Terrestrial Exoplanet Atmospheres. *In Planetary Exploration and Science : Recent Results and Advances*, pages 291–308.
- HU, R. et SEAGER, S. (2014). Photochemistry in terrestrial exoplanet atmospheres. iii. photochemistry and thermochemistry in thick atmospheres on super earths and mini neptunes. *The Astrophysical Journal*, 784(1):63.
- JACOBSON, M. Z. et TURCO, R. P. (1994). Modeling coagulation among particles of different composition and size. *Atmospheric Environment*, 28:1327–1338.
- JOSHI, A. et WANG, H. (2006). Master equation modeling of wide range temperature and pressure dependence of  $\text{co} + \text{oh} \rightarrow$  products. *International journal of chemical kinetics*, 38(1):57–73.
- JWST TRANSITING EXOPLANET COMMUNITY EARLY RELEASE SCIENCE TEAM, AHRER, E.-M., ALDERSON, L., BATALHA, N. M., BATALHA, N. E., BEAN, J. L., BEATTY, T. G., BELL, T. J., BENNEKE, B., BERTA-THOMPSON, Z. K., CARTER, A. L., CROSSFIELD, I. J. M., ESPINOZA, N., FEINSTEIN, A. D., FORTNEY, J. J., GIBSON, N. P., GOYAL, J. M., KEMPTON, E. M. R., KIRK, J., KREIDBERG, L., LÓPEZ-MORALES, M., LINE, M. R., LOTHINGER, J. D., MORAN, S. E., MUKHERJEE, S., OHNO, K., PARMENTIER, V., PIAULET, C., RUSTAMKULOV, Z., SCHLAWIN, E., SING, D. K., STEVENSON, K. B., WAKEFORD, H. R., ALLEN, N. H., BIRKMANN, S. M., BRANDE, J., CROUZET, N., CUBILLOS, P. E., DAMIANO, M., DÉSSERT, J.-M., GAO, P., HARRINGTON, J., HU, R., KENDREW, S., KNUTSON, H. A., LAGAGE, P.-O., LECONTE, J., LENDL, M., MACDONALD, R. J., MAY, E. M., MIGUEL, Y., MOLAVERDIKHANI, K., MOSES, J. I., MURRAY, C. A., NEHRING, M., NIKOLOV, N. K., PETIT DIT DE LA ROCHE, D. J. M., RADICA, M., ROY, P.-A., STASSUN, K. G., TAYLOR, J., WAALKES, W. C., WACHIRAPHAN, P., WELBANKS, L., WHEATLEY, P. J., AGGARWAL, K., ALAM, M. K., BANERJEE, A., BARSTOW, J. K., BLECIC, J., CASEWELL, S. L., CHANGEAT, Q., CHUBB, K. L., COLÓN, K. D., COULOMBE, L.-P., DAYLAN, T., DE VAL-BORRO, M., DECIN, L., DOS SANTOS, L. A., FLAGG, L., FRANCE, K., FU, G., GARCÍA MUÑOZ, A., GIZIS, J. E., GLIDDEN, A., GRANT, D., HENG, K., HENNING, T., HONG, Y.-C., INGLIS, J., IRO, N., KATARIA, T., KOMACEK, T. D., KRICK, J. E., LEE, E. K. H., LEWIS, N. K., LILLO-BOX, J., LUSTIG-YAEGER, J., MANCINI, L., MANDELL, A. M., MANSFIELD, M., MARLEY, M. S., MIKAL-EVANS, T., MORELLO, G., NIXON, M. C., ORTIZ



- CEBALLOS, K., PIETTE, A. A. A., POWELL, D., RACKHAM, B. V., RAMOS-ROSADO, L., RAUSCHER, E., REDFIELD, S., ROGERS, L. K., ROMAN, M. T., ROUDIER, G. M., SCARSDALE, N., SHKOLNIK, E. L., SOUTHWORTH, J., SPAKE, J. J., STEINRUECK, M. E., TAN, X., TESKE, J. K., TREMBLIN, P., TSAI, S.-M., TUCKER, G. S., TURNER, J. D., VALENTI, J. A., VENOT, O., WALDMANN, I. P., WALLACK, N. L., ZHANG, X. et ZIEBA, S. (2023). Identification of carbon dioxide in an exoplanet atmosphere. *Nature*, 614(7949):649–652.
- KAWASHIMA, Y., HU, R. et IKOMA, M. (2019). Detectable Molecular Features above Hydrocarbon Haze via Transmission Spectroscopy with JWST : Case Studies of GJ 1214b-, GJ 436b-, HD 97658b-, and Kepler-51b-like Planets. *ApJL*, 876(1):L5.
- KEE, R., RUPLEY, F., MILLER, J., COLTRIN, M., GRGAR, J., MEEKS, E., MOFFAT, H., LUTZ, A., DIXON-LEWIS, G., SMOOKE, M. *et al.* (2006). Chemkin release 4.1. *Reaction Design, San Diego, CA*, 115.
- KESSLER, W., CARLETON, K. et MARINELLI, W. (1993). Absorption coefficients for water vapor at 193 nm from 300 to 1073 k. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 50(1):39–46.
- KNUTSON, H. A., BENNEKE, B., DEMING, D. et HOMEIER, D. (2014). A featureless transmission spectrum for the Neptune-mass exoplanet GJ436b. *Nature*, 505(7481):66–68.
- KONINGS, T., BAEYENS, R. et DECIN, L. (2022). Impact of stellar flares on the chemical composition and transmission spectra of gaseous exoplanets orbiting M dwarfs. *A&A*, 667:A15.
- KOPPARAPU, R. k., KASTING, J. F. et ZAHNLE, K. J. (2012). A Photochemical Model for the Carbon-rich Planet WASP-12b. *ApJ*, 745(1):77.
- KRASNOPOLSKY, V. A. (2018). Disulfur dioxide and its near-UV absorption in the photochemical model of Venus atmosphere. *Icarus*, 299:294–299.
- KREIDBERG, L., BEAN, J. L., DÉSSERT, J.-M., BENNEKE, B., DEMING, D., STEVENSON, K. B., SEAGER, S., BERTA-THOMPSON, Z., SEIFAHRT, A. et HOMEIER, D. (2014). Clouds in the atmosphere of the super-Earth exoplanet GJ1214b. *Nature*, 505(7481):69–72.
- KREIDBERG, L., LINE, M. R., PARMENTIER, V., STEVENSON, K. B., LOUDEN, T., BONNEFOY, M., FAHERTY, J. K., HENRY, G. W., WILLIAMSON, M. H., STASSUN, K., BEATTY, T. G., BEAN, J. L., FORTNEY, J. J., SHOWMAN, A. P., DÉSSERT, J.-M. et ARCANGELI, J. (2018). Global Climate and Atmospheric Composition of the Ultra-hot Jupiter WASP-103b from HST and Spitzer Phase Curve Observations. *The Astronomical Journal*, 156(1):17.
- LAVVAS, P., KOSKINEN, T. et YELLE, R. V. (2014). Electron Densities and Alkali Atoms in Exoplanet Atmospheres. *ApJ*, 796(1):15.
- LEBONNOIS, S., TOUBLANC, D., HOURDIN, F. et RANNOU, P. (2001). Seasonal Variations of Titan’s Atmospheric Composition. *Icarus*, 152:384–406.

- LECONTE, J., FORGET, F., CHARNAY, B., WORDSWORTH, R., SELSIS, F., MILLOUR, E. et SPIGA, A. (2013). 3D climate modeling of close-in land planets : Circulation patterns, climate moist bistability, and habitability. *A&A*, 554:A69.
- LEE, E. K. H., PRINOTH, B., KITZMANN, D., TSAI, S.-M., HOEIJMAKERS, J., BORSATO, N. W. et HENG, K. (2022a). The Mantis Network II : examining the 3D high-resolution observable properties of the UHJs WASP-121b and WASP-189b through GCM modeling. *MNRAS*, 517(1):240–256.
- LEE, Y. J., GARCÍA MUÑOZ, A., YAMAZAKI, A., QUÉMERAIS, E., MOTTOLA, S., HELLMICH, S., GRANZER, T., BERGOND, G., ROTH, M., GALLEGO-CANO, E., CHAUFRAY, J.-Y., ROBIDEL, R., MURAKAMI, G., MASUNAGA, K., KAPLAN, M., ERECE, O., HUESO, R., KABÁTH, P., ŠPOKOVÁ, M., SÁNCHEZ-LAVEGA, A., KIM, M.-J., MANGANO, V., JESSUP, K.-L., WIDEMANN, T., SUGIYAMA, K.-i., WATANABE, S., YAMADA, M., SATOH, T., NAKAMURA, M., IMAI, M. et CABRERA, J. (2022b). Reflectivity of Venus’s Dayside Disk During the 2020 Observation Campaign : Outcomes and Future Perspectives. *The Planetary Science Journal*, 3(9):209.
- LEFÈVRE, F., LEBONNOIS, S., MONTMESSIN, F. et FORGET, F. (2004). Three-dimensional modeling of ozone on Mars. *Journal of Geophysical Research (Planets)*, 109:E07004.
- LEFÈVRE, F., TROKHIMOVSKIY, A., FEDOROVA, A., BAGGIO, L., LACOMBE, G., MÄÄTTÄNEN, A., BERTAUX, J. L., FORGET, F., MILLOUR, E., VENOT, O., BÉNILAN, Y., KORABLEV, O. et MONTMESSIN, F. (2021). Relationship Between the Ozone and Water Vapor Columns on Mars as Observed by SPICAM and Calculated by a Global Climate Model. *Journal of Geophysical Research (Planets)*, 126(4):e06838.
- LENDL, M., TRIAUD, A. H. M. J., ANDERSON, D. R., COLLIER CAMERON, A., DELREZ, L., DOYLE, A. P., GILLON, M., HELLIER, C., JEHIN, E., MAXTED, P. F. L., NEVEUVANMALLE, M., PEPE, F., POLLACCO, D., QUELOZ, D., SÉGRANSAN, D., SMALLEY, B., SMITH, A. M. S., UDRY, S., VAN GROOTEL, V. et WEST, R. G. (2014). WASP-117b : a 10-day-period Saturn in an eccentric and misaligned orbit. *A&A*, 568:A81.
- LEWIS, B. et CARVER, J. (1983). Temperature dependence of the carbon dioxide photoabsorption cross section between 1200 and 1970 a. *J. Quant. Spectr. Rad. Transf.*, 30(4):297 – 309.
- LINE, M. R., BROGI, M., BEAN, J. L., GANDHI, S., ZALESKY, J., PARMENTIER, V., SMITH, P., MACE, G. N., MANSFIELD, M., KEMPTON, E. M. R., FORTNEY, J. J., SHKOLNIK, E., PATIENCE, J., RAUSCHER, E., DÉSSERT, J.-M. et WARDENIER, J. P. (2021). A solar C/O and sub-solar metallicity in a hot Jupiter atmosphere. *Nature*, 598(7882):580–584.
- LINE, M. R., KNUTSON, H., WOLF, A. S. et YUNG, Y. L. (2014). A systematic retrieval analysis of secondary eclipse spectra. ii. a uniform analysis of nine planets and their c to o ratios. *The Astrophysical Journal*, 783(2):70.
- LINE, M. R., WOLF, A. S., ZHANG, X., KNUTSON, H., KAMMER, J. A., ELLISON, E., DEROO, P., CRISP, D. et YUNG, Y. L. (2013). A systematic retrieval analysis of

- secondary eclipse spectra. i. a comparison of atmospheric retrieval techniques. *The Astrophysical Journal*, 775(2):137.
- LÓPEZ-MORALES, M., COUGHLIN, J. L., SING, D. K., BURROWS, A., APAI, D., ROGERS, J. C., SPIEGEL, D. S. et ADAMS, E. R. (2010). Day-side z'-band emission and eccentricity of wasp-12b\*. *The Astrophysical Journal Letters*, 716(1):L36.
- LOUCA, A. J., MIGUEL, Y., TSAI, S.-M., FRONING, C. S., LOYD, R. O. P. et FRANCE, K. (2023). The impact of time-dependent stellar activity on exoplanet atmospheres. *MNRAS*, 521(3):3333–3347.
- MACDONALD, R. J., GOYAL, J. M. et LEWIS, N. K. (2020). Why Is it So Cold in Here? Explaining the Cold Temperatures Retrieved from Transmission Spectra of Exoplanet Atmospheres. *ApJL*, 893(2):L43.
- MADHUSUDHAN, N. (2012). C/O Ratio as a Dimension for Characterizing Exoplanetary Atmospheres. *ApJ*, 758:36.
- MADHUSUDHAN, N. (2019). Exoplanetary Atmospheres : Key Insights, Challenges, and Prospects. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics* , 57:617–663.
- MADHUSUDHAN, N., AGÚNDEZ, M., MOSES, J. I. et HU, Y. (2016). Exoplanetary Atmospheres—Chemistry, Formation Conditions, and Habitability. *Space Sc. Rev.*, 205(1-4):285–348.
- MADHUSUDHAN, N., CROUZET, N., MCCULLOUGH, P. R., DEMING, D. et HEDGES, C. (2014). H<sub>2</sub>O Abundances in the Atmospheres of Three Hot Jupiters. *ApJL*, 791:L9.
- MADHUSUDHAN, N., HARRINGTON, J., STEVENSON, K. B., NYMEYER, S., CAMPO, C. J., WHEATLEY, P. J., DEMING, D., BLECIC, J., HARDY, R. A., LUST, N. B., ANDERSON, D. R., COLLIER-CAMERON, A., BRITT, C. B. T., BOWMAN, W. C., HEBB, L., HELLIER, C., MAXTED, P. F. L., POLLACCO, D. et WEST, R. G. (2011). A high C/O ratio and weak thermal inversion in the atmosphere of exoplanet WASP-12b. *Nature*, 469:64–67.
- MANCHON, L., OUAZZANI, R. M., VAUGLIN, I., BOT, C., BRAU-NOGUÉ, S., BRIOT, D., CIESLA, L., LAGARDE, N., DE LAVERNY, P., LÉBOULLEUX, L., NESVADBA, N., MALZAC, J. et VENOT, O. (2023). COMMISSION FEMMES ET ASTRONOMIE DE LA SF2A : sexism and sexual harassment for European physicists. In *SF2A-2023 : Proceedings of the Annual meeting of the French Society of Astronomy and Astrophysics*, pages 25–30.
- MANDELL, A. M., HAYNES, K., SINUKOFF, E., MADHUSUDHAN, N., BURROWS, A. et DEMING, D. (2013). Exoplanet Transit Spectroscopy Using WFC3 : WASP-12 b, WASP-17 b, and WASP-19 b. *ApJ*, 779(2):128.
- MANSFIELD, M., LINE, M. R., BEAN, J. L., FORTNEY, J. J., PARMENTIER, V., WISER, L., KEMPTON, E. M. R., GHARIB-NEZHAD, E., SING, D. K., LÓPEZ-MORALES, M., BAXTER, C., DÉSSERT, J.-M., SWAIN, M. R. et ROUDIER, G. M. (2021). A unique hot Jupiter spectral sequence with evidence for compositional diversity. *Nature Astronomy*, 5:1224–1232.

- MAYNE, N. J., BARAFFE, I., ACREMAN, D. M., SMITH, C., BROWNING, M. K., SKÅLID AMUNDSEN, D., WOOD, N., THUBURN, J. et JACKSON, D. R. (2014). The unified model, a fully-compressible, non-hydrostatic, deep atmosphere global circulation model, applied to hot Jupiters. ENDGame for a HD 209458b test case. *A&A*, 561:A1.
- MAYOR, M. et QUELOZ, D. (1995). A Jupiter-mass companion to a solar-type star. *Nature*, 378(6555):355–359.
- MCBRIDE, B., GORDON, S. et RENO, M. (1993). Coefficients for calculating thermodynamic and transport properties of individual species. *NASA Technical Memorandum*, 4513.
- MENDONÇA, J. M., GRIMM, S. L., GROSHEINTZ, L. et HENG, K. (2016). THOR : A New and Flexible Global Circulation Model to Explore Planetary Atmospheres. *ApJ*, 829(2):115.
- MENDONÇA, J. M., MALIK, M., DEMORY, B.-O. et HENG, K. (2018). Revisiting the Phase Curves of WASP-43b : Confronting Re-analyzed Spitzer Data with Cloudy Atmospheres. *The Astronomical Journal*, 155:150.
- MILLER-RICCI KEMPTON, E., ZAHNLE, K. et FORTNEY, J. J. (2012). The Atmospheric Chemistry of GJ 1214b : Photochemistry and Clouds. *ApJ*, 745(1):3.
- MIN, M., ORMEL, C. W., CHUBB, K., HELLING, C. et KAWASHIMA, Y. (2020). The ARCiS framework for exoplanet atmospheres. Modelling philosophy and retrieval. *A&A*, 642:A28.
- MOLAVERDIKHANI, K., HENNING, T. et MOLLIÈRE, P. (2019). From Cold to Hot Irradiated Gaseous Exoplanets : Fingerprints of Chemical Disequilibrium in Atmospheric Spectra. *ApJ*, 883(2):194.
- MOLLIÈRE, P., VAN BOEKEL, R., BOUWMAN, J., HENNING, T., LAGAGE, P. O. et MIN, M. (2017). Observing transiting planets with JWST. Prime targets and their synthetic spectral observations. *A&A*, 600:A10.
- MOLLIÈRE, P., VAN BOEKEL, R., DULLEMOND, C., HENNING, T. et MORDASINI, C. (2015). Model Atmospheres of Irradiated Exoplanets : The Influence of Stellar Parameters, Metallicity, and the C/O Ratio. *ApJ*, 813(1):47.
- MORELLO, G., CASASAYAS-BARRIS, N., ORELL-MIQUEL, J., PALLÉ, E., CRACCHIOLO, G. et MICELA, G. (2022). The strange case of Na I in the atmosphere of HD 209458 b. *A&A*, 657:A97.
- MORLEY, C. V., FORTNEY, J. J., KEMPTON, E. M. R., MARLEY, M. S., VISSCHER, C. et ZAHNLE, K. (2013). Quantitatively Assessing the Role of Clouds in the Transmission Spectrum of GJ 1214b. *ApJ*, 775(1):33.
- MORLEY, C. V., FORTNEY, J. J., MARLEY, M. S., ZAHNLE, K., LINE, M., KEMPTON, E., LEWIS, N. et CAHOY, K. (2015). Thermal Emission and Reflected Light Spectra of Super Earths with Flat Transmission Spectra. *ApJ*, 815(2):110.

- MOSES, J., MADHUSUDHAN, N., VISSCHER, C. et FREEDMAN, R. (2013). Chemical consequences of the c/o ratio on hot jupiters : Examples from wasp-12b, corot-2b, xo-1b, and hd 189733b. *ApJ*, 763(1):25.
- MOSES, J., VISSCHER, C., FORTNEY, J., SHOWMAN, A., LEWIS, N., GRIFFITH, C., KLIPPENSTEIN, S., SHABRAM, M., FRIEDSON, A., MARLEY, M. *et al.* (2011). Disequilibrium carbon, oxygen, and nitrogen chemistry in the atmospheres of HD 189733b and HD 209458b. *ApJ*, 737:15.
- MOSES, J. I. (2014). Chemical kinetics on extrasolar planets. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London Series A*, 372:20130073–20130073.
- MOSES, J. I., LINE, M. R., VISSCHER, C., RICHARDSON, M. R., NETTELMANN, N., FORTNEY, J. J., BARMAN, T. S., STEVENSON, K. B. et MADHUSUDHAN, N. (2013). Compositional Diversity in the Atmospheres of Hot Neptunes, with Application to GJ 436b. *ApJ*, 777:34.
- MOSES, J. I., TREMBLIN, P., VENOT, O. et MIGUEL, Y. (2022). Chemical variation with altitude and longitude on exo-Neptunes : Predictions for Ariel phase-curve observations. *Experimental Astronomy*, 53(2):279–322.
- MOUSIS, O., ATKINSON, D. H., AMBROSI, R., ATREYA, S., BANFIELD, D., BARABASH, S., BLANC, M., CAVALIÉ, T., COUSTENIS, A., DELEUIL, M., DURRY, G., FERRI, F., FLETCHER, L. N., FOUCHET, T., GUILLOT, T., HARTOGH, P., HUESO, R., HOFSTADTER, M., LEBRETON, J. P., MANDT, K. E., RAUER, H., RANNOU, P., RENARD, J. B., SÁNCHEZ-LAVEGA, A., SAYANAGI, K. M., SIMON, A. A., SPILKER, T., VENKATAPATHY, E., WAITE, J. H. et WURZ, P. (2022). In Situ exploration of the giant planets. *Experimental Astronomy*, 54(2-3):975–1013.
- MOUSIS, O., ATKINSON, D. H., CAVALIÉ, T., FLETCHER, L. N., AMATO, M. J., ASLAM, S., FERRI, F., RENARD, J. B., SPILKER, T., VENKATAPATHY, E., WURZ, P., APLIN, K., COUSTENIS, A., DELEUIL, M., DOBRIJEVIC, M., FOUCHET, T., GUILLOT, T., HARTOGH, P., HEWAGAMA, T., HOFSTADTER, M. D., HUE, V., HUESO, R., LEBRETON, J. P., LELLOUCH, E., MOSES, J., ORTON, G. S., PEARL, J. C., SÁNCHEZ-LAVEGA, A., SIMON, A., VENOT, O., WAITE, J. H., ACHTERBERG, R. K., ATREYA, S., BILLEBAUD, F., BLANC, M., BORGET, F., BRUGGER, B., CHARNOZ, S., CHIAVASSA, T., COTTINI, V., D’HENDECOURT, L., DANGER, G., ENCRENAZ, T., GORIUS, N. J. P., JORDA, L., MARTY, B., MORENO, R., MORSE, A., NIXON, C., REH, K., RONNET, T., SCHMIDER, F. X., SHERIDAN, S., SOTIN, C., VERNAZZA, P. et VILLANUEVA, G. L. (2018). Scientific rationale for Uranus and Neptune in situ explorations. *P&SS*, 155:12–40.
- MOUSIS, O., FLETCHER, L. N., LEBRETON, J.-P., WURZ, P., CAVALIÉ, T., COUSTENIS, A., COURTIN, R., GAUTIER, D., HELLED, R., IRWIN, P. G. J., MORSE, A. D., NETTELMANN, N., MARTY, B., ROUSSELOT, P., VENOT, O., ATKINSON, D. H., WAITE, J. H., REH, K. R., SIMON-MILLER, A., ATREYA, S., ANDRÉ, N., BLANC, M., DAGLIS, I. A., FISCHER, G., GEPPERT, W. D., GUILLOT, T., HEDMAN, M. M., HUESO, R., LELLOUCH, E., LUNINE, J. I., MURRAY, C. D., O’DONOGHUE, J., RENGEL, M., SANCHEZ-LAVEGA, A., SCHMIDER, F.-X., SPIGA, A., SPILKER, T., PETIT, J.-M., TISCARENO, M. S., ALI-DIB, M., ALTWEGG, K., BOUQUET, A., BRIOIS, C., FOUCHET,

- T., GUERLET, S., KOSTIUK, T., LEBLEU, D., MORENO, R., ORTON, G. S. et PONCY, J. (2014). Scientific rationale for saturn's in situ exploration. *Planetary and Space Science*, 104, Part A(0):29.
- MUELLER, R. F. (1964). A Chemical Model for the Lower Atmosphere of Venus. *Icarus*, 3(4):285–298.
- MUGNAI, L. V., MODIRROUSTA-GALIAN, D., EDWARDS, B., CHANGEAT, Q., BOUWMAN, J., MORELLO, G., AL-REFAIE, A., BAEYENS, R., BIEGER, M. F., BLAIN, D., GRESSIER, A., GUILLUY, G., JAZIRI, Y., KIEFER, F., MORVAN, M., PLURIEL, W., POVEDA, M., SKAF, N., WHITEFORD, N., WRIGHT, S., YIP, K. H., ZINGALES, T., CHARNAY, B., DROSSART, P., LECONTE, J., VENOT, O., WALDMANN, I. et BEAULIEU, J.-P. (2021). ARES. V. No Evidence For Molecular Absorption in the HST WFC3 Spectrum of GJ 1132 b. *The Astronomical Journal*, 161(6):284.
- NICHOLLS, H., HÉBRARD, E., VENOT, O., DRUMMOND, B. et EVANS, E. (2023). Temperature-chemistry coupling in the evolution of gas giant atmospheres driven by stellar flares. *MNRAS*, 523(4):5681–5702.
- ÖBERG, K. I., MURRAY-CLAY, R. et BERGIN, E. A. (2011). The Effects of Snowlines on C/O in Planetary Atmospheres. *ApJL*, 743(1):L16.
- OEHLSCHLAEGER, M., DAVIDSON, D., JEFFRIES, J. et HANSON, R. (2004). Ultraviolet absorption cross-sections of hot carbon dioxide. *Chemical physics letters*, 399(4):490–495.
- OLLIVIER, J. L., DOBRIJÉVIC, M. et PARISOT, J. P. (2000). New photochemical model of Saturn's atmosphere. *P&SS*, 48(7-8):699–716.
- ORESSENKO, M., LAVIE, B., GRIMM, S. L., TSAI, S.-M., MALIK, M., DEMORY, B.-O., MORDASINI, C., ALIBERT, Y., BENZ, W., QUANZ, S. P., TROTTA, R. et HENG, K. (2017). Retrieval analysis of the emission spectrum of wasp-12b : Sensitivity of outcomes to prior assumptions and implications for formation history. *The Astrophysical Journal Letters*, 847(1):L3.
- OUAZZANI, R. M., BOT, C., BRAU-NOGUÉ, S., BRIOT, D., LAVERNY, P., LAGARDE, N., NESVADBA, N., MALZAC, J., VAUGLIN, I. et VENOT, O. (2022). Commission Femmes et Astronomie de la SF2A : Women participation in French Astronomy. In RICHARD, J., SIEBERT, A., LAGARDE, E., LAGARDE, N., VENOT, O., MALZAC, J., MARQUETTE, J. B., N'DIAYE, M. et BRIOT, B., éditeurs : *SF2A-2022 : Proceedings of the Annual meeting of the French Society of Astronomy and Astrophysics*. Eds. : J. Richard, pages 23–28.
- OWOYELE, O. et PAL, P. (2022). Chemnode : A neural ordinary differential equations framework for efficient chemical kinetic solvers. *Energy and AI*, 7:100118.
- PANEK, E., BEAULIEU, J.-P., DROSSART, P., VENOT, O., CHANGEAT, Q., AL-REFAIE, A. et GRESSIER, A. (2023). A re-analysis of equilibrium chemistry in five hot Jupiters. *arXiv e-prints*, page arXiv :2306.10873.

- PARMENTIER, V., GUILLOT, T., FORTNEY, J. J. et MARLEY, M. S. (2015). A non-grey analytical model for irradiated atmospheres. II. Analytical vs. numerical solutions. *A&A*, 574:A35.
- PARMENTIER, V., SHOWMAN, A. P. et LIAN, Y. (2013). 3D mixing in hot Jupiters atmospheres. I. Application to the day/night cold trap in HD 209458b. *A&A*, 558:A91.
- PENG, Z., CARRASCO, N. et PERNOT, P. (2014). Modeling of synchrotron-based laboratory simulations of titan,Ås ionospheric photochemistry. *GeoResJ*, 1-2:33–53.
- PINHAS, A., MADHUSUDHAN, N., GANDHI, S. et MACDONALD, R. (2019). H<sub>2</sub>O abundances and cloud properties in ten hot giant exoplanets. *MNRAS*, 482(2):1485–1498.
- PLURIEL, W., WHITEFORD, N., EDWARDS, B., CHANGEAT, Q., YIP, K. H., BAEYENS, R., AL-REFAIE, A., FABIENNE BIEGER, M., BLAIN, D., GRESSIER, A., GUILLUY, G., YASSIN JAZIRI, A., KIEFER, F., MODIRROUSTA-GALIAN, D., MORVAN, M., MUGNAI, L. V., POVEDA, M., SKAF, N., ZINGALES, T., WRIGHT, S., CHARNAY, B., DROSSART, P., LECONTE, J., TSIARAS, A., VENOT, O., WALDMANN, I. et BEAULIEU, J.-P. (2020a). ARES. III. Unveiling the Two Faces of KELT-7 b with HST WFC3. *The Astronomical Journal*, 160(3):112.
- PLURIEL, W., ZINGALES, T., LECONTE, J. et PARMENTIER, V. (2020b). Strong biases in retrieved atmospheric composition caused by day-night chemical heterogeneities. *A&A*, 636:A66.
- POLLACK, J. B., RAGES, K., POPE, S. K., TOMASKO, M. G., ROMANI, P. N. et ATREYA, S. K. (1987). Nature of the stratospheric haze on Uranus : Evidence for condensed hydrocarbons. *JGR*, 92(A13):15037–15065.
- RIDGWAY, R. J., ZAMYATINA, M., MAYNE, N. J., MANNERS, J., LAMBERT, F. H., BRAAM, M., DRUMMOND, B., HÉBRARD, E., PALMER, P. I. et KOHARY, K. (2023). 3D modelling of the impact of stellar activity on tidally locked terrestrial exoplanets : atmospheric composition and habitability. *MNRAS*, 518(2):2472–2496.
- RIMMER, P. et RUGHEIMER, S. (2019). Hydrogen cyanide in nitrogen-rich atmospheres of rocky exoplanets. *Icarus*, 329:124–131.
- RIMMER, P. B. et HELLING, C. (2016). A Chemical Kinetics Network for Lightning and Life in Planetary Atmospheres. *ApJS*, 224(1):9.
- RIMMER, P. B., JORDAN, S., CONSTANTINOU, T., WOITKE, P., SHORTTLE, O., HOBBS, R. et PASCHODIMAS, A. (2021). Hydroxide Salts in the Clouds of Venus : Their Effect on the Sulfur Cycle and Cloud Droplet pH. *The Planetary Science Journal*, 2(4):133.
- ROCCHETTO, M., WALDMANN, I. P., VENOT, O., LAGAGE, P.-O. et TINETTI, G. (2016). Exploring Biases of Atmospheric Retrievals in Simulated JWST Transmission Spectra of Hot Jupiters. *ApJ*, 833:120.
- RODGERS-LEE, D., RIMMER, P. B., VIDOTTO, A. A., LOUCA, A. J., TAYLOR, A. M., MESQUITA, A. L., MIGUEL, Y., VENOT, O., HELLING, C., BARTH, P. et LACY, E. (2023). The energetic particle environment of a GJ 436 b-like planet. *MNRAS*, 521(4):5880–5891.

- ROMANI, P. N. et ATREYA, S. K. (1988). Methane photochemistry and haze production on Neptune. *Icarus*, 74(3):424–445.
- ROMANI, P. N., BISHOP, J., BEZARD, B. et ATREYA, S. (1993). Methane Photochemistry on Neptune : Ethane and Acetylene Mixing Ratios and Haze Production. *Icarus*, 106(2): 442–463.
- ROTHMAN, L., GORDON, I., BABIKOV, Y., BARBE, A., CHRIS BENNER, D., BERNATH, P., BIRK, M., BIZZOCCHI, L., BOUDON, V., BROWN, L. *et al.* (2013). The hitran2012 molecular spectroscopic database. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 130:4–50.
- ROTHMAN, L., GORDON, I., BARBE, A., BENNER, D., BERNATH, P., BIRK, M., BOUDON, V., BROWN, L., CAMPARGUE, A., CHAMPION, J.-P. *et al.* (2009). The hitran 2008 molecular spectroscopic database. *J. Quant. Spectr. Rad. Transf.*, 110:533–572.
- ROTHMAN, L., GORDON, I., BARBER, R., DOTHE, H., GAMACHE, R., GOLDMAN, A., PEREVALOV, V., TASHKUN, S. et TENNYSON, J. (2010). Hitemp, the high-temperature molecular spectroscopic database. *J. Quant. Spectr. Rad. Transf.*, 111(15):2139–2150.
- RUSTAMKULOV, Z., SING, D. K., MUKHERJEE, S., MAY, E. M., KIRK, J., SCHLAWIN, E., LINE, M. R., PIAULET, C., CARTER, A. L., BATALHA, N. E., GOYAL, J. M., LÓPEZ-MORALES, M., LOTHINGER, J. D., MACDONALD, R. J., MORAN, S. E., STEVENSON, K. B., WAKEFORD, H. R., ESPINOZA, N., BEAN, J. L., BATALHA, N. M., BENNEKE, B., BERTA-THOMPSON, Z. K., CROSSFIELD, I. J. M., GAO, P., KREIDBERG, L., POWELL, D. K., CUBILLOS, P. E., GIBSON, N. P., LECONTE, J., MOLAVERDIKHANI, K., NIKOLOV, N. K., PARMENTIER, V., ROY, P., TAYLOR, J., TURNER, J. D., WHEATLEY, P. J., AGGARWAL, K., AHRER, E., ALAM, M. K., ALDERSON, L., ALLEN, N. H., BANERJEE, A., BARAT, S., BARRADO, D., BARSTOW, J. K., BELL, T. J., BLECIC, J., BRANDE, J., CASEWELL, S., CHANGEAT, Q., CHUBB, K. L., CROUZET, N., DAYLAN, T., DECIN, L., DÉSSERT, J., MIKAL-EVANS, T., FEINSTEIN, A. D., FLAGG, L., FORTNEY, J. J., HARRINGTON, J., HENG, K., HONG, Y., HU, R., IRO, N., KATARIA, T., KEMPTON, E. M. R., KRICK, J., LENDL, M., LILLO-BOX, J., LOUCA, A., LUSTIG-YAEGER, J., MANCINI, L., MANSFIELD, M., MAYNE, N. J., MIGUEL, Y., MORELLO, G., OHNO, K., PALLE, E., PETIT DIT DE LA ROCHE, D. J. M., RACKHAM, B. V., RADICA, M., RAMOS-ROSADO, L., REDFIELD, S., ROGERS, L. K., SHKOLNIK, E. L., SOUTHWORTH, J., TESKE, J., TREMBLIN, P., TUCKER, G. S., VENOT, O., WAALKES, W. C., WELBANKS, L., ZHANG, X. et ZIEBA, S. (2023). Early Release Science of the exoplanet WASP-39b with JWST NIRSpec PRISM. *Nature*, 614(7949):659–663.
- SCHAEFER, L., LODDERS, K. et FEGLEY, B. (2012). Vaporization of the earth : Application to exoplanet atmospheres. *The Astrophysical Journal*, 755(1):41.
- SCHINKE, R. (1995). *Photodissociation dynamics : spectroscopy and fragmentation of small polyatomic molecules*. Numéro 1. Cambridge University Press.
- SCHULZ, C., KOCH, J., DAVIDSON, D., JEFFRIES, J. et HANSON, R. (2002). Ultraviolet absorption spectra of shock-heated carbon dioxide and water between 900 and 3050 k. *Chemical Physics Letters*, 355:82 – 88.



- SHAO, W. D., ZHANG, X., MENDONÇA, J. et ENCRENAZ, T. (2022). Local-time Dependence of Chemical Species in the Venusian Mesosphere. *The Planetary Science Journal*, 3(1):3.
- SHOWMAN, A. P., FORTNEY, J. J., LIAN, Y., MARLEY, M. S., FREEDMAN, R. S., KNUTSON, H. A. et CHARBONNEAU, D. (2009). Atmospheric circulation of hot jupiters : Coupled radiative-dynamical general circulation model simulations of hd 189733b and hd 209458b. *The Astrophysical Journal*, 699(1):564.
- SING, D. K., FORTNEY, J. J., NIKOLOV, N., WAKEFORD, H. R., KATARIA, T., EVANS, T. M., AIGRAIN, S., BALLESTER, G. E., BURROWS, A. S., DEMING, D., DÉSSERT, J.-M., GIBSON, N. P., HENRY, G. W., HUITSON, C. M., KNUTSON, H. A., LECAVELIER DES ETANGS, A., PONT, F., SHOWMAN, A. P., VIDAL-MADJAR, A., WILLIAMSON, M. H. et WILSON, P. A. (2016). A continuum from clear to cloudy hot-Jupiter exoplanets without primordial water depletion. *Nature*, 529(7584):59–62.
- SKAF, N., BIEGER, M. F., EDWARDS, B., CHANGEAT, Q., MORVAN, M., KIEFER, F., BLAIN, D., ZINGALES, T., POVEDA, M., AL-REFAIE, A., BAEYENS, R., GRESSIER, A., GUILLUY, G., JAZIRI, A. Y., MODIRROUSTA-GALIAN, D., MUGNAI, L. V., PLURIEL, W., WHITEFORD, N., WRIGHT, S., YIP, K. H., CHARNAY, B., LECONTE, J., DROSART, P., TSIARAS, A., VENOT, O., WALDMANN, I. et BEAULIEU, J.-P. (2020). ARES. II. Characterizing the Hot Jupiters WASP-127 b, WASP-79 b, and WASP-62b with the Hubble Space Telescope. *The Astronomical Journal*, 160(3):109.
- SOUTHWORTH, J. (2010). Homogeneous studies of transiting extrasolar planets—iii. additional planets and stellar models. *MNRAS*.
- STEVENSON, K. B., BEAN, J. L., MADHUSUDHAN, N. et HARRINGTON, J. (2014a). Deciphering the Atmospheric Composition of WASP-12b : A Comprehensive Analysis of its Dayside Emission. *ApJ*, 791(1):36.
- STEVENSON, K. B., DÉSSERT, J.-M., LINE, M. R., BEAN, J. L., FORTNEY, J. J., SHOWMAN, A. P., KATARIA, T., KREIDBERG, L., MCCULLOUGH, P. R., HENRY, G. W., CHARBONNEAU, D., BURROWS, A., SEAGER, S., MADHUSUDHAN, N., WILLIAMSON, M. H. et HOMEIER, D. (2014b). Thermal structure of an exoplanet atmosphere from phase-resolved emission spectroscopy. *Science*, 346(6211):838–841.
- STEVENSON, K. B., LINE, M. R., BEAN, J. L., DÉSSERT, J.-M., FORTNEY, J. J., SHOWMAN, A. P., KATARIA, T., KREIDBERG, L. et FENG, Y. K. (2017). Spitzer Phase Curve Constraints for WASP-43b at 3.6 and 4.5  $\mu\text{m}$ . *The Astronomical Journal*, 153:68.
- STOLZENBACH, A. (2016). *Study of Venus’s photochemistry with a general circulation model*. Theses, Université Pierre et Marie Curie - Paris VI.
- STOLZENBACH, A., LEFÈVRE, F., LEBONNOIS, S. et MÄÄTTÄNEN, A. (2023). Three-dimensional modeling of Venus photochemistry and clouds. *Icarus*, 395:115447.
- STOLZENBACH, A., LEFÈVRE, F., LEBONNOIS, S., MÄÄTTÄNEN, A. et BEKKI, S. (2014). Three-dimensional modelling of Venus photochemistry. *In EGU General Assembly 2014*, Vienna, Austria.

- STROBEL, D. F. (1969). The Photochemistry of Methane in the Jovian Atmosphere. *Journal of Atmospheric Sciences*, 26(5):906–911.
- STROBEL, D. F. (1974). The Photochemistry of Hydrocarbons in the Atmosphere of Titan. *Icarus*, 21(4):466–470.
- STROBEL, D. F., SUMMERS, M. E., HERBERT, F. et SANDEL, B. R. (1990). The photochemistry of methane in the atmosphere of Triton. *GRL*, 17(10):1729–1732.
- SWAIN, M., DEROO, P., TINETTI, G., HOLLIS, M., TESSENYI, M., LINE, M., KAWAHARA, H., FUJII, Y., SHOWMAN, A. P. et YURCHENKO, S. N. (2013). Probing the extreme planetary atmosphere of WASP-12b. *Icarus*, 225(1):432–445.
- TAYLOR, J., PARMENTIER, V., IRWIN, P. G. J., AIGRAIN, S., LEE, E. K. H. et KRISSANSEN-TOTTON, J. (2020). Understanding and mitigating biases when studying inhomogeneous emission spectra with JWST. *MNRAS*, 493(3):4342–4354.
- TEMPKE, R. et MUSHO, T. (2022). Autonomous design of new chemical reactions using a variational autoencoder. *Communications Chemistry*, 5(1):40.
- TENNYSON, J. et YURCHENKO, S. N. (2012). Exomol : molecular line lists for exoplanet and other atmospheres. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 425(1):21–33.
- TINETTI, G., DROSSART, P., ECCLESTON, P., HARTOGH, P., HESKE, A., LCONTE, J., MICELA, G., OLLIVIER, M., PILBRATT, G., PUIG, L., TURRINI, D., VANDENBUSSCHE, B., WOLKENBERG, P., BEAULIEU, J.-P., BUCHAVE, L. A., FERUS, M., GRIFFIN, M., GUEDEL, M., JUSTTANONT, K., LAGAGE, P.-O., MACHADO, P., MALAGUTI, G., MIN, M., NØRGAARD-NIELSEN, H. U., RATAJ, M., RAY, T., RIBAS, I., SWAIN, M., SZABO, R., WERNER, S., BARSTOW, J., BURLEIGH, M., CHO, J., COUDÉ DU FORESTO, V., COUSTENIS, A., DECIN, L., ENCRENAZ, T., GALAND, M., GILLON, M., HELLED, R., MORALES, J. C., GARCÍA MUÑOZ, A., MONETI, A., PAGANO, I., PASCALE, E., PICCIONI, G., PINFIELD, D., SARKAR, S., SELSIS, F., TENNYSON, J., TRIAUD, A., VENOT, O., WALDMANN, I., WALTHAM, D., WRIGHT, G., AMIAUX, J., AUGUÈRES, J.-L., BERTHÉ, M., BEZAWADA, N., BISHOP, G., BOWLES, N., COFFEY, D., COLOMÉ, J., CROOK, M., CROUZET, P.-E., DA PEPPA, V., SANZ, I. E., FOCARDI, M., FRERICKS, M., HUNT, T., KOHLEY, R., MIDDLETON, K., MORGANTE, G., OTTENSAMER, R., PACE, E., PEARSON, C., STAMPER, R., SYMONDS, K., RENGEL, M., RENOTTE, E., ADE, P., AFFER, L., ALARD, C., ALLARD, N., ALTIERI, F., ANDRÉ, Y., ARENA, C., ARGYRIOU, I., AYLWARD, A., BACCANI, C., BAKOS, G., BANASZKIEWICZ, M., BARLOW, M., BATISTA, V., BELLUCCI, G., BENATTI, S., BERNARDI, P., BÉZARD, B., BLECKA, M., BOLMONT, E., BONFOND, B., BONITO, R., BONOMO, A. S., BRUCATO, J. R., BRUN, A. S., BRYSON, I., BUJWAN, W., CASEWELL, S., CHARNAY, B., PESTELLINI, C. C., CHEN, G., CIARAVELLA, A., CLAUDI, R., CLÉDASSOU, R., DAMASSO, M., DAMIANO, M., DANIELSKI, C., DEROO, P., DI GIORGIO, A. M., DOMINIK, C., DOUBLIER, V., DOYLE, S., DOYON, R., DRUMMOND, B., DUONG, B., EALES, S., EDWARDS, B., FARINA, M., FLACCOMIO, E., FLETCHER, L., FORGET, F., FOSSEY, S., FRÄNZ, M., FUJII, Y., GARCÍA-PIQUER, Á., GEAR, W., GEOFFRAY, H., GÉRARD, J. C., GESA, L., GOMEZ, H., GRACZYK, R., GRIFFITH, C., GRODENT, D., GUARCELLO,

- M. G., GUSTIN, J., HAMANO, K., HARGRAVE, P., HELLO, Y., HENG, K., HERRERO, E., HORNSTRUP, A., HUBERT, B., IDA, S., IKOMA, M., IRO, N., IRWIN, P., JARCHOW, C., JAUBERT, J., JONES, H., JULIEN, Q., KAMEDA, S., KERSCHBAUM, F., KERVELLA, P., KOSKINEN, T., KRIJGER, M., KRUPP, N., LAFARGA, M., LANDINI, F., LELLOUCH, E., LETO, G., LUNTZER, A., RANK-LÜFTINGER, T., MAGGIO, A., MALDONADO, J., MAILLARD, J.-P., MALL, U., MARQUETTE, J.-B., MATHIS, S., MAXTED, P., MATSUO, T., MEDVEDEV, A., MIGUEL, Y., MINIER, V., MORELLO, G., MURA, A., NARITA, N., NASCIMBENI, V., NGUYEN TONG, N., NOCE, V., OLIVA, F., PALLE, E., PALMER, P., PANCRAZZI, M., PAPAGEORGIOU, A., PARMENTIER, V., PERGER, M., PETRALIA, A., PEZZUTO, S., PIERREHUMBERT, R., PILLITTERI, I., PIOTTO, G., PISANO, G., PRISINZANO, L., RADIOTI, A., RÉESS, J.-M., REZAC, L., ROCCHETTO, M., ROSICH, A., SANNA, N., SANTERNE, A., SAVINI, G., SCANDARIATO, G., SICARDY, B., SIERRA, C., SINDONI, G., SKUP, K., SNELLEN, I., SOBIECKI, M., SORET, L., SOZZETTI, A., STIEPEN, A., STRUGAREK, A., TAYLOR, J., TAYLOR, W., TERENCEZI, L., TESSENYI, M., TSIARAS, A., TUCKER, C., VALENCIA, D., VASISHT, G., VAZAN, A., VILARDELL, F., VINATIER, S., VITI, S., WATERS, R., WAWER, P., WAWRZASZEK, A., WHITWORTH, A., YUNG, Y. L., YURCHENKO, S. N., ZAPATERO OSORIO, M. R., ZELLEM, R., ZINGALES, T. et ZWART, F. (2018). A chemical survey of exoplanets with ARIEL. *Experimental Astronomy*, 46(1):135–209.
- TINETTI, G., DROSSART, P., ECCLESTON, P., HARTOGH, P., HESKE, A., LECONTE, J., MICELA, G., OLLIVIER, M., PILBRATT, G., PUIG, L., TURRINI, D., VANDENBUSSCHE, B., WOLKENBERG, P., PASCALE, E., BEAULIEU, J.-P., GÜDEL, M., MIN, M., RATAJ, M., RAY, T., RIBAS, I., BARSTOW, J., BOWLES, N., COUSTENIS, A., COUDÉ DU FORESTO, V., DECIN, L., ENCRENAZ, T., FORGET, F., FRISWELL, M., GRIFFIN, M., LAGAGE, P. O., MALAGUTI, P., MONETI, A., MORALES, J. C., PACE, E., ROCCHETTO, M., SARKAR, S., SELSIS, F., TAYLOR, W., TENNYSON, J., VENOT, O., WALDMANN, I. P., WRIGHT, G., ZINGALES, T. et ZAPATERO-OSORIO, M. R. (2016). The science of ARIEL (Atmospheric Remote-sensing Infrared Exoplanet Large-survey). In *Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference Series*, volume 9904 de *Proc. Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers*, page 99041X.
- TINETTI, G., ECCLESTON, P., HASWELL, C., LAGAGE, P.-O., LECONTE, J., LÜFTINGER, T., MICELA, G., MIN, M., PILBRATT, G., PUIG, L., SWAIN, M., TESTI, L., TURRINI, D., VANDENBUSSCHE, B., ROSA ZAPATERO OSORIO, M., ARET, A., BEAULIEU, J.-P., BUCHHAVE, L., FERUS, M., GRIFFIN, M., GUEDEL, M., HARTOGH, P., MACHADO, P., MALAGUTI, G., PALLÉ, E., RATAJ, M., RAY, T., RIBAS, I., SZABÓ, R., TAN, J., WERNER, S., RATTI, F., SCHARMBERG, C., SALVIGNOL, J.-C., BOUDIN, N., HALAIN, J.-P., HAAG, M., CROUZET, P.-E., KOHLEY, R., SYMONDS, K., RENK, F., CALDWELL, A., ABREU, M., ALONSO, G., AMIAUX, J., BERTHÉ, M., BISHOP, G., BOWLES, N., CARMONA, M., COFFEY, D., COLOMÉ, J., CROOK, M., DÉSJONQUERES, L., DÍAZ, J. J., DRUMMOND, R., FOCARDI, M., GÓMEZ, J. M., HOLMES, W., KRIJGER, M., KOVACS, Z., HUNT, T., MACHADO, R., MORGANTE, G., OLLIVIER, M., OTTENSAMER, R., PACE, E., PAGANO, T., PASCALE, E., PEARSON, C., MØLLER PEDERSEN, S., PNIEL, M., ROOSE, S., SAVINI, G., STAMPER, R., SZIROVICZA, P., SZOKE, J., TOSH, I., VILARDELL, F., BARSTOW, J., BORSATO, L., CASEWELL, S., CHANGEAT, Q., CHARNAY, B., CIVIŠ, S., COUDÉ DU FORESTO, V., COUSTENIS, A., COWAN, N., DANIELSKI, C., DEMANGEON, O., DROSSART, P., EDWARDS, B. N., GILLI, G., ENCRENAZ, T., KISS, C.,

- KOKORI, A., IKOMA, M., MORALES, J. C., MENDONÇA, J., MONETI, A., MUGNAI, L., GARCÍA MUÑOZ, A., HELLED, R., KAMA, M., MIGUEL, Y., NIKOLAOU, N., PAGANO, L., PANIC, O., RENGEL, M., RICKMAN, H., ROCCHETTO, M., SARKAR, S., SELSIS, F., TENNYSON, J., TSIARAS, A., VENOT, O., VIDA, K., WALDMANN, I. P., YURCHENKO, S., SZABÓ, G., ZELLEM, R., AL-REFAIE, A., PEREZ ALVAREZ, J., ANISMAN, L., ARHANCET, A., ATECA, J., BAEYENS, R., BARNES, J. R., BELL, T., BENATTI, S., BIAZZO, K., BŁĘCKA, M., BONOMO, A. S., BOSCH, J., BOSSINI, D., BOURGALAIS, J., BRIENZA, D., BRUCALASSI, A., BRUNO, G., CAINES, H., CALCUTT, S., CAMPANTE, T., CANESTRARI, R., CANN, N., CASALI, G., CASAS, A., CASSONE, G., CARA, C., CARMONA, M., CARONE, L., CARRASCO, N., CHANGEAT, Q., CHIOETTO, P., CORTECCHIA, F., CZUPALLA, M., CHUBB, K. L., CIARAVELLA, A., CLARET, A., CLAUDI, R., CODELLA, C., GARCIA COMAS, M., CRACCHIOLO, G., CUBILLOS, P., DA PEPPPO, V., DECIN, L., DEJABRUN, C., DELGADO-MENA, E., DI GIORGIO, A., DIOLAITI, E., DORN, C., DOUBLIER, V., DOUMAYROU, E., DRANSFIELD, G., DUMAYE, L., DUNFORD, E., JIMENEZ ESCOBAR, A., VAN EYLEN, V., FARINA, M., FEDELE, D., FERNÁNDEZ, A., FLEURY, B., FONTE, S., FONTIGNIE, J., FOSSATI, L., FUNKE, B., GALY, C., GARAI, Z., GARCÍA, A., GARCÍA-RIGO, A., GARUFI, A., GERMANO SACCO, G., GIACOBBE, P., GÓMEZ, A., GONZALEZ, A., GONZALEZ-GALINDO, F., GRASSI, D., GRIFFITH, C., GUARCELLO, M. G., GOUJON, A., GRESSIER, A., GRZEGORCZYK, A., GUILLOT, T., GUILLUY, G., HARGRAVE, P., HELLIN, M.-L., HERRERO, E., HILLS, M., HOREAU, B., ITO, Y., JESSEN, N. C., KABATH, P., KÁLMÁN, S., KAWASHIMA, Y., KIMURA, T., KNÍŽEK, A., KREIDBERG, L., KRUID, R., KRUIJSSEN, J. M. D., KUBELÍK, P., LARA, L., LEBONNOIS, S., LEE, D., LEFEVRE, M., LICHTENBERG, T., LOCCI, D., LOMBINI, M., SANCHEZ LOPEZ, A., LORENZANI, A., MACDONALD, R., MAGRINI, L., MALDONADO, J., MARCQ, E., MIGLIORINI, A., MODIRROUSTA-GALIAN, D., MOLAVERDIKHANI, K., MOLINARI, S., MOLLIÈRE, P., MOREAU, V., MORELLO, G., MORINAUD, G., MORVAN, M., MOSES, J. I., MOUZALI, S., NAKHJIRI, N., NAPONIELLO, L., NARITA, N., NASCIMBENI, V., NIKOLAOU, A., NOCE, V., OLIVA, F., PALLADINO, P., PAPAGEORGIOU, A., PARMENTIER, V., PERES, G., PÉREZ, J., PEREZ-HOYOS, S., PERGER, M., CECCHI PESTELLINI, C., PETRALIA, A., PHILIPPON, A., PICCIALI, A., PIGNATARI, M., PIOTTO, G., PODIO, L., POLENTA, G., PRETI, G., PRIBULLA, T., LOPEZ PUERTAS, M., RAINER, M., REESS, J.-M., RIMMER, P., ROBERT, S., ROSICH, A., ROSSI, L., RUST, D., SALEH, A., SANNA, N., SCHISANO, E., SCHREIBER, L., SCHWARTZ, V., SCIPPA, A., SELI, B., SHIBATA, S., SIMPSON, C., SHORTTLE, O., SKAF, N., SKUP, K., SOBIECKI, M., SOUSA, S., SOZZETTI, A., ŠPONER, J., STEIGER, L., TANGA, P., TACKLEY, P., TAYLOR, J., TECZA, M., TERENCEZI, L., TREMBLIN, P., TOZZI, A., TRIAUD, A., TROMPET, L., TSAI, S.-M., TSANTAKI, M., VALENCIA, D., CARINE VANDAELE, A., VAN DER SWAELMEN, M., ADIBEKYAN, V., VASISHT, G., VAZAN, A., DEL VECCHIO, C., WALTHAM, D., WAWER, P., WIDEMANN, T., WOLKENBERG, P., HOU YIP, G., YUNG, Y., ZILINSKAS, M., ZINGALES, T. et ZUPPELLA, P. (2021). Ariel : Enabling planetary science across light-years. *arXiv e-prints*, page arXiv :2104.04824.
- TOON, O. B., TURCO, R. P., WESTPHAL, D., MALONE, R. et LIU, M. S. (1988). A multidimensional model for aerosols : Description of computational analogs. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 45:2123–2143.
- TOUBLANC, D., PARISOT, J. P., BRILLET, J., GAUTIER, D., RAULIN, F. et MCKAY, C. P. (1995). Photochemical Modeling of Titan's Atmosphere. *Icarus*, 113(1):2–26.

- TREMBLIN, P., AMUNDSEN, D. S., MOURIER, P., BARAFFE, I., CHABRIER, G., DRUMMOND, B., HOMEIER, D. et VENOT, O. (2015). Fingering Convection and Cloudless Models for Cool Brown Dwarf Atmospheres. *ApJL*, 804:L17.
- TREMBLIN, P., CHABRIER, G., MAYNE, N. J., AMUNDSEN, D. S., BARAFFE, I., DEBRAS, F., DRUMMOND, B., MANNERS, J. et FROMANG, S. (2017). Advection of Potential Temperature in the Atmosphere of Irradiated Exoplanets : A Robust Mechanism to Explain Radius Inflation. *ApJ*, 841(1):30.
- TSAI, S.-M., LEE, E. K. H., POWELL, D., GAO, P., ZHANG, X., MOSES, J., HÉBRARD, E., VENOT, O., PARMENTIER, V., JORDAN, S., HU, R., ALAM, M. K., ALDERSON, L., BATALHA, N. M., BEAN, J. L., BENNEKE, B., BIERSON, C. J., BRADY, R. P., CARONE, L., CARTER, A. L., CHUBB, K. L., INGLIS, J., LECONTE, J., LINE, M., LÓPEZ-MORALES, M., MIGUEL, Y., MOLAVERDIKHANI, K., RUSTAMKULOV, Z., SING, D. K., STEVENSON, K. B., WAKEFORD, H. R., YANG, J., AGGARWAL, K., BAEYENS, R., BARAT, S., DE VAL-BORRO, M., DAYLAN, T., FORTNEY, J. J., FRANCE, K., GOYAL, J. M., GRANT, D., KIRK, J., KREIDBERG, L., LOUCA, A., MORAN, S. E., MUKHERJEE, S., NASEDKIN, E., OHNO, K., RACKHAM, B. V., REDFIELD, S., TAYLOR, J., TREMBLIN, P., VISSCHER, C., WALLACK, N. L., WELBANKS, L., YOUNGBLOOD, A., AHRER, E.-M., BATALHA, N. E., BEHR, P., BERTA-THOMPSON, Z. K., BLECIC, J., CASEWELL, S. L., CROSSFIELD, I. J. M., CROUZET, N., CUBILLOS, P. E., DECIN, L., DÉSSERT, J.-M., FEINSTEIN, A. D., GIBSON, N. P., HARRINGTON, J., HENG, K., HENNING, T., KEMPTON, E. M. R., KRICK, J., LAGAGE, P.-O., LENDL, M., LOTHINGER, J. D., MANSFIELD, M., MAYNE, N. J., MIKAL-EVANS, T., PALLE, E., SCHLAWIN, E., SHORTTLE, O., WHEATLEY, P. J. et YURCHENKO, S. N. (2023). Photochemically produced SO<sub>2</sub> in the atmosphere of WASP-39b. *Nature*, 617(7961):483–487.
- TSAI, S.-M., LYONS, J. R., GROSHEINTZ, L., RIMMER, P. B., KITZMANN, D. et HENG, K. (2017). VULCAN : An Open-source, Validated Chemical Kinetics Python Code for Exoplanetary Atmospheres. *ApJS*, 228(2):20.
- TSAI, S.-M., MALIK, M., KITZMANN, D., LYONS, J. R., FATEEV, A., LEE, E. et HENG, K. (2021). A Comparative Study of Atmospheric Chemistry with VULCAN. *ApJ*, 923(2):264.
- TSIARAS, A., ROCCHETTO, M., WALDMANN, I. P., VENOT, O., VARLEY, R., MORELLO, G., DAMIANO, M., TINETTI, G., BARTON, E. J., YURCHENKO, S. N. et TENNYSON, J. (2016a). Detection of an Atmosphere Around the Super-Earth 55 Cancri e. *ApJ*, 820:99.
- TSIARAS, A., WALDMANN, I. P., ROCCHETTO, M., VARLEY, R., MORELLO, G., DAMIANO, M. et TINETTI, G. (2016b). A New Approach to Analyzing HST Spatial Scans : The Transmission Spectrum of HD 209458 b. *ApJ*, 832(2):202.
- TSIARAS, A., WALDMANN, I. P., ZINGALES, T., ROCCHETTO, M., MORELLO, G., DAMIANO, M., KARPOUZAS, K., TINETTI, G., MCKEMMISH, L. K., TENNYSON, J. et YURCHENKO, S. N. (2018). A Population Study of Gaseous Exoplanets. *The Astronomical Journal*, 155(4):156.

- TURCO, R. P., HAMILL, P., TOON, O. B., WHITTEN, R. C. et KIANG, C. S. (1979). A one-dimensional model describing aerosol formation and evolution in the stratosphere : I. physical processes and mathematical analogs. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 36:699–717.
- TURRINI, D., SCHISANO, E., FONTE, S., MOLINARI, S., POLITI, R., FEDELE, D., PANIĆ, O., KAMA, M., CHANGEAT, Q. et TINETTI, G. (2021). Tracing the Formation History of Giant Planets in Protoplanetary Disks with Carbon, Oxygen, Nitrogen, and Sulfur. *ApJ*, 909(1):40.
- VEILLET, R., VENOT, O., SIRJEAN, B., BOUNACEUR, R., GLAUDE, P.-A., AL-REFAIE, A. et HÉBRARD, E. (2023). An extensively validated C/H/O/N chemical network for hot exoplanets disequilibrium chemistry. *A&A*.
- VENOT, O., AGÚNDEZ, M., SELSIS, F., TESSENYI, M. et IRO, N. (2014). The atmospheric chemistry of the warm Neptune GJ 3470b : Influence of metallicity and temperature on the CH<sub>4</sub>/CO ratio. *A&A*, 562:A51.
- VENOT, O., BÉNILAN, Y., FRAY, N., GAZEAU, M. C., LEFÈVRE, F., ES-SEBBAR, E., HÉBRARD, E., SCHWELL, M., BAHRINI, C., MONTMESSIN, F., LEFÈVRE, M. et WALDMANN, I. P. (2018a). VUV-absorption cross section of carbon dioxide from 150 to 800 K and applications to warm exoplanetary atmospheres. *A&A*, 609:A34.
- VENOT, O., BOUNACEUR, R., DOBRIJEVIC, M., HÉBRARD, E., CAVALIÉ, T., TREMBLIN, P., DRUMMOND, B. et CHARNAVY, B. (2019). Reduced chemical scheme for modelling warm to hot hydrogen-dominated atmospheres. *A&A*, 624:A58.
- VENOT, O., CAVALIÉ, T., BOUNACEUR, R., TREMBLIN, P., BROUILLARD, L. et LHOUS-SAINE BEN BRAHIM, R. (2020a). New chemical scheme for giant planet thermochemistry. Update of the methanol chemistry and new reduced chemical scheme. *A&A*, 634:A78.
- VENOT, O., DRUMMOND, B., MIGUEL, Y., WALDMANN, I. P., PASCALE, E. et ZINGALES, T. (2018b). A better characterization of the chemical composition of exoplanets atmospheres with ARIEL. *Experimental Astronomy*, 46(1):101–134.
- VENOT, O., FRAY, N., BÉNILAN, Y., GAZEAU, M.-C., HÉBRARD, E., LARCHER, G., SCHWELL, M., DOBRIJEVIC, M. et SELSIS, F. (2013). High-temperature measurements of VUV-absorption cross sections of CO<sub>2</sub> and their application to exoplanets. *A&A*, 551:131.
- VENOT, O., HÉBRARD, E., AGÚNDEZ, M., DECIN, L. et BOUNACEUR, R. (2015). New chemical scheme for studying carbon-rich exoplanet atmospheres. *A&A*, 577:A33.
- VENOT, O., HÉBRARD, E., AGÚNDEZ, M., DOBRIJEVIC, M., SELSIS, F., HERSANT, F., IRO, N. et BOUNACEUR, R. (2012). A chemical model for the atmosphere of hot Jupiters. *A&A*, 546:A43.
- VENOT, O., PARMENTIER, V., BLECIC, J., CUBILLOS, P. E., WALDMANN, I. P., CHANGEAT, Q., MOSES, J. I., TREMBLIN, P., CROUZET, N., GAO, P., POWELL, D., LAGAGE, P.-O., DOBBS-DIXON, I., STEINRUECK, M. E., KREIDBERG, L., BATALHA, N., BEAN,

- J. L., STEVENSON, K. B., CASEWELL, S. et CARONE, L. (2020b). Global Chemistry and Thermal Structure Models for the Hot Jupiter WASP-43b and Predictions for JWST. *ApJ*, 890(2):176.
- VENOT, O., ROCCHETTO, M., CARL, S., ROSHNI HASHIM, A. et DECIN, L. (2016). Influence of Stellar Flares on the Chemical Composition of Exoplanets and Spectra. *ApJ*, 830:77.
- VINATIER, S., BÉZARD, B., FOUCHET, T., TEANBY, N. A., DE KOK, R., IRWIN, P. G. J., CONRATH, B. J., NIXON, C. A., ROMANI, P. N., FLASAR, F. M. et COUSTENIS, A. (2007). Vertical abundance profiles of hydrocarbons in Titan's atmosphere at 15° S and 80° N retrieved from Cassini/CIRS spectra. *Icarus*, 188(1):120–138.
- VISSCHER, C. (2012). Chemical Timescales in the Atmospheres of Highly Eccentric Exoplanets. *ApJ*, 757(1):5.
- WAKEFORD, H. R. et SING, D. K. (2015). Transmission spectral properties of clouds for hot Jupiter exoplanets. *A&A*, 573:A122.
- WAKELAM, V., HERBST, E., LOISON, J.-C., SMITH, W., CHANDRASEKARAN, V., PAVONE, B., ADAMS, N., BACCHUS-MONTABONEL, M.-C., BERGEAT, A., BEROFF, K., BIERBAUM, V. M., CHABOT, M., DALGARNO, A., van DISHOCK, E. F., FAURE, A., GEPPERT, W. D., GERLICH, D., GALLI, D., HEBRARD, E., HERSANT, F., HICKSON, K. M., HONVAULT, P., KLIPPENSTEIN, S. J., LE PICARD, S., NYMAN, G., PERNOT, P., SCHLEMMER, S., SELSIS, F., SIMS, I. R., TALBI, D., TENNYSON, J., TROE, J., WESTER, R. et WIESENFELD, L. (2012). A KInetic Database for Astrochemistry (KIDA). *ApJS*, 199:21.
- WALDMANN, I. P., ROCCHETTO, M., TINETTI, G., BARTON, E. J., YURCHENKO, S. N. et TENNYSON, J. (2015a). Tau-REx II : Retrieval of Emission Spectra. *ApJ*, 813:13.
- WALDMANN, I. P., TINETTI, G., ROCCHETTO, M., BARTON, E. J., YURCHENKO, S. N. et TENNYSON, J. (2015b). Tau-REx I : A Next Generation Retrieval Code for Exoplanetary Atmospheres. *ApJ*, 802:107.
- WANG, D., LUNINE, J. I. et MOUSIS, O. (2016). Modeling the disequilibrium species for Jupiter and Saturn : Implications for Juno and Saturn entry probe. *Icarus*, 276:21–38.
- WANG, D., MIGUEL, Y. et LUNINE, J. (2017). Modeling Synthetic Spectra for Transiting Extrasolar Giant Planets : Detectability of H<sub>2</sub>S and PH<sub>3</sub> with the James Webb Space Telescope. *ApJ*, 850(2):199.
- WELBANKS, L., MADHUSUDHAN, N., ALLARD, N. F., HUBENY, I., SPIEGELMAN, F. et LEININGER, T. (2019). Mass-metallicity trends in transiting exoplanets from atmospheric abundances of h<sub>2</sub>o, na, and k. *The Astrophysical Journal Letters*, 887(1):L20.
- YUNG, Y. L., STROBEL, D. F., KONG, T. Y. et MCELROY, M. B. (1977). Photochemistry of Nitrogen in the Martian Atmosphere. *Icarus*, 30(1):26–41.
- ZAHNLE, K., MARLEY, M. S., FREEDMAN, R. S., LODDERS, K. et FORTNEY, J. J. (2009). Atmospheric Sulfur Photochemistry on Hot Jupiters. *ApJL*, 701(1):L20–L24.

- ZAHNLE, K., MARLEY, M. S., MORLEY, C. V. et MOSES, J. I. (2016). Photolytic Hazes in the Atmosphere of 51 Eri b. *ApJ*, 824(2):137.
- ZAHNLE, K. J. et MARLEY, M. S. (2014). Methane, Carbon Monoxide, and Ammonia in Brown Dwarfs and Self-Luminous Giant Planets. *ApJ*, 797(1):41.
- ZHAO, M., MONNIER, J. D., SWAIN, M. R., BARMAN, T. et HINKLEY, S. (2011). Ground-based detections of thermal emission from corot-1b and wasp-12b. *ApJ*, 744(2):122.