

**Université de Montréal**

**Caractérisation d'atmosphère d'exoplanètes par  
spectroscopie de transmission en présence  
d'hétérogénéités stellaires : impact et modélisation des  
régions actives occultées**

par

**Marylou Fournier Tondreau**

Département de physique  
Faculté des arts et des sciences

Mémoire présenté en vue de l'obtention du grade de  
Maître ès sciences (M.Sc.)  
en Physique

6 juillet 2023

**Université de Montréal**

Faculté des arts et des sciences

---

Ce mémoire intitulé

**Caractérisation d’atmosphère d’exoplanètes par spectroscopie  
de transmission en présence d’hétérogénéités stellaires :  
impact et modélisation des régions actives occultées**

présenté par

**Marylou Fournier Tondreau**

a été évalué par un jury composé des personnes suivantes :

*Pierre Bergeron*

---

(président-rapporteur)

*David Lafrenière*

---

(directeur de recherche)

*René Doyon*

---

(membre du jury)

# Résumé

---

Les hétérogénéités de surface des étoiles actives, telles que les taches et les facules, peuvent compliquer l'interprétation des spectres de transmission en introduisant des caractéristiques spectrales qui chevauchent celles d'atmosphère d'exoplanètes. Les courbes de lumière de transit d'HAT-P-18 b et de WASP-52 b, observées avec le mode SOSS de l'instrument NIRISS à bord du JWST, sont déformées par des occultations de taches. Avant le déploiement du JWST, ces régions actives étaient souvent simplement masquées, toutefois ceci peut mener à des mesures incorrectes des paramètres du transit. J'ai adapté et implémenté `spotrod`, un modèle de transit avec occultation de taches, dans l'outil `Juliet` pour inférer conjointement les paramètres du transit et des taches occultées. J'ai ainsi ajusté les courbes de lumière de transit de ces deux Jupiters chaudes et récupéré la position de chaque tache, leur rayon et leur spectre de contraste, c'est-à-dire le rapport du flux de la tache sur le flux stellaire. J'ai contraint la température des taches et leur gravité de surface (pour prendre en compte les effets du champ magnétique local) en ajustant chaque spectre de contraste avec des spectres de modèles stellaires PHOENIX. Cependant, un certain degré de dégénérescence est présent, conduisant à une solution plus probable pour chaque tache, mais aussi à d'autres solutions qui ne peuvent être exclues. Le spectre de transmission d'HAT-P-18 b nous a permis de détecter de l' $\text{H}_2\text{O}$  ( $12,5\sigma$ ) avec une abondance sub-solaire de  $\log \text{H}_2\text{O} \approx -4,4 \pm 0,3$ , des nuages ( $7,4\sigma$ ) et du  $\text{CO}_2$  ( $7,3\sigma$ ) dans l'atmosphère planétaire ainsi que des régions actives non occultées ( $5,8\sigma$ ) qui imitent une pente de diffusion Rayleigh.

**Mots clés :** Atmosphères d'exoplanètes — Jupiters chaudes — Spectroscopie de transmission — Activité stellaire – Occultations de taches stellaires

# Abstract

---

Surface heterogeneities on active stars, such as starspots and faculae, can complicate the interpretation of transmission spectra and introduce spectral features that overlap those of exoplanetary atmospheres. The transit light curves of HAT-P-18 b and WASP-52 b, observed in the SOSS mode of the NIRISS instrument aboard the JWST, are deformed by spot-crossings. These active regions were often simply masked before the launch of the JWST; however, this can prevent the correct measure of transit parameters. I adapted and implemented `spotrod`, a model for transits of spotted stars, into the `Juliet` tool to simultaneously infer the transit and occulted starspots parameters. I fitted the transit light curves of these two hot Jupiters and retrieved for each spot its position, radius and spot-to-stellar flux contrast spectrum. I constrained the spots' temperature and surface gravity – attempting to capture the effects of the local magnetic pressure – by fitting each contrast spectrum with PHOENIX stellar model spectra. However, some degree of degeneracy is present, leading to a most likely solution for each starspot and other solutions that cannot be excluded. The transmission spectrum of HAT-P-18 b enabled us to detect H<sub>2</sub>O ( $12.5\sigma$ ) with a sub-solar abundance of  $\log \text{H}_2\text{O} \approx -4.4 \pm 0.3$ , a cloud deck ( $7.4\sigma$ ) and CO<sub>2</sub> ( $7.3\sigma$ ) in the planetary atmosphere as well as unocculted active regions ( $5.8\sigma$ ) which mimic a Rayleigh scattering slope.

**Keywords** : Exoplanetary atmospheres — Hot Jupiters — Transmission spectroscopy — Stellar activity – Occulted starspots



# Table des matières

---

<b>Résumé</b> .....	3
<b>Abstract</b> .....	4
<b>Liste des tableaux</b> .....	9
<b>Table des figures</b> .....	10
<b>Liste des sigles et des abréviations</b> .....	12
<b>Remerciements</b> .....	17
<b>Avant-propos</b> .....	18
<b>Chapitre 1. Introduction</b> .....	19
1.1. Exoplanète .....	20
1.1.1. Définition .....	20
1.1.2. Premières découvertes .....	20
1.1.3. Méthodes de détection .....	21
1.1.4. Types d'exoplanètes .....	22
1.1.4.1. Jupiter chaude .....	22
1.1.5. Formation et évolution .....	23
1.1.5.1. Planète géante gazeuse .....	24
1.1.5.2. Migration des Jupiters chaudes .....	24
1.1.5.3. Atmosphère planétaire .....	25
1.1.6. Transit .....	25
1.2. Caractérisation atmosphérique des exoplanètes .....	28
1.2.1. Méthodes de caractérisation .....	28
1.2.1.1. Spectroscopie d'imagerie directe .....	28
1.2.1.2. Spectroscopie de transit .....	29
1.2.1.3. Spectroscopie Doppler .....	30
1.2.2. Signal atmosphérique en transmission .....	30

1.2.3.	Composition et structure atmosphérique .....	31
1.2.3.1.	Composition chimique .....	31
1.2.3.2.	Nuage et brume .....	32
1.2.3.3.	Profil de température .....	33
1.2.4.	Implication pour la formation et l'évolution des planètes géantes .....	33
1.2.5.	Modélisation d'atmosphères en transmission.....	34
1.2.6.	Récupération d'atmosphères .....	35
1.3.	Contamination stellaire .....	36
1.3.1.	Effet de la source lumineuse du transit .....	37
1.3.2.	Hétérogénéités des surfaces stellaires .....	38
1.3.2.1.	Granulation et oscillations .....	38
1.3.2.2.	Taches.....	39
1.3.2.3.	Facules .....	39
1.3.3.	Impact des hétérogénéités en spectroscopie de transmission.....	40
1.3.3.1.	Granulation et oscillations .....	40
1.3.3.2.	Régions actives occultées.....	40
1.3.3.3.	Régions actives non occultées .....	41
1.3.3.4.	Impact sur l'assombrissement centre-bord .....	43
1.3.4.	Approches pour les régions actives occultées.....	44
1.3.4.1.	Outils de modélisation .....	45
1.3.4.2.	Limites de la compréhension .....	46
1.3.5.	Approches pour les régions actives non occultées .....	46
1.3.5.1.	Correction directe.....	47
1.3.5.2.	Modélisation dans les récupérations .....	47
1.3.5.3.	Limites de la compréhension .....	49
1.4.	Contributions.....	49
<b>Chapitre 2. Near-Infrared Transmission Spectroscopy of HAT-P-18 b with NIRISS : Disentangling Planetary and Stellar Features in the Era of JWST .....</b>		<b>52</b>
2.1.	Introduction .....	54
2.2.	Observations & Data Reduction.....	57
2.2.1.	Observations.....	57
2.2.1.1.	JWST NIRISS/SOSS .....	57

2.2.1.2.	HST/WFC3 + <i>Spitzer</i> /IRAC .....	58
2.2.2.	Data Reduction .....	58
2.2.2.1.	JWST NIRISS/SOSS Data Reduction .....	58
2.2.2.2.	HST/WFC3 + <i>Spitzer</i> /IRAC Data Reduction & Light Curve Fitting .	60
2.3.	JWST NIRISS/SOSS Light Curve Fitting & Occulted Starspot Analysis .....	62
2.3.1.	Light Curve Fitting with Spot-Crossing Masked .....	62
2.3.2.	Occulted Starspot Method .....	65
2.3.3.	Inferred Occulted Starspot Properties on HAT-P-18 .....	66
2.4.	Retrieval Analysis .....	69
2.4.1.	A Joint Planetary Atmosphere and Stellar Contamination Retrieval Method	70
2.4.1.1.	The Transit Light Source Effect .....	71
2.4.1.2.	Unocculted Stellar Heterogeneity Models for HAT-P-18 b .....	72
2.4.2.	Retrieval Configuration .....	72
2.4.2.1.	POSEIDON .....	73
2.4.2.2.	SCARLET .....	73
2.4.2.3.	AURORA .....	75
2.4.3.	An Explanation for HAT-P-18 b’s Transmission Spectrum .....	76
2.4.3.1.	Evidence of Helium Absorption .....	76
2.4.4.	The Atmosphere of HAT-P-18 b .....	78
2.4.5.	Unocculted Stellar Heterogeneities .....	81
2.4.5.1.	One Heterogeneity Stellar Contamination Model .....	81
2.4.5.2.	More Complex Stellar Contamination Models .....	81
2.4.5.3.	Sensitivity of Atmospheric Properties to Stellar Contamination Models	83
2.4.6.	A Comparison between HST + <i>Spitzer</i> and JWST .....	83
2.5.	Summary & Discussion .....	85
2.5.1.	The Atmosphere of HAT-P-18 b in Context .....	86
2.5.2.	Legacy of Hubble & <i>Spitzer</i> in Light of JWST Results .....	87
2.5.3.	Challenges of Occulted Spot Analysis in the Era of JWST .....	88
2.5.4.	Accounting for Unocculted Heterogeneities in JWST Transmission Spectra	89
2.6.	Conclusion .....	90
2.7.	Appendix .....	91
2.7.1.	Additional Reduction Pipeline .....	91
2.7.2.	Additional Materials .....	91

<b>Chapter 3. Near-Infrared Transmission Spectroscopy of WASP-52 b with JWST/NIRISS: Joint Inference of the Exoplanetary Atmosphere and Stellar Active Features.....</b>	<b>95</b>
3.1. Introduction.....	96
3.2. Observations.....	97
3.3. Data Reduction and Light Curve Fitting.....	98
3.3.1. Data Reduction.....	98
3.3.2. Light Curve Fitting with Occulted Starspots Modelling.....	98
3.3.3. Inferred Occulted Starspot Properties on WASP-52.....	104
3.4. Appendix.....	105
3.4.1. Additional Reduction Pipeline.....	105
3.4.2. Additional Materials.....	106
<b>Conclusion.....</b>	<b>109</b>
<b>Références bibliographiques.....</b>	<b>111</b>

## Liste des tableaux

---

2.1	Parameters of the HAT-P-18 planetary system used in the analysis.....	57
2.2	Families of solutions for the occulted starspot on HAT-P-18.....	69
2.3	Retrieval parameters and priors.....	74
2.4	Retrieval results for the one heterogeneity model.....	80
2.5	Unocculted stellar heterogeneity Bayesian model comparison.....	83
2.6	Comparison of best-fitting white light curve parameters.....	91
3.1	Parameters of the WASP-52 planetary system used in the analysis.....	98
3.2	Priors and comparison of best-fitting broadband light curve parameters.....	106

# Table des figures

---

1.1	Schéma d'une orbite planétaire.....	27
1.2	Exemple de spectre de transmission avec les contributions moléculaires.....	32
1.3	Exemple de récupération d'atmosphère.....	36
1.4	Schéma de l'effet de la source lumineuse du transit.....	37
1.5	Exemple d'occultations et de modélisations de régions actives dans les courbes de lumière de transit.....	42
1.6	Exemple de spectres de contamination stellaire.....	44
2.1	Data products at different stages of the reduction process of HAT-P-18 b's TSO	59
2.2	HST/WFC3 binned spectrophotometric light curves of HAT-P-18 b.....	61
2.3	<i>Spitzer</i> /IRAC light curves of HAT-P-18 b.....	62
2.4	JWST NIRISS/SOSS white light curves of HAT-P-18 b.....	64
2.5	Transmission spectra of HAT-P-18 b with JWST/NIRISS and HST/WFC3.....	64
2.6	Modelling of the spot-crossing event in HAT-P-18 b's transit.....	67
2.7	JWST NIRISS/SOSS binned spectrophotometric light curves of HAT-P-18 b....	68
2.8	Density of contrast spectra of the occulted spot on HAT-P-18.....	70
2.9	Contributions of planetary atmosphere and stellar features to HAT-P-18 b's transmission spectrum.....	77
2.10	Transmission spectrum of HAT-P-18 b around the 1.083 $\mu\text{m}$ helium triplet.....	78
2.11	Atmospheric and stellar retrieval results for HAT-P-18 b with JWST/NIRISS...	79
2.12	Unocculted stellar heterogeneity properties from the retrieval analysis.....	82
2.13	Impact of unocculted stellar contamination model on retrieved atmospheric properties.....	84
2.14	Atmospheric and stellar retrieval results for HAT-P-18 b with HST + <i>Spitzer</i> ....	85
2.15	Comparison between an equilibrium chemistry model and the retrieved mixing ratios.....	88

2.16	Comparison of transmission spectra with JWST/NIRISS obtained with two different pipelines.....	92
2.17	Posterior probability distributions from the NIRISS/SOSS broadband light curve fit with <code>spotrod</code> .....	93
2.18	Stellar contamination spectra of the occulted spot on HAT-P-18 .....	94
3.1	Data products at different stages of the reduction process of WASP-52 b's TSO..	99
3.2	Modelling of the spot-crossings in WASP-52 b's transit .....	101
3.3	Binned spectrophotometric light curves of WASP-52 b.....	102
3.4	Transmission spectrum of WASP-52 b with JWST NIRISS/SOSS.....	103
3.5	Retrieved contrast spectra of the two occulted spots on WASP-52 .....	104
3.6	Comparison of transmission spectra obtained with two different pipelines.....	105
3.7	Posterior probability distributions from the broadband light curve fit.....	107
3.8	Potential range of stellar contamination owing to occulted spots on WASP-52 ...	108

## Liste des sigles et des abréviations

---

ACAM	Caméra à port auxiliaire, de l'anglais <i>Auxiliary-port CAMera</i>
CIA	Absorption induite par collision, de l'anglais <i>Collision Induced Absorption</i>
DN	Nombre de données, de l'anglais <i>Data Numbers</i>
ERO	Premières observations publiées, de l'anglais <i>Early Release Observations</i>
ESPRESSO	Spectrographe échelle pour l'observation de planètes rocheuses et des observations spectroscopiques stables, de l'anglais <i>Echelle Spectrograph for Rocky Exoplanet- and Stable Spectroscopic Observations</i>
ExoPAG	Groupe d'analyse du programme d'exploration d'exoplanètes, de l'anglais <i>Exoplanet exploration Program Analysis Group</i>
FRQNT	Fonds de Recherche du Québec — Nature et Technologies
GTO	Temps d'observations garanti, de l'anglais <i>Guaranteed Time Observations</i>
HAT	Télescope automatisé hongrois, de l'anglais <i>Hungarian-made Automated Telescope</i>



HST	Télescope spatial Hubble, de l'anglais <i>Hubble Space Telescope</i>
IR	InfraRouge
IRAC	Caméra infrarouge à matrice, de l'anglais <i>InfraRed Array Camera</i>
iREx	Institut Trottier de Recherche sur les Exoplanètes
JWST	Télescope spatial James Webb, de l'anglais <i>James Webb Space Telescope</i>
MAST	Archive Mikulski pour télescopes spatiaux, de l'anglais <i>Mikulski Archive for Space Telescopes</i>
MCMC	Monte Carlo par chaînes de Markov, de l'anglais <i>Markov Chain Monte Carlo</i>
NASA	Administration nationale de l'aéronautique et de l'espace, de l'anglais <i>National Aeronautics and Space Administration</i>
NIRISS	Imageur et spectrographe sans fente dans le proche infrarouge, de l'anglais <i>Near InfraRed Imager and Slitless Spectrograph</i>
NIRSpec	Spectrographe proche infrarouge, de l'anglais <i>Near InfraRed Spectrograph</i>
NRC	Conseil national de recherches, de l'anglais <i>National Research Council</i>
NSERC	Conseil de recherches en sciences naturelles et en génie, de l'anglais <i>Natural Sciences and Engineering Research Council</i>

PI	Chercheur principal, de l'anglais <i>Principal Investigator</i>
PSF	Fonction d'étalement du point, de l'anglais <i>Point Spread Function</i>
P-T	Pression-Température
RMS	Moyenne quadratique, de l'anglais <i>Root Mean Square</i>
SAG	Groupe d'analyse d'étude, de l'anglais <i>Study Analysis Group</i>
S/N	Signal sur bruit, de l'anglais <i>Signal-to-Noise</i>
SOSS	Spectroscopie sans fente sur un seul objet, de l'anglais <i>Single Object Slitless Spectroscopy</i>
STIS	Spectrographe d'imagerie du télescope spatial, de l'anglais <i>Space Telescope Imaging Spectrograph</i>
STScI	Institut des sciences pour télescope spatial, de l'anglais <i>Space Telescope Science Institute</i>
TEPS	Technologies pour la science exo-planétaire, de l'anglais <i>Technologies for Exo-Planetary Science</i>
TLSE	Effet de la source lumineuse du transit, de l'anglais <i>Transit Light Source Effect</i>
T-P	Température-Pression
TSO	Observation de série temporelle, de l'anglais <i>Time Series Observation</i>

UV	UltraViolet
VLT	Très grand télescope, de l'anglais <i>Very Large Telescope</i>
WASP	Recherche à angle large de planètes, de l'anglais <i>Wide Angle Search for Planets</i>
WFC3	Caméra grand champ 3, de l'anglais <i>Wide Field Camera 3</i>
WHT	Télescope William Herschel, de l'anglais <i>William Herschel Telescope</i>

*À moi plus jeune et à toutes celles  
qui ne croient pas pouvoir réussir en physique*

## Remerciements

---

David Lafrenière – René Doyon – Björn Benneke – équipe de Parité sciences (Julie Hlavacek-Larrondo, Jean-François Arguin, Stéphanie Luna, Mirjam Fines-Neuschild, Jean-François Carrier) – Gilles Boisclair – Yashar Hezaveh – Ryan MacDonald – Kim Morel – Katherine Thibault – Olivia Lim – collègues et ami.e.s à l’Institut Trottier de recherche sur les exoplanètes – Charles Raymond – Hugo Schérer – 2<sup>e</sup> famille au CHU Sainte-Justine – famille (plus particulièrement, Louis, Johanne, Jonathan et Marjorie) et ami.e.s

Chacun.e à votre façon, vous avez influencé positivement mon parcours en physique, je vous en serai éternellement reconnaissante. Merci d’avoir cru en moi !

## Avant-propos

---

Mon Vieux, Tu M'as Jeté Sur Une Nouvelle Planète ! Du plus loin que je me souviens, c'est la première chose que j'ai apprise dans les années 90 sur les planètes. Un procédé mnémotechnique plutôt efficace pour se souvenir de l'ordre des planètes dans le système solaire. L'expression a dû être changée depuis puisque Pluton n'est plus considéré comme une planète, mais plutôt une planète naine<sup>1</sup>. Les années 90 ont été une décennie phare pour la recherche sur les exoplanètes avec les premières détections convaincantes d'objets de masse planétaire au-delà du système solaire (p.ex., Wolszczan & Frail, 1992; Mayor & Queloz, 1995). Aujourd'hui, plus de 5000 exoplanètes ont été découvertes dont plus de la moitié sont attribuables à la méthode du transit<sup>2</sup>. Ce domaine de recherche scientifique permettra-t-il de répondre à une des plus grandes questions de l'humanité : sommes-nous seuls dans l'Univers ? Chose certaine, avec l'affluence de nouveaux observatoires et, par conséquent, de données, les prochaines décennies s'annoncent prometteuses. Devant cet univers d'opportunités, j'ai décidé de me joindre aux efforts.

---

1. Résolution 6A de l'Union astronomique internationale en 2006 : [https://www.iau.org/news/press\\_releases/detail/iau0603/](https://www.iau.org/news/press_releases/detail/iau0603/)

2. L'Encyclopédie des Planètes Extrasolaires : <http://exoplanet.eu/>

# Chapitre 1

---

## Introduction

La détection d'exoplanètes et leur caractérisation est un domaine de recherche scientifique florissant depuis la première découverte d'une planète extrasolaire orbitant une étoile de type solaire (Mayor & Queloz, 1995). Pourtant, les premières candidates, rétractées depuis, datent d'aussi loin que le 18<sup>e</sup> siècle (Jacob, 1855). Le nombre d'exoplanètes détectées et caractérisées a explosé dans les 10 dernières années, et ce, en grande partie grâce à la méthode du transit qui consiste à observer une planète lorsqu'elle passe devant son étoile. Il s'agit aussi d'une méthode couramment utilisée pour observer l'atmosphère d'exoplanètes. En effet, la spectroscopie de transit (ou de transmission) permet de révéler la composition et la structure d'une atmosphère en étudiant la variation spectrale du rayon planétaire lors du transit causée par différentes sources d'opacité dans l'atmosphère planétaire (Seager & Sasselov, 2000).

Avant le déploiement du télescope spatial James Webb (JWST), la plupart des études en spectroscopie de transmission ciblaient les géantes gazeuses orbitant près de leur étoile vu leur signal élevé. Ce nouveau télescope spatial permet maintenant d'utiliser cette méthode pour caractériser l'atmosphère d'exoplanètes rocheuses ayant comme étoiles hôtes des naines rouges. Il s'agit de petites étoiles froides connues pour rester actives longtemps après leur formation et ainsi être pourvues de photosphères hétérogènes. Par contre, il y a un nuage à l'horizon. La spectroscopie de transmission dépend fortement de la compréhension de la source de lumière qui irradie l'atmosphère planétaire, et ce, en fonction de la longueur d'onde. Les étoiles ne sont pas des sources de lumière homogènes et constantes. C'est le cas en particulier pour les étoiles actives, qui ont des surfaces composées de régions actives, comme des facules et des taches stellaires. Ceci peut compliquer considérablement l'interprétation des spectres de transit et peut affecter les caractéristiques spectrales (p.ex., Rackham et al., 2018). Il est alors primordial de démêler le signal provenant de la planète de celui de l'étoile hôte. Pour ce faire, des efforts sont en cours pour évaluer l'effet de la contamination stellaire et développer des approches pour en tenir compte afin de tirer le meilleur parti des spectres de transmission observés avec le JWST et les futurs télescopes.

Le but de ce mémoire est d'adresser l'impact de l'occultation de régions actives sur un spectre de transmission et de déterminer quelles contraintes sur celles-ci peuvent être inférées avec des observations de transit avec le JWST. Ce mémoire présente ainsi une approche pour intégrer les hétérogénéités stellaires dans les études de transit et en déduire les propriétés. Le premier chapitre de ce mémoire débute avec l'état des connaissances sur les exoplanètes, puis enchaîne avec la caractérisation atmosphérique des exoplanètes et enfin se termine avec la contamination stellaire dans le contexte des études de transit.

## 1.1. Exoplanète

Aujourd'hui, plus de 30 ans après la confirmation de l'existence des exoplanètes, les techniques de détection et les avancées dans la compréhension théorique de leur formation et leur évolution progressent rapidement. Dans ce contexte, cette section donne d'abord la définition formelle d'une exoplanète, un aperçu des premières découvertes et les principales méthodes de détection. Puis, il est question des différents types d'exoplanètes ainsi que brièvement de leur formation et leur évolution. Enfin, la méthode du transit est abordée plus en détails.

### 1.1.1. Définition

La définition actuelle pour une exoplanète a été établie en 2003 par un groupe de travail réuni par l'Union astronomique internationale (Boss et al., 2005). Toute planète qui orbite autour d'une autre étoile que le Soleil est une exoplanète. Dans ce contexte, une planète est définie comme tout objet avec une vraie masse inférieure à la masse limite permettant la fusion thermonucléaire du deutérium qui orbite autour d'étoiles ou de cadavres stellaires.

### 1.1.2. Premières découvertes

Les premiers résultats tangibles de planètes extrasolaires sont attribuables aux perturbations dans le mouvement du pulsar PSR B1257+12 qui ont mené Wolszczan & Frail (1992) à conclure sur l'existence d'au moins deux planètes en orbite. Ensuite, la première exoplanète orbitant une étoile de type solaire, 51 Pegasi, a été découverte sans ambiguïté par Mayor & Queloz (1995) par spectroscopie Doppler. Autrement dit, l'oscillation de l'étoile causée par le mouvement de la planète entraînait un décalage Doppler du spectre stellaire. Puis, en 1999, le transit d'une exoplanète a été observé pour la première fois indépendamment par Henry et al. (2000) et Charbonneau et al. (2000) suite à la surveillance photométrique de HD 209458. Les découvertes subséquentes ont permis de confirmer que 51 Peg b et HD 209458 b étaient les premiers exemples d'une classe de planètes absentes du système solaire, appelée Jupiter chaude, soit des géantes gazeuses orbitant près de leur étoile.



### 1.1.3. Méthodes de détection

La recherche d'exoplanètes fait largement appel à des méthodes de détection indirecte, on peut tout de même compter sur une méthode de détection directe, l'imagerie. Pour mieux comprendre ces différentes méthodes, on les classe en trois catégories (Perryman, 2018), telles les méthodes dynamiques (vitesses radiales, astrométrie, chronométrie), la méthode des microlentilles gravitationnelles et les méthodes photométriques (transit, imagerie directe).

Les effets dynamiques générés par l'influence gravitationnelle d'une planète sur son étoile sont à la base de la méthode des vitesses radiales, l'astrométrie et la chronométrie. La méthode des vitesses radiales, aussi appelée spectroscopie Doppler, est basée sur le fait que dans un système planétaire, les différents objets, incluant les étoiles, sont en orbite autour du barycentre du système. Un mouvement orbital, sauf lorsque dans le plan du ciel, correspond à une oscillation dans la direction radiale. On peut estimer les vitesses radiales des étoiles, c'est-à-dire la composante de vitesses dans la ligne de visée d'un observateur, en mesurant le décalage Doppler de certaines raies de leur spectre. Une perturbation périodique des vitesses radiales permet de déduire la présence d'une planète. Cette méthode sera abordée dans le contexte de la caractérisation atmosphérique à la section 1.2.1.3. L'astrométrie, quant à elle, implique la mesure précise de la position et du mouvement des objets astronomiques. Une étoile a usuellement un mouvement propre, qui correspond à son déplacement dans la galaxie, du point de vue de l'observateur, et un mouvement apparent lié à la parallaxe. Si une étoile est l'hôte d'un système planétaire, son orbite autour du barycentre du système contribuera aussi à son mouvement. Enfin, la chronométrie regroupe toutes les méthodes qui ont mené à la détection d'une exoplanète à partir de décalages temporels d'un signal périodique quelconque. Ici encore, l'interaction gravitationnelle d'une exoplanète sur son étoile hôte (p.ex., pulsar, étoile variable pulsante, étoile binaire) ou sur les autres membres de son système planétaire (p.ex, variations de la chronométrie du transit ou de la durée du transit) sont à l'origine de ses décalages temporels.

La méthode des microlentilles gravitationnelles vient de la courbure de l'espace-temps par la masse-énergie en relativité générale. Ainsi, lorsque qu'un objet astronomique en arrière-plan, une source, se situe presque parfaitement dans la ligne de visée d'une étoile massive d'avant-plan, une lentille, ceci fait dévier les rayons lumineux de la source. Une brève amplification du signal lumineux de la source se produit lorsqu'une planète, en parcourant son orbite, passe sur la ligne de visée de son étoile et de l'objet en arrière-plan.

Les observations en photométrie permettent de mesurer le rayonnement des étoiles et de son environnement immédiat. La détection d'une faible et courte diminution périodique de la luminosité constante d'une étoile attribuable au passage d'une planète devant l'étoile se rapporte à la méthode du transit. Ceci sera discuté plus en détails dans la section 1.1.6. L'imagerie directe, comme son nom l'indique, consiste à détecter une exoplanète au côté

d'une étoile sur des images prises à haute résolution spatiale. Bien que cette méthode semble à première vue assez simple, elle comporte son lot de défis qui sera abordé brièvement à la section 1.2.1.1. Il existe diverses autres méthodes prometteuses, mais encore peu utilisées. Par exemple, la méthode de la cinématique du disque protoplanétaire (Pinte et al., 2019), la pollution de l'atmosphère des naines blanches par des débris planétaires, les ondes gravitationnelles, etc.

#### 1.1.4. Types d'exoplanètes

Diverses tentatives ont été entreprises pour classifier les différentes exoplanètes. Une classification selon le rayon, la masse, la composition ou la température est souvent employée (Perryman, 2018). La plupart des classifications se basent sur les objets du système solaire. On adopte ici une classification structurelle par la composition regroupant les planètes rocheuses (p.ex., planète de lave, planète-océan, super-Terre, planète analogue à la Terre), les géantes gazeuses (p.ex., Jupiter chaude, Jupiter ultra-chaude, planète enflée) et les planètes de glaces (p.ex., mini-Neptune, planète géante de glaces).

La composition, et par conséquent la masse des planètes, provient de l'accrétion d'une certaine fraction des constituants du disque protoplanétaire, c'est-à-dire du gaz, des glaces et des roches. Dans le contexte de l'étude des planètes (Perryman, 2018), une roche est tout composé chimique sous phase solide avec un point de fusion élevé (p.ex., métaux, silicates), une glace désigne un composé volatil avec un point de fusion entre 100 et 200 K (p.ex., eau, méthane, azote, ammoniac) et un gaz est un composé très volatil avec un point de fusion inférieur à 100 K (p.ex., hydrogène, hélium). Une planète rocheuse est essentiellement constituée de roches, elle peut aussi avoir une atmosphère qui contribue faiblement à la masse totale. Une géante gazeuse, quant à elle, a une épaisse couche d'hydrogène et d'hélium qui constitue l'essentiel de sa masse et un petit noyau rocheux. Une planète de glaces comprend un noyau rocheux et une couche gazeuse, tous deux de taille modérée, laissant aux glaces (aussi sous forme liquide) la plus grande fraction de la masse.

1.1.4.1. Jupiter chaude. Elles sont communément définies comme des planètes de masse jovienne avec une courte période orbitale de 3 à 9 jours (Gaudi et al., 2005). Elles sont ainsi fortement chauffées par le rayonnement stellaire, ce qui explique leur rayon gonflé. Bien qu'intrinsèquement rares, ces géantes gazeuses sont à la tête des premières découvertes grâce à notamment leur grande probabilité de transit due au faible rayon de leur orbite (voir Éq. 1.1.2). Elles sont aussi plus propices à la caractérisation de leur atmosphère en raison de leur grande taille, de leur émission thermique élevée et de leur atmosphère gonflée (Brown, 2001).

### 1.1.5. Formation et évolution

La formation des planètes fait suite au processus de formation des étoiles et du disque circumstellaire, par l'agglomération de la matière résiduelle pendant que le disque protoplanétaire s'effondre et évolue. La formation des étoiles de la séquence principale commence par un processus incertain de turbulence qui cause des instabilités gravitationnelles dans un nuage moléculaire (McKee & Ostriker, 2007). Ce dernier est composé de gaz, principalement du dihydrogène, ainsi que de l'hydrogène et de l'hélium, et de nombreuses autres molécules (p.ex., CO, CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>O, NH<sub>3</sub>; Semenov et al., 2010), et de grains de poussière (p.ex., silicate, carbone amorphe; Gail & Hoppe, 2010). Ceci déclenche l'effondrement gravitationnel du nuage moléculaire, sa fragmentation et l'accrétion axiale de matière (p.ex., Shu et al., 1987). En effet, par conservation du moment cinétique de la matière qui s'effondre, une partie de celle-ci chute directement sur l'étoile en formation et l'autre partie tombe, par symétrie, sur un disque plat en rotation dans le plan passant par le centre de masse et orthogonal au moment cinétique total du nuage moléculaire. Ce disque fournira éventuellement l'environnement nécessaire à la formation des planètes; on l'appelle alors le disque protoplanétaire.

La formation des planètes rocheuses et du cœur des géantes gazeuses (selon la théorie d'accrétion du noyau) débute par l'agglomération progressive de la matière solide. D'abord, les grains de poussière (taille de l'ordre du  $\mu\text{m}$ ) du disque protoplanétaire, accélérés par la turbulence, entrent en collision et se lient par l'interaction de van der Waals, ce qui forme des petites roches (taille de l'ordre du cm; Kusaka et al., 1970). Puis, une deuxième phase de croissance mène à la formation de planétésimaux (taille de l'ordre du km). Cette phase est encore mal comprise, en raison de l'arrêt de la croissance à des tailles de l'ordre du cm à cause de l'apparition de rebonds à des vitesses de  $\gtrsim 0,1$  m/s et de la fragmentation des particules à des vitesses de  $\gtrsim 1$  m/s (p.ex., Windmark et al., 2012). Pour surmonter notamment cette barrière, des modèles basés sur l'accrétion de cailloux ont été développés (Lambrechts & Johansen, 2012). Selon cette théorie, il y a formation de cailloux de poussière (taille de l'ordre du cm) par coagulation grâce à la friction du gaz dans le disque. Enfin, une dernière étape de coagulation dominée par des interactions gravitationnelles, où les planétésimaux entrent en collision et fusionnent, forment les protoplanètes. On peut distinguer trois zones de coagulation. Une première zone pour les planètes rocheuses qui est caractérisée par des interactions planète-planète, des collisions chaotiques et de forts impacts qui contribuent aux fusions subséquentes, et ce, jusqu'à l'installation d'une configuration plus stable (Safronov, 1972). Une seconde zone dans laquelle la coagulation des planétésimaux est incomplète (p.ex., dans le système solaire, la ceinture d'astéroïdes et de Kuiper, et les disques de débris). Une autre zone au-delà de la ligne de glace où les planètes géantes se forment. Une ligne de glace correspond à la ligne au-delà de laquelle une espèce chimique donnée existe sous forme solide (glace). Par conséquent, à l'intérieur d'une ligne de glace, l'espèce sera sous forme de

gaz, tandis qu'à l'extérieur, celle-ci sera sous forme de glaces. Dans les dernières phases de formation, avant que le gaz restant ne soit perdu par accrétion ou dispersion, le gaz fournit un milieu visqueux, ce qui, combiné avec les interactions gravitationnelles entre les protoplanètes et les planétésimaux résiduels, entraîne une certaine migration menant à une stabilisation du système planétaire (p.ex., Lin & Papaloizou, 1979; Kenyon & Bromley, 2006).

1.1.5.1. Planète géante gazeuse. Il existe deux grandes théories pour la formation des planètes géantes, soit l'accrétion du noyau (modèle ascendant, de l'anglais « bottom-up ») et l'instabilité gravitationnelle du disque (modèle descendant, de l'anglais « top-down »). La première commence, comme pour les planètes rocheuses, par la coagulation des planétésimaux pour former un noyau massif, suivi par l'accrétion rapide d'une enveloppe gazeuse (Pollack et al., 1996). En effet, lorsque le noyau atteint une masse critique, et ce suffisamment rapidement pour que le gaz soit encore abondant dans le disque, une enveloppe gazeuse massive peut s'accréter à partir du disque résiduel. Pour la seconde théorie, les géantes gazeuses se forment à la suite de la fragmentation gravitationnelle du disque protoplanétaire (Bodenheimer et al., 2000). Pour les deux théories, une migration subséquente ou pendant la formation contribue aux processus d'accrétions.

La théorie de l'accrétion du noyau a été divisée en quatre étapes principales, qui peuvent être modifiées subséquemment par les effets de la migration. D'abord, il y a l'accrétion primaire du noyau, tel que décrit précédemment, qui mène à la formation d'une planète massive (environ 5-20 fois la masse de la Terre; Ikoma et al., 2000). Ensuite, il y a l'accrétion lente de l'enveloppe qui se caractérise par une accrétion de gaz sur le noyau et de planétésimaux résiduels. Puis, il y a l'accrétion rapide de gaz, qui est déclenchée si l'enveloppe atteint une masse comparable à celle du noyau. À cette étape, il y a relativement peu d'accrétion de solides, les planétésimaux se dissolvent et enrichissent les enveloppes gazeuses. Enfin, il y a contraction et refroidissement de la planète, marquée par la fin de l'accrétion de gaz.

L'instabilité gravitationnelle du disque serait une autre possibilité pour la formation d'au moins quelques planètes géantes. Celles-ci pourraient se former, plus directement et rapidement, par un effondrement rapide dans un disque protoplanétaire massif et gravitationnellement instable, qui mènerait à la fragmentation et contraction des condensats gazeux (Boss, 1997). Des noyaux de roche et de glace pourraient se former par la coagulation et la sédimentation subséquente des grains de poussière. Des géantes de glace plus petites pourraient se former par la photo-évaporation des enveloppes gazeuses (Boss et al., 2002). Ce modèle contourne les incertitudes liées à l'accumulation progressive de solides et l'échelle de temps important requis par la théorie de l'accrétion du noyau (Boss, 2000).

1.1.5.2. Migration des Jupiters chaudes. La formation in situ des Jupiters chaudes est improbable. Dans les modèles d'accrétion du noyau, la disponibilité de la matière à cet endroit et l'ouverture du disque (c.-à-d. la déplétion en gaz à cet endroit) semblent empêcher

leur croissance (p.ex., Boss, 1995; Rafikov, 2006), tandis que dans les modèles d’instabilité gravitationnelle du disque, le gaz se refroidit trop lentement pour que les bras spiraux se fragmentent en amas liés (p.ex., Matzner & Levin, 2005; Rafikov, 2005). Ces considérations soutiennent l’idée que les Jupiters chaudes sont arrivées à leur localisation actuelle ( $a \lesssim 0.2$  au) depuis leur région de formation au-delà de la ligne de glace ( $a \gtrsim 3$  au). Il y a deux hypothèses privilégiées pour expliquer la localisation des Jupiters chaudes, soit la migration vers l’intérieur causée par le disque, soit la circularisation de l’orbite par les forces de marées à cause d’une orbite très excentrique avec un petit péricentre.

1.1.5.3. Atmosphère planétaire. On distingue trois origines différentes pour les atmosphères planétaires, soit primordiale, primaire et secondaire (p.ex., Liggins et al., 2022). Lorsque le gaz est accrété du disque protoplanétaire, on parle d’atmosphère primordiale. La formation d’une atmosphère primaire, quant à elle, provient de la libération de gaz lors de l’accrétion de planétésimaux ou du dégazage lors du refroidissement d’un océan de magma. Une atmosphère secondaire provient plutôt de la libération à long terme de composés volatils par l’intérieur planétaire, par exemple, par le volcanisme, les impacts, du dégazage non volcanique (p.ex., serpentisation), etc. Par conséquent, les planètes géantes sont composées d’une atmosphère primordiale, tandis que les planètes rocheuses peuvent évoluer d’une atmosphère primordiale à une primaire à une secondaire. En réalité, différents processus géologiques et atmosphériques peuvent modifier la composition des atmosphères des planètes rocheuses, comme le rééquilibrage cinétique thermo-chimique, l’évasion atmosphérique (p.ex., hydrodynamique ou érosif causée par l’activité stellaire), les processus photochimiques et biologiques.

### 1.1.6. Transit

L’observatoire spatial Kepler est responsable de la majorité des exoplanètes détectées par la méthode du transit (Batalha, 2014). Deux projets de recherche menés avec des télescopes terrestres, HAT et WASP, ont aussi permis de détecter un bon nombre d’exoplanètes en transit (Bakos et al., 2004; Pollacco et al., 2006). Ces dernières revêtent un intérêt particulier, car leurs courbes de lumière permettent de mesurer leur rayon. Pour un alignement adéquat, lorsqu’une planète passe devant son étoile, le flux de l’étoile est atténué du point de vue d’un observateur, et ce, proportionnellement au rapport des aires des disques projetés de la planète et de l’étoile. Ceci correspond à la profondeur de transit  $\Delta F$  et s’exprime comme suit :

$$\Delta F \equiv \frac{F_* - F_{\text{transit}}}{F_*} \simeq \left( \frac{R_p}{R_*} \right)^2, \quad (1.1.1)$$

où  $F_*$  correspond au flux de l’étoile,  $F_{\text{transit}}$  le flux bloqué par la planète lors du transit,  $R_p$  le rayon de la planète et  $R_*$  celui de l’étoile (Seager & Mallén-Ornelas, 2003). L’effet se répète avec la période orbitale de la planète. Ceci donne accès à la densité de l’exoplanète, lorsque

la masse de la planète peut être estimée par la méthode des vitesses radiales, et ainsi une première estimation de la composition globale de l'intérieur planétaire. L'effet observé est faible, pour une étoile avec un rayon solaire, on peut s'attendre à une profondeur de transit d'environ  $\Delta F \simeq 1.1 \times 10^{-2}$  et  $\Delta F \simeq 8.4 \times 10^{-5}$  pour respectivement des planètes du rayon de Jupiter et de la Terre (Perryman, 2018). Cet effet augmente pour des petites étoiles comme des naines rouges. La probabilité d'observer un transit pour une étoile donnée est également faible. La probabilité pour une planète orientée au hasard d'être alignée favorablement pour un transit est donnée par :

$$p = \frac{R_*}{a} \simeq 0.005 \left( \frac{R_*}{R_\odot} \right) \left( \frac{a}{1 \text{ au}} \right)^{-1}, \quad (1.1.2)$$

considérant une planète en orbite circulaire autour d'une étoile de rayon  $R_*$  à la distance orbitale  $a$  (Borucki & Summers, 1984; Perryman, 2018). Par exemple, ceci correspond à une probabilité de  $p \simeq 0.075$  pour une Jupiter chaude orbitant une naine orange (c.-à-d. pour  $a = 0.05$  et  $R_* = 0.75 R_\odot$ ) et à  $p \simeq 0.00096$  pour Jupiter.

Il y a quatre observables caractérisant un transit, soit la période  $P$ , la profondeur de transit  $\Delta F$ , la durée totale du transit  $t_T$ , c'est-à-dire l'intervalle entre le premier et le quatrième contact, et la durée de la partie plate du transit  $t_F$ , c'est-à-dire l'intervalle entre le deuxième et le troisième contact. Ces trois derniers sont illustrés à la Figure 1.1, les cercles en pointillés indiquent les quatre points de contact. Trois équations décrivent la géométrie du transit, soit pour une orbite circulaire, la profondeur de transit (Éq. 1.1.1), la durée du transit (Éq. 1.1.3) et la forme du transit (Éq. 1.1.4),

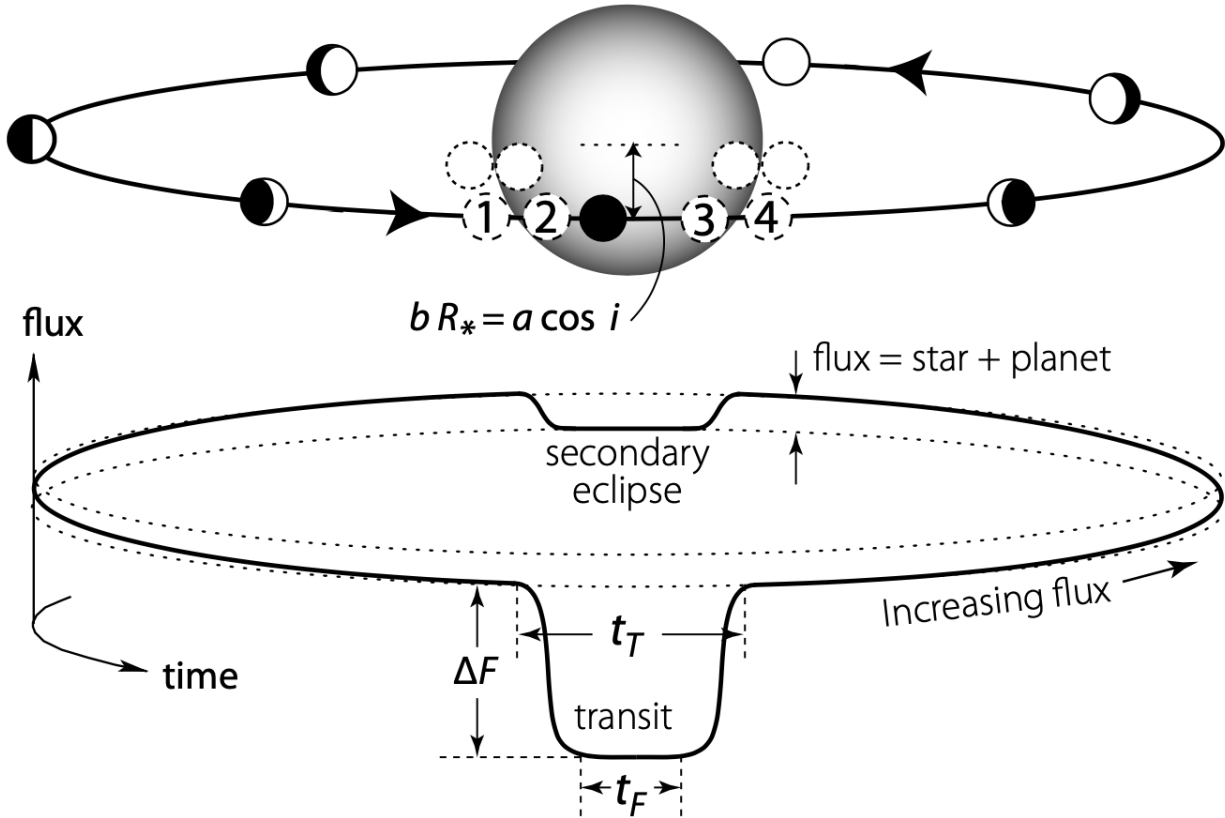
$$t_T = \frac{P}{\pi} \arcsin \left( \frac{R_*}{a} \sqrt{\frac{[1 + (R_p/R_*)]^2 - [(a/R_*) \cos i]^2}{1 - \cos^2 i}} \right) \text{ et} \quad (1.1.3)$$

$$\frac{\sin(t_F \pi / P)}{\sin(t_T \pi / P)} = \frac{\sqrt{\sqrt{[1 - (R_p/R_*)]^2 - [(a/R_*) \cos i]^2}}}{\sqrt{[1 + (R_p/R_*)]^2 - [(a/R_*) \cos i]^2}}, \quad (1.1.4)$$

où  $a$  et  $i$  sont respectivement le demi-grand axe et l'inclinaison de l'orbite planétaire (Seager & Mallén-Ornelas, 2003). On peut exprimer le paramètre d'impact  $b$ , c'est-à-dire la latitude apparente de l'étoile à laquelle la planète transite (voir Figure 1.1), tel que :

$$b = \frac{a}{R_*} \cos i. \quad (1.1.5)$$

À l'aide de ces équations, on peut déduire les paramètres physiques du transit ( $b$ ,  $a/R_*$ ,  $R_p/R_*$ ). Ces trois équations sont vraies pour une source uniforme sans assombrissement centre-bord. Cet effet représente la diminution apparente de la luminosité entre le centre



**Figure 1.1** – Schéma d’une orbite planétaire illustrant un transit et une éclipse secondaire. Tiré de Perryman (2018) Figure 6.26.

d’une étoile et son bord, causée par des effets de profondeur optique. Une formulation théorique des courbes de lumière de transit pour une source uniforme en présence d’assombriement centre-bord a été donnée par Mandel & Agol (2002). En outre, une fraction importante des planètes en transit, en particulier dans les systèmes planétaires à une planète, ont des excentricités non nulles. Kipping (2008) a dérivé les équations analytiques pour les quatre observables du transit pour une orbite elliptique en trois dimensions. Dans ce cas, les variables additionnelles, soit l’excentricité  $e$  et l’argument du périastre  $\omega$ , ne peuvent pas être déterminées seulement à partir de la courbe de lumière de transit.

L’ajustement d’une courbe de lumière de transit consiste à inférer les paramètres physiques du transit pour une courbe de lumière donnée. Ceci est souvent réalisé avec des algorithmes de Monte Carlo par chaîne de Markov (MCMC) ou de l’échantillonnage imbriqué (de l’anglais « nested sampling ») basé sur la statistique bayésienne. Ces derniers fournissent les distributions postérieures marginalisées pour chaque paramètre, ainsi que leur intervalle de confiance associé. Un exemple d’outil couramment utilisé est *batman* (Kreidberg, 2015), basé sur le formalisme de Mandel & Agol (2002), qui modélise les courbes de lumière de transit

et que l'on peut combiner avec un algorithme de MCMC pour récupérer certains paramètres du transit.

## 1.2. Caractérisation atmosphérique des exoplanètes

La combinaison d'observations spectroscopiques et de techniques de modélisation et de récupération d'atmosphères a permis de contraindre un large éventail de propriétés atmosphériques pour un grand nombre d'exoplanètes. Cette section aborde d'abord brièvement les méthodes de caractérisation. Ensuite, l'accent est mis sur la spectroscopie de transmission en discutant du signal, de la composition et de la structure atmosphérique. Puis, il est question des implications pour la formation et l'évolution des planètes gazeuses. Enfin, cette section se termine avec les principes de base de la modélisation et de la récupération d'atmosphères.

### 1.2.1. Méthodes de caractérisation

Les différentes méthodes qui rendent possible l'observation des atmosphères d'exoplanètes nécessitent de séparer le signal de la planète de celui de l'étoile. Une méthode intuitive est la spectroscopie d'imagerie directe. Dans ce cas, la lumière de la planète est angulairement séparée de celle de l'étoile. Une autre méthode, la spectroscopie de transit, repose sur la variation dans le temps du rayonnement de la planète et de l'étoile. Trois configurations sont possibles (voir Figure 1.1), apportant des contraintes différentes et complémentaires pour la caractérisation atmosphérique : l'éclipse primaire (spectroscopie de transmission), lorsque la planète transite devant son étoile, l'éclipse secondaire (spectroscopie d'émission), lorsque la planète passe derrière elle, et une courbe de phase pour une partie ou l'ensemble de l'orbite. Une dernière méthode, la spectroscopie Doppler à haute résolution, dépend du décalage Doppler des raies spectrales. Pour cette dernière, la vitesse radiale élevée des Jupiters chaudes peut être exploitée pour distinguer les raies spectrales de la planète de celles de l'étoile hôte.

1.2.1.1. Spectroscopie d'imagerie directe. L'imagerie directe capture une image très contrastée de l'environnement stellaire immédiat, ce qui permet de détecter l'émission thermique d'une exoplanète<sup>1</sup>. La spectroscopie peut alors fournir de l'information sur les propriétés physico-chimiques des atmosphères, telles que la composition et le profil de température (p.ex., Barman et al., 2015; Macintosh et al., 2015). Il est difficile de détecter le rayonnement d'une planète, étant donné que les planètes ont une séparation angulaire relativement petite par rapport à l'étoile hôte et que leur luminosité est très faible par rapport à leur étoile (Fischer et al., 2014). Les jeunes géantes gazeuses, encore très brillantes à cause de la chaleur résiduelle de formation, et celles relativement éloignées de leurs étoiles, sont les meilleures cibles. Le contraste de flux planète-étoile dans le proche

---

1. En principe, on peut aussi détecter la lumière de l'étoile réfléchiée par la planète. Cependant, ceci n'a pas encore été observé, car c'est au-delà des capacités des télescopes actuels.



infrarouge pour ces planètes est d'environ  $10^{-4}$  (Madhusudhan, 2019). De nombreux efforts sont en cours pour permettre l'observation d'exoplanètes plus froides et plus petites (p.ex., Snellen et al., 2015). L'exigence de contraste pour l'imagerie d'exoplanètes similaires à la Terre et à Jupiter dans le système solaire n'est pas réalisable avec les observatoires actuels. Par exemple, cette dernière a un rapport de flux planète-étoile dans le proche infrarouge de  $10^{-7}$  à une séparation de 0,5 arcsec (Madhusudhan, 2019). Plusieurs techniques sont en cours de développement pour atteindre un contraste et une résolution angulaire plus élevés (p.ex., Absil & Mawet, 2010). Le contraste peut être augmenté en observant à des longueurs d'onde plus grandes puisque l'émission thermique de la planète augmente à mesure que l'émission de l'étoile diminue. La résolution et le rapport signal sur bruit (S/N) peuvent être améliorés en utilisant de grandes ouvertures, ce qui est plus faisable pour les télescopes terrestres, bien que l'optique adaptative soit nécessaire pour réduire les effets de la turbulence atmosphérique (Babcock, 1953; Buffington et al., 1977). Les interféromètres peuvent également améliorer la résolution. La coronagraphie ou l'interférométrie est aussi utilisée pour éliminer optiquement la lumière des étoiles et isoler le signal de la planète.

1.2.1.2. Spectroscopie de transit. La plupart des observations d'atmosphère d'exoplanètes ont été réalisées avec la spectroscopie de transit. Lors d'un transit, une partie de la lumière de l'étoile est bloquée par la planète, tandis qu'une partie de la lumière traverse l'atmosphère au terminator de la planète (séparation entre le côté jour et le côté nuit) et peut introduire des caractéristiques d'absorption mesurables sur le spectre observé (Seager & Sasselov, 2000; Brown, 2001). Cela se traduit par une modification de la fraction du disque stellaire bloquée par la planète, c'est-à-dire de la profondeur de transit. La dépendance sur la longueur d'onde donne le spectre de transmission. La spectroscopie de transmission sonde les atmosphères à haute altitude et renseigne sur la présence et l'abondance d'espèces chimiques, la présence de nuages et de brumes, et la température de l'atmosphère. Des nuages à haute altitude peuvent cependant masquer ou atténuer les caractéristiques d'absorption (p.ex., Wakeford & Sing, 2015). En outre, les hétérogénéités de surface des étoiles actives, comme les taches et les facules, peuvent avoir un impact sur les caractéristiques spectrales (voir Section 1.3).

Lors de l'éclipse secondaire, la lumière totale est celle de l'étoile, alors que juste avant (ou après) l'éclipse, la lumière provient de l'étoile et du côté jour de la planète. Ceci est visible à la Figure 1.1. Dans le cas le plus général, la différence correspond à la réflexion et à l'émission thermique de la planète. Il y a deux pics dans le spectre d'une planète, un dans le visible dû à la lumière de l'étoile réfléchi par la planète, correspondant au pic du spectre des étoiles de type FGK, et un autre dans l'infrarouge (IR) dû à l'émission thermique de la planète. La profondeur de l'éclipse secondaire est une mesure du rapport des flux émis par la planète et par l'étoile. Le spectre d'émission est obtenu en mesurant la profondeur relative à

différentes longueurs d’onde, et la structure thermique et la composition atmosphérique sont accessibles par les caractéristiques spectrales (p.ex., Deming et al., 2005).

La spectroscopie de courbe de phase consiste à observer une orbite planétaire complète ou partielle, ce qui donne les propriétés physico-chimiques de l’atmosphère en fonction de la phase orbitale. Les variations d’émission de la planète dues aux différentes fractions visibles du côté jour et du côté nuit (voir Figure 1.1) fournissent des contraintes directes sur la dynamique atmosphérique, le transport de l’énergie et l’efficacité de la circulation (p.ex., Stevenson et al., 2014; Zhang et al., 2018). Les courbes de phase permettent également de calculer des cartes de température de luminosité en fonction de la profondeur atmosphérique (Knutson et al., 2007).

1.2.1.3. Spectroscopie Doppler. L’observation d’atmosphère d’exoplanètes avec la spectroscopie Doppler à haute résolution s’est avérée être une méthode puissante pour détecter les composés atmosphériques. Les raies spectrales des planètes géantes orbitant près de leur étoile ont un décalage Doppler par rapport à celles de leur étoile en raison du mouvement planétaire élevé. Par exemple, la demi-amplitude de la vitesse radiale de ces planètes est mille fois plus grande que celle de leur étoile (Madhusudhan, 2019). Par conséquent, les caractéristiques spectrales de l’étoile hôte, ainsi que les raies telluriques, sont essentiellement statiques pour l’observateur. Des observations à partir de télescopes terrestres sont nécessaires, étant donné que la méthode nécessite des spectres à haute résolution ( $R \sim 10^5$ ). Des méthodes de suppression de tendance (« detrending » en anglais) sont utilisées pour enlever tous les signaux statiques dans le temps, supprimant ainsi les caractéristiques stellaires et telluriques (p.ex., Brogi et al., 2012). Les spectres résiduels sont corrélés avec des spectres modèles contenant les espèces atomiques ou moléculaires attendues. Les effets systématiques des instruments sont moins problématiques avec cette méthode par rapport à la spectroscopie à basse résolution, car elle ne repose pas sur la précision photométrique. Comme d’autres méthodes utilisant la spectroscopie à haute résolution, la dynamique atmosphérique ou planétaire, comme les vents ou la vitesse de rotation de la planète, peut être déduite à partir des changements de vitesse et de l’élargissement des signaux (p.ex., Snellen et al., 2010; Snellen et al., 2014; Brogi et al., 2016). Cette méthode doit être combinée avec une méthode à basse résolution pour contraindre l’abondance absolue des espèces détectées (Brogi et al., 2017).

## 1.2.2. Signal atmosphérique en transmission

On peut approximer l’épaisseur de l’atmosphère planétaire interceptée lors d’un transit comme étant un anneau d’étendue radiale d’environ cinq fois la hauteur de l’échelle atmosphérique  $H$ , c’est-à-dire :

$$H = \frac{kT}{\mu_m g_p}, \quad (1.2.1)$$

où  $k$  est la constante de Boltzmann,  $T$  la température atmosphérique,  $\mu_m$  le poids moléculaire moyen et  $g_p$  la gravité à la surface de la planète. Cette équation peut être dérivée de l'expression de l'équilibre hydrostatique et de la loi des gaz parfaits. On peut estimer, à partir de l'équation de la profondeur de transit, le signal atmosphérique (la variation relative du signal pendant le transit due à l'atmosphère de la planète), tel que (Seager et al., 2009) :

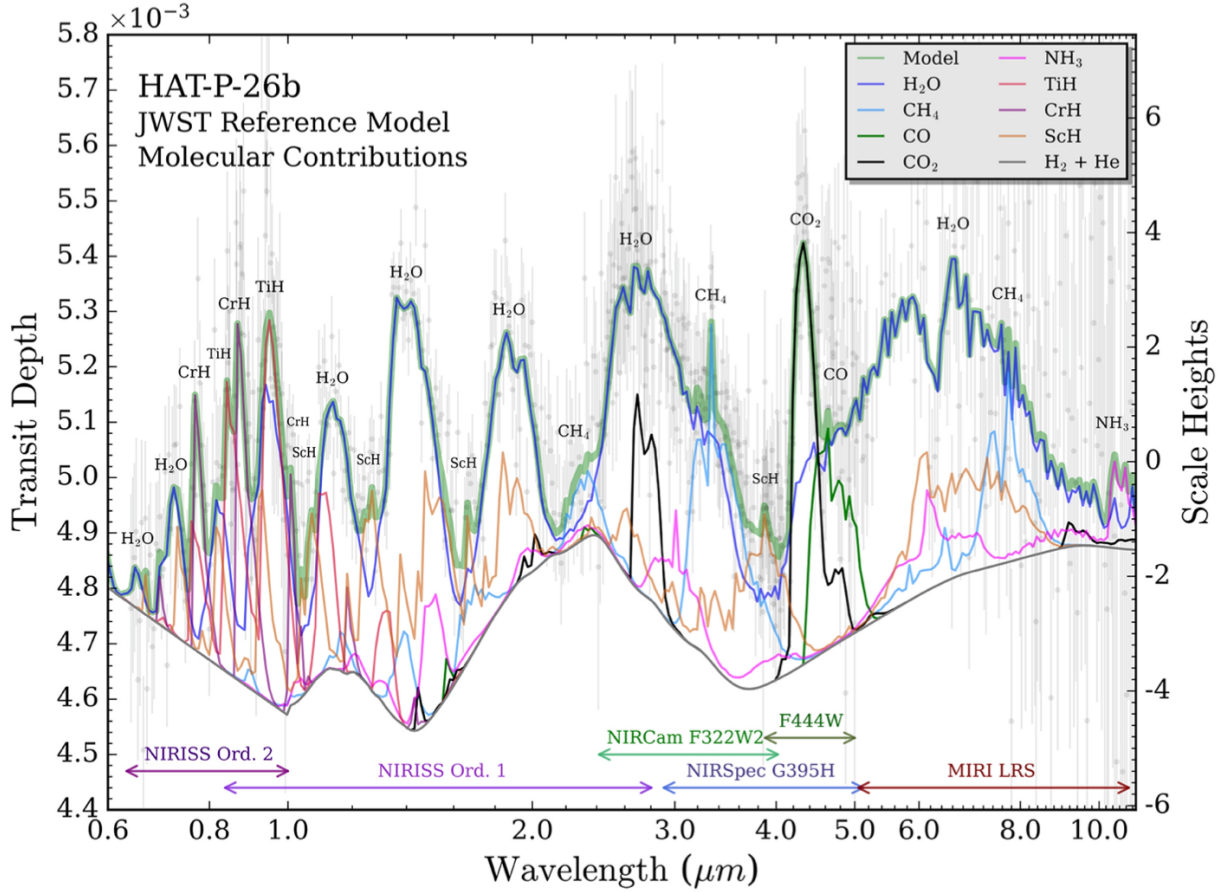
$$\delta \simeq 5 \times \frac{2R_p}{R_*^2} H. \quad (1.2.2)$$

Par conséquent, le signal, qui dépend de la hauteur atmosphérique de la planète, est plus fort pour les planètes à faible gravité de surface avec des atmosphères chaudes et des compositions d'éléments légers transitant des petites étoiles. Pour une Jupiter chaude orbitant une étoile de type K, on s'attend à avoir un signal d'au plus 2500 ppm, tandis que pour une planète rocheuse avec une atmosphère similaire à la Terre orbitant une naine rouge, on est près de 100 ppm.

### 1.2.3. Composition et structure atmosphérique

1.2.3.1. Composition chimique. Depuis la détection du sodium par Charbonneau et al. (2002) dans l'atmosphère d'HD 209458, une gamme d'espèces chimiques a été détectée dans diverses atmosphères d'exoplanètes à l'aide de télescopes spatiaux et terrestres. Avant le déploiement du JWST, les principales détections dans l'atmosphère de Jupiters chaudes étaient le sodium (576,8 nm), le potassium (778,8 nm) et la vapeur d'eau (p.ex., 1.4  $\mu\text{m}$ ; Madhusudhan, 2019). Cette dernière a également eu son abondance contrainte avec le plus de précision dans plusieurs atmosphères de Jupiters chaudes (p.ex., Tsiaras et al., 2018). Plus récemment, le JWST a permis la détection du CO<sub>2</sub> dans l'atmosphère de WASP-39 b (JWST Transiting Exoplanet Community Early Release Science Team et al., 2023).

De façon générale, les atomes et les ions absorbent fortement dans l'ultraviolet (UV) et le visible en raison de leurs transitions électroniques, tandis que les molécules, telles que l'H<sub>2</sub>O, le CO, le CO<sub>2</sub>, le CH<sub>4</sub>, etc., absorbent dans l'infrarouge vu leurs transitions de vibration et de rotation. D'autres molécules plus lourdes (p.ex., TiO, VO) absorbent également fortement dans le visible. Les espèces absorbantes dans l'UV et le visible sondent les régions supérieures des atmosphères, là où les réactions photochimiques ont lieu, tandis que les molécules sondent l'atmosphère entre 1 mbar et 1 bar (Madhusudhan, 2019). La spectroscopie de transmission permet de sonder l'UV à l'IR, tandis que les observations en émission sont plus avantageuses dans l'IR, où l'émission thermique est maximale. La Figure 1.2 présente un spectre de transmission synthétique pour HAT-P-26 b montrant la contribution de différentes molécules ainsi que les plages de longueur d'onde des instruments à bord du JWST.



**Figure 1.2** – Spectre de transmission de référence d’HAT-P-26b avec les contributions moléculaires. Tiré de MacDonald & Madhusudhan (2019) Figure 11.

1.2.3.2. Nuage et brume. Considérant que les atmosphères d’exoplanètes ont une grande variété de compositions ainsi que de conditions de température et de pression, une large gamme de composés peuvent former des nuages et des brumes. Le terme « nuage » désigne les condensats qui sont typiquement produits lorsqu’un gaz est refroidi et condense, car sa pression partielle dépasse sa pression de vapeur saturante<sup>2</sup>. La base des nuages dans l’atmosphère se trouve ainsi à l’intersection entre la courbe de pression de vapeur saturante et le profil de température de la planète. Ceci permet de déduire la composition des nuages selon la pression (altitude) où ils sont observés. Les condensats potentiels sont des métaux, des silicates, des sulfures, des sels et des alcalis (Wakeford & Sing, 2015). Avant l’arrivée du JWST, les spectres de transmission avaient une couverture en longueur d’onde et une précision insuffisantes pour distinguer les condensats à l’origine des nuages observés. Le terme « brume », quant à lui, est réservé aux aérosols qui se forment par des processus

2. Il s’agit de la pression à laquelle la phase gazeuse d’un composé est en équilibre avec la phase liquide ou solide à une température donnée

photochimiques ou tout autre processus chimique hors équilibre (p.ex., suies d’hydrocarbures formées à partir de méthane photolysé; Zahnle et al., 2010; Marley et al., 2013).

Les nuages ont comme effet de diffuser la lumière et de cacher l’atmosphère à plus basse altitude en agissant comme une source additionnelle d’opacité. Ce qui diminue ou masque complètement les raies d’absorption, surtout dans les spectres de transmission. Les nuages sont souvent modélisés comme une source d’opacité grise (diffusion indépendante de la longueur d’onde), tandis que les brumes sont souvent associées à la diffusion Rayleigh, c’est-à-dire une opacité dépendante de la longueur d’onde et affectant surtout les petites longueurs d’onde ( $\sigma_{\text{diff}} \propto \lambda^{-4}$ ). On peut ainsi constater l’effet des nuages et des brumes sur les spectres de transmission lorsque des caractéristiques spectrales d’importantes espèces chimiques sont atténuées (p.ex., Deming et al., 2013) et par la présence de pentes dans les spectres optiques similaires à la diffusion Rayleigh (p.ex., Pont et al., 2013).

1.2.3.3. Profil de température. Bien que la température soit une propriété qui varie dans les trois dimensions et avec le temps, en première approximation le profil de température vertical, en termes de pression ou d’altitude atmosphérique, contrôle l’abondance de la plupart des espèces chimiques. Les inférences des profils de température, communément appelés profils T-P, dans les atmosphères d’exoplanètes, sont réalisées à partir des spectres d’émission, avec les meilleures contraintes obtenues pour les spectres d’émission thermique côté jour des Jupiters chaudes en transit (p.ex., Stevenson et al., 2014). En principe, la spectroscopie de transmission peut contraindre la température au terminator de l’atmosphère (p.ex., Sing et al., 2008). Cependant, les contraintes sont relativement faibles vu qu’elles proviennent de la hauteur de l’échelle atmosphérique (voir Éq. 1.2.1) qui régit l’amplitude d’une raie d’absorption. Pour les Jupiters chaudes, trois classes de profils ont été observées, soit les profils T-P sans inversions thermiques, les profils T-P avec inversions thermiques et les profils isothermes. La majorité des Jupiters chaudes observées avec des températures d’équilibre inférieures à environ 2 000 K présentent des profils de température sans inversions thermiques (Madhusudhan, 2019).

## 1.2.4. Implication pour la formation et l’évolution des planètes géantes

Les compositions chimiques, plus particulièrement les abondances élémentaires des atmosphères, peuvent permettre d’étudier la formation et l’évolution des exoplanètes, sans pour autant permettre de contraindre l’ensemble des processus impliqués. Un des objectifs de la caractérisation des exoplanètes géantes est de mesurer le rapport C/O de leur atmosphère, en détectant et mesurant les abondances des principales molécules porteuses de carbone et d’oxygène. Fondamentalement, le disque protoplanétaire devrait partager les mêmes éléments que l’étoile hôte puisqu’ils proviennent du même nuage moléculaire. Les atmosphères

primordiales des géantes gazeuses constituent des traceurs précieux de leurs processus d'accrétion. Leur composition est déterminée par les proportions de gaz et de solides accrétés à divers endroits du disque par rapport aux différentes lignes de glace. Les principales lignes de glaces proviennent des éléments les plus abondants ; dans l'ordre de condensation, à partir de l'étoile et en s'éloignant, on retrouve :  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{N}_2$ , etc. Ces derniers régissent les transitions dans les rapports d'abondance des éléments clés dans le disque (p.ex., O, C et N). Ainsi, lorsqu'on se déplace vers l'extérieur du disque, la quantité d'oxygène dans la phase gazeuse diminue, tandis qu'elle augmente dans les solides. Par conséquent, le rapport C/O du gaz s'approche de 1 au fur et à mesure que l'on avance dans le disque au-delà de la ligne de glace du  $\text{CO}_2$ . Le rapport C/O solaire est de 0,54 (Asplund et al., 2009). Au fil du temps, le disque refroidit et les lignes de glace des différentes molécules se rapprochent de l'étoile. Ainsi, la composition du disque (p.ex., les rapports C/H, O/H et C/O) en gaz et en solides change avec le temps et la distance orbitale (Eistrup et al., 2018).

Par simplification, on peut croire que le disque est en état d'équilibre et les compositions du gaz et des solides sont déterminés uniquement en fonction de l'emplacement du disque par rapport aux lignes de glaces. En réalité, la composition du disque peut varier (p.ex., par des inhomogénéités de structure) et être affectée par différents processus thermiques et photochimiques. La formation par accrétion du noyau avec une accrétion importante de planétésimaux et une migration à travers le disque donne des métallicités supersolaires et des rapports C/O subsolaires (riches en oxygène), c'est-à-dire  $\text{C/O} \lesssim 0,5$  (Mordasini et al., 2016; Cridland et al., 2016). La formation au-delà des lignes de glaces de  $\text{CO}$  et  $\text{CO}_2$ , mais avec une migration sans disque, peut conduire à des métallicités subsolaires et à des compositions riches en carbone, avec un rapport C/O près de 1 (Öberg et al., 2011; Madhusudhan et al., 2014). Les planètes formées via l'instabilité gravitationnelle peuvent avoir une variété de compositions (Helled & Bodenheimer, 2010; Madhusudhan et al., 2014; Ilee et al., 2017). La formation de planètes géantes par accrétion de cailloux peut aussi conduire à une gamme variée de métallicités et de rapports C/O (Madhusudhan et al., 2017).

### 1.2.5. Modélisation d'atmosphères en transmission

La modélisation d'atmosphères a pour but de générer des spectres de transmission selon différentes compositions et structures d'atmosphère. L'équation de transfert radiatif est le fondement des modèles d'atmosphère et de la génération des spectres théoriques. En outre, pour décrire le profil de température d'une atmosphère planétaire, trois équations sont nécessaires, soit l'équation de transfert radiatif, l'équation de l'équilibre hydrostatique et l'équation de la conservation de l'énergie.

Le transfert radiatif permet d'établir comment la radiation est affectée lorsqu'elle passe dans un médium, ici l'atmosphère d'une planète. L'équation de transfert radiatif décrit le

changement d'intensité spécifique d'un faisceau lumineux  $dI_\lambda$  en fonction des pertes ( $\alpha I$ , où  $\alpha$  est le coefficient d'opacité) et des gains ( $j_\lambda$ , coefficient d'émission) de photons dans le faisceau. L'expression en une dimension est :

$$\frac{dI_\lambda(z)}{dz} = -\alpha_\lambda(z)I_\lambda(z) + j_\lambda(z), \quad (1.2.3)$$

où  $z$  est l'altitude verticale, chaque couche ayant une température et une pression donnée (Seager & Deming, 2010). Pour une atmosphère sans diffusion, on peut exprimer l'équation de transfert radiatif avec la profondeur optique  $\tau_\lambda$ , tel que :

$$\frac{dI_\lambda(\tau_\lambda)}{d\tau_\lambda} = -I_\lambda(\tau_\lambda) + B(T(\tau_\lambda)), \quad (1.2.4)$$

où  $d\tau_\lambda = \alpha_\lambda dz$  et  $B$  est la loi de Planck. Dans l'atmosphère planétaire, on peut supposer un équilibre thermodynamique local et ainsi, selon la loi de Kirchhoff,  $B = j/\alpha$ . Pour les spectres d'exoplanètes, des solutions simplifiées sont possibles pour l'équation de transfert radiatif. Pour les spectres de transmission, on peut prendre le cas en absence d'émission (c.-à-d.  $j_\lambda = 0$ ) et de diffusion, soit  $dI_\lambda = -I_\lambda d\tau_\lambda$ . On résout ensuite pour l'intensité et on obtient :

$$I_\lambda(z) = I_\lambda(z_{\max})e^{-\tau_\lambda(z)}. \quad (1.2.5)$$

Par conséquent, la profondeur de transit en fonction de la longueur d'onde peut être donnée par (Brown, 2001) :

$$\delta_\lambda = \frac{R_p^2}{R_s^2} + \frac{2}{R_s^2} \int_0^{z_{\max}} (R_p + z)(1 - e^{-\tau_\lambda(z)}) dz, \quad (1.2.6)$$

où l'on peut exprimer la profondeur optique en fonction de chaque absorbeur  $\tau_{\lambda,i}$ , tel que :

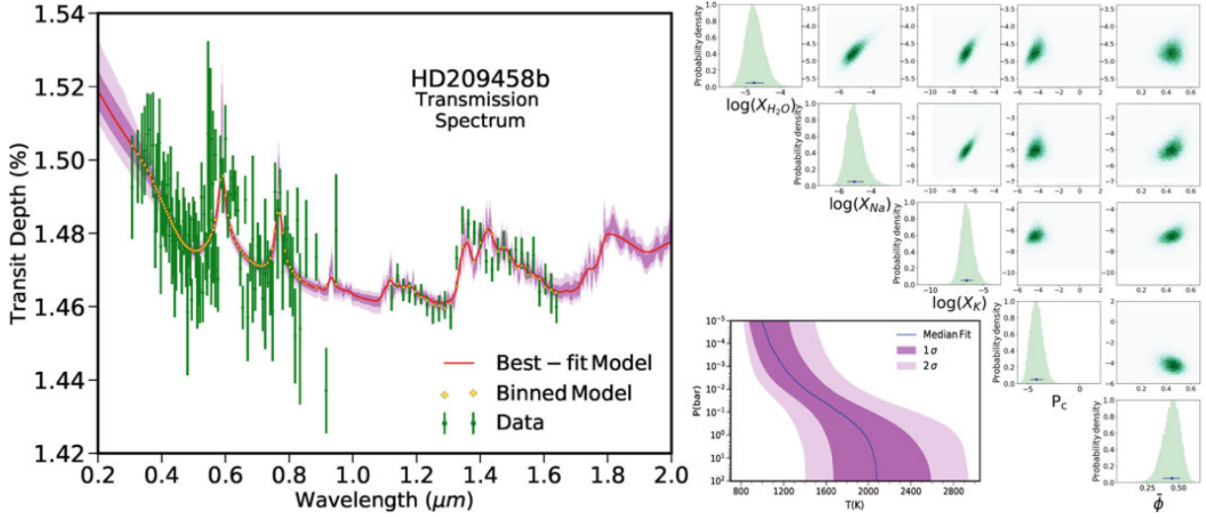
$$\tau_\lambda(z) = \sum_i \tau_{\lambda,i}(z) = \int_z^{z_{\max}} n_i(z')\sigma_{\lambda,i}(z') dz', \quad (1.2.7)$$

ici  $n_i$  et  $\sigma_{\lambda,i}$  sont respectivement la densité d'un absorbeur et la section efficace d'un absorbeur. Les sections efficaces proviennent de mesures en laboratoire ou de calculs de mécanique quantique (p.ex., Sharp & Burrows, 2007; Rothman et al., 2009).

### 1.2.6. Récupération d'atmosphères

La récupération d'atmosphères vise à résoudre le problème inverse de la modélisation atmosphérique. La récupération consiste à ajuster un modèle à un spectre de transmission observé afin d'estimer les paramètres du modèle et de faire des déductions sur les propriétés de l'atmosphère planétaire. Plusieurs techniques ont été développées pour la récupération atmosphérique (p.ex., Benneke & Seager, 2013; MacDonald & Madhusudhan, 2017).

Essentiellement, un modèle décrit une atmosphère par un ensemble de paramètres libres (p.ex., les abondances moléculaires, la température de l'atmosphère, le traitement des nuages



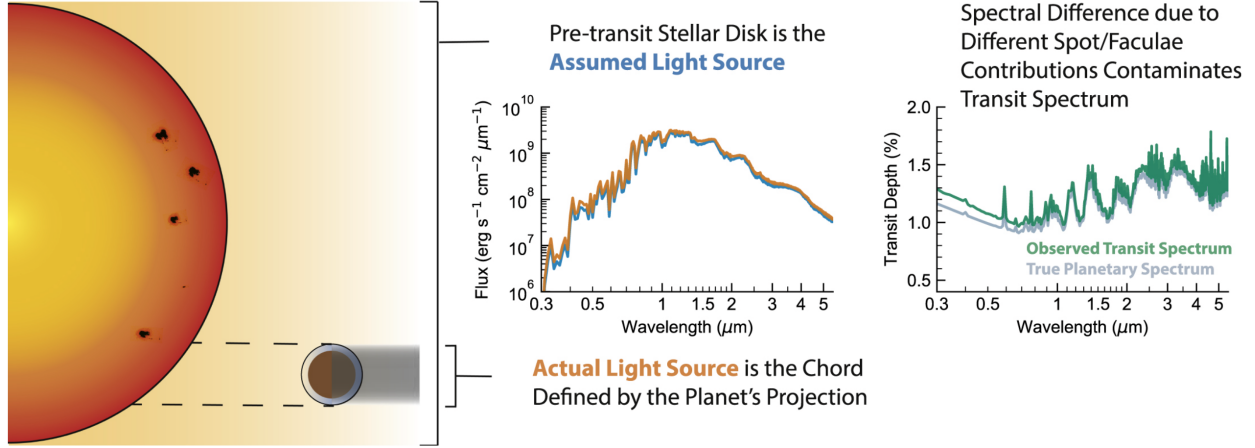
**Figure 1.3** – Exemple de récupération d’atmosphère pour un spectre de transmission d’HD 209458 b. Le panneau de gauche montre un spectre observé en vert avec l’ajustement du modèle en mauve. Le panneau de droite montre le profil T-P récupéré et les distributions de probabilité a posteriori des composantes récupérées ( $H_2O$ , Na, K, pression (altitude) des nuages et fraction de couverture des nuages). Tiré de Madhusudhan (2018) Figure 2.

et des brumes) et de paramètres fixes. On utilise un algorithme d’échantillonnage bayésien (typiquement MCMC ou un échantillonnage imbriqué) pour explorer l’espace des paramètres du modèle et calculer leur distribution a posteriori. La Figure 1.3 montre un exemple simple de récupération d’atmosphère. L’échantillonnage imbriqué de différents modèles permet de les comparer avec les facteurs de Bayes (c.-à-d. les rapports d’évidences entre les modèles) et d’identifier la signification statistique de chaque composante du modèle pour vérifier si la présence d’une espèce chimique dans l’atmosphère planétaire est supportée par les données.

### 1.3. Contamination stellaire

L’une des principales préoccupations liées à la spectroscopie de transmission est la possibilité que des hétérogénéités stellaires modifient les profondeurs de transit par l’effet de la source lumineuse du transit (TLSE) et faussent ainsi les déductions sur la composition de l’atmosphère planétaire. L’objectif de cette section est de résumer les connaissances actuelles et les limites de la compréhension des hétérogénéités stellaires, de leur impact en spectroscopie de transmission et des approches pour modéliser les régions actives occultées et non occultées. L’accent est mis sur l’optique et le proche infrarouge, étant donné que les hétérogénéités stellaires ont un plus grand impact dans cette gamme de longueurs d’onde.





**Figure 1.4** – Schéma de l'effet de la source lumineuse du transit. Tiré de Rackham et al. (2018) Figure 1.

### 1.3.1. Effet de la source lumineuse du transit

La spectroscopie de transmission repose sur la mesure de la profondeur de transit à différentes longueurs d'onde pour identifier la composition de l'atmosphère planétaire. Lorsqu'une surface stellaire contient des hétérogénéités, le spectre de transmission peut présenter une dépendance en longueur d'onde qui n'est pas causée par l'atmosphère de la planète en transit (p.ex., Rackham et al., 2018). L'origine de cet effet est une inadéquation entre l'intensité stellaire incidente sur la planète et l'intensité moyenne de l'ensemble de la surface stellaire. En effet, les mesures de profondeur de transit dépendent de la différence entre la lumière incidente sur la planète et la lumière transmise par l'atmosphère planétaire. On suppose que le spectre moyen du disque stellaire est identique à la source lumineuse incidente sur l'atmosphère planétaire lors du transit. En réalité, cette dernière provient d'un petit cercle sur le disque stellaire défini par la projection de la planète sur son étoile hôte pendant le transit. En présence d'hétérogénéités sur la surface stellaire, le spectre provenant de la réelle source de lumière peut différer significativement du spectre supposé. Ces différences conduiront à des variations apparentes de la profondeur de transit. Ceci est illustré à la Figure 1.4. L'ampleur de la contamination sur la profondeur de transit dépend de la taille et des contrastes de flux des hétérogénéités. On définit le facteur de contamination stellaire dépendant de la longueur d'onde  $\epsilon_\lambda$ , soit pour  $N_{\text{het}}$  hétérogénéités (p.ex., Rackham et al., 2018) :

$$\epsilon_{\lambda, \text{het}} = \frac{1}{1 - \sum_{i=1}^{N_{\text{het}}} f_{\text{het}, i} \left( 1 - \frac{F_{\lambda, \text{het}, i}}{F_{\lambda, \text{phot}}} \right)}, \quad (1.3.1)$$

où  $f_{\text{het}, i}$  est la fraction de couverture de l' $i^{\text{ème}}$  hétérogénéité sur le disque stellaire avec un flux correspondant  $F_{\lambda, \text{het}, i}$  et  $F_{\lambda, \text{phot}}$  est le flux de la photosphère. Ce facteur correspond à la dépendance en longueur introduit par le TLSE dans le spectre de transmission.

### 1.3.2. Hétérogénéités des surfaces stellaires

Les hétérogénéités sur la surface visible d'une étoile, c'est-à-dire la photosphère, résultent de processus induits par le mouvement du plasma et de processus liés au champ magnétique, ainsi qu'à leurs interactions. Le premier processus produit sur la photosphère de la granulation, c'est-à-dire une structure granuleuse correspondant aux sommets des cellules de convection, ainsi que des oscillations. Le second génère des structures magnétiques à la surface de l'étoile, tels que des régions brillantes (facules) et sombres (taches, pores). Une région active typique se compose de grandes et petites taches, pores et facules, et est généralement la source d'éruptions stellaires (« flares » en anglais). Les hétérogénéités de surface changent à la fois intrinsèquement avec l'évolution des régions actives et du point de vue de l'observateur avec la rotation de l'étoile. Il sera principalement question dans cette sous-section de la compréhension théorique de leur taille, leur localisation, leur durée de vie et leur contraste dans le spectre allant du visible à l'infrarouge.

1.3.2.1. Granulation et oscillations. Pour le moment, on ne peut résoudre spatialement ces structures en détails que sur le Soleil, bien que leurs impacts sur d'autres étoiles aient été détectés avec des observations non résolues. Elles sont caractéristiques des étoiles avec une enveloppe convective, c'est-à-dire celles avec une température effective inférieure à environ 6700 K (p.ex., Rackham et al., 2023). La granulation stellaire est une source ultime de bruit de fond dans les courbes de lumière stellaires, elle représente une limite inférieure à la variabilité photométrique d'une étoile. Il s'agit d'une structure comprenant des granules brillantes, c'est-à-dire des cellules ascendantes de plasma chaud, séparées par des zones plus sombres et étroites, appelées intergranules, qui correspondent au plasma descendant plus froid. Leur diamètre moyen sur le Soleil serait de 1 500 km (p.ex., Schwarzschild, 1959). Des simulations 3D pour d'autres étoiles montrent que la taille des granules diminue avec la gravité de surface et augmente avec la température de surface et la métallicité, quoique la dépendance soit faible pour la métallicité (Nordlund & Dravins, 1990). Les processus de convection causent aussi des oscillations visibles sur la photosphère. Les variations de luminosité dues à la granulation et aux oscillations sont de l'ordre de minutes à heures (p.ex., Bahng & Schwarzschild, 1961; Rackham et al., 2023). La luminosité de la granulation fluctue avec les variations d'intensité des granules brillantes et des intergranules, ce que l'on appelle le scintillement de granulation. Les variations de contraste entre les granules et les intergranules augmentent fortement avec la température effective, faiblement avec la métallicité et diminuent avec la gravité de surface (Tremblay et al., 2013). Les observations du Soleil montrent une forte diminution du contraste de la granulation à grandes longueurs d'onde. Ce qui est aussi vrai pour les oscillations, dont les amplitudes d'intensité observées à une longueur d'onde  $\lambda$  sont proportionnelles à  $1/\lambda$  (Kjeldsen & Bedding, 2011). L'amplitude du scintillement de granulation est proportionnel au contraste de luminosité des granules/intergranules, ce qui se traduit par une diminution

du scintillement de granulation à grandes longueurs d'onde (p.ex., Sánchez Cuberes et al., 2003). Les oscillations, quant à elles, présentent des amplitudes de variabilité de la luminosité beaucoup plus faibles.

1.3.2.2. Taches. Pour le Soleil, il s'agit des structures les plus contrastées visibles dans l'optique et le proche infrarouge. Les taches sont visibles sur la photosphère comme une zone sombre, l'ombre, entourée d'une région plus claire, la pénombre. L'augmentation locale du champ magnétique inhibe la convection de surface et cause un refroidissement du plasma dans la région active. Un pore est le terme désignant une ombre sans pénombre ; l'intensité du champ magnétique y est relativement plus faible (Suetterlin, 1998). La distribution de taille des taches suit une loi log-normale ; les taches plus petites étant plus fréquentes (Bogdan et al., 1988). Leur durée de vie sur le Soleil augmente linéairement avec leur taille (règle de Gnevyshev-Waldmeier ; Gnevyshev, 1938; Waldmeier, 1955). Cela implique que la plupart des taches vivent moins d'une journée, mais les plus grandes peuvent persister pendant des mois. Il semble que pour les autres étoiles, les durées de vie des taches stellaires ne suivent pas tout à fait cette tendance. Les grandes taches sur les étoiles actives peuvent durer très longtemps, voire des années (Hussain, 2002). Aussi, pour les étoiles actives, les taches peuvent se produire à des latitudes beaucoup plus élevées que les  $\pm 30^\circ$  de l'équateur que l'on observe généralement sur le Soleil, avec l'existence de taches polaires (Roettenbacher et al., 2016). En général, les étoiles plus chaudes ont des taches avec une différence de température plus importante que les étoiles plus froides, ceci semble aussi vrai pour des étoiles de gravité de surface différente (Berdyugina et al., 2005). De plus, il y a un lien direct entre la taille de la tache et l'intensité de l'ombre pour les taches solaires. Les taches plus grandes ont tendance à avoir des ombres plus sombres que celles plus petites (p.ex., Mathew et al., 2007).

1.3.2.3. Facules. Ce sont des manifestations des champs magnétiques photosphériques à petite échelle qui ne sont pas assez forts pour former des taches (p.ex., Solanki, 1993) ou le résultat de la désintégration des régions actives. Souvent situées au voisinage des taches, les facules sont des structures brillantes et inégales d'environ 100 à 400 km de diamètre sur le Soleil (p.ex., Rackham et al., 2023). Leurs homologues dans la chromosphère sont appelés plages. Des observations d'étoiles de type G et K montrent que les taches et les plages sont souvent, mais pas toujours, associées (Morris et al., 2018). Les changements de températures effectives de la surface stellaire peuvent être faibles pour les facules, les augmentations de flux dépendant fortement de la longueur d'onde, avec une augmentation particulièrement forte dans l'UV et avec la position sur le disque. En effet, il y a une augmentation du contraste des facules vers les bords d'une étoile (Beeck et al., 2015). Les facules peuvent être à la fois brillantes et sombres, selon le type spectral de l'étoile (Beeck et al., 2015; Norris et al., 2017). Peu de simulations magnétohydrodynamiques ont évalué l'effet des niveaux d'activité stellaire et des paramètres fondamentaux (métallicité et gravité de surface) sur

les contrastes et les tailles des facules. Le contraste des facules pourrait dépendre fortement de la métallicité de l'étoile selon des modèles 1D simplifiés, avec des contrastes plus élevés pour des métallicités plus élevées (Witzke et al., 2018). Conformément aux observations, les simulations montrent que les étoiles actives sont dominées par des taches sombres, tandis que les étoiles moins actives sont dominées par des facules (Radick et al., 1998; Reinhold et al., 2019). La transition de la domination des taches à la domination des facules se produit à un nombre de Rossby d'environ un, c'est-à-dire lorsque la période de rotation est à peu près égale au temps de renversement convectif (Reinhold et al., 2019).

### 1.3.3. Impact des hétérogénéités en spectroscopie de transmission

1.3.3.1. Granulation et oscillations. Ils sont une source potentielle de bruit, en ajoutant une dispersion supplémentaire dans les courbes de lumière de transit, et de contamination dans les spectres de transmission par le TLSE. Le premier a un impact minime dans la plupart des cas, soit au plus  $\sim 0,05\%$  d'erreur sur la profondeur de transit dans le visible (lorsque le bruit issu de la granulation domine sur le bruit de photons), ce qui diminue à plus grandes longueurs d'onde (Sarkar et al., 2018). Le second, l'impact par le TLSE, a été exploré par des simulations. Par exemple, Morris et al. (2017) et Sulis et al. (2020) suggèrent que pour des étoiles semblables au Soleil observées dans le visible, l'erreur absolue sur le rayon de la planète récupérée due au bruit de granulation peut atteindre  $\sim 10\%$  et  $\sim 2\%$  pour respectivement une planète Terre et une super-Terre. Chiavassa et al. (2017) ont simulé pour des étoiles de type solaire et de type K des transits à l'aide de modèles stellaires 3D. Les résultats suggèrent que des biais sur la profondeur de transit peuvent se produire si une exoplanète transite sur une corde qui a une luminosité significativement différente en raison de la granulation. Les biais peuvent s'élever à quelques ppm à  $0,7\ \mu\text{m}$  dans le cas d'un système analogue à la Terre et au Soleil, ce qui est du même ordre de grandeur que les caractéristiques atmosphériques (Bétrémieux & Kaltenegger, 2013). Par contre, on ne sait pas à quel point ces simulations sont réalistes. Heureusement, l'effet est beaucoup plus faible à des plus grandes longueurs d'onde, ce qui suggère qu'il pourrait s'agir d'un effet négligeable dans l'infrarouge, mais pourrait devenir un problème pour les observations de transit dans le visible. Les oscillations ont probablement un impact plus faible en raison des amplitudes associées plus petites, mais ceci n'a pas encore été validé avec des simulations. Somme toute, l'impact de la granulation et des oscillations sur les courbes de lumière de transit pourrait être modélisé comme un simple bruit (« jitter » en anglais) dans l'infrarouge.

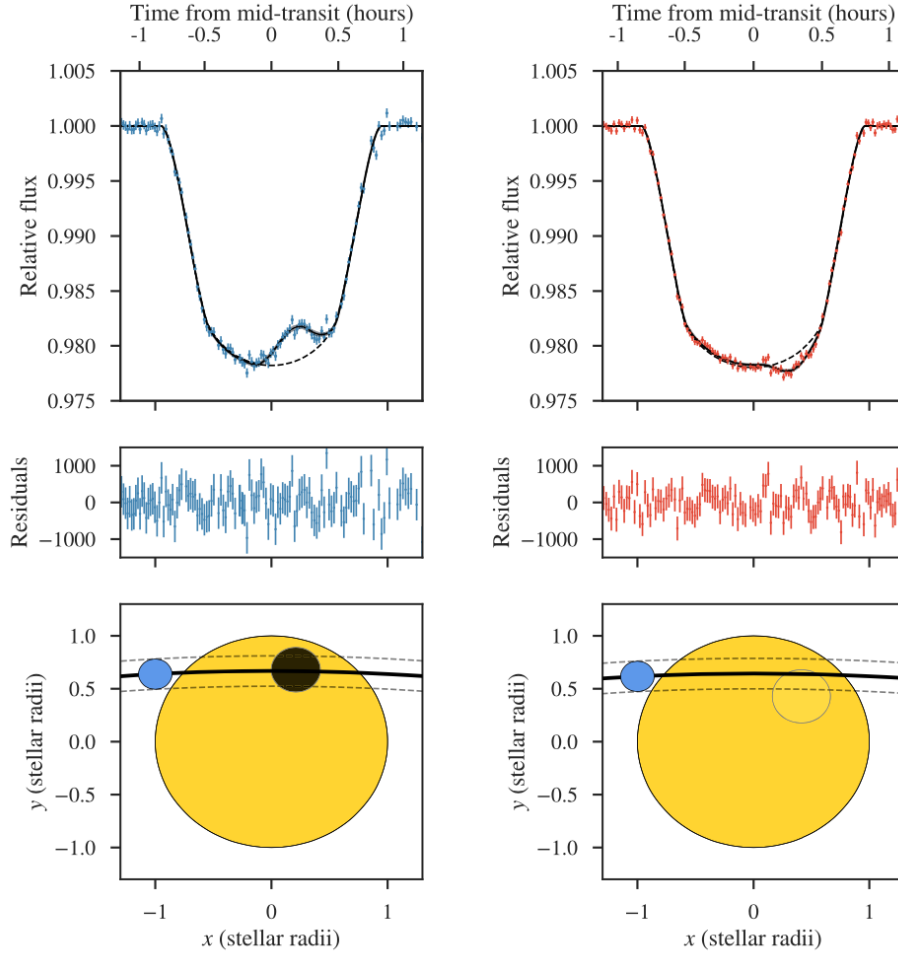
1.3.3.2. Régions actives occultées. Elles sont identifiables dans les courbes de lumière de transit, tel qu'illustré à la Figure 1.5, par une bosse ou un creux selon qu'il s'agit respectivement d'une tache ou d'une facule. Par exemple, pour une tache, l'occultation par la planète d'une région sur l'étoile qui produit moins de flux, vu la température plus basse, cause une

réaugmentation du flux observé, car la planète bloque moins de flux qu’ailleurs sur la photosphère. Par conséquent, les taches et les facules diminuent et augmentent respectivement la profondeur apparente du transit (p.ex., Czesla et al., 2009).

La première exoplanète détectée par transit, HD 209458 b (Charbonneau et al., 2000), a également fourni la première observation d’une tache stellaire occultée, à la fois avec le télescope spatial Hubble (HST ; Brown et al., 2001) et un télescope terrestre (Deeg et al., 2001). Silva (2003) a été la première à modéliser les taches occultées sur HD 209458, contraignant leur taille et leur température. Le nombre observé d’occultations de régions actives durant les transits planétaires avec des télescopes terrestres est nettement plus élevé qu’avec des télescopes spatiaux, dû principalement aux nombreuses observations à haute cadence ( $< 2$  min). Les observations à faible cadence peuvent limiter la détection d’occultations et même l’empêcher lorsque la durée de l’événement d’occultation est équivalente ou plus courte que la cadence d’observation. Ceci est particulièrement problématique pour des planètes avec des petits rayons comparés à leur étoile hôte (Tregloan-Reed & Unda-Sanzana, 2019). Ceci est aussi limitant pour les plus petites et/ou plus chaudes taches (correspondant à un faible contraste ;  $\gtrsim 0.9$ , p.ex., Rackham et al., 2023).

Les régions actives occultées sont souvent simplement masquées des courbes de lumière de transit, ce qui peut diminuer l’efficacité de l’observation. Cela peut aussi conduire à un spectre de transmission biaisé en influençant non seulement la profondeur de transit, mais aussi le temps de mi-transit, le demi-grand axe et le paramètre d’impact (Barros et al., 2013). Par exemple, les variations du paramètre d’impact dues à l’effet des régions actives sur les paramètres d’assombrissement centre-bord peuvent introduire des pentes positives ou négatives dans le spectre de transmission allant du visible à l’infrarouge (Alexoudi et al., 2020). Par conséquent, le fait de masquer les occultations dans les courbes de lumière n’annule probablement pas complètement leur effet sur la détermination des paramètres du transit, en particulier avec une spectrophotométrie à moyenne résolution. Ceci est encore plus vrai lorsque plusieurs occultations sont observées dans un même transit. Dans ces cas, la suppression des occultations pourrait simplement ne pas laisser suffisamment de données pour l’ajustement des courbes de lumière. De plus, elles peuvent avoir un impact sur le spectre de transmission par le TLSE, comme pour les régions actives non occultées. Par exemple, des simulations réalisées par Oshagh et al. (2014) suggèrent que l’effet peut atteindre dans le visible une différence allant jusqu’à 10 % dans le rapport des rayons de la planète et de l’étoile, imitant la signature de la diffusion Rayleigh d’une atmosphère planétaire.

1.3.3.3. Régions actives non occultées. Elles ont un impact sur le spectre de transmission par le TLSE. L’effet principal de ces régions est de changer la profondeur apparente du transit par un effet opposé aux régions actives occultées. Ainsi, la forme d’une courbe de transit peut être grandement affectée par la variabilité de la surface stellaire (Agol et al.,



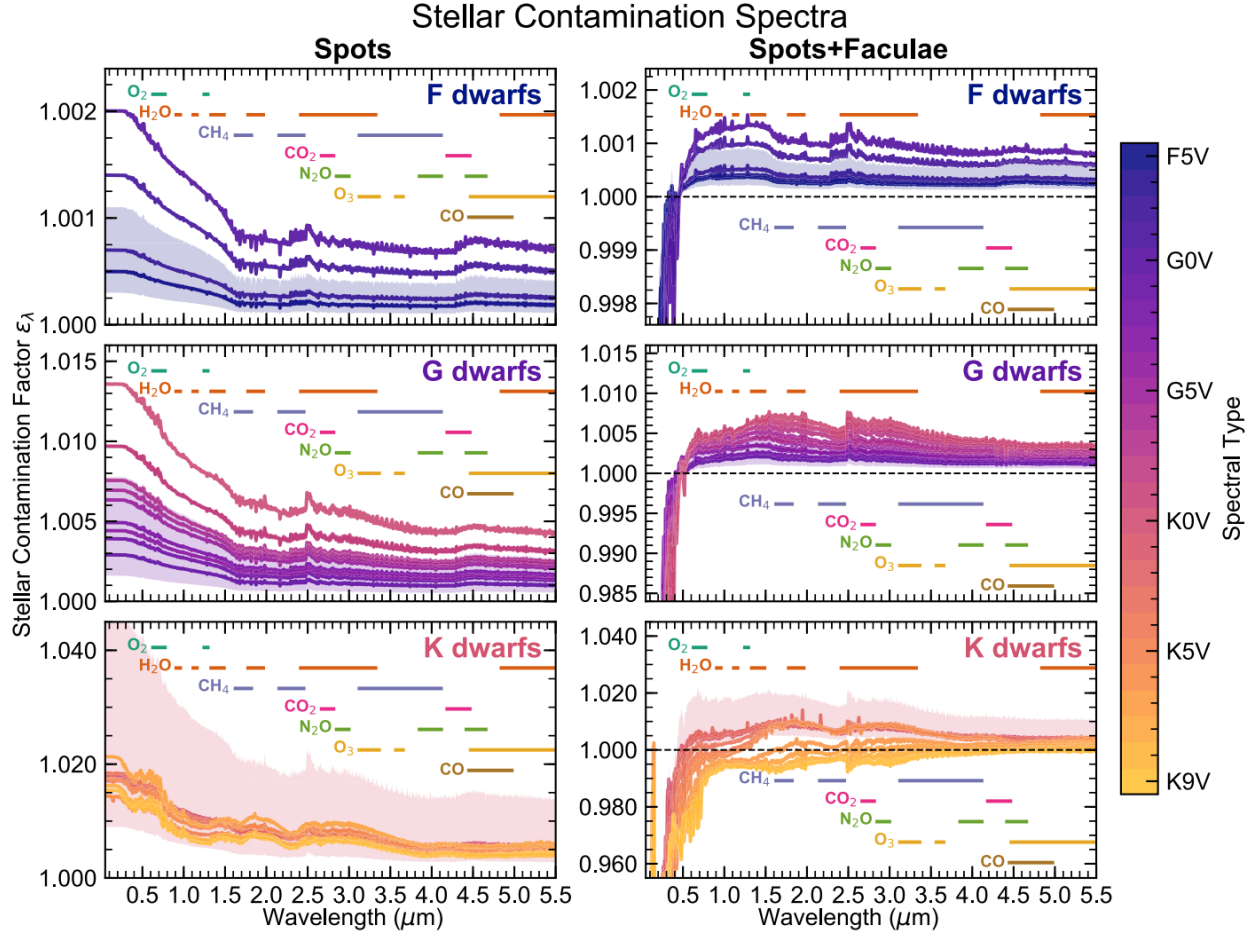
**Figure 1.5** – Exemple d’occultations de régions actives dans les courbes de lumière de transit, soit une tache dans le panneau de gauche et une facule dans celui de droite, et des modélisations correspondantes dans les panneaux du bas. Tiré d’Espinoza et al. (2019b) Figure 7.

2005; Ragozzine & Wolf, 2009; Barros et al., 2013). En fait, la forme d’une courbe de transit dépend de la géométrie relative du système, le long de la ligne de visée d’un observateur, et peut être également affectée par des interactions dynamiques entre plusieurs planètes ou entre une planète et son étoile hôte. Les variations de la profondeur de transit, dans lesquelles l’amplitude de la profondeur change au fil du temps, sont fondamentalement dues au changement de luminosité relative de la corde stellaire occultée par rapport à la lumière stellaire non occultée. Par contre, des interactions dynamiques peuvent changer la géométrie de la corde de transit elle-même (Carter & Winn, 2010; Hamann et al., 2019). Un changement dans la phase de rotation des régions actives ou leur émergence ou leur déclin peut changer la luminosité de la surface stellaire non occultée. De plus, la photométrie de transit à haute cadence et haute précision peut être nécessaire pour bien distinguer les régions actives non occultées de celles occultées. Supposons qu’un système présente des variations de profondeur

de transit et non des variations de temps ou de durée de transit, et qu'il n'y ait aucune preuve que ces variations soient principalement causées par des régions actives le long de la corde de transit, il est alors plausible que cela résulte de changements dans la surface stellaire non occultée. Par ailleurs, les éruptions stellaires peuvent aussi être observées dans les courbes de lumière de transit comme des pics stochastiques. Elles peuvent ainsi être distinguées des variations plus lentes et généralement plus faibles sur la surface stellaire ou des sources de bruit (Feinstein et al., 2020).

Outre leurs effets photométriques significatifs, les régions actives non occultées peuvent imprimer des signatures spectroscopiques caractéristiques dans les spectres de transmission. L'effet est plus important dans le visible ; pour les taches l'effet est similaire à ce que l'on pourrait s'attendre d'une atmosphère brumeuse qui provoque une pente de diffusion Rayleigh dans le spectre de transmission (p.ex., McCullough et al., 2014), tandis que pour les facules, il s'agit plutôt d'une pente négative (p.ex., Rackham et al., 2018; Kirk et al., 2021). De plus, pour les régions actives qui ont des températures significativement différentes de la photosphère, et pour des étoiles semblables au Soleil et plus froides ; les taches et les facules peuvent avoir des caractéristiques moléculaires distinctes de l'étoile elle-même, mais similaires à celles de l'atmosphère d'une planète (par exemple, TiO, H<sub>2</sub>O, CO ; Berdyugina, 2011). Dans les données photométriques à large bande, ces dernières peuvent mimer des caractéristiques à large bande des atmosphères planétaires, tandis que pour des données à bande étroite, celles-ci peuvent avoir un impact significatif sur la force des caractéristiques atomiques et moléculaires (p.ex., Rackham et al., 2017, 2018, 2019). Rackham et al. (2018, 2019) ont étudié l'impact des régions actives non occultées pour les étoiles de type FGKM en estimant les fractions de couverture des régions actives qui correspondent aux variabilités observées. Ils ont trouvé que les fractions de couverture des taches augmentent de  $\sim 0.1\%$  pour les naines F à  $2-4\%$  pour les naines K tardives à  $\sim 10\%$  pour les naines M. Aussi, ils ont constaté que les taches et les facules non occultées modifient les profondeurs de transit de quelques pourcents à quelques dizaines de pourcents, selon la taille des taches et le rapport entre la couverture en taches et en facules. La Figure 1.6 montre des exemples de spectres de contamination stellaire pour les étoiles de type F, G et K et donne les bandes de longueur d'onde pour les principales molécules dans les atmosphères d'exoplanètes.

1.3.3.4. Impact sur l'assombrissement centre-bord. La compréhension de ce dernier joue un rôle fondamental pour la détermination des hétérogénéités stellaires et de l'impact de leurs interactions. D'abord, les variations entre le centre et le bord des étoiles permettent de contraindre l'amplitude et le contraste de la granulation, ainsi que les différents contrastes des régions actives en fonction de leur position sur le disque. Puis, elles peuvent affecter la modélisation des courbes de lumière de transit et, par conséquent, biaiser le spectre de



**Figure 1.6** – Spectres de contamination stellaire estimés pour des modèles de taches (à gauche) et la combinaison de taches et de facules (à droite) sur les étoiles naines de type F (haut), G (milieu) et K (bas). Tiré de Rackham et al. (2019) Figure 5.

transmission récupéré. On sait déjà qu’il existe des désaccords entre les lois théoriques d’assombrissement centre-bord dérivés de modèles d’atmosphères stellaires et des lois déterminées empiriquement par photométrie (p.ex., Claret, 2009). Selon des simulations, la modélisation inexacte de l’assombrissement centre-bord peut même entraîner un écart de 1 à 10 % dans la mesure du rayon planétaire dans l’UV et le visible (p.ex., Csizmadia et al., 2013; Espinoza & Jordán, 2015). L’utilisation de lois théoriques d’assombrissement centre-bord qui ne tiennent pas compte des hétérogénéités peut biaiser la profondeur de transit récupérée pour des exoplanètes orbitant des étoiles actives (Csizmadia et al., 2013). Cela est en soi une source de contamination sur la modélisation des courbes de lumière de transit.

### 1.3.4. Approches pour les régions actives occultées

On peut déduire différents paramètres des régions actives occultées à partir des courbes de lumière de transit tels que leurs positions, tailles et contrastes. Des études récentes ont



exécuté une inférence conjointe des paramètres du transit et des régions actives occultées en utilisant divers codes de modélisation (p.ex., Espinoza et al., 2019b; voir Section 1.3.4.1). En fait, il a été recommandé par un groupe d'études sur l'effet de la contamination stellaire sur la spectroscopie de transmission spatiale (SAG 21; Rackham et al., 2023) d'exécuter ces inférences conjointes, au lieu de simplement masquer les régions actives occultées. La modélisation des occultations dans les courbes de lumière de transit permet aussi d'exploiter leur dépendance en longueur d'onde pour dériver d'autres paramètres de ces régions actives, tels que leur température (p.ex., Sing et al., 2011; Bruno et al., 2022). On utilise généralement des a priori non informatifs sur les propriétés des régions actives occultées lorsqu'on les modélise. De plus, même dans les cas où il n'y a pas d'occultations évidentes, les modèles peuvent être utilisés pour fixer des limites supérieures à l'impact des régions actives occultées à faible rapport S/N. Ces dernières introduisent une incertitude sur le niveau de contamination de l'activité stellaire similaire à celle des régions actives non occultées, mais avec un effet opposé (Ballerini et al., 2012).

Les tailles des régions actives détectées dans les courbes de lumière de transit sont généralement plus grandes que celles observées sur le Soleil. De plus, les températures des taches déduites de transits semblent être plus chaudes par rapport à celles récupérées par d'autres méthodes (Rackham et al., 2023). Ce qui peut indiquer des biais avec cette technique ou l'effet combiné des zones ombrées, pénombrales et faculaires. Par exemple, la méthode du transit permet de déduire la température moyenne d'une région active alors que des méthodes telles que la modélisation des bandes moléculaires sont principalement sensibles aux températures des ombres (en raison de la réponse non linéaire des raies moléculaires à la température).

La principale difficulté liée à la modélisation des régions actives réside dans le fait qu'il ne s'agit jamais de structures uniques et isolées. Ainsi, des taches et des facules sont probablement présentes simultanément, à la fois occultées et non occultées. L'effet résultant de ces structures sur les courbes de lumière de transit dépend de leur taille, leur emplacement et la longueur d'onde des observations, et est généralement impossible à séparer. En outre, il n'est pas toujours évident de savoir s'il s'agit d'une facule ou d'une tache qui est occultée, car les modèles avec l'un ou l'autre peuvent parfois offrir des ajustements comparables aux courbes de lumière de transit (Kirk et al., 2016; Bruno et al., 2016).

1.3.4.1. Outils de modélisation. Une dizaine d'outils de modélisation de taches dans les courbes de lumière de transit ont été développés jusqu'à présent. Par exemple, on retrouve **ECLIPSE** (Silva, 2003), **SOAP-T** (Oshagh et al., 2013), **PRISM** (p.ex., Tregloan-Reed et al., 2013), **spotrod** (Béky et al., 2014), **KSint** (Montalto et al., 2014), **e11c** (Maxted, 2016), **StarSim** (Herrero et al., 2016), **STSP** (Morris et al., 2017), **TOSC** (Scandariato et al., 2017) et **PyTranSpot** (Juvan et al., 2018). Il existe trois modèles semi-analytiques (c.-à-d. **spotrod**,

KSint et STSP) et des modèles par pixellisation, nécessitant une intégration sur une grille 2D de la surface stellaire. Ces derniers demandent plus de temps de calcul, mais ont l’avantage de permettre l’attribution d’intensités individuelles à chaque élément de coordonnées spécifiques. On présente plus en détails dans ce qui suit l’outil qui sera utilisé pour les travaux de ce mémoire, soit `spotrod`.

`spotrod` est un outil semi-analytique pour modéliser des transits planétaires avec l’occultation d’un nombre quelconque de taches circulaires et homogènes sur la surface stellaire. En réalité, ceci correspond physiquement davantage à des pores. Le modèle fait deux simplifications, la première étant que les taches sont circulaires et la seconde que celles-ci sont homogènes et suivent la même loi d’assombrissement centre-bord que l’étoile. Une courbe de lumière de transit est paramétrisée avec le temps à mi-transit  $T_0$ , le paramètre d’impact  $b$ , le demi-grand axe  $a/R_*$ , le rayon planétaire  $R_p/R_*$ , les coefficients d’une loi arbitraire d’assombrissement centre-bord et les quatre paramètres de chaque tache. Ces derniers sont le rayon de la tache, les positions en  $x$  et en  $y$  de la tache avec  $(x, y) = (0, 0)$  représentant le centre de l’étoile, tous trois exprimés en unité de rayon stellaire, et le contraste, c’est-à-dire le rapport entre le flux de la tache (vue par l’observateur) et le flux de la surface stellaire. Des facules peuvent être modélisées en utilisant un contraste supérieur à 1. Le modèle peut prendre en compte les taches occultées et non occultées. Un exemple de modélisation d’une tache et d’une facule est illustré dans le panneau du bas de la Figure 1.5.

1.3.4.2. Limites de la compréhension. Des progrès théoriques et des études observationnelles supplémentaires sont nécessaires pour comprendre les limites de ce que nous pouvons déduire des propriétés des régions actives à partir de courbes de lumière de transit et la façon de lever les dégénérescences dans les paramètres récupérés, tels que la taille et la température. Aussi, des avancées sont nécessaires pour comprendre les meilleures approches pour propager les informations des modèles magnétohydrodynamiques sur les propriétés des régions actives dans les a priori utilisés pour les modéliser. De plus, des études supplémentaires sont requises pour déterminer l’impact des régions actives occultées, mais non détectées, sur les mesures de profondeur de transit.

### 1.3.5. Approches pour les régions actives non occultées

On peut séparer les approches en deux, une approche qui consiste à appliquer une correction directe basée sur la variabilité stellaire et une autre qui consiste à modéliser les régions actives dans les récupérations d’atmosphères. Mentionnons que les observations photométriques produisent généralement une dégénérescence entre la taille et la température des régions actives. Par exemple, une modulation photométrique donnée peut être produite par une tache stellaire relativement petite, mais très froide (très sombre), ou par une tache plus grande, mais plus chaude. Le problème est aggravé par le fait que les régions actives

contiennent généralement des éléments brillants (de type faculaire ou plage) et des taches sombres. Les contributions de ces dernières peuvent s’additionner ou s’annuler partiellement, en fonction de leur emplacement, leur taille, des longueurs d’onde observées et du type spectral de l’étoile (Rackham et al., 2023). La spectroscopie à basse et moyenne résolution peuvent offrir une vue plus détaillée que la photométrie, notamment en permettant de mieux comprendre la taille des régions actives, à condition que la précision soit suffisante pour observer des changements spectraux relativement subtils (Rackham et al., 2023). Aussi, les facules ont une signature spectrale beaucoup plus forte que les taches (p.ex., Shapiro et al., 2014; Cauley et al., 2018), ce qui pourrait aider à lever certaines dégénérescences. En spectroscopie de transmission, les régions actives non occultées peuvent ne pas être toutes aussi importantes à prendre en compte. En effet, Cauley et al. (2018) ont démontré que l’intensité des raies spectrales diminue considérablement à mesure que la séparation entre une planète et une latitude active augmente. Les effets les plus importants se produisent lorsque les deux sont à moins de cinq degrés l’une de l’autre.

1.3.5.1. Correction directe. Pour prendre en compte l’hétérogénéité stellaire, un grand nombre d’approches ont d’abord été développées pour atténuer l’impact des régions actives sur les spectres de transmission. La principale approche consiste à appliquer une correction directe basée sur la variabilité de l’étoile. On modélise ici le flux stellaire comme une combinaison linéaire du flux de la photosphère  $F_{\text{phot},\lambda}$  et des taches  $F_{\text{spot},\lambda}$ . La variation du flux à une longueur d’onde  $\lambda$  ( $\Delta f_\lambda$ ) comparé à une longueur d’onde de référence  $\lambda_0$  ( $\Delta f_{\lambda_0}$ ) est donné par (Sing et al., 2011) :

$$\Delta f_\lambda = \Delta f_{\lambda_0} \left( \frac{1 - (F_{\text{spot},\lambda}/F_{\text{phot},\lambda})}{1 - (F_{\text{spot},\lambda_0}/F_{\text{phot},\lambda_0})} \right). \quad (1.3.2)$$

L’effet des facules est ici négligé. Cette approche présume qu’au cours de la rotation de l’étoile, le flux maximal dans une courbe de lumière correspond à une surface sans tache (p.ex., Berta et al., 2011). Par contre, les étoiles actives peuvent avoir de nombreuses taches contribuant à un niveau persistant de taches au cours de la rotation de l’étoile. Ces étoiles sont celles pour lesquelles l’impact des régions actives est le plus important à prendre en compte. Par conséquent, la variabilité rotationnelle fournit une limite inférieure à l’hétérogénéité d’une photosphère. Donc, l’application d’une correction directe basée sur la variabilité de l’étoile peut sous-estimer la correction réelle nécessaire (Rackham et al., 2023).

1.3.5.2. Modélisation dans les récupérations. Une approche pour distinguer les signaux planétaires des signaux stellaires dans les spectres de transmission observées est de modéliser la contribution des régions actives aux spectres. Ainsi, pour extraire l’information des spectres de transmission, on utilise les outils d’inférence Bayésienne pour contraindre simultanément les propriétés d’une atmosphère planétaire et d’une photosphère hétérogène. On peut modéliser le spectre de transmission d’une exoplanète transitant une étoile possédant

des hétérogénéités, tel que (MacDonald & Lewis, 2022; Rackham et al., 2023) :

$$\Delta_{\lambda, \text{obs}} = \delta_{\lambda, \text{atm}} \epsilon_{\lambda, \text{het}} , \quad (1.3.3)$$

où  $\Delta_{\lambda, \text{obs}}$  est le spectre de transmission observé,  $\delta_{\lambda, \text{atm}}$  est le spectre de transmission de l’atmosphère planétaire (voir Éq. 1.2.6) et  $\epsilon_{\lambda, \text{het}}$  est le facteur de contamination dépendant de la longueur d’onde (voir Éq. 1.3.1). L’inclusion de régions actives non occultées dans les récupérations d’atmosphères est relativement nouveau ; il n’y a pas encore de consensus sur les meilleures pratiques et ainsi les approches peuvent varier d’une étude à l’autre. Typiquement, une simple hétérogénéité décrit par trois paramètres libres, soit sa fraction de couverture  $f_{\text{het}}$ , sa température  $T_{\text{het}}$ , et la température de la photosphère  $T_{\text{phot}}$ , est modélisée (p.ex., Pinhas et al., 2018). Lors de l’exploration de l’espace des paramètres, chaque paire de  $T_{\text{het}}$  et  $T_{\text{phot}}$  est utilisée pour calculer les spectres de flux de l’hétérogénéité et de la photosphère en interpolant des grilles de modèles stellaires (p.ex., les grilles PHOENIX ; Husser et al., 2013), ce qui permet de calculer le facteur de contamination en fonction de la longueur d’onde  $\epsilon_{\lambda, \text{het}}$  (voir Éq. 1.3.1). Des a priori gaussiens (p.ex., Pinhas et al., 2018; Rathcke et al., 2021) ou uniformes (p.ex., Iyer & Line, 2020) sont usuellement utilisés sur  $T_{\text{phot}}$ . Il est aussi commun de fixer la métallicité et la gravité de surface  $g$  des hétérogénéités à celles de la photosphère. Toutefois, les taches, qui sont modélisées avec des spectres de modèles stellaires, ont potentiellement un  $\log g$  inférieur de 0,5 à 1 dex de celui de l’étoile (Bruno et al., 2022). Ceci viendrait de la diminution de la pression du gaz causée par l’augmentation de la pression magnétique locale (p.ex., Solanki, 2003). De plus, des paramètres supplémentaires pourraient être ajoutés pour obtenir des modèles avec plusieurs hétérogénéités. Il n’est pas encore clair quand de tels modèles (p.ex., incluant à la fois des taches et des facules ; Zhang et al., 2018) sont nécessaires. La contamination du spectre de transmission dépend des contrastes des régions actives dans différentes bandes spectrales, un seul élément de régions actives est généralement insuffisant et il faudrait idéalement combiner deux éléments de régions actives, un pour des facules et un autre pour des taches (Rackham et al., 2023). En outre, des études récentes ont utilisé des spectres stellaires hors transit pour ajuster les paramètres des hétérogénéités, soit en modélisant simultanément leur impact sur les spectres de transmission ou en recueillant simplement de l’information préalable pour les analyses des spectres de transmission (Zhang et al., 2018; Wakeford et al., 2019; Iyer & Line, 2020; Cracchiolo et al., 2021). Il n’est pas encore certain que cette approche apporte un avantage supplémentaire.

Iyer & Line (2020) ont effectué des récupérations sur le spectre de transmission d’une sous-Neptune en orbite autour d’une naine rouge, en faisant varier la précision des données et la couverture des taches. La conclusion est que le modèle incluant le TLSE est de plus en plus préféré pour une meilleure précision et pour les fractions de couverture de la tache supérieures à 1%. Pour une couverture de la tache inférieure à 1%, il faut une précision

de 15 ppm pour que le modèle avec le TLSE soit encore fortement préféré. De plus, il a été démontré que de ne pas tenir compte des taches lors de la modélisation des spectres de transmission des planètes géantes peut biaiser les abondances moléculaires récupérées (p.ex., Barstow et al., 2015). En outre, pour les spectres de transmission à faible résolution, l’impact des régions actives est plus important à des longueurs d’onde plus courtes, où les contrastes entre les régions actives et la photosphère sont les plus marqués. Par conséquent, les observations dans le spectre visible et dans l’UV permettraient d’obtenir de meilleures déductions sur les propriétés de l’atmosphère planétaire et des régions actives non occultées (p.ex., Kirk et al., 2021).

Somme toute, les récupérations reposent sur des modèles stellaires, ainsi la précision est donc limitée par la fidélité de ces modèles. Iyer & Line (2020) soulignent la nécessité d’améliorer les modèles d’atmosphères stellaires, en particulier pour les étoiles hôtes plus froides (de type K et M). De plus, les récupérations reposent actuellement sur des spectres stellaires dérivés de modèles 1D pour modéliser les spectres des taches et des facules. Des études récentes ont produit des spectres de taches et de facules à partir de modèles magnétohydrodynamique 3D pour quelques étoiles de type FGKM (p.ex., Panja et al., 2020; Johnson et al., 2021). Ces études révèlent des différences spectrales par rapport aux spectres des modèles stellaires 1D, en particulier pour les facules, soulignant les limites de cette approche (Norris et al., 2017; Johnson et al., 2021). La variation centre-bord du contraste des facules (p.ex., Yeo et al., 2013) et l’augmentation du contraste des facules avec la métallicité stellaire (Witzke et al., 2018) ne sont pas prises en compte avec des modèles stellaires 1D.

1.3.5.3. Limites de la compréhension. Des travaux supplémentaires sont requis pour comprendre quand les récupérations qui incluent le TLSE sont nécessaires et quelles sont les limites et les meilleures pratiques de cette approche. De plus, il faudrait plus de travaux évaluant l’impact de l’utilisation des spectres stellaires pour approximer les régions actives. Des avancées sont aussi nécessaires dans le développement des modèles de spectres pour les taches et les facules et leurs incorporations dans les récupérations, particulièrement pour les étoiles froides et les facules pour différents types spectraux. Des travaux supplémentaires sont requis pour déterminer quand les données à courte longueur d’onde devraient être utilisées pour compléter les spectres de transmission dans le proche infrarouge et quels biais peuvent être introduits par l’étude des spectres dans le proche infrarouge seulement.

## 1.4. Contributions

Ce mémoire a nécessité le développement d’une approche pour modéliser des occultations de régions actives dans les observations de transit avec l’imageur et spectrographe sans fente dans le proche infrarouge (NIRISS) du JWST. Dans un premier temps, j’ai revu la littérature et testé des outils disponibles qui modélisent des transits occultant des régions

actives. J’ai choisi de travailler avec l’outil semi-analytique `spotrod` (Béky et al., 2014) vu sa paramétrisation usuelle du transit ( $P$ ,  $T_0$ ,  $b$ ,  $a/R_*$ ,  $R_p/R_*$ ,  $e$ ,  $\omega$ ), l’utilisation d’une loi arbitraire pour l’assombrissement centre-bord et sa rapidité d’exécution. L’outil a tout de même nécessité d’être adapté pour inclure des orbites planétaires circulaires et pour l’utiliser en Python 3. Dans un second temps, j’ai implanté l’outil dans le simulateur du mode SOSS (c.-à-d. spectroscopie sans fente sur un seul objet) de l’instrument NIRISS (Albert et al., 2023), dans l’outil *Juliet* (Espinoza et al., 2019a) et dans l’outil d’ajustement de transit de Jason Rowe. Dans un dernier temps, j’ai utilisé le transit observé d’HAT-P-18 b en juin 2022 avec NIRISS/SOSS pour développer une approche pour ajuster les courbes de lumière en présence d’une tache occultée (voir Chapitre 2). J’ai par la suite utilisé la même approche pour l’observation du transit de WASP-52 b obtenue avec NIRISS/SOSS en novembre 2022 (voir Chapitre 3).

Pour le chapitre 2 sur HAT-P-18 b, j’ai mené le projet de recherche sous la supervision de David Lafrenière. Le projet comptait de multiples collaborateurs (c.-à-d. dix autres personnes ont contribué à l’analyse des données). Une analyse d’un spectre de transmission obtenu avec des observations du HST et du télescope spatial Spitzer a aussi été réalisée. Pour ce qui est des données provenant de NIRISS/SOSS, j’ai fait une réduction de données avec l’outil `SOSSISSE` développé par Étienne Artigau (Lim et al., soumis). J’ai décidé de ne pas l’inclure dans l’article vu certaines incompréhensions dans les résultats de la réduction. Michael Radica, Louis-Philippe Coulombe, Jason Rowe et Kim Morel ont participé à la réduction des données. J’ai fait l’ajustement des courbes de lumière pour les différentes réductions ainsi que la comparaison entre elles. Le spectre de transmission analysé dans l’article est celui de Michael Radica. J’ai aussi modélisé la tache occultée. Antoine Darveau-Bernier m’a partagé son code pour interpoler les spectres d’atmosphères stellaires. Pour ce qui est des données HST et *Spitzer*, il s’agit de Steven Rogowski supervisé par Björn Benneke qui a réalisé la réduction et l’ajustement des courbes de lumière. Ryan MacDonald a réalisé les récupérations d’atmosphère, a assemblé et comparé les différentes récupérations d’atmosphère de Luis Welbanks, Caroline Piaulet et lui-même. Romain Allart a analysé la raie d’absorption de l’hélium. Ryan MacDonald a aussi fait les récupérations d’atmosphère pour le spectre de transmission provenant des observations HST et *Spitzer*. David Lafrenière, principalement, ainsi que Michael Radica, Loïc Albert, Étienne Artigau et Olivia Lim m’ont orienté et aidé à plusieurs reprises. J’ai rédigé l’article et réalisé les figures et tableaux, à l’exception du résumé (réécrit par Ryan MacDonald), des deux avant-derniers paragraphes de la section 2.1 (Ryan MacDonald), des sections 2.2.2.1 et 2.3.1 (rédigé par Michael Radica principalement et David Lafrenière), de la section 2.4 (Ryan MacDonald principalement, ainsi que Caroline (2.4.2.2), Luis (2.4.2.3) et Romain Allart (2.4.3.1)), du premier paragraphe de la section 2.7.1 (Louis-Philippe Coulombe), des figures 2.9 à 2.15 (Ryan MacDonald) et des tableaux

2.3 à 2.5 (Ryan MacDonald). Les autres co-auteurs ont lu l'article et certains ont soumis des commentaires, suggestions et/ou corrections.

Pour le chapitre 3 sur WASP-52 b, je mène aussi le projet de recherche sous la supervision de David Lafrenière. J'ai fait une réduction de données avec l'outil `SOSSISSE`. La réduction principale de l'article a été réalisée par Kim Morel. J'ai fait l'ajustement des courbes de lumière pour les différentes réductions. J'ai modélisé les taches occultées. J'ai utilisé le code pour interpoler les spectres d'atmosphères stellaires d'Antoine Darveau-Bernier. Ryan MacDonald est en train de réaliser les récupérations d'atmosphère. J'ai rédigé l'ensemble de l'article et réalisé toutes les figures et tableaux, au stade apparent dans ce mémoire. Par contre, certaines sections seront éventuellement rédigées par Ryan MacDonald et Kim Morel. Les autres co-auteurs vont lire l'article et soumettre des commentaires, suggestions et/ou corrections.

## Chapitre 2

---

# Near-Infrared Transmission Spectroscopy of HAT-P-18 b with NIRISS : Disentangling Planetary and Stellar Features in the Era of JWST

Marylou Fournier-Tondreau<sup>1</sup>, Ryan J. MacDonald<sup>2</sup>, Michael Radica<sup>1</sup>, David Lafrenière<sup>1</sup>, Luis Welbanks<sup>3</sup>, Caroline Piaulet<sup>1</sup>, Louis-Philippe Coulombe<sup>1</sup>, Romain Allart<sup>1</sup>, Kim Morel<sup>1</sup>, Étienne Artigau<sup>1,4</sup>, Loïc Albert<sup>1</sup>, Olivia Lim<sup>1</sup>, René Doyon<sup>1</sup>, Björn Benneke<sup>1</sup>, Jason F. Rowe<sup>5</sup>, Antoine Darveau-Bernier<sup>1</sup>, Nicolas B. Cowan<sup>6,7</sup>, Nikole K. Lewis<sup>8</sup>, Neil James Cook<sup>1</sup>, Laura Flagg<sup>8</sup>, Frédéric Genest<sup>1</sup>, Stefan Pelletier<sup>1</sup>, Doug Johnstone<sup>9,10</sup>, Lisa Dang<sup>1</sup>, Lisa Kaltenegger<sup>8</sup>, Jake Taylor<sup>1,11</sup>, Jake D. Turner<sup>8</sup>

<sup>1</sup>Institut Trottier de recherche sur les exoplanètes and Département de Physique, Université de Montréal, 1375 Avenue Thérèse-Lavoie-Roux, Montréal, QC, H2V 0B3, Canada

<sup>2</sup>Department of Astronomy, University of Michigan, 1085 S. University Ave., Ann Arbor, MI 48109, USA

<sup>3</sup>School of Earth and Space Exploration, Arizona State University, 781 Terrace Mall, Tempe, AZ, 85287, USA

<sup>4</sup>Observatoire du Mont-Mégantic, Université de Montréal, Montréal, QC, H3C 3J7, Canada

<sup>5</sup>Department of Physics & Astronomy, Bishop's University, Sherbrooke, QC J1M 1Z7, Canada

<sup>6</sup>Department of Physics, McGill University, 3600 rue University, Montréal, QC, H3A 2T8, Canada

<sup>7</sup>Department of Earth and Planetary Sciences, McGill University, 3600 rue University, Montréal, QC, H3A 2T8, Canada

<sup>8</sup>Carl Sagan Institute and Department of Astronomy, Cornell University, Ithaca, NY 14853, USA

<sup>9</sup>NRC Herzberg Astronomy and Astrophysics, 5071 West Saanich Rd, Victoria, BC, V9E 2E7, Canada

<sup>10</sup>Department of Physics and Astronomy, University of Victoria, Victoria, BC, V8P 5C2, Canada



Ce manuscrit a été soumis à la revue arbitrée *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* le 26 juillet 2023.

**RÉSUMÉ.** Le programme *Early Release Observations* du JWST comprenait l’observation avec NIRISS/SOSS du spectre de transit allant de 0,6 à 2,8  $\mu\text{m}$  d’HAT-P-18 b, une exoplanète de  $\sim 800$  K et de masse comparable à Saturne. L’analyse initiale de ces données a permis de détecter de l’eau et de l’hélium s’échappant d’une atmosphère plutôt brumeuse. Cependant, les naines actives de type K comme HAT-P-18 ont des hétérogénéités de surface, telles que des taches stellaires et des facules, qui peuvent compliquer l’interprétation des spectres de transmission et, en effet, l’occultation d’une tache est clairement visible dans les courbes de lumière de transit. Ici, nous présentons une réanalyse et une interprétation approfondies de ce spectre de transmission d’HAT-P-18 b, ainsi que des observations de transit obtenues avec HST/WFC3 et *Spitzer*/IRAC. Nous détectons de l’H<sub>2</sub>O (12,5  $\sigma$ ), du CO<sub>2</sub> (7,3  $\sigma$ ), des nuages (7,4  $\sigma$ ), des taches stellaires non occultées (5,8  $\sigma$ ) et potentiellement du Na (2,7  $\sigma$ ). Par contre, nous ne détectons pas le CH<sub>4</sub> précédemment signalé ( $\log \text{CH}_4 < -6$  à 2  $\sigma$ ). Nous obtenons un excellent accord entre trois codes de récupération indépendants qui trouvent une abondance sub-solaire de H<sub>2</sub>O, soit  $\log \text{H}_2\text{O} \approx -4,4 \pm 0,3$ . Cependant, l’abondance inférée de CO<sub>2</sub> est significativement super-solaire ( $\log \text{CO}_2 \approx -4,8 \pm 0,4$ ) et nécessite une enquête plus approfondie sur son origine. Nous avons implémenté de nouvelles considérations dans les modèles afin d’ajuster la gravité de surface locale des hétérogénéités stellaires, pour tenter de tenir compte des effets de la pression magnétique, en plus de leur température. Enfin, nous comparons nos inférences obtenues avec le spectre du JWST à celles du HST/WFC3 et du *Spitzer*/IRAC. Nos résultats mettent en évidence la capacité exceptionnelle de contraindre simultanément l’atmosphère planétaire et les hétérogénéités stellaires à l’ère du JWST et démontrent que les spectres de transmission du JWST peuvent justifier des traitements plus complexes de l’effet de la source lumineuse du transit.

**Mots-clés :** planètes et satellites : atmosphères – planètes et satellites : planètes géantes – planètes et satellites : individuel : HAT-P-18 b – (étoiles :) taches stellaires – méthodes : analyse de données – techniques : spectroscopique

**ABSTRACT.** The JWST Early Release Observations (ERO) program included transit observation of the  $\sim 800$  K Saturn-mass exoplanet HAT-P-18 b from 0.6–2.8  $\mu\text{m}$  using NIRISS/SOSS. Initial analysis of these data has yielded detections of water and escaping helium in an otherwise hazy atmosphere. However, active K dwarfs such as HAT-P-18 are

known to possess surface heterogeneities — starspots and faculae — that can complicate the interpretation of transmission spectra, and indeed, a spot-crossing event is clearly present in the transit observation. Here, we present an extensive reanalysis and interpretation of the JWST ERO transmission spectrum of HAT-P-18 b, as well as HST/WFC3 and *Spitzer*/IRAC transit observations. We detect H<sub>2</sub>O ( $12.5\sigma$ ), CO<sub>2</sub> ( $7.3\sigma$ ), a cloud deck ( $7.4\sigma$ ), and unocculted starspots ( $5.8\sigma$ ), alongside hints of Na ( $2.7\sigma$ ). However, we do not detect previously reported CH<sub>4</sub> ( $\log \text{CH}_4 < -6$  to  $2\sigma$ ). We obtain excellent agreement between three independent retrieval codes, which find a sub-solar H<sub>2</sub>O abundance of  $\log \text{H}_2\text{O} \approx -4.4 \pm 0.3$ . However, the inferred CO<sub>2</sub> abundance ( $\log \text{CO}_2 \approx -4.8 \pm 0.4$ ) is significantly super-solar and requires further investigation into its origin. We implement new model considerations designed to fit the local surface gravity of stellar heterogeneities, thereby attempting to capture the effects of magnetic pressure, in addition to their temperature. Finally, we compare our JWST inferences to those from HST/WFC3 and *Spitzer*/IRAC. Our results highlight the exceptional promise of simultaneous planetary atmosphere and stellar heterogeneity constraints in the era of JWST and demonstrate that JWST transmission spectra may warrant more complex treatments of the transit light source effect.

**Keywords:** planets and satellites: atmospheres – planets and satellites: gaseous planets – planets and satellites: individual: HAT-P-18 b – (stars:) starspots – methods: data analysis – techniques: spectroscopic

## 2.1. Introduction

In the works for over two decades, the James Webb Space Telescope (JWST) is finally operational. Astronomers can now count on space instruments with modes designed to study exoplanetary atmospheres. Transmission spectroscopy is a commonly used method to reveal the composition and structure of an atmosphere and, therefore, to enable inferences about a planet’s formation and evolution history. During a transit, part of the starlight is blocked by the planet, whereas some light passes through the planetary atmosphere and can introduce measurable absorption features (Seager & Sasselov, 2000; Brown, 2001). The resulting transmission spectrum can reveal key information regarding the abundance of molecular and atomic species and the presence of clouds and hazes (e.g., Charbonneau et al., 2002; Tinetti et al., 2007; Wakeford & Sing, 2015; Sing et al., 2016).

Astronomers have faced many challenges when conducting atmospheric studies with the Hubble (HST) and *Spitzer* Space Telescopes since neither observatory was designed for exoplanet observations. Numerous technical difficulties, instrument systematics, as well as narrow wavelength range and spectral resolution, have limited atmospheric inferences. For example, observations with the Wide Field Camera 3 (WFC3) instrument aboard HST are

complicated by systematic trends, such as “HST breathing” effects, visit-long slopes, and the “ramp” effect (Wakeford et al., 2016). Nevertheless, the efforts and ingenuity of scientists have led to astonishing discoveries, such as the detection of several chemical species, including water vapour on hot Jupiters (e.g., Tinetti et al., 2007; Tsiaras et al., 2018) and even on a sub-Neptune (e.g., Benneke et al., 2019b), the inference of clouds and hazes in several gas giants (e.g., Wakeford & Sing, 2015; Sing et al., 2016), and the observation of atmospheric escape on hot Neptune-like exoplanets (e.g., Ehrenreich et al., 2015; Spake et al., 2018).

HAT-P-18 b was discovered in 2010 by Hartman et al. (2011) using the Hungarian-made Automated Telescope Network. It is of approximately Saturn mass ( $M = 0.197 M_J$ ), but with an inflated radius ( $R = 0.995 R_J$ ), due to its higher temperature ( $T_{\text{eq}} = 852 \text{ K}$ ) relative to the Solar System giants, which is a consequence of the planet’s comparatively short orbital period ( $P = 5.508 \text{ days}$ ). Ground- and space-based transmission spectroscopy has been performed on this target. Kirk et al. (2017) suggested a high-altitude haze consistent with the detection of Rayleigh scattering and the absence of the sodium absorption feature using the Auxiliary-port CAMera (ACAM) instrument on the William Herschel Telescope (WHT). Tsiaras et al. (2018) detected the presence of water vapour and a grey, opaque cloud deck in HAT-P-18 b’s atmosphere using HST/WFC3, reporting a water abundance of  $\log_{10} \text{H}_2\text{O} = -2.63 \pm 1.18$  and a cloud-top pressure of  $\log_{10} P_{\text{cloud}} [\text{Pa}] = 2.82 \pm 0.91$ . Fu et al. (2022) presented an analysis of the transit observed in the Single Object Slitless Spectroscopy (SOSS) mode (Albert et al., 2023) of the Near Infrared Imager and Slitless Spectrometer (NIRISS) instrument (Doyon et al., 2023) on board the JWST and detected water, hints of methane ( $\Delta \log Z = 3.79$ , or a  $3.2 \sigma$  confidence), as well as excess helium absorption and tail in an otherwise very hazy atmosphere.

HAT-P-18 is an active K dwarf with an effective temperature of 4803 K and a slightly super-solar metallicity ( $[\text{Fe}/\text{H}] = 0.10 \pm 0.08$ ; Hartman et al., 2011). Stellar active regions, such as starspots and faculae, can introduce spectral features in transmission spectra that overlap those of exoplanetary atmospheres. Occulted active regions were often masked when fitting transit models to spectroscopic light curves; however, the impact of the occulted spot on the transmission spectrum is still present despite that (e.g., Oshagh et al., 2014; Bixel et al., 2019). This can also lead to a biased transmission spectrum by impacting not only the transit depth but possibly the mid-transit time, the scaled semi-major axis, and the impact parameter (Barros et al., 2013). Recent studies have moved towards joint inferences of transit and active region properties (e.g., Bixel et al., 2019; Espinoza et al., 2019b). The NASA Study Analysis Group on the effect of stellar contamination on space-based transmission spectroscopy (SAG 21) of the Exoplanet Exploration Program Analysis Group (ExoPAG) recommends performing these joint inferences with future observations instead of masking active region occultations (Rackham et al., 2023).

Unocculted stellar active regions have long been recognized as a significant obstacle to exoplanet transmission spectroscopy. Early HST studies recognized that unocculted cool starspots can cause strong transit depth slopes towards short visible wavelengths (e.g., Pont et al., 2007, 2013; McCullough et al., 2014). Similarly, unocculted hot faculae can imprint a negative slope in transmission spectra (e.g., Rackham et al., 2018; Kirk et al., 2021). The physical origin of this ‘stellar contamination’ is a mismatch between the intensity of the stellar surface sampled by the planet during transit and the average spectrum of the star (including the photosphere, starspots, and faculae). Since the contrast ratio between the spectra of stellar regions at different temperatures increases as shorter wavelengths, this ‘transit light source effect’ (TLSE; Rackham et al., 2018; Barclay et al., 2021) is wavelength-dependent and more significant at visible wavelengths. The most common approach to deal with the TLSE in early studies was to correct the transmission spectrum based on activity monitoring or occulted starspot properties (e.g., Pont et al., 2008; Berta et al., 2011; Sing et al., 2011). Barstow et al. (2015) demonstrated that not accounting for starspots when modelling transmission spectra of giant planets can bias retrieved molecular abundances, while (Rackham et al., 2018) further showed that the TLSE can dominate over absorption features for terrestrial planets. (Moran et al., 2023) provide a recent example of this prediction, finding degenerate interpretations between unocculted starspots and atmospheric H<sub>2</sub>O for JWST observation of a terrestrial exoplanet.

Recent years have seen a renewed focus on incorporating unocculted stellar regions into atmospheric retrieval codes, allowing *simultaneous* inferences of stellar and atmospheric properties. Pinhas et al. (2018) developed a transmission spectrum retrieval framework to jointly fit a single population of unocculted stellar heterogeneities and a planetary atmosphere. Subsequent retrieval studies have explored the fidelity of TLSE retrieval assumptions (e.g., Iyer & Line, 2020; Thompson et al., 2023; Rackham & de Wit, 2023) and applied these joint retrievals to interpret observations from HST and *Spitzer* (e.g., Bruno et al., 2020; Rathcke et al., 2021), ground-based telescopes (e.g. Bixel et al., 2019; Jiang et al., 2021; Kirk et al., 2021), and JWST (Moran et al., 2023). However, the SAG 21 report (Rackham et al., 2023) notes that there is considerable scope to improve the realism and complexity of retrieval prescriptions for unocculted stellar active regions.

In this work, we aim to disentangle stellar and planetary atmosphere signals by including stellar heterogeneities in transit fits and atmospheric retrievals. We present and compare two independent atmospheric reanalyses of HAT-P-18 b, one using JWST NIRISS/SOSS ERO transit observation and another combining transit observations from HST/WFC3 and the Infrared Array Camera (IRAC) of *Spitzer*. We describe the observations and data reduction approach in Section 2.2 and detail our JWST NIRISS/SOSS light curve fitting and occulted starspot analysis in Section 2.3. Section 2.4 describes our joint stellar heterogeneity and

**Table 2.1** – Parameters of the HAT-P-18 planetary system used in this analysis

Parameters	HAT-P-18	Units
<b>Stellar parameters</b>		
Spectral type	K2V	
Stellar radius	0.75	$R_{\odot}$
Stellar mass	$0.770 \pm 0.031$	$M_{\odot}$
Metallicity	$0.10 \pm 0.08$	[Fe/H]
Stellar surface gravity	$4.57 \pm 0.04$	$\log_{10} \text{ cm/s}^2$
Effective temperature	$4803 \pm 80$	K
<b>Planetary and transit parameters</b>		
Planet radius	$0.995 \pm 0.052$	$R_J$
Planet mass	$0.197 \pm 0.013$	$M_J$
Orbital period	$5.508023 \pm 0.000006$	day
Eccentricity	$0.084 \pm 0.048$	
Argument of Periastron	$120.0 \pm 56.0$	deg
Impact parameter	$0.324^{+0.055}_{-0.078}$	
Scaled semi-major axis	$16.04 \pm 0.75$	
Transit duration	$0.1131 \pm 0.0009$	day
Area ratio $(R_p/R_*)^2$	$0.1365 \pm 0.0015$	
Equilibrium temperature	852	K

*Note:* Parameters from Hartman et al., 2011

atmospheric retrieval method and presents results from three independent retrieval codes. We summarize and discuss our results in Section 2.5 and conclude in Section 2.6.

## 2.2. Observations & Data Reduction

The scientific legacy of HST and *Spitzer* is considerable, particularly for exoplanet studies; JWST will, in many ways, build on this legacy. In this work, we present transit observations with JWST and its predecessors, HST and *Spitzer*, to show the potential of NIRISS/SOSS to characterize exoplanetary atmospheres and to cope with challenges such as stellar contamination.

### 2.2.1. Observations

2.2.1.1. JWST NIRISS/SOSS. HAT-P-18 b was observed in transit using the SOSS mode of the NIRISS instrument (Albert et al., 2023; Doyon et al., 2023) on board JWST as part of the Early Release Observations (ERO) program (PI: Klaus M. Pontoppidan; Pontoppidan et al., 2022). The time series observations (TSO) started on June 13<sup>th</sup>, 2022, at 04:36:50.861 UTC and lasted 7.15 hours, which covered the 2.7 hours transit as well as some baseline before and after the transit. The GR700XD grism and the CLEAR filter were used, along with the SUBSTRIP256 subarray, which captures both diffraction orders 1 and 2.

There are 469 integrations, each consisting of 9 groups and lasting 54.94 seconds. This TSO was previously published by Fu et al. (2022), the major findings of which are summarized in Section 2.1.

2.2.1.2. HST/WFC3 + *Spitzer*/IRAC. Transit observations of HAT-P-18 b were obtained using HST/WFC3 with the G141 grism in the spatial scan mode. These come from two visits, consisting of five orbits each, made as part of the Cycle 23 HST General Observer campaign (PI: Drake Deming) in February 2016 and January 2017 (Deming et al., 2015). These observations spanned the wavelength range from 1.1 to 1.7  $\mu\text{m}$ . The raw light curves show characteristic, non-linear systematics because of thermal effects induced by the telescope’s 96-minute orbit (Foster et al., 1995). This leads us to follow standard practice (e.g., Benneke et al., 2019b) and discard from our analysis the first orbit as well as the first two measurements in each subsequent orbit. This leaves one orbit on either side of the transit and two orbits corresponding to the transit itself, including significant portions of the ingress and egress. These HST transits were previously published by Tsiaras et al. (2018).

Transit observations with *Spitzer* come from two visits in 2012 and 2014 using the IRAC instrument in the 3.6 and 4.5  $\mu\text{m}$  channels (PI: Jean-Michel Désert and Heather A. Knutson). The data were obtained from the Spitzer Heritage Archive.

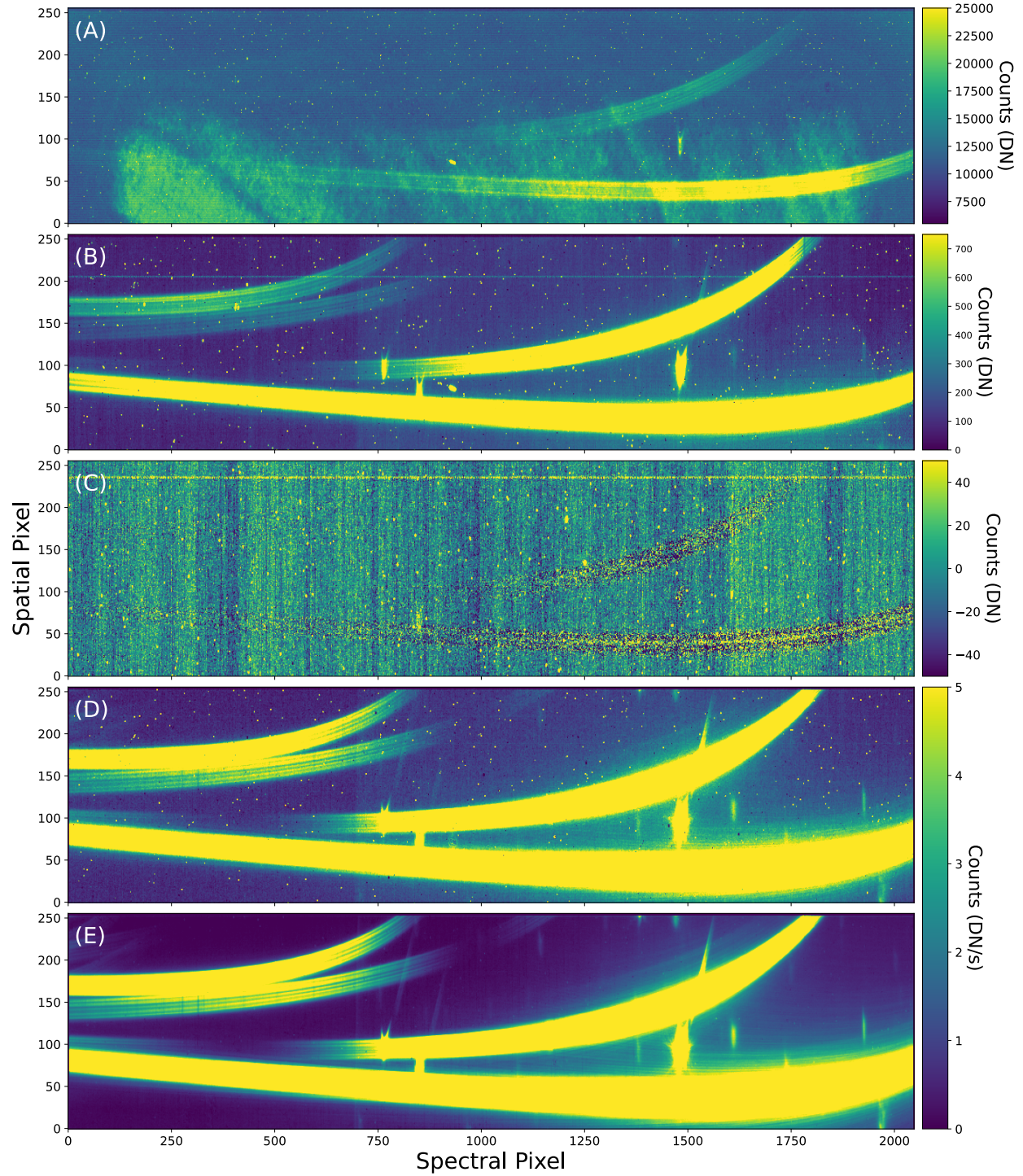
## 2.2.2. Data Reduction

2.2.2.1. JWST NIRISS/SOSS Data Reduction. We reduced the NIRISS/SOSS TSO using the `supreme-SPOON` pipeline (Feinstein et al., 2023; Coulombe et al., 2023; Radica et al., 2023), starting from the raw, uncalibrated files downloaded from the Mikulski Archive for Space Telescopes (MAST). Some steps in the `supreme-SPOON` pipeline are handled by the official JWST pipeline. We follow a nearly identical procedure for the reduction as was presented in Feinstein et al. (2023) and Radica et al. (2023): we first process the TSO through `supreme-SPOON` Stage 1, which performs the detector level calibrations. This includes, in particular, the subtraction of the column-correlated  $1/f$  noise, during which we ensure to properly mask several bright zeroth order contaminants of background field stars, and the ramp fitting to convert from 3D “ramp” to 2D “slope” images.

Stage 2 of `supreme-SPOON` performs further reductions on the slope-level products, including the background subtraction, for which we use the SOSS SUBSTRIP256 background model provided by the Space Telescope Science Institute (STScI)<sup>1</sup>, and tracing of the target orders to define the extraction boxes as well as the stability of the target trace (changes in  $x$  and/or  $y$  position, changes in morphology, etc.) over the course of the TSO. For further details on these steps, please see Radica et al. (2023). We note, though, that using a constant

---

1. <https://jwst-docs.stsci.edu/jwst-calibration-pipeline-caveats/jwst-time-series-observations-pipeline-caveats/niriss-time-series-observation-pipeline-caveats#NIRISSTimeSeriesObservationPipelineCaveats-SOSSskybackground>



**Figure 2.1** – Data products at different stages of the reduction process. **(A)**: A raw, uncalibrated data frame in data numbers (DN). **(B)**: Data frame after superbias subtraction and reference pixel correction. **(C)**:  $1/f$  noise. **(D)**: After ramp fitting and flat field correction. **(E)**: Final calibrated data product after background subtraction and bad pixel correction.



scaling of the STScI background model, such as in Radica et al. (2023), did not perfectly remove the background step. We, therefore, separately scaled the STScI model blueward and redward of the step (e.g., Lim et al. submitted). We find values for the best-fitting background scaling to be 0.4384 and 0.4080 for pre- and post-jump, respectively.

We extract the stellar spectra using the **ATOCA** algorithm (Darveau-Bernier et al., 2022) using a **specprofile** reference file created specifically for these observations using the **APPLESOSS** code (Radica et al., 2022). **ATOCA** explicitly takes into account the overlap between the first and second orders of the target spectrum on the detector during the extraction, though the expected dilution introduced from this overlap is predicted to be near-negligible for relative measurements such as exoplanet transmission spectroscopy (Darveau-Bernier et al., 2022; Radica et al., 2022).

We use the updated **APPLESOSS v2.0.0** in this work. The initial version of **APPLESOSS** presented in Radica et al. (2022) used the **WebbPSF** package (Perrin et al., 2014) to simulate the extended wings of the SOSS PSF (Point Spread Function). However, due to concerns that the simulated PSFs underpredict the SOSS wings<sup>2</sup>, we update the **APPLESOSS** framework to use the wings of order 1 profiles bluewards of  $\sim 1.1 \mu\text{m}$  where there is no contribution from order 2 on the detector. We note, however, that the transmission spectrum is unchanged whether simulated or empirical wings are used, as the strength of the self-dilution is significantly smaller than the transit depth precision. Finally, after the extraction, we clip any data points which deviate by more than  $5\sigma$  from their neighbours in the time direction;  $< 2\%$  of points are rejected in this way. We find no significant deviation in the target trace position with the positions included in the **spectrace** reference file<sup>3</sup>, and we, therefore, use the default SOSS wavelength solution. A summary of the major reduction steps is shown in Figure 2.1.

HAT-P-18 has a co-moving white dwarf companion separated by only  $\sim 2.66''$  at a position angle of  $\sim 186^\circ$ , as revealed by GAIA astrometry (Mugrauer & Michel, 2021)<sup>4</sup>. Given the aperture position angle of the SOSS observation ( $252.09^\circ$ ), the spectral trace of this companion is offset by  $(-9, +40)$  pixels relative to the trace of HAT-P-18, i.e., mostly out of the extraction aperture throughout order 1 and for all wavelengths  $< 0.85 \mu\text{m}$  at order 2. Combined with its measured contrast of 8 mag at  $1.4 \mu\text{m}$  (Mugrauer & Michel, 2021), it has a negligible effect on the flux extracted for HAT-P-18. No particular action was thus taken to deal with it.

2.2.2.2. HST/WFC3 + *Spitzer*/IRAC Data Reduction & Light Curve Fitting. Following standard procedure for HST/WFC3 observations (e.g., Deming et al., 2013; Benneke

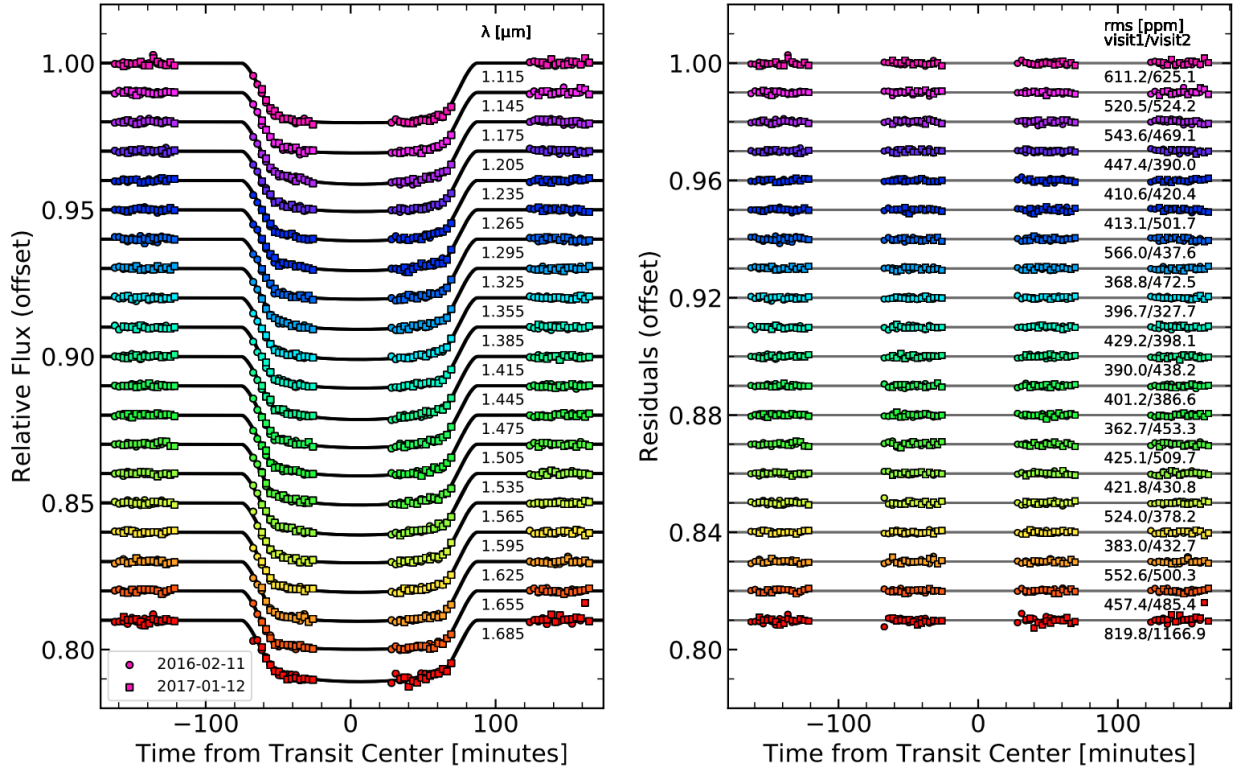
---

2. JWST Technical Report JWST-STScI-008270

3. **spectrace** reference file `jwst_niriss_spectrace_0023.fits` was used in this work.

4. This companion was also previously reported as a candidate by Ginski et al. (2016) based on lucky imaging.

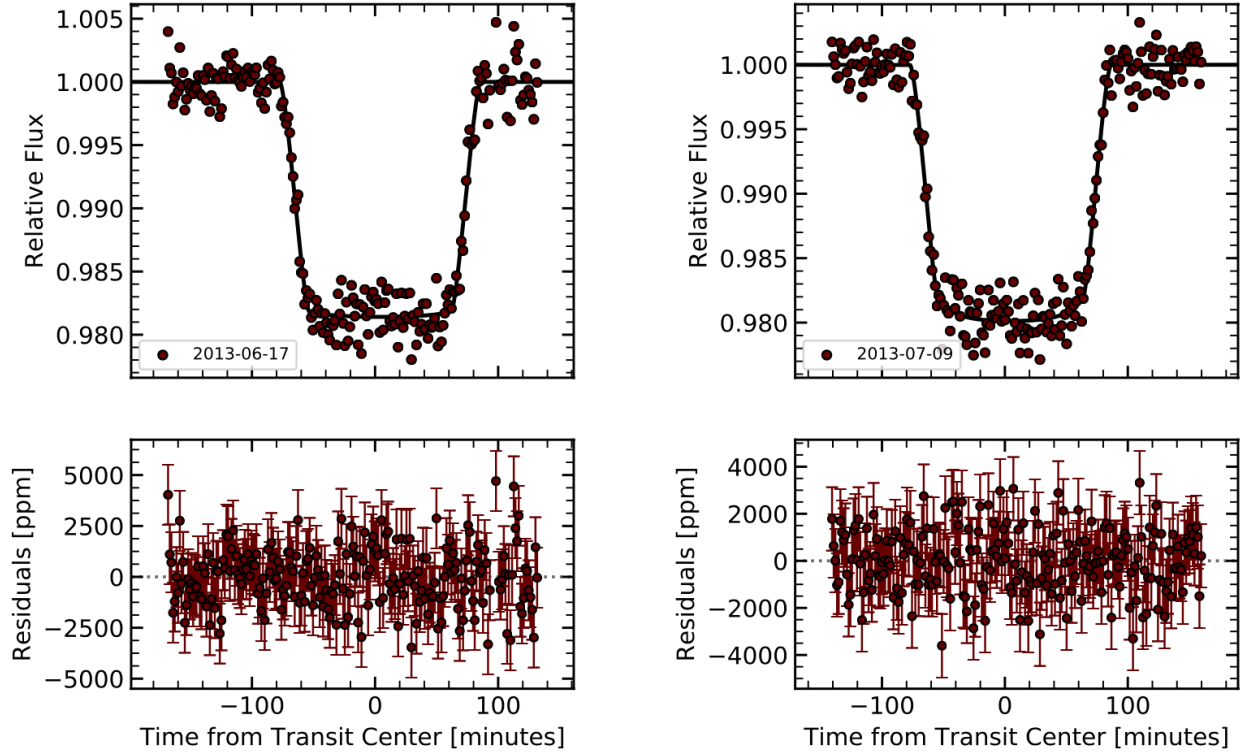




**Figure 2.2** – HST/WFC3 binned spectrophotometric light curves, along with the best-fitting transit models overplotted (black) for both visits. Light curves are arbitrarily offset for clarity. *Right*: Residuals from the different light curve fits with the associated root-mean-square (RMS) scatter.

et al., 2019b), we perform the necessary data reduction and light curve fitting by using the modular Exoplanet Transit Eclipses and Phase curves (ExoTEP) framework (Benneke et al., 2017, 2019a), which employs the `batman` transit light curve model (Kreidberg, 2015). Using a Markov chain Monte Carlo (MCMC) method with the `emcee` package (Foreman-Mackey et al., 2013), ExoTEP jointly fits the transit and systematics models for the two visits along with photometric noise parameters. We construct spectrophotometric light curves by spectrally binning at 30 nm intervals (Kreidberg et al., 2014) the extracted flux for each visit. This binning was chosen because it offered the best trade-off between the number of data versus error bar size, as compared to 10 and 60 nm bin widths. We follow Benneke et al. (2019b) for the procedure of the white and spectrophotometric light curve fits. The latter for both visits are shown in Figure 2.2, whereas the best-fitting values from the white light curve fit are quoted in Table 2.6. The resulting HST/WFC3 transmission spectrum is displayed in Figure 2.5.

We follow standard procedure for *Spitzer*/IRAC image processing (e.g., Benneke et al., 2019b). As was done for the HST data, we employ ExoTEP to reduce the data further and fit the *Spitzer* light curves. After correcting for the *Spitzer*-specific systematics, we obtain a



**Figure 2.3** – *Spitzer*/IRAC light curves. *Top*: Best-fitting transit models (black), overlaid with the systematics-corrected data (red circles), showing channel 1 ( $3.6\ \mu\text{m}$ ) and channel 2 ( $4.5\ \mu\text{m}$ ) in the left and right panel, respectively. *Bottom*: Residuals from the light curve fits.

final light curve for each of the two channels as displayed in Figure 2.3. We used 80-second bins for the time axis due to the relatively high cadence of the *Spitzer* data. Compared to the HST spectrophotometric light curves, we find that the scatter is higher, resulting in larger errors for the *Spitzer* data points in the combined transmission spectrum. We kept the transit depths from *Spitzer*/IRAC in our transmission spectrum in order to better constrain our atmospheric retrievals.

## 2.3. JWST NIRISS/SOSS Light Curve Fitting & Occulted Starspot Analysis

### 2.3.1. Light Curve Fitting with Spot-Crossing Masked

For the SOSS data, we construct separate white light curves for orders 1 and 2 by summing the flux from all wavelengths in order 1 ( $0.85\text{--}2.8\ \mu\text{m}$ ) and from  $0.6\text{--}0.85\ \mu\text{m}$  in order 2. We then fit a transit model to each white light curve using the *juliet* package (Espinoza et al., 2019a). We fix the orbital period to 5.5080230 d, the eccentricity to 0.084,

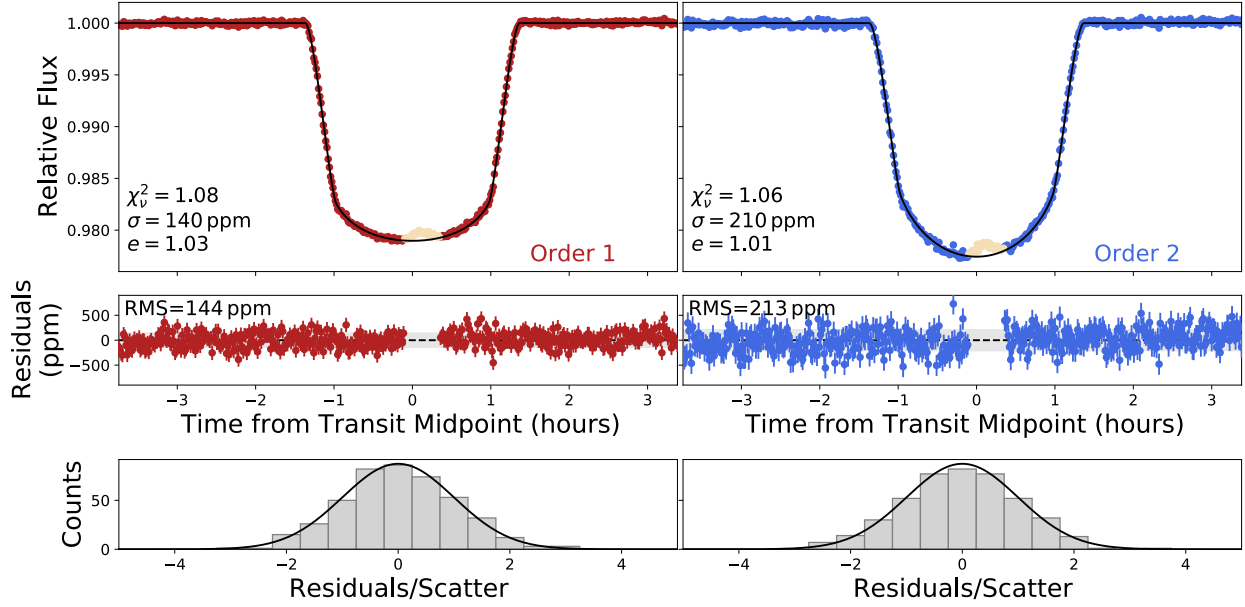
and the argument of periastron to  $120^\circ$  (Hartman et al., 2011; all their values used in this paper are listed in Table 2.1), and put wide, uninformative priors on the time of transit centre,  $T_0$ , the impact parameter,  $b$ , the scaled orbital semi-major axis,  $a/R_*$ , and the scaled planet radius,  $R_p/R_*$ . We fit two parameters of the quadratic limb darkening law following the parameterization of Kipping (2013), a scalar jitter term,  $\sigma$ , which replaces the flux errors reported by the reduction pipeline, and finally, a term to fix the zero point of the transit baseline. Unlike previous SOSS TSOs (Feinstein et al., 2023; Radica et al., 2023), we find that no detrending is necessary, as the white light curves for both orders are best fit by a transit model with no additional systematics models:  $\Delta \log Z = 26.1$ , or a  $>5\sigma$  preference by the Benneke & Seager (2013) scale.

There is a spot-crossing event clearly visible just after the transit mid-point. Here we do not include a model of this occulted starspot and instead mask the integrations associated with the spot-crossing (integrations 240 – 270). Therefore, we fit eight parameters for each order. The reduced Chi-squared statistic for the fits is  $\chi^2_\nu = 1.08$  for order 1 and 1.06 for order 2. The best-fitting transit models for orders 1 and 2 are overplotted in Figure 2.4.

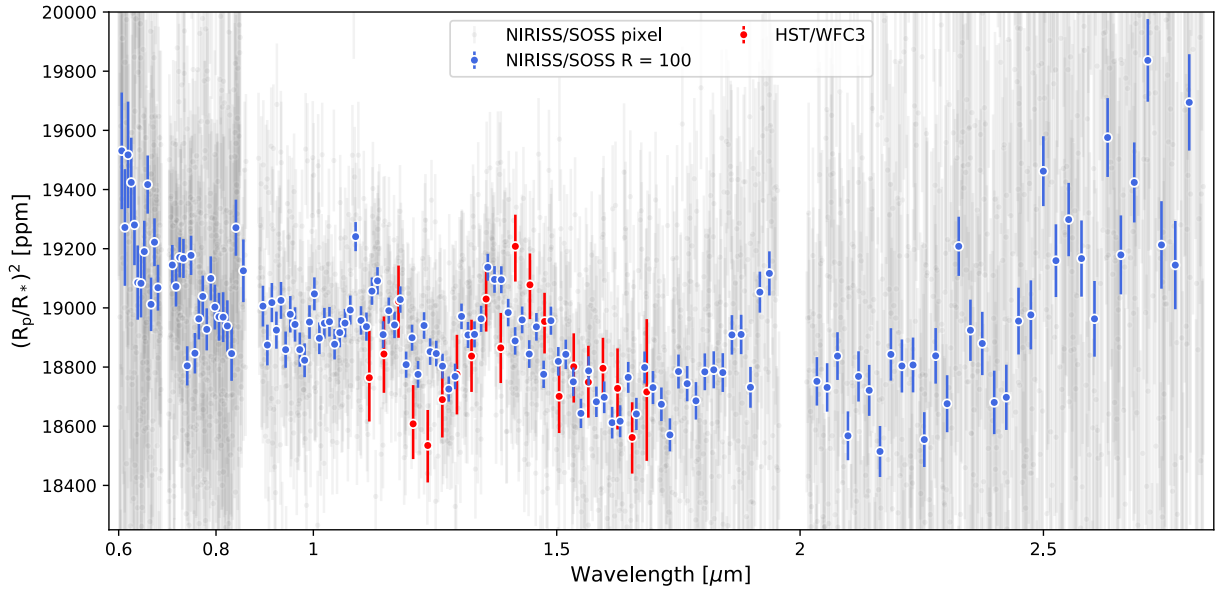
We then proceed to fit the spectrophotometric light curves at the pixel level — that is, we fit one light curve per pixel column on the detector. This results in 2038 light curves for order 1 and 567 for order 2. For these fits, we fix the orbital parameters and the transit baseline’s zero point to their best-fitting values from the order 1 white light curve fit because of the better signal-to-noise (S/N). We leave only the scaled planet radius, limb-darkening parameters, and jitter term free. We put Gaussian priors on the limb-darkening parameters based on calculations from the ExoTiC-LD package (Laginja & Wakeford, 2020; Wakeford & Grant, 2022) using the 3D stagger grid (Magic et al., 2015). The widths of the Gaussian priors are set to 0.1 (e.g., Pontoppidan et al., 2022). We again mask the integrations associated with the spot-crossing in each fit. The resulting transmission spectrum is displayed in Figure 2.5.

Unlike in Radica et al. (2023), we are unable to post-process our transmission spectrum to correct for the diluting effects of field star contamination. There are several undispersed order 0 contaminants clearly visible in the SOSS frame; however, they are either simply too bright to allow for the reconstruction of the target trace or are time-varying. We, therefore, mask the affected regions of the transmission spectrum as was done in Feinstein et al. (2023) and Fu et al. (2022).

We also produce a transmission spectrum using an independent reduction pipeline, NAMELESS (Feinstein et al., 2023; Coulombe et al., 2023; Radica et al., 2023), as shown in Figure 2.16, to verify the self-consistency of our results (see Appendix 2.7.1). The best-fitting transit parameters from NIRISS/SOSS white light curve fits for both reduction pipelines are shown in Table 2.6.



**Figure 2.4** – *Top*: NIRISS/SOSS white light curves for order 1 (left) and order 2 (right) with the best-fitting transit model overplotted in black. The fit statistics are shown for each order:  $\chi^2_{\nu}$ ; the reduced Chi-squared,  $\sigma$ ; the average error bar, and  $e$ ; the error multiple to obtain a  $\chi^2_{\nu}$  equal to unity. *Middle*: Residuals to the transit fits. The RMS scatter in the residuals is indicated for each order. *Bottom*: Histogram of residuals.



**Figure 2.5** – Transmission spectra of HAT-P-18 b; one with JWST NIRISS/SOSS at pixel resolution (faded grey) and binned to a resolving power of  $R = 100$  (blue) and another with HST/WFC3 (red). Note that no offset was applied to the HST spectrum.

### 2.3.2. Occulted Starspot Method

We also perform a second light curve fit, enabling a joint inference of the starspot and planet properties to model the spot and study its impact on the transmission spectrum. To this end, we first compute a single broadband light curve by summing the flux from wavelengths  $0.65\text{--}0.85\ \mu\text{m}$  of order 2 together with wavelengths  $0.85\text{--}1.5\ \mu\text{m}$  of order 1. We exclude wavelengths bluewards of  $0.65\ \mu\text{m}$  to maximize the S/N and wavelengths redwards of  $1.5\ \mu\text{m}$  because the effect of spot crossings is stronger at shorter wavelengths where the spot contrast with respect to the stellar photosphere is larger. We fit a transit model with a spot-crossing event using `spotrod` (Béky et al., 2014), which we have implemented into the `juliet` package (Espinoza et al., 2019a). We fix the period, the eccentricity and the argument of periastron to the Hartman et al. (2011) values and fit the mid-transit time, the impact parameter, the scaled semi-major axis, the scaled planet radius, the two parameters of the quadratic limb darkening law, and the jitter term with wide, uninformative priors. We also fit the zero point of the transit baseline, though the best-fitting value is again very close to zero. We fit four additional parameters to model the starspot: the  $x$ - and  $y$ -positions of the spot, its radius, and its spot-to-stellar flux contrast. The positions and the radius of the spot are in stellar radii units. The centre of the star is at  $(0, 0)$ . We use uniform priors ranging from 0 to 1. We employ `dynesty` (Speagle, 2020) to sample the parameter space with 5000 live points. The reduced Chi-squared statistic for the fit with the highest likelihood is  $\chi_\nu = 1.08$ . There is strong evidence ( $\Delta \log Z = 95.7$ , or a  $> 5\sigma$  preference) for a transit model with an occulted spot. This best-fitting transit model is overplotted in the top panel of Figure 2.6, and a cartoon of the spot-crossing event is shown in the bottom panel. The choice of wavelength range ( $0.65\text{--}1.5\ \mu\text{m}$ ) results in best-fitting values that are more precise and overall consistent at  $1\sigma$  to the best-fitting values with the entire wavelength ranges of order 1 and 2.

We then fit the spectrophotometric light curves at a resolving power of  $R = 100$ , fixing the orbital parameters ( $T_0$ ,  $b$ ,  $a/R^*$ ), as well as the spot positions and radius from the above broadband light curve fit. The  $y$ -position of the spot is not well constrained, as shown in the corner plot in Figure 2.17, so we use the set of parameters with the highest likelihood instead of the medians of the posteriors from the broadband light curve fit, to ensure that the parameters are self-consistent. We fit the scaled planet radius, the limb-darkening parameters, the spot contrast and the jitter coefficient with the priors described above. The spectrophotometric light curves for 14 bins with their best-fitting transit models are shown in Figure 2.7 for the highest likelihood model. The spot contrast is correlated with the  $y$ -position (see Figure 2.17) because there is a degeneracy between the radius and the contrast of the spot given the strong correlation between the spot temperature and filling

factor<sup>5</sup> (Bruno et al., 2022). To capture the uncertainties coming from the degeneracies in the spot  $y$ -position, size and contrast, we repeat the fit of the spectrophotometric light curves 50 times by fixing the same parameters ( $T_0$ ,  $b$ ,  $a/R^*$ , spot positions and radius) to 50 random sets taken from the posterior samples of the broadband light curve fit. We draw the 50 sets from the 68 % of the weighted samples with the highest likelihoods.

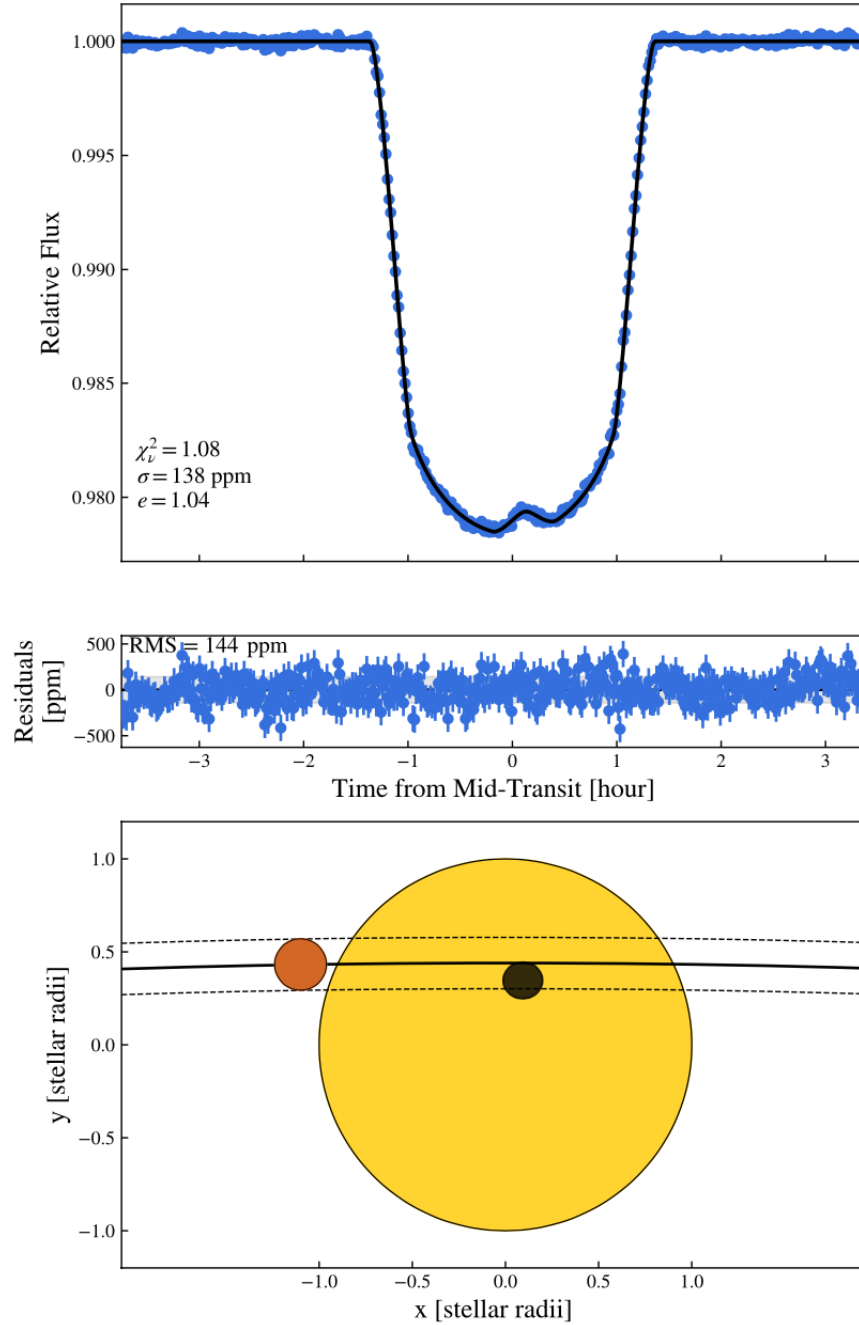
We next constrain the temperature of the occulted spot by fitting PHOENIX stellar atmosphere model spectra (Husser et al., 2013) to the spot contrast spectrum resulting from the spectrophotometric light curves fits. Starspots’ spectra are thought to be represented by stellar models with lower temperatures and 0.5–1 dex lower  $\log g$  than the host star. The increased magnetic pressure in active features decreases the gas pressure (Solanki, 2003; Bruno et al., 2022), which is akin to a stellar model with a lower surface gravity. In fitting for the spot temperature, we thus also left the spot surface gravity to vary as a free parameter. For the spot, we use stellar model spectra with temperatures from 4000 to 5000 K, logarithmic surface gravities from 1 to 5 dex and a fixed metallicity of 0.1 from Hartman et al. (2011). We interpolated these spectra in temperature and  $\log g$  as needed during the fitting process. For the star, we use a stellar model spectrum with the temperature,  $\log g$  and metallicity fixed to the corresponding values from Hartman et al. (2011). The model spot contrast spectrum is then simply the ratio of the model spot spectrum to the model star spectrum. We fit the temperature of the spot and the  $\log g$  with wide, uninformative priors using the `emcee` MCMC package (Foreman-Mackey et al., 2013).

### 2.3.3. Inferred Occulted Starspot Properties on HAT-P-18

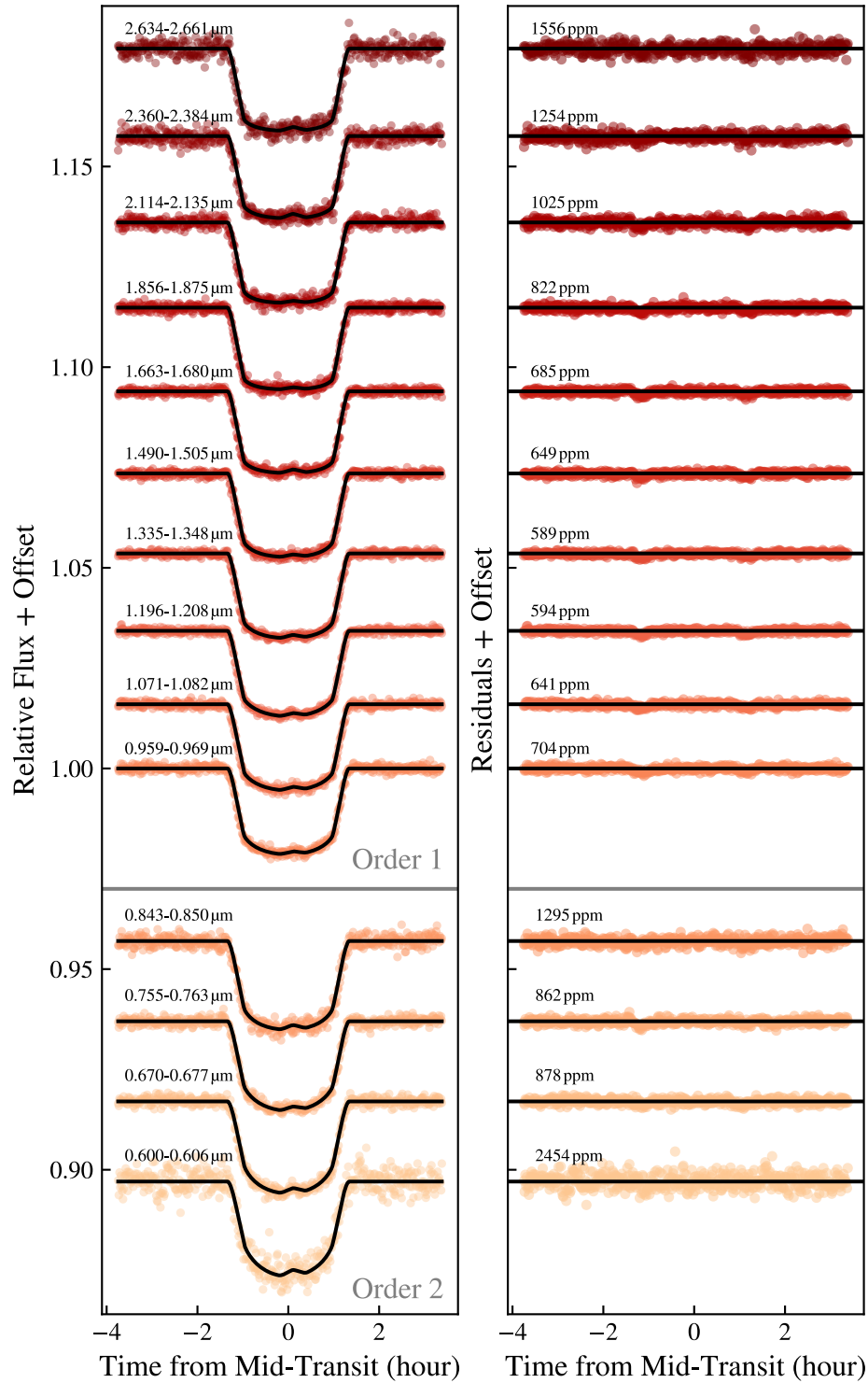
From the aforementioned process, we obtained 51 starspot contrast spectra from the 51 spectrophotometric fits performed: one from the highest likelihood values and 50 with random draws from the broadband light curve fit. Each model has its own set of parameters (i.e.,  $T_0$ ,  $b$ ,  $a/R^*$ , spot positions and radius). The resulting density of spot contrast spectra is shown in Fig. 2.8. By inspecting the individual contrast spectra, we see that 28 of the 50 random fitting models (56 %) have a retrieved contrast spectrum within  $1\sigma$  of the one retrieved with the highest likelihood set of parameters (blue model in Figure 2.8). We lump these solutions together as the “most likely” one. The mean and standard deviation of the spot  $x$ - and  $y$ -position, radius, temperature, and the model  $\log g$  are given in Table 2.2 for this group of solutions. This corresponds to a spot radius of  $0.116 \pm 0.014 R_*$ , a temperature  $\Delta T = -93 \pm 15$  K colder than the star (or  $T_{\text{spot}} = 4710 \pm 15$  K) and a lower  $\log g$  by  $1.16 \pm 0.19$  dex. The retrieved  $\log g$  for the starspot model is consistent with Bruno et al. (2022) expectation.

---

5. The filling factor corresponds to the fraction of the planetary disc occulting the active region.



**Figure 2.6** – Modelling of the spot-crossing event. *Top*: NIRISS/SOSS broadband light curve (blue), along with the best-fitting model overplotted (black) and the fit statistics listed in the bottom left corner ( $\chi^2_\nu$ ; the reduced Chi-squared,  $\sigma$ ; the average error bar, and  $e$ ; the error multiple needed to obtain a  $\chi^2_\nu$  equal to unity). *Middle*: Residuals to the transit fit with the RMS scatter. *Bottom*: Physical representation of the maximum likelihood solution for the occulted starspot (black circle) on the star (yellow circle), along with the transit motion in black (dashed lines representing the transit chord) of the planet (orange circle).



**Figure 2.7** – JWST NIRISS/SOSS binned spectrophotometric light curves, along with the best-fitting transit models using `spotrod` (black). *Left*: Normalized spectrophotometric light curves at a resolving power of  $R = 100$ . *Right*: Associated residuals from the light curve fit in each bin with the RMS scatter indicated.



**Table 2.2** – Families of solutions for the occulted starspot

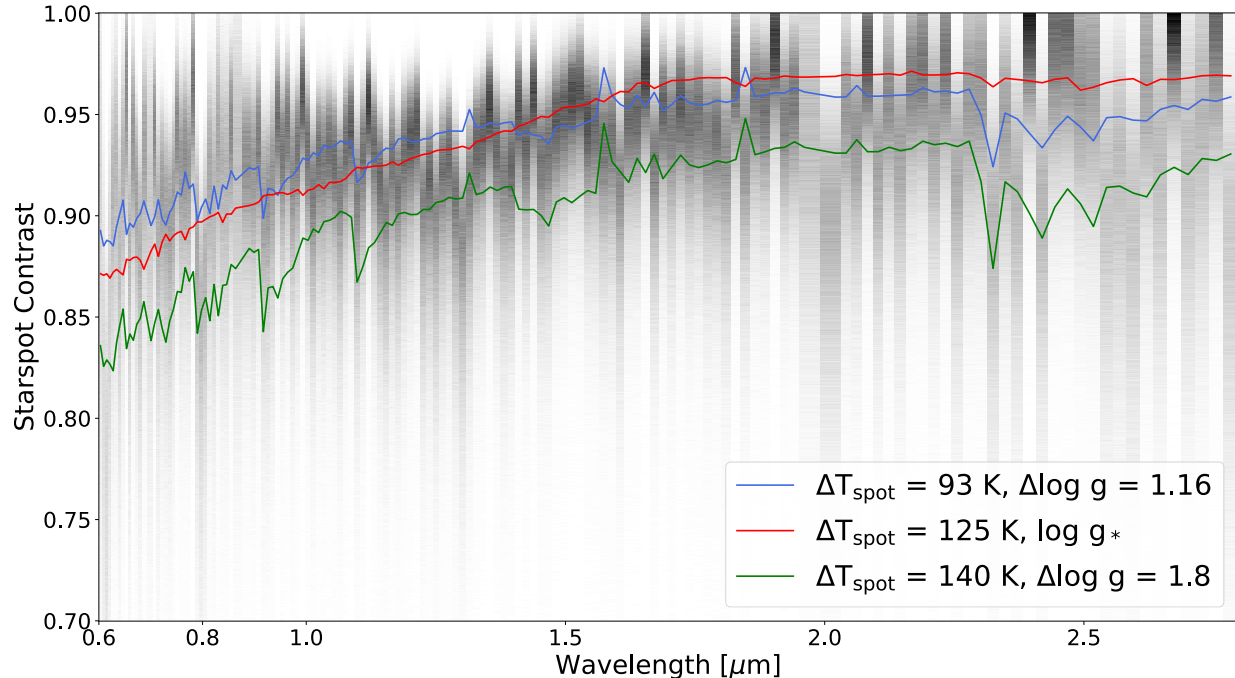
Solutions	Fraction of models	x-position [R <sub>*</sub> ]	y-position [R <sub>*</sub> ]	size [R <sub>*</sub> ]	ΔT [K]	Δlog g [log <sub>10</sub> cm/s <sup>2</sup> ]
<b>Most likely</b>	0.56	0.090 ± 0.005	0.42 ± 0.05	0.116 ± 0.014	93 ± 15	1.16 ± 0.19
<b>Colder spot</b>						
Similar position	0.18	0.092 ± 0.003	0.41 ± 0.07	0.090 ± 0.004	140 ± 20	1.8 ± 0.2
Higher position	0.14	0.088 ± 0.004	0.53 ± 0.03	0.125 ± 0.018	180 ± 50	2.1 ± 0.4
Lower position	0.12	0.091 ± 0.005	0.24 ± 0.05	0.14 ± 0.03	190 ± 80	2.2 ± 0.6

Among the remaining contrast spectra, those not within  $1\sigma$  of the one with the highest likelihood, we can identify three other broad families of solutions corresponding to a colder spot because of a smaller filling factor; see Table 2.2. The transmission spectra for these four families of solutions do not significantly change (they are consistent at the  $1\sigma$  level) from the transmission spectrum obtained with the spot occultation features masked (as done in Section 2.3.1). This is expected for a spot of that size and temperature, as the TLSE from occulting such a spot results only in a small slope toward bluer wavelengths in the transmission spectrum, as shown in Figure 2.18. This effect, estimated to be of the order of 10 to 20 ppm from Equation 2.4.4 in Section 2.4, is smaller than our transit depth uncertainties.

## 2.4. Retrieval Analysis

We now present the inferences from our retrieval analysis of HAT-P-18 b’s transmission spectrum with NIRISS/SOSS (from Section 2.3.1). Our retrievals jointly model the influence of the planetary atmosphere and unocculted stellar heterogeneities on the transmission spectrum and thus yield simultaneous constraints. We conducted this analysis with three independent retrieval codes to ensure robust results.

In what follows, we first describe our approach for joint retrievals of a planetary atmosphere and stellar contamination. We then describe the setup of our three retrieval codes before presenting our resulting constraints on HAT-P-18 b’s atmosphere and unocculted stellar active regions. Finally, we compare retrieval results from our HST + *Spitzer* transmission spectrum to those yielded from NIRISS/SOSS.



**Figure 2.8** – Density of contrast spectra from the 50 models fit, along with the most likely model in blue and a colder solution model in green (the one with a similar spot position). The model in red represents the best-fitting model to the highest likelihood contrast spectrum if we only fit for the spot temperature, fixing the surface gravity to the stellar value. The Chi-squared statistic for this fit is  $\chi^2 = 193$  instead of  $\chi^2 = 156$  when the spot model’s surface gravity is also fit.

### 2.4.1. A Joint Planetary Atmosphere and Stellar Contamination Retrieval Method

The influence of active stellar regions on exoplanet transmission spectra — the *transit light source effect* (e.g. Rackham et al., 2018) — can be modelled simultaneously with the planetary atmosphere in retrievals. This has the advantage of yielding joint constraints on the planetary atmosphere and unocculted stellar heterogeneities while also propagating uncertainties from the star into the derived atmospheric constraints (see Rackham et al., 2023, for a review). Several retrieval studies have included prescriptions for unocculted starspots and/or faculae (e.g., Pinhas et al., 2018; Bixel et al., 2019; Iyer & Line, 2020; Rathcke et al., 2021; Jiang et al., 2021; Rackham & de Wit, 2023; Thompson et al., 2023), with the most common being a three-parameter model that fits for the temperature and covering fraction of a single heterogeneity (Pinhas et al., 2018). While these treatments have generally sufficed for *Hubble* and ground-based data, the exceptional data quality and wavelength coverage of JWST motivates the consideration of more complex stellar contamination models.

We investigate a range of unocculted stellar heterogeneity prescriptions during our HAT-P-18 b retrievals. Our goal is to determine the appropriate level of starspot and/or faculae model complexity required to interpret the JWST/NIRISS transmission spectrum of HAT-P-18 b while also informing future JWST retrieval studies of hot Jupiters. We begin by summarizing the equations underlying the transit light source effect.

2.4.1.1. The Transit Light Source Effect. The transmission spectrum of an exoplanet transiting a star with a heterogeneous stellar surface can be written as (MacDonald & Lewis, 2022)

$$\Delta_\lambda = \delta_{\lambda, \text{atm}} \epsilon_{\lambda, \text{het}} \psi_{\lambda, \text{night}} \quad (2.4.1)$$

where  $\Delta_\lambda$  is the observed transmission spectrum,  $\delta_{\lambda, \text{atm}}$  is the transmission spectrum from the planetary atmosphere,  $\epsilon_{\lambda, \text{het}}$  is the wavelength-dependent “stellar contamination factor” from a heterogeneous stellar surface, and  $\psi_{\lambda, \text{night}}$  accounts for thermal emission from the planetary nightside (we assume this final term negligibly deviates from unity for HAT-P-18 b). For a planetary atmosphere with properties varying only with altitude (the 1D assumption),  $\delta_{\lambda, \text{atm}}$  is given by

$$\delta_{\lambda, \text{atm}} = \frac{R_{\text{p, top}}^2 - 2 \int_0^{R_{\text{p, top}}} b e^{-\tau_{\lambda, \text{slant}}(b)} db}{R_*^2} \quad (2.4.2)$$

where  $R_{\text{p, top}}$  is the planetary radius at the top of the modelled atmosphere,  $b$  is the ray impact parameter,  $R_*$  is the stellar radius, and  $\tau_{\lambda, \text{slant}}$  is the slant optical depth. For a stellar surface with  $N_{\text{het}}$  unocculted heterogeneous active regions (e.g., spots or faculae), the stellar contamination factor,  $\epsilon_{\lambda, \text{het}}$ , can be expressed as

$$\epsilon_{\lambda, \text{het}} = \frac{1}{1 - \sum_{i=1}^{N_{\text{het}}} f_{\text{het}, i} \left( 1 - \frac{I_{\lambda, \text{het}, i}}{I_{\lambda, \text{phot}}} \right)} \quad (2.4.3)$$

where  $f_{\text{het}, i}$  is the fractional stellar disc coverage of the  $i^{\text{th}}$  heterogeneous region, with corresponding specific intensity  $I_{\lambda, \text{het}, i}$ , while  $I_{\lambda, \text{phot}}$  is the specific intensity of the stellar photosphere. Equation 2.4.3 demonstrates that the stellar contamination factor deviates from unity when a heterogeneity possesses a different intensity from the photosphere. In general,  $I_{\lambda, \text{het}, i}$  is shorthand for  $I_{\lambda, \text{het}, i}([\text{Fe}/\text{H}]_i, \log g_i, T_i)$ , where  $[\text{Fe}/\text{H}]_i$  is the local metallicity of the heterogeneity,  $\log g_i$  is the local log surface gravity, and  $T_i$  is the heterogeneity temperature.

Most retrieval studies consider a single population of unocculted heterogeneities with a temperature different from that of the photosphere (but with the same metallicity and surface gravity). Given these assumptions, the stellar contamination factor is given by (e.g.,

Rackham et al., 2018; Pinhas et al., 2018)

$$\epsilon_{\lambda, \text{het}} = \frac{1}{1 - f_{\text{het}} \left( 1 - \frac{I_{\lambda, \text{het}}(T_{\text{het}})}{I_{\lambda, \text{phot}}(T_{\text{phot}})} \right)} \quad (2.4.4)$$

where the three free parameters are the heterogeneity coverage fraction,  $f_{\text{het}}$ , the heterogeneity temperature,  $T_{\text{het}}$ , and the photosphere temperature,  $T_{\text{phot}}$ .

We also consider here a more general treatment of stellar contamination. Motivated by several strategic gaps identified in the NASA ExoPAG SAG 21 community report (Rackham et al., 2023), we also consider a two-heterogeneity model with the assumption of a common surface gravity relaxed. By defining these heterogeneities as starspots and faculae ( $T_{\text{spot}} < T_{\text{phot}} < T_{\text{fac}}$ ), we can write the stellar contamination factor as

$$\epsilon_{\lambda, \text{het}} = \frac{1}{1 - \left[ f_{\text{spot}} \left( 1 - \frac{I_{\lambda, \text{spot}}(\log g_{\text{spot}}, T_{\text{spot}})}{I_{\lambda, \text{phot}}(\log g_{\text{phot}}, T_{\text{phot}})} \right) + f_{\text{fac}} \left( 1 - \frac{I_{\lambda, \text{fac}}(\log g_{\text{fac}}, T_{\text{fac}})}{I_{\lambda, \text{phot}}(\log g_{\text{phot}}, T_{\text{phot}})} \right) \right]} \quad (2.4.5)$$

The addition of a second heterogeneity population and separate surface gravities increases the number of free parameters for this stellar contamination model to eight.

2.4.1.2. Unocculted Stellar Heterogeneity Models for HAT-P-18 b. We consider five treatments for unocculted stellar heterogeneities when retrieving HAT-P-18 b’s transmission spectrum:

- (1) **No stellar contamination.**
- (2) **One heterogeneity**, defined by three free parameters:  $f_{\text{het}}$ ,  $T_{\text{het}}$ , and  $T_{\text{phot}}$ .
- (3) **Two heterogeneities** (spots + faculae), defined by five free parameters:  $f_{\text{spot}}$ ,  $T_{\text{spot}}$ ,  $f_{\text{fac}}$ ,  $T_{\text{fac}}$ , and  $T_{\text{phot}}$ .
- (4) **One heterogeneity with free surface gravity**, defined by five free parameters:  $f_{\text{het}}$ ,  $T_{\text{het}}$ ,  $\log g_{\text{het}}$ ,  $T_{\text{phot}}$ , and  $\log g_{\text{phot}}$ .
- (5) **Two heterogeneities with free surface gravity**, defined by eight free parameters:  $f_{\text{spot}}$ ,  $T_{\text{spot}}$ ,  $\log g_{\text{spot}}$ ,  $f_{\text{fac}}$ ,  $T_{\text{fac}}$ ,  $\log g_{\text{fac}}$ ,  $T_{\text{phot}}$ , and  $\log g_{\text{phot}}$ .

## 2.4.2. Retrieval Configuration

We applied three exoplanet retrieval codes to HAT-P-18 b’s transmission spectrum: POSEIDON (MacDonald & Madhusudhan, 2017; MacDonald, 2023), AURORA (Welbanks & Madhusudhan, 2021), and SCARLET (Benneke & Seager, 2012; Benneke, 2015). We initially conducted independent analyses to establish which atmospheric and stellar properties provide the necessary complexity to describe HAT-P-18 b’s transmission spectrum. After comparing

our results, we chose a common set of model assumptions for the three codes: chemical opacity from Na, K, H<sub>2</sub>O, CO, CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, HCN, and NH<sub>3</sub> (the most prominent opacity sources expected at HAT-P-18b’s equilibrium temperature under equilibrium chemistry and/or with chemical quenching, see e.g., Madhusudhan et al. 2016); an inhomogeneous grey cloud-deck combined with a power-law haze; and one unocculted stellar heterogeneity (i.e., the *one heterogeneity* model). Our retrievals were conducted on the R = 100 binned variant of HAT-P-18b’s transmission spectrum with the spot-crossing masked (see Figure 2.5), but we find consistent results when retrieving the full-resolution NIRISS data. We describe the specific configuration used by each retrieval code below and list the priors used in Table 2.3.

2.4.2.1. **POSEIDON.** We conducted a series of POSEIDON retrievals to assess the model complexity required to fit HAT-P-18b’s JWST/NIRISS transmission spectrum. This includes the five stellar contamination models listed in Section 2.4.1.2, nested models to compute detection significances for each chemical species, and additional robustness tests (e.g., a retrieval of the unbinned pixel-resolution spectrum).

Our POSEIDON retrievals model HAT-P-18b as a H<sub>2</sub>+He-dominated atmosphere with a standard configuration used for hot Jupiter retrieval studies (e.g., MacDonald & Madhusudhan, 2017; Kirk et al., 2021; Taylor et al., 2023). We prescribe 100 layers, spaced uniformly in log-pressure from 10<sup>-8</sup>–100 bar, where the layers follow a variant of the pressure-temperature (P-T) profile parameterization from Madhusudhan & Seager (2009) but with the reference temperature located at 10 bar. The inhomogeneous cloud and haze aerosol model follows MacDonald & Madhusudhan (2017). We fit for the log<sub>10</sub> volume mixing ratios of the 8 gases in the reference model, using absorption cross-sections (see MacDonald & Lewis, 2022) computed from the following line lists: Na and K (Ryabchikova et al., 2015); H<sub>2</sub>O (Polyan-sky et al., 2018); CO (Li et al., 2015); CO<sub>2</sub> (Tashkun & Perevalov, 2011); CH<sub>4</sub> (Yurchenko et al., 2017); HCN (Barber et al., 2014); and NH<sub>3</sub> (Coles et al., 2019). We include H<sub>2</sub>-H<sub>2</sub> collision-induced absorption from HITRAN (Karman et al., 2019). We also fit for the planetary radius at a reference pressure of 10 bar. We calculate model transmission spectra from 0.55–2.9 μm at R = 20,000. We calculate the stellar contamination factor (Equation 2.4.3) by interpolating PHOENIX models (Husser et al., 2013) using the PyMSG package (Townsend & Lopez, 2023). Our POSEIDON retrievals have up to 27 free parameters (depending on the chosen stellar contamination model from Section 2.4.1.2), with 1,000 nested sampling live points used by the PyMultiNest (Feroz et al., 2009; Buchner et al., 2014) package to chart the parameter space.

2.4.2.2. **SCARLET.** We performed retrievals using the SCARLET retrieval framework (Benneke, 2015; Benneke et al., 2019a). We improved the SCARLET framework from previous work on low-resolution observations (Benneke et al., 2019a,b; Piaulet et al., 2023) with the

**Table 2.3** – Retrieval parameters and priors.

Parameter	POSEIDON	SCARLET	AURORA
<b>Composition</b>			
$\log X_i$	$\mathcal{U}[-12, -1]$	$\mathcal{U}[-12, -0.3]$	$\mathcal{U}[-12, -1]$
<b>P-T profile</b>			
$\alpha_{1,2}$	$\mathcal{U}[0.02, 2.0]$	—	$\mathcal{U}[0.02, 2.0]$
$\log P_{1,2}$	$\mathcal{U}[-8, 2]$	—	$\mathcal{U}[-8, 2]$
$\log P_3$	$\mathcal{U}[-2, 2]$	—	$\mathcal{U}[-2, 2]$
$T_{\text{ref}}$	$\mathcal{U}[300, 2000]$	$\mathcal{U}[300, 1700]$	$\mathcal{U}[300, 1000]$
<b>Aerosols</b>			
$\log c_{\text{haze}}$	—	$\mathcal{U}[-10, 5]$	—
$\log a$	$\mathcal{U}[-4, 8]$	—	$\mathcal{U}[-4, 8]$
$\gamma$	$\mathcal{U}[-20, 2]$	—	$\mathcal{U}[-20, 2]$
$\log P_{\text{cloud}}$	$\mathcal{U}[-8, 2]$	$\mathcal{U}[-8, 2]$	$\mathcal{U}[-8, 2]$
$f_{\text{cloud}}$	$\mathcal{U}[0, 1]$	$\mathcal{U}[0, 1]$	$\mathcal{U}[0, 1]$
<b>Stellar</b>			
<b>One het.</b>			
$f_{\text{het}}$	$\mathcal{U}[0.0, 0.5]$	$\mathcal{U}[0.0, 1.0]$	$\mathcal{U}[0.0, 0.5]$
$T_{\text{het}}$	$\mathcal{U}[3500, 1.2 T_*]$	—	$\mathcal{U}[3500, 1.2 T_*]$
$\Delta T_{\text{het}}$	—	$\mathcal{U}[-800, -50]$	—
$T_{\text{phot}}$	$\mathcal{N}[T_*, \sigma_{T_*}]$	$\mathcal{N}[T_*, \sigma_{T_*}]$	$\mathcal{N}[T_*, \sigma_{T_*}]$
$\log g_{\text{het}}$	$\mathcal{U}[3.0, 5.0]$	—	—
$\log g_{\text{phot}}$	$\mathcal{N}[\log g_*, \sigma_{\log g_*}]$	—	—
<b>Two het.</b>			
$f_{\text{fac}}$	$\mathcal{U}[0.0, 0.5]$	—	—
$f_{\text{spot}}$	$\mathcal{U}[0.0, 0.5]$	—	—
$T_{\text{fac}}$	$\mathcal{U}[T_* - 3\sigma_{T_*}, 1.2 T_*]$	—	—
$T_{\text{spot}}$	$\mathcal{U}[3500, T_* + 3\sigma_{T_*}]$	—	—
$T_{\text{phot}}$	$\mathcal{N}[T_*, \sigma_{T_*}]$	—	—
$\log g_{\text{fac}}$	$\mathcal{U}[3.0, 5.0]$	—	—
$\log g_{\text{spot}}$	$\mathcal{U}[3.0, 5.0]$	—	—
$\log g_{\text{phot}}$	$\mathcal{N}[\log g_*, \sigma_{\log g_*}]$	—	—
<b>Other</b>			
$R_{\text{p,ref}}$	$\mathcal{U}[0.85 R_{\text{p}}, 1.15 R_{\text{p}}]$	—	—
$\log P_{\text{ref}}$	—	—	$\mathcal{U}[-8, 2]$

*Note:* All three retrieval codes adopt the *one heterogeneity* stellar contamination model for this comparison  $T_{\text{ref}}$  is defined at 10 mbar for POSEIDON,  $10^{-8}$  bar for AURORA, and is the isothermal temperature for SCARLET. All pressure parameters are expressed in units of bar and temperatures in K. For the priors, we adopt  $R_{\text{p}} = 0.995 R_J$ ,  $T_* = 4803$  K,  $\log g_* = 4.57$  (cgs),  $\sigma_{T_*} = 80$  K, and  $\sigma_{\log g_*} = 0.04$  (cgs). All retrievals have a fixed stellar metallicity of  $[\text{Fe}/\text{H}] = 0.1$ , while those without free surface gravity assume  $\log g = \log g_* = 4.57$  in all regions. ‘—’ indicates that the parameter did not feature in the retrieval. All log parameters are base 10.

addition of non-uniform cloud coverage and of the contribution of stellar contamination to the transmission spectrum.

In the SCARLET retrieval, the atmosphere is parameterized by the abundances of the spectrally-active chemical species of interest (Na, K, H<sub>2</sub>O, CO, CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, HCN, NH<sub>3</sub>) which are assumed to be well-mixed and constant with pressure, and an isothermal temperature structure. The ratio of He and H<sub>2</sub>, which make up the remainder of the gas, is set to Jupiter’s He/H<sub>2</sub> of 0.157.

The retrieval includes three parameters describing aerosols ( $\log p_{\text{cloud}}$ ,  $f_{\text{cloud}}$ ,  $\log c_{\text{haze}}$ ). The cloud parameterization consists of a grey cloud, opaque across all wavelengths, with a cloud top pressure  $p_{\text{cloud}}$ . Potential fractional cloud coverage is captured by the  $f_{\text{cloud}}$  parameter and corresponds to a weighted average of a cloud-free and a cloudy model. The contribution of haze to the transmission spectrum via a slope towards shorter wavelengths is parameterized using the  $c_{\text{haze}}$  parameter, which is a factor that multiplies the Rayleigh contribution to the scattering coefficient (unity corresponds to standard Rayleigh scattering).

Finally, two parameters describe the stellar heterogeneity:  $\Delta T_{\text{spot}}$  and  $f_{\text{spot}}$ . Stellar heterogeneity is implemented following the standard approach (see Section 2.4.1.1) assuming that the contribution of stellar contamination to the spectrum can be represented by that of spots with a temperature of  $T_{\text{spot}} = T_{\text{phot}} + \Delta T_{\text{spot}}$  (where  $T_{\text{phot}}$  is the photosphere temperature) covering a fraction  $f_{\text{spot}}$  of the star. Stellar models are queried from the PHOENIX grid of stellar atmosphere models (Husser et al., 2013).

The forward models calculated by the retrieval have a resolving power of 15,625. We use opacity sampling from cross-section tables at a resolving power of 250,000 to build the opacity tables used, and the opacities are taken from the ExoClimes Simulation Platform database. We choose HITEMP opacities for H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, NH<sub>3</sub> (Rothman et al., 2010), and ExoMol opacities for all other species (Tennyson et al., 2016). We use Nested Sampling to sample the parameter space and its Python implementation in the `nestle` module (Skilling, 2004; Mukherjee et al., 2006; Shaw et al., 2007).

**2.4.2.3. AURORA.** We also perform atmospheric retrievals with AURORA (Welbanks & Madhusudhan, 2021) to interpret the transmission spectrum of HAT-P-18 b. The application of AURORA to transmission spectra of exoplanets is described in Welbanks & Madhusudhan (2022) following the general setup presented Welbanks & Madhusudhan (2019); Welbanks et al. (2019). We follow the methods of Pinhas et al. (2018) to consider the impact of stellar heterogeneities as implemented in previous works (see e.g., Ahrer et al., 2023).

Aurora computes line-by-line radiative transfer in transmission geometry for a parallel-plane atmosphere assuming hydrostatic equilibrium. Our atmospheric model is computed using a 100 layer pressure grid uniformly spaced in log-pressure between  $10^{-8}$  and 100 bar, and a wavelength grid from  $0.55 \mu\text{m}$  to  $2.9 \mu\text{m}$ , covering these NIRISS observations, at a

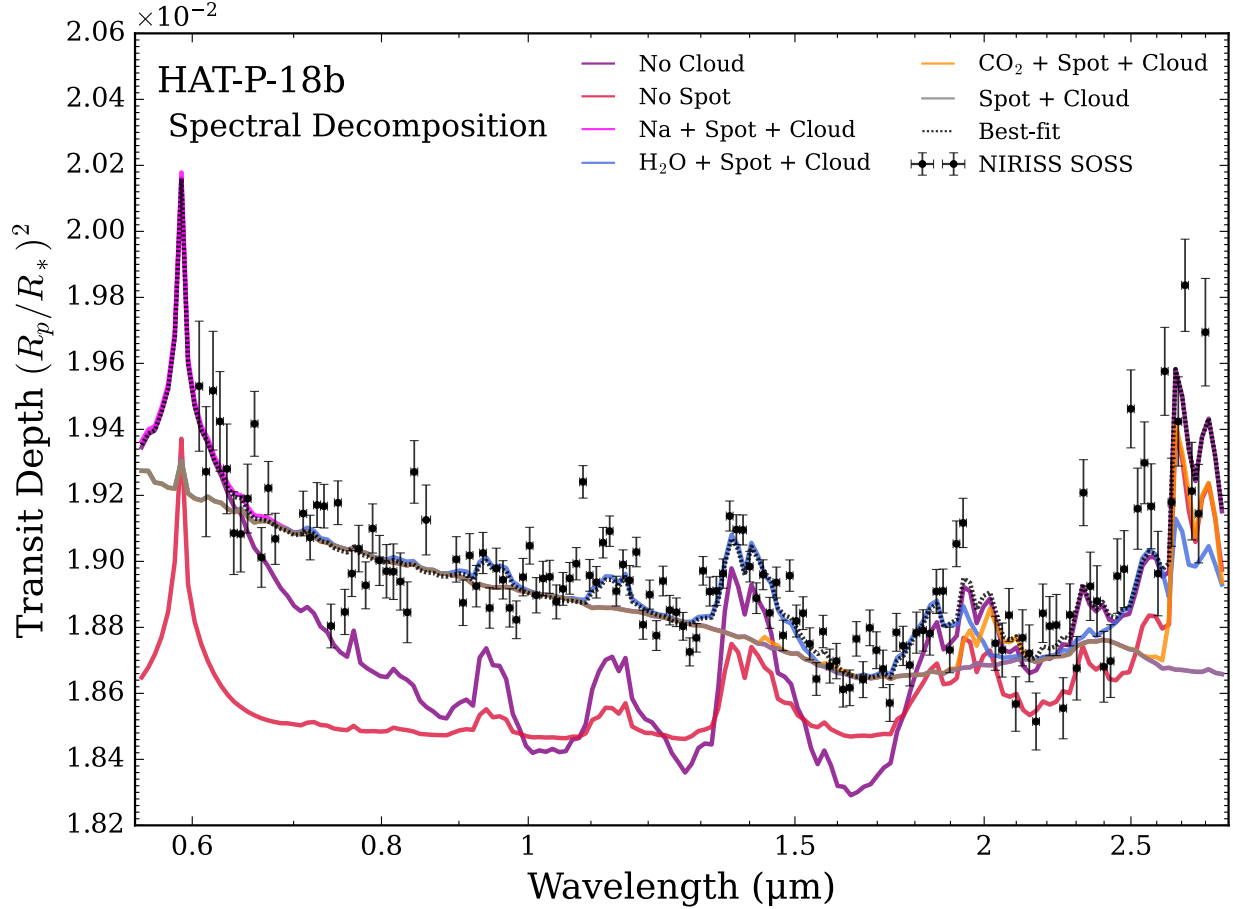
constant resolution of  $R = 20,000$ . We parameterize the P-T profile of the atmosphere using the prescription from Madhusudhan & Seager (2009) and the presence of inhomogeneous clouds (e.g., Line & Parmentier, 2016) and hazes (e.g., Lecavelier Des Etangs et al., 2008), using a single sector for their combined spectroscopic imprint following the description in Welbanks & Madhusudhan (2021). The volume mixing ratios for the eight chemical species considered in our fiducial model are assumed to be constant with height and use cross-sections for  $\text{H}_2$ — $\text{H}_2$  and  $\text{H}_2$ —He collision induced absorption (CIA; Richard et al., 2012),  $\text{CH}_4$  (Yurchenko & Tennyson, 2014), CO (Rothman et al., 2010),  $\text{CO}_2$  (Rothman et al., 2010),  $\text{H}_2\text{O}$  (Rothman et al., 2010), HCN (Barber et al., 2014), K (Allard et al., 2016), Na (Allard et al., 2019), and  $\text{NH}_3$  (Yurchenko et al., 2011), computed as described in Gandhi & Madhusudhan (2017, 2018) and Welbanks et al. (2019). Following Pinhas et al. (2018), we model the heterogeneous stellar photosphere by interpolating stellar models from the PHOENIX database (Husser et al., 2013). The parameter estimation is performed using the nested sampling algorithm (Skilling, 2004) with MultiNest (Feroz et al., 2009) and its python implementation PyMultiNest (Buchner et al., 2014).

### 2.4.3. An Explanation for HAT-P-18 b’s Transmission Spectrum

We first provide an intuitive explanation for HAT-P-18 b’s transmission spectrum. Figure 2.9 shows a spectral decomposition of the maximum likelihood (best-fitting) model transmission spectrum from the POSEIDON *one heterogeneity* retrieval (model (ii) in Section 2.4.1.2). We detect multiple  $\text{H}_2\text{O}$  absorption features near  $0.95 \mu\text{m}$ ,  $1.15 \mu\text{m}$ ,  $1.4 \mu\text{m}$ ,  $1.9 \mu\text{m}$ , and  $2.6 \mu\text{m}$  (with a combined significance of  $12.5 \sigma$ ). We further detect a  $\text{CO}_2$  absorption feature near  $2.7 \mu\text{m}$  ( $7.3 \sigma$ ) and infer evidence of Na at lower significance ( $2.7 \sigma$ ). The small amplitude of the absorption features is due to an optically-thick cloud deck which is uniform around the terminator ( $7.4 \sigma$ ). Finally, the spectral slope short wards of  $1.65 \mu\text{m}$  is caused by the combination of unocculted starspots ( $5.8 \sigma$ ) and the uniform cloud deck. The quoted detection significances are from Bayesian model comparisons between the reference POSEIDON *one heterogeneity* model and another retrieval with one model component removed (e.g., Benneke & Seager, 2013). We do not identify statistically significant evidence for K, CO,  $\text{CH}_4$ , HCN,  $\text{NH}_3$ , nor a scattering haze. We note that these conclusions are independently retrieved by the SCARLET and AURORA retrievals, which produce similar best-fitting spectra (see Section 2.4.4). Finally, we determine below that a single high data point near  $1.1 \mu\text{m}$ , not fit by our retrieval models, is attributable to metastable helium. We verified that removing this data point does not alter the retrieval results.

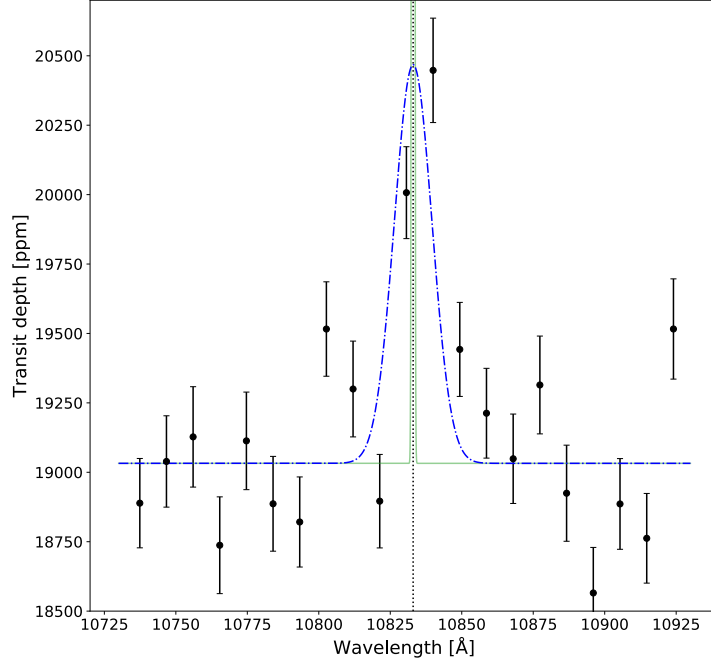
2.4.3.1. Evidence of Helium Absorption. We assessed evidence of helium absorption in HAT-P-18 b’s atmosphere via an independent fit to the pixel-resolution transmission spectrum near  $1.083 \mu\text{m}$ . Figure 2.10 shows that a Gaussian fit, with free amplitude and width,





**Figure 2.9** – Contributions of planetary atmosphere and stellar features to HAT-P-18 b’s transmission spectrum. The best-fitting model spectrum from the POSEIDON *one heterogeneity* retrieval (dashed line) — see Section 2.4.4 — is compared to the NIRISS/SOSS data (error bars) for reference. The coloured lines show the effect of removing the cloud (purple) and starspot (red) from the best-fitting model, while the other lines show models with combinations of a cloud, starspot, H<sub>2</sub> continuum opacity, and a single atmospheric chemical species (Na: magenta; H<sub>2</sub>O: blue; CO<sub>2</sub>: orange) or no additional absorbers (grey). HAT-P-18 b’s transmission spectrum is therefore well-explained by unocculted starspots, a cloud deck, Na, H<sub>2</sub>O, and CO<sub>2</sub>.

favours an excess absorption of  $0.13 \pm 0.03\%$  ( $4.3\sigma$ ) centred around the near-infrared helium triplet at  $1.083\ \mu\text{m}$ . Our result is consistent within  $1\sigma$  to Fu et al. (2022), Vissapragada et al. (2022), and Paragas et al. (2021). Since the helium line profile is unresolved with NIRISS/SOSS, even at pixel resolution, we do not conduct more complex modelling of the helium line. Consequently, we cannot unambiguously attribute this signature to the planetary atmosphere nor disentangle the layers probed by the helium triplet. Nonetheless, we confirm that HAT-P-18 b exhibits a longer transit duration with more absorption post transit — as also observed by Fu et al. (2022) — which could indicate an extended atmosphere with the presence of a cometary-like tail as exhibited by WASP-107 b (Allart et al., 2019).

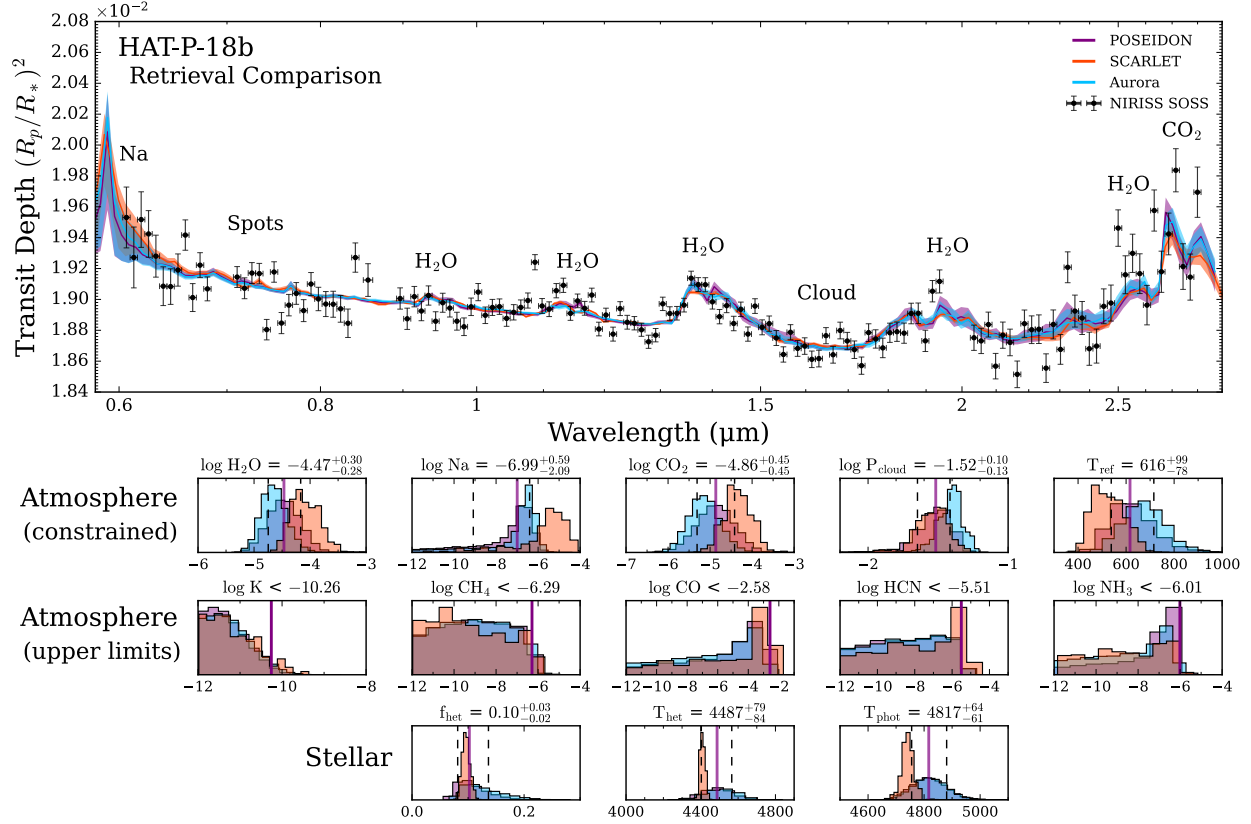


**Figure 2.10** – Pixel-resolution transmission spectrum of HAT-P-18 b around the  $1.083 \mu\text{m}$  helium triplet. We model the helium triplet as a Gaussian convolved to the resolution of NIRISS/SOSS and fitted to the data. The best-fit is shown in blue, and the unconvolved Gaussian in green. The central wavelength of the metastable helium triplet is indicated as the vertical dashed line.

Future observations of HAT-P-18 b at higher spectral resolution can confirm the helium absorption. A confirmation would indicate that HAT-P-18 b is losing its atmosphere and is undergoing significant mass loss. We estimated the intrinsic excess absorption arising from the resolved helium triplet to be  $3.17 \pm 0.67 \%$  (Figure 2.10). This value was derived by fitting a Gaussian with a fixed width of  $1 \text{ \AA}$  (the typical width of the helium triplet; e.g., Allart et al. 2018, 2019; Nortmann et al. 2018; Salz et al. 2018) and a free intrinsic amplitude, which was then convolved to the pixel-resolution NIRISS/SOSS data. Such a strong helium signature would be readily detectable with ground-based high-resolution spectrographs, which would provide complementary observations to study the unique processes shaping HAT-P-18 b’s upper atmosphere.

#### 2.4.4. The Atmosphere of HAT-P-18 b

Our retrieved atmospheric properties for HAT-P-18 b are summarized in Figure 2.11. All three retrieval codes obtain retrieved transmission spectra consistent with the picture presented previously: HAT-P-18 b’s observed spectrum is shaped by absorption from  $\text{H}_2\text{O}$  and  $\text{CO}_2$  (and likely Na), unocculted starspots, and a cloud deck. The posterior distributions



**Figure 2.11** – Atmospheric and stellar retrieval results for HAT-P-18 b. *Top*: Retrieved model transmission spectra from our JWST/NIRISS spectra (black errors). For each of the three retrieval codes (POSEIDON; purple, SCARLET; orange, and AURORA; blue), the median retrieved spectrum (solid lines) and  $1\sigma$  confidence intervals (shaded contours) are shown. The most important model features required to explain HAT-P-18 b’s NIRISS transmission spectrum are annotated. All three codes adopt the *one heterogeneity* model for this comparison. *Bottom*: Posterior probability distributions corresponding to the retrieval model in the top panel. The top row shows retrieved atmospheric properties with constrained values, the middle row shows non-detected chemical species with abundance upper limits, and the bottom row shows the retrieved unocculted starspot properties. Each histogram is annotated with the retrieved median and  $\pm 1\sigma$  confidence intervals from the POSEIDON retrieval for reference (see Table 2.4 for the results from all three codes).

in Figure 2.11, and corresponding confidence regions in Table 2.4, provide our quantitative constraints on HAT-P-18 b’s atmospheric properties.

We obtain precise constraints on several atmospheric properties, including the  $\text{H}_2\text{O}$  and  $\text{CO}_2$  abundances, cloud deck pressure, and atmospheric temperature. The retrieved  $\text{H}_2\text{O}$  abundance ( $\log X_{\text{H}_2\text{O}} = -4.47^{+0.30}_{-0.28}$  (POSEIDON);  $-4.11^{+0.27}_{-0.22}$  (SCARLET);  $-4.65^{+0.24}_{-0.22}$  (AURORA)) is  $\sim 10\times$  lower than the expected abundance for a solar-composition atmosphere under chemical equilibrium at HAT-P-18 b’s equilibrium temperature (Hartman et al., 2011). Conversely, the retrieved  $\text{CO}_2$  abundance ( $\log X_{\text{CO}_2} = -4.86^{+0.45}_{-0.45}$  (POSEIDON);

**Table 2.4** – Retrieval results for the *one heterogeneity* model.

Parameter	POSEIDON	SCARLET	AURORA
<b>Composition</b>			
$\log X_{\text{H}_2\text{O}}$	$-4.47^{+0.30}_{-0.28}$	$-4.11^{+0.27}_{-0.22}$	$-4.65^{+0.24}_{-0.22}$
$\log X_{\text{Na}}$	$-6.99^{+0.59}_{-2.09}$	$-5.45^{+0.69}_{-1.59}$	$-6.65^{+0.42}_{-1.68}$
$\log X_{\text{CO}_2}$	$-4.86^{+0.45}_{-0.45}$	$-4.39^{+0.38}_{-0.26}$	$-5.16^{+0.40}_{-0.36}$
$\log X_{\text{K}}$	$< -10.26$	$< -9.87$	$< -10.11$
$\log X_{\text{CH}_4}$	$< -6.29$	$< -6.12$	$< -6.30$
$\log X_{\text{CO}}$	$< -2.58$	$< -2.26$	$< -2.85$
$\log X_{\text{HCN}}$	$< -5.51$	$< -5.01$	$< -5.56$
$\log X_{\text{NH}_3}$	$< -6.01$	$< -6.13$	$< -6.21$
<b>P-T profile</b>			
$T_{\text{ref}}$	$616^{+99}_{-78}$	$523^{+81}_{-65}$	$673^{+90}_{-85}$
<b>Aerosols</b>			
$\log P_{\text{cloud}}$	$-1.52^{+0.10}_{-0.13}$	$-1.53^{+0.10}_{-0.13}$	$-1.40^{+0.07}_{-0.10}$
$f_{\text{cloud}}$	$> 0.87$	$> 0.83$	$> 0.90$
<b>Stellar</b>			
$f_{\text{het}}$	$0.10^{+0.03}_{-0.02}$	$0.10^{+0.01}_{-0.01}$	$0.12^{+0.04}_{-0.03}$
$T_{\text{het}}$	$4487^{+79}_{-84}$	$4408^{+16}_{-12}$	$4513^{+85}_{-92}$
$T_{\text{phot}}$	$4817^{+64}_{-61}$	$4740^{+22}_{-19}$	$4821^{+62}_{-60}$

*Note:* We do not list results for unconstrained parameters (e.g. the other P-T profile parameters, since the retrieved profiles are essentially isothermal). ‘<’ and ‘>’ represent  $2\sigma$  upper and lower limits, respectively.

$-4.39^{+0.38}_{-0.26}$  (SCARLET);  $-5.16^{+0.40}_{-0.36}$  (AURORA)) is  $> 100 \times$  higher than expected for a similar solar-composition atmosphere (cf. Voitke et al. 2018). The retrieved Na abundance ( $\log X_{\text{Na}} = -6.99^{+0.59}_{-2.09}$  (POSEIDON);  $-5.45^{+0.69}_{-1.59}$  (SCARLET);  $-6.65^{+0.42}_{-1.68}$  (AURORA)) is more weakly constrained, being broadly consistent with a range of sub-solar to solar (POSEIDON and AURORA) or even a super-solar composition (SCARLET). An opaque cloud deck, consistent with uniform terminator coverage ( $f_{\text{cloud}} > 0.83$ , see Table 2.4), is localized with a cloud top pressure of  $\approx 30$  mbar ( $\log P_{\text{cloud}} = -1.52^{+0.10}_{-0.13}$  (POSEIDON);  $-1.53^{+0.10}_{-0.13}$  (SCARLET);  $-1.40^{+0.07}_{-0.10}$  (AURORA)). Finally, the retrieved P-T profile, over the pressure range probed by our NIRISS/SOSS observations, is isothermal at  $\approx 600$  K ( $T_{\text{ref}} = 616^{+99}_{-78}$  K (POSEIDON);  $523^{+81}_{-65}$  K (SCARLET);  $T_{100 \text{ mbar}} = 761^{+92}_{-91}$  K (AURORA)). We discuss the sensitivity of these inferences to the assumed stellar contamination model in Section 2.4.5.3. We note that, while SCARLET favours slightly higher abundances and lower temperatures than POSEIDON and AURORA, all three codes produce consistent retrieval results to within  $1\sigma$ .

We also obtain robust upper limits on the abundances of several important chemical species. Our retrievals strongly disfavour the presence of K ( $\log X_{\text{K}} \lesssim -10$  to  $2\sigma$ ), which

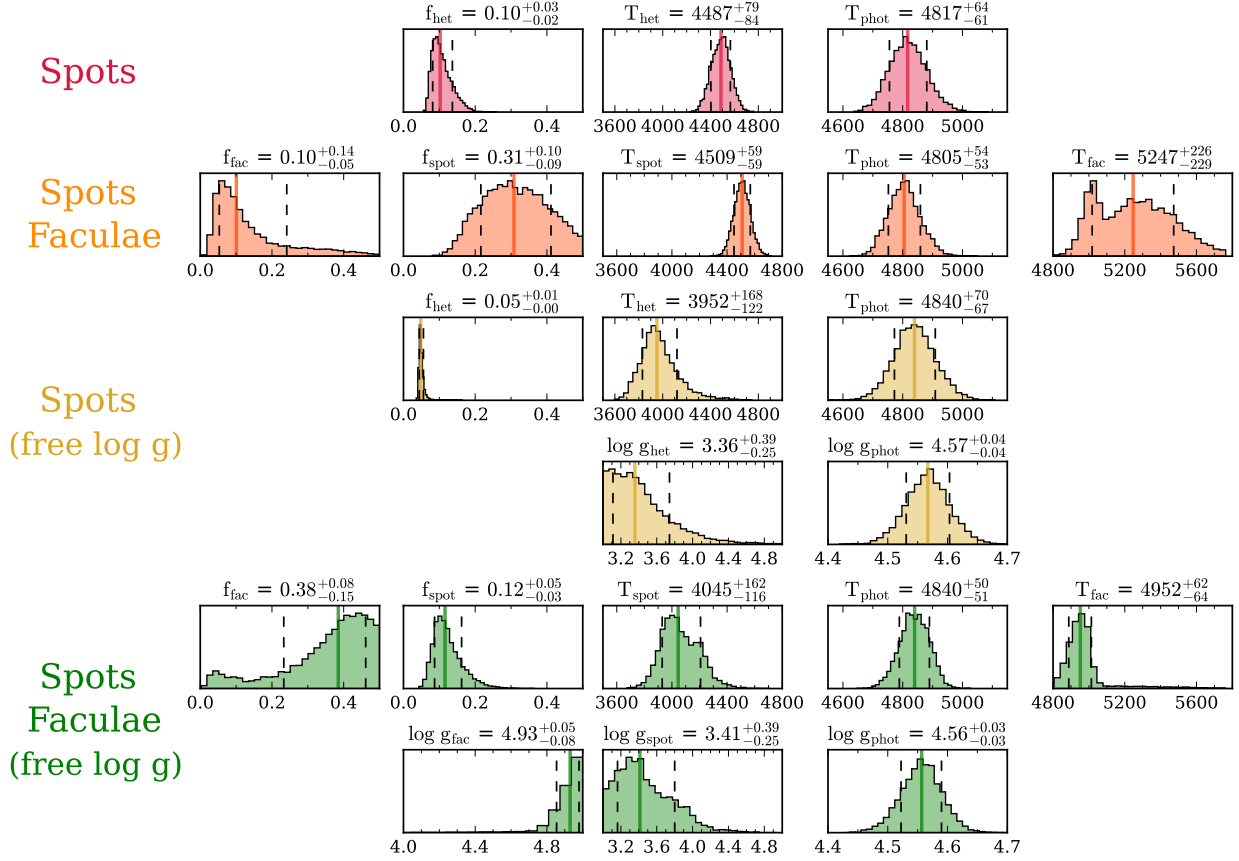
could be due to condensation out of the gas phase. Similarly, we establish that  $\text{CH}_4$  is at least  $100\times$  less abundant than the expectation for a solar-composition atmosphere in chemical equilibrium ( $\log X_{\text{CH}_4} \lesssim -6$  to  $2\sigma$  vs. the expected  $\log X_{\text{CH}_4} \sim -4$ ; Woitke et al. 2018), which could indicate photochemical dissociation (e.g., Moses et al., 2011; Venot et al., 2012). Although we see a tentative hint of CO in our posteriors (see Figure 2.11), additional observations at longer wavelengths, covering the  $4.6\mu\text{m}$  CO band, would be required to robustly constrain the CO abundance (and hence the atmospheric C/O ratio). We also find upper limits on HCN and  $\text{NH}_3$  ( $\log X_{\text{HCN}} \lesssim -5$ ;  $\log X_{\text{NH}_3} \lesssim -6$ ), which are consistent with both equilibrium and disequilibrium expectations for hot giant planets (e.g., Moses et al., 2011; Venot et al., 2012). These upper limits underline that SOSS data is of sufficiently high quality to provide scientifically meaningful constraints even on the abundances of non-detected chemical species.

### 2.4.5. Unocculted Stellar Heterogeneities

We next turn to constraints on unocculted stellar heterogeneities. We first present results under the assumption of a single unocculted heterogeneity population with fixed  $\log g$  — a common approach in the literature — before relaxing this assumption by considering more complex treatments of the TLSE. Finally, we examine the impact of different unocculted stellar heterogeneity models on the retrieved atmospheric properties of HAT-P-18 b.

2.4.5.1. One Heterogeneity Stellar Contamination Model. Assuming a single population of unocculted stellar active regions, our retrievals require unocculted starspots to explain HAT-P-18 b’s transmission spectrum (see Figure 2.11 and Table 2.4). The spots are  $\approx 300\text{ K}$  cooler than the photosphere ( $T_{\text{het}} = 4487^{+64}_{-61}\text{ K}$  (POSEIDON);  $4408^{+16}_{-12}\text{ K}$  (SCARLET);  $4513^{+85}_{-92}\text{ K}$  (AURORA), compared to  $T_{\text{phot}} \approx 4800\text{ K}$ ) and cover  $\approx 10\%$  of the stellar surface ( $f_{\text{het}} = 0.10^{+0.03}_{-0.02}$  (POSEIDON);  $0.10^{+0.01}_{-0.01}$  (SCARLET);  $0.12^{+0.04}_{-0.03}$  (AURORA)). We note that SCARLET has smaller uncertainties on the retrieved stellar parameters, which we attribute to the different parameterization of the stellar heterogeneity and hazes in the prior.

2.4.5.2. More Complex Stellar Contamination Models. We find that the best-fitting stellar contamination model for HAT-P-18 b is two distinct populations of unocculted heterogeneities — spots and faculae — with different surface gravities. We established this via a series of Bayesian model comparisons between the five stellar contamination models listed in Section 2.4.1.2. Our results, summarized in Table 2.5, demonstrate a significant improvement in the Bayesian evidence for the *two heterogeneities with free surface gravity* model compared to the fiducial *one heterogeneity* model we have focused on thus far (a Bayes factor of 77.5, equivalent to  $3.4\sigma$ ). We also find that the preference for unocculted heterogeneities vs. no stellar contamination is greater for the *two heterogeneities with free surface gravity* model compared to the *one heterogeneity* model ( $6.5\sigma$  vs.  $5.8\sigma$ ). Nevertheless, we



**Figure 2.12** – Unocculted stellar heterogeneity properties from the POSEIDON retrieval analysis. Posterior distributions from four retrieval models are shown, from top to bottom: (i) a single population of stellar heterogeneities (spots) with  $\log g_{\text{spot}} = \log g_{\text{phot}} = 4.57$ , as in Figure 2.11 (red); (ii) two distinct populations of spots and faculae, all with  $\log g = 4.57$  (orange); (iii) same as the spot model, but with the  $\log g$  of the spots and photosphere as free parameters (gold); and (iv) same as the spot + faculae model, but with free  $\log g$  for all three stellar components (green). The histograms are ordered such that the columns (within each row) have the same physical interpretation between the different retrievals (e.g.,  $f_{\text{het}}$  from the *one heterogeneity* models corresponds to  $f_{\text{spot}}$  in the *two heterogeneities* models). The retrieved atmospheric properties for HAT-P-18 b are consistent across all four unocculted stellar heterogeneity models.

show below that adopting the preferred stellar contamination model does not significantly alter the atmospheric constraints for HAT-P-18 b presented in Figure 2.11.

We show in Figure 2.12 that the choice of stellar contamination model can significantly alter inferences about unocculted stellar active regions. The most significant change is that retrievals with free  $\log g$  favour much cooler spots ( $\Delta T \approx -800$  K vs.  $\approx -300$  K) than those with  $\log g_{\text{spot}} = \log g_{\text{phot}}$ . Indeed, the retrieved spot surface gravity is lower than the photosphere by  $> 2\sigma$ . We similarly find that fitting for  $\log g_{\text{fac}}$  allows a more accurate determination of the faculae temperature compared to fixing the surface gravities. Overall,

**Table 2.5** – Unocculted stellar heterogeneity Bayesian model comparison.

Model	$\ln \mathcal{Z}_i$	$\mathcal{B}_{\text{ref},i}$	$\ln \mathcal{B}_{\text{ref},i}$	Det. Sig.
<b><i>Two het. (free log g)</i></b>	984.74	Ref.	Ref	Ref.
<i>No stellar contam.</i>	965.54	$2.19 \times 10^8$	19.2	$6.5 \sigma$
<i>One het.</i>	980.39	77.5	4.35	$3.4 \sigma$
<i>One het. (free log g)</i>	981.53	25.0	3.22	$3.0 \sigma$
<i>Two het.</i>	983.57	3.24	1.18	$2.1 \sigma$

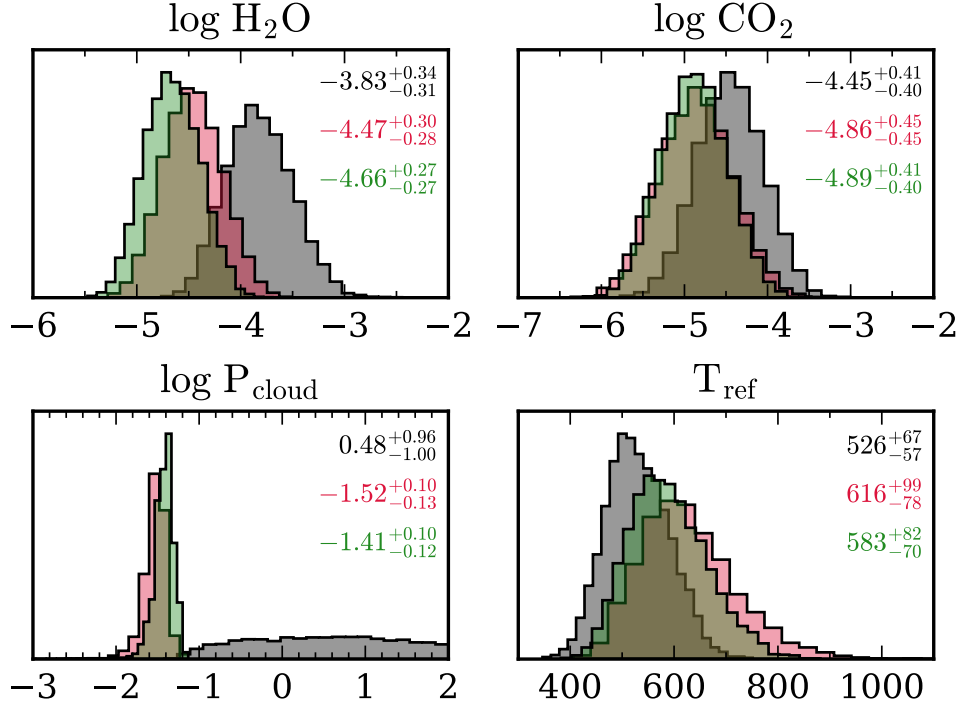
*Note:*  $\ln \mathcal{Z}_i$  is the Bayesian evidence of the  $i^{\text{th}}$  model.  $\mathcal{B}_{\text{ref},i}$  is the Bayes factor of the reference model with respect to the  $i^{\text{th}}$  model. “Det. Sig.” indicates the detection significance, expressed in equivalent “ $\sigma$ ” (e.g., Benneke & Seager, 2013), for the reference model, highlighted in bold, vs. the  $i^{\text{th}}$  model.

our preferred solution for HAT-P-18’s unocculted active regions is as follows: spots and faculae cover  $f_{\text{spot}} = 12_{-3}^{+5} \%$  and  $f_{\text{fac}} > 4 \%$  ( $2 \sigma$  lower limit) of HAT-P-18’s surface, with temperatures of  $T_{\text{spot}} = 4045_{-116}^{+162}$  K and  $T_{\text{fac}} = 4952_{-64}^{+62}$  K and surface gravities of  $\log g_{\text{spot}} < 4.17$  ( $2 \sigma$  upper limit) and  $\log g_{\text{fac}} > 4.45$  ( $2 \sigma$  lower limit). These compare to a background photosphere with  $T_{\text{phot}} = 4840_{-51}^{+50}$  K and  $\log g_{\text{phot}} = 4.56_{-0.03}^{+0.03}$ . These results demonstrate that more complete stellar contamination models can provide deeper insights into the nature of unocculted stellar active regions.

2.4.5.3. Sensitivity of Atmospheric Properties to Stellar Contamination Models. Finally, we find that, provided the spectroscopic imprint of unocculted heterogeneities is considered in the atmospheric model, the adopted stellar contamination model only minimally impacts the retrieved atmospheric properties for this data. Figure 2.13 shows that our preferred stellar contamination model (*two heterogeneities with free surface gravity*) produces retrieved temperatures, cloud pressures, and H<sub>2</sub>O and CO<sub>2</sub> abundances consistent with the simpler spot-only model with fixed surface gravity (*one heterogeneity*). However, a retrieval not including stellar contamination would attribute the spectral slope (caused by spots and a cloud deck) to an atmospheric haze and erroneously retrieve a H<sub>2</sub>O abundance 1–2  $\sigma$  higher than when spots are included. Therefore, while the finer details of the stellar contamination model are less crucial if one only wishes to constrain the planetary atmosphere, a simple stellar contamination model (e.g. *one heterogeneity*, as considered in studies such as Pinhas et al. 2018 and Rathcke et al. 2021) is vital to obtain reliable atmospheric inferences for exoplanets transiting active stars.

## 2.4.6. A Comparison between HST + *Spitzer* and JWST

We additionally ran retrievals on our newly reduced HST and *Spitzer* observations to contextualize our JWST results. We consider two POSEIDON retrievals, a model without stellar contamination and with a single unocculted stellar heterogeneity, adopting the same retrieval



No Stellar Contam.

Spots (fixed log g)

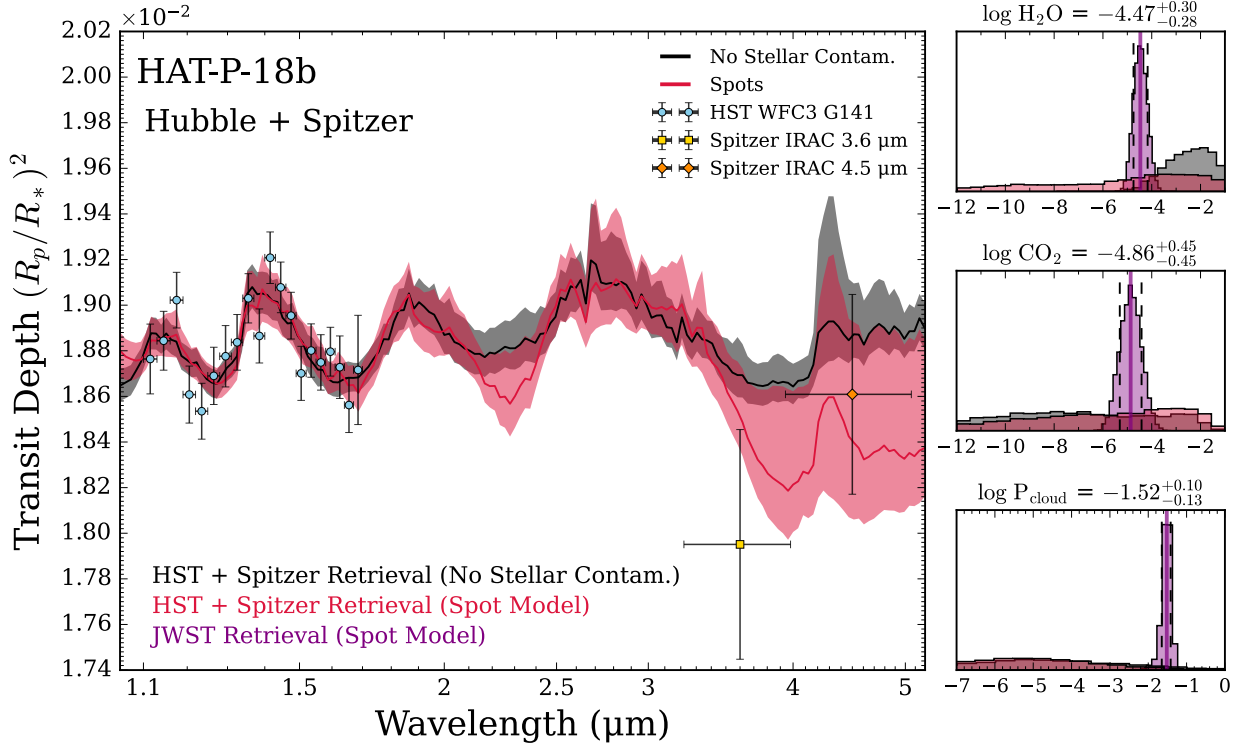
Spots + Faculae (free log g)

**Figure 2.13** – Impact of unocculted stellar contamination model on retrieved atmospheric properties. Posterior distributions are shown from three POSEIDON retrieval models: *no stellar contamination* (black), *one heterogeneity* (red), and *two heterogeneities with free surface gravity* (green). The *one heterogeneity* (“spots”) model corresponds to the results in Figure 2.11. Without considering stellar contamination, one would retrieve a  $\text{H}_2\text{O}$  abundance biased 1–2 $\sigma$  higher and find no cloud deck. The  $\text{CO}_2$  abundance and atmospheric temperature are less sensitive to the stellar contamination model.

configuration and priors as used in the JWST analysis (see section 2.4.2 and Table 2.3). The only difference compared to our previous approach is an altered model wavelength grid (0.9–5.3  $\mu\text{m}$  at  $R = 20,000$ ) to cover the *Spitzer* data at longer infrared wavelengths.

Figure 2.14 compares our retrieved spectrum and atmospheric constraints from HST and *Spitzer* to our previously presented JWST results. We focus on the abundances of  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}_2$ , and the cloud pressure for this comparison since these are the most well-constrained model parameters from our JWST/NIRISS data (see section 2.4.4). Both retrieval models infer an attenuated absorption feature in the HST/WFC3 data, suggesting a degree of cloud opacity ( $\log P_{\text{cloud}} \lesssim -2$  to  $1\sigma$ ). The model without stellar contamination attributes the absorption near 1.1 and 1.4  $\mu\text{m}$  to  $\text{H}_2\text{O}$ , with an abundance constraint at the order-of-magnitude level





**Figure 2.14** – Atmospheric retrieval of Hubble and *Spitzer* transmission spectra of HAT-P-18b. *Left*: Retrieved spectrum assuming no stellar contamination (black) and with a single heterogeneity (red), shown via their median (solid lines) and  $1\sigma$  confidence intervals. *Right*: Corresponding posterior probability distributions with the retrieved median and  $\pm 1\sigma$  parameter constraints. The JWST NIRISS/SOSS retrieval results from the single heterogeneity POSEIDON retrieval (see Figure 2.11) are overlaid, demonstrating that NIRISS/SOSS data provides significantly improved constraints on the atmospheric composition and cloud pressure compared to Hubble and *Spitzer* data.

( $\log X_{\text{H}_2\text{O}} = -2.43_{-1.05}^{+0.87}$ ). However, the unocculted starspot model, which obtains an improved fit to the *Spitzer* data, finds the HST/WFC3 data can be explained by either  $\text{H}_2\text{O}$  absorption or  $\text{CH}_4$  in combination with starspots. This three-way degeneracy between  $f_{\text{het}}$ ,  $\log X_{\text{H}_2\text{O}}$ , and  $\log X_{\text{CH}_4}$  — caused by the lack of data shortwards of  $1.0\mu\text{m}$  — removes the  $\text{H}_2\text{O}$  detection one could claim under the assumption of no stellar contamination. Therefore, HAT-P-18b’s  $\text{H}_2\text{O}$  abundance is essentially unconstrained from the HST and *Spitzer* observations. In contrast, our JWST/NIRISS observations have the wavelength coverage to break the degeneracies between unocculted starspots and the atmospheric composition, affording detailed characterization of HAT-P-18b’s atmosphere.

## 2.5. Summary & Discussion

This work has led to important inferences on both the stellar activity of HAT-P-18 and the atmosphere of its hot Saturn. Our main results are as follows:

- The transit light curves show evidence of a spot-crossing event ( $> 5\sigma$ ); we inferred that the most likely parameters for that occulted spot are a position on the projected stellar surface of  $(x, y) = (0.090 \pm 0.005, 0.42 \pm 0.05) R_*$ , with a radius of  $0.116 \pm 0.014 R_*$ , and a temperature colder than the star of  $\Delta T = -93 \pm 15$  K.
- The main features in the transmission spectrum retrieved from NIRISS/SOSS observations are multiple absorption features produced by water vapour ( $12.5\sigma$ ) with a retrieved abundance of  $\log \text{H}_2\text{O} \approx -4.4 \pm 0.3$ , evidence of Na ( $2.7\sigma$ ) and a rise at redder wavelengths due to a  $\text{CO}_2$  absorption feature ( $7.3\sigma$ ). Also, there is a slope towards bluer wavelengths caused by unocculted starspots ( $5.8\sigma$ ) and a uniform, grey cloud deck ( $7.4\sigma$ ) that mutes some absorption features.
- Modelling stellar heterogeneities led to four slightly different solutions for the occulted spot, and we showed that different treatments of the unocculted active regions could be used. Fortunately, we found that the different solutions for the active regions had no significant impact on the retrieved transmission spectrum and atmospheric properties of HAT-P-18 b.
- Modelling spot spectra is best achieved with stellar models with lower surface gravities than the stellar photosphere. For the most likely solution of the occulted spot, that is a  $\Delta \log g = 1.16 \pm 0.19$  dex, which is in perfect agreement with our solutions for the unocculted spots with free  $\log g$ .

We proceed to discuss the implications of our results and their potential impact on exoplanetary atmosphere studies in transmission spectroscopy.

### 2.5.1. The Atmosphere of HAT-P-18 b in Context

The best-fitting atmosphere model confirms the presence of  $\text{H}_2\text{O}$  and clouds in the terminator region of HAT-P-18 b, which is in agreement with previous work (Tsiaras et al., 2018). As in Fu et al. (2022), our transmission spectrum shows a slope towards bluer wavelengths; however, to explain it, instead of unocculted stellar heterogeneities, these authors inferred Rayleigh haze scattering, as also suggested by Kirk et al. (2017) from ground-based observations. The TLSE, which was not taken into consideration in those studies, must be responsible for that difference, as well as the  $10\times$  higher water abundance in Fu et al. (2022). We also find  $10\times$  less  $\text{CO}_2$  than was reported by Fu et al. (2022), and we furthermore cannot confirm their detection of  $\text{CH}_4$ ; both differences could come from the data reduction.

We show in Figure 2.15 our retrieved chemical abundances in comparison to an equilibrium chemistry model from `FastChem 2` (Stock et al., 2022) at 600 K with a metallicity of 0.1 dex and a solar C/O ratio. We selected  $10\times$  sub-solar metallicity for this reference equilibrium model based on our retrieved sub-solar  $\text{H}_2\text{O}$  abundance (which is our most precisely constrained abundance), allowing us to compare the other retrieved molecular abundances

to equilibrium expectations. The retrieved Na abundance is consistent with this equilibrium model, as are the non-detections of CO, HCN and NH<sub>3</sub>. On the other hand, our retrieved abundance of CO<sub>2</sub> is significantly more abundant, whereas CH<sub>4</sub> and K are depleted by at least two orders of magnitude. We also computed equilibrium chemistry models with different C/O ratios, but the abundances did not change significantly. Some differences could be caused by non-equilibrium effects, like photochemistry for CH<sub>4</sub> and clouds for K. Methane, which would be expected at the temperature of HAT-P-18 b, was also not detected in the atmosphere of the slightly warmer hot-Saturn WASP-39 b (Feinstein et al., 2023). The C/O ratio is still uncertain for HAT-P-18 b’s atmosphere and the need for longer wavelength observations with other instruments, such as NIRSpec G395H, are required to measure all the main carbon-bearing species.

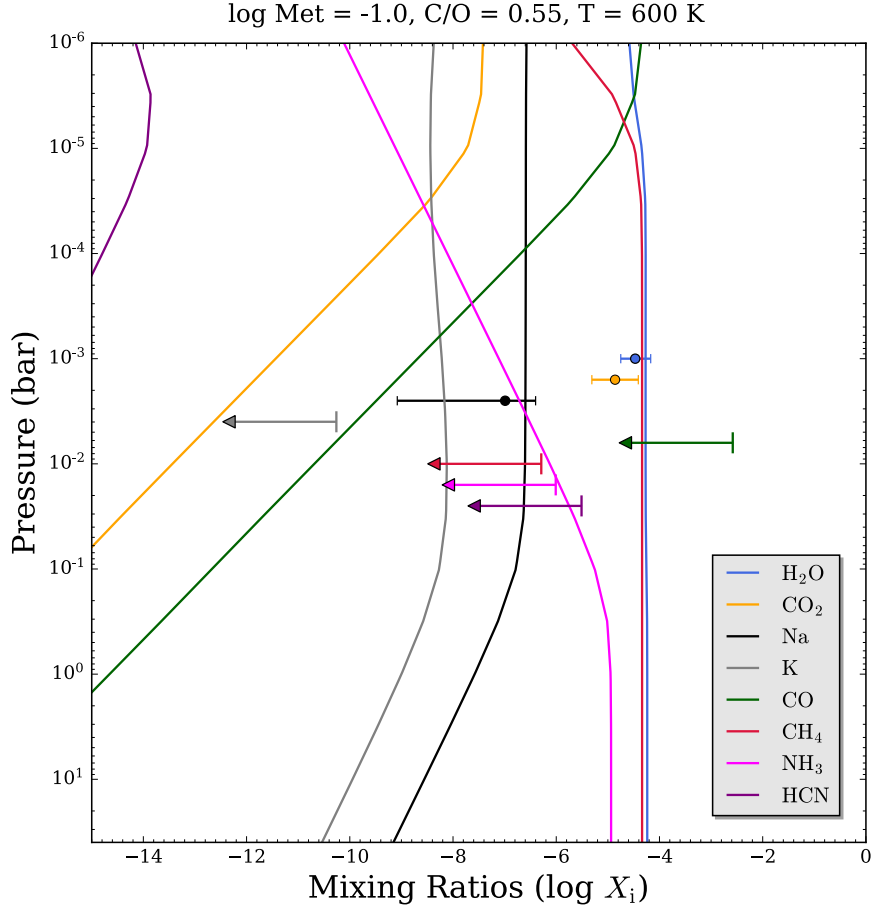
Our detection of CO<sub>2</sub> may be spurious, and the abundance estimate off. It is possible that we observe an edge effect in the NIRISS observations, as the CO<sub>2</sub> band is right at the red end of the SOSS spectrum, even exceeding it slightly. Longer wavelength data with the Near Infrared Spectrograph (NIRSpec) G395H grating would allow the detection of CO<sub>2</sub> to be confirmed and its abundance refined.

### 2.5.2. Legacy of Hubble & *Spitzer* in Light of JWST Results

For our HST and *Spitzer* transmission spectrum, the model without stellar contamination finds an abundance of H<sub>2</sub>O ( $\log \text{H}_2\text{O} = -2.43_{-1.05}^{+0.87}$ ) and a cloud pressure ( $\log P_{\text{cloud}} \lesssim -2 \approx 10 \text{ mbar}$ ) in perfect agreement with the findings of Tsiaras et al. (2018) ( $\log \text{H}_2\text{O} = -2.63 \pm 1.18$  and  $\log P_{\text{cloud}} = -2.18 \pm 0.91 \approx 6.6 \text{ mbar}$ ). However, we showed that a model considering the stellar contamination with a single heterogeneity removes the H<sub>2</sub>O detection because of a three-way degeneracy between the coverage fraction of heterogeneities and the abundances of H<sub>2</sub>O and CH<sub>4</sub> due to the lack of the visible spectrum with HST/WFC3.

The impact of spots on optical transmission spectra has been known for some time to mimic a Rayleigh scattering slope (e.g., McCullough et al., 2014; Rackham et al., 2018). Also, for exoplanets orbiting red dwarf stars, the 1.4  $\mu\text{m}$  water absorption feature observed with HST/WFC3 was sometimes debated to come from potential water molecules in their cold starspots (e.g., Barclay et al., 2021). Now, with NIRISS/SOSS, we can break the degeneracy between a hazy atmosphere and starspots, and potentially for colder stars, we could confirm if water absorption features come from starspots or the exoplanetary atmosphere.

HST and *Spitzer* inference studies had shown that water vapour, alkali metals, as well as clouds are common in hot giant planets (e.g., Madhusudhan, 2019). Still, there often remained a degeneracy between water and clouds, preventing robustly retrieving the abundance of H<sub>2</sub>O and the location of the cloud deck (e.g., Benneke & Seager, 2012, 2013). In this work, we confirmed these detections of water vapour, clouds and potentially sodium in a



**Figure 2.15** – Comparison between an equilibrium chemistry model (coloured curves) and the retrieved mixing ratios from the POSEIDON *one heterogeneity* model (error bars and arrows). The error bars correspond to  $1\sigma$  constraints for the inferred chemical species ( $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}_2$ , and Na), whilst the arrows correspond to  $2\sigma$  upper limits for the non-detected species. The FastChem 2 equilibrium model shown assumes a solar C/O ratio and  $10\times$  sub-solar metallicity (chosen based on the retrieved  $\text{H}_2\text{O}$  mixing ratio) and a temperature consistent with the retrieved terminator temperature (600 K).

hot giant atmosphere, and we demonstrate that the improved wavelength coverage provided by NIRISS/SOSS is sufficient to break the cloud-metallicity degeneracy.

### 2.5.3. Challenges of Occulted Spot Analysis in the Era of JWST

Our work adds to the growing body of literature demonstrating that the inference of the transit and occulted spots properties with JWST observations can and should be done to avoid possible biases in atmospheric estimates (e.g.; Bixel et al., 2019; Rackham et al., 2023). A semi-analytic tool like `spotrod` (Béky et al., 2014), used here, is less computationally expensive compared to other tools that use a pixelation approach to model the stellar disc.

Parallelization of those tools could be a simple solution to further improve the computation time.

Moreover, we found that modelling active features from light curves, with the current tools and knowledge, is a degenerate problem. The standard practice of fixing the orbital parameters using a white light curve fit, which also fixes the occulted spot size and position, may prevent ruling out some families of solutions. Therefore, we are currently developing a package to simultaneously fit all spectral channels using both wavelength-dependent and wavelength-independent parameters. Still, theoretical advances are needed to understand the limits of inferences from occultations and break the degeneracy between starspot size and temperature. Fortunately, those degeneracies do not impact the retrieved transmission spectrum significantly. Furthermore, `spotrod` assumes that active features have a circular shape and the same limb-darkening law as the star. This can also impact the retrieved properties and make it more difficult to lift some degeneracies. The occulted feature may, moreover, have a more complex structure consisting of a cool spot and a hot facula, which could explain the smaller temperature difference retrieved for the occulted spot compared to the unocculted spots. Nonetheless, the retrieved stellar fraction of the occulted spot  $f_{\text{oc.spot}} = 1.35 \pm 0.02\%$  is coherent with our preferred solution for the coverage fraction of unocculted spots  $f_{\text{unoc.spot}} = 12_{-3}^{+5}\%$ .

#### 2.5.4. Accounting for Unocculted Heterogeneities in JWST Transmission Spectra

Our best-fitting model suggests that the slope towards bluer wavelengths in this NIRISS/SOSS observation comes mainly from unocculted stellar heterogeneities. Our work shows that we should constrain planetary atmosphere and stellar contamination properties simultaneously with JWST NIRISS/SOSS data; otherwise, there is a risk of biasing atmospheric inferences. However, we could not distinguish clearly which of the four stellar contamination treatments investigated (one and two heterogeneities, one and two heterogeneities with free surface gravity) is the most plausible, but we were able to show that a particular choice of treatment does not significantly change the atmospheric inferences.

Furthermore, the spectra of active regions are currently modelled with 1D stellar models, which is another limitation, particularly for faculae (Norris et al., 2017; Johnson et al., 2021), because they fail to capture aspects of facular contrasts, such as the center-to-limb variation (e.g., Yeo et al., 2013) and the dependence on stellar metallicity (Witzke et al., 2018). More theoretical work, such as magnetohydrodynamic simulations of magnetic features, is needed to understand better and, thus, model the contrast of active regions more accurately as a

function of stellar fundamental parameters and activity. In the meantime, we suggest that spots' flux spectra be modelled with stellar models with lower surface gravities than the star.

## 2.6. Conclusion

We presented atmospheric retrieval analyses of two transmission spectra of HAT-P-18 b obtained with JWST NIRISS/SOSS, and HST/WFC3 with *Spitzer*/IRAC. We also modelled a spot-crossing event in the transit observed with NIRISS/SOSS. We confirmed that the wavelength coverage and spectral resolution of NIRISS/SOSS considerably improve the detection significance and the abundance constraints on chemical species compared to observations from HST and *Spitzer* combined. In including stellar heterogeneities in transit fits and atmospheric retrievals, we implemented new model considerations designed to fit the local surface gravity of stellar heterogeneities. This work is instructive for the upcoming JWST transit observations, particularly by informing the community on disentangling stellar and planetary atmosphere signals.

*Acknowledgements.* We thank Steven Rogowski for his initial work on HST and *Spitzer* data. This work is based on observations made with JWST, as well as the Hubble and Spitzer Space Telescopes. This project is undertaken with the financial support of the Canadian Space Agency. M.F.T. acknowledges financial support from the Fonds de Recherche du Québec — Nature et technologies (FRQNT) and funding from the Trottier Family Foundation in their support of iREx. R.J.M. acknowledges support for this work provided by NASA through the NASA Hubble Fellowship grant HST-HF2-51513.001, awarded by the Space Telescope Science Institute, which is operated by the Association of Universities for Research in Astronomy, Inc., for NASA, under contract NAS5-26555. M.R. acknowledges financial support from the Natural Sciences and Engineering Research Council of Canada (NSERC) as well as from FRQNT and iREx. C.P. acknowledges support from FRQNT and TEPS Ph.D. scholarships and the NSERC Vanier scholarship. K.M. acknowledges financial support from the FRQNT. O.L. acknowledges financial support from FRQNT and iREx. D.J. is supported by NRC Canada and by an NSERC Discovery Grant. J.D.T was supported for this work by NASA through the NASA Hubble Fellowship grant #HST-HF2-51495.001-A awarded by the Space Telescope Science Institute, which is operated by the Association of Universities for Research in Astronomy, Incorporated, under NASA contract NAS5-26555.

*Data Availability.* All data used in this study are publicly available from the Barbara A. Mikulski Archive for Space Telescopes<sup>6</sup> and the Spitzer Heritage Archive<sup>7</sup>.

---

6. <https://mast.stsci.edu/portal/Mashup/Clients/Mast/Portal.html>

7. <https://sha.ipac.caltech.edu/applications/Spitzer/SHA/>

**Table 2.6** – Comparison of best-fitting “white” light curve parameters

Pipeline	Spot-crossing	$t_0$ [BJD - 2400000]	$R_p/R_*$	$b$	$a/R_*$	$q_1$	$q_2$
<b>NIRISS</b>							
<b>supreme-</b>	Masked	$59743.353393^{+0.000018}_{-0.000017}$	$0.1377^{+0.0003}_{-0.0003}$	$0.398^{+0.009}_{-0.009}$	$15.31^{+0.05}_{-0.05}$	$0.20^{+0.02}_{-0.02}$	$0.31^{+0.05}_{-0.05}$
<b>SPOON</b>	Modelled	$59743.353403^{+0.000019}_{-0.000017}$	$0.1379^{+0.0003}_{-0.0004}$	$0.429^{+0.010}_{-0.010}$	$15.32^{+0.05}_{-0.05}$	$0.25^{+0.03}_{-0.02}$	$0.40^{+0.05}_{-0.05}$
<b>NAMELESS</b>	Masked	$59743.84893^{+0.00002}_{-0.00002}$	$0.1371^{+0.0004}_{-0.0004}$	$0.380^{+0.013}_{-0.015}$	$15.42^{+0.07}_{-0.07}$	$0.19^{+0.02}_{-0.02}$	$0.33^{+0.06}_{-0.05}$
<b>WFC3</b>	—	57430	$0.1373^{+0.0004}_{-0.0004}$	$0.373^{+0.019}_{-0.019}$	$16.69^{+0.15}_{-0.15}$	0.179179	0.296171

*Note:* For the WFC3 white light curve fit, the mid-transit time and the two parameters of the quadratic limb darkening law were fixed to those values.

## 2.7. Appendix

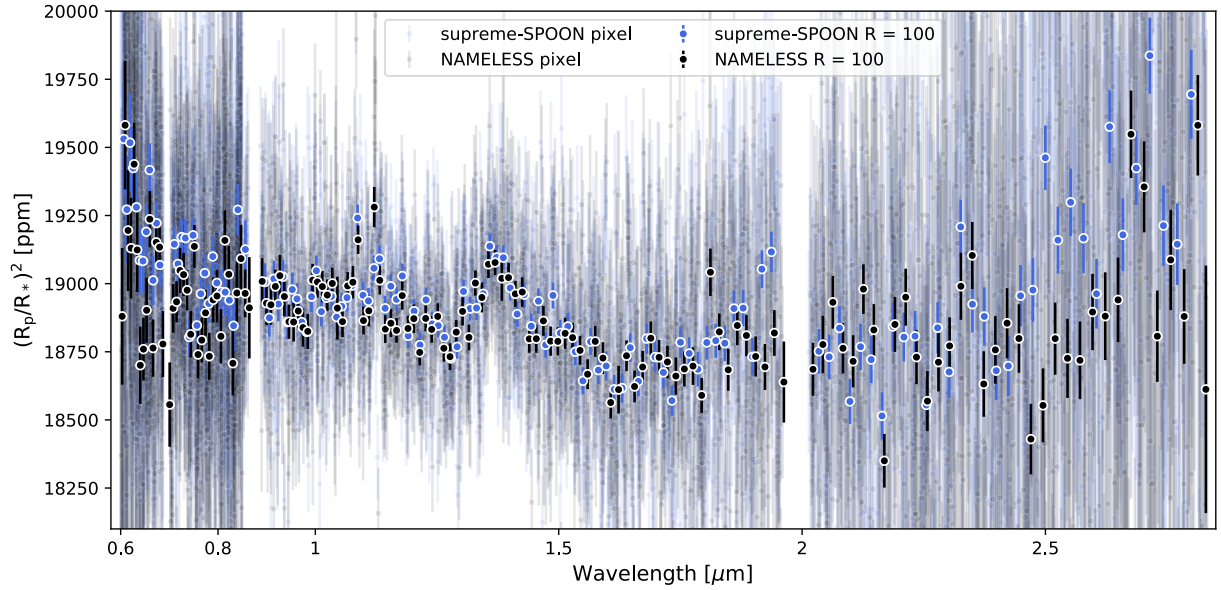
### 2.7.1. Additional Reduction Pipeline

We carried out an independent reduction on the HAT-P-18 b SOSS TSO using NAMELESS (described in depth in Coulombe et al., 2023). We applied all stage 1 steps of the `jwst` pipeline except for the dark current subtraction. We subsequently applied the world coordinate system, source type, and flat field steps of stage 2. We proceeded with the background subtraction, scaling independently the two regions separated by the jump of the model background provided by STScI, as described in detail in Lim et al. submitted. Treatment of the 1/f noise was performed by scaling each individual column of the trace independently and finding the value that results in the lowest chi-square for a given column and integration (Coulombe et al., 2023). Finally, we extracted the 2D spectra using the `getSimpleSpectrum` function of the `transitspectroscopy` pipeline<sup>8</sup> with an aperture width of 30 pixels.

We perform the light curve fitting on the extracted spectrophotometric observations in an identical manner to the one described in Section 2.3. We fix the orbital parameters ( $T_0$ ,  $b$ ,  $a/R_*$ ) to the best-fitting values from the order 1 white light curve fit of the `supreme-SPOON` pipeline to ensure consistency. The retrieved transmission spectrum, along with the one from the reference `supreme-SPOON` reduction, are shown in Figure 2.16. These transmission spectra obtained through two different pipelines are in good agreement; note that the `supreme-SPOON` reduction corrects for the order 0 contaminants, and NAMELESS masks them. Otherwise, the transmission spectra show overall consistent transit depths and features. However, the reduction pipeline NAMELESS provides a transmission spectrum with a lower rise at redder wavelengths corresponding to potentially less abundant CO<sub>2</sub>. A comparison of the best-fitting white light curve parameters for NIRISS/SOSS with both pipelines is available in Table 2.6. The best-fitting parameters for the broadband light curve fit with the spot-crossing modelled are also displayed.

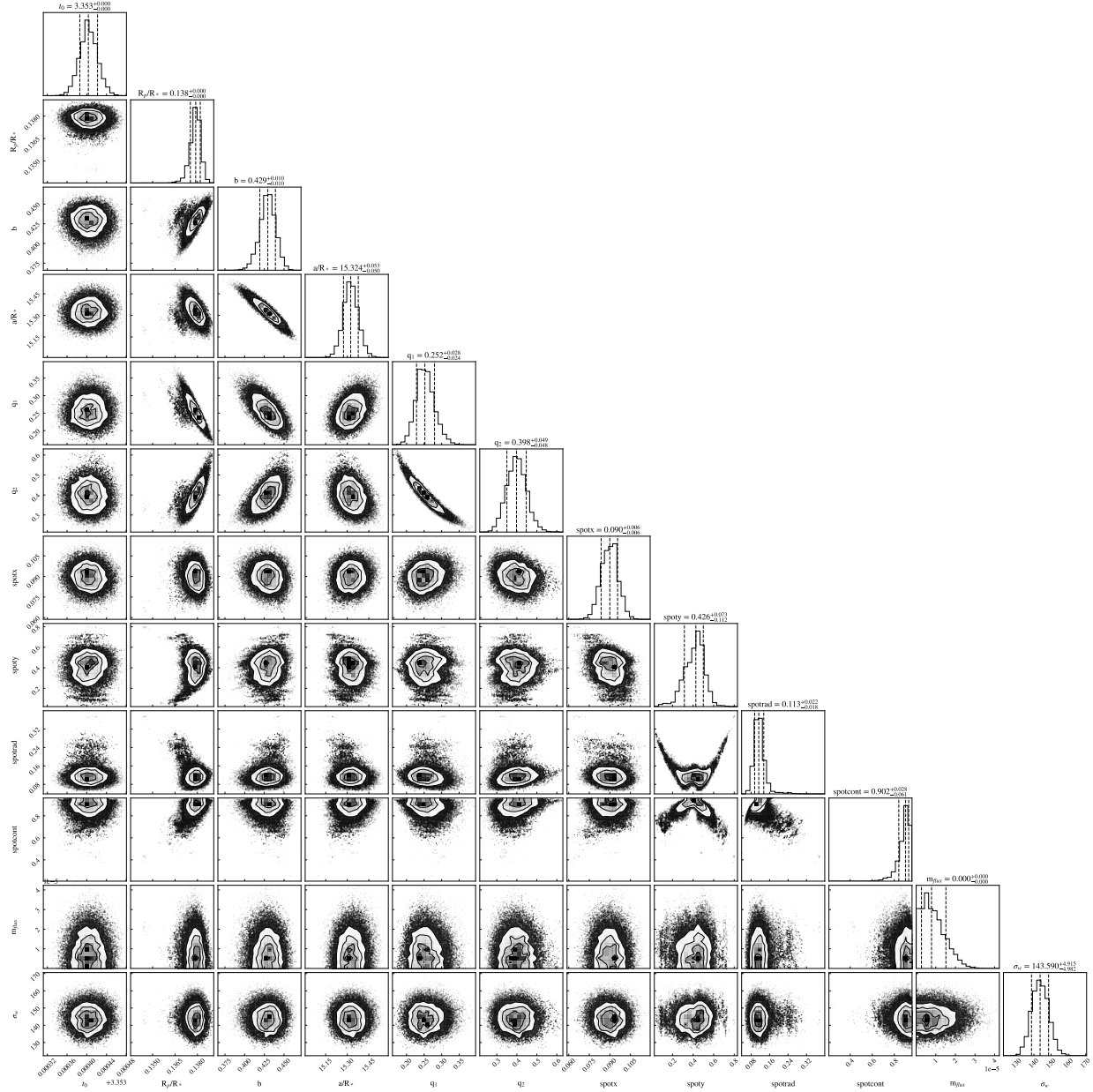
### 2.7.2. Additional Materials

8. <https://github.com/nespinoza/transitspectroscopy>

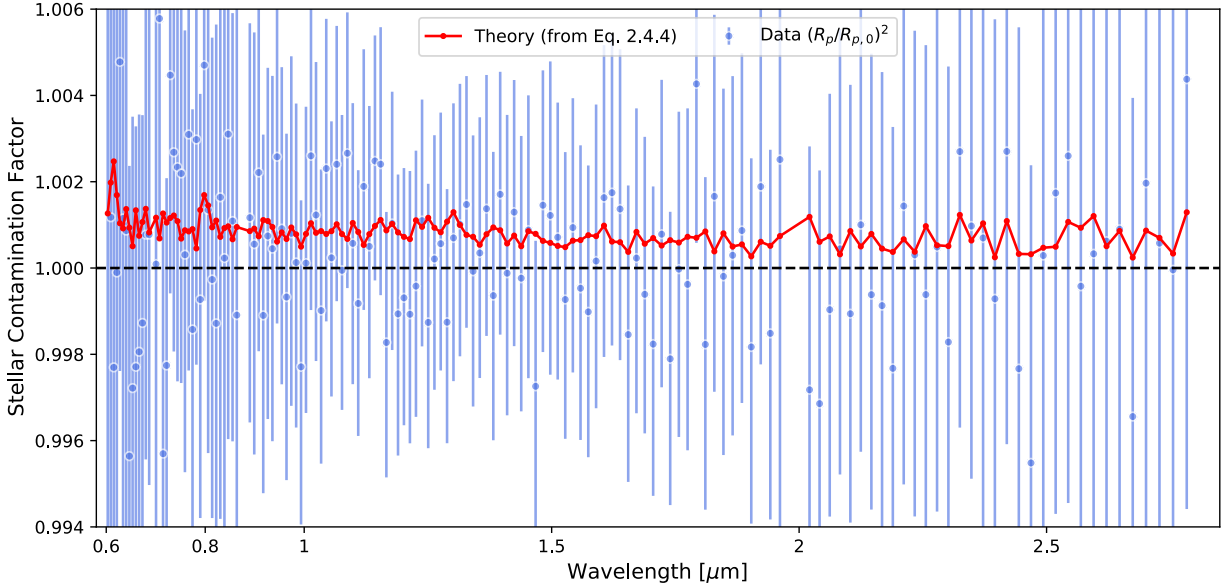


**Figure 2.16** – Comparison of transmission spectra for HAT-P-18 b obtained with two different pipelines: **supreme-SPOON** (blue) and **NAMELESS** (black). Transmission spectra are shown binned to a constant resolving power of  $R = 100$  (darker points) and at the pixel resolution (faded points).





**Figure 2.17** – Posterior probability distributions from the NIRISS/SOSS broadband light curve fit with `spotrod`. This corresponds to the joint fit of the orbital and starspot parameters.



**Figure 2.18** – Stellar contamination on the transmission spectrum due to the occulted spot. The contamination factor (blue) represents the squared ratio of the planet’s apparent radius  $R_p$  over the planet’s true radius  $R_{p,0}$ . The former corresponds to a transit depth computed with a spot-crossing masked and the latter with a spot-crossing modelled. The theoretical factor (red) was derived from Eq. 2.4.4.

## Chapter 3

---

# Near-Infrared Transmission Spectroscopy of WASP-52 b with JWST/NIRISS: Joint Inference of the Exoplanetary Atmosphere and Stellar Active Features

Marylou Fournier-Tondreau<sup>1</sup>, Ryan J. MacDonald<sup>2</sup>, Kim Morel<sup>1</sup>, David Lafrenière<sup>1</sup>, Étienne Artigau<sup>1,3</sup>, Olivia Lim<sup>1</sup>, Michael Radica<sup>1</sup>, René Doyon<sup>1</sup>, Loïc Albert<sup>1</sup>, Jason F. Rowe<sup>4</sup>, Antoine Darveau-Bernier<sup>1</sup>, et al.

<sup>1</sup>Institut Trottier de recherche sur les exoplanètes and Département de Physique, Université de Montréal, 1375 Avenue Thérèse-Lavoie-Roux, Montréal, QC, H2V 0B3, Canada

<sup>2</sup>Department of Astronomy, University of Michigan, 1085 S. University Ave., Ann Arbor, MI 48109, USA

<sup>3</sup>Observatoire du Mont-Mégantic, Université de Montréal, Montréal, QC, H3C 3J7, Canada

<sup>4</sup>Department of Physics & Astronomy, Bishop's University, Sherbrooke, QC J1M 1Z7, Canada

Ce manuscrit est en préparation et sera soumis à la revue arbitrée *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* d'ici à la fin de l'année 2023.

**RÉSUMÉ.** La Jupiter chaude qui transite WASP-52 b est une excellente cible pour la caractérisation atmosphérique par spectroscopie de transmission. Cependant, son étoile hôte, une naine active de type K, est connue pour avoir des hétérogénéités de surface, telles que des taches stellaires et des facules, ce qui contribue également aux caractéristiques du spectre de transmission. Un transit de WASP-52 b a été observé avec JWST NIRISS/SOSS dans le cadre du cycle 1 du programme *Guaranteed Time Observations* (GTO) et, en effet, des occultations de taches sont présentes dans le transit. Dans ce travail, nous récupérons le spectre de transmission allant de 0,6 à 2,8  $\mu\text{m}$  en modélisant simultanément le transit planétaire et les taches occultées. Puis, nous caractérisons l'atmosphère de WASP-52 b en tenant compte de la contribution des régions actives au spectre de transmission, ainsi, nous contraignons simultanément les propriétés de l'atmosphère

planétaire et les hétérogénéités non occultées sur la surface stellaire.

**Mots-clés :** planètes et satellites : atmosphères – planètes et satellites : planètes géantes – planètes et satellites : individuel : WASP-52 b – (étoiles :) taches stellaires – méthodes : analyse de données – techniques : spectroscopique

**ABSTRACT.** The transiting hot Jupiter WASP-52 b is an excellent target for atmospheric characterization through transmission spectroscopy. However, its host star, an active K-type dwarf, is known to have surface heterogeneities, such as starspots and faculae, which also contribute to the information encoded in the transmission spectrum. A transit of WASP-52 b was observed with JWST NIRISS/SOSS as part of the Guaranteed Time Observations program cycle 1, and indeed two clear spot-crossing events are present in the transit. In this work, we retrieve the 0.6-2.8  $\mu\text{m}$  transmission spectrum by simultaneously modelling the planetary transit and occulted starspots. We then characterize WASP-52 b’s atmosphere by accounting for the contribution of active regions to the transmission spectrum; thereby, we simultaneously constrain the properties of the planetary atmosphere and the unocculted heterogeneities on the stellar surface.

**Keywords:** planets and satellites: atmospheres – planets and satellites: gaseous planets – planets and satellites: individual: WASP-52 b – (stars:) starspots – methods: data analysis – techniques: spectroscopic

## 3.1. Introduction

Transmission spectroscopy has proven to be one of the most powerful techniques in probing the composition of exoplanetary atmospheres and making inferences about exoplanets’ formation and migration pathways (Seager & Sasselov, 2000; Brown, 2001). It is a key science purpose for the James Webb Space Telescope (JWST). The observations made with this new observatory have been so far promising, showing exquisite precision, revealing several spectral features, and leading to the first detection of  $\text{CO}_2$  and  $\text{SO}_2$  in the atmosphere of a hot Jupiter (WASP-39 b; JWST Transiting Exoplanet Community Early Release Science Team et al., 2023; Rustamkulov et al., 2023; Alderson et al., 2023). Beyond providing better precision, JWST also improves on the spectral range available to its predecessors and now covers all main molecules expected in hot Jupiter’s atmospheres, such as  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{CO}$ , and  $\text{CO}_2$ , as well as metal alkalis, like Na and K (e.g., Burrows & Sharp, 1999; Moses et al., 2011). With good sensitivity to such a wide range of features, JWST offers an excellent opportunity to study many more complex effects that could occur in exoplanet atmospheres, such as vertical mixing and photochemistry (e.g., Tsai et al., 2023).

According to the atmosphere’s temperature structure and composition, a wide range of exotic condensates are also proposed to exist, ranging from pure transition metals (like

Fe) to silicates, sulphides, and salt/alkali condensates, which may give rise to significant clouds (e.g., Wakeford & Sing, 2015). JWST might offer new insights into the presence and characteristics of those particle clouds. However, clouds can also complicate transmission spectroscopy analyses by covering considerable portions of the atmosphere, making it difficult to identify the chemical species present therein (e.g., Deming et al., 2013).

The hot Jupiter WASP-52 b, discovered in 2011 by Hébrard et al. (2013), is an ideal target for exoplanet atmospheric studies given its large scale height ( $H = 700$  km) and deep transit ( $\delta = 0.0271$ ). Bruno et al. (2020) presented a retrieval analysis of its optical to infrared transmission spectrum combining HST/WFC3 (Bruno et al., 2018), as well as HST/STIS and *Spitzer*/IRAC (Alam et al., 2018) observations. They reported a water abundance of  $\log_{10} \text{H}_2\text{O} = -3.30_{-1.12}^{+0.94}$ , subsolar C/O, 0.1-10 $\times$  solar metallicity and overall weak muting of the spectral features by clouds. Alam et al. (2018) had reported hints of Na (at  $2.3\sigma$  confidence) in a cloudy atmosphere. Also, Chen et al. (2020) detected Na, K, and H $\alpha$  with the high-resolution spectrograph ESPRESSO at the VLT.

However, in analyzing the transit spectrum of this exoplanet, one must carefully consider the effect of its moderately active K2V host star; occulted active regions, such as starspots (Mancini et al., 2017; Bruno et al., 2018; May et al., 2018) and faculae (Kirk et al., 2016), have been identified several times. Stellar activity is indeed one of the main challenges to correctly characterize exoplanet atmospheres through transmission spectroscopy. Active features can prevent the correct measure of transit parameters and introduce spurious spectral features in transmission spectra. Many efforts were undertaken to study the stellar activity of WASP-52 and mitigate its impact on transit spectra (Louden et al., 2017; Alam et al., 2018; May et al., 2018; Bruno et al., 2020). Notably, Bruno et al. (2020) found a  $< 3000$  K temperature for the unocculted starspots with a 5 % coverage fraction.

In this work, we present a joint fit of the planetary atmosphere’s properties and its host star’s stellar heterogeneities using a transmission spectrum observed with the Near Infrared Imager and Slitless Spectrometer (NIRISS) instrument of the JWST. We describe the observations in Section 3.2 and the data analysis, as well as the modelling of the spot-crossing events in Section 3.3.

## 3.2. Observations

A transit observation of WASP-52 b was obtained using the Single Object Slitless Spectroscopy (SOSS) mode of the NIRISS instrument (Albert et al., 2023; Doyon et al., 2023) as part of the JWST Guaranteed Time Observations program cycle 1 (PID: 1201; PI: David Lafrenière). The time series observation (TSO) started on November 27<sup>th</sup>, 2022, at 07:08:33.169 UTC and spanned 4.44 hours, which covered the 1.8 h transit as well as 1.9 h of baseline before the transit and 0.74 h after the transit. It used the standard

**Table 3.1** – Parameters of the WASP-52 planetary system used in this analysis.

Parameters	WASP-52	Unit
<b>Stellar parameters</b>		
Spectral type	K2V	
Stellar radius	$0.79 \pm 0.02$	$R_{\odot}$
Stellar mass	$0.87 \pm 0.03$	$M_{\odot}$
Metallicity	$0.03 \pm 0.12$	[Fe/H]
Stellar surface gravity	$4.582 \pm 0.014$	$\log_{10} \text{ cm/s}^2$
Effective temperature	$5000 \pm 100$	K
<b>Planetary and transit parameters</b>		
Planet radius	$1.27 \pm 0.03$	$R_J$
Planet mass	$0.46 \pm 0.02$	$M_J$
Planet surface gravity	$2.81 \pm 0.03$	$\log_{10} \text{ cm/s}^2$
Orbital period	$1.7497798 \pm 0.0000012$	day
Eccentricity	0	
Impact parameter	$0.60 \pm 0.02$	
Scaled semi-major axis	$7.3801^{+0.1106}_{-0.1073}$	AU
Transit duration	$0.0754 \pm 0.0005$	day
Area ratio $(R_p/R_*)^2$	$0.0271 \pm 0.0004$	
Equilibrium temperature	$1315 \pm 35$	K

*Note:* Parameters from Hébrard et al. (2013)

GR700XD/CLEAR combination, along with the SUBSTRIP256 detector, which captures both diffraction orders 1 and 2. There is a total of 265 integrations, each consisting of 10 groups and lasting 60.434 seconds.

### 3.3. Data Reduction and Light Curve Fitting

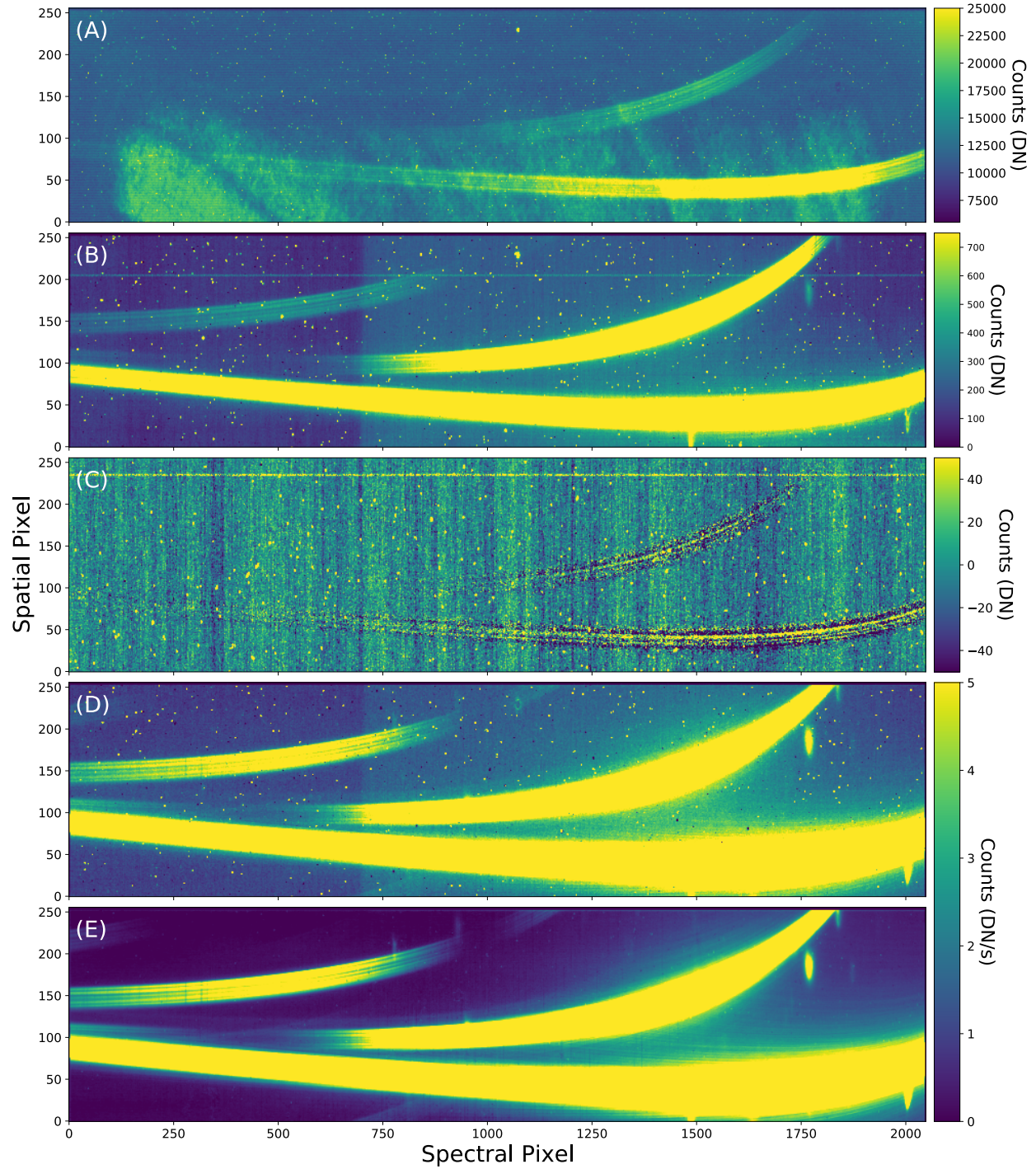
#### 3.3.1. Data Reduction

We reduce the TSO using the `supreme-SP00N` pipeline (Radica et al., 2023), starting from the raw, uncalibrated files. We follow a similar procedure as was presented in Radica et al. (2023). *The main reduction was done and will be described further by K.M.*

A summary of the major reduction steps can be visualized in Figure 3.1. Furthermore, we reduced the observations with another independent pipeline, `SOSSISSE` (Lim et al. submitted), to verify the self-consistency of our results (see Appendix 3.4.1).

#### 3.3.2. Light Curve Fitting with Occulted Starspots Modelling

We construct a broadband light curve, following Fournier-Tondreau et al. submitted, by summing the flux from wavelengths bluewards of  $1.5 \mu\text{m}$  in order 1 ( $0.85\text{--}1.5 \mu\text{m}$ ) and from



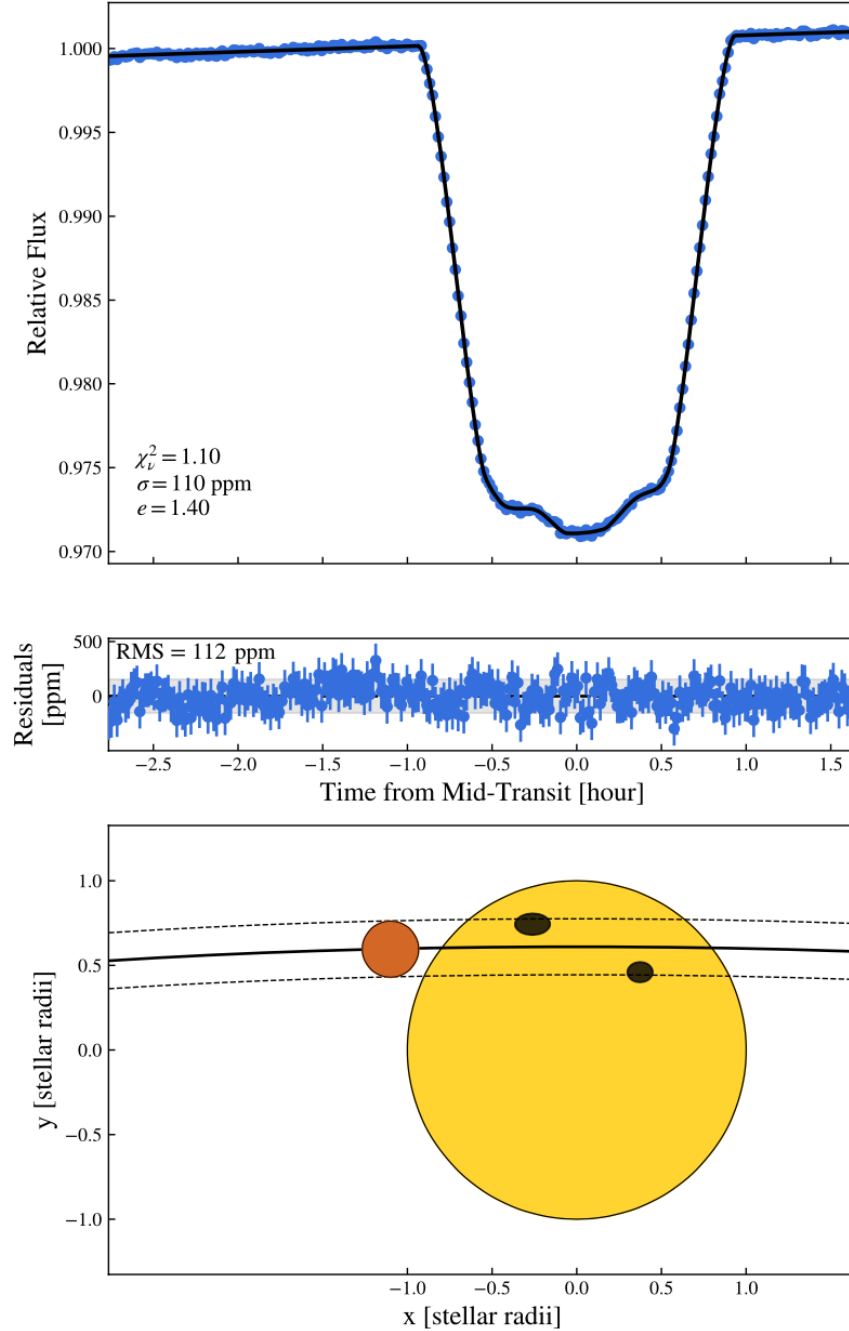
**Figure 3.1** – Data products at different stages of the reduction process. **(A)**: A raw, uncalibrated data frame in data numbers (DN). **(B)**: Data frame after superbias subtraction and reference pixel correction. **(C)**:  $1/f$  noise. **(D)**: After ramp fitting and flat field correction. **(E)**: Final calibrated data product.

0.65–0.85  $\mu\text{m}$  in order 2 to maximize the signal-to-noise (S/N) and to keep the wavelength range where the spot-crossings have a stronger effect. We mask the first and the 65<sup>th</sup> integration, which displayed an anomalous background signal. The resulting broadband light curve is shown in Figure 3.2 and displays two clear spot-crossing events, seen as bumps near the beginning and the end of the transit. We fit a transit model with two spot-crossing events using `spotrod` (Béky et al., 2014) with the `Juliet` package (Espinoza et al., 2019a). We fix the orbital period to 1.7497798 d, the eccentricity to 0, and the argument of periastron to  $0^\circ$  (Hébrard et al., 2013; all their values used in this paper are listed in Table 3.1). We fit for the mid-transit time  $T_0$ , the impact parameter  $b$ , the scaled semi-major axis  $a/R_*$ , the scaled planet radius  $R_p/R_*$ , the spots’  $x$ - and  $y$ -position, the spots’ radius  $R_{\text{spot}}$ , the spot-to-stellar flux contrast  $F_{\text{spot}}/F_*$ , a term to fix the zero point of the transit baseline  $\theta_0$ , and the two quadratic limb darkening parameters ( $q_1$ ,  $q_2$ ) following the parameterization of Kipping (2013). We also fit for a scalar jitter term,  $\sigma$ , which is added to the flux error in quadrature. We tested detrending against linear models with time, trace  $x$ -position, trace  $y$ -position and a linear and quadratic model with time. The broadband light curve best fits a transit model with a linear model with time  $\theta_1$ . We sample the parameter space with 2000 live points using `dynesty` (Speagle, 2020). Therefore, we fit 17 parameters; the priors and the best-fitting transit parameters for the broadband light curve fit are shown in Table 3.2. The reduced Chi-squared statistic for the fit with the highest likelihood is  $\chi_\nu^2 = 1.10$ . This best-fitting transit model is overplotted in Figure 3.2 with the modelling of the spot-crossings. We also tested a model with a facula (bright region) near the middle of the transit instead of two dark spots by allowing the contrast to be greater than one, but we ruled it out because the model could not match the light curve satisfactorily.

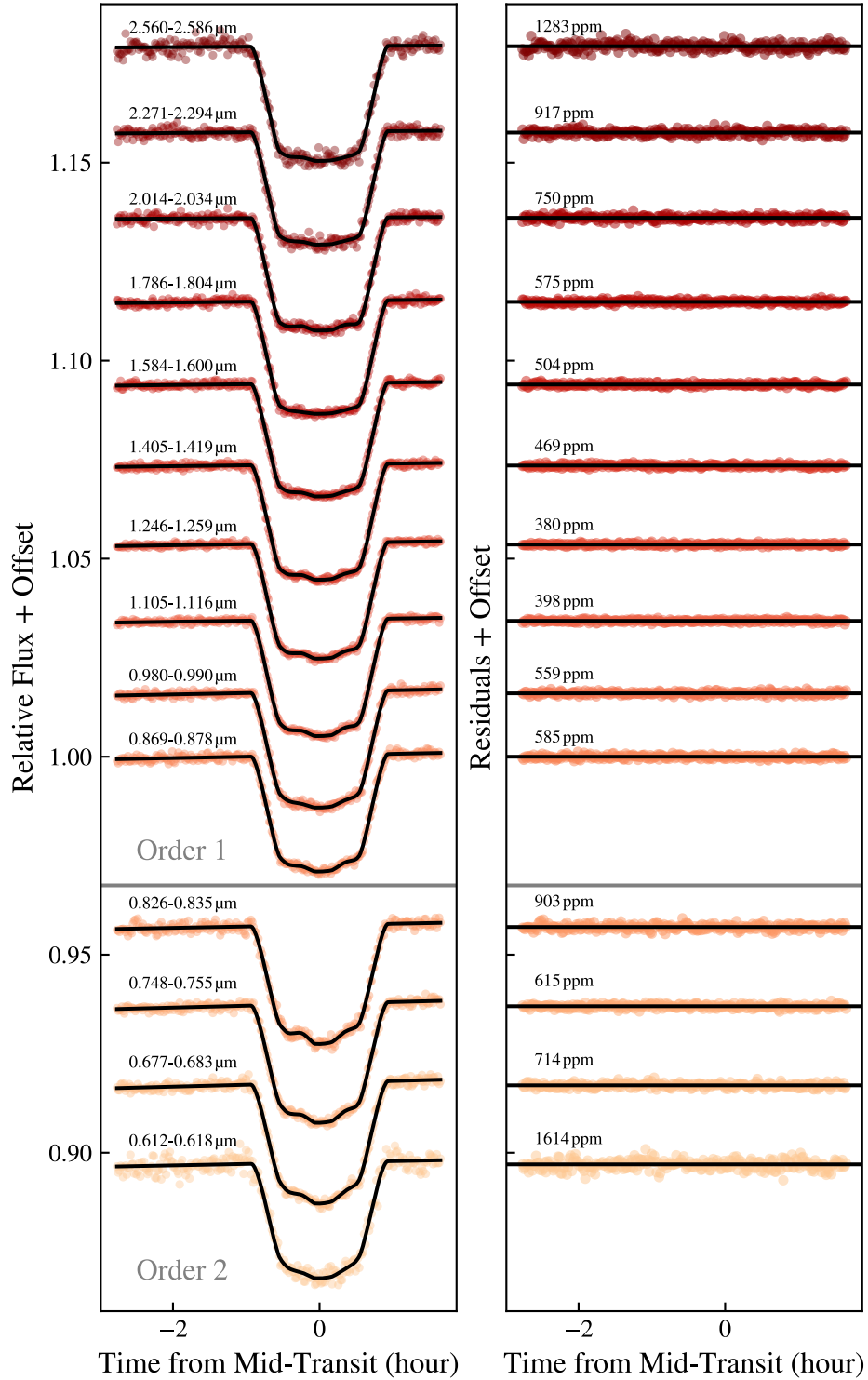
We then proceed to fit the spectrophotometric light curves at the pixel level. This is 2038 light curves for order 1 and 567 for order 2. At this point,  $T_0$ ,  $b$ ,  $a/R_*$ , the spots’ positions and radii were fixed to the best-fitting values with the highest likelihood from the broadband fit. The remaining transit parameters to be fitted were the scaled planet radius, the contrast for each spot, and the two quadratic limb darkening parameters for each spectrophotometric light curve. We put Gaussian priors on the limb-darkening parameters based on calculations from the `ExoTiC-LD` package (Laginja & Wakeford, 2020; Wakeford & Grant, 2022) using the 3D stagger grid (Magic et al., 2015). The widths of the Gaussian priors are set to 0.2 following Patel & Espinoza (2022). The spectrophotometric light curves for 14 bins at a resolving power of  $R = 100$ , along with their best-fitting transit models, are displayed in Figure 3.3. The resulting transmission spectrum is depicted in Figure 3.4, and a comparison with the transmission spectrum obtained with the `SOSSISSE` pipeline is shown in Figure 3.6.

The  $y$ -positions of the occulted spots are not well constrained and correlated with their size and contrast (see Figure 3.7); therefore, we also perform a light curve fit with another tool to try to lift some degeneracies. This package simultaneously fits all spectrophotometric

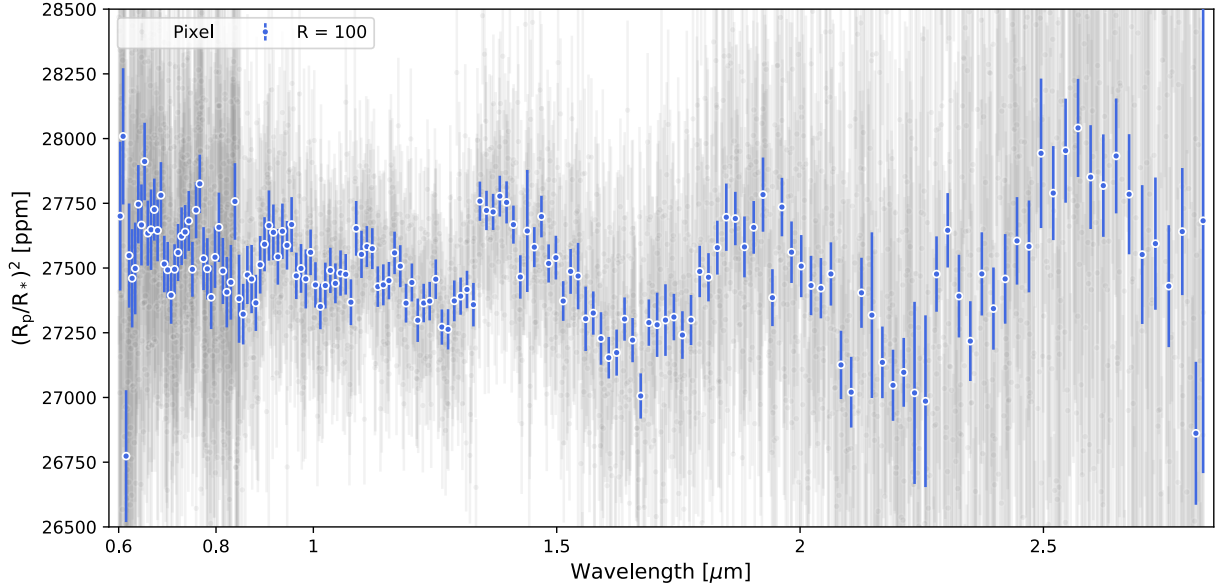




**Figure 3.2** – Modelling of the spot-crossing events. *Top*: Broadband light curve (blue) along with the best-fitting transit model with the highest likelihood overplotted (black). The fit statistics are listed in the bottom left corner ( $\chi^2_{\nu}$ ; the reduced Chi-squared,  $\sigma$ ; the average error bar, and  $e$ ; the error multiple needed to obtain a  $\chi^2_{\nu}$  equal to unity). *Middle*: Residuals to the transit fit with the root-mean-square (RMS) scatter. *Bottom*: Physical representation of the solution for the occulted starspots (black circle) on the star (yellow circle), along with the transit motion in black (dashed lines representing the transit chord) of the planet (orange circle).



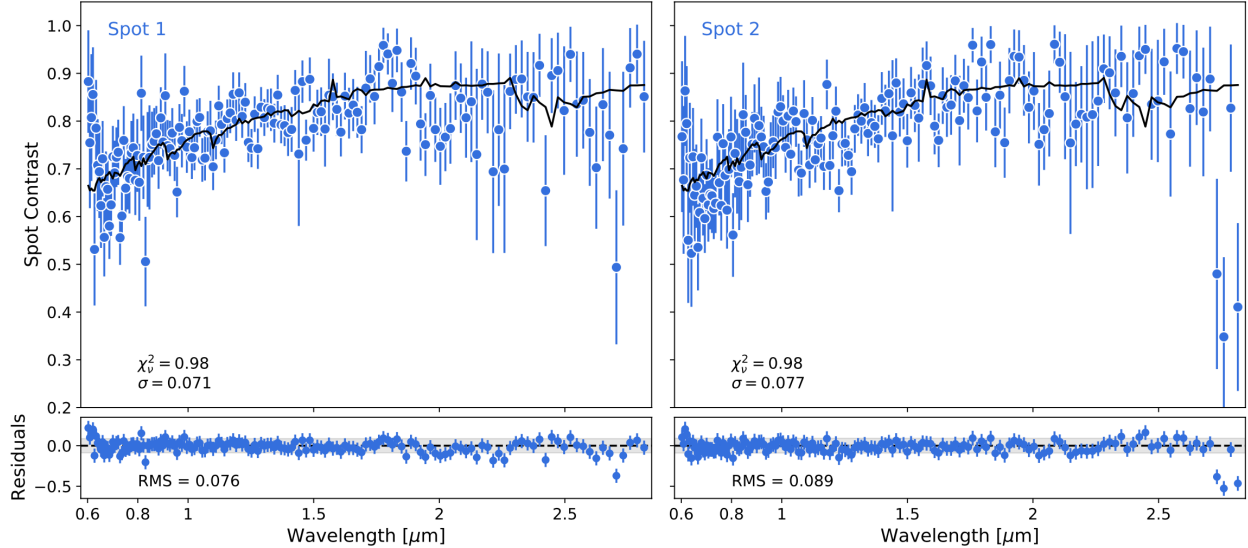
**Figure 3.3** – Binned spectrophotometric light curves, along with the best-fitting transit models (black). *Left*: Normalized spectrophotometric light curves at a resolving power of  $R = 100$ . *Right*: Associated residuals from the light curve fit in each bin with the RMS scatter indicated.



**Figure 3.4** – Transmission spectrum of WASP-52 b; at pixel resolution (faded grey) and binned to a resolving power of  $R = 100$  (blue).

light curves using wavelength-dependent and wavelength-independent parameters. Also, limb-darkening is treated differently; we fit the stellar temperature and the surface gravity and generate the limb-darkening parameters from the ExoTiC-LD package instead of fitting them directly. The stellar metallicity is fixed to Hébrard et al. (2013) value. *This light curve fitting is done by D.L. and is still in progress.*

Finally, to retrieve the spot contrast spectra, we also fit the spectrophotometric light curves at  $R = 100$  because the model cannot constrain the contrasts properly at the pixel level at wavelengths redwards of  $1.8 \mu\text{m}$  due to the low S/N. We fit these contrast spectra, using the emcee MCMC package (Foreman-Mackey et al., 2013), to constrain the temperature of each spot by using PHOENIX stellar atmosphere model spectra (Husser et al., 2013). We fit for the spot temperature and spot surface gravity  $g$  following Fournier-Tondreau et al. submitted. For the spot model spectra, we use stellar model spectra with temperatures from 4000 to 5000 K, logarithmic surface gravities from 1.5 to 5.5 dex and a fixed metallicity of 0.03 from Hébrard et al. (2013), and we interpolate these spectra in temperature and  $\log g$ . For the star model spectrum, we compute a stellar spectrum with a temperature,  $\log g$  and metallicity fixed to Hébrard et al. (2013) values. A model spot contrast spectrum is the ratio of a model spot spectrum to the model star spectrum. Figure 3.5 shows the best-fitting contrast model for each spot overplotted on the retrieved contrast spectra.



**Figure 3.5** – Contrast spectra of the two occulted spots. *Top*: Retrieved contrast spectrum for each spot at a resolving power of  $R = 100$  (blue), along with the best-fitting transit model overplotted (black). The fit statistics are listed in each bottom left corner ( $\chi^2_v$ ; the reduced Chi-squared, and  $\sigma$ ; the average error bar). *Bottom*: Residuals to the contrast fit with the RMS scatter indicated.

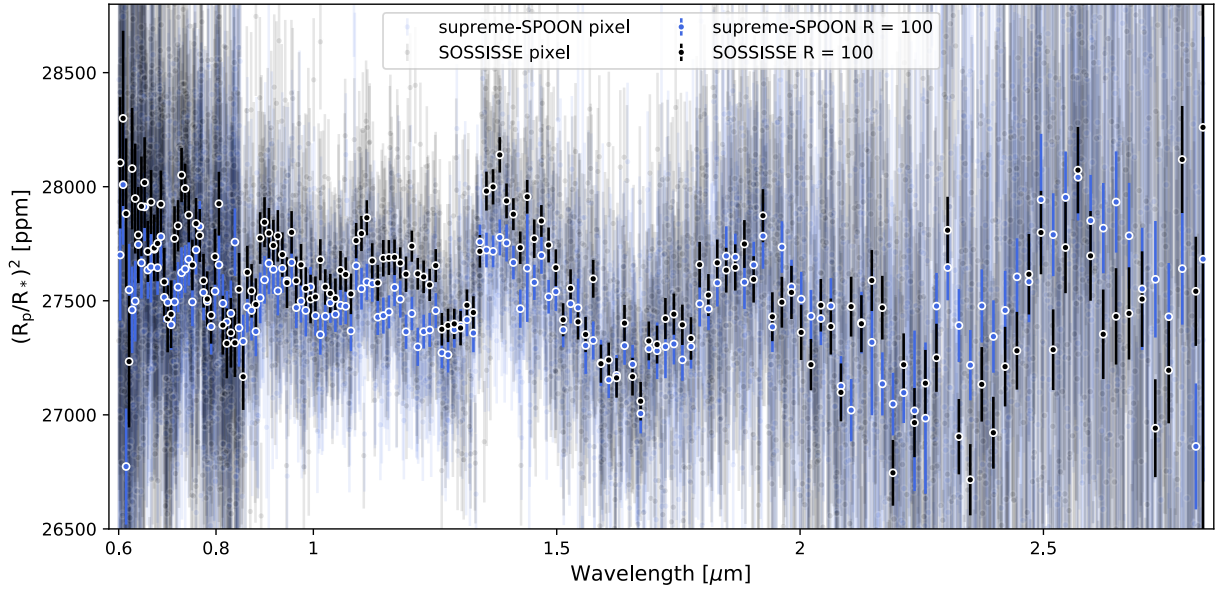
### 3.3.3. Inferred Occulted Starspot Properties on WASP-52

We find two cold spots of sizes  $R_{\text{spot},1} = 0.11^{+0.04}_{-0.02} R_*$  and  $R_{\text{spot},2} = 0.11^{+0.07}_{-0.04} R_*$  with temperatures of  $\Delta T_1 = -351 \pm 16$  K and  $\Delta T_2 = -426^{+16}_{-15}$  K colder than the stellar photosphere. The combined coverage fraction of these two occulted spots is thus  $f_{\text{oc, spots}} = 2.4\%$ . The surface gravities of the spots’ models are lower than the star with  $\Delta \log g_1 = 2.2 \pm 0.3$  dex and  $\Delta \log g_2 = 0.42^{+0.8}_{-0.6}$  dex, respectively for spots 1 and 2. The broadband light curve fit with *Juliet* led to precise measurements on the x-positions of the spots but not to well-constrained y-positions. The first spot particularly can be modelled with mainly two y-positions, one at  $y = 0.75^{+0.04}_{-0.03} R_*$  and another at  $y = 0.43^{+0.05}_{-0.10} R_*$ , as shown in Table 3.2 and in the  $y_{\text{spot},1}$  posterior distribution from the broadband light curve fit with the supreme-SPOON reduction (see the corner plot in Figure 3.7).

Furthermore, we compute the stellar contamination spectrum for these retrieved spots’ properties to evaluate their impact on the transmission spectrum if they were not accounted for. The stellar contamination factor  $\epsilon_{\lambda, \text{het}}$  for  $N_{\text{het}}$  heterogeneities can be expressed as (e.g., Rackham et al., 2018),

$$\epsilon_{\lambda, \text{het}} = \frac{1}{1 - \sum_{i=1}^{N_{\text{het}}} f_{\text{het}, i} \left( 1 - \frac{F_{\lambda, \text{het}, i}}{F_{\lambda, \text{phot}}} \right)} \quad (3.3.1)$$

where  $f_{\text{het}, i}$  is the fractional stellar disc coverage of the  $i^{\text{th}}$  heterogeneous region, with corresponding specific flux  $F_{\lambda, \text{het}, i}$  and  $F_{\lambda, \text{phot}}$  is the specific flux of the stellar photosphere.



**Figure 3.6** – Comparison of transmission spectra obtained with two different pipelines: supreme-SPOON (blue) and SOSSISSE (black). Transmission spectra are shown binned to a resolving power of  $R = 100$  (darker points) and at the pixel resolution (faded points).

Figure 3.8 shows that they would mainly mimic a Rayleigh scattering slope of the order of 30-80 ppm on the transit depth.

## 3.4. Appendix

### 3.4.1. Additional Reduction Pipeline

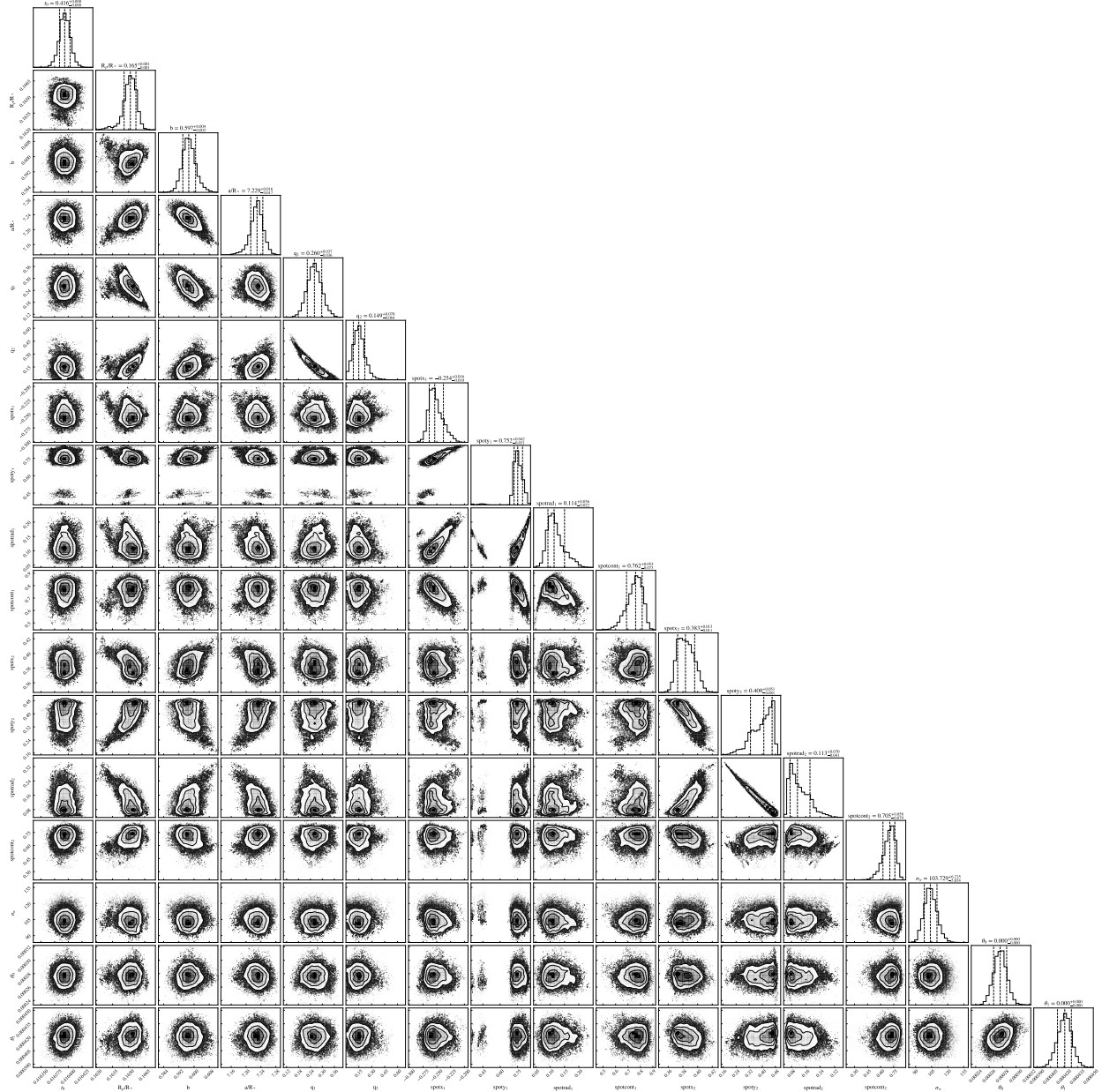
We performed an independent reduction on the TSO using SOSSISSE; this pipeline was described in Lim et al. submitted. We perform the light curve fitting identically to the one described in Section 3.3.2, except that the broadband light curve was constructed by computing a weighted average, where the weight was given by the inverse squared uncertainty on the fluxes since the extracted spectrophotometric observations are normalized in the SOSSISSE tool. Table 3.2 shows the best-fitting broadband light curve parameters. However, for the spectrophotometric light curve fitting, we fix the mid-transit time, the impact parameter, the scaled semi-major axis, the spots’ positions and radii to the best-fitting values from the broadband light curve fit of the supreme-SPOON pipeline. The retrieved transmission spectrum and the one from the reference supreme-SPOON reduction are displayed in Figure 3.6. These two transmission spectra obtained through different pipelines are in overall good agreement, showing consistent features across the full wavelength range of SOSS. *The transit depth differences at 0.6, 0.75, 1.2 and 1.4  $\mu\text{m}$  will be investigated further.*

**Table 3.2** – Comparison of the best-fitting broadband light curve parameters along with the priors

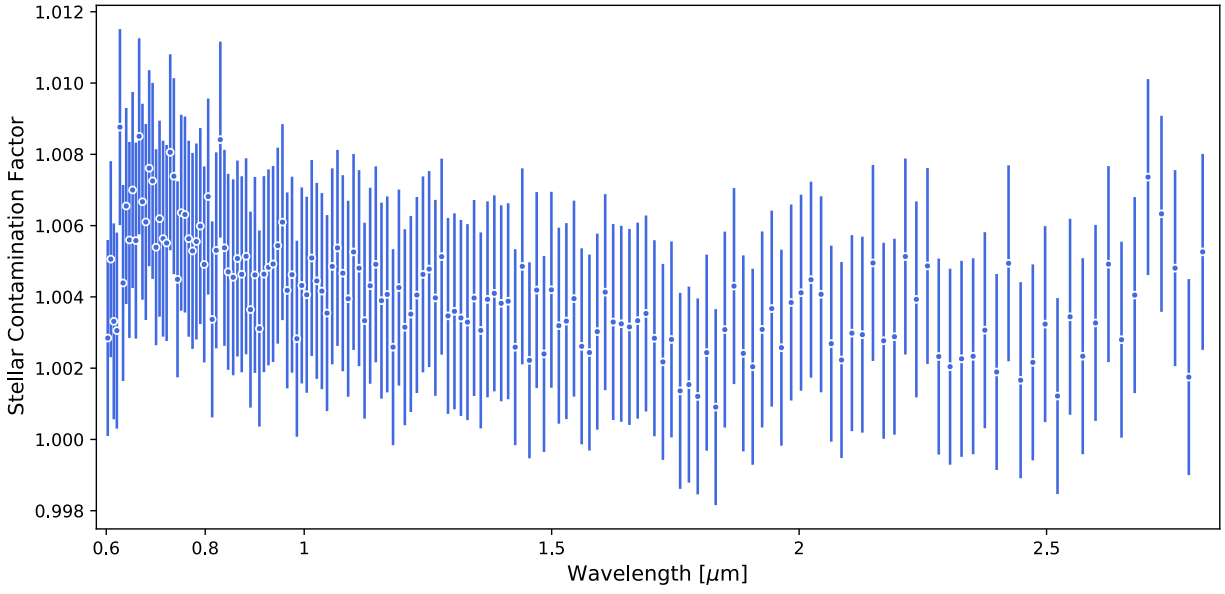
Parameters	Priors	supreme-SPOON		SOSSISSE	Units
		Highest likelihood	Median	Median	
$t_0$	$\mathcal{U}[59910.39, 59910.44]$	59910.416394	59910.416393 $^{+0.000010}_{-0.000009}$	59910.416310 $^{+0.000017}_{-0.000017}$	BJD - 2400000
$R_p/R_*$	$\mathcal{U}[0.01, 0.9]$	0.1655	0.1652 $^{+0.0005}_{-0.0006}$	0.1656 $^{+0.0007}_{-0.0009}$	
b	$\mathcal{U}[0.01, 0.9]$	0.5956	0.597 $^{+0.004}_{-0.003}$	0.597 $^{+0.005}_{-0.005}$	
$a/R_*$	$\mathcal{U}[1, 20]$	7.240	7.229 $^{+0.016}_{-0.017}$	7.23 $^{+0.02}_{-0.02}$	
$q_1$	$\mathcal{U}[0, 1]$	0.26	0.26 $^{+0.04}_{-0.04}$	0.25 $^{+0.04}_{-0.05}$	
$q_2$	$\mathcal{U}[0, 1]$	0.14	0.15 $^{+0.07}_{-0.06}$	0.15 $^{+0.13}_{-0.09}$	
$\theta_0$	$\mathcal{U}[-10, 10]$	0.000281	0.000276 $^{+0.000010}_{-0.000010}$	0.000201 $^{+0.000016}_{-0.000016}$	
$\theta_1$	$\mathcal{U}[-10, 10]$	0.000423	0.000421 $^{+0.000007}_{-0.000008}$	0.000287 $^{+0.000012}_{-0.000012}$	
$\sigma$	$\mathcal{L}[0.1, 100000]$	99	104 $^{+6}_{-6}$	187 $^{+9}_{-8}$	ppm
$x_{\text{spot},1}$	$\mathcal{U}[-1, 0]$	-0.261	-0.254 $^{+0.016}_{-0.010}$	-0.266 $^{+0.011}_{-0.013}$	$R_*$
$y_{\text{spot},1}$	$\mathcal{U}[0, 1]$	0.74	0.75 $^{+0.04}_{-0.03}$	0.43 $^{+0.05}_{-0.10}$	$R_*$
$R_{\text{spot},1}$	$\mathcal{U}[0, 1]$	0.103	0.11 $^{+0.04}_{-0.02}$	0.11 $^{+0.08}_{-0.03}$	$R_*$
$F_{\text{spot},1}/F_*$	$\mathcal{U}[0, 1]$	0.75	0.76 $^{+0.05}_{-0.07}$	0.76 $^{+0.07}_{-0.10}$	
$x_{\text{spot},2}$	$\mathcal{U}[0, 1]$	0.3737	0.383 $^{+0.013}_{-0.011}$	0.384 $^{+0.012}_{-0.012}$	$R_*$
$y_{\text{spot},2}$	$\mathcal{U}[0, 1]$	0.4597	0.41 $^{+0.05}_{-0.08}$	0.44 $^{+0.04}_{-0.07}$	$R_*$
$R_{\text{spot},2}$	$\mathcal{U}[0, 1]$	0.074	0.11 $^{+0.07}_{-0.04}$	0.10 $^{+0.06}_{-0.03}$	$R_*$
$F_{\text{spot},2}/F_*$	$\mathcal{U}[0, 1]$	0.74	0.71 $^{+0.06}_{-0.08}$	0.73 $^{+0.07}_{-0.08}$	

*Note:* For supreme-SPOON, the set of parameters with the highest likelihood is the weighted sample with the highest likelihood.

### 3.4.2. Additional Materials



**Figure 3.7** – Posterior probability distributions from the broadband light curve fit of the supreme-SPOON pipeline with spotrod.



**Figure 3.8** – Stellar contamination on the transmission spectrum due to the combined occulted starspots if they were not accounted for. The factors were computed from Eq. 3.3.1.



# Conclusion

---

Dans ce mémoire, j'ai présenté mes travaux visant à étudier l'impact des hétérogénéités stellaires occultées sur les spectres de transmission obtenus avec l'instrument NIRISS du JWST et à contraindre les paramètres des régions actives occultées lors des transits de deux Jupiters chaudes, soit HAT-P-18 b et WASP-52 b. Les hétérogénéités de surface occultées ont été modélisées par une tache pour HAT-P-18 b et deux taches pour WASP-52 b. Pour HAT-P-18 b, la tache aurait un rayon de  $0.116 \pm 0.014 R_*$  (c.-à-d. une fraction de couverture de  $f \sim 1.3 \%$ ) et serait plus froide que la surface stellaire de  $93 \pm 15$  K. Pour WASP-52 b, la tache avant la mi-transit aurait un rayon de  $0.11_{-0.02}^{+0.04} R_*$  ( $f \sim 1.2 \%$ ) et serait plus froide de  $351 \pm 16$  K. La tache après la mi-transit aurait un rayon de  $0.11_{-0.04}^{+0.07} R_*$  ( $f \sim 1.2 \%$ ) et serait plus froide de  $426_{-15}^{+16}$  K. La position en  $x$  de chaque tache stellaire a été contrainte avec précision, par contre, les contraintes sur la position en  $y$  de chaque tache sont incertaines. Ceci ne semble pas affecter la récupération du spectre de transmission. De plus, j'ai aussi été en mesure d'ajuster les spectres des taches avec des modèles de spectres stellaires ayant des gravités de surface inférieures à celle de l'étoile hôte. En effet, la gravité de surface agit comme un proxy pour la diminution de la pression du gaz dans la tache, causée par la pression du champ magnétique (p.ex., Solanki, 2003). Aucune étude n'avait encore modélisé des observations de taches occultées avec des modèles de spectres stellaires utilisant une gravité de surface différente de l'étoile. Selon les contraintes obtenues, il semble judicieux d'utiliser une gravité de surface inférieure de 0.5 à 1 dex, tel que proposé par Bruno et al. (2022), ou de laisser ce paramètre libre lors des ajustements. En outre, l'effet de ces taches occultées dans les spectres de transmission lorsqu'elles ne sont pas modélisées est d'imiter une pente de diffusion Rayleigh de l'ordre de 10-80 ppm sur la profondeur du transit. L'ajustement des courbes de lumière de transit qui inclue la modélisation des régions actives occultées peuvent prémunir contre les biais des hétérogénéités occultées sur les spectres de transmission.

La modélisation des taches occultées par HAT-P-18 b et WASP-52 b permet de tirer certaines conclusions sur cette approche. D'abord, il est faisable de réaliser une inférence conjointe des paramètres du transit et des taches occultées avec les observations du JWST.

Par contre, on constate que la modélisation des régions actives à partir des courbes de lumière de transit, avec les outils et les connaissances actuels, est un problème dégénéré. La pratique standard consistant à fixer les paramètres du transit à l'aide d'un ajustement de la courbe de lumière blanche, qui fixe également la taille et la position de la tache occultée, pourrait être à l'origine de certaines dégénérescences, particulièrement entre la position en  $y$  de la tache et sa température. Nous développons actuellement un outil permettant d'ajuster simultanément toutes les courbes de lumière spectroscopiques en utilisant à la fois des paramètres dépendants et indépendants de la longueur d'onde. L'ajustement des courbes de lumière de WASP-52 b sera aussi réalisé avec cet outil pour vérifier si cette approche est plus avantageuse. Les simplifications faites par l'outil `spotrod` (Béky et al., 2014), utilisé dans ces travaux, pourraient aussi avoir un impact sur les paramètres contraints des taches et rendre plus difficile de lever certaines dégénérescences. En outre, les régions actives sont des structures beaucoup plus complexes que présentement modélisées. Des avancées théoriques sont aussi nécessaires pour mieux comprendre les limites des déductions que l'on peut faire à partir des courbes de lumière de transit et pour lever la dégénérescence entre la taille et la température d'une tache. Heureusement, mes travaux portent à croire que les dégénérescences ne semblent pas avoir d'impact significatif sur le spectre de transmission récupéré.

Enfin, mes travaux ont permis de confirmer que les spectres des taches devraient être modélisés avec des modèles de spectres stellaires utilisant une gravité de surface inférieure à celle de l'étoile. Ceci a mené mes collaborateurs sur l'analyse d'HAT-P-18 b à intégrer la gravité de surface des régions actives comme un paramètre libre dans leur outil de récupération. Par contre, l'utilisation de spectres stellaires pour modéliser les régions actives occultées est une limite de cette approche qui mériterait d'être évaluée davantage. Cette dernière renforce l'intérêt de progrès théoriques dans le développement de modèles de spectres pour les taches et plus particulièrement pour les facules.

Avant le lancement, prévu dans les années 2040, d'un grand télescope spatial couvrant l'ultraviolet à l'infrarouge capable d'imager directement des planètes similaires à la Terre, l'observation des transits constitue un des meilleurs moyens d'étudier l'atmosphère d'exoplanètes rocheuses, notamment les exoplanètes potentiellement habitables (National Academies of Sciences, Engineering, and Medicine, 2021). Par la suite, la spectroscopie de transmission restera tout de même un outil essentiel dans l'étude des atmosphères d'exoplanètes. Celles potentiellement habitables que nous serons en mesure d'observer auront comme étoile hôte des naines froides qui ont des photosphères hétérogènes. Ce qui confirme l'importance de mieux comprendre l'impact des hétérogénéités stellaires en spectroscopie de transmission et d'améliorer la modélisation de celles-ci afin de contraindre adéquatement les signaux de contamination stellaire dans les observations de transit.

## Références bibliographiques

---

- Absil, O., & Mawet, D. 2010, *A&A Rev.*, 18, 317
- Agol, E., Steffen, J., Sari, R., & Clarkson, W. 2005, *MNRAS*, 359, 567
- Ahrer, E., Wheatley, P. J., Gandhi, S., et al. 2023, *MNRAS*, 521, 5636
- Alam, M. K., Nikolov, N., López-Morales, M., et al. 2018, *AJ*, 156, 298
- Albert, L., Lafreniere, D., Doyon, R., et al. 2023, arXiv e-prints, arXiv:2306.04572
- Alderson, L., Wakeford, H. R., Alam, M. K., et al. 2023, *Nature*, 614, 664
- Alexoudi, X., Mallonn, M., Keles, E., et al. 2020, *A&A*, 640, A134
- Allard, N. F., Spiegelman, F., & Kielkopf, J. F. 2016, *A&A*, 589, A21
- Allard, N. F., Spiegelman, F., Leininger, T., & Molliere, P. 2019, *A&A*, 628, A120
- Allart, R., Bourrier, V., Lovis, C., et al. 2018, *Science*, 362, 1384, aDS Bibcode: 2018Sci...362.1384A
- . 2019, *Astronomy and Astrophysics*, 623, A58
- Asplund, M., Grevesse, N., Sauval, A. J., & Scott, P. 2009, *ARA&A*, 47, 481
- Babcock, H. W. 1953, *PASP*, 65, 229
- Bahng, J., & Schwarzschild, M. 1961, *ApJ*, 134, 312
- Bakos, G., Noyes, R. W., Kovács, G., et al. 2004, *PASP*, 116, 266
- Ballerini, P., Micela, G., Lanza, A. F., & Pagano, I. 2012, *A&A*, 539, A140
- Barber, R. J., Strange, J. K., Hill, C., et al. 2014, *MNRAS*, 437, 1828
- Barclay, T., Kostov, V. B., Colón, K. D., et al. 2021, *AJ*, 162, 300
- Barman, T. S., Konopacky, Q. M., Macintosh, B., & Marois, C. 2015, *ApJ*, 804, 61
- Barros, S. C. C., Boué, G., Gibson, N. P., et al. 2013, *MNRAS*, 430, 3032
- Barstow, J. K., Aigrain, S., Irwin, P. G. J., Kendrew, S., & Fletcher, L. N. 2015, *MNRAS*, 448, 2546
- Batalha, N. M. 2014, *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 111, 12647
- Beeck, B., Schüssler, M., Cameron, R. H., & Reiners, A. 2015, *A&A*, 581, A42
- Béky, B., Kipping, D. M., & Holman, M. J. 2014, *MNRAS*, 442, 3686
- Benneke, B. 2015, arXiv e-prints, arXiv:1504.07655
- Benneke, B., & Seager, S. 2012, *ApJ*, 753, 100
- . 2013, *ApJ*, 778, 153

- Benneke, B., Werner, M., Petigura, E., et al. 2017, *ApJ*, 834, 187
- Benneke, B., Knutson, H. A., Lothringer, J., et al. 2019a, *Nature Astronomy*, 3, 813
- Benneke, B., Wong, I., Piaulet, C., et al. 2019b, *ApJ*, 887, L14
- Berdyugina, S. V. 2011, in *Astronomical Society of the Pacific Conference Series*, Vol. 437, *Solar Polarization 6*, ed. J. R. Kuhn, D. M. Harrington, H. Lin, S. V. Berdyugina, J. Trujillo-Bueno, S. L. Keil, & T. Rimmele, 219
- Berdyugina, S. V., Braun, P. A., Fluri, D. M., & Solanki, S. K. 2005, *A&A*, 444, 947
- Berta, Z. K., Charbonneau, D., Bean, J., et al. 2011, *ApJ*, 736, 12
- Bétrémieux, Y., & Kaltenegger, L. 2013, *ApJ*, 772, L31
- Bixel, A., Rackham, B. V., Apai, D., et al. 2019, *AJ*, 157, 68
- Bodenheimer, P., Burkert, A., Klein, R. I., & Boss, A. P. 2000, in *Protostars and Planets IV*, ed. V. Mannings, A. P. Boss, & S. S. Russell, 675
- Bogdan, T. J., Gilman, P. A., Lerche, I., & Howard, R. 1988, *ApJ*, 327, 451
- Borucki, W. J., & Summers, A. L. 1984, *Icarus*, 58, 121
- Boss, A. P. 1995, *Science*, 267, 360
- . 1997, *Science*, 276, 1836
- . 2000, *ApJ*, 536, L101
- Boss, A. P., Wetherill, G. W., & Haghighipour, N. 2002, *Icarus*, 156, 291
- Boss, A. P., Butler, R. P., Hubbard, W. B., et al. 2005, *Proceedings of the International Astronomical Union*, 1, 183–186
- Brogi, M., de Kok, R. J., Albrecht, S., et al. 2016, *ApJ*, 817, 106
- Brogi, M., Line, M., Bean, J., Désert, J. M., & Schwarz, H. 2017, *ApJ*, 839, L2
- Brogi, M., Snellen, I. A. G., de Kok, R. J., et al. 2012, *Nature*, 486, 502
- Brown, T. M. 2001, *ApJ*, 553, 1006
- Brown, T. M., Charbonneau, D., Gilliland, R. L., Noyes, R. W., & Burrows, A. 2001, *ApJ*, 552, 699
- Bruno, G., Deleuil, M., Almenara, J. M., et al. 2016, *A&A*, 595, A89
- Bruno, G., Lewis, N. K., Stevenson, K. B., et al. 2018, *AJ*, 156, 124
- Bruno, G., Lewis, N. K., Alam, M. K., et al. 2020, *MNRAS*, 491, 5361
- Bruno, G., Lewis, N. K., Valenti, J. A., et al. 2022, *MNRAS*, 509, 5030
- Buchner, J., Georgakakis, A., Nandra, K., et al. 2014, *Astronomy and Astrophysics*, 564, A125
- Buffington, A., Crawford, F. S., Muller, R. A., Schwemin, A. J., & Smits, R. G. 1977, *Journal of the Optical Society of America (1917-1983)*, 67, 298
- Burrows, A., & Sharp, C. M. 1999, *ApJ*, 512, 843
- Carter, J. A., & Winn, J. N. 2010, *ApJ*, 716, 850
- Cauley, P. W., Kuckein, C., Redfield, S., et al. 2018, *AJ*, 156, 189
- Charbonneau, D., Brown, T. M., Latham, D. W., & Mayor, M. 2000, *ApJ*, 529, L45

- Charbonneau, D., Brown, T. M., Noyes, R. W., & Gilliland, R. L. 2002, *ApJ*, 568, 377
- Chen, G., Casasayas-Barris, N., Pallé, E., et al. 2020, *A&A*, 635, A171
- Chiavassa, A., Caldas, A., Selsis, F., et al. 2017, *A&A*, 597, A94
- Claret, A. 2009, *A&A*, 506, 1335
- Coles, P. A., Yurchenko, S. N., & Tennyson, J. 2019, *MNRAS*, 490, 4638
- Coulombe, L.-P., Benneke, B., Challener, R., et al. 2023, arXiv e-prints, arXiv:2301.08192
- Cracchiolo, G., Micela, G., & Peres, G. 2021, *MNRAS*, 501, 1733
- Cridland, A. J., Pudritz, R. E., & Alessi, M. 2016, *MNRAS*, 461, 3274
- Csizmadia, S., Pasternacki, T., Dreyer, C., et al. 2013, *A&A*, 549, A9
- Czesla, S., Huber, K. F., Wolter, U., Schröter, S., & Schmitt, J. H. M. M. 2009, *A&A*, 505, 1277
- Darveau-Bernier, A., Albert, L., Talens, G. J., et al. 2022, *Publications of the Astronomical Society of the Pacific*, 134, 094502
- Deeg, H. J., Garrido, R., & Claret, A. 2001, *New Astronomy*, 6, 51
- Deming, D., Seager, S., Richardson, L. J., & Harrington, J. 2005, *Nature*, 434, 740
- Deming, D., Wilkins, A., McCullough, P., et al. 2013, *ApJ*, 774, 95
- Deming, D., Benneke, B., Fraine, J., et al. 2015, *A Metallicity and Cloud Survey of Exoplanetary Atmospheres Prior to JWST*, HST Proposal. Cycle 23, ID. #14260
- Doyon, R., Willott, C. J., Hutchings, J. B., et al. 2023, arXiv e-prints, arXiv:2306.03277
- Ehrenreich, D., Bourrier, V., Wheatley, P. J., et al. 2015, *Nature*, 522, 459
- Eistrup, C., Walsh, C., & van Dishoeck, E. F. 2018, *A&A*, 613, A14
- Espinoza, N., & Jordán, A. 2015, *MNRAS*, 450, 1879
- Espinoza, N., Kossakowski, D., & Brahm, R. 2019a, *MNRAS*, 490, 2262
- Espinoza, N., Rackham, B. V., Jordán, A., et al. 2019b, *MNRAS*, 482, 2065
- Feinstein, A. D., Montet, B. T., Ansdell, M., et al. 2020, *AJ*, 160, 219
- Feinstein, A. D., Radica, M., Welbanks, L., et al. 2023, *Nature*, 614, 670
- Feroz, F., Hobson, M. P., & Bridges, M. 2009, *MNRAS*, 398, 1601
- Fischer, D. A., Howard, A. W., Laughlin, G. P., et al. 2014, in *Protostars and Planets VI* (University of Arizona Press), 715–737
- Foreman-Mackey, D., Hogg, D. W., Lang, D., & Goodman, J. 2013, *Publications of the Astronomical Society of the Pacific*, 125, 306
- Foster, C. L., Tinker, M. L., Nurre, G. S., & Till, W. A. 1995, *Journal of Spacecraft and Rockets*, 32, 634
- Fu, G., Espinoza, N., Sing, D. K., et al. 2022, *ApJ*, 940, L35
- Gail, H.-P., & Hoppe, P. 2010, in *Protoplanetary Dust: Astrophysical and Cosmochemical Perspectives*, ed. D. A. Apai & D. S. Lauretta (Cambridge University Press), 27–65
- Gandhi, S., & Madhusudhan, N. 2017, *MNRAS*, 472, 2334
- . 2018, *MNRAS*, 474, 271

Gaudi, B. S., Seager, S., & Mallen-Ornelas, G. 2005, *ApJ*, 623, 472

Ginski, C., Mugrauer, M., Seeliger, M., et al. 2016, *MNRAS*, 457, 2173

Gnevyshev, M. N. 1938, *Izvestiya Glavnoj Astronomicheskij Observatorii v Pulkove*, 16, 36

Hamann, A., Montet, B. T., Fabrycky, D. C., Agol, E., & Kruse, E. 2019, *AJ*, 158, 133

Hartman, J. D., Bakos, G. Á., Sato, B., et al. 2011, *ApJ*, 726, 52

Hébrard, G., Collier Cameron, A., Brown, D. J. A., et al. 2013, *A&A*, 549, A134

Helled, R., & Bodenheimer, P. 2010, *Icarus*, 207, 503

Henry, G. W., Marcy, G. W., Butler, R. P., & Vogt, S. S. 2000, *ApJ*, 529, L41

Herrero, E., Ribas, I., Jordi, C., et al. 2016, *A&A*, 586, A131

Hussain, G. A. J. 2002, *Astronomische Nachrichten*, 323, 349

Husser, T. O., Wende-von Berg, S., Dreizler, S., et al. 2013, *A&A*, 553, A6

Ikoma, M., Nakazawa, K., & Emori, H. 2000, *ApJ*, 537, 1013

Ilee, J. D., Forgan, D. H., Evans, M. G., et al. 2017, *MNRAS*, 472, 189

Iyer, A. R., & Line, M. R. 2020, *ApJ*, 889, 78

Jacob, W. S. 1855, *MNRAS*, 15, 228

Jiang, C., Chen, G., Pallé, E., et al. 2021, *A&A*, 656, A114

Johnson, L. J., Norris, C. M., Unruh, Y. C., et al. 2021, *MNRAS*, 504, 4751

Juvan, I. G., Lendl, M., Cubillos, P. E., et al. 2018, *A&A*, 610, A15

JWST Transiting Exoplanet Community Early Release Science Team, Ahrer, E.-M., Alderson, L., et al. 2023, *Nature*, 614, 649

Karman, T., Gordon, I. E., van der Avoird, A., et al. 2019, *Icarus*, 328, 160

Kenyon, S. J., & Bromley, B. C. 2006, *AJ*, 131, 1837

Kipping, D. M. 2008, *MNRAS*, 389, 1383

—. 2013, *MNRAS*, 435, 2152

Kirk, J., Wheatley, P. J., Louden, T., et al. 2017, *MNRAS*, 468, 3907

—. 2016, *MNRAS*, 463, 2922

Kirk, J., Rackham, B. V., MacDonald, R. J., et al. 2021, *AJ*, 162, 34

Kjeldsen, H., & Bedding, T. R. 2011, *A&A*, 529, L8

Knutson, H. A., Charbonneau, D., Allen, L. E., et al. 2007, *Nature*, 447, 183

Kreidberg, L. 2015, *PASP*, 127, 1161

Kreidberg, L., Bean, J. L., Désert, J.-M., et al. 2014, *Nature*, 505, 69

Kusaka, T., Nakano, T., & Hayashi, C. 1970, *Progress of Theoretical Physics*, 44, 1580

Laginja, I., & Wakeford, H. 2020, *JOSS*, 5, 2281

Lambrechts, M., & Johansen, A. 2012, *A&A*, 544, A32

Lecavelier Des Etangs, A., Pont, F., Vidal-Madjar, A., & Sing, D. 2008, *A&A*, 481, L83

Li, G., Gordon, I. E., Rothman, L. S., et al. 2015, *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 216, 15

- Liggins, P., Jordan, S., Rimmer, P. B., & Shorttle, O. 2022, *Journal of Geophysical Research (Planets)*, 127, e07123
- Lin, D. N. C., & Papaloizou, J. 1979, *MNRAS*, 188, 191
- Line, M. R., & Parmentier, V. 2016, *ApJ*, 820, 78
- Louden, T., Wheatley, P. J., Irwin, P. G. J., Kirk, J., & Skillen, I. 2017, *MNRAS*, 470, 742
- MacDonald, R. J. 2023, *The Journal of Open Source Software*, 8, 4873
- MacDonald, R. J., & Lewis, N. K. 2022, *ApJ*, 929, 20
- MacDonald, R. J., & Madhusudhan, N. 2017, *MNRAS*, 469, 1979
- . 2019, *MNRAS*, 486, 1292
- Macintosh, B., Graham, J. R., Barman, T., et al. 2015, *Science*, 350, 64
- Madhusudhan, N. 2018, in *Handbook of Exoplanets*, ed. H. J. Deeg & J. A. Belmonte (Springer Nature), 104
- . 2019, *ARA&A*, 57, 617
- Madhusudhan, N., Agúndez, M., Moses, J. I., & Hu, Y. 2016, *Space Sci. Rev.*, 205, 285
- Madhusudhan, N., Amin, M. A., & Kennedy, G. M. 2014, *The Astrophysical Journal*, 794, L12
- Madhusudhan, N., Bitsch, B., Johansen, A., & Eriksson, L. 2017, *MNRAS*, 469, 4102
- Madhusudhan, N., & Seager, S. 2009, *ApJ*, 707, 24
- Magic, Z., Chiavassa, A., Collet, R., & Asplund, M. 2015, *A&A*, 573, A90
- Mancini, L., Southworth, J., Raia, G., et al. 2017, *MNRAS*, 465, 843
- Mandel, K., & Agol, E. 2002, *ApJ*, 580, L171
- Marley, M. S., Ackerman, A. S., Cuzzi, J. N., & Kitzmann, D. 2013, in *Comparative Climatology of Terrestrial Planets*, ed. S. J. Mackwell, A. A. Simon-Miller, J. W. Harder, & M. A. Bullock (The University of Arizona Press), 367–392
- Mathew, S. K., Martínez Pillet, V., Solanki, S. K., & Krivova, N. A. 2007, *A&A*, 465, 291
- Matzner, C. D., & Levin, Y. 2005, *ApJ*, 628, 817
- Maxted, P. F. L. 2016, *A&A*, 591, A111
- May, E. M., Zhao, M., Haidar, M., Rauscher, E., & Monnier, J. D. 2018, *AJ*, 156, 122
- Mayor, M., & Queloz, D. 1995, *Nature*, 378, 355
- McCullough, P. R., Crouzet, N., Deming, D., & Madhusudhan, N. 2014, *ApJ*, 791, 55
- McKee, C. F., & Ostriker, E. C. 2007, *ARA&A*, 45, 565
- Montalto, M., Boué, G., Oshagh, M., et al. 2014, *MNRAS*, 444, 1721
- Moran, S. E., Stevenson, K. B., Sing, D. K., et al. 2023, *ApJ*, 948, L11
- Mordasini, C., van Boekel, R., Mollière, P., Henning, T., & Benneke, B. 2016, *ApJ*, 832, 41
- Morris, B. M., Curtis, J. L., Douglas, S. T., et al. 2018, *AJ*, 156, 203
- Morris, B. M., Hebb, L., Davenport, J. R. A., Rohn, G., & Hawley, S. L. 2017, *ApJ*, 846, 99
- Moses, J. I., Visscher, C., Fortney, J. J., et al. 2011, *ApJ*, 737, 15
- Mugrauer, M., & Michel, K.-U. 2021, *Astronomische Nachrichten*, 342, 840

- Mukherjee, P., Parkinson, D., & Liddle, A. R. 2006, *The Astrophysical Journal*, 638, L51
- National Academies of Sciences, Engineering, and Medicine. 2021, *Pathways to Discovery in Astronomy and Astrophysics for the 2020s* (The National Academies Press)
- Nordlund, A., & Dravins, D. 1990, *A&A*, 228, 155
- Norris, C. M., Beeck, B., Unruh, Y. C., et al. 2017, *A&A*, 605, A45
- Nortmann, L., Pallé, E., Salz, M., et al. 2018, *Science*, 362, 1388, aDS Bibcode: 2018Sci...362.1388N
- Öberg, K. I., Murray-Clay, R., & Bergin, E. A. 2011, *ApJ*, 743, L16
- Oshagh, M., Boisse, I., Boué, G., et al. 2013, *A&A*, 549, A35
- Oshagh, M., Santos, N. C., Ehrenreich, D., et al. 2014, *A&A*, 568, A99
- Panja, M., Cameron, R., & Solanki, S. K. 2020, *ApJ*, 893, 113
- Paragas, K., Vissapragada, S., Knutson, H. A., et al. 2021, *The Astrophysical Journal*, 909, L10, aDS Bibcode: 2021ApJ...909L..10P
- Patel, J. A., & Espinoza, N. 2022, *AJ*, 163, 228
- Perrin, M. D., Sivaramakrishnan, A., Lajoie, C.-P., et al. 2014, in *Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference Series*, Vol. 9143, *Space Telescopes and Instrumentation 2014: Optical, Infrared, and Millimeter Wave*, ed. J. Oschmann, Jacobus M., M. Clampin, G. G. Fazio, & H. A. MacEwen, 91433X
- Perryman, M. 2018, *The Exoplanet Handbook* (Cambridge University Press)
- Piaulet, C., Benneke, B., Almenara, J. M., et al. 2023, *Nature Astronomy*, 7, 206
- Pinhas, A., Rackham, B. V., Madhusudhan, N., & Apai, D. 2018, *MNRAS*, 480, 5314
- Pinte, C., van der Plas, G., Ménard, F., et al. 2019, *Nature Astronomy*, 3, 1109
- Pollacco, D. L., Skillen, I., Collier Cameron, A., et al. 2006, *PASP*, 118, 1407
- Pollack, J. B., Hubickyj, O., Bodenheimer, P., et al. 1996, *Icarus*, 124, 62
- Polyansky, O. L., Kyuberis, A. A., Zobov, N. F., et al. 2018, *MNRAS*, 480, 2597
- Pont, F., Knutson, H., Gilliland, R. L., Moutou, C., & Charbonneau, D. 2008, *MNRAS*, 385, 109
- Pont, F., Sing, D. K., Gibson, N. P., et al. 2013, *MNRAS*, 432, 2917
- Pont, F., Gilliland, R. L., Moutou, C., et al. 2007, *A&A*, 476, 1347
- Pontoppidan, K. M., Barrientes, J., Blome, C., et al. 2022, *ApJ*, 936, L14
- Rackham, B., Espinoza, N., Apai, D., et al. 2017, *ApJ*, 834, 151
- Rackham, B. V., Apai, D., & Giampapa, M. S. 2018, *ApJ*, 853, 122
- . 2019, *AJ*, 157, 96
- Rackham, B. V., & de Wit, J. 2023, arXiv e-prints, arXiv:2303.15418
- Rackham, B. V., Espinoza, N., Berdyugina, S. V., et al. 2023, *RAS Techniques and Instruments*, 2, 148
- Radica, M., Albert, L., Taylor, J., et al. 2022, *PASP*, 134, 104502
- Radica, M., Welbanks, L., Espinoza, N., et al. 2023, arXiv e-prints, arXiv:2305.17001



- Radick, R. R., Lockwood, G. W., Skiff, B. A., & Baliunas, S. L. 1998, *ApJS*, 118, 239
- Rafikov, R. R. 2005, *ApJ*, 621, L69
- . 2006, *ApJ*, 648, 666
- Ragozzine, D., & Wolf, A. S. 2009, *ApJ*, 698, 1778
- Rathcke, A. D., MacDonald, R. J., Barstow, J. K., et al. 2021, *AJ*, 162, 138
- Reinhold, T., Bell, K. J., Kuszlewicz, J., Hekker, S., & Shapiro, A. I. 2019, *A&A*, 621, A21
- Richard, C., Gordon, I. E., Rothman, L. S., et al. 2012, *J. Quant. Spec. Radiat. Transf.*, 113, 1276
- Roettenbacher, R. M., Monnier, J. D., Korhonen, H., et al. 2016, *Nature*, 533, 217
- Rothman, L. S., Gordon, I. E., Barbe, A., et al. 2009, *J. Quant. Spec. Radiat. Transf.*, 110, 533
- Rothman, L. S., Gordon, I. E., Barber, R. J., et al. 2010, *J. Quant. Spec. Radiat. Transf.*, 111, 2139
- Rustamkulov, Z., Sing, D. K., Mukherjee, S., et al. 2023, *Nature*, 614, 659
- Ryabchikova, T., Piskunov, N., Kurucz, R. L., et al. 2015, *Physica Scripta*, 90, 054005
- Safronov, V. S. 1972, *Evolution of the protoplanetary cloud and formation of the earth and planets.* (Keter Publishing House)
- Salz, M., Czesla, S., Schneider, P. C., et al. 2018, *A&A*, 620, A97
- Sánchez Cuberes, M., Vázquez, M., Bonet, J. A., & Sobotka, M. 2003, *A&A*, 397, 1075
- Sarkar, S., Argyriou, I., Vandenbussche, B., Papageorgiou, A., & Pascale, E. 2018, *MNRAS*, 481, 2871
- Scandariato, G., Nascimbeni, V., Lanza, A. F., et al. 2017, *A&A*, 606, A134
- Schwarzschild, M. 1959, *ApJ*, 130, 345
- Seager, S., & Deming, D. 2010, *ARA&A*, 48, 631
- Seager, S., Deming, D., & Valenti, J. A. 2009, in *Astrophysics and Space Science Proceedings*, Vol. 10, *Astrophysics in the Next Decade*, 123
- Seager, S., & Mallén-Ornelas, G. 2003, *ApJ*, 585, 1038
- Seager, S., & Sasselov, D. D. 2000, *ApJ*, 537, 916
- Semenov, D., Hersant, F., Wakelam, V., et al. 2010, *A&A*, 522, A42
- Shapiro, A. I., Solanki, S. K., Krivova, N. A., et al. 2014, *A&A*, 569, A38
- Sharp, C. M., & Burrows, A. 2007, *ApJS*, 168, 140
- Shaw, J. R., Bridges, M., & Hobson, M. P. 2007, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 378, 1365
- Shu, F. H., Adams, F. C., & Lizano, S. 1987, *ARA&A*, 25, 23
- Silva, A. V. R. 2003, *ApJ*, 585, L147
- Sing, D. K., Vidal-Madjar, A., Désert, J. M., Lecavelier des Etangs, A., & Ballester, G. 2008, *ApJ*, 686, 658
- Sing, D. K., Pont, F., Aigrain, S., et al. 2011, *MNRAS*, 416, 1443

- Sing, D. K., Fortney, J. J., Nikolov, N., et al. 2016, *Nature*, 529, 59
- Skilling, J. 2004, in *American Institute of Physics Conference Series*, Vol. 735, *Bayesian Inference and Maximum Entropy Methods in Science and Engineering: 24th International Workshop on Bayesian Inference and Maximum Entropy Methods in Science and Engineering*, ed. R. Fischer, R. Preuss, & U. V. Toussaint, 395–405
- Snellen, I., de Kok, R., Birkby, J. L., et al. 2015, *A&A*, 576, A59
- Snellen, I. A. G., Brandl, B. R., de Kok, R. J., et al. 2014, *Nature*, 509, 63
- Snellen, I. A. G., de Kok, R. J., de Mooij, E. J. W., & Albrecht, S. 2010, *Nature*, 465, 1049
- Solanki, S. K. 1993, *Space Sci. Rev.*, 63, 1
- . 2003, *A&A Rev.*, 11, 153
- Spake, J. J., Sing, D. K., Evans, T. M., et al. 2018, *Nature*, 557, 68
- Speagle, J. S. 2020, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 493, 3132
- Stevenson, K. B., Désert, J.-M., Line, M. R., et al. 2014, *Science*, 346, 838
- Stock, J. W., Kitzmann, D., & Patzer, A. B. C. 2022, *MNRAS*, 517, 4070
- Suetterlin, P. 1998, *A&A*, 333, 305
- Sulis, S., Lendl, M., Hofmeister, S., et al. 2020, *A&A*, 636, A70
- Tashkun, S. A., & Perevalov, V. I. 2011, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 112, 1403
- Taylor, J., Radica, M., Welbanks, L., et al. 2023, *MNRAS*, arXiv:2305.16887
- Tennyson, J., Yurchenko, S. N., Al-Refaie, A. F., et al. 2016, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 327, 73
- Thompson, A., Biagini, A., Cracchiolo, G., et al. 2023, arXiv e-prints, arXiv:2302.04574
- Tinetti, G., Liang, M., Beaulieu, J., et al. 2007, in *AAS/Division for Planetary Sciences Meeting Abstracts*, Vol. 39, *AAS/Division for Planetary Sciences Meeting Abstracts #39*, 29.05
- Townsend, R., & Lopez, A. 2023, *The Journal of Open Source Software*, 8, 4602
- Tregloan-Reed, J., Southworth, J., & Tappert, C. 2013, *MNRAS*, 428, 3671
- Tregloan-Reed, J., & Unda-Sanzana, E. 2019, *A&A*, 630, A114
- Tremblay, P. E., Ludwig, H. G., Freytag, B., Steffen, M., & Caffau, E. 2013, *A&A*, 557, A7
- Tsai, S.-M., Lee, E. K. H., Powell, D., et al. 2023, *Nature*, 617, 483
- Tsiaras, A., Waldmann, I. P., Zingales, T., et al. 2018, *AJ*, 155, 156
- Venot, O., Hébrard, E., Agúndez, M., et al. 2012, *A&A*, 546, A43
- Vissapragada, S., Knutson, H. A., Greklek-McKeon, M., et al. 2022, *The Astronomical Journal*, 164, 234, aDS Bibcode: 2022AJ....164..234V
- Wakeford, H., & Grant, D. 2022, *Exo-TiC/ExoTiC-LD: ExoTiC-LD v2.1 Zenodo Release*, Zenodo, doi:10.5281/zenodo.6809899
- Wakeford, H. R., & Sing, D. K. 2015, *A&A*, 573, A122
- Wakeford, H. R., Sing, D. K., Evans, T., Deming, D., & Mandell, A. 2016, *ApJ*, 819, 10

- Wakeford, H. R., Lewis, N. K., Fowler, J., et al. 2019, *AJ*, 157, 11
- Waldmeier, M. 1955, *Ergebnisse und Probleme der Sonnenforschung*. (Geest & Portig)
- Welbanks, L., & Madhusudhan, N. 2019, *AJ*, 157, 206
- . 2021, *ApJ*, 913, 114
- . 2022, *ApJ*, 933, 79
- Welbanks, L., Madhusudhan, N., Allard, N. F., et al. 2019, *ApJ*, 887, L20
- Windmark, F., Birnstiel, T., Güttler, C., et al. 2012, *A&A*, 540, A73
- Witzke, V., Shapiro, A. I., Solanki, S. K., Krivova, N. A., & Schmutz, W. 2018, *A&A*, 619, A146
- Woitke, P., Helling, C., Hunter, G. H., et al. 2018, *A&A*, 614, A1
- Wolszczan, A., & Frail, D. A. 1992, *Nature*, 355, 145
- Yeo, K. L., Solanki, S. K., & Krivova, N. A. 2013, *A&A*, 550, A95
- Yurchenko, S. N., Amundsen, D. S., Tennyson, J., & Waldmann, I. P. 2017, *Astronomy and Astrophysics*, 605, A95
- Yurchenko, S. N., Barber, R. J., & Tennyson, J. 2011, *MNRAS*, 413, 1828
- Yurchenko, S. N., & Tennyson, J. 2014, *MNRAS*, 440, 1649
- Zahnle, K., Marley, M. S., & Fortney, J. J. 2010, *Thermometric Soots on Warm Jupiters?*, arXiv:0911.0728
- Zhang, Z., Zhou, Y., Rackham, B. V., & Apai, D. 2018, *AJ*, 156, 178