



HAL
open science

Analyse des spectres infrarouges thermiques émis par l'atmosphère de Titan enregistrés par l'instrument CIRS à bord de la sonde Cassini

Sandrine Vinatier

► **To cite this version:**

Sandrine Vinatier. Analyse des spectres infrarouges thermiques émis par l'atmosphère de Titan enregistrés par l'instrument CIRS à bord de la sonde Cassini. Astrophysique [astro-ph]. Université Paris-Diderot - Paris VII, 2007. Français. NNT: . tel-00463734

HAL Id: tel-00463734

<https://theses.hal.science/tel-00463734>

Submitted on 15 Mar 2010

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

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

ANALYSE DES SPECTRES INFRAROUGES
THERMIQUES ÉMIS PAR L'ATMOSPHÈRE DE
TITAN ENREGISTRÉS PAR L'INSTRUMENT
CASSINI/CIRS

THÈSE

présentée pour l'obtention du titre de

Docteur de l'Université Denis Diderot – Paris VII

spécialité Astrophysique et Instrumentations Associées

par

Sandrine VINATIER

soutenue publiquement le 30 octobre 2007 devant le jury suivant :

| | |
|-----------------------------|---|
| <i>Président :</i> | Marcello FULCHIGNONI |
| <i>Directeur de thèse :</i> | Bruno BÉZARD |
| <i>Rapporteurs :</i> | Caitlin GRIFFITH Frédéric HOURDIN |
| <i>Examineurs :</i> | Marie-Claire GAZEAU Jean-Pierre LEBRETON |

Résumé

Le travail de cette thèse porte sur l'analyse des spectres infrarouges thermiques de l'atmosphère de Titan enregistrés par l'instrument CIRS à bord de la sonde Cassini. L'objectif est d'inverser les distributions verticales de la température et des abondances des espèces minoritaires entre 100 et 500 km à plusieurs latitudes afin d'en étudier les variations latitudinales.

L'instrument CIRS (Composite InfraRed Spectrometer), est un spectromètre infrarouge à transformée de Fourier observant dans la gamme spectrale 10-1400 cm^{-1} qui présente de nombreuses signatures spectrales dues aux bandes de rotation-vibration de CH_4 , C_2H_2 , C_2H_4 , C_2H_6 , $\text{CH}_3\text{C}_2\text{H}$, C_3H_8 , C_4H_2 , C_6H_6 , HCN , HC_3N et CO_2 . Les intensités de ces bandes dépendent à la fois de la température et de l'abondance de ces constituants. Il est donc nécessaire de connaître le profil de température avant de déduire les abondances des différents constituants.

Le profil de température est déduit de l'intensité de la bande ν_4 de CH_4 centrée à 1305 cm^{-1} . En effet, l'abondance de CH_4 est connue et a été mesurée in situ par la sonde Huygens. En utilisant cette abondance et en modélisant les spectres observés, il est possible d'en déduire la température. Pour cela, nous utilisons un code d'inversion qui résout l'équation de transfert radiatif en utilisant simultanément plusieurs spectres acquis avec une géométrie au limbe et au nadir et sondant différentes altitudes. Il est ainsi possible d'inverser le profil de température à une latitude donnée. J'ai effectué ce travail pour cinq latitudes : 56°S, 13°S, 56°N, 82°N et 83°N, ceci fait l'objet de la Partie II de ce manuscrit.

J'ai ensuite utilisé ces profils de température inversés pour déduire, aux mêmes latitudes, les profils d'abondance des molécules minoritaires citées ci-dessus. Celles-ci émettent principalement dans la gamme 600-1100 cm^{-1} . Pour cela, j'utilise un algorithme d'inversion combinant à la fois les spectres au limbe et au nadir afin d'en déduire les profils d'abondance. Ce travail et les résultats sont décrits dans la Partie III. Une comparaison avec les observations et les prédictions des modèles photochimiques est présentée.

Enfin, la dernière partie de cette thèse est consacrée à l'étude des rapports isotopiques $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ et $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ dans le HCN , ainsi que le rapport D/H mesuré dans C_2H_2 . Les résultats obtenus pour différentes latitudes, ainsi que leurs implications concernant l'atmosphère de Titan sont présentés.

Abstract

This work is focused on the analysis of thermal infrared spectra of Titan's atmosphere acquired by the Cassini/CIRS instrument. The objective is the retrieval of the vertical distributions of atmospheric temperatures and abundances of trace constituents in the 100-500 km range at several latitudes in order to infer their latitudinal variations.

The CIRS (Composite InfraRed Spectrometer) instrument is a Fourier transform infrared spectrometer recording spectra in the 10-1400 cm^{-1} spectral range, which exhibits numerous spectral signatures from the rovibrational bands of CH_4 , C_2H_2 , C_2H_4 , C_2H_6 , $\text{CH}_3\text{C}_2\text{H}$, C_3H_8 , C_4H_2 , C_6H_6 , HCN , HC_3N et CO_2 . The intensities of these bands depend on both the temperature and the abundance of the molecules. It is then necessary to retrieve the vertical temperature profile prior to the abundance vertical profiles.

We deduce the thermal profile by using the ν_4 methane band, centered at 1305 cm^{-1} . The methane abundance has been measured by the GCMS instrument aboard the Huygens probe. By using this abundance and by modeling the observed spectra, we are able to retrieve the temperature at a given latitude. For this purpose, we use an inversion algorithm that solves the radiative transfer equation using simultaneously nadir and limb spectra, each probing a different altitude. This work was done for five latitudes : 56°S, 13°S, 56°N, 82°N and 83°N, and is described in Part II of this manuscript.

The inverted vertical temperature profiles are then used to retrieve, at the same latitudes, the vertical mixing ratio profiles of the above-mentioned molecules, which mainly emit in the spectral range 600-1400 cm^{-1} . We use an inversion algorithm combining both nadir and limb spectra to retrieve the vertical abundance profiles. This work and the results are detailed in Part III.

The last part of the work presented here is dedicated to the studies of the $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ et $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ isotopic ratios in HCN , and the D/H ratio measured in C_2H_2 . Results obtained at several latitudes and their implications concerning the Titan atmosphere are described in Part IV.

Table des matières

I. Introduction

| | |
|---|-----------|
| 1 L'atmosphère de Titan | 3 |
| 1.1 Une chimie atmosphérique complexe | 4 |
| 1.2 Structure thermique | 6 |
| 1.2.1 La troposphère | 6 |
| 1.2.2 La stratosphère | 7 |
| 1.2.3 La mésosphère | 8 |
| 1.3 Dynamique | 9 |
| 1.3.1 Circulation méridienne | 9 |
| 1.3.2 Existence de vents zonaux | 10 |
| 1.4 Aérosols, nuages | 11 |
| 1.5 Existence d'un couplage entre le rayonnement, la chimie, la température et la dynamique | 11 |
| 2 Spectre d'émission thermique | 13 |
| 2.1 Equation de transfert de rayonnement | 14 |
| 2.2 Maximum de la fonction de contribution | 15 |
| 2.3 Interaction entre le rayonnement infrarouge et la matière | 17 |
| 2.3.1 Cas des molécules diatomiques observées sur Titan, absorption induite par collision | 18 |
| 2.3.2 Cas des molécules polyatomiques linéaires ou des rotateurs symétriques | 19 |
| 2.3.3 Intensité des raies | 21 |
| 2.3.4 Forme des raies | 21 |
| 2.4 Spectre d'émission thermique observé | 23 |
| 2.4.1 Raies en absorption ou en émission | 23 |
| 2.4.2 Variation de l'intensité avec la masse d'air, observations au nadir et au limbe | 26 |
| 2.5 Déduction des paramètres physiques | 28 |
| 2.5.1 La température | 28 |
| 2.5.2 L'abondance des constituants | 29 |
| 3 Les observations de l'atmosphère de Titan en infrarouge thermique | 31 |
| 3.1 Que voit-on sur ces spectres ? | 32 |
| 3.2 Les résultats de l'analyse des spectres de Voyager/IRIS | 34 |
| 3.3 L'instrument Cassini/CIRS | 35 |
| 3.4 Les problématiques | 39 |

II. Inversion des profils de température

| | | |
|----------|---|-----------|
| 4 | Algorithme d'inversion et observations | 43 |
| 4.1 | Principe de l'inversion de la température | 43 |
| 4.2 | Algorithme d'inversion de la température | 47 |
| 4.2.1 | Description de l'algorithme | 47 |
| 4.2.2 | Modèle atmosphérique | 50 |
| 4.2.3 | Modèle spectroscopique | 51 |
| 4.3 | Généralités sur les observations utilisées | 52 |
| 4.3.1 | La sélection des spectres | 53 |
| 5 | Profils de température inversés : résultats | 55 |
| 5.1 | 56°S, 13°S et 56°N | 55 |
| 5.1.1 | Les sélections de spectres | 55 |
| 5.1.2 | Modélisation du continuum et détermination de la correction en altitude | 56 |
| 5.1.3 | Les kernels | 57 |
| 5.1.4 | Profils de température inversés | 61 |
| 5.2 | 82°N et 83°N | 63 |
| 5.2.1 | Les sélections des spectres au limbe | 63 |
| 5.2.2 | Inversion des profils thermiques | 64 |
| 5.2.3 | Résultats | 66 |
| 6 | Profils de température inversés : discussion | 69 |

III. Inversion des profils d'abondance

| | | |
|----------|--|------------|
| 7 | Algorithme d'inversion et observations | 75 |
| 7.1 | Algorithme d'inversion des profils d'abondance | 76 |
| 7.2 | Modèle atmosphérique et spectroscopique | 78 |
| 7.3 | Observations utilisées | 78 |
| 8 | Profils d'abondance inversés à 54°S, 15°S, 54°N et 79°N : résultats | 81 |
| 8.1 | L'acétylène (C ₂ H ₂) et le cyanure d'hydrogène (HCN) | 81 |
| 8.1.1 | Correction du décalage spectral | 82 |
| 8.1.2 | Lissage vertical | 83 |
| 8.1.3 | Spectres modélisés et kernels | 85 |
| 8.1.4 | Profils d'abondances inversés de C ₂ H ₂ et HCN | 89 |
| 8.2 | L'éthane (C ₂ H ₆) | 91 |
| 8.3 | Le propane (C ₃ H ₈) | 92 |
| 8.4 | L'éthylène (C ₂ H ₄) | 94 |
| 8.5 | Le diacétylène (C ₄ H ₂) et le méthylacétylène (CH ₃ C ₂ H) | 95 |
| 8.6 | Le cyanoacétylène (HC ₃ N), le dioxyde de carbone (CO ₂) et le benzène (C ₆ H ₆) | 97 |
| 9 | Profils d'opacité des aérosols | 105 |

| | |
|---|------------|
| 10 Discussion | 107 |
| 10.1 Comparaison avec les résultats précédents | 107 |
| 10.1.1 Acétylène (C_2H_2) | 107 |
| 10.1.2 Cyanure d'hydrogène (HCN) | 108 |
| 10.1.3 L'éthane (C_2H_6) | 109 |
| 10.1.4 Le propane (C_3H_8) | 109 |
| 10.1.5 Le méthylacétylène (CH_3C_2H) | 109 |
| 10.1.6 Le diacétylène (C_4H_2) | 110 |
| 10.1.7 L'éthylène (C_2H_4) | 110 |
| 10.1.8 Le cyanoacétylène (HC_3N) | 111 |
| 10.1.9 Le dioxyde de carbone (CO_2) | 112 |
| 10.1.10 Le benzène (C_6H_6) | 112 |
| 10.2 Comparaison avec les modèles photochimiques | 112 |
| 10.2.1 Croissance de l'abondance avec l'altitude | 112 |
| 10.2.2 Enrichissement à haute latitude nord | 113 |
| 10.2.3 Minima d'abondance dans l'hémisphère nord à haute altitude | 114 |

VI. Rapports isotopiques

| | |
|--|------------|
| 11 Rapports isotopiques $^{15}N/^{14}N$ et $^{13}C/^{12}C$ | 117 |
| 11.1 Le rapport isotopique $^{15}N/^{14}N$: introduction | 118 |
| 11.1.1 Le rapport $^{15}N/^{14}N$ dans le système solaire | 118 |
| 11.1.2 Mesure de $^{14}N/^{15}N$ dans l'atmosphère de Titan | 120 |
| 11.1.3 Implications de la valeur du rapport $^{14}N/^{15}N$ dans Titan | 120 |
| 11.2 Le rapport isotopique $^{13}C/^{12}C$: introduction | 121 |
| 11.2.1 Le rapport $^{13}C/^{12}C$ dans le système solaire | 121 |
| 11.2.2 Mesure de $^{12}C/^{13}C$ dans l'atmosphère de Titan | 122 |
| 11.2.3 Implications de la valeur du rapport $^{13}C/^{12}C$ dans Titan | 123 |
| 11.3 Déterminations des rapports $^{12}C/^{13}C$ et $^{14}N/^{15}N$ à partir des données de CIRS | 124 |
| 11.3.1 Détection et modélisation de $HC^{15}N$ et $H^{13}CN$ | 124 |
| 11.3.2 Observations utilisées pour les inversions | 126 |
| 11.3.3 Inversion des abondances de HCN et ses isotopes | 127 |
| 11.3.4 Tests de la variation verticale des rapports $^{12}C/^{13}C$ et $^{14}N/^{15}N$ | 127 |
| 11.3.5 Profils d'abondance inversés de $HC^{15}N$ et $H^{13}CN$ | 132 |
| 11.3.6 Rapports isotopiques et calculs des barres d'erreur | 133 |
| 11.3.7 Rapport $^{13}C/^{12}C$: résultats, comparaison aux autres observations et implications | 137 |
| 11.3.8 Rapport $^{15}N/^{14}N$: résultats, comparaison aux autres observations et implications | 138 |
| 12 Rapport isotopique D/H dans le C_2H_2 | 141 |
| 12.1 Le rapport D/H dans le système solaire | 141 |
| 12.2 Le rapport D/H dans l'atmosphère de Titan | 142 |
| 12.3 Détermination du rapport D/H dans le C_2H_2 à partir des données CIRS à $54^\circ S$, $15^\circ S$ et $54^\circ N$ | 144 |

| | |
|--|-----|
| 12.3.1 Inversions des profils verticaux d'abondance de C ₂ HD | 144 |
| 12.3.2 Rapport D/H dans le C ₂ H ₂ à partir des données de CIRS : résultats et conclusions | 149 |

V. Conclusions et perspectives

| | |
|---|------------|
| 13 Conclusions et perspectives | 153 |
| 13.1 Conclusions | 153 |
| 13.2 Perspectives | 155 |
| Remerciements | 157 |

Annexes

| | |
|---|------------|
| A Article : Vinatier et al. (2007a) | 161 |
| B Article : Vinatier et al. (2007b) | 181 |
| C Article : Flasar et al. (2005) | 193 |
| D Liste des publications en tant que co-auteur | 199 |
| Bibliographie | 199 |

Liste des tableaux

| | | |
|------|--|-----|
| 4.1 | Modèle de variation spectrale de l'opacité des aérosols de Titan entre 10 et 1600 cm^{-1} | 52 |
| 4.2 | Liste des observations au limbe à 0.5 cm^{-1} durant la mission nominale. | 54 |
| 5.1 | Caractéristiques des spectres moyennés au limbe et au nadir utilisés pour les inversions des profils de température à 56°S, 13°S et 56°N. | 56 |
| 5.2 | Caractéristiques des spectres moyennés au limbe utilisés pour les inversions des profils de température à 82°N et 83°N. | 63 |
| 7.1 | Caractéristiques des spectres moyennés au limbe et au nadir utilisés pour les inversions des profils d'abondance à 54°S, 15°S, 54°N et 79°N | 79 |
| 8.1 | Niveaux sondés par les émissions de C_2H_6 au nadir à 54°S, 15°S et 54°N | 92 |
| 8.2 | Niveaux des maxima des kernels de l'émission au limbe de C_2H_6 à 819.75 cm^{-1} | 92 |
| 8.3 | Niveaux sondés par les émissions de C_3H_8 au nadir à 54°S, 15°S et 54°N | 93 |
| 8.4 | Niveaux des maxima des kernels de l'émission au limbe de C_3H_8 à 748 cm^{-1} | 94 |
| 8.5 | Niveaux sondés par les émissions de C_2H_4 au nadir à 54°S, 15°S et 54°N à 949.5 cm^{-1} | 96 |
| 8.6 | Niveaux des maxima des kernels au limbe calculés à 949.5 cm^{-1} à 54°S, 15°S, 54°N et 79°N | 96 |
| 8.7 | Niveaux sondés par les émissions de C_2H_6 au nadir à 54°S, 15°S et 54°N | 96 |
| 8.8 | Niveaux des maxima des kernels des émissions au limbe de C_4H_2 à 628 cm^{-1} à 54°S, 15°S, 54°N et 79°N | 98 |
| 8.9 | Niveaux sondés par les émissions de HC_3N au nadir à 54°S, 15°S et 54°N | 100 |
| 8.10 | Niveaux des maxima des kernels des émissions au limbe de HC_3N à 663.25 cm^{-1} à 54°S, 15°S, 54°N et 79°N | 100 |
| 11.1 | Valeurs des rapports isotopiques $^{12}\text{C}/^{13}$ et $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ mesurés dans l'atmosphère de Titan | 123 |
| 12.1 | Rapports D/H obtenus dans l'atmosphère de Titan à partir d'observations spatiales et au sol dans le CH_4 , H_2 et C_2H_2 | 143 |

Table des figures

| | | |
|-----|---|----|
| 1.1 | Chimie des hydrocarbures | 5 |
| 1.2 | Chimie des nitriles | 5 |
| 1.3 | Formation des aérosols | 6 |
| 1.4 | Profil thermique mesuré par Huygens/HASI | 7 |
| 1.5 | Fonction courant de la circulation méridienne | 9 |
| 1.6 | Schéma des principaux phénomènes de transports méridiens de l'atmosphère de Titan | 10 |
| 2.1 | Schéma de l'émission d'une couche atmosphérique | 15 |
| 2.2 | Fonction de Chapman | 17 |
| 2.3 | Schéma des transitions permises d'une bande perpendiculaire | 20 |
| 2.4 | Spectre de la bande ν_5 de l'acétylène | 20 |
| 2.5 | Raie lorentzienne en absorption et en émission | 24 |
| 2.6 | Variation de la profondeur d'une raie spectrale avec l'altitude du niveau d'opacité $\tau \sim \mu$ | 25 |
| 2.7 | Géométrie des observations et variation de la masse d'air d'une observation au nadir | 26 |
| 2.8 | Détail de la géométrie d'une observation au limbe | 27 |
| 3.1 | Exemple de spectres au nadir acquis par Voyager/IRIS | 32 |
| 3.2 | Exemple de spectres au limbe acquis par Voyager/IRIS | 33 |
| 3.3 | Profil vertical de la température stratosphérique déduit des données Voyager/IRIS | 34 |
| 3.4 | Variation latitudinale de la température déduite des données Voyager/IRIS | 35 |
| 3.5 | Profils verticaux des abondances de C_2H_2 , C_2H_4 , C_2H_6 , C_3H_4 , C_3H_8 , C_4H_2 , HCN, HC_3N , C_2N_2 déduite des données au limbe de Voyager/IRIS à $70^\circ N$ | 36 |
| 3.6 | Variation latitudinale de l'abondance des constituants de l'atmosphère de Titan déduits des données de Voyager/IRIS | 37 |
| 3.7 | Schéma de conception de l'instrument Cassini/CIRS | 38 |
| 3.8 | Plans focaux de CIRS | 39 |
| 4.1 | Exemple de spectre enregistré par le FP4 | 46 |
| 4.2 | Schématisation de la méthode directe et du principe d'inversion | 47 |
| 4.3 | Projection d'une observation au limbe | 53 |
| 5.1 | Effet du décalage en altitude sur les spectres synthétiques au limbe de la bande ν_4 de CH_4 à $13^\circ S$ | 58 |
| 5.2 | Modélisations des spectres de la ν_4 de CH_4 à $56^\circ S$, $13^\circ S$ et $56^\circ N$ | 59 |

| | | |
|------|--|-----|
| 5.3 | Kernels calculés à 1230, 1253.75 et 1305.75 cm^{-1} correspondant aux spectres observés à 56°S, 13°S et 56°N | 60 |
| 5.4 | Schématisation d'une observation au limbe optiquement épaisse | 61 |
| 5.5 | Profils verticaux de température inversés à 56°S, 13°S et 56°N | 62 |
| 5.6 | Comparaison entre les spectres observés et calculés à 82°N et 83°N et kernels correspondant aux émissions à 1230 cm^{-1} et 1305.75 cm^{-1} à 82°N | 65 |
| 5.7 | Profil verticaux de température inversés à 82°N et 83°N | 67 |
| 6.1 | Profil verticaux de température inversés à 56°S, 13°S, 56°N et 82°N | 70 |
| 6.2 | Carte des températures moyennes déduites des données CIRS par Achterberg et al. (2007) | 71 |
| 7.1 | Exemple de spectre enregistré par le FP3 | 80 |
| 8.1 | Comparaison des profils inversés de HCN à 54°S à partir de 3 profils initiaux d'abondance constants avec l'altitude | 83 |
| 8.2 | Effet du décalage spectral des spectres observés sur les résidus entre les spectres calculés et observés | 84 |
| 8.3 | Effet du décalage spectral des spectres observés sur les profils d'abondance inversés de HCN et C_2H_2 à 54°N. | 85 |
| 8.4 | Profils inversés de C_2H_2 et HCN à 54°S avec des longueurs de corrélation différentes et profils verticaux d'intensité correspondants | 86 |
| 8.5 | Compraison entre les spectres observés et les spectres calculés entre 705 et 740 cm^{-1} à 54°N | 87 |
| 8.6 | Kernels correspondant aux émissions de C_2H_2 à 729.25 cm^{-1} et 712.25 cm^{-1} à 54°S (a), 54°N (b) et 79°N (c) | 88 |
| 8.7 | Profils verticaux d'intensité observés dans les branches Q de C_2H_2 et HCN à 54°N comparés aux profils d'intensité calculés | 90 |
| 8.8 | Comparaison entre les spectres observés et calculés de l'émission de C_2H_6 à 54°S | 91 |
| 8.9 | Comparaison entre les spectres observés et calculés de l'émission de C_3H_8 | 93 |
| 8.10 | Comparaison entre les spectres observés et calculés de l'émission de C_2H_4 | 95 |
| 8.11 | Comparaison entre les émissions observées et calculées de C_4H_2 et $\text{CH}_3\text{C}_2\text{H}$ à 54°N et résidus correspondants | 97 |
| 8.12 | Comparaison entre les émissions observées et calculées de HC_3N , CO_2 et C_6H_6 à 54°S et 79°N | 99 |
| 8.13 | Résidus entre les spectres observés au limbe moyennés autour de 210 km et 272 km et les spectres calculés avec ou sans émission de HC_3N | 99 |
| 8.14 | Profils inversés d'abondance de C_2H_2 , HCN, C_2H_6 et C_3H_8 | 102 |
| 8.15 | Profils inversés d'abondance de C_2H_4 , C_4H_2 , $\text{CH}_3\text{C}_2\text{H}$ et HC_3N | 103 |
| 8.16 | Profils inversés d'abondance de CO_2 et C_6H_6 | 104 |
| 9.1 | Profils inversés d'opacité des aérosols à 15°S | 106 |
| 11.1 | Rapport isotopique $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ dans le système solaire | 119 |
| 11.2 | Comparaison entre les spectres observés de HC^{15}N et H^{13}CN et les spectres calculés à 15°S et 83°N | 125 |
| 11.3 | Profils d'abondance de $\text{H}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$ et HC^{15}N inversés à 15°S | 128 |

| | | |
|------|--|-----|
| 11.4 | Distributions verticales du rapport isotopique $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ à 15°S | 130 |
| 11.5 | Test de la pente du profil d'abondance de HC^{15}N à 15°S | 131 |
| 11.6 | Kernels normalisés correspondant aux profils d'abondance de HCN , HC^{15}N et H^{13}CN à 15°S avec des rapports isotopiques constants avec l'altitude | 132 |
| 11.7 | Kernels normalisés correspondant aux profils d'abondance de HCN , HC^{15}N et H^{13}CN à 83°N avec des rapports isotopiques constants avec l'altitude | 133 |
| 11.8 | Profils verticaux d'abondance de HCN , H^{13}CN et HC^{15}N inversés à 15°S et 83°N avec des rapports isotopiques constants avec l'altitude | 134 |
| 11.9 | Valeurs moyennes des rapports isotopiques $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ et $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ (tirets) à 15°S et 83°N | 139 |
| 12.1 | Comparaison entre les spectres calculés avec et sans émission de C_2HD et les spectres observés à 54°S et 15°S | 146 |
| 12.2 | Profils d'abondance de C_2HD et C_2H_2 inversés à 54°S et 15°S | 147 |
| 12.3 | Profils d'abondance de C_2HD et C_2H_2 inversés à 54°N | 148 |
| 12.4 | Kernels normalisés à 54°S , calculés à 678 cm^{-1} (C_2HD), 682 cm^{-1} (branche P de C_2H_2) et 729 cm^{-1} (branche Q de C_2H_2) | 148 |
| 12.5 | Rapports isotopiques D/H obtenus à 54°S , 15°S et 54°N | 149 |

Première partie

I. Introduction

CHAPITRE 1

L'atmosphère de Titan

Sommaire

| | | |
|------------|--|-----------|
| 1.1 | Une chimie atmosphérique complexe | 4 |
| 1.2 | Structure thermique | 6 |
| 1.2.1 | La troposphère | 6 |
| 1.2.2 | La stratosphère | 7 |
| 1.2.3 | La mésosphère | 8 |
| 1.3 | Dynamique | 9 |
| 1.3.1 | Circulation méridienne | 9 |
| 1.3.2 | Existence de vents zonaux | 10 |
| 1.4 | Aérosols, nuages | 11 |
| 1.5 | Existence d'un couplage entre le rayonnement, la chimie, la température et la dynamique | 11 |

Titan est le plus gros satellite du système de Saturne. Son rayon atteint 2575 km et il possède une atmosphère dense s'étendant jusqu'à 1500 km au-dessus de sa surface. Il est le seul objet du système solaire - avec la Terre - à posséder une atmosphère constituée majoritairement d'azote. Le deuxième constituant le plus abondant est le méthane, qui joue un rôle analogue à celui joué par l'eau sur Terre : en effet, étant donné les conditions de pression et de température régnant sur Titan, le méthane peut se trouver sous les trois formes solide, liquide ou gazeuse. Il semblerait qu'un cycle du méthane existe sur Titan, et cette théorie a été confortée par les images prises par Huygens qui montrent de nombreux chenaux fluviaux. L'atmosphère de Titan présente un intérêt particulier du fait de sa chimie très active (présentée dans la Section 1.1) qui forme des hydrocarbures et les nitriles qui réagissent entre eux pour former une couche épaisse d'aérosols qui finissent par sédimenter et s'accumulent à la surface. L'atmosphère de Titan présente d'autres analogies avec l'atmosphère terrestre : la distribution verticale de la température montre plusieurs couches d'inversion (décrite dans la Section 1.2) et Titan possède une dynamique atmosphérique marquée (Section 1.3).

L'atmosphère de Titan a été découverte en 1908 par Coma Solà en détectant un assombrissement centre bord. Ce phénomène, observé sur tout objet du système solaire

présentant une atmosphère conséquente, est dû à la plus grande absorption de la lumière solaire diffusée vers la Terre au niveau du limbe atmosphérique. Le méthane (CH_4) a été le premier constituant détecté par Kuiper à partir des bandes en proche infrarouge (Kuiper, 1944). Ensuite, pendant près de 30 ans, les découvertes sur l'atmosphère de Titan sont restées en suspens jusqu'à l'avènement des observations millimétriques au sol à haute résolution, puis des observations spectro-photométriques de haute précision. Elles ont permis de mettre en évidence d'autres hydrocarbures (de formule C_xH_y , ils sont constitués uniquement de carbone et d'hydrogène) - l'éthane (C_2H_6), le méthane monodeutéié (CH_3D), l'éthylène (C_2H_4) et l'acétylène (C_2H_2) - à partir de leurs émissions en infrarouge thermique (Gillett et al. 1973 ; Low and Rieke, 1974 ; Gillett 1975 ; Tokunaga et al., 1980). Ce sont les sondes Voyager qui, en 1980 et 1981, ont permis de faire un bond considérable dans la caractérisation de l'atmosphère de Titan. Le diazote (N_2) a ainsi été observé et déterminé comme étant le composé le plus abondant (98 %), vient ensuite le méthane qui constitue seulement quelques pourcents de l'atmosphère (Broadfoot et al., 1981 ; Hanel et al. 1981 ; Tyler et al. 1981). De nouvelles molécules organiques¹ furent détectées grâce au spectromètre infrarouge IRIS à bord de la sonde Voyager. Titan présente ainsi une atmosphère semi-réductrice (le carbone est sous forme de CH_4 qui est un gaz réducteur ; si elle était totalement réductrice, l'azote serait sous forme de NH_3 comme pour les planètes géantes) qui ressemblerait à l'atmosphère terrestre primitive (Clarke et Ferris, 1997), bien que beaucoup plus froide avec environ -180°C à la surface. Sa richesse en composés organiques, hydrocarbures et nitriles fait de Titan un laboratoire naturel pour étudier la chimie prébiotique (Hunten et al., 1984 ; Raulin et Owen, 2002).

1.1 Une chimie atmosphérique complexe

La grande particularité de Titan est son épaisse atmosphère qui est composée à 98 % de diazote (N_2) et 1.4 % de méthane (dans la stratosphère).

Le N_2 est photodissocié principalement par le rayonnement solaire compris entre 80 et 100 nm dans la haute atmosphère, au-delà de 800 km, et dans une moindre mesure, par les rayons cosmiques (Yung et al., 1984) en dessous de 150 km, et par les électrons énergétiques provenant de la magnétosphère de Saturne. Les atomes d'azote ainsi produits réagissent avec des molécules (hydrocarbures, radicaux ...) pour former les nitriles (de formule $\text{R-C}\equiv\text{N}$).

Le méthane est détruit dans la haute atmosphère, au-dessus de 700 km, principalement par photodissociation, et dans une moindre proportion, par impact avec les particules chargées. La photolyse de CH_4 , en-dessous de 140 nm, produit les radicaux CH_3 , CH_2 et CH . Ces radicaux très réactifs ont une durée de vie très courte. Le radical méthyl (CH_3) réagit avec lui-même pour former de l'éthane (C_2H_6), l'hydrocarbure le plus abondant après le méthane.

Les réactions de ces radicaux avec les principaux constituants atmosphériques, incluant l'azote et l'hydrogène, les réactions par photolyse et les réactions chimiques avec des hydrocarbures conduisent à la formation d'hydrocarbures et de nitriles de plus en plus complexes. Les Figs. 1.1 et 1.2 (issues de Wilson et Atreya, 2004) résument, res-

¹Un composé est dit organique s'il possède au moins un atome de carbone lié, au moins, à un atome d'hydrogène.

pectivement, la chimie des hydrocarbures et des nitriles les plus simples.

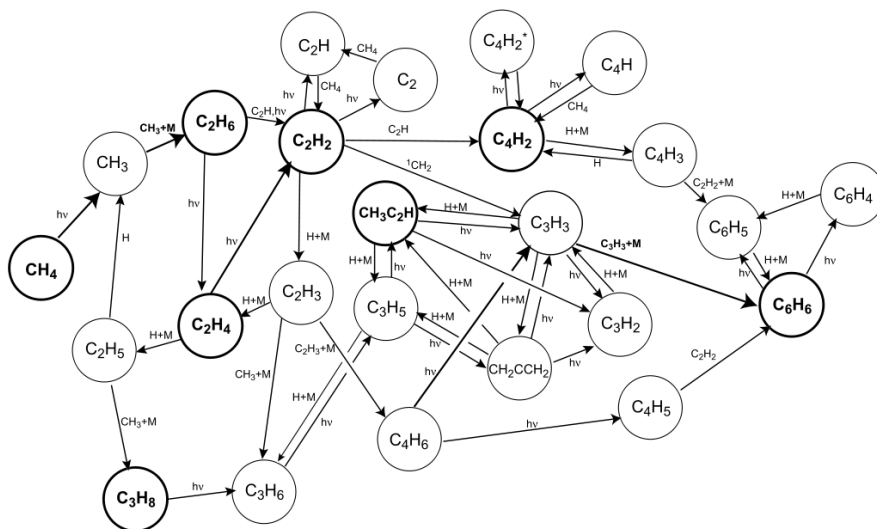


FIG. 1.1: *Chimie des hydrocarbures*, Wilson et Atreya (2004). Les espèces stables et les réactions principales sont représentées en gras.

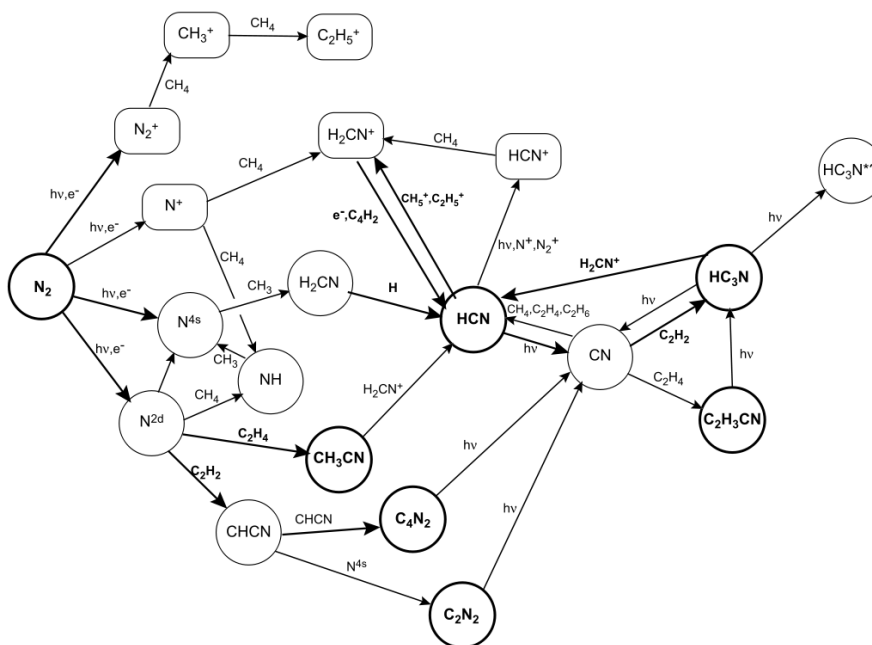


FIG. 1.2: *Chimie des nitriles*, Wilson et Atreya (2004). Les espèces stables et les réactions principales sont représentées en gras. Les rectangles font référence aux ions.

Ces hydrocarbures et ces nitriles forment ensuite des molécules organiques complexes qui réagissent entre elles pour produire les aérosols (particules solides en suspension dans l'air, voir Section 1.4), qui sont à l'origine de la brume jaune-orangée qui recouvre toute la planète. La Fig 1.3, issue de Atreya (2006) propose un schéma simplifié de la formation des aérosols.

Le méthane et les aérosols absorbent une grande partie du rayonnement solaire dans les domaines UV et visible. Ceux-ci, ainsi que les molécules organiques créées par

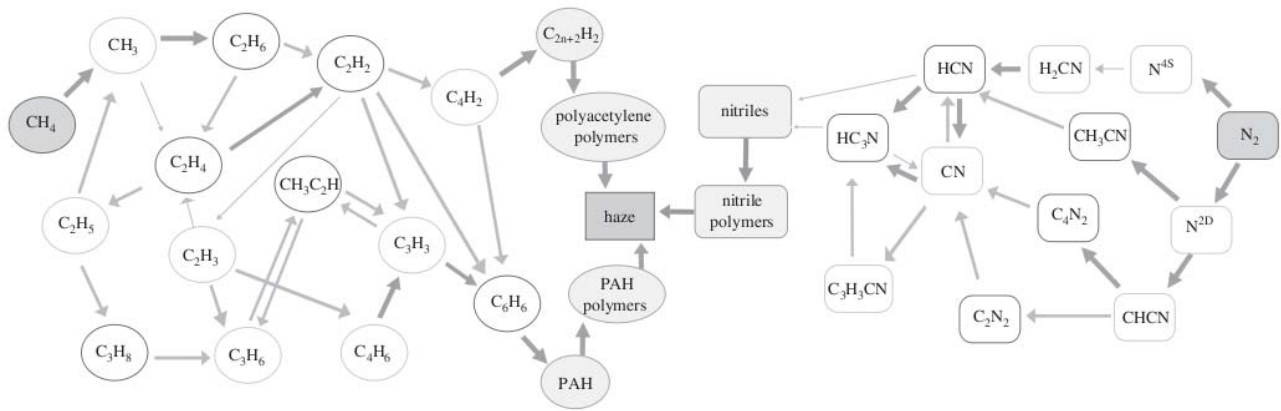


FIG. 1.3: Formation des aérosols, Atreya (2006). Schéma simplifié de la formation des aérosols. La photolyse du méthane mène à la formation d'hydrocarbures aromatiques polycycliques (PAH) et des polymères de polyacétylène, tandis que l'azote permet de former des nitriles et des polymères de nitriles. Tous conduisent à la production d'aérosols et donc à la perte irréversible du méthane atmosphérique.

photochimie, réémettent dans le domaine infrarouge, ce qui participe à l'effet de serre et provoque un refroidissement des couches atmosphériques. Nous allons voir dans la section suivante comment le rayonnement solaire et les composés chimiques influent sur la distribution verticale de la température atmosphérique.

1.2 Structure thermique

La structure thermique de Titan présente des similitudes avec celle de l'atmosphère terrestre. Dans les deux cas, la distribution verticale de la température - appelée profil vertical de température - possède des couches d'inversion, qui correspondent à un minimum ou un maximum de la température. La Fig. 1.4 présente le profil vertical mesuré in situ à 10°S par l'instrument HASI (Hugens Atmospheric Structure Instrument) à bord de la sonde Huygens, qui a plongé dans l'atmosphère de Titan le 14 janvier 2005. A la surface, l'instrument a mesuré une température de 93.65 ± 0.25 K (Fulchignoni et al. 2005) et une pression de 1467 ± 1 mbar. L'instrument a également déterminé le profil de température à 10°S, 192°W entre la surface et 1400 km (voir Fig. 1.4)

L'albedo de Titan vaut environ 0.3, c'est-à-dire que 30 % du flux solaire qui atteint le satellite est renvoyé vers l'espace après diffusion. L'absorption de 70 % du flux solaire au niveau de l'orbite de Saturne, conduit à une température effective de 82 K. Cependant, seul 10 % du flux solaire incident atteint la surface à cause de l'absorption du rayonnement solaire par les aérosols et les gaz. Ce rayonnement provoque un chauffage de la surface qui réémet dans le domaine infrarouge, il en résulte un chauffage des couches atmosphériques qui réémettent elles aussi en infrarouge isotropiquement. Il existe donc, comme sur Terre, un effet de serre qui augmente la température de surface de Titan de 11 K.

1.2.1 La troposphère

Au-dessus de la surface, la température diminue avec l'altitude, cette partie de l'atmosphère est appelée la troposphère. La température atteint un minimum de 70.43

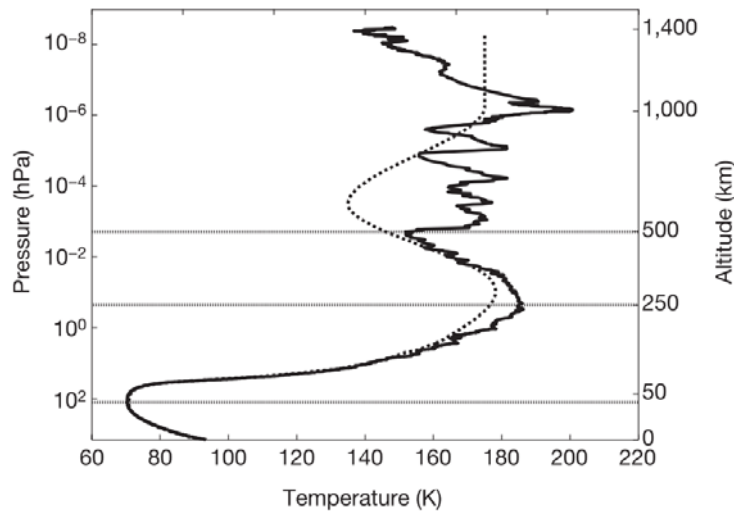


FIG. 1.4: Profil thermique mesuré par *Huygens/HASI* (Fulchignoni et al. 2005) (trait plein) comparé au modèle (pointillés, Yelle et al. 1997). Au dessus de 160 km, la densité est déduite de la décélération de la sonde, et la pression est déduite du profil de densité en utilisant l'équilibre hydrostatique. La température est déterminée à partir de ces deux paramètres en utilisant la loi des gaz parfaits.

K (Fulchignoni et al. 2005) vers 44 km. C'est la première couche d'inversion, appelée tropopause. La troposphère est une zone où apparaît généralement la convection dans les atmosphères planétaires. Comme les couches d'air à proximité de la surface sont chauffées par émission infrarouge, celles-ci ont tendance à être moins denses que les couches supérieures qui sont plus froides. Il s'ensuit que l'air chaud monte et l'air froid plonge. Elles ont d'autre part du mal à se refroidir par rayonnement lorsque l'épaisseur optique dans le domaine infrarouge est importante. C'est le cas sur Titan du fait de l'absorption induite par collision du diazote, du méthane et de l'hydrogène.

La convection n'apparaît que si la température atmosphérique décroît assez rapidement avec l'altitude. Dans ce cas, une parcelle d'air chaude proche de la surface ne se refroidit pas assez vite en montant et reste plus chaude que l'air ambiant et continue donc son ascension. Le gradient de température est alors proche du gradient adiabatique : g/C_p où g est l'accélération due à la gravité et C_p la chaleur spécifique de l'air. Pour Titan, ce rapport vaut 1.4 K/km (en comparaison, sur Terre, il vaut 10 K/km pour un air sec). Les instabilités convectives existent dans la partie inférieure des atmosphères optiquement épaisses. Dans la partie supérieure de la troposphère, la densité devient assez faible pour que le refroidissement radiatif, dû à l'émission de rayonnement infrarouge vers l'espace, soit assez efficace pour diminuer la température atmosphérique. Le gradient de température devient sub-adiabatique et la convection cesse. Cette décroissance de la température se poursuit jusqu'à un minimum de température, la tropopause. Sur Terre, la tropopause se situe entre 8 km (pôle) et 12 km (équateur).

1.2.2 La stratosphère

Au-dessus de la tropopause, la température augmente avec l'altitude en raison de l'absorption d'une fraction du flux solaire dans l'atmosphère. Cette région est appelée

la stratosphère. La convection a cessé et l'air se stratifie en couches qui se mélangent peu entre elles. En l'absence de sources locales de chaleur, la température devrait être constante avec l'altitude, inférieure à la température effective. Or elle passe de 70 K à 44 km à 186 K à 250 km, où la température atteint un maximum (stratopause). Sur Titan, ce chauffage est principalement dû à l'absorption du rayonnement solaire, UV et visible, par les aérosols et le méthane. Les aérosols, le méthane, l'acétylène (C_2H_2) et l'éthane (C_2H_6) réémettent du rayonnement infrarouge dans toutes les directions qui refroidit les couches atmosphériques et équilibre le chauffage solaire. Sur Terre, le chauffage de la stratosphère est provoqué par l'absorption du rayonnement solaire UV par l'ozone et la stratopause terrestre se situe à ~ 50 km.

1.2.3 La mésosphère

Au-dessus de la stratopause, la densité d'aérosols décroît et la température diminue de nouveau avec l'altitude. Cette zone est appelée la mésosphère. Sur Titan, la température atteint un minimum de 152 K à 490 km (mésopause). L'instrument Huygens/HASI a mis en évidence de fortes variations de température entre 500 et 1020 km (voir Fig. 1.4) avec des couches d'inversion et des phénomènes dynamiques de type onde de gravité.

Nous avons vu ci-dessus que le profil vertical de température de l'atmosphère de Titan présente le même type de structures que le profil terrestre. Cependant, les températures sont bien plus froides sur Titan que sur Terre. Une autre différence visible concerne les altitudes des zones d'inversion qui sont bien plus élevées sur Titan que sur Terre. Ceci est lié au fait que l'atmosphère de Titan est bien plus étendue en altitude que ne l'est l'atmosphère terrestre. Un paramètre important qui caractérise une atmosphère planétaire est son échelle de hauteur² $H = RT/mg$, qui correspond à l'épaisseur d'atmosphère sur laquelle la densité et la pression sont divisées par un facteur $e \sim 2.7$ (soit une décroissance de 63 %). L'atmosphère de Titan étant constituée à 98 % de diazote, $m \sim 28 \text{ g.mol}^{-1}$ (pour la Terre, $m = 29 \text{ g.mol}^{-1}$). Au-dessus de la surface, où $T = 94 \text{ K}$, l'échelle de hauteur vaut 21 km ; dans la stratosphère, où la température est plus élevée, $H \sim 40 \text{ km}$. Sur Terre, l'échelle de hauteur de la troposphère vaut 8.4 km. Cette différence trouve son origine dans l'accélération de la pesanteur sur Titan ($g = 1.35 \text{ m.s}^{-2}$) qui est bien moins importante que celle de la Terre ($g = 9.8 \text{ m.s}^{-2}$).

Nous venons de voir quelles sont les caractéristiques globales du profil de température de l'atmosphère de Titan. Ce profil de température diffère d'un point à l'autre de la surface de Titan. Nous allons voir maintenant quel rôle joue la dynamique atmo-

²L'atmosphère est considérée comme étant à l'équilibre hydrostatique, c'est-à-dire que pour chaque couche atmosphérique, les forces de gravitation sont contrebalancées par un gradient de pression de direction opposée. En utilisant la relation d'équilibre des forces et la loi des gaz parfaits, l'évolution de la pression en fonction de l'altitude s'exprime de la façon suivante pour une atmosphère isotherme :

$$P(z) = P(0)e^{-\frac{z-z_0}{H}} \quad (1.1)$$

où $H = \frac{RT}{mg}$ où $R = 8.3145 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$, T est la température, m la masse moléculaire moyenne de l'atmosphère et g l'accélération de la pesanteur. Elle est appelée échelle de hauteur en pression et sa valeur varie avec l'altitude puisque la température n'est pas constante avec l'altitude.

sphérique.

1.3 Dynamique

1.3.1 Circulation méridienne

Les modèles de circulation générale (e.g., Hourdin et al. 1995, Lebonnois et al. 2001) prédisent une importante circulation atmosphérique dans la stratosphère (au dessus de 40 km). En raison du chauffage engendré par le flux solaire, plus important dans l'hémisphère d'été que dans l'hémisphère d'hiver, une grande cellule de circulation monte dans l'hémisphère d'été et plonge dans la région polaire d'hiver. Cette grande cellule reste en place pendant environ 12 ans (sur les 30 ans que dure une année de Titan) puis s'inverse, pour durer à nouveau une douzaine d'années. L'inversion se fait grâce à une circulation transitoire qui apparaît à l'équinoxe et dure environ 3 ans. Pendant l'équinoxe, le flux solaire chauffe principalement la région équatoriale et provoque la création de deux petites cellules de circulation. Elles présentent chacune leur partie ascendante près de l'équateur et leur partie descendante au niveau des pôles. La Fig. 1.5, issue de Lebonnois et al. (2001) résume ce phénomène.

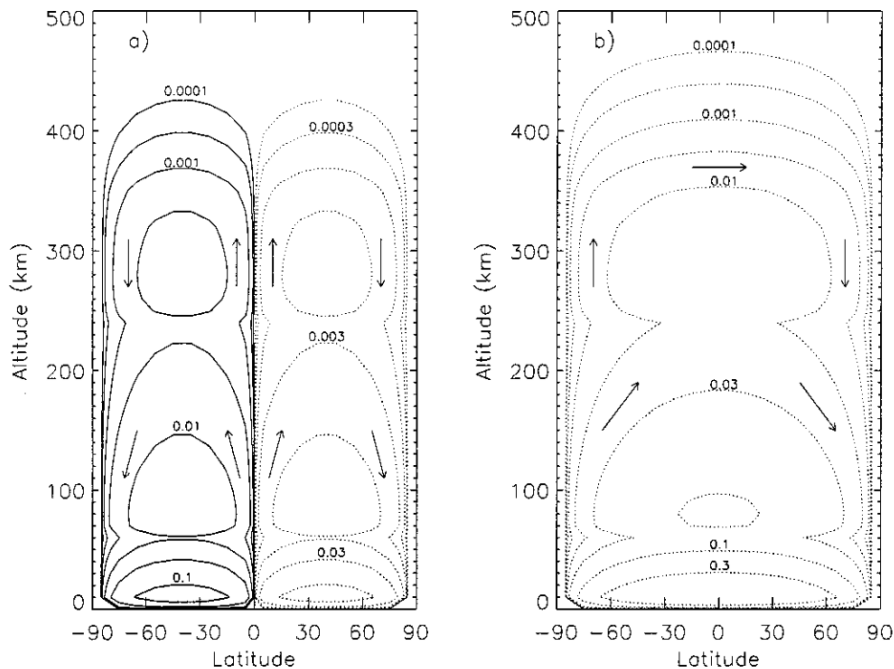


FIG. 1.5: Fonction courant de la circulation méridienne en 10^9 kg.s^{-1} (Lebonnois et al., 2001). Les traits pleins correspondent à la rotation dans le sens direct et les pointillés au sens de rotation opposé. (a) est la période de transition (équinoxe) et (b) est le solstice d'hiver nord.

Pendant cette période transitoire, la branche ascendante de l'hémisphère d'été se déplace vers l'équateur puis prend place dans l'hémisphère opposé. C'est cette période transitoire que les sondes Voyager ont observée en 1980 et 1981, juste après l'hiver nord. Actuellement la sonde Cassini observe Titan en plein hiver nord (le solstice d'hiver date d'octobre 2002). La période transitoire sera de nouveau observable en 2010, pendant la mission étendue de Cassini.

Il existe aussi une circulation troposphérique plus complexe que la circulation stratosphérique. Elle est du même type que celle des cellules de Hadley observées sur Terre, avec une branche ascendante autour de $30^\circ - 40^\circ$ dans l'hémisphère d'été, et deux branches descendantes vers $\pm 60^\circ$.

La circulation stratosphérique dominante est responsable de la distribution à grande échelle de la brume et des espèces chimiques. Les modèles photochimiques prédisent que ces composés se forment dans la mésosphère, ils sont ensuite transportés par la branche supérieure de la circulation stratosphérique vers le pôle d'hiver, où les masses d'air plongent. Cette région est isolée par le vortex polaire³ et forme une zone riche en aérosols et en espèces chimiques, par contraste avec le reste de la planète. Cette branche descendante de la cellule traverse les parties plus froides de l'atmosphère (basse stratosphère et tropopause) et perd une partie des gaz par condensation, ainsi qu'une partie des aérosols qui servent de noyaux de condensation. Dans la basse stratosphère, la circulation revient vers l'équateur et remonte dans l'hémisphère d'été où l'air est donc moins chargé en espèces chimiques. La Fig. 1.6, issue de Hourdin et al. (2004), résume ces phénomènes de transport.

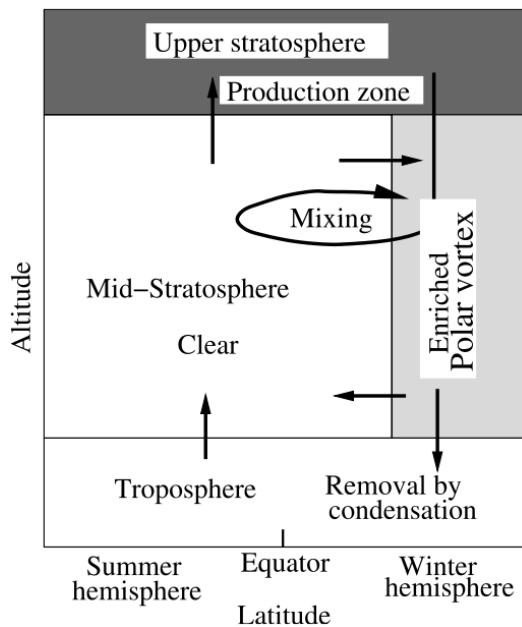


FIG. 1.6: Schéma des principaux mécanismes de transports méridiens de l'atmosphère de Titan responsables des contrastes observés dans la composition atmosphérique de Titan (Hourdin et al., 2004).

1.3.2 Existence de vents zonaux

Les bandes de faible contraste observées en visible dans la brume de Titan suggèrent l'existence de forts vents zonaux (vents parallèles à l'équateur). De plus les cartes de température de l'atmosphère de Titan présentent de très faibles contrastes dans la

³Le vortex polaire est une zone de vents zonaux stratosphériques présentant un mouvement circulaire autour du pôle d'hiver. Ils sont créés par le fort gradient thermique qui existe entre l'équateur et le pôle d'hiver (voir également la note de bas de page 4).

direction longitudinale alors qu'elles montrent de forts contrastes (d'environ 20 K) entre l'équateur et le pôle d'hiver (pôle nord actuellement). Les vents zonaux sont déduits de ces champs de température en utilisant l'équation des vents thermiques⁴. Leur amplitude est plus faible aux hautes latitudes de l'hémisphère sud et croît vers le nord avec un maximum aux latitudes moyennes nord (20-40°N) où leur vitesse atteint 160 m.s⁻¹ (Flasar et al. 2005).

1.4 Aérosols, nuages

La brume photochimique de Titan est constituée d'aérosols. Un aérosol est un agrégat de macromolécules solides en suspension dans l'air qui n'est pas constitué de matériaux simples condensés sous forme liquide ou solide. Ils peuvent constituer une couche à l'échelle globale, comme celle observée sur Titan en-dessous de ~ 300 km, ou locale comme la couche détachée observée au pôle nord par Voyager vers 300-350 km et qui est observée actuellement par Cassini vers 500 km. Ils peuvent se déplacer sur de longues distances avant de disparaître par sédimentation ou par lavage par les pluies. Les aérosols, sous l'effet des chocs avec les molécules d'air, acquièrent un mouvement Brownien qui les conduit à s'entrechoquer et, parfois, à se coller entre eux par interaction de Van der Waals. Ce phénomène permet aux aérosols de changer de taille.

Les aérosols jouent un rôle très important dans l'équilibre radiatif de l'atmosphère de Titan. D'une part, leur absorption du rayonnement solaire UV et visible génère un chauffage de la stratosphère et leur opacité infrarouge, même faible, contribue significativement au refroidissement radiatif de l'atmosphère. D'autre part, ils empêchent le rayonnement solaire visible d'atteindre la surface et de la chauffer, créant ainsi un anti-effet de serre (voir Bézard et al. 1995).

De plus, les aérosols peuvent jouer le rôle de noyaux de condensation pour les hydrocarbures et les nitriles, vers 80 km, là où la température est la plus basse. Le méthane condense également dans la troposphère, ce qui génère la formation de nuages visibles autour du pôle sud (e.g. Brown et al., 2002) et vers 40°S (Griffith et al., 2005; Roe et al. 2005).

1.5 Existence d'un couplage entre le rayonnement, la chimie, la température et la dynamique

Ainsi, comme nous venons de le voir dans ces différentes sections, il existe un couplage entre le rayonnement (responsable de la formation des radicaux) et la chimie qui est, elle-même, à l'origine des molécules complexes et des aérosols. Ceux-ci influent sur le transfert du rayonnement, ce qui crée des variations de température avec la latitude, à l'origine de la dynamique de l'atmosphère de Titan. Enfin, la dynamique influe sur

⁴ L'équation des vents zonaux peut s'exprimer de la façon suivante (Flasar et al. 2004) :

$$\frac{\partial}{\partial \ln P} \left[u \left(f + u \frac{\tan \Lambda}{r} \right) \right] \approx \frac{R}{r \mu} \left. \frac{\partial T}{\partial \Lambda} \right|_P \quad (1.2)$$

où P est la pression, Λ la latitude, r le rayon de Titan, R la constante des gaz parfaits, μ la masse molaire moyenne de l'atmosphère de Titan, et f la force de Coriolis qui est telle que $f=2\Omega \sin \Lambda$ où Ω est la vitesse de rotation angulaire de la planète.

la distribution latitudinale des molécules et des aérosols (voir Partie III), ainsi que sur le profil de température (voir Partie II). Le rayonnement, la chimie, la température et la dynamique sont donc très fortement couplés dans l'atmosphère de Titan.

CHAPITRE 2

Spectre d'émission thermique

Sommaire

| | | |
|------------|---|-----------|
| 2.1 | Equation de transfert de rayonnement | 14 |
| 2.2 | Maximum de la fonction de contribution | 15 |
| 2.3 | Interaction entre le rayonnement infrarouge et la matière | 17 |
| 2.3.1 | Cas des molécules diatomiques observées sur Titan, absorption induite par collision | 18 |
| 2.3.2 | Cas des molécules polyatomiques linéaires ou des rotateurs symétriques | 19 |
| 2.3.3 | Intensité des raies | 21 |
| 2.3.4 | Forme des raies | 21 |
| 2.4 | Spectre d'émission thermique observé | 23 |
| 2.4.1 | Raies en absorption ou en émission | 23 |
| 2.4.2 | Variation de l'intensité avec la masse d'air, observations au nadir et au limbe | 26 |
| 2.5 | Déduction des paramètres physiques | 28 |
| 2.5.1 | La température | 28 |
| 2.5.2 | L'abondance des constituants | 29 |

Nous venons de voir les caractéristiques générales de l'atmosphère de Titan. Nous allons maintenant voir comment l'émission thermique nous permet de déduire des informations sur la température et sur les abondances des molécules. Après avoir rappelé l'équation donnant l'intensité de l'émission thermique émergente d'une atmosphère planétaire, nous verrons comment il est possible de connaître l'altitude d'où est émis ce rayonnement. Ensuite, nous présenterons les interactions entre le rayonnement infrarouge thermique et les molécules et leurs effets sur les spectres observés. Enfin, nous verrons comment il est possible d'en déduire la température et l'abondance des molécules.

Les spectres planétaires sont constitués de deux composantes : l'une correspond à l'émission thermique de la planète qui domine généralement au-delà de $5 \mu\text{m}$ (ou en-deçà de 2000 cm^{-1}) vu les températures des atmosphères ; l'autre correspond à l'émission solaire réfléchie, qui domine en-deçà de $5 \mu\text{m}$. Dans le cadre de cette thèse, nous

nous intéressons à l'émission thermique de Titan (émission principalement à l'équilibre thermodynamique local). L'instrument Cassini/CIRS, qui observe entre 10 et 1400 cm^{-1} (1 mm - 7 μm), est dédié à l'observation de cette composante (voir Section 3.3). Généralement, l'équilibre thermodynamique local (ETL) est réalisé pour les pressions supérieures à quelques microbars, c'est le cas sur Titan où l'ETL est réalisé jusqu'à ~ 500 km, soit ~ 1 μbar (Roger Yelle, communication privée). CIRS permet ainsi de sonder une grande partie de la gamme d'altitudes jusqu'à 500 km.

Dans la suite, nous verrons à quoi correspondent les spectres thermiques observés en rappelant quelques éléments de transfert de rayonnement et de spectroscopie infrarouge.

2.1 Equation de transfert de rayonnement

L'intensité du rayonnement émis par une atmosphère planétaire est donnée par résolution de l'équation de transfert radiatif plan parallèle qui s'exprime de la manière suivante :

$$\mu \frac{dI_\nu}{d\tau_\nu} = I_\nu - S_\nu \quad (2.1)$$

où $\mu = \cos \theta$ avec θ l'angle d'émission (angle entre la normale à la couche d'air considérée et la ligne de visée). S_ν est la fonction source à la fréquence ν . I_ν est l'intensité du rayonnement à la fréquence ν . τ_ν est l'épaisseur optique à la fréquence ν et s'exprime en fonction du coefficient d'absorption k_ν et du coefficient de diffusion d_ν de la façon suivante :

$$\tau_\nu = \int_z^\infty (k_\nu + d_\nu) dz \quad (2.2)$$

où z correspond à l'altitude. Dans le cas de l'émission thermique, nous considérons le terme d_ν comme nul puisque la diffusion est négligeable aux longueurs d'onde considérées.

La solution formelle de cette équation est donnée par l'équation 2.3 pour un rayonnement dirigé dans le même sens que l'axe des z (correspondant à $\mu > 0$)

$$I_\nu e^{-\tau/\mu} = I_\nu(\tau_1) e^{-\tau_1/\mu} + \frac{1}{\mu} \int_\tau^{\tau_1} S_\nu(\tau') e^{-\tau'/\mu} d\tau' \quad (2.3)$$

avec τ et τ_1 définis comme sur la Fig. 2.1

Dans le cas de l'émission thermique, S_ν est égale à la fonction de Planck B_ν^1 , là où l'atmosphère est à l'ETL. Pour l'étude de l'émission thermique d'une atmosphère planétaire possédant une surface (planètes telluriques), ou un plafond nuageux (planètes

¹La fonction de Planck à la forme suivante :

$$B(\nu, T) d\nu = \frac{2hc^2\nu^3}{(\exp(hc\nu/kT) - 1)} d\nu \quad (2.4)$$

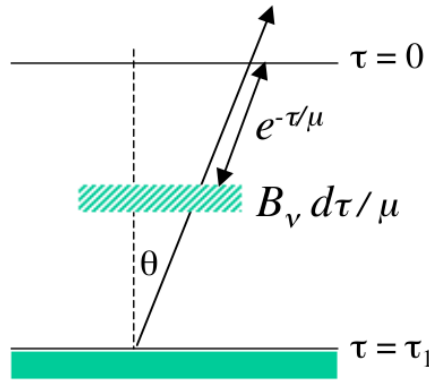


FIG. 2.1: Schéma de l'émission d'une couche atmosphérique. Le niveau $\tau = 0$ correspond au sommet de l'atmosphère et le niveau τ_1 à la surface (planète tellurique) ou à un plafond nuageux (planètes géantes).

géantes), l'équation 2.3 peut donc être réécrite :

$$I_\nu(\mu, 0) = B_\nu(\tau_1)e^{-\tau_1/\mu} + \frac{1}{\mu} \int_0^{\tau_1} B_\nu(\tau)e^{-\tau/\mu} d\tau \quad (2.5)$$

où l'on obtient l'intensité du rayonnement émis en haut de l'atmosphère ($\tau = 0$) qui a traversé une quantité d'atmosphère proportionnelle à la masse d'air $1/\mu$. Les opacités τ et τ_1 sont définies comme sur la Fig. 2.1, où τ_1 est l'épaisseur optique au niveau de la surface. $B_\nu(\tau_1)$ est l'intensité émise par la surface ou le plafond nuageux. Le premier terme de droite de l'équation 2.5 correspond à l'émission de la surface ou du plafond nuageux $B_\nu(\tau_1)$ atténuée de façon exponentielle ($e^{-\tau_1/\mu}$) par toute l'atmosphère avant d'en atteindre le sommet. Cette émission est d'autant plus atténuée que l'angle d'émission est important (et donc que la masse d'air $1/\mu$ traversée est importante). Le second terme de droite de l'équation 2.5 fait référence à la contribution de l'émission thermique $B_\nu(\tau)d\tau$ de chaque couche atmosphérique atténuée exponentiellement par l'épaisseur d'atmosphère située au-dessus de chacune d'elle, correspondant à une opacité τ . Remarquons que dans cette équation, le flux infrarouge thermique provenant des couches atmosphériques et réfléchi par la surface est négligé car ce terme est généralement très faible puisque que l'émissivité² de la surface est proche de 1.

2.2 Maximum de la fonction de contribution

Dans la pratique, comment les altitudes où sont émises les photons infrarouges observés par les instruments sont-elles connues ?

Il est utile d'introduire la **fonction poids (ou "weighting function")** qui donne le gradient de la transmission ($T_\nu = e^{-\tau/\mu}$) à travers l'atmosphère dans la direction μ

²L'émissivité (notée ϵ), est le rapport entre le flux total rayonné par la surface ou une couche atmosphérique et celui d'un corps noir qui rayonnerait à la même température. C'est un nombre sans dimensions compris entre 0 et 1.

et qui s'exprime comme :

$$WF(z, \mu) = \frac{d}{dz} e^{-\tau/\mu} = \frac{dT_\nu}{dz} = -\frac{e^{-\tau/\mu}}{\mu} \frac{d\tau}{dz} \quad (2.6)$$

Comme l'atmosphère est supposée être à l'équilibre hydrostatique $dp/p = d\ln p = -dz/H$, la fonction poids peut être réécrite en pression comme :

$$WF(p, \mu) = \frac{d}{d\ln p} e^{-\tau/\mu} = \frac{dT_\nu}{d\ln p} \quad (2.7)$$

Cette fonction atteint son maximum là où la transmission change le plus rapidement.

L'équation 2.5 du rayonnement thermique émis par une atmosphère devient :

$$I_\nu(\mu, 0) = B_\nu(\tau_1) e^{-\tau_1/\mu} + \int_0^\infty B_\nu(p) WF(p) d\ln p \quad (2.8)$$

Si la fonction de Planck $B_\nu(p)$ varie peu avec la pression, comparé à la variation de $WF(p)$, alors le niveau où $WF(p)$ est maximale est également le niveau qui contribue le plus à l'intensité $I(\mu, 0)$. Etant donné que les profils de température présentent souvent de fortes variations de température avec la pression, les variations de $B_\nu(p)$ sont également importantes et il est préférable d'utiliser le maximum de la **fonction de contribution** $CF = B_\nu(p)WF(p)$, plus approprié pour définir le niveau du maximum de contribution à l'émission $I_\nu(\mu, 0)$ en sortie de l'atmosphère. Dans ce cas :

$$I_\nu(\mu, 0) = B_\nu(\tau_1) e^{-\tau_1/\mu} + \int_0^\infty CF(p) d\ln p \quad (2.9)$$

Le niveau du maximum de $CF(p)$ varie avec la fréquence, principalement à cause de la variation de l'épaisseur optique. En étudiant l'intensité d'une raie au niveau de son coeur ou dans les ailes (voir Section 2.3.3), il est donc possible de sonder différents niveaux de l'atmosphère qui sont à des températures différentes.

Nous allons maintenant voir quelle approximation permet de déduire le niveau du maximum de la fonction de contribution.

Lorsque l'altitude augmente, l'opacité diminue et nous avons $d\tau_\nu = -k_\nu dz = -\sigma_\nu n(z) dz$, où σ_ν est la section efficace d'absorption des molécules et $n(z)$ leur densité. En utilisant l'équilibre hydrostatique et la loi des gaz parfaits, on obtient : $d\tau_\nu = \frac{\sigma_\nu H}{kT} dp$ avec H l'échelle de hauteur, k la constante de Boltzmann et T la température. Si le gaz a une température constante avec l'altitude et que le coefficient d'absorption est indépendant de la pression alors l'opacité augmente linéairement avec la pression tel que $\tau_\nu = \frac{\sigma_\nu H}{kT} p$. Dans ce cas, la fonction poids devient :

$$WF(p) = p \frac{\sigma_\nu H}{\mu kT} e^{-\frac{\sigma_\nu H}{\mu kT} p} = \frac{\tau_\nu}{\mu} e^{-\tau_\nu/\mu} \quad (2.10)$$

Elle correspond alors à la fonction de Chapman (un cas particulier de la fonction poids). Cette fonction est représentée sur la Fig. 2.2.

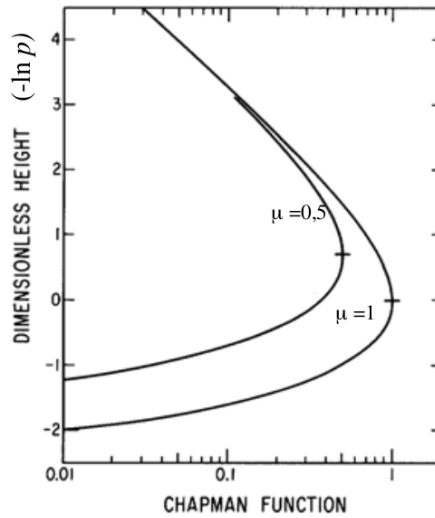


FIG. 2.2: Fonction de Chapman. Le maximum de la fonction de Chapman donne approximativement le niveau d'où provient le rayonnement thermique observé. L'altitude la plus basse pouvant être sondée est telle que $\mu = 1$ (i.e., $\theta=0$, ligne de visée perpendiculaire à la surface). Pour $\mu = 0.5$, la fonction sonde une altitude plus élevée.

En dérivant cette fonction, nous voyons qu'elle atteint son maximum pour $\tau = \mu$. L'émission thermique provient principalement de la région de l'atmosphère centrée vers $\tau = \mu$. Les couches situées en-dessous du niveau $\tau = \mu$ présentent une grande émissivité car la densité est élevée, mais leur émission est atténuée exponentiellement (terme en $e^{-\tau/\mu}$) par les couches supérieures. Les couches situées au-dessus de ce niveau présentent une densité moins importante et donc une faible émissivité. La largeur typique de la fonction de Chapman vaut environ une échelle de hauteur.

Bien que la forme réelle d'une fonction poids monochromatique soit influencée par le profil de température et la pression, la fonction de Chapman constitue une approximation de $WF(P)$ et en possède les principales caractéristiques.

Nous verrons dans les Parties II et III, l'importance des fonctions de contribution dans les inversion des profils de température et d'abondance.

Nous avons introduit ici le terme d'opacité sans l'explicitier. Ce terme $\tau(\nu)$ varie avec la fréquence, il dépend des coefficients d'absorption de la matière présente, et il varie en particulier d'une molécule à l'autre. Nous allons voir à la Section suivante comment se traduisent les interactions entre rayonnement et matière, en nous focalisant sur l'infrarouge.

2.3 Interaction entre le rayonnement infrarouge et la matière

Les interactions entre le rayonnement et la matière sont décrites grâce à la théorie quantique qui ne sera pas détaillée ici. Nous nous contenterons de donner les résultats utiles pour comprendre les émissions observées sur les spectres infrarouges thermiques de l'atmosphère de Titan.

Les photons infrarouges peuvent exciter les modes rotationnels et vibrationnels des molécules. Ils ne sont pas assez énergétiques pour exciter les transitions électroniques dans les atomes, qui ont lieu principalement dans les domaines visible et ultraviolet.

Les molécules ne peuvent posséder que certains modes de vibration et de rotation et elles peuvent passer d'un état à un autre (correspondant soit à une transition vibrationnelle pure, soit rotationnelle pure, ou une transition vibration-rotation) en émettant ou absorbant un photon dont les énergies sont quantifiées. Les molécules peuvent donc voir leurs états de vibration ou de rotation modifiés par un échange d'énergie avec le rayonnement ambiant qui s'effectue par l'intermédiaire de l'interaction entre le champ électrique du rayonnement et le moment dipolaire de la molécule. Ces transitions sont régies par des règles de sélection déterminées par la physique quantique. En conséquence, les molécules absorbent et émettent des radiations en formant un motif complexe de raies discrètes qui se distinguent très nettement du spectre de corps noir. Etant donné que chaque molécule a une structure unique et donc des énergies de rotation et de vibration uniques, le motif de raies est caractéristique de la matière observée.

Les nombres d'onde ³ des modes de vibration moléculaire sont généralement compris entre 50 et 5000 cm^{-1} et ceux des transitions de rotation sont compris entre 1 et 300 cm^{-1} .

2.3.1 Cas des molécules diatomiques observées sur Titan, absorption induite par collision

Trois molécules diatomiques ont été observées dans l'atmosphère de Titan : N_2 , H_2 et CO . Dans le cas de CO , les règles de sélection des transitions d'énergie s'appliquent puisque cette molécule dissymétrique possède un moment dipolaire permanent. Ces règles de sélection sont similaires à celles des transitions de vibration - rotation des molécules polyatomiques linéaires (bandes parallèles, voir Section 2.3.2).

A l'opposé, N_2 et H_2 ne possèdent pas de moment dipolaire permanent, et ne devraient donc pas interagir avec le rayonnement environnant. Or, lorsque la densité est assez élevée, les collisions subies par les molécules sont à l'origine de la distorsion de leur distribution électronique ou du chevauchement des densités de charge. Des absorptions induites par collision sont alors observées. Un moment dipolaire induit peut apparaître au cours de collisions entre molécules (e.g. $\text{H}_2\text{-H}_2$, $\text{H}_2\text{-N}_2$), entre une molécule et un atome ($\text{H}_2\text{-He}$), ou entre deux atomes (He-Ar). Dans le cas de Titan, les absorptions induites par collisions les plus intenses sont les suivantes : $\text{N}_2 - \text{N}_2$, $\text{N}_2 - \text{H}_2$, $\text{N}_2 - \text{CH}_4$ et $\text{CH}_4 - \text{CH}_4$.

Les collisions entre deux molécules créent des bandes larges situées autour des nombres d'onde des transitions de rotation pure ou de vibration-rotation des molécules individuelles. Les largeurs de ces bandes sont importantes (plusieurs dizaines de cm^{-1} ou plus) à cause de la durée d'une collision, qui n'excède pas 10^{-12} s. En effet, la largeur d'une raie spectrale est inversement proportionnelle à la durée de vie de l'état d'énergie, qui est dans ce cas égale à la durée d'une collision (voir Section 2.3.4). La profondeur d'une telle bande d'absorption augmente proportionnellement avec le

³Le nombre d'onde est relié à la fréquence par la relation $\nu = f/c$ où f est la fréquence en Hz et c la vitesse de la lumière.

nombre de molécules par élément de volume et le nombre de partenaires de collision. L'absorption dépend donc du produit des densités des molécules qui rentrent en collision (quand les partenaires sont les mêmes, cette dépendance correspond au carré de la densité).

Dans la gamme spectrale de CIRS, l'absorption induite par collision de N_2-N_2 domine aux fréquences inférieures à 100 cm^{-1} , celle de N_2-CH_4 domine entre 150 et 500 cm^{-1} . Autour de 480 cm^{-1} , ce sont les absorptions de N_2-CH_4 et N_2-H_2 avec une intensité comparable, et au-delà de 550 cm^{-1} , N_2-H_2 domine.

L'atmosphère de Titan présente une chimie complexe et la quasi-totalité des molécules observées sont polyatomiques. Nous aborderons dans la section suivante le cas des molécules polyatomiques linéaires ou plus généralement des rotateurs symétriques qui correspondent à la plupart des molécules connues de Titan (HCN, C_2H_2 ...). Nous ne traiterons pas le cas des rotateurs asymétriques (dont les moments d'inertie principaux sont tous différents) en raison de la grande complexité des niveaux d'énergie de rotation (comme c'est le cas par exemple pour C_2H_4).

2.3.2 Cas des molécules polyatomiques linéaires ou des rotateurs symétriques

Les spectres d'émission de ces molécules sont plus complexes que ceux des molécules diatomiques du fait de leur nombre de modes de vibration qui est plus élevé et qui dépend du nombre d'atomes de la molécule.

Remarquons qu'une molécule polyatomique symétrique ne possède pas de dipôle (CO_2 , CH_4), les transitions de rotation sont donc interdites. Or, si la molécule vibre, la symétrie peut être détruite et un moment dipolaire est créé.

Les transitions vibrationnelles (qui correspondent au passage d'un état de nombre quantique ν'' à un état ν') et rotationnelles (passage d'un état de nombre quantique J'' à un état J') sont quantifiées, celle-ci ont lieu simultanément, ce qui donne naissance à des bandes de rotation-vibration qui forment un ensemble de raies rotationnelles centrées autour de la fréquence de vibration.

Si la molécule présente un moment dipolaire orienté selon son axe principal⁴, alors les règles de transition permises sont telles que $\Delta v=0, \pm 1, \pm 2, \dots$ et $\Delta J=\pm 1$. La règle de sélection des ΔJ implique l'existence d'une branche P ($\Delta J=-1$), constituée de raies également espacées et s'étendant vers les nombres d'onde inférieurs à la fréquence de vibration. La branche correspondant à $\Delta J = +1$ est appelée la branche R, elle est constituée de raies s'étendant vers les nombres d'onde élevés. La bande résultante est une bande parallèle.

Dans le cas des bandes perpendiculaires, c'est-à-dire liées aux transitions de rotation-vibration d'une molécule dont le moment dipolaire est perpendiculaire à l'axe principal, les règles de sélection des transitions permises sont telles que $\Delta v=0, \pm 1, \pm 2, \dots$ et $\Delta J = 0, \pm 1$. En plus des branches P et R, une branche Q correspondant à $\Delta J=0$, est visible au niveau de la fréquence de vibration. La Fig. 2.3 illustre ces

⁴Dans les cas considérés ici, il correspond à l'axe reliant les atomes pour une molécule linéaire ou l'axe de symétrie autour duquel une rotation de la molécule conduit à une configuration de celle-ci qu'un observateur fixe ne peut distinguer de la configuration initiale.

règles de sélection. La branche Q est plus intense que les branches P et R, et c'est généralement cette branche qui est détectée le plus facilement sur les spectres observés. Ce type de bande est observé pour l'acétylène comme l'illustre la Fig. 2.4, issue de la base de données HITRAN, montrant la bande ν_5 centrée à 729 cm^{-1} (cette bande nous sert à déterminer l'abondance de cette molécule dans l'atmosphère de Titan, voir Partie III). On notera que, dans ce cas, la branche Q est très étroite en fréquence car les raies correspondant à différents nombres quantiques de rotation sont très proches les unes des autres, J étant inchangé lors de la transition.

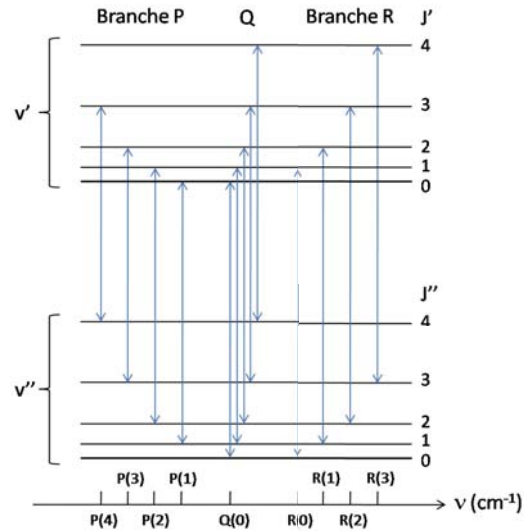


FIG. 2.3: Schéma des transitions permises entre deux niveaux vibrationnels v' et v'' d'une bande perpendiculaire d'une molécule polyatomique linéaire (ou d'un rotateur symétrique).

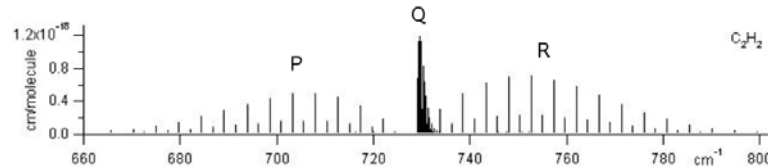


FIG. 2.4: Spectre théorique de la bande ν_5 de l'acétylène (C_2H_2) issu de la base de données HITRAN 2004. Position et intensité relative des raies en fonction des nombres d'onde (cm^{-1}), avec les branches P, Q et R. Les intensités sont données en $\text{cm}^{-1}/(\text{molécule} \times \text{cm}^{-2})$ à la température de 296 K. Notons que la meilleure résolution spectrale de CIRS, qui vaut 0.5 cm^{-1} ne permet pas de résoudre les raies de la branche Q.

Des changements dans l'apparence du spectre peuvent être causés par des changements de masse atomique dans une molécule. Ce sont les effets de substitution isotopique comme le deutérium pour l'hydrogène ou ^{13}C pour ^{12}C (voir la Partie IV pour les exemples de spectres des isotopes de HCN et C_2H_2). Les mouvements de vibration changent alors de fréquence.

Nous venons de voir qu'il existe des règles de sélection qui régissent la localisation des différentes raies d'émission ou d'absorption au cours de transitions rotationnelles,

vibrationnelles, ou de vibration - rotation. L'instrument Cassini/CIRS permet d'observer les bandes purement rotationnelles de 10 et 300 cm^{-1} et de vibration - rotation entre 300 et 1400 cm^{-1} . Pour interpréter les spectres et en déduire les abondances⁵ des molécules et la température de l'atmosphère, il faut comprendre comment les intensités des raies varient.

2.3.3 Intensité des raies

L'intensité (ou force) d'une raie dépend de la probabilité d'absorption ou d'émission d'un photon, et donc de l'interaction entre le champ électrique incident et le dipôle de la molécule. La probabilité de transition entre les niveaux d'énergie E_n (niveau haut) et E_m (niveau bas) dépend du moment dipolaire associé à la molécule et du nombre de molécules dans l'état d'énergie E_n . A l'équilibre thermodynamique, il est possible de déterminer le nombre de molécules dans l'état (v, J) . Pour un nombre quantique v donné, le nombre de molécules augmente pour les J croissant jusqu'à atteindre un maximum qui dépend de la température du milieu. Les intensités dans les branches P et R sont alors maximales (voir Fig. 2.4). Au-delà de ce maximum, le nombre de molécules décroît avec J croissant et les intensités des raies décroissent également.

2.3.4 Forme des raies

Une autre caractéristique des raies spectrales est leur forme. Les raies spectrales n'apparaissent jamais comme des raies infiniment fines, et ce même pour une résolution infinie du détecteur. Trois phénomènes sont à l'origine de l'élargissement des raies.

L'élargissement naturel

Le premier est l'élargissement naturel des raies. Il trouve son origine dans le principe d'incertitude de Heisenberg appliqué aux énergies des états initiaux et finaux de transition : $\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar$, où Δt est la durée de vie de l'état considéré et ΔE l'étalement en énergie de cet état. Ainsi, un état n'a une énergie parfaitement définie que si la durée de vie de cet état est infinie. Mais comme ce n'est jamais le cas, tous les niveaux d'énergie sont plus ou moins étalés. Cette équation peut être réécrite en fréquence : $\Delta \nu \cdot \Delta t \sim c$ où l'élargissement de la raie $\Delta \nu$ (en cm^{-1}) correspond à la gamme de fréquences de radiation qui a le plus de probabilité d'interagir avec la molécule. On obtient alors la largeur naturelle de raie qui vaut en cm^{-1} : $\Delta \nu \sim 1/c\Delta t$. Le profil de la raie suit alors un profil lorentzien, la largeur à mi-hauteur est dite largeur naturelle de transition. L'élargissement naturel dans l'infrarouge est généralement négligeable devant les autres causes d'élargissement et constitue la limite inférieure de la largeur d'une raie spectrale. Par exemple, pour une transition moléculaire vers 1000 cm^{-1} , l'élargissement naturel peut être de l'ordre de 10^{-7} cm^{-1} . Dans la pratique l'élargissement collisionnel a un effet plus marqué.

⁵L'abondance d'une molécule, également appelée rapport de mélange ou fraction molaire, est donnée par $q_i = n_i/n$ où n_i est la densité de la molécule considérée (en molécules. cm^{-3}) et n la densité atmosphérique. L'abondance d'une molécule correspond donc à sa proportion dans l'atmosphère.

Elargissement collisionnel

Lorsque des collisions se produisent entre des molécules ou des atomes en phase gazeuse, il y a un échange d'énergie qui se produit en un temps très court. Les collisions induisent la transition d'un niveau d'énergie à un autre. Dans les conditions physiques des atmosphères planétaires, le temps de collision est bien plus court que la durée de vie d'une transition naturelle. Les collisions constituent la principale cause de réduction du temps de vie d'un niveau, et étant donné le principe d'incertitude de Heisenberg, il s'ensuit un élargissement de la raie. La répartition spectrale de l'intensité est donnée par une relation similaire à celle de l'élargissement naturel qui est lorentzien, et est donné par la relation :

$$I(\nu) = \frac{K}{2\pi} \frac{\Delta\nu_c}{(\nu - \nu_0)^2 + (\Delta\nu_c)^2/4} \quad (2.11)$$

où K l'intensité spectrale intégrée sur toute la raie, $\Delta\nu_c$ est la largeur totale à mi-hauteur de la raie et ν_0 son centre. Cette largeur de collision dépend de la pression et de la température (car elles font varier le nombre de collisions) et s'exprime comme :

$$\Delta\nu_L(p, T) = \Delta\nu_L(p_0, T_0) \frac{P}{P_0} \left(\frac{T}{T_0}\right)^n \quad (2.12)$$

où P_0 et T_0 sont des températures de référence. L'indice n est toujours strictement inférieur à 0 et dépend de la transition et de la molécule considérée. Ainsi, à une température donnée, $\Delta\nu_L$ est proportionnelle à la pression P , ce qui conduit à la définition du coefficient d'élargissement collisionnel : $\gamma = \Delta\nu_L/P$. L'élargissement collisionnel dépend des nombres quantiques de rotation et relativement peu de la fréquence de vibration. Les bases de données d'atmosphères planétaires (GEISA, HITRAN) donnent la valeur de ce coefficient d'élargissement à une température de 296 K et une pression de 1 atmosphère.

Elargissement Doppler

Les molécules qui émettent ou absorbent le rayonnement sont en mouvement d'agitation thermique. Certaines d'entre elles se déplacent dans la même direction que le photon avec lequel l'interaction a lieu, et d'autres dans la direction opposée. Dans ce cas, le profil complet de la raie est donné par la contribution de plusieurs molécules ou par une même molécule présentant plusieurs portions de trajectoire entre chaque collision, certaines allant vers le photon et d'autres s'en éloignant.

L'effet Doppler-Fizeau se caractérise par le fait que $\nu - \nu_0 = \nu_0 \frac{v_z}{c}$, où v_z est la vitesse dans la direction du photon absorbé ou émis. Il existe donc un élargissement de la raie qui augmente avec la vitesse des particules, et donc avec la température. Le profil de l'intensité de la raie est donné par :

$$I(\nu) = K \frac{2\sqrt{\ln 2}}{\pi \Delta\nu_D} \exp(-4\ln 2 (\nu - \nu_0)^2 / \Delta\nu_D^2) \quad (2.13)$$

avec

$$\Delta\nu_D = \frac{\nu}{c} \left(8 \ln 2 k N_0 \frac{T}{M}\right)^{\frac{1}{2}} = 7.16 \times 10^{-7} \left(\frac{T}{M}\right)^{\frac{1}{2}} \nu \quad (2.14)$$

avec k la constante de Boltzmann et N_0 le nombre d'Avogadro. Cet élargissement est d'autant plus important que la fréquence centrale de la raie est élevée. Par exemple,

l'élargissement Doppler de CH_4 à 200 K est de 3.3×10^{-3} à 1300 cm^{-1} (gamme spectrale de CIRS) et vaut 7.6×10^{-3} à 3300 cm^{-1} .

Dans la plupart des cas, l'élargissement est à la fois collisionnel et Doppler. Ainsi, la forme de la raie présente une contribution due au profil de Lorentz et une contribution due à l'effet Doppler. Le profil Doppler est plus piqué autour du centre de la raie, tandis que le profil Lorentzien présente des ailes plus étendues. Le profil composite qui en résulte est appelé profil de Voigt et est la convolution des fonctions gaussienne et lorentzienne.

$$I(\nu) = \int_{\nu'} G(\nu)L(\nu - \nu')d\nu' \quad (2.15)$$

La largeur empirique de la fonction de Voigt vaut :

$$\Delta\nu_D = \frac{\Delta\nu_c}{2} + \left(\frac{\Delta\nu_c^2}{4} + \Delta\nu_D^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.16)$$

Le coeur de la raie est dominé par le profil Doppler, tandis que les ailes sont dominées par le profil Lorentzien.

Dans les atmosphères planétaires, une raie formée à différentes altitudes, présentera un profil avec une large base due aux hautes pressions à basse altitude (forme lorentzienne collisionnelle) et un coeur Doppler étroit engendré par les basses pressions à haute altitude.

Nous avons vu jusqu'à présent la théorie qui régie la position, l'intensité et la forme de ces raies. Dans la section suivante, nous allons présenter comment il est possible de déduire la température atmosphérique et les abondances des molécules à partir des raies d'émission/d'absorption.

2.4 Spectre d'émission thermique observé

2.4.1 Raies en absorption ou en émission

Prenons l'exemple d'une couche atmosphérique de gaz présentant une température T_A constante et une pression constante, située juste au-dessus de la surface de température T_S . Considérons que le gaz possède une seule raie spectrale. Nous nous intéressons ici au cas de l'émission thermique et la diffusion est négligée. D'après l'éq. 2.5, nous avons l'émission émergente de cette couche qui vaut :

$$I_\nu(\mu, 0) = B_\nu(T_S)e^{-\tau_1/\mu} + B_\nu(T_A)[1 - e^{-\tau_1/\mu}] = B_\nu(T_A) - [B_\nu(T_A) - B_\nu(T_S)]e^{-\tau_1/\mu} \quad (2.17)$$

En l'absence d'opacité atmosphérique ($\tau_1=0$), $I_\nu(\mu, 0)=B_\nu(T_s)$, et on voit l'émission thermique de la surface. Près de la raie, $\tau_1 \neq 0$ et $I_\nu(\mu, 0) < B_\nu(T_s)$ si $T_A < T_B$, alors la raie est vue en absorption. $I_\nu(\mu, 0)$ augmente uniquement si $T_A > T_S$, dans ce cas, la raie spectrale est vue en émission. En revanche, si $T_A < T_S$, alors l'intensité diminue, et la raie spectrale est vue en absorption. Et si $T_A = T_S$, la raie disparaît.

Si le milieu est optiquement mince, alors la surface sous la raie (définie par rapport au continuum) est proportionnelle à la densité. En effet, si la densité est faible le long de la ligne de visée, très peu de molécules sont masquées

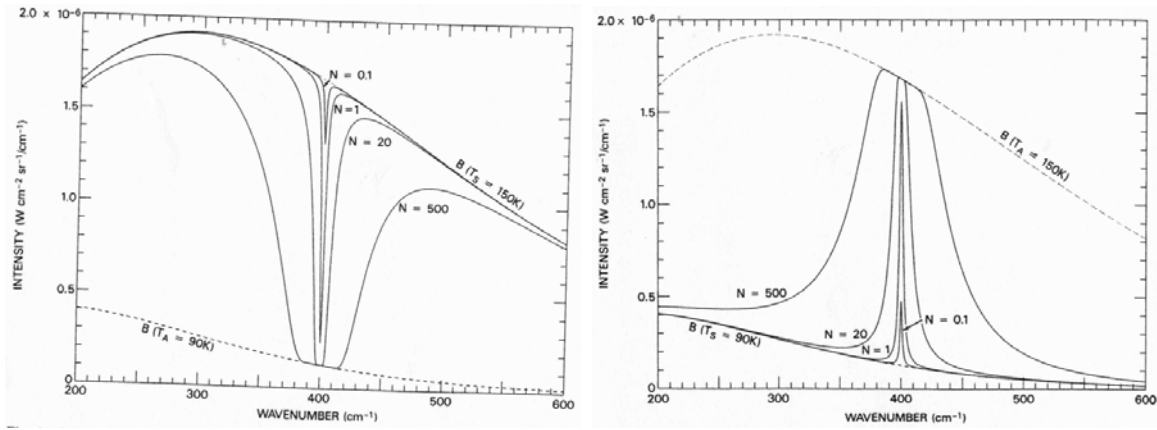


FIG. 2.5: **A gauche :** Raie lorentzienne en absorption dans une couche atmosphérique isotherme de température $T_A = 90$ K au dessus d'une surface de température $T_S = 150$ K. La largeur de raie vaut 1 cm^{-1} (voir Eq. 2.12) et le centre de la raie est situé à 400 cm^{-1} . La raie est représentée pour quatre valeurs de la densité moléculaire $N=0.1, 1, 20$ et $500 \text{ molécules.cm}^{-3}$. Les fonctions de Planck à $T=150$ K et 90 K servent de limites pour la raie. **A droite :** Raie lorentzienne en émission car la température de surface vaut $T_S = 90$ K et la température atmosphérique vaut $T_A = 150$ K. Les caractéristiques sont les mêmes que pour la figure de gauche.

par d'autres molécules ($\tau_1 \ll 1$) et presque toutes contribuent à l'opacité. Si la densité devient trop importante, alors les molécules se masquent les unes les autres et seule une fraction d'entre elles contribue à l'opacité maximale de la raie. **Si le milieu est optiquement épais, alors la raie approche de la saturation et l'aire sous la raie n'est plus proportionnelle à la densité, mais à une fraction de puissance de celle-ci.** Le coeur de la raie s'aplatit - il est saturé - car la couche devient opaque à cette fréquence et les contrastes de température entre la surface et la couche n'affectent plus l'intensité près du centre de la raie (la surface n'est pas visible). Seules les ailes de la raie, où la section efficace d'absorption des molécules est encore faible, laissent entrevoir une contribution de la surface.

Nous venons de voir l'exemple d'une couche atmosphérique de température constante, mais dans la réalité, l'atmosphère n'est pas isotherme. Nous allons maintenant nous intéresser à l'effet des variations de température avec l'altitude sur l'évolution de la raie.

Considérons une fréquence de faible opacité atmosphérique (ν_c), alors il est possible d'observer l'atmosphère profonde, là où $\tau_c \simeq \mu$. Dans ce cas, l'émission en sortie est telle que $I_{\nu c} = B_{\nu c}(T_c)$ où T_c est la température au niveau $\tau_c \simeq \mu$. Cette émission constitue le continuum du spectre observé. Si l'opacité atmosphérique est très faible et que la planète possède une surface, alors la température du continuum correspond à celle de la surface : $T_c = T_{surf}$. Considérons maintenant une autre fréquence pour laquelle l'opacité atmosphérique est plus élevée : $\nu \neq \nu_c$. Dans ce cas, l'altitude sondée est forcément plus élevée puisque cette fréquence ne permet plus de voir la surface, ce qui signifie que le niveau $\tau \sim \mu$ se déplace vers le haut. L'émission thermique provient d'une altitude plus élevée et alors l'intensité émise est $I_\nu = B_\nu(T)$. La Fig. 2.6 représente différents cas de figure suivant l'altitude du niveau sondé et la forme du profil de température. Si le nouveau niveau sondé se situe à τ_1, τ_2 ou τ_3 , alors les températures correspondantes à ces niveaux sont plus faibles que celle du continuum. Dans ce cas,

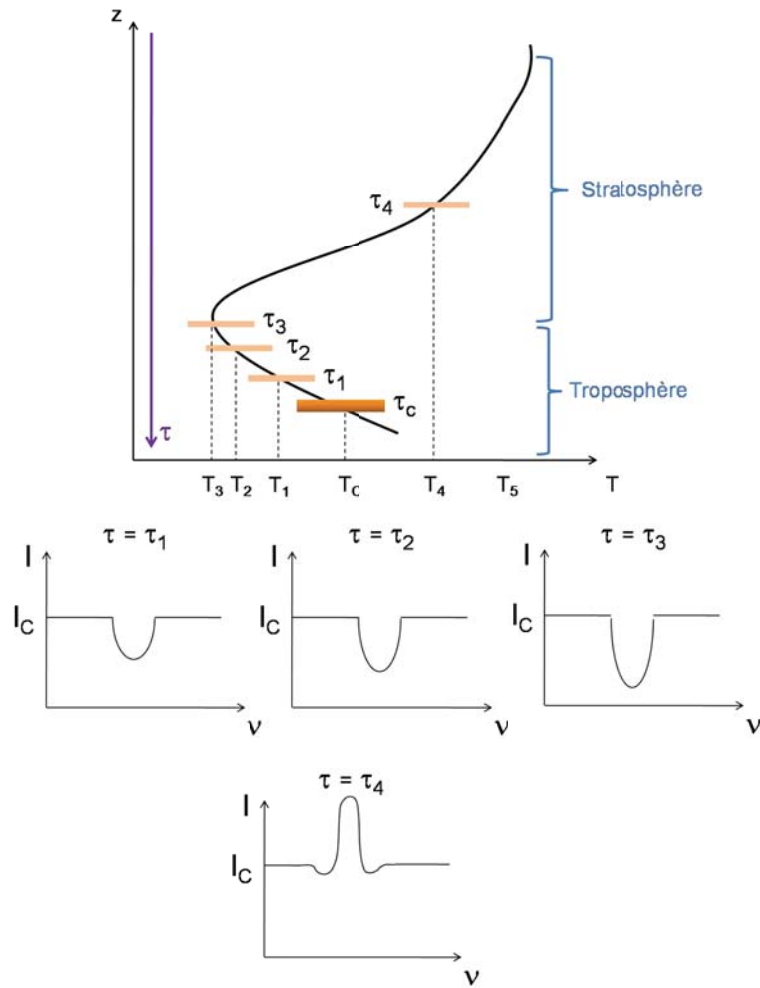


FIG. 2.6: Schématisation de la variation de la profondeur d'une raie spectrale avec l'altitude du niveau d'opacité $\tau \sim \mu$. Si l'émission thermique provient du niveau d'opacité τ_1 , alors la raie est vue en absorption car la température du continuum (T_C) est plus élevée que celle du niveau τ_1 (où $T = T_1$). La profondeur de la raie augmente pour les niveaux où $\tau = \tau_2$ et τ_3 , car l'écart de température entre le continuum et la région d'émission de la bande augmente. La profondeur de la bande d'absorption est maximale au niveau τ_3 . En revanche pour le niveau $\tau = \tau_4$, la température de la région d'émission est supérieure à celle du continuum et une partie de la raie apparaît en émission.

les raies apparaissent en absorption avec une profondeur de plus en plus grande à mesure que la température du niveau sondé diminue. Au niveau τ_4 , la température est supérieure à celle du continuum et dans ce cas un motif en émission apparaît au centre de la raie en absorption. Au-dessus de ce niveau, la température du milieu est bien plus élevée que celle du continuum et la raie apparaît fortement en émission. Si le maximum d'émission provenait d'un niveau où $T = T_C$, alors la raie disparaîtrait.

De façon plus générale, ces phénomènes sont connus sous le nom de loi de Kirchhoff. Si un composé présente une opacité dans une région atmosphérique plus froide que celle du niveau τ_c , alors la raie correspondante apparaît en absorption. Si au contraire, ce composé est opaque dans une région plus chaude que celle du continuum, alors sa raie apparaît en émission sur le spectre.

Ainsi, à partir de l'observation du profil des raies en absorption ou en émission, il

est possible de déduire une information sur le profil de température.

2.4.2 Variation de l'intensité avec la masse d'air, observations au nadir et au limbe

Que se passe-t-il lorsque l'on augmente la masse d'air ? Nous l'avons vu plus haut, la masse d'air correspond par définition à $1/\mu = 1/\cos\theta$. En d'autres termes, l'épaisseur d'atmosphère parcourue par le rayonnement pour une visée sondant une altitude z_1 avec un angle d'émission θ vaut $1/\mu$ fois l'épaisseur d'atmosphère parcourue par le rayonnement pour une visée parfaitement verticale ($\theta = 0$) sondant la même altitude. Ainsi plus la masse d'air est importante, plus le rayonnement émis à un niveau donné est atténué par les couches supérieures (termes en $e^{-\tau/\mu}$ dans la solution de l'équation de transfert de rayonnement).

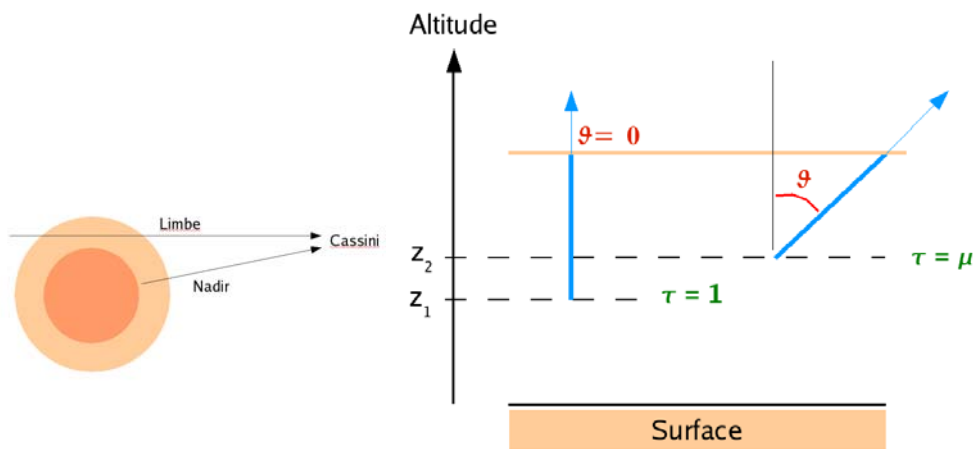


FIG. 2.7: *A gauche : Géométrie des observations au limbe et au nadir.* La ligne de visée d'une observation au nadir intercepte la surface, tandis que celle d'une observation au limbe n'intercepte que l'atmosphère. Le schéma n'est pas à l'échelle des observations réalisées par l'instrument Cassini/CIRS qui ont lieu à plusieurs dizaines de milliers de kilomètres de la surface de Titan. **A droite : Variation avec la masse d'air de l'altitude du niveau sondé par une observation au nadir.** Lorsque l'angle d'émission θ augmente, la masse d'air traversée au-dessus d'une altitude donnée augmente de façon linéaire, et le niveau tel que $\tau \sim \mu$ se déplace vers le haut.

Une augmentation de la masse d'air a donc le même effet qu'une augmentation de l'opacité τ_ν (voir Fig. 2.7, à droite). Pour que le rayonnement thermique émis traverse une même quantité d'atmosphère, il faut que le niveau d'émission $\tau \sim \mu$ (z_2) soit situé plus haut que celui où $\tau \sim 1$ (z_1). Le niveau tel que $\tau = \mu$ est donc plus haut en altitude. Si nous reprenons la Fig. 2.6, et que nous supposons que cette augmentation de l'angle d'émission fait passer le maximum d'émission du niveau τ_1 au niveau τ_2 , alors l'intensité de l'émission diminue. De la même manière, si le niveau sondé dans la stratosphère passe du niveau τ_4 à un niveau plus élevé, alors l'intensité de la raie augmente (car la température est d'autant plus élevée par rapport à celle du continuum).

De façon générale, si la masse d'air augmente, alors l'intensité de l'émission d'origine stratosphérique augmente et celle d'origine troposphérique diminue.

Deux types d'observation reviendront régulièrement dans ce manuscrit : les observations à géométrie nadir et les observations à géométrie au limbe. Une observation au nadir intercepte la surface de Titan (comme le schématise la Fig. 2.7 (à gauche), tandis qu'une observation au limbe, ou à visée rasante, traverse uniquement l'atmosphère. Pour une visée au nadir, l'augmentation de la masse d'air est réalisée en observant des points de la surface de Titan de plus en plus éloignés du centre du disque, et lorsque la ligne de visée n'intercepte plus la surface, l'observation devient une observation au limbe, où la masse d'air $1/\cos \theta$ tend vers l'infini (car θ tend vers 90°). La Fig. 2.7 (gauche), montre clairement que la ligne de visée d'une observation au limbe traverse une quantité d'atmosphère bien supérieure à celle d'une observation au nadir.

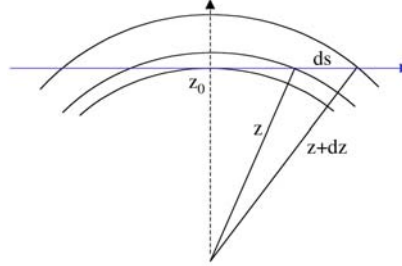


FIG. 2.8: *Détail de la géométrie d'une observation au limbe.*

L'équation de l'intensité observée dans ce cas est telle que :

$$I_\nu = \int_{-\infty}^{\infty} B_\nu(T) e^{-\tau_s} d\tau_s \quad (2.18)$$

en intégrant sur tout le chemin optique, où s donne la position le long de la ligne de visée (voir Fig. 2.8). Avec l'opacité qui est donnée le long de la ligne de visée par :

$$\tau_s = \int_s^{\infty} k_\nu ds \quad (2.19)$$

avec :

$$ds = \sqrt{(z+dz)^2 - z_0^2} - \sqrt{z^2 - z_0^2} = d(\sqrt{z^2 - z_0^2}) \quad (2.20)$$

et donc, l'épaisseur optique totale le long de la ligne de visée (de part et d'autre du point tangent) vaut :

$$\tau_s^{tot} = 2 \int_{z_0}^{\infty} \sigma_\nu n(z) \frac{z}{\sqrt{z^2 - z_0^2}} dz \quad (2.21)$$

le facteur 2 vient du fait que chaque couche située au-dessus du point tangent est prise en compte deux fois (d'un côté et de l'autre du point tangent) le long de la ligne de visée (voir Fig. 2.8).

En utilisant l'eq. 2.6, et le fait que :

$$\frac{d\tau_s^{tot}}{dz} = -2\sigma_\nu n(z) \frac{z}{\sqrt{z^2 - z_0^2}} \quad (2.22)$$

on en déduit que la fonction-poids tend vers l' ∞ lorsque $z = z_0$. **Quand l'opacité de la région visée est faible (donc à haute altitude), la fonction poids tend à être très piquée, mais étant donné la faible émissivité atmosphérique, il est parfois difficile d'obtenir un bon rapport signal-sur-bruit. En revanche, quand l'épaisseur optique atmosphérique augmente, la fonction poids s'élargit en tendant vers les largeurs de fonction poids d'une observation au nadir (du type fonction de Chapman). Généralement, le bon compromis est obtenu lorsque $\tau \sim 1$ au niveau du point tangent. A noter que les couches atmosphériques situées en-dessous du point tangent ne contribuent pas à l'émission thermique.**

Dans une observation au nadir, la pression atmosphérique et la densité des absorbants croissent le long de la ligne de visée jusqu'à atteindre la surface où les couches atmosphériques pour lesquelles la contribution locale à l'émission thermique devient négligeable. Dans la géométrie au limbe, la ligne de visée traverse l'atmosphère et l'espace constitue l'arrière plan. La pression croît le long de la ligne de visée jusqu'au niveau du point tangent et décroît au-delà, alors que le nombre de molécules interceptées par la ligne de visée continue d'augmenter. Dans la géométrie nadir, à une fréquence donnée, il n'y a pas d'information directe sur la dépendance des paramètres physiques avec l'altitude et l'épaisseur optique est déterminée par la densité de colonne des absorbants le long de la ligne de visée. Pour une observation au limbe, nous avons plus d'information, puisque pour les raies optiquement minces, le maximum de contribution à l'émission provient du point tangent.

En observant avec des lignes de visée à des altitudes différentes, il est possible de déduire des informations sur le profil de température ou sur la distribution verticale des constituants.

Un autre avantage des observations au limbe consiste en leur long parcours optique à travers l'atmosphère qui permet d'obtenir de l'information sur les constituants peu abondants présentant des émissions spectrales très faibles.

2.5 Dédution des paramètres physiques

Nous allons maintenant aborder comment, à partir des spectres d'émission thermique, il est possible de remonter à une information sur la température et sur l'abondance des constituants.

Le principe consiste en la mesure de l'intensité du spectre à des fréquences différentes afin de sonder des pressions différentes (puisque les maxima des fonctions de contributions sondent des niveaux différents).

2.5.1 La température

D'après l'équation 2.3, nous pouvons remarquer que si l'épaisseur optique $\tau_\nu(p) = \int_l kqn dl$ (où k est le coefficient d'absorption, q est l'abondance de la molécule, n la densité atmosphérique et l la longueur parcourue sur le chemin optique) est connue, c'est-à-dire que la distribution verticale de l'abondance d'une molécule est connue, il est possible de déduire $T(p)$ (inclue dans la fonction de Planck), car l'intensité est connue. Pour cela, on utilise un constituant uniformément mélangé dont l'abondance

est connue. Dans le cas de Titan, c'est le méthane. Un spectre au nadir ne donnera de l'information que dans la basse atmosphère et sonde une gamme d'altitude relativement large (de l'ordre d'une ou plusieurs échelles de hauteur). Tandis qu'un spectre au limbe correspondant à une fréquence optiquement mince aura une contribution très piquée autour de l'altitude de visée.

2.5.2 L'abondance des constituants

L'utilisation de plusieurs fréquences plus ou moins optiquement épaisses permet de déduire une information sur la distribution verticale de la température ou de l'abondance d'une molécule. Par exemple, l'intensité du centre de la branche Q est élevée comparée à l'intensité mesurée dans les branches P et R. Il en résulte que la branche P (ou R) sonde des niveaux plus bas que la branche Q. Là où la molécule ne présente pas d'émission, c'est le continuum qui est visible, et donc le niveau le plus bas sondé.

De plus, l'utilisation d'observations au limbe acquises à plusieurs altitudes permet de déduire plus simplement une information verticale sur les paramètres physiques comme on l'a vu ci-dessus. En utilisant un algorithme d'inversion qui combine les spectres au limbe et au nadir, il est possible de remonter à la distribution de la température entre 100 et 500 km en utilisant les spectres acquis par CIRS. Le principe de ce type d'inversion sera décrit dans la partie II.

Ces méthodes ont été appliquées aux observations de l'atmosphère de Titan réalisées par Voyager, et ont permis de déduire le profil de température dans la stratosphère et les profils d'abondance de plusieurs molécules. Nous allons maintenant présenter quelles étaient les connaissances sur la température atmosphérique et les abondances des molécules mineures avant la mission Cassini.

CHAPITRE 3

Les observations de l'atmosphère de Titan en infrarouge thermique

Sommaire

| | | |
|-----|---|----|
| 3.1 | Que voit-on sur ces spectres ? | 32 |
| 3.2 | Les résultats de l'analyse des spectres de Voyager/IRIS | 34 |
| 3.3 | L'instrument Cassini/CIRS | 35 |
| 3.4 | Les problématiques | 39 |

La mission Voyager a permis de faire un bond considérable dans la caractérisation de la chimie de l'atmosphère de Titan. L'instrument IRIS (InfraRed Interferometer Spectrometer), qui est le précurseur de l'instrument Cassini/CIRS (voir section 3.3) a enregistré pendant le premier survol de Titan, en 1980, des spectres émis en infrarouge thermique, entre 200 et 1500 cm^{-1} avec une résolution spectrale de 4.3 cm^{-1} . Plusieurs milliers de spectres nadir furent enregistrés sur toute la surface du satellite dont chacun couvrait une gamme en latitude de $\pm 20^\circ$ au maximum (Coustenis et Bézard 1995). Ces spectres ont été analysés par Coustenis et al. (1989) dans le but d'en déduire la composition chimique de la stratosphère dans la région équatoriale. Ces auteurs ont pu ainsi déterminer les abondances de l'acétylène (C_2H_2), l'éthylène (C_2H_4), l'éthane (C_2H_6), le méthylacétylène (C_3H_4), le propane (C_3H_8), le diacétylène (C_4H_2), le cyanure d'hydrogène (HCN), et le dioxyde de carbone (CO_2), ainsi que des limites supérieures du cyanoacétylène (HC_3N), et du cyanogène (C_2N_2). Afin d'étudier les variations latitudinales des abondances de ces molécules, Coustenis et Bézard (1995) ont étudié les spectres de IRIS enregistrés de 60°S à 70°N . La Fig. 3.1 (Coustenis et Bézard, 1995), qui montre trois spectres moyennés au nadir à 30°N , 50°N et 70°N , met très clairement en évidence le fait que l'émission de certaines molécules apparaît aux hautes latitudes nord, alors qu'elles ne sont pas détectées à 30°N .

Dans la phase d'approche de Titan, Voyager/IRIS a également acquis des données au limbe à $\sim 75^\circ\text{N}$ avec une résolution verticale de 200 km. A partir de ces données, Coustenis et al. (1991) ont pu déduire les distributions verticales de certaines des molécules citées ci-dessus. La Fig. 3.2 montre l'allure de trois spectres enregistrés avec des lignes de visée au limbe à 121, 232, et 269 km à 70°N .

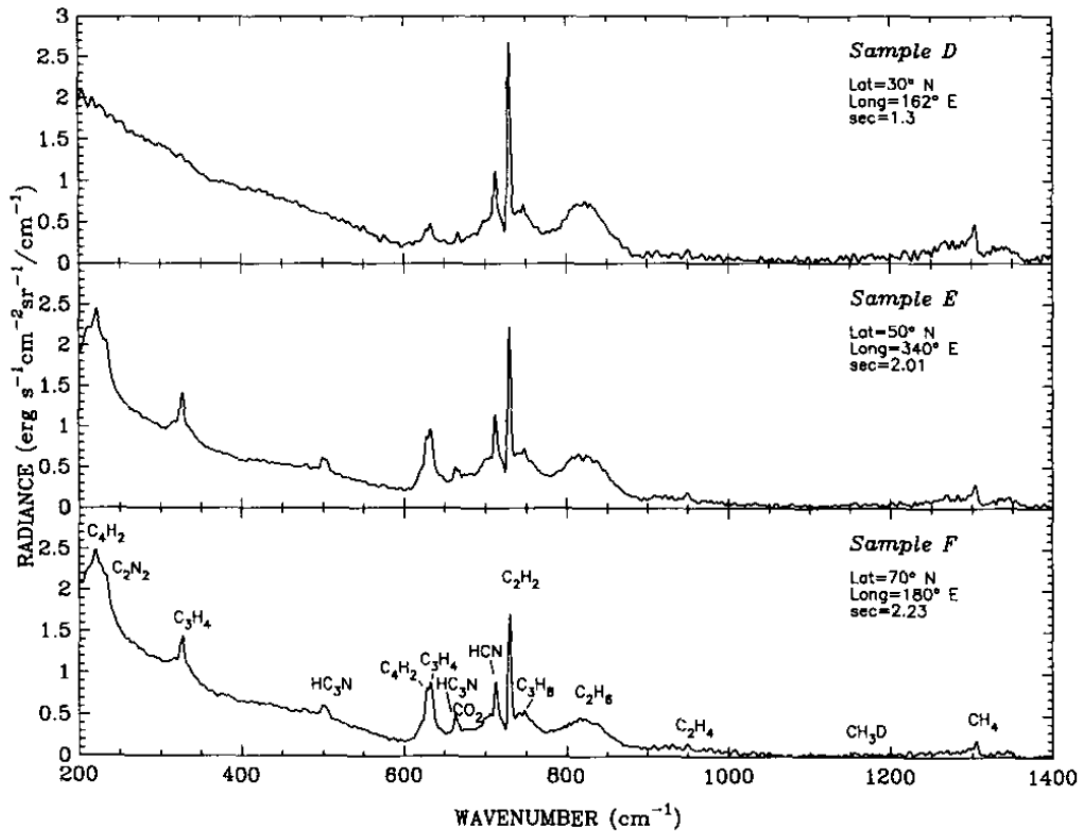


FIG. 3.1: Spectres au nadir acquis par Voyager/IRIS à 30° N, 50° N et 70° N avec une résolution spectrale de 4.3 cm^{-1} (Coustenis et Bézard 1995).

3.1 Que voit-on sur ces spectres ?

En comparant les spectres au nadir de la Fig. 3.1 et ceux au limbe de la Fig. 3.2, nous pouvons remarquer que la pente du continuum est différente en-deçà de 600 cm^{-1} . Ceci est causé par l'émission thermique provenant de la troposphère supérieure de Titan (à environ 70-75 K) dans le cas des spectres au nadir. A ce continuum, se superposent les absorptions induites par collisions (voir Section 2.3.1) ainsi que l'émission des aérosols stratosphériques. Au-delà de 600 cm^{-1} , le continuum est principalement formé par l'émission thermique des aérosols. Dans le cas des observations au limbe, le corps noir sur lequel se détachent les émissions moléculaires est celui de l'espace (à 2.73 K), l'intensité n'augmente donc pas vers les basses fréquences, contrairement au spectre nadir. Dans le cas des limbes, le continuum est principalement causé par l'émission des aérosols; pour les basses altitudes, des bandes d'absorption induites par collision peuvent apparaître en-deçà de 600 cm^{-1} .

Nous voyons également se dessiner de façon très nette de nombreuses bandes de vibration - rotation en émission sur le continuum. Toutes les bandes observées par CIRS (excepté les bandes d'absorption induites par collisions : $\text{N}_2\text{-N}_2$, $\text{N}_2\text{-H}_2$, $\text{N}_2\text{-CH}_4$, $\text{CH}_4\text{-CH}_4$) apparaissent en émission. En effet, celles-ci sont formées dans la stratosphère qui est une région chauffée principalement par l'absorption du rayonnement UV et visible du Soleil.

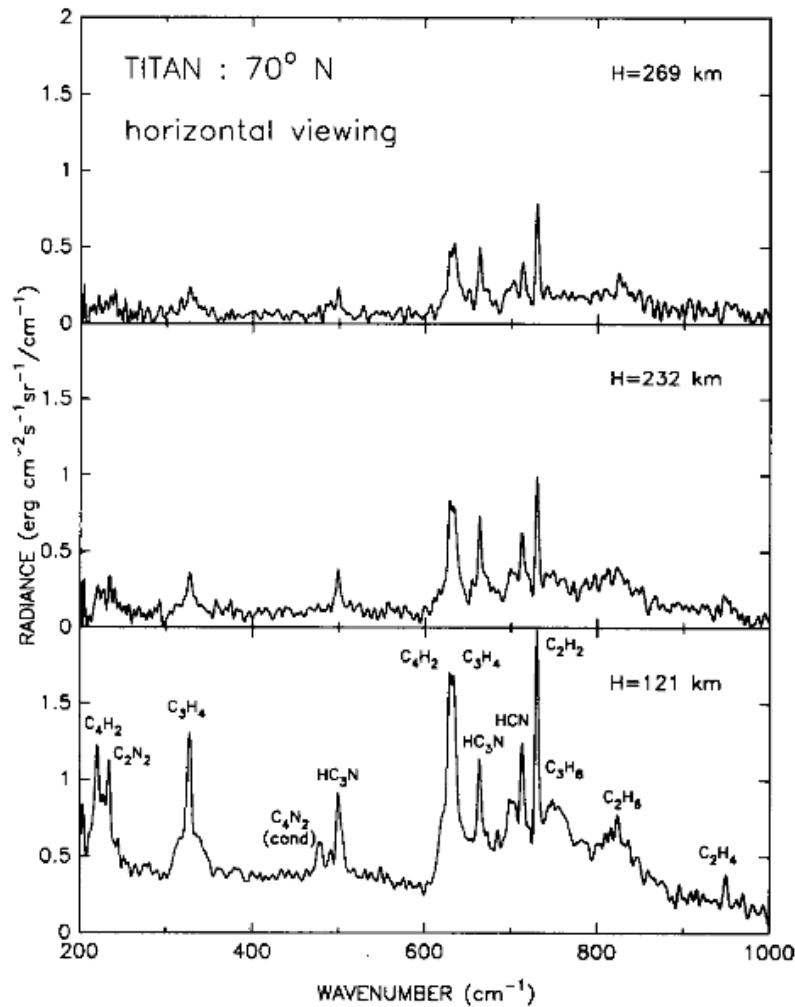


FIG. 3.2: Spectres au limbe enregistrés par IRIS à 70°N à 121, 232 et 269 km (Coustenis et al. 1991).

Je vais maintenant lister les bandes d'émission des molécules qui apparaîtront tout au long de ce manuscrit, et qui sont visibles sur les Figs. 3.1 et 3.2 au-delà de 600 cm^{-1} :

- méthylacétylène : $\text{CH}_3\text{C}_2\text{H}$, bande ν_9 (pliage liaison C-H), centrée à 633 cm^{-1}
- diacétylène : C_4H_2 , bande ν_8 (pliage liaison C-H), 630 cm^{-1}
- cyanoacétylène : HC_3N , bande ν_5 , branche Q centrée à 663 cm^{-1}
- cyanure d'hydrogène : HCN , branche Q de la ν_2 , centrée à 712 cm^{-1}
- acétylène : C_2H_2 , bande ν_5 (pliage de la liaison C-H, mode doublement dégénéré), branche Q centrée à 729 cm^{-1}
- propane : C_3H_8 , bande ν_{21} centrée à 748 cm^{-1}
- éthane : C_2H_6 , bande ν_9 (mode doublement dégénéré) centrée à 822 cm^{-1}
- éthylène : C_2H_4 , bande ν_7 (vibration liaison CH_2), centrée à 949 cm^{-1}
- le dioxyde de carbone : CO_2 , bande ν_2 à 667 cm^{-1}

Nous parlerons également du benzène (C_6H_6) qui n'avait pas été détecté par Voyager/IRIS du fait de la résolution spectrale (4.3 cm^{-1}) et de la sensibilité de l'instrument. Cette molécule présente sa bande ν_4 à 673 cm^{-1} .

3.2 Les résultats de l'analyse des spectres de Voyager/IRIS

Les données au limbe enregistrées par Voyager/IRIS à 70°N ont permis à Coustenis et al. (1991) de déduire pour la première fois les distributions verticales d'un certain nombre de molécules citées ci-dessus. Pour cela, les auteurs ont d'abord déterminé le profil de température entre 0.15 et 5 mbar (partie inférieure de la stratosphère) en utilisant la bande du méthane entre 1260 et 1460 cm^{-1} avec une abondance de CH_4 égale à 1.8 % dans la stratosphère (qui correspond à l'abondance au niveau du piège froid¹ où la température au niveau de condensation vaut 71.2 K). La Fig. 3.3 montre le profil de température obtenu par Coustenis et al. à 70°N (trait plein), comparé à celui de Coustenis et al. (1989) déduit de données nadir à l'équateur (tirets). Le profil à 70°N montre une forte diminution de la température à 0.2 mbar (~ 20 K), comparé à celui de l'équateur.

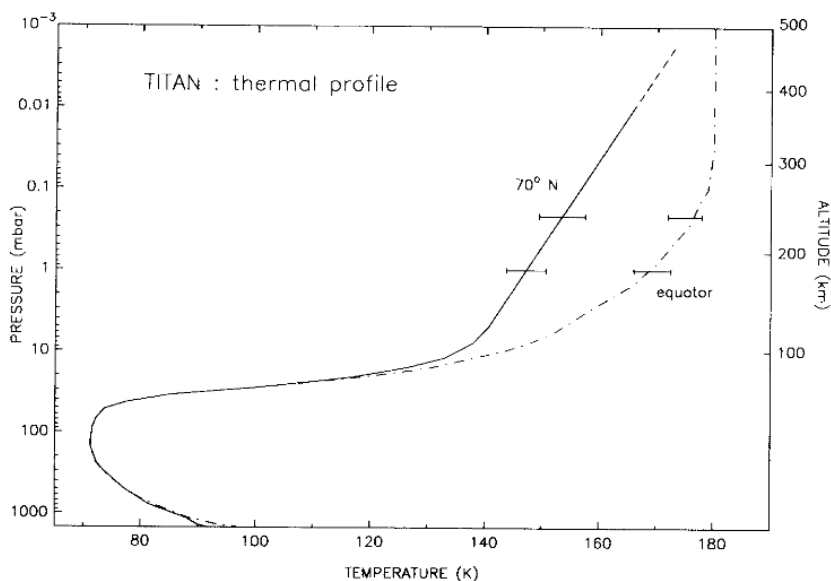


FIG. 3.3: Profil vertical de la température stratosphérique déduit des données Voyager/IRIS (Coustenis et Bézard 1991). Les barres d'erreurs sont déterminées aux niveaux 0.2 et 1 mbar. Le profil de température équatorial déduit des données Voyager/IRIS au nadir (Coustenis et al. 1989) est tracé en tiret pour comparaison. Le profil de température est contraint par la bande ν_4 du CH_4 entre 0.01 et 5 mbar.

Les données acquises au nadir par Voyager/IRIS à plusieurs latitudes ont permis à Coustenis et al. (1995) de déterminer les variations de la température pour plusieurs latitudes entre 60°S et 70°N. La Fig. 3.4 présente les valeurs des températures obtenues à 1 mbar (sondées par la branche P du méthane) et 0.4 mbar (sondées par la branche Q). La température est quasiment constante en latitude jusqu'à 20°N, au-delà, elle diminue fortement jusqu'à perdre une quinzaine de degrés à 70°N.

En utilisant ces profils de température, les auteurs ont déterminé pour la première fois les variations latitudinales de l'abondance de plusieurs molécules. Coustenis et al.

¹Le piège froid est situé au niveau de la tropopause, là où la température est la plus basse. Les molécules issues de la surface (comme le CH_4 de Titan ou l'eau sur Terre) et qui atteignent cette zone par transport convectif, se condensent sous l'effet des basses températures. L'abondance de ces molécules dans la stratosphère ne peut dépasser celle au niveau du piège froid.

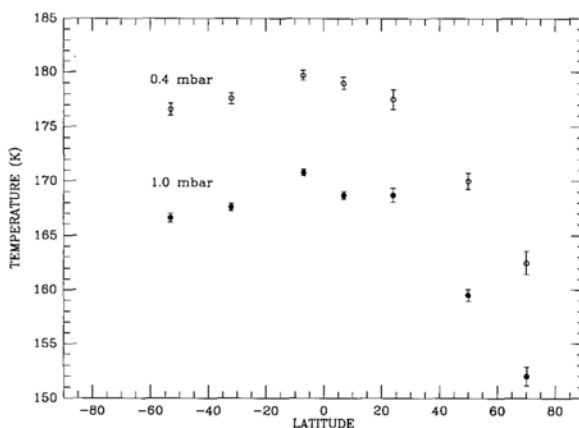


FIG. 3.4: Variation latitudinale de la température déduite des données Voyager/IRIS (Coustenis et Bézard 1995). Les températures sont données à 0.4 et 1 mbar.

(1991) ont également utilisé le profil de température déduit à 70°N pour contraindre, pour la première fois, les distributions verticales des abondances de C_2H_2 , C_2H_6 , C_3H_4 , C_4H_2 , C_2N_2 , HCN et HC_3N qui sont représentées sur la Fig. 3.5.

La Fig. 3.6 résume les résultats de Coustenis et al. (1995) concernant les variations latitudinales des abondances. Certaines molécules comme C_4H_2 , C_3H_4 , C_2H_4 , HCN, HC_3N ou C_2N_2 présentent un très fort enrichissement au-delà de 30°N. A l'époque, ces enrichissements n'étaient pas expliqués de façon satisfaisante car seuls des modèles photochimiques à une dimension (pas de variation en longitude et latitude) étaient disponibles pour interpréter les données. Ils ne pouvaient donc prédire les variations à haute latitude nord. Aujourd'hui, avec les modèles de circulation générale (e.g., celui du Laboratoire de Météorologie Dynamique, Lebonnois et al. 2001, Hourdin et al. 2004), nous savons que ces enrichissements sont principalement causés par la circulation atmosphérique de Titan (voir Section 1.3).

Avant la mission Cassini/Huygens, la plupart des profils verticaux (température stratosphérique et abondance de C_2H_2 , C_2H_4 , C_2H_6 , CH_3C_2H , C_3H_8 , C_4H_2 , HCN, HC_3N , C_2N_2) de Titan disponibles avaient été déduits des données de Voyager/IRIS à 70°N, entre 100 et 300 km avec une résolution verticale de 200 km. Des observations en millimétrique depuis le sol ont également permis de déduire les profils verticaux de HCN et HC_3N moyennés sur le disque (Hidayat et al. 1997, Marten et al. 2002 et Gurwell 2004). Les données du télescope spatial ISO ont également permis à Coustenis et al. (2003) de déduire des informations verticales sur les molécules C_2H_2 , HCN, C_2H_6 et CO_2 .

Mon travail de thèse a pour objet la détermination de nouveaux profils verticaux de température et d'abondance des molécules entre 100 et 500 km à partir des spectres infrarouges thermiques enregistrés entre 10 et 1400 cm^{-1} par l'instrument Cassini/CIRS.

3.3 L'instrument Cassini/CIRS

L'instrument Cassini/CIRS (Composite Infrared Spectrometer) est consacré à l'étude de l'émission thermique des objets du système de Saturne (anneaux, satte-

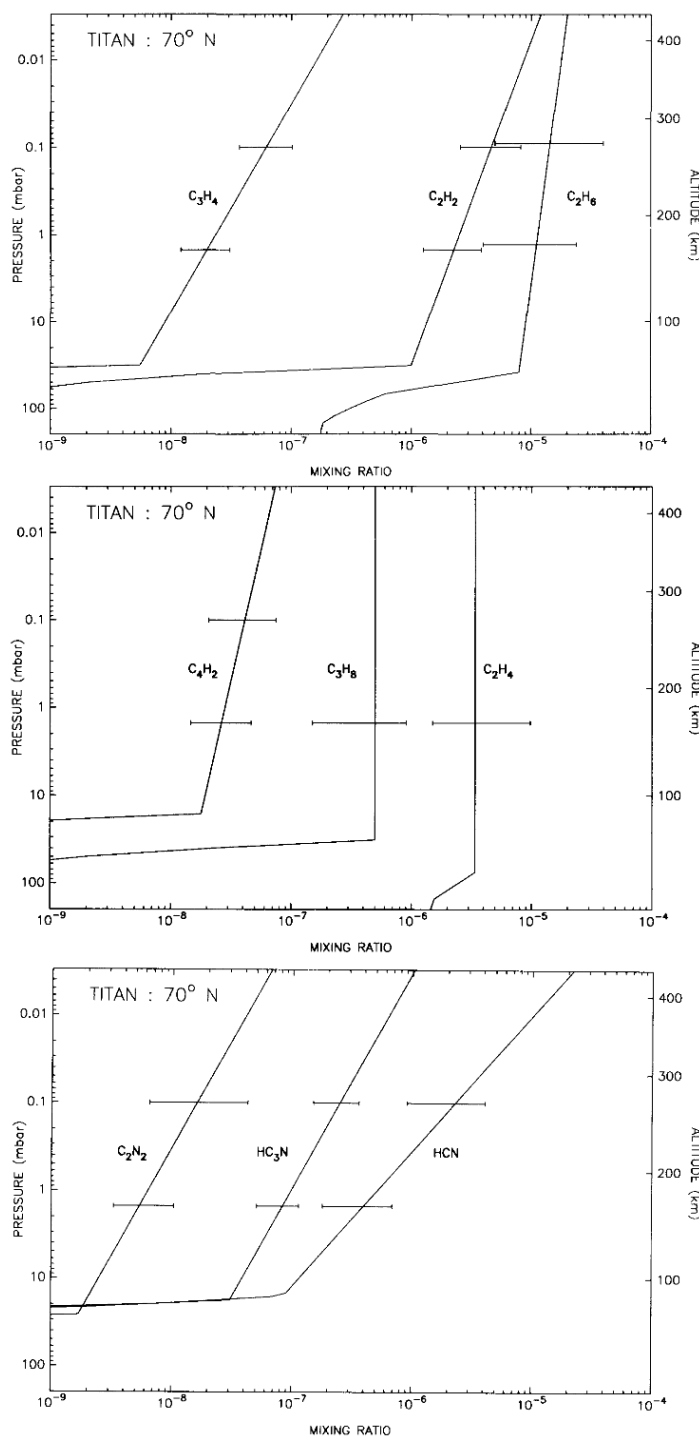


FIG. 3.5: Profils verticaux des abondances de C_2H_2 , C_2H_4 , C_2H_6 , C_3H_4 , C_3H_8 , C_4H_2 , HCN, HC_3N , C_2N_2 déduits des données au limbe de Voyager/IRIS à $70^\circ N$ (Coustenis et Bézard 1991). Sous leur niveau de condensation, les abondances des gaz sont supposées suivre leur loi de saturation respectives. Les barres d'erreur sont indiquées aux niveaux 1.5 et 0.1 mbar.

lites) ainsi que Saturne elle-même. Les températures de ces objets sont comprises entre 55 et 200 K, ils émettent donc en infrarouge moyen et lointain.

CIRS acquiert des spectres entre 10 et 1400 cm^{-1} (1 mm à $7\text{ }\mu\text{m}$) avec une résolution spectrale programmable entre 0.5 et 15.5 cm^{-1} (qui correspondent aux résolutions

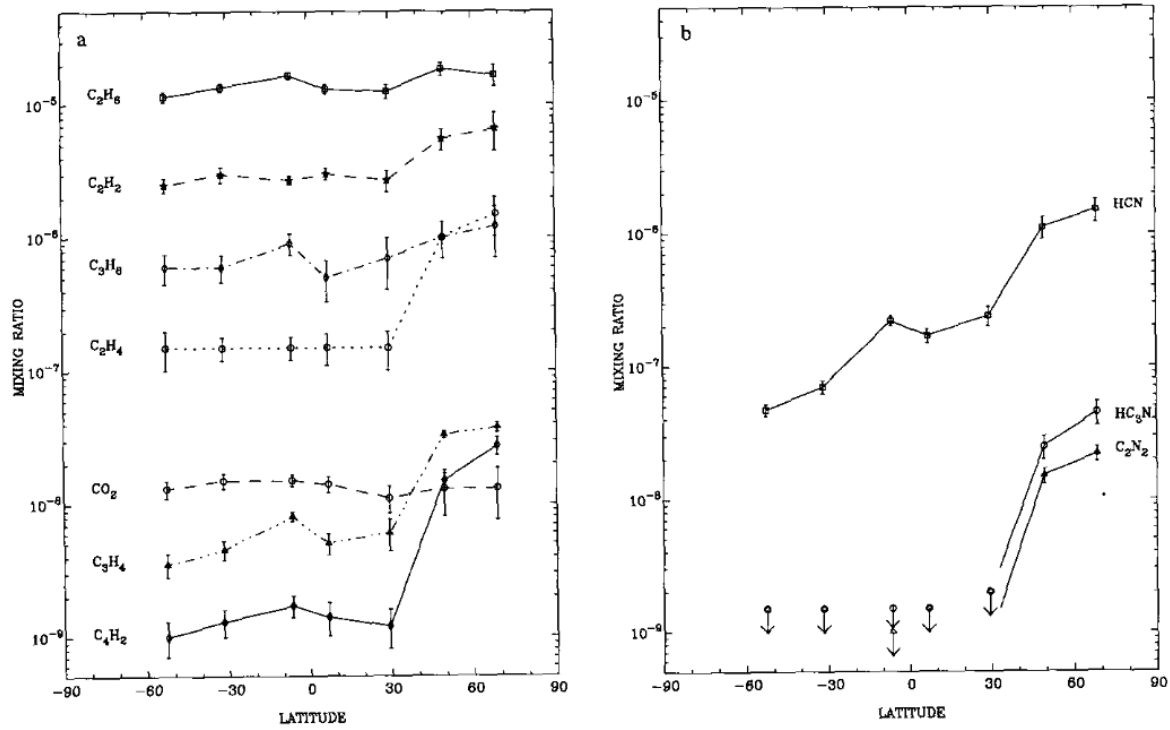


FIG. 3.6: Variation latitudinale de l'abondance des constituants de l'atmosphère de Titan déduits des données de Voyager/IRIS Coustenis et al. (1995). (a) Les hydrocarbures et CO₂. (b) Les nitriles. Les incertitudes à 1- σ sont données pour chaque abondance inversée ainsi que les limites supérieures à 3- σ (flèches) pour HC₃N et C₂N₂ aux latitudes < 50° N.

des spectres apodisés ²). C'est un spectromètre infrarouge à Transformée de Fourier composé de deux interféromètres qui partagent le même télescope.

Le premier, qui opère dans l'infrarouge lointain entre 10 - 600 cm⁻¹ (1 mm et 17 μ m), est un interféromètre à polarisation avec un plan focal qui consiste en 2 détecteurs

²Un interférogramme peut être enregistré uniquement entre $-\delta_{max}$ et $+\delta_{max}$ qui sont les amplitudes maximales de déplacement du miroir de l'interféromètre de Michelson. L'amplitude du spectre est obtenue par Transformée de Fourier de l'interférogramme :

$$I_\nu = r_\nu(I_\nu - B_\nu) = \int_{-\infty}^{+\infty} i(\delta)A(\delta)\cos 2\pi\nu\delta d\delta \quad (3.1)$$

où r_ν est la réponse de l'instrument, I_ν est la radiance de la planète et B_ν la fonction de Planck correspondant à la température de l'instrument. $i(\delta)$ est l'intensité de l'interférogramme pour le déplacement δ du miroir et $A(\delta)$ est une fonction "porte" qui vaut 1 lorsque $-\delta_{max} < \delta < +\delta_{max}$. Le spectre reconstruit n'est donc pas le spectre réel, mais une convolution du vrai spectre avec la TF de la fonction porte, qui est une fonction sinus cardinal. Cette fonction sinc correspond à la résolution spectrale la plus grande, mais elle possède des lobes secondaires de forte intensité. Les raies spectrales apparaissent donc avec des oscillations dues à ces lobes secondaires de part et d'autre du coeur de la raie. En appliquant une fonction différente de la fonction "porte", il est possible de réduire l'amplitude des lobes secondaires, c'est l'**apodisation**. La fonction appliquée aux interférogrammes de CIRS est la fonction de Hamming dont la TF présente des lobes secondaires extrêmement réduits. La contrepartie est que la résolution spectrale est deux fois moins bonne que celle d'un spectre non apodisé (sinc). L'équipe CIRS met à disposition des spectres apodisés et non apodisés. Au cours de ma thèse, je n'ai travaillé qu'avec des spectres apodisés.

thermopiles avec un champ de vue de 3.9 mrad. Ce plan focal est appelé FP1 (Focal Plane 1). La Fig. 3.7 schématise l'instrument. Le second interféromètre observe en infrarouge moyen, c'est un interféromètre de Michelson à deux plans focaux : le FP3 qui observe entre 600 et 1100 cm^{-1} ($17 \mu\text{m}$ - $9 \mu\text{m}$) et le FP4 qui observe l'intervalle 1100 - 1400 cm^{-1} ($9 \mu\text{m}$ - $7 \mu\text{m}$). Deux barrettes de 10 détecteurs HgCdTe (détecteurs au Tellurure de Mercure et Cadmium) constituant chacun un pixel d'un champ de vue de 0.273 mrad, sont disposés sur les deux plans focaux. La Fig. 3.8 donne la position relative des trois plans focaux projetée sur le ciel. Le plan focal 2 a disparu au cours du projet suite à des restrictions budgétaires.

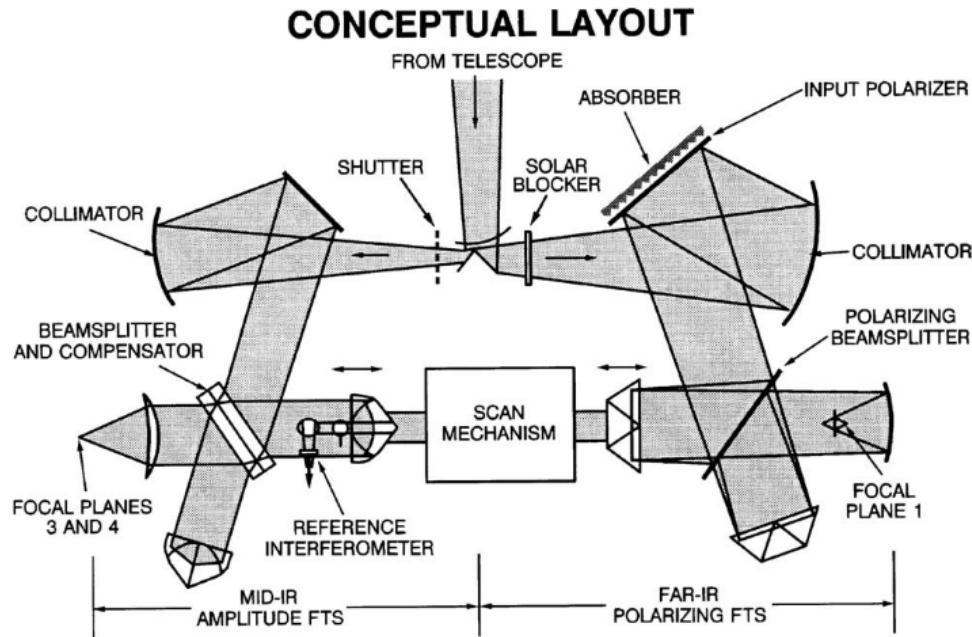


FIG. 3.7: Schéma de conception de l'instrument *Cassini/CIRS* (Flasar et al. 2004). Le faisceau en provenance du télescope est scindé en deux voies vers les spectromètres IR moyen et IR lointain.

L'ensemble optique comprend un télescope Cassegrain dont le miroir primaire parabolique mesure 50,8 cm de diamètre et le miroir secondaire hyperbolique 7,6 cm de diamètre. Le rayonnement infrarouge incident est distribué entre les voies infrarouges "moyen" et "lointain" par un miroir de champ. Les faisceaux sont focalisés vers les détecteurs à la sortie des interféromètres. Un interféromètre de référence permet de maintenir une vitesse constante du mécanisme de balayage et de contrôler l'échantillonnage des données.

L'ensemble optique est refroidi passivement et contrôlé pour être maintenu à $170 \pm 0,1$ K. Le détecteur du plan FP1 fonctionne à une température de 170 K. Les barrettes de 10 détecteurs fonctionnent à des températures programmables entre 75 K et 85 K. Les détecteurs de la barrette FP3 sont utilisés en mode photoconducteur, ceux de FP4 en mode photovoltaïque. Ceci permet entre autres de limiter son bruit et donc d'augmenter sa sensibilité.

CIRS présente plusieurs améliorations par rapport à Voyager/IRIS :

- Une couverture en infrarouge lointain plus grande que celle d'IRIS (qui ne pouvait observer entre 10 et 180 cm^{-1}). Cette nouvelle région spectrale permet de déduire

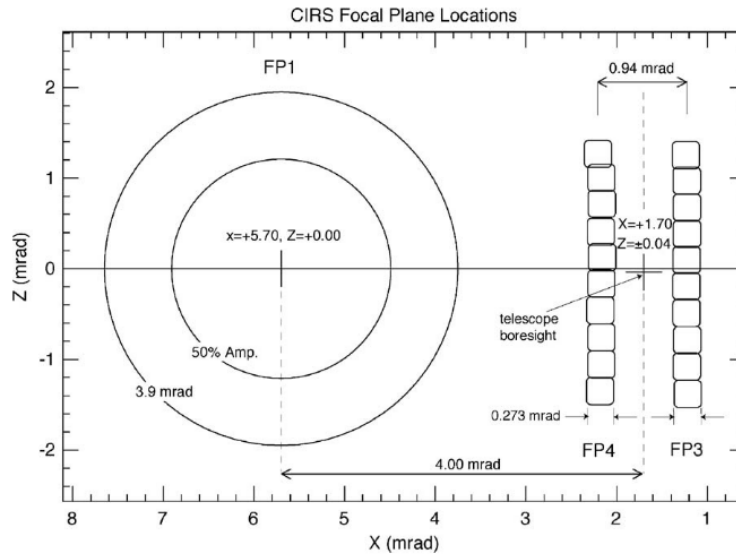


FIG. 3.8: *Plans focaux de CIRS projetés sur le ciel (Flasar et al. 2004). FP1 est le plan focal infrarouge lointain. FP3 et FP4 sont les plans focaux infrarouge moyen.*

la température dans la basse stratosphère et la haute troposphère de Saturne et Titan. Elle permet également d'étudier les anneaux.

- Meilleure résolution spectrale : la résolution maximale de CIRS est de 0.5 cm^{-1} (apodisée), comparée aux 4.3 cm^{-1} de résolution de IRIS. Ceci a pour but principal la détection de nouvelles molécules ainsi que les isotopes.
- Meilleure sensibilité dans la région $600 - 1400 \text{ cm}^{-1}$ grâce aux détecteurs HgCdTe refroidis passivement, au lieu d'un détecteur thermopile. Ces détecteurs ont un champ de vue plus petit ($0.27 \times 0.27 \text{ mrad}$) et permettent donc d'avoir une meilleure résolution spatiale de Titan à distance comparable.
- Observations au limbe : CIRS a été spécialement conçu pour les observations au limbe de Titan et Saturne grâce aux détecteurs des plans focaux FP3 et FP4, dont les champs de vue de $0.27 \times 0.27 \text{ mrad}$ permettent de sonder Titan et Saturne avec une résolution verticale de l'ordre d'une échelle de hauteur. De plus, le long parcours d'absorption combiné à l'absence de continuum induit par collisions augmente énormément la sensibilité aux constituants mineurs.

D'autre part, le fait que Cassini effectue des survols de Titan environ tous les mois, soit 44 survols entre 2004 et 2008, permet d'observer de nombreux points sur la surface de Titan. Il sera donc possible de déterminer des variations en latitude et longitude des profils de température et d'abondance des constituants de l'atmosphère de Titan. De plus, nous savons aujourd'hui que la mission sera étendue de façon certaine jusqu'en 2010, et peut-être même jusqu'en 2013, ce qui permettra d'étudier les variations temporelles de ces profils verticaux.

3.4 Les problématiques

Un des objectifs de la mission Cassini/Huygens est d'étudier Titan. Les objectifs sont les suivants :

- Déterminer les abondances des constituants atmosphériques (incluant les gaz

- rare), établir les rapports isotopiques des éléments abondants, contraindre les scénarios de formation et d'évolution de Titan et de son atmosphère.
- Observer les distributions verticales et horizontales des gaz minoritaires, recherche de nouvelles molécules organiques complexes, étudier les sources d'énergie de la chimie atmosphérique, modéliser la photochimie de la stratosphère, étudier la formation et la composition des aérosols.
 - Mesurer les vents et les températures globales; étudier la physique des nuages, la circulation atmosphérique générale, et les effets saisonniers dans l'atmosphère de Titan; détecter des éclairs.
 - Déterminer l'état physique, la topographie et la composition de la surface, déduire la structure interne du satellite.
 - Étudier la haute atmosphère, son ionisation, et son rôle en tant que source de composés neutres et ionisés pour Titan et pour la magnétosphère de Saturne.

Le travail de cette thèse porte sur le second point. L'objectif de mon travail est de déterminer, à partir des spectres enregistrés par CIRS, les profils verticaux d'abondance des molécules traces de l'atmosphère de Titan - C_2H_2 , C_2H_4 , C_2H_6 , CH_3C_2H , C_3H_8 , C_4H_2 , C_6H_6 , HCN , HC_3N et CO_2 - dans la stratosphère et la basse mésosphère. En utilisant plusieurs observations, j'ai pu mettre en évidence les variations latitudinales de ces profils verticaux en m'intéressant aux latitudes suivantes : $55^\circ S$, $15^\circ S$, $56^\circ N$, $80^\circ N$ et $83^\circ N$. Nous avons vu à la Section 2.5 qu'il était indispensable de connaître le profil de température pour déterminer les profils d'abondance des molécules. J'ai donc dans un premier temps inversé les profils thermiques à ces latitudes, ce travail sera détaillé dans la Partie II. Les inversions des profils d'abondance seront présentées dans la Partie III. Au cours de ma thèse, j'ai également travaillé sur la détermination des rapports isotopiques $^{13}C/^{12}C$ et $^{15}N/^{14}N$ dans le HCN , ainsi que D/H dans le C_2H_2 ; ces études seront présentées dans la partie IV.

Ces profils verticaux seront ensuite utilisés par les modélisateurs et sont très importants pour contraindre la dynamique atmosphérique ainsi que la chimie complexe qui se déroule dans l'atmosphère de Titan.

Deuxième partie

II. Inversion des profils de température

CHAPITRE 4

Algorithme d'inversion et observations

Sommaire

| | | |
|------------|---|-----------|
| 4.1 | Principe de l'inversion de la température | 43 |
| 4.2 | Algorithme d'inversion de la température | 47 |
| 4.2.1 | Description de l'algorithme | 47 |
| 4.2.2 | Modèle atmosphérique | 50 |
| 4.2.3 | Modèle spectroscopique | 51 |
| 4.3 | Généralités sur les observations utilisées | 52 |
| 4.3.1 | La sélection des spectres | 53 |

Nous avons vu dans la Partie I que la radiance émergente à un nombre d'onde donné contient la contribution de plusieurs niveaux de l'atmosphère. La contribution relative de chaque niveau est donnée par la fonction de contribution ($CF = B_\nu(T(z))WF(z, \nu)$). La région de contribution maximale est située environ au niveau où l'épaisseur optique est proche de 1. Nous allons voir en détail dans cette partie, comment à partir des spectres infrarouges thermiques il est possible de déduire le profil thermique de l'atmosphère de Titan. Dans la Section 4.1 nous allons décrire le principe d'inversion de la température, ensuite nous décrirons le modèle d'inversion dans la Section 4.2 et enfin, nous détaillerons dans les Sections 4.3 et 5, les résultats obtenus à 56°S, 13°S, 56°N, 82°N et 83°N.

4.1 Principe de l'inversion de la température

Nous avons vu dans la Partie I que l'intensité des bandes d'un spectre infrarouge thermique dépend à la fois de la température atmosphérique et de l'abondance des molécules actives dans la région spectrale considérée (Eq. 2.5). Pour une observation au nadir, nous avons :

$$I_\nu(\mu, 0) = B_\nu(T, \tau_1)e^{-\tau_1/\mu} + \int_0^\infty B_\nu(T(z))WF(z, \nu)dz \quad (4.1)$$

avec $WF(z, \mu) = -\frac{d}{dz}e^{-\tau/\mu} = -\frac{dTr_\nu}{dz}$ où Tr_ν est la transmission à la fréquence ν . $Tr = \exp(-\int_0^s kqn ds)$ où n est la densité atmosphérique totale, q l'abondance du constituant, s la position le long de la ligne de visée et k le coefficient d'absorption.

Le premier terme de droite correspond à l'émission thermique de la surface atténuée par l'atmosphère et le second correspond à l'émission de chaque couche, atténuée par les couches supérieures.

Il est préférable d'utiliser la pression ($z = -H \times \ln p$) au lieu de l'altitude car l'opacité est intrinsèquement liée à la densité et donc à la pression.

Pour une observation au limbe, l'Eq. 4.1 devient ¹ :

$$I_\nu = - \int_{-\infty}^{\ln(p_{tang})} B_\nu(T) WF(\ln p, \nu) d \ln p = - \int_{-\infty}^{\ln(p_{tan})} B_\nu(T) \frac{\partial}{\partial \ln p} \left[Tr - \frac{Tr^2(p_{tang})}{Tr} \right] d \ln p \quad (4.2)$$

où p_{tang} est la pression au point tangent. En infrarouge thermique moyen et lointain, $B_\nu(T)$ dépend fortement de la température. La transmission Tr_ν dépend principalement de la quantité d'absorbant le long de la ligne de visée et faiblement de la température.

Si la distribution avec l'altitude d'un composé absorbant est connue, le niveau où $\tau \sim 1$ le long de la ligne de visée (soit $\tau \sim \mu$ pour une observation au nadir) peut être identifié et la température à ce niveau peut être déterminée à partir de la mesure de l'intensité de la bande d'émission de l'absorbant. Il faut donc choisir une molécule dont l'abondance est déterminée indépendamment de la bande d'émission utilisée pour l'inversion de la température, soit à partir de mesures in situ, soit à partir d'une autre bande spectrale.

Dans le cas de l'atmosphère de Titan, la molécule utilisée est le méthane. L'abondance de cette molécule a été déterminée dans la stratosphère de deux manières : à partir des raies rotationnelles en infrarouge proche enregistrées par CIRS (Flasar et al., 2005), et in situ grâce aux données de l'instrument Huygens/GCMS à 10°S (Niemann et al., 2005). Les raies purement rotationnelles de CH_4 sont visibles sur le FP1,

¹Soit τ_{ptang} et $Tr(p_{tang}) = e^{-\tau_{ptang}}$ respectivement l'opacité et la transmission sur la ligne de visée au niveau du point tangent. L'intensité émise le long de la ligne de visée peut être écrite sous la forme :

$$\begin{aligned} I_\nu &= \int_0^{\tau_{ptang}} (B_\nu(T)e^{-\tau} + B_\nu(T)e^{-(2\tau_{ptang}-\tau)}) d\tau \\ &= \int_0^{\tau_{ptang}} (B_\nu(T)Tr + B_\nu(T)\frac{Tr(p_{tang})^2}{Tr}) d\tau \\ &= \int_0^{\tau_{ptang}} B_\nu(T)(-dTr) + B_\nu(T)d\left[\frac{Tr(p_{tang})^2}{Tr}\right] \\ &= - \int_0^{\tau_{ptang}} B_\nu(T)d\left[Tr - \frac{Tr(p_{tang})^2}{Tr}\right] \\ &= - \int_{-\infty}^{\ln(p_{tang})} B_\nu(T)\frac{\partial}{\partial \ln p}\left[Tr - \frac{Tr^2(p_{tang})}{Tr}\right] d \ln p \end{aligned}$$

elles sont formées dans la région 3-20 mbar (140-80 km), qui est située entre les deux régions où la température peut être mesurée par CIRS (entre 500 et 50 mbar et entre 5 et 0.5 mbar). En interpolant la température entre ces deux régions, il est possible de contraindre l'abondance du méthane. Flasar et al. (2005) obtiennent ainsi une fraction molaire de CH_4 valant $(1.6 \pm 0.5) \times 10^{-2}$. D'autre part, l'instrument GCMS a permis de mesurer in situ à 10°S la distribution de CH_4 de 140 km jusqu'à la surface. Niemann et al. (2005) obtiennent une fraction molaire constante dans la stratosphère égale à 1.41×10^{-2} avec une erreur inférieure à 5 %, ce qui est en accord avec la valeur déduite par Flasar et al. (2005).

Au début de ma thèse, j'ai utilisé la valeur d'abondance de CH_4 déduite des spectres de CIRS (1.6 %), par la suite, nous avons choisi d'utiliser la valeur de la mesure réalisée in situ (1.41 %) du fait de sa meilleure précision. Dans toute la suite du manuscrit, c'est cette dernière valeur qui est utilisée dans la détermination des profils de température.

Etant donné que l'abondance de CH_4 est connue dans la stratosphère, indépendamment de la connaissance du profil de température dans cette région, c'est une bande d'émission de cette molécule qui nous permet de déterminer la température. **La bande utilisée est la ν_4 dont la branche Q est centrée à 1305 cm^{-1} (bande de vibration-rotation)**. La branche Q de cette bande est optiquement épaisse en visée au nadir (à la résolution de CIRS, le niveau $\tau \sim 1$ est atteint vers 0.5 mbar), et sous le niveau ~ 0.1 mbar en visée au limbe (voir Section 5.1.3), elle est alors peu sensible à la variation d'abondance de CH_4 . En revanche, elle est sensible aux variations de température car elle se situe dans l'aile de la fonction de Planck. Les raies rotationnelles de CH_4 (situées dans le FP1, en millimétrique), quant à elles, présentent une faible intensité comparé à la ν_4 , car elle correspondent à des transitions interdites. En effet, le méthane "au repos" est de forme tétraédrique régulière, il ne possède pas de moment dipolaire permanent et ne devrait donc pas présenter d'émission en infrarouge. Or le mode de vibration fondamental ν_4 brise la symétrie et il se crée alors un moment dipolaire qui peut interagir avec le rayonnement. Dans le cas des rotations, la force centrifuge déforme la molécule et induit un faible moment dipolaire ; c'est grâce à cet effet que les raies purement rotationnelles sont visibles. Les raies rotationnelles de CH_4 , qui sont moins intenses que la ν_4 , sont optiquement minces dans la stratosphère, et donc plus sensibles aux variations de l'abondance du méthane que ne l'est la ν_4 . Ces raies rotationnelles ont été utilisées par Flasar et al. (2005) pour déterminer l'abondance de CH_4 qu'ils trouvent égale à 1.6 %. La ν_4 de CH_4 a été utilisée par Coustenis et al. (1989, 1991) et Coustenis et Bézard (1995) pour déterminer la température à partir des spectres enregistrés par Voyager/IRIS. Nous utilisons également cette bande d'émission pour déterminer la température à partir des spectres acquis par CIRS.

La Fig. 4.1 représente un spectre enregistré avec une visée nadir par le FP4 de CIRS, sur lequel se dessinent très nettement la bande ν_4 de CH_4 entre 1200 et 1400 cm^{-1} avec la branche Q à 1305 cm^{-1} et l'émission de l'isotope CH_3D à 1155 cm^{-1} .

De façon générale, il est possible d'utiliser deux approches différentes pour inverser un paramètre physique :

- **Modélisation directe** : un modèle atmosphérique est utilisé avec l'équation de

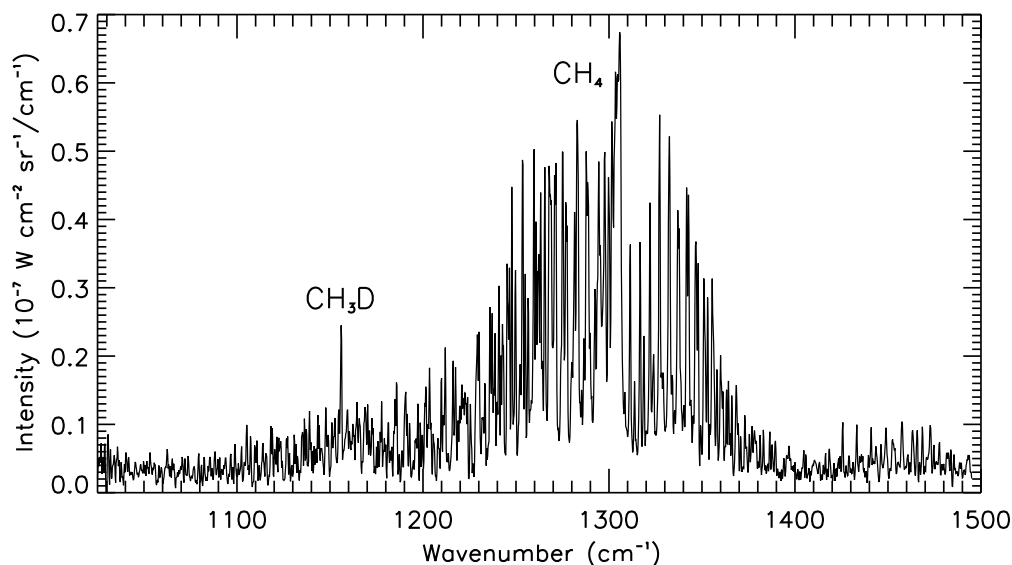


FIG. 4.1: Exemple de spectre enregistré par le FP4.

transfert radiatif afin de calculer les intensités spectrales qui seront directement comparées aux intensités observées. La Fig. 4.2 (a) schématise cette méthode. Les paramètres du modèle sont ajustés (dans notre cas, c'est principalement le profil de température) et les calculs répétés jusqu'à obtenir une bonne modélisation des données. Ici, de façon simplifiée, les modèles 1, 2, ... n correspondent à des profils thermiques 1, 2, ... n différents. L'avantage de cette méthode est sa simplicité, cependant elle peut rapidement devenir fastidieuse lorsque l'on utilise simultanément plusieurs spectres sondant des altitudes différentes et fournissant donc une information verticale détaillée.

- **Inversion** : cette méthode utilise un algorithme qui permet d'inverser les paramètres à partir de l'intensité mesurée. Un profil de température a priori est donné en entrée de l'inversion. L'algorithme résoud l'équation de transfert de rayonnement en tenant compte des paramètres physiques de l'atmosphère de Titan et calcule un spectre qui est comparé au spectre observé. Une minimisation au sens des moindres carrés de la distance entre le spectre calculé et observé entraîne un ajustement du profil de température initial (plus ou moins important suivant les contraintes appliquées). Ce nouveau profil thermique obtenu en sortie sert comme profil d'entrée d'une nouvelle itération. Le processus est répété jusqu'à minimisation complète du χ^2 , le profil thermique a alors convergé vers le profil solution.

Dans notre étude, nous utilisons plusieurs spectres simultanément : un spectre au nadir (sondant la basse stratosphère) et plusieurs spectres au limbe sondant chacun une altitude différente dans la stratosphère et la mésosphère afin de remonter à la température à ces différents niveaux. La méthode directe est alors relativement difficile à mettre en place car il faut reproduire le mieux possible tous les spectres simultanément (jusqu'à une dizaine) en modifiant le profil de température d'entrée "à la main". La méthode d'inversion est alors bien mieux adaptée car elle tient compte

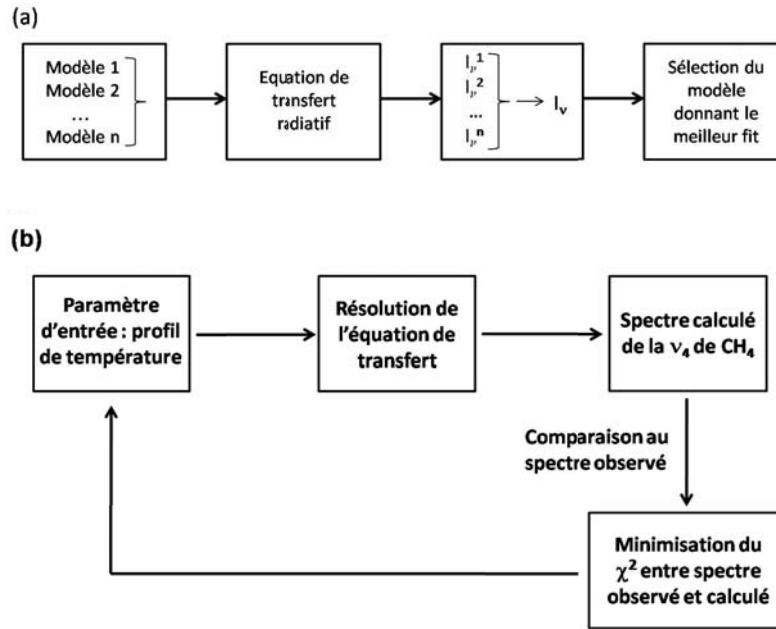


FIG. 4.2: (a) Schématisation de la méthode directe. Les modèles 1, 2, ... n correspondent à des profils thermiques 1, 2, ... n différents. Un algorithme qui tient compte des paramètres physiques de l'observation et de l'atmosphère de Titan permet de calculer les intensités en sortie de l'atmosphère. Le spectre calculé le plus proche des données observées correspond à un profil de température solution. (b) Schématisation de la méthode d'inversion. Un profil de température a priori est donné en entrée de l'inversion. L'algorithme qui résout l'équation de transfert radiatif calcule un spectre qui est comparé au spectre observé. Une minimisation au sens des moindres carrés de la distance entre les spectres calculés et observés permet d'obtenir en sortie un nouveau profil de température. Ce profil de température sert comme profil en entrée d'une nouvelle itération. Le processus est répété jusqu'à minimisation du χ^2 .

automatiquement de la contribution de tous les spectres qui permettent de contraindre le profil de température sur plusieurs niveaux.

L'inversion de la température à partir de la radiance est un problème "mal posé", c'est-à-dire que d'une part, la température ne peut être déduite directement de l'équation de transfert qui est non linéaire, et que d'autre part, de légères modifications des données entraînent de fortes modifications de la solution. C'est-à-dire que dans notre cas, le bruit spectral, qui est totalement décorrélé d'une fréquence à une autre et d'un spectre à l'autre, génère des oscillations sur le profil de température solution si des contraintes ne sont pas appliquées (lissage vertical du profil thermique solution et possibilité de s'éloigner plus ou moins du profil initial).

Nous allons voir dans la Section suivante en quoi consiste l'algorithme d'inversion.

4.2 Algorithme d'inversion de la température

4.2.1 Description de l'algorithme

La méthode d'inversion que nous utilisons est une inversion linéaire contrainte (constrained linear inversion). Dans un premier temps, nous allons en détailler les prin-

cipes, puis nous verrons plus précisément en quoi consiste le modèle atmosphérique que nous utilisons pour calculer les spectres synthétiques qui modélisent les données.

Les équations de base sont les équations 4.1 et 4.2. L'intensité $I_\nu(\mu, 0)$ est calculée par intégration numérique de l'équation de transfert. L'atmosphère est découpée en N couches d'égale épaisseur en $\ln(p)$ entre les pressions p_{max} et p_{min} (à la surface et en haut de l'atmosphère respectivement), où la température est supposée constante dans chaque couche. Le profil de température est donc défini sur N niveaux atmosphériques. En supposant que la transmission au niveau p_{max} est égale à 1, la radiance (eq. 4.2) se réécrit :

$$I_{\nu_i} = \sum_{j=1}^N B(\nu_i, T(z_j)) \Delta Tr(j) \quad (4.3)$$

où $\Delta Tr(j)$ est le changement de la transmission Tr le long de la couche j . Pour inverser un profil de température, l'équation 4.3 est linéarisée ² en tenant compte d'un profil initial de température $T_0(z)$:

$$\Delta I_i = \sum_{j=1}^N \frac{\partial I_i}{\partial T_j} \Delta T_j \quad (4.4)$$

où $\partial I_i / \partial T_j$ est la valeur de la fonction dérivée de l'intensité à la fréquence ν_i par rapport à la température T dans la couche j . Les perturbations appliquées au profil de référence sont données par :

$$\Delta T_j = T(z_j) - T_0(z_j) \quad (4.5)$$

$$\Delta I_i = I(\nu_i) - I_0(\nu_i) \quad (4.6)$$

avec $I_0(\nu_i)$ la radiance calculée avec $T_0(z_j)$. ΔI_i représente la différence entre le spectre observé et le spectre calculé pour le nombre d'onde i . Les solutions $T(z)$ de l'eq. 4.4, pour des mesures $I(\nu_i)$, sont celles d'un problème mal posé. De légères modifications de $I(\nu_i)$ (causées par le bruit) peuvent se traduire par des modifications importantes du profil $T(z)$.

En définissant la matrice K_{ij} , appelée *kernel* (ou noyau en français) :

$$K_{ij} = \frac{\Delta I_i}{\Delta T_j} = \frac{\partial B(\nu_i, T(z_j))}{\partial T_j} \Delta Tr(\nu_i, z_j) \quad (4.7)$$

2

$$\begin{aligned} I(\nu_i) &= \sum_{j=1}^N B(\nu_i, T_0(z_j) + \Delta T_j) \Delta Tr(j) \\ &= \sum_{j=1}^N [B(\nu_i, T_0(z_j)) + \frac{\partial B(\nu_i, T)}{\partial T} \Delta T_j] \Delta Tr(j) \\ &= I_0(\nu_i) + \sum_{j=1}^N \frac{\partial B(\nu_i, T)}{\partial T} \Delta Tr(j) \Delta T_j \\ I(\nu_i) - I_0(\nu_i) = \Delta I &= \sum_{j=1}^N \frac{\partial I(\nu_i)}{\partial T} \Delta T_j \end{aligned}$$

où $B(\nu_i, T(z_j))$ est la valeur de la fonction de Planck à la fréquence ν_i et la température $T(z_j)$ de la couche j , et $Tr(\nu_i, z_j)$ est la transmission de la couche j à la fréquence ν_i . L'équation 4.4 se réécrit :

$$\Delta I = K \Delta T \quad (4.8)$$

Le profil $T(z)$ est obtenu par l'algorithme en minimisant la différence quadratique (χ^2) entre l'intensité mesurée et l'intensité calculée (ΔI). Une contrainte est appliquée sur le profil $T(z)$, afin qu'il s'éloigne peu du profil initial T_0 . La méthode d'inversion linéaire contrainte admet alors pour solution (voir Conrath et al. 1998) :

$$\Delta T = \alpha S K^T C^{-1} \Delta I \quad (4.9)$$

avec

$$C = \alpha K S K^T + E \quad (4.10)$$

la matrice $S_{ij} = \exp[-(z_i - z_j)^2 / 2L^2]$ est une matrice gaussienne de corrélation où L est la longueur de corrélation, exprimée en échelles de hauteur. Cette matrice permet de filtrer la solution $T(z)$ verticalement, c'est-à-dire que la température $T(z_j)$ inversée dans chaque couche j est corrélée avec les températures des couches supérieures et inférieures sur une hauteur qui vaut L échelles de hauteur. E est la matrice des erreurs de mesure, c'est une matrice carré $n \times n$ (où n est le nombre de points du spectre). En supposant que les mesures d'erreur sont décorréliées d'un point à un autre du spectre, E peut être prise comme diagonale avec E_{ii} égal au carré de la radiance équivalente au bruit (NESR, Noise Equivalent Spectral Radiance³) pour la fréquence ν_i . Le paramètre α est un scalaire qui contrôle l'écart entre le profil de température solution et le profil initial $T_0(z)$. Plus ce paramètre est petit, et moins la solution est autorisée à s'écarter de $T_0(z)$. La valeur du paramètre α est choisie de telle sorte que les traces de chacune des matrices sommées dans l'Eq. 4.10 soient similaires.

Les barres d'erreur liées au bruit sont données par l'équation suivante :

$$\sigma_{T_j} = \sqrt{\sum_i (R_{ij})^2 E_{ii}} \quad (4.11)$$

où $R_{ij} = S K^T C^{-1}$.

Les spectres à analyser sont souvent des moyennes de plusieurs spectres, dans ce cas, le NESR effectif est le NESR d'un spectre individuel, divisé par la racine carré du nombre de spectres moyennés.

Comme l'équation de transfert radiatif est non linéaire, le processus de calcul de $T(z)$ est répété plusieurs fois avec en entrée de chaque itération, la nouvelle valeur de $T(z)$ comme profil initial, jusqu'à ce que le processus atteigne une bonne convergence. Nous déduisons que la solution a convergé en vérifiant que l'écart-type rms⁴ entre

³Le NESR est estimé par acquisition de plusieurs spectres de l'espace (émission de corps noir à 2.73 K) et des spectres de l'obturateur de CIRS (corps noir à 170 K), Nixon et al. (2007a) décrivent en détail la façon dont est estimé le NESR.

⁴

$$rms = \sqrt{\frac{\sum (I_{obs} - I_{calc})^2}{N}} \quad (4.12)$$

où I_{obs} est l'intensité spectrale observée, I_{calc} l'intensité calculée et N le nombre de points spectraux.

les spectres observés et modélisés ne varie plus d'une itération à une autre. Dans la pratique, trois itérations suffisent.

Le point important de l'inversion est le calcul du kernel K (Eq. 4.7) :

$$K_{ij} = \frac{\Delta I_i}{\Delta T(z_j)} = \frac{\partial B(\nu_i, T(z_j))}{\partial T_j} \Delta Tr(\nu_i, z_j) \quad (4.13)$$

Les kernels sont recalculés à chaque itération avec le nouveau profil de température. La matrice K est une sorte de fonction de contribution (introduite dans la Partie I, Section 2.2), si ce n'est qu'elle tient compte de la dérivée de la fonction de Planck par rapport à la température, au lieu de la fonction de Planck elle-même.

L'algorithme d'inversion, écrit par Bruno Bézard en Fortran 77, peut inverser simultanément un spectre au nadir et plusieurs spectres au limbe afin d'apporter une contrainte forte sur le profil thermique à plusieurs altitudes. Il peut prendre en compte jusqu'à 11 spectres moyennés. Enfin, nous appliquons un lissage vertical au profil de température qui vaut une échelle de hauteur, ce qui correspond environ à la résolution verticale des observations au limbe. On ne peut appliquer un lissage plus faible, car cela reviendrait à dire que les points de température sont indépendants sur une hauteur qui est plus faible que la résolution des observations.

Le calcul de la matrice K fait intervenir un modèle atmosphérique de Titan (voir Section 4.2.2) avec un profil de température initial qui permet de calculer $B(\nu_i, z_j)$ dans chaque couche. Il fait également intervenir la transmission qui varie d'une molécule à l'autre et qui dépend de la fréquence. La transmission dépend des coefficients d'absorption des absorbants calculés à partir des fichiers spectroscopiques issus des bases de données comme GEISA ou HITRAN (voir plus loin), et dépend également des abondances de chaque absorbant (rentrées dans le modèle atmosphérique). Pour calculer les spectres, le code a donc également besoin d'un modèle spectroscopique des raies (voir Section 4.2.3). Enfin, les spectres synthétiques doivent tenir compte de la fonction d'appareil⁵ de CIRS pour pouvoir être comparés aux données.

4.2.2 Modèle atmosphérique

L'algorithme peut prendre en compte jusqu'à 96 niveaux, pour nos inversions, nous divisons l'atmosphère en 71 niveaux de 1457 mbar (0 km) à 0.1 μ bar, correspondant à 70 couches d'égale épaisseur en $\ln(p)$ (où p est la pression). Jusqu'à 16 molécules peuvent être incluses dans le modèle. Dans la pratique, en plus de la distribution verticale en abondance de CH_4 , il nous faut inclure celles de CH_3D et C_2H_2 car ces deux composés possèdent des bandes d'émission qui se superposent à la bande ν_4 . Le modèle tient également compte de l'abondance de N_2 et H_2 qui affectent la masse moléculaire et donc l'échelle de hauteur. Un profil de température initial est donné en entrée de l'algorithme. Les abondances de chaque molécule et la température sont interpolées pour chaque couche atmosphérique. Afin que l'algorithme calcule des spectres qui puissent être

⁵La fonction d'appareil correspond à une réponse impulsionnelle globale du spectromètre. Cette fonction relie le spectre de la source étudiée à la courbe représentant les variations de flux en sortie de l'instrument. Dans notre cas, lorsque nous utilisons des spectres observés apodisés, nous appliquons la transformée de Fourier de la fonction de Hamming.

comparés aux observations, il faut rentrer les altitudes de chaque spectre observé au limbe, ainsi que la masse d'air ($1/\mu$) quand un spectre au nadir est utilisé.

4.2.3 Modèle spectroscopique

Pour inverser la température, nous utilisons la gamme spectrale 1215 - 1308 cm^{-1} qui inclue une bonne partie de la branche P et la branche Q de la ν_4 de CH_4 . Nous n'utilisons pas la branche R car l'information est redondante avec celle de la branche P. En effet, les branches P et R sont quasiment symétriques de part et d'autre de la branche Q, leurs intensités sont donc équivalentes et elles sondent des niveaux comparables. D'autre part, plus la gamme spectrale à inverser est grande et plus le temps de calcul est élevé. L'intervalle spectral que nous avons choisi constitue un bon compromis.

Les spectres synthétiques sont calculés aux altitudes et masses d'air des spectres observés à partir d'un code de transfert radiatif raie par raie. A partir des fichiers spectroscopiques de chaque molécule (qui donne les positions, niveaux d'énergie, demi-largeurs collisionnelles et intensités des raies à 296 K), issus de la base de données GEISA 2003 (Jacquinet-Husson et al. 2005), ce code détermine l'intensité et l'élargissement de chaque raie spectrale dans chaque couche du modèle. L'épaisseur optique de chaque couche est calculée avec un pas constant inférieur ou égal aux demi-largeurs des raies en tenant compte de toutes les raies présentes à $\pm 35 \text{ cm}^{-1}$ de la fréquence en utilisant un profil de Voigt.

L'opacité de continuum des spectres doit également être incorporée. Ce code prend en compte les bandes d'absorption induites par collisions de $\text{N}_2\text{-N}_2$, $\text{N}_2\text{-CH}_4$, $\text{N}_2\text{-H}_2$ et $\text{CH}_4\text{-CH}_4$ (voir Partie I, Section 2.3.1). Les coefficients d'absorption ont été calculés à partir de routines fournies par A. Borysow (<http://www.astro.ku.dk/~aborysow/programs/>) basés sur les travaux de Borysow et Frommhold (1886a, 1986b, 1987) et Borysow et Tang (1993). Il faut de plus, tenir compte de l'opacité des aérosols qui est à l'origine de l'émission du continuum au-delà de 600 cm^{-1} et qui est plus marquée sur les limbes. En nous basant sur les résultats de l'instrument Huygens/DISR (Descent Imager/Spectral Radiometer, Tomasko et al. 2005), l'épaisseur optique des aérosols est supposée décroître lentement avec l'altitude en variant comme $p^{0.1}$, jusqu'au niveau 1 mbar. Au-dessus de ce niveau, l'opacité des aérosols décroît avec l'altitude suivant l'échelle de hauteur de pression atmosphérique. L'opacité du continuum est ajustée en comparant le continuum entre les multiplets de la ν_4 de CH_4 des spectres calculés avec les spectres observés. Ces spectres synthétiques sont calculés par la méthode directe (voir Fig. 4.2, (a)). L'opacité des aérosols correspondant à une bonne modélisation du continuum est ensuite incorporée dans le modèle atmosphérique pour effectuer l'inversion du profil de température. Nous supposons que l'opacité des aérosols varie peu dans la gamme spectrale utilisée pour l'inversion. Notre modèle de variation spectrale des aérosols est donné dans la Table 4.1. Une fois sommées toutes ces opacités, la radiance monochromatique émise est calculée par l'équation de transfert (4.1) ou (4.2), puis convoluée avec la fonction d'appareil. Dans notre cas, comme nous utilisons les spectres apodisés, cette fonction de convolution est la fonction de Hamming (voir Section 3.3, note de bas de page 2). La matrice E est déterminée à partir d'un fichier donnant la valeur de l'intensité du bruit (NESR) pour chaque

| nombres d'onde (cm^{-1}) | opacité relative |
|--|---------------------|
| 10 | 0.0001 |
| 300 | 0.003 |
| 600 | 0.007 |
| 1200 | 0.03 |
| 1600 | 0.07 |

TAB. 4.1: Modèle de variation spectrale de l'opacité des aérosols de Titan entre 10 et 1600 cm^{-1}

nombre d'onde fourni par l'équipe CIRS.

Dans la Section suivante nous décrirons comment nous sélectionnons les spectres qui serviront à l'inversion des profils de température.

4.3 Généralités sur les observations utilisées

Etant donné la résolution des plans focaux, le pointage est différent pour une observation en infrarouge lointain (FP1) ou en infrarouge moyen (FP3 et FP4), et les différents besoins scientifiques de la mission contraignent la résolution spectrale requise. De plus les contraintes temporelles et les performances de la sonde Cassini ont amené l'équipe CIRS à sélectionner un certain nombre de type d'observations qui ont chacun un objectif bien défini. Les plans focaux sont alors orientés différemment suivant les cas. Flasar et al. (2004) liste les diverses projections des plan focaux sur le disque de Titan.

Pour les inversions de la température dans la stratosphère, nous utilisons les séquences d'observations à long temps d'intégration dénommées "Mid-Infrared Limb Composition Integration" ("MIRLMBINT"). Ces observations permettent d'inverser la température et les abondances des composés chimiques à une même latitude car les spectres sont enregistrés simultanément par les deux plans focaux FP3 et FP4. Au cours d'une de ces séquences, la sonde, située entre 100 000 et 180 000 km de Titan (soit entre 8 et 6 h avant ou après le point d'approche le plus proche, voir Flasar et al. 2004), permet d'avoir une résolution verticale sur l'atmosphère de Titan de l'ordre d'une échelle de hauteur. Les séquences d'observations ont lieu à une latitude bien précise. Le temps d'intégration de ces spectres est le plus long programmable (~ 1 min par spectre), ce qui permet d'obtenir la meilleure résolution spectrale (0.5 cm^{-1}). Les plans focaux sont positionnés perpendiculairement à la surface de façon à ce que chaque pixel du FP3 et du FP4 sonde une altitude particulière de l'atmosphère de Titan (voir Fig. 4.3), l'avantage principal de ces observations consiste en leur bonne résolution spatiale par rapport à une observation au nadir qui sonde une large gamme d'altitudes.

Cette séquence d'observations est réalisée en deux temps : les barrettes de détecteur acquièrent dans un premier temps des spectres à basse altitude autour de 125 km, puis, dans un second temps, la barrette est centrée autour de 225 km, pour étendre l'information en altitude. Il y a un recouvrement des détecteurs sur environ 20 % de la barrette de façon à tenir compte de l'incertitude de pointage.

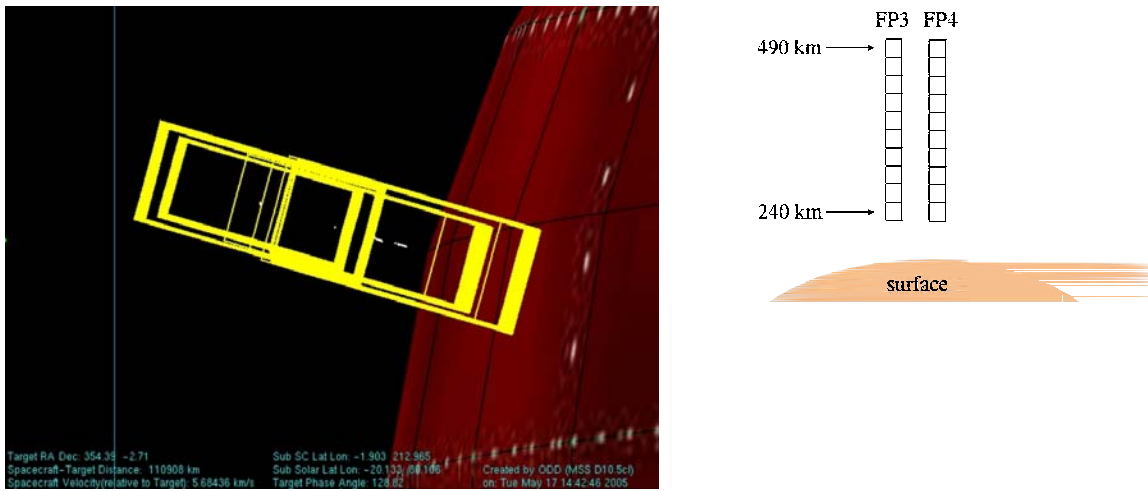


FIG. 4.3: *A gauche : Projection de l'observation au limbe à long temps d'intégration lors du survol T7 à 20° N. La surface de Titan est schématisée en orange. A droite : Représentation de la disposition des pixels de FP3 et FP4 au cours de ce type d'observation. Chaque pixel sonde une altitude différente.*

La Table 4.2 liste toutes les séquences d'observations MIRLMBINT qui sont programmées pendant la mission nominale.

Quand cela est possible, nous utilisons également des observations enregistrées au nadir à une résolution spectrale de 0.5 cm^{-1} et à des latitudes comparables à celles des observations au limbe, afin de sonder des niveaux plus bas que ceux sondés par les limbes. En effet, la quantité d'atmosphère traversée au cours d'une observation au nadir est plus faible que celle traversée pendant une observation au limbe et le rayonnement, qui est moins absorbé sur un chemin optique plus court, provient alors de couches plus profondes que dans le cas des limbes.

Les inversions de température dans la stratosphère et la mésosphère sont effectuées uniquement à partir des spectres enregistrés par le FP4 car ils contiennent la bande ν_4 du méthane.

4.3.1 La sélection des spectres

J'effectue les sélections des spectres en utilisant une interface graphique réalisée par Thierry Fouchet en langage IDL, qui permet de sélectionner des spectres parmi la centaine de milliers de spectres observés depuis le début de la mission. Il est possible d'effectuer des sélections en prenant en compte des paramètres comme la date, le survol, les latitudes, les longitudes, les angles d'émission pour les observations au nadir ou les altitudes pour les limbes, ainsi que la résolution spectrale. Il est ensuite possible de moyenniser les spectres sélectionnés afin d'obtenir un meilleur rapport signal-à-bruit.

Pour chaque inversion de la température, je commence par sélectionner tous les spectres au limbe enregistrés pendant une séquence "MIRLMBINT" (un survol et une latitude donnée) avec des lignes de visée comprises entre 0 km et 600 km. Dans tous les cas, je vérifie que la distance à laquelle les spectres ont été acquis varie peu d'un spectre à l'autre afin que la résolution spatiale soit homogène dans la sélection. Je regarde ensuite comment les lignes de visée sont distribuées le long des altitudes. Soit leurs altitudes augmentent de façon continue, et dans ce cas, j'effectue des moyennes

| survol | date | latitude | survol | date | latitude |
|--------|------------|--------------|--------|------------|----------|
| Tb | Dec. 2004 | 13°S | T23 | Janv. 2007 | 5°N |
| T3 | Fev. 2004 | 82°N | T24 | Janv. 2007 | 30°N |
| T7 | Sept. 2005 | 20°N | T25 | Fev. 2007 | 15°N |
| T10 | Janv. 2006 | 55°N | T27 | Mars 2007 | 20°S |
| T14 | Mai 2006 | 32°S et 50°N | T28 | Avril 2007 | 30°S |
| T15 | Juil. 2006 | 56°S | T35 | Août 2007 | 0°N |
| T16 | Juil. 2006 | 45°N | T39 | Dec. 2007 | 14°S |
| T19 | Oct. 2006 | 60°N et 30°N | T42 | Mars 2008 | ? |
| T21 | Dec. 2006 | 15°N | T43 | Mai 2008 | ? |

TAB. 4.2: *Liste des observations au limbe à 0.5 cm^{-1} durant la mission nominale. Un problème est survenu lors de l'acquisition des données du survol T7 et les spectres au limbe ont été perdus. Les résultats présentés dans ce manuscrit portent sur les spectres des survols Tb, T3, T10, T15, ainsi que T4 pour lequel d'autres types d'observations ont été réalisés.*

de spectres par tranches de 30 km, ce qui me permet d'obtenir de 10 à 11 spectres moyennés entre ~ 100 et 500 km. Soit les lignes de visée se regroupent par paquets séparés d'une vingtaine de kilomètres les uns des autres, chaque paquet correspond à l'acquisition d'un détecteur, et je moyenne alors les spectres par paquet enregistré par un même détecteur. Le nombre de spectres moyennés par altitude varie d'une observation à l'autre. Nous avons choisi de ne considérer que les spectres acquis en-dessous de 500 km en raison des écarts à l'ETL qui peuvent apparaître au-dessus de ce niveau. Lorsque l'équilibre thermodynamique local n'est plus vérifié, la fonction source de la couche n'est plus celle d'un corps noir. A l'ETL, du fait de l'importante densité du gaz, ce sont les chocs (lointains et proches) entre molécules qui induisent principalement l'émission des photons en faisant basculer les molécules dans des états d'énergie moins élevées. La désexcitation peut également avoir lieu par émission spontanée isotrope d'un photon de fréquence plus ou moins similaire à celui absorbé. L'émission est alors similaire à une diffusion incohérente. Dans les hautes couches de l'atmosphère, ce photon a moins de chances d'interagir avec une molécule (car la densité est faible) et peut donc directement arriver sur le détecteur. Dans le cas non LTE, le photon absorbé peut provenir de couches profondes de l'atmosphère et être diffusé (de façon incohérente) vers l'observateur. Sur un spectre au limbe à très haute altitude, l'émission totale observée contient une composante "diffusée" provenant des couches plus profondes.

Pour chaque sélection de spectres enregistrés au limbe, j'effectue une sélection de spectres enregistrés au nadir à une latitude comparable afin de sonder des niveaux plus bas que ceux sondés par les spectres au limbe.

CHAPITRE 5

Profils de température inversés : résultats

Sommaire

| | | |
|------------|--|-----------|
| 5.1 | 56°S, 13°S et 56°N | 55 |
| 5.1.1 | Les sélections de spectres | 55 |
| 5.1.2 | Modélisation du continuum et détermination de la correction en altitude | 56 |
| 5.1.3 | Les kernels | 57 |
| 5.1.4 | Profils de température inversés | 61 |
| 5.2 | 82°N et 83°N | 63 |
| 5.2.1 | Les sélections des spectres au limbe | 63 |
| 5.2.2 | Inversion des profils thermiques | 64 |
| 5.2.3 | Résultats | 66 |

Dans cette Section, je vais présenter mon travail portant sur les inversions des profils de température à 56°S, 13°S, 56°N, 82°N et 83°N. Nous détaillerons dans un premier temps, l'analyse des données à 56°S, 13°S et 56°N, car elles prennent en compte à la fois des données au limbe et au nadir, puis celles à 82 et 83°N effectuées à partir de spectres au limbe uniquement.

5.1 56°S, 13°S et 56°N

5.1.1 Les sélections de spectres

Les inversions que nous allons détailler dans cette section utilisent des données acquises à 56°S, 13°S et 56°N durant les survols T15 (2 juillet 2006), Tb (13 décembre 2004) et T10 (15 janvier 2006) respectivement. La Table 5.1 résume les caractéristiques de ces sélections. Pour ces trois latitudes, nous avons utilisé un nombre comparable de spectres moyennés au limbe dont les lignes de visée sont comprises entre ~ 200 km et 500 km, ainsi qu'un spectre moyenné au nadir dans chaque cas.

| Sélections des spectres moyennés au limbe | | | | | |
|---|------|-------|----------------------|---|--|
| survol | lat. | long. | résol. vert. (km) | altitude (km) | nombre de spectres moyennés |
| T15 | 56°S | 280°E | ~35 | 194, 227, 252, 286, 327, 368, 410, 451, 491 | 57, 57, 47, 69, 37, 34,36,34,35 |
| TB | 13°S | 260°E | ~30 | 205, 240, 276, 312, 348, 384, 420, 456 | 26, 27, 26, 27, 26, 27, 26, 27 |
| T10 | 56°N | 67°E | ~33 | 186, 219, 255, 291,327, 365, 404,442,481,519 | 42, 48, 50, 49, 22, 22 ,22,22,22,22 |
| Sélections des spectres moyennés au nadir | | | | | |
| survol | lat. | long. | angle d'émission | altitude (km) | nombre de spectres moyennés |
| T15 | 54°S | 143°E | 55° | - | 203 |
| Tb | 9°S | 29°E | 36° | - | 80 |
| T10 | 55°N | 140°E | 55° | - | 12 |

TAB. 5.1: Caractéristiques des spectres moyennés au limbe et au nadir utilisés pour les inversions des profils de température à 56°S, 13°S et 56°N. Pour les observations au limbe et au nadir, les latitudes, longitudes et le numéro de survol sont indiquées. Pour les spectres au limbe, la résolution verticale, le nombre de spectres moyennés et les altitudes correspondantes sont indiquées. Pour les nadir, sont donnés les angles d'émission et le nombre de spectres moyennés pour chaque sélection. Ces spectres sont tous issus de la version 2.0.1 de la base de données de CIRS.

5.1.2 Modélisation du continuum et détermination de la correction en altitude

La première étape de l'inversion consiste en la modélisation du continuum entre les multiplets de la bande ν_4 de CH_4 . Pour cela, j'effectue plusieurs calculs directs avec des opacités intégrées d'aérosols différentes. Je compare ensuite les spectres synthétiques obtenus avec les spectres observés et je conserve l'opacité qui me permet de reproduire au mieux le continuum. Ce travail est réalisé pour chaque inversion.

Comme cela a été indiqué dans la Section 4.2, un profil thermique doit être donné en entrée de l'algorithme. Ce profil initial est le profil thermique obtenu in situ par l'instrument Huygens/HASI à 10°S (voir Fig. 1.4, Partie I). Les altitudes de visée de chaque spectre moyenné (issues de la base de données de CIRS) sont données en entrée de l'inversion. Cependant ces altitudes ne sont pas forcément les niveaux réellement pointés du fait de l'erreur de pointage de CIRS qui peut atteindre 2 mrad (ce qui correspondrait à 270 km en projection sur l'atmosphère lorsque la sonde est située à 100 000 km de Titan, Flasar et al., 2004). Ce décalage en altitude des spectres au limbe, qui doit être pris en compte dans l'inversion des données, est le même d'un spectre à l'autre puisque leur positions relatives sont fixes.

Il faut de plus noter un autre point important : même si l'erreur de pointage est nulle, il peut être nécessaire d'appliquer une correction en altitude. En effet, la grille en altitude dans le code d'inversion est déterminée à partir de l'équilibre hydrostatique, et est donc fortement dépendante du profil de température. Or, sous un certain niveau, celui-ci n'est pas contraint par les observations et des profils de température différents correspondent donc à des grilles de pression différentes, et donc des grilles

d'altitude différentes. En conséquence, différents profils de température qui modélisent correctement les spectres observés, peuvent générer ou non un décalage en altitude par rapport aux altitudes des lignes de visée. Comme le profil de température en entrée peut différer du profil réel de Titan, la grille d'altitude que nous calculons à partir de l'équilibre hydrostatique dans le code ne correspond pas forcément à la grille d'altitude géométrique utilisée pour les observations.

Le décalage en altitude à appliquer en entrée du code constitue donc un paramètre libre de l'inversion qu'il faut déterminer. Les altitudes indiquées dans la base de données de CIRS ne permettent pas toujours de reproduire les spectres observés, même lorsque le profil thermique solution a bien convergé. Le décalage en altitude à appliquer peut être déterminé à partir des spectres au limbe les plus bas (à haute altitude le rapport signal-à-bruit devient mauvais) car les intensités relatives des branches P (ou R) et Q, ainsi que la forme de la branche Q, sont très sensibles à l'altitude de visée. En effet, la branche Q est plus rapidement saturée que la branche P pour les pressions élevées.

Dans la pratique, j'effectue plusieurs inversions avec des décalages différents (le décalage est appliqué simultanément à tous les spectres au limbe moyennés) afin de voir lequel permet de reproduire au mieux les spectres observés. Je compare ainsi les différents résidus rms obtenus et sélectionne le décalage correspondant aux valeurs de rms minimales.

La Fig. 5.1 donne l'exemple des effets de 3 décalages sur la forme des spectres au limbe calculés à 13°S. Ces décalages valent +15 km, +30 km et +45 km par rapport aux altitudes nominales des lignes de visée. Cette figure illustre la sensibilité de l'intensité des spectres à ce décalage en altitude, en particulier, les intensités relatives des branches P et Q sont fortement affectées par la valeur de ce décalage.

A 13°S, nous trouvons qu'un décalage de +30 km par rapport aux données permet de reproduire les spectres observés. A 56°S, il n'y a pas besoin d'appliquer de décalage, et à 56°N, il vaut -25 km par rapport aux altitudes nominales de la Table 5.1. L'incertitude sur ces décalages vaut ± 7 km (à $1-\sigma$).

La Fig. 5.2 montre les modélisations des spectres au nadir et quelques limbes à 56°S (a), 13°S (b) et 56°N (c).

5.1.3 Les kernels

Les niveaux sondés par chaque limbe sont déterminés à partir des kernels calculés à 1230 cm^{-1} (branche P de faible intensité), 1253.75 cm^{-1} (branche P de forte intensité) et à 1305.75 cm^{-1} (branche Q). La Fig. 5.3 montre les kernels correspondant aux émissions des 3 latitudes.

On peut remarquer que les kernels correspondant aux émissions nadir de la branche Q (à gauche en rouge) ne sondent jamais sous le niveau 0.7 mbar (donné par la largeur à mi-hauteur). Les kernels des émissions au limbe avec les lignes de visée les plus basses (représentés en violet, bleu et vert) sont larges car les émissions correspondantes sont optiquement épaisses. Ces kernels ne sondent pas à l'altitude de la ligne de visée, mais au-dessus car le niveau où $\tau \sim 1$ est situé en avant du point tangent (voir la Fig. 5.4), i.e. dans des couches plus élevées que celle du point tangent. Ces kernels correspondent à des émissions de la branche Q optiquement épaisses. Pour les lignes de visées à plus haute altitude, les émissions deviennent optiquement minces ¹, les kernels sont alors

¹Lorsque les kernels sont très piqués, nous utilisons le terme "optiquement mince" bien qu'une

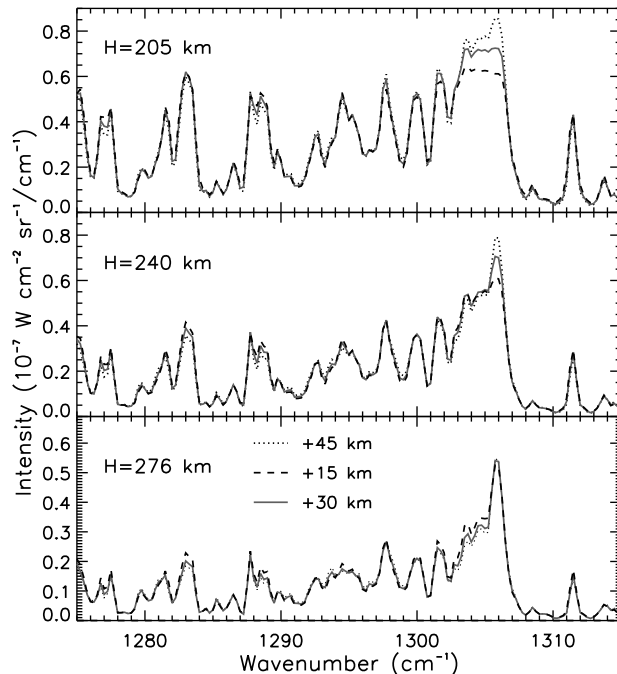


FIG. 5.1: *Effet du décalage en altitude sur les spectres synthétiques au limbe de la bande ν_4 de CH_4 à 13°S correspondant à +15 km, +30 km et +45 km par rapport aux altitudes nominales des lignes de visée qui sont indiquées pour chaque spectre. Le décalage permettant de reproduire au mieux les spectres observés vaut +30 km. La comparaison des spectres synthétiques et des spectres observés avec ce décalage sont montrés par la Fig. 5.2 (b).*

beaucoup plus piqués et leur maxima sont situés aux niveaux des altitudes de visée des observations au limbe.

Les altitudes plus basses sont sondées par les émissions des multiplets de la branche P qui possèdent des intensités d'autant moins élevées que les multiplets sont éloignés en fréquence de la branche Q (car les niveaux d'énergie sont d'autant moins peuplés). Pour les multiplets optiquement minces, les intensités à 1230 et 1253.75 cm^{-1} sondent les mêmes altitudes.

A 56°S (a) et 13°S (b), les intensités des spectres au limbe à ces deux nombres d'onde sont toutes optiquement minces (kernels très piqués). En revanche, concernant les observations au nadir, les kernels calculés pour ces deux fréquences ne sondent pas les mêmes niveaux. Les kernels calculés à 1230 cm^{-1} (pointillés) sondent les niveaux jusqu'à $\sim 8\text{ mbar}$ (donné par la largeur à mi-hauteur) avec un maximum de contribution vers 2 mbar, tandis que ceux calculés à 1253.75 cm^{-1} (traits pleins) sondent environ entre 0.2 et 3 mbar avec un maximum vers 0.9 mbar.

A 56°N , les kernels correspondant aux émissions de la branche Q (limbe et nadir) sondent des niveaux comparables à ceux sondés à 56°S et 13°S . Or les émissions à 1230 et 1253.75 cm^{-1} , dans la branche P, au nadir et par les limbes les plus bas, supposés sonder des altitudes plus basses que celles sondées par la branche Q, ne proviennent pas de niveaux plus profonds que 1.5 mbar (161 km). Les signatures spectrales à ces deux fréquences sont donc émises à une altitude plus élevée à 56°N qu'à 13°S et 56°S comme

légère contribution plus optiquement épaisse existe. En effet, le maximum de contribution provient de l'altitude du point tangent, mais les couches supérieures qui peuvent être plus chaudes ne sont pas totalement transparentes, ce qui explique l'élargissement de ces kernels au-dessus du point tangent.

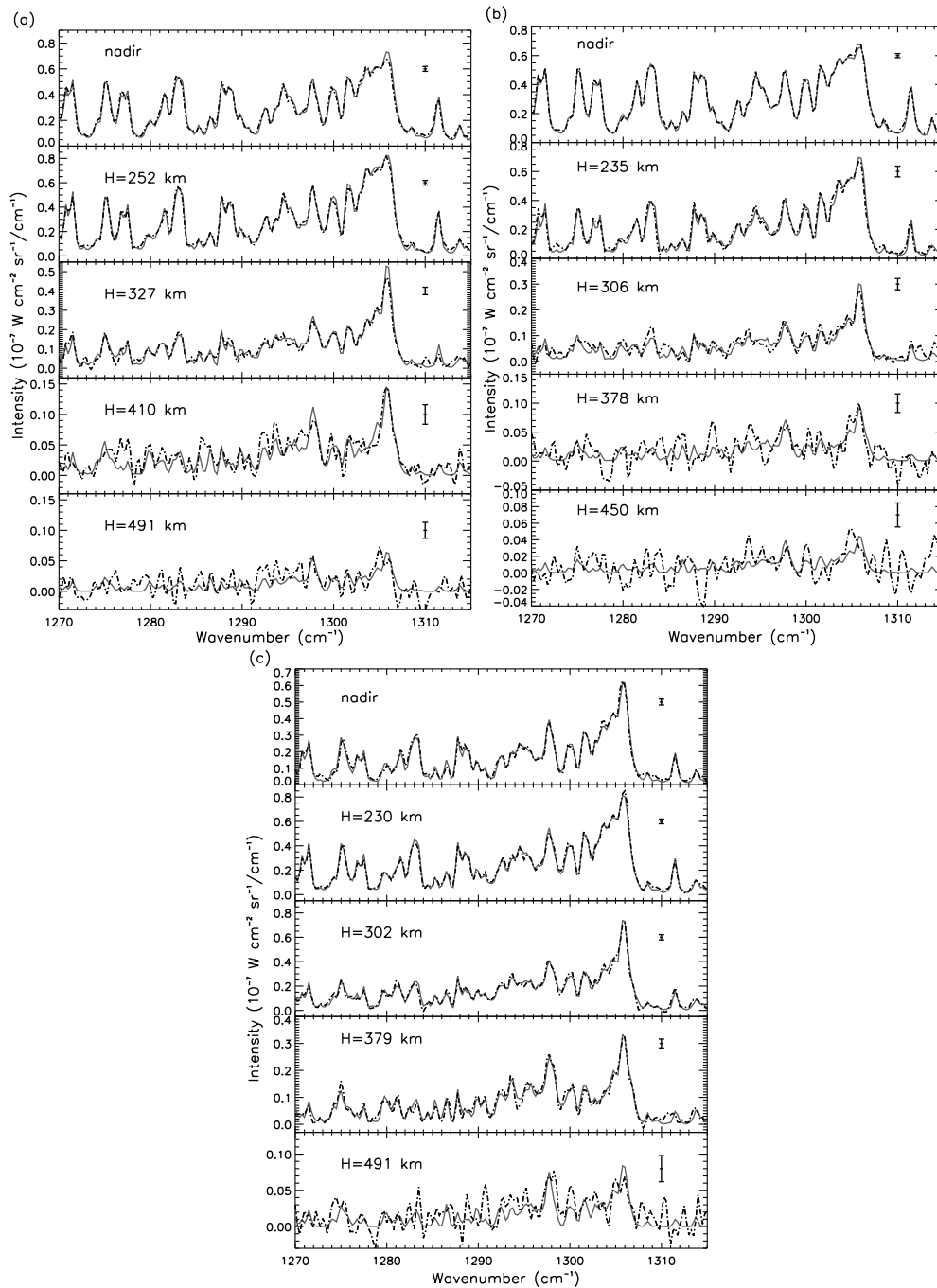


FIG. 5.2: Modélisations des spectres de la ν_4 de CH_4 à 56°S (a), 13°S (b) et 56°N (c) entre 1270 et 1315 cm^{-1} . Les spectres observés sont représentés en tirets et les spectres calculés en traits pleins gris. Les altitudes indiquées tiennent compte de la correction en altitude. Les profils de température inversés correspondent à la meilleure reproduction (au sens des moindres carrés) du jeu complet de spectres au limbe et au nadir pour chaque latitude. Les barres d'erreur indiquent les niveaux $\pm 1\text{-}\sigma$.

le schématise la Fig. 5.4. Ceci est dû au fait que la température stratosphérique est bien plus froide à 56°N, qu'à 56°S et 13°S (voir Section 5.1.4). Dans ce cas, l'émission thermique de la basse stratosphère provient d'un niveau plus élevé, où la température est comparable à celle de la basse stratosphère des profils thermiques de l'hémisphère

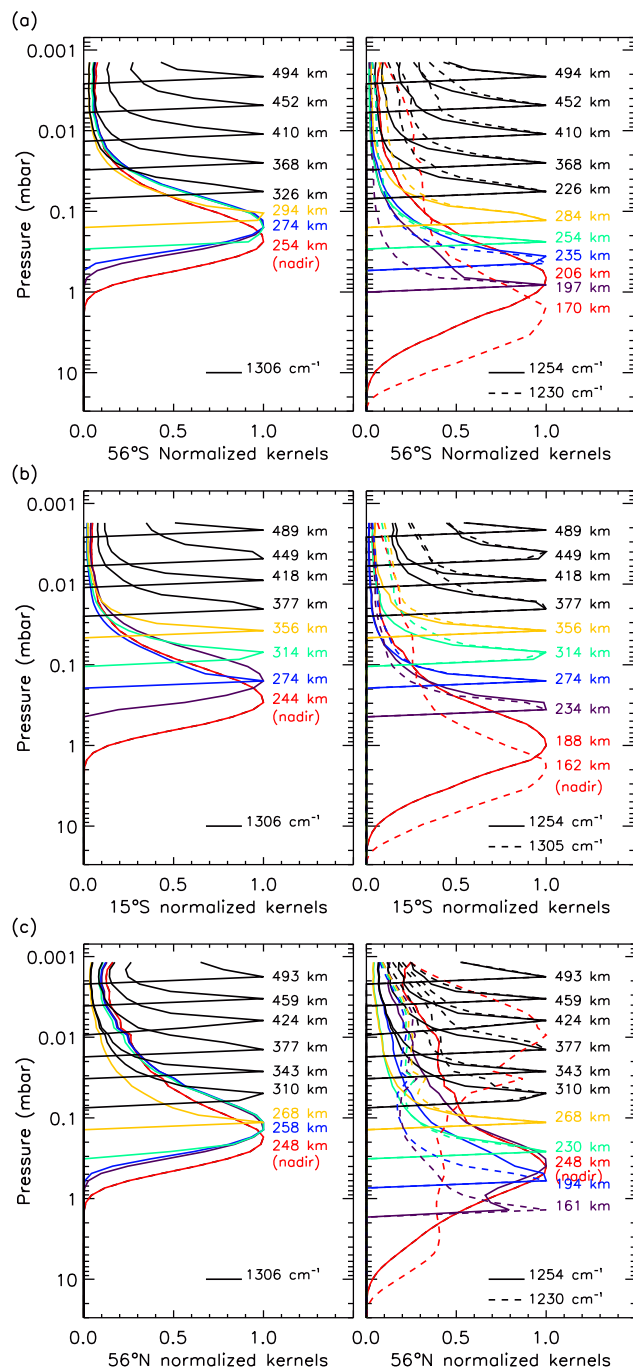


FIG. 5.3: Kernels calculés à 1230, 1253.75 et 1305.75 cm^{-1} correspondant aux spectres observés à 56°S (a), 13°S (b) et 56°N (c). Les traits pleins rouges représentent les kernels correspondant aux émissions nadir, les autres traits pleins représentent ceux des émissions au limbe (les couleurs permettant de les différencier à basse altitude) calculés à 1305.75 cm^{-1} (à gauche) et 1253.75 cm^{-1} (à droite). Enfin les tirets représentent les kernels calculés à 1230 cm^{-1} . Les altitudes sont données dans chaque cas aux niveaux des maxima des kernels.

sud.

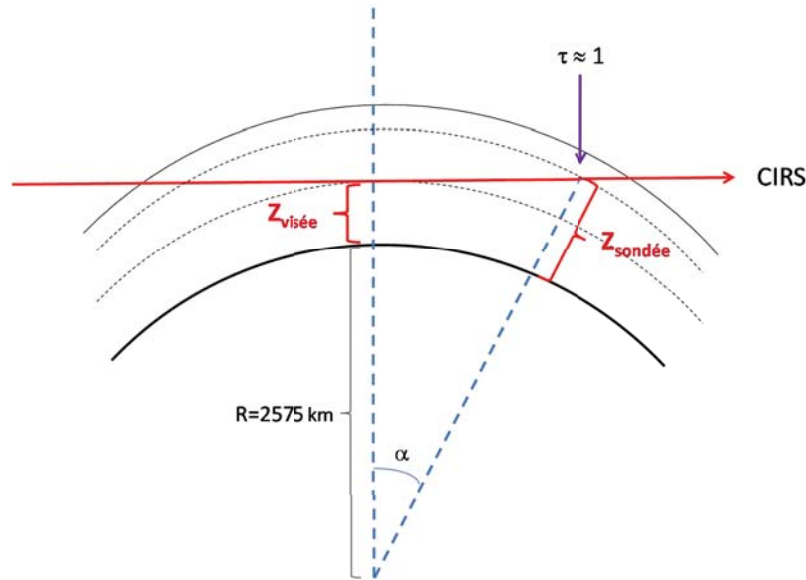


FIG. 5.4: Schématisation d'une observation au limbe optiquement épaisse. Le niveau $\tau \sim 1$ n'est pas situé au niveau du point tangent, mais en avant de celui-ci, l'altitude sondée n'est pas celle de la ligne de visée, mais une altitude plus élevée.

5.1.4 Profils de température inversés

Les profils de température inversés à 56°S, 13°S et 56°N sont représentés sur la Fig. 5.5 en noir, rouge et bleu respectivement. Les zones où les profils de température ne sont pas contraints par les spectres observés sont représentées en pointillés, le profil thermique solution converge alors vers le profil thermique initial en entrée de l'algorithme. Les barres d'erreur à 1- σ sont données au niveau des maxima des kernels. Celles-ci prennent en compte l'incertitude liée au bruit et celle liée à la correction en altitude (qui vaut ± 7 km). Ces deux erreurs sont sommées quadratiquement telle que :

$$\sigma_T = \sqrt{\sigma_{T_{shift}}^2 + \sigma_{T_{bruit}}^2} \quad (5.1)$$

où $\sigma_{T_{shift}}$ est l'erreur sur le profil thermique causée par l'incertitude de la correction en altitude. Nous la déterminons en inversant les profils thermiques en ajoutant ± 7 km aux altitudes en entrée de l'inversion. Les écarts entre le profil thermique solution et ces deux nouveaux profils inversés avec une correction de ± 7 km en altitude nous donne $\sigma_{T_{shift}}$. Les barres d'erreur théoriques dues au bruit sont calculées par l'algorithme d'inversion à partir des matrices de corrélation (voir Eq. 4.11). Cependant, les écarts rms entre les spectres calculés et observés sont toujours plus élevées que la valeur du NESR (Noise Equivalent Spectral Radiance). Si le modèle était parfait, l'écart entre les spectres observés et calculés lorsque la solution a convergé serait dû uniquement au bruit et le résidu rms devrait être du même ordre que le NESR. Le fait d'avoir un résidu rms toujours supérieur au NESR (souvent de l'ordre d'un facteur 2) signifie que soit le NESR des spectres de Titan est sous-évalué (bruit plus élevé qu'attendu), soit les incertitudes du modèle sont plus élevées que le niveau de bruit. Dans tous les cas, nous avons donc choisi de considérer que l'écart rms constituait un meilleur indicateur du niveau d'incertitude et nous multiplions systématiquement l'erreur sur la température en sortie de l'algorithme (qui ne tient compte que de la valeur du NESR) par le facteur

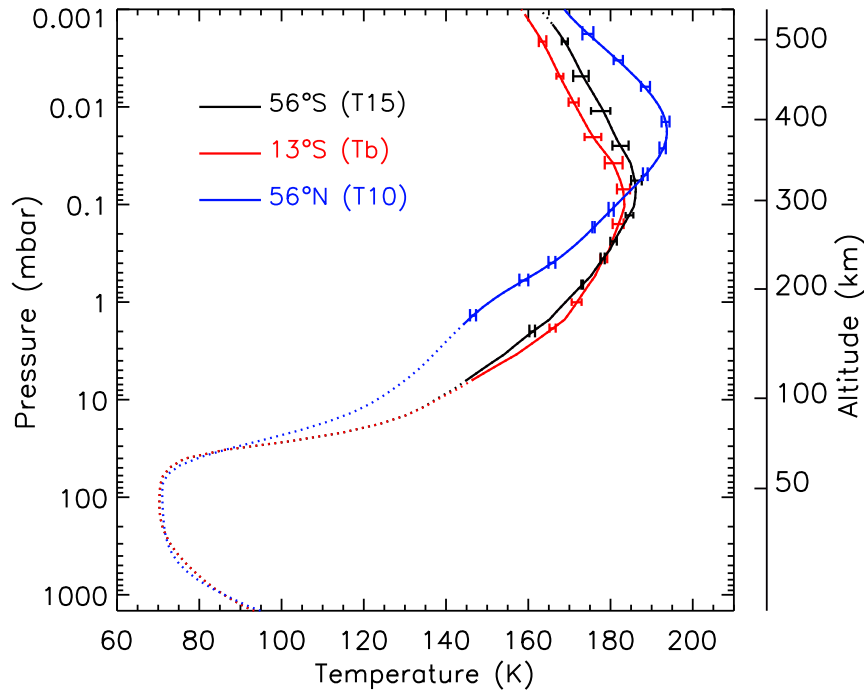


FIG. 5.5: Profils verticaux de température inversés à 56°S (noir), 13°S (rouge) et 56°N (bleu). Les parties en pointillés représentent les zones où les profils de température ne sont pas contraints par les observations. L'échelle de hauteur à droite fait référence au profil de température à 13°S. Les barres d'erreur sont données au niveau des maxima des kernels.

rms/NESR.

Nous ne tenons pas compte des incertitudes sur l'abondance du méthane (1.41 ± 0.07 %) qui sont très faibles et dont l'effet sur le profil de température inversé est largement inclus dans les barres d'erreur.

Les trois profils de température inversés présentent tous une stratopause très marquée. Le premier travail de ma thèse a été l'analyse de la première version des spectres au limbe enregistrés à 13°S pour en déterminer le profil de température. Ce premier profil thermique inversé nous a permis de mettre pour la première fois en évidence, l'existence d'une stratopause (Flasar et al., 2005, voir annexe C). La nouvelle version de ce profil thermique présentée sur la Fig. 5.5 diffère légèrement de la première version car nous utilisons ici une abondance de CH_4 égale à 1.4 % alors que nous avons utilisé 1.6 % pour la première version de l'inversion. De plus les données ont été réétalonnées plusieurs fois par l'équipe CIRS, ce qui peut engendrer de légères modifications des intensités spectrales.

En comparant ces trois profils thermiques, nous pouvons noter que la température stratosphérique ne semble pas varier entre 56°S et 13°S. En revanche, à 56°N, la température diminue fortement et l'écart entre 56°N et 13°S à 1 mbar atteint presque 25 K. Ce phénomène s'explique directement par la diminution d'ensoleillement à haute latitude nord, moins de rayonnement est absorbé par les aérosols et le méthane, ce qui entraîne une diminution du chauffage de la stratosphère.

La stratopause à 56°S et 13°S est située à un niveau comparable (vers 0.1 mbar, ~ 300 km), alors qu'à 56°N, elle est située à 0.018 mbar (366 km). Cette différence

| | lat. | long. | résol. vert. (km) | altitude (km) | nombre de spectres moyennés |
|-----------|------|-------|----------------------|--|--------------------------------|
| T3 | 82°N | 88°E | ~ 50 | 172, 205, 255, 310, 365, 420, 462, 501 | 29, 29, 45, 39, 44, 37, 49, 70 |
| T4 | 83°N | 139°E | ~ 10 | 159, 177, 201, 219, 238, 260, 281, 297 | 13, 11, 10, 9, 10, 12, 10, 6 |

TAB. 5.2: Caractéristiques des spectres moyennés au limbe utilisés pour les inversions des profils de température à 82°N et 83°N. La latitude, la longitude, la résolution verticale, les altitudes moyennées des lignes de visée et le nombre de spectres moyennés sont indiqués. Les spectres du survol T3 sont issus de la versions 2.0.1 de la base de données, tandis que ceux à 83°N sont issus de la version 2.0 (la version 2.0.1 ne présente pas de modifications pour ce survol).

s'explique par des phénomènes liés à la dynamique qui apparaissent à haute latitude nord (voir Section 6).

5.2 82°N et 83°N

5.2.1 Les sélections des spectres au limbe

Les inversions des profils thermiques à 82°N et 83°N ont été effectuées à partir de spectres au limbe uniquement. Les caractéristiques de ces spectres sont données dans la Table 5.2

Les spectres enregistrés lors du survol T3 proviennent du même type de séquence que ceux analysés aux moyennes latitudes (séquence MIRLMBINT), ceux acquis lors du survol T4 proviennent d'un autre type de séquence qui privilégie les observations du FP1. Comme ce plan focal possède un champ de vue de 3.9 mrad, les acquisitions ont lieu à des distances comprises entre 25 000 à 40 000 km de Titan (résolution verticale sur l'atmosphère de l'ordre de 100 km), ce qui correspond à une résolution verticale de l'ordre de 10 km pour les FP3 et FP4 qui acquièrent les données en même temps que le FP1. Cependant, les lignes de visée de ces données ne dépassent pas l'altitude 300 km. Concernant les spectres au limbe enregistrés pendant le survol T3, leur résolution verticale est de l'ordre de 50 km et les lignes de visée pointent au-delà de 500 km (nous ne prenons en compte que les spectres jusqu'à 500 km en raison des effets non LTE qui apparaissent à plus haute altitude). J'ai sélectionné les spectres acquis pendant le survol T4 en raison de leur bonne résolution spatiale, afin d'inverser un profil de température qui me servira pour les inversions des profils d'abondance des 2 isotopes de HCN (voir Partie IV). Ces deux isotopes possèdent des émissions de faible intensité et sont noyés dans le bruit au-delà de 300 km, la sélection à T4 est donc intéressante dans ce cas, en revanche, elle n'est pas très étendue en altitude, et il ne sera pas possible à partir de ces spectres de contraindre la température dans la région de la stratopause.

Les spectres enregistrés pendant T3 sont répartis de façon homogène en altitude, j'ai donc choisi de les moyennner par tranches de 40 km d'altitude, ce qui correspond à des moyennes de 29 à 70 spectres. Pour ce qui est des spectres enregistrés pendant T4, j'ai effectué des moyennes par tranches de 20 km, qui incluent chacune environ une dizaine de spectres. Les altitudes nominales de chaque spectre moyenné sont données dans la Table 5.2.

Nous n'avons pas utilisé de spectres au nadir car il n'y avait pas de données acquises avec cette géométrie au-dessus de 75°N. Ceci est relativement proche de 83°N, mais

à ces très hautes latitudes (au-delà de 50°N), les variations latitudinales de température sont significatives sur un intervalle de 5° (voir Achterberg et al. 2007). De plus, au début de la mission, les orbites de la sonde Cassini étaient très proches du plan équatorial, les angles d'émission aux hautes latitudes étaient alors très élevés, de telle sorte que ces observations ne sondent pas des niveaux plus bas que ceux sondés par les spectres au limbe. Les orbites de la sonde sont actuellement (2007) plus inclinées, ce qui permet de réduire la valeur de l'angle d'émission des observations nadir à haute latitude. Cependant, même avec un angle d'émission faible, il semble que l'émission au nadir ne provienne pas d'un niveau beaucoup plus profond que 1 ou 2 mbar à cause des très faibles températures stratosphériques vers 80°N (voir ci-dessous).

5.2.2 Inversion des profils thermiques

Pour les inversions des profils thermiques à ces deux latitudes, j'ai procédé exactement de la même manière que pour ceux à 56°S , 13°S et 56°N . Dans un premier temps, j'ai modélisé l'émission du continuum. J'ai également déterminé la correction en altitude à appliquer aux spectres pour les deux latitudes. A 82°N (T3), j'applique un décalage de -5 km par rapport aux altitudes indiquées dans la base de données de CIRS. A 83°N (T4), ce décalage vaut $+5$ km. L'incertitude sur cette correction en altitude vaut ± 7 km.

La Fig. 5.6 montre la comparaison entre les spectres observés (tirets noirs) et les spectres calculés (traits pleins gris) à 82°N (a) et 83°N (b). Nous pouvons remarquer que le spectre à 495 km à 82°N présente un très bon rapport signal-à-bruit, ce qui n'était pas le cas à 56°S , 13°S et 56°N . Ceci s'explique par le fait que la température de la mésosphère à 82°N est bien supérieure à celle à plus basse latitude (voir ci-dessous). Même si la densité atmosphérique devient faible (moins de molécules contribuent à l'émission du rayonnement), l'émission thermique de CH_4 est encore importante du fait de la température élevée.

La Fig. 5.6 (c) présente les kernels des émissions à 1230 cm^{-1} (branche P) et 1305.75 cm^{-1} (branche Q) correspondants aux spectres à 82°N . Les spectres au limbe sondent entre 0.9 mbar (170 km) et (0.002 mbar) 490 km. Ceux à 83°N présentent les mêmes caractéristiques excepté que la borne supérieure des altitudes diffère (puisque'il n'y a pas de spectres au-dessus de 300 km). Ils sondent entre 0.9 mbar et 0.05 mbar (300 km). La forme des kernels nous montre que la branche Q est optiquement épaisse pour les 2 limbes les plus profonds qui sondent à 283 km, alors que leurs lignes de visée valent 172 et 205 km. Les émissions à 1230 cm^{-1} ne sont pas complètement optiquement minces du fait de leur forme relativement large, cependant, les kernels possèdent tout de même des maxima (171, 209, 251 km) qui sondent approximativement l'altitude de la ligne de visée. Notons que si nous rajoutons à l'inversion un limbe plus profond que 171 km, la branche P devient alors optiquement épaisse et le niveau le plus bas sondé reste situé à ~ 1 mbar.

En-dessous de 170 km, les branches P, Q et R sont optiquement épaisses. En conséquence, pour des lignes de visée plus basses, la région du maximum d'information (maximum de la fonction de contribution) n'est pas localisée au niveau du point tangent, mais plus proche de la sonde le long de la ligne de visée, et donc à plus haute

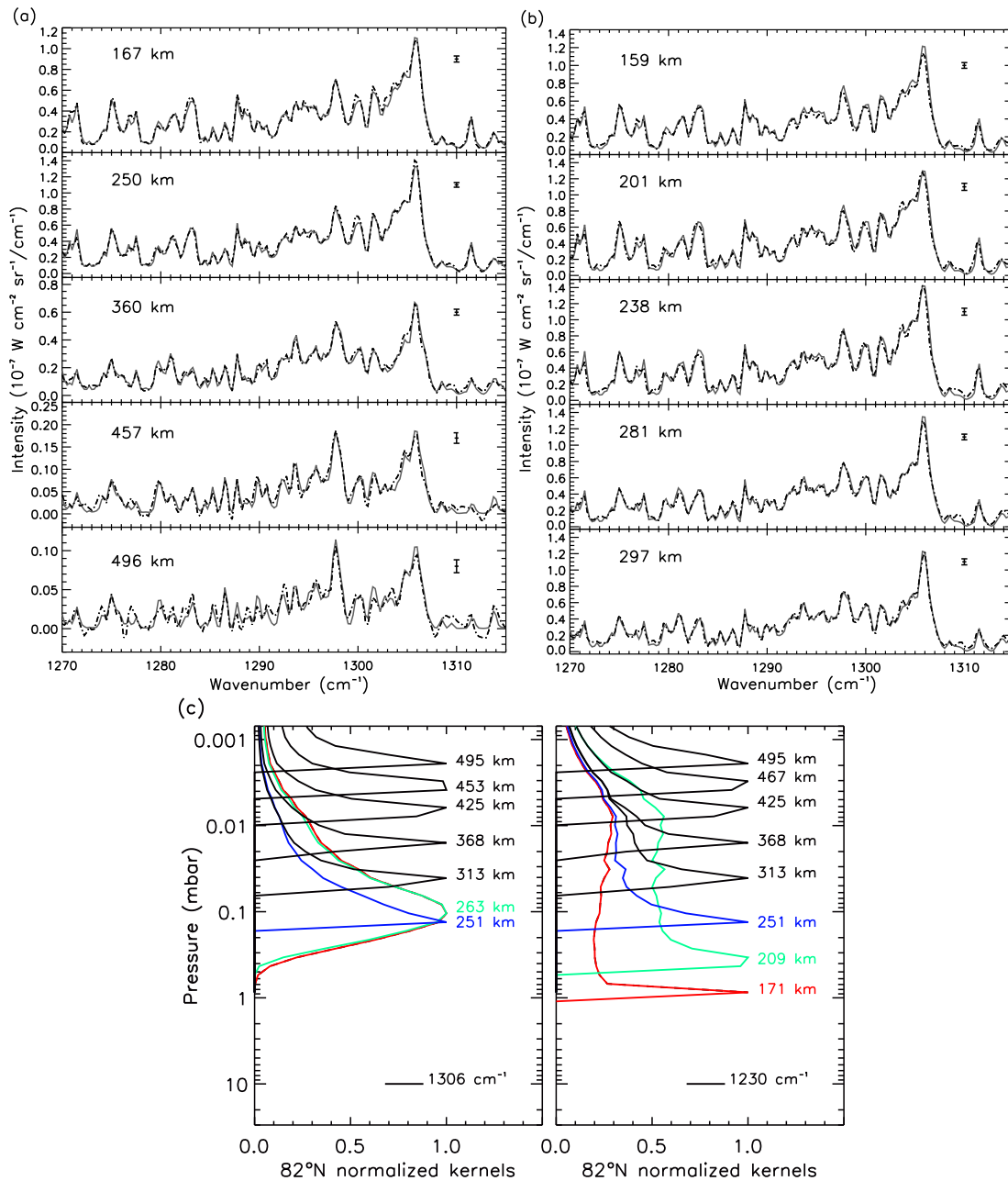


FIG. 5.6: En haut : Comparaison entre les spectres observés et calculés à 82°N (a) et 83°N (b). Les spectres observés sont représentés en tirets noirs et les spectres calculés en traits pleins gris. Les barres d'erreur sont données à $\pm 1\text{-}\sigma$. En bas : Kernels correspondant aux émissions à 1305.75 cm^{-1} (à gauche) et 1230 cm^{-1} (à droite) à 82°N. Les altitudes sont données au niveau des maxima des kernels. A 1305.75 cm^{-1} , les kernels correspondant aux limbés les plus bas (en rouge et vert) sont optiquement épais et quasi superposés, leur maxima sont situés à 263 km. Tandis que ces kernels à 1230 cm^{-1} correspondent à des émissions optiquement minces et sondent chacun approximativement les altitudes correspondantes des points tangents.

altitude (voir Fig. 5.4). Or comme ces observations ont été enregistrées lorsque la sonde avait une orbite proche du plan équatorial, la ligne de visée de chaque limbe à très haute latitude nord intercepte toute une gamme de latitudes de l'hémisphère nord. Ainsi, les limbés optiquement épais acquis à 82°N sondent en fait des latitudes plus basses, jusqu'à 65°N (voir ci-dessous).

Ce problème ne se pose pas pour les observations à latitudes moyennes car la sonde étant dans le plan équatorial, les lignes de visée des limbes proches de l'équateur interceptent plusieurs longitudes alors que la latitude varie peu. La température atmosphérique et les abondances présentent de faibles variations longitudinales (Flasar et al. 2005, Teanby et al. 2006) mais de larges variations latitudinales principalement vers les hautes latitudes. En conséquence, les températures déduites des émissions optiquement épaisses à haute latitude doivent être interprétées avec précaution car elles ne proviennent pas de la latitude du point tangent, mais d'une latitude inférieure.

De plus, il est important de noter que même pour des intervalles spectraux relativement transparents, il est possible en principe que le maximum d'émission provienne d'un endroit le long de la ligne de visée qui n'est pas le point tangent. En effet, la contribution d'un point donné est essentiellement proportionnelle à la fonction de Planck et au gradient de transmission ($CF(p) = B(T)dTr/dlnp$) le long du chemin optique. Comme la fonction de Planck dépend fortement de la température dans la région spectrale que nous étudions, de forts gradients de température le long de la ligne de visée peuvent influencer la localisation du maximum d'émission. Ainsi pour les observations près du pôle nord qui traversent plusieurs latitudes, les émissions optiquement minces peuvent, en fait, sonder des latitudes différentes de celles visées par la géométrie de l'observation. Il ne nous est pas possible d'évaluer cet effet car nous ne connaissons pas les gradients de température le long du chemin optique. Achterberg et al. (2007), pour tenir compte de ce phénomène, ont mis au point un algorithme d'inversion à 2 dimensions qui prend en compte les gradients de température latitudinaux pour l'inversion des profils thermiques. Ainsi, leur profils sont réellement représentatifs de la latitude visée.

5.2.3 Résultats

La Fig. 5.7 montre les profils de température inversés à 82°N (orange) et 83°N (bleu) avec les barres d'erreur correspondantes. Les parties non contraintes par les observations sont représentées en pointillés. Ces deux profils thermiques sont en bon accord.

Notons également que bien que les deux limbes les plus bas présentent une contribution optiquement mince de la branche P, la branche Q est optiquement épaisse et le profil thermique sous 250 km provient donc de latitudes plus basses que 82°N. Nous allons évaluer ces latitudes sondées. L'équation qui donne la variation en latitude (dans le cas où la longitude du point tangent est égale à celle de la sonde) est telle que $\cos\Delta(lat) = (R + z_{visée})/(R + z_{sonde})$, où $\Delta(lat)$ est l'angle reliant la latitude de visée et celle réellement sondée, R est le rayon de Titan, $z_{visée}$ l'altitude visée et z_{sonde} l'altitude d'où provient le maximum de l'émission (voir la Fig. 5.4).

Pour le limbe le plus bas que nous utilisons, dont l'altitude de visée vaut 172 km, les signatures spectrales sont émises à une altitude de 283 km, ce qui correspond à $\Delta(lat) = 16^\circ$, et l'émission provient alors principalement de la latitude 64°N.

La Section suivante compare les profils thermiques obtenus à moyenne latitude avec ceux obtenus à haute latitude nord. Nous allons voir comment sont interprétées les différences observées.

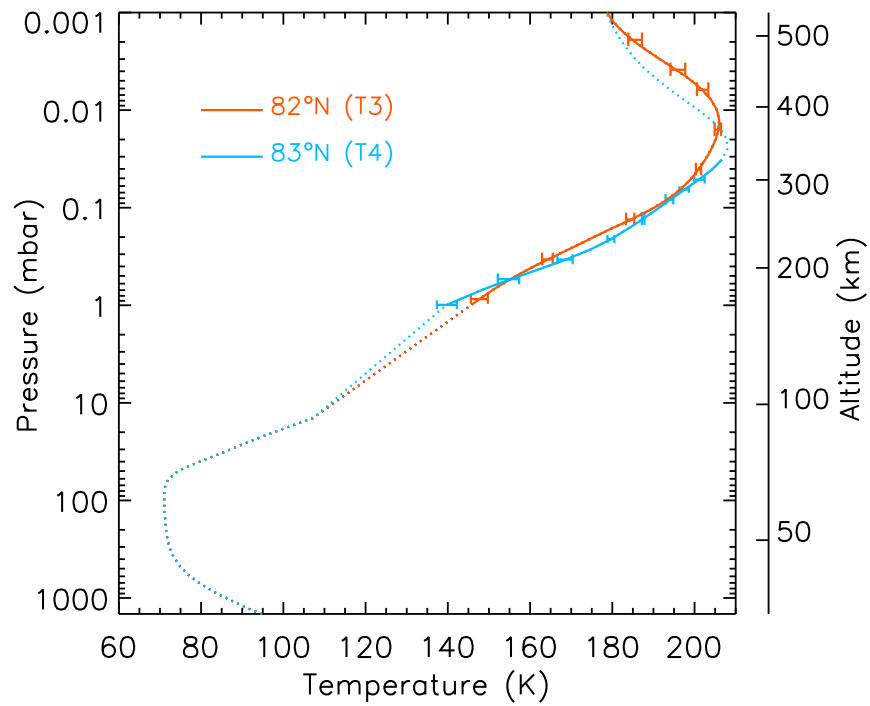


FIG. 5.7: Profil verticaux de température inversés à 82°N (orange) et 83°N (bleu). Les barres d'erreur sont données au niveau des maxima des kernels. Les parties en pointillé ne sont pas contraintes par les observations.

CHAPITRE 6

Profils de température inversés : discussion

La Fig. 6.1 regroupe les profils de température à 56°S (noir), 13°S (rouge), 56°N (bleu) et 82°N (orange), le profil à 83°N n'est pas représenté pour plus de lisibilité. Notre but en inversant les profils de température est de les utiliser ensuite dans les inversions les profils d'abondance des molécules traces. Dans l'équipe CIRS, Rich Achterberg et Barney Conrath se sont chargés d'effectuer une étude systématique des profils thermiques sur toute la surface de Titan. Leur modèle d'inversion, plus sophistiqué que le notre, prend en compte les gradients thermiques latitudinaux (voir la section précédente) et qui influent sur les profils inversés à haute latitude. Achterberg et al. (2007) ont obtenu une carte de la distribution latitudinale de la température entre 10 et 10^{-3} mbar. Celle-ci est reproduite sur la Fig. 6.2 sur laquelle sont superposées les latitudes de nos inversions.

Si nous nous intéressons au niveau 1 mbar, à 56°S et 13°S, Achterberg et al. (2007) obtiennent une température quasi constante de l'ordre de 170 K que nous déduisons également à partir de nos inversions. A 56°N, ils obtiennent une température d'environ 150 K que nous obtenons également. La température semble peu varier à ce niveau aux latitudes supérieures. Concernant la stratopause, nous la trouvons située vers 0.1 mbar à 56°S et 13°S avec une température de l'ordre de 180 K, alors qu'à 56°N et 82°N, elle est située à des pressions plus faibles (~ 0.02 mbar) pour des températures de 195 K et 205 K respectivement, ce qui est également en accord avec les résultats de Achterberg et al. (2007).

Ces variations latitudinales de température sont expliquées par des phénomènes dynamiques et radiatifs (Hourdin et al. 2004 ; Cresspin et al. 2005). La variation de la température stratosphérique est liée à la couche principale d'aérosols. Le chauffage de la stratosphère trouve son origine dans l'absorption du rayonnement solaire par les aérosols et le méthane. L'hémisphère d'été étant actuellement l'hémisphère sud, l'ensoleillement y est le plus important, et le chauffage stratosphérique le plus élevé. L'altitude de la stratopause est alors déterminée par la limite supérieure de la couche principale des aérosols. Dans la haute stratosphère et la basse mésosphère, le refroidissement est principalement causé par les aérosols, CH_4 , C_2H_2 et C_2H_6 , alors que le refroidissement par les raies rotationnelles de HCN domine dans la mésosphère supé-

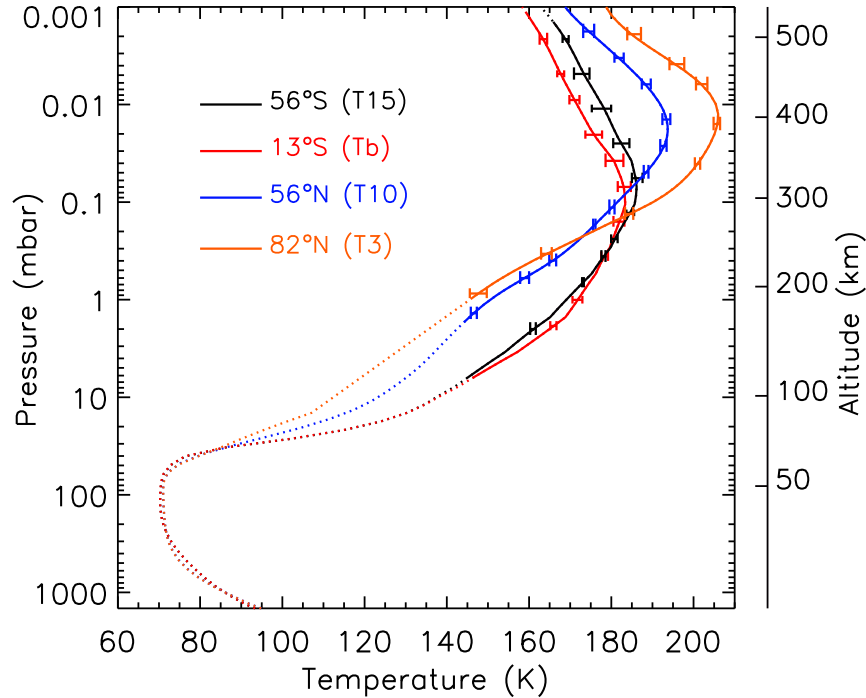


FIG. 6.1: Profil verticaux de température inversés à 56°S (noir), 13°S (rouge), 56°N (bleu) et 82°N (orange). Les barres d'erreur sont données au niveau des maxima des kernels. L'échelle des altitude réfère au profil thermique à 13°S.

rieure lorsque les bandes vibrationnelles des hydrocarbures ne sont plus à l'ETL (Yelle et al. 1991). Dans l'hémisphère nord, l'ensoleillement diminue et le chauffage de la stratosphère est donc moins efficace. A très haute latitude, comme par exemple à 82°N, une partie de la stratosphère se trouve dans la nuit polaire, le chauffage solaire est nul alors que les aérosols et hydrocarbures refroidissent radiativement l'atmosphère. L'effet est même accentué par l'accumulation des aérosols due à la descente d'air au pôle nord (pôle d'hiver, voir Partie I, Section 1.3), augmentant ainsi le refroidissement radiatif.

L'augmentation de la température de la stratopause et de la mésosphère vers les hautes latitudes nord est liée à la descente d'air au pôle nord qui entraîne une compression adiabatique des couches supérieures, et donc une augmentation de la température. A très haute latitude nord, l'altitude de la stratopause correspond à la zone où le chauffage adiabatique est le plus efficace. Au-dessus, la densité atmosphérique n'est pas assez élevée pour entraîner une augmentation significative de la température, et en-dessous, la densité est trop élevée et la compression est moins efficace.

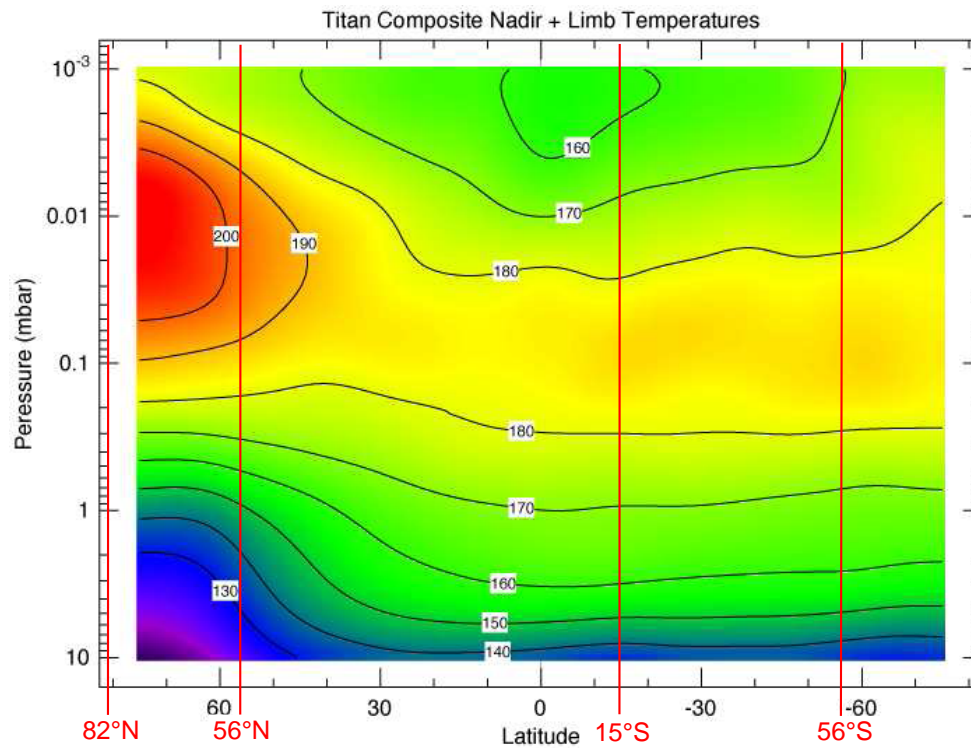


FIG. 6.2: Carte des températures moyennes déduites des données CIRS par Achterberg et al. (2007) en utilisant des spectres au limbe et au nadir. Les températures inversées ont été moyennées sur 5° de latitude. Les contours sont donnés en K. Nous avons superposé à cette carte les latitudes pour lesquelles nous avons inversés les profils thermiques.

Troisième partie

III. Inversion des profils d'abondance

CHAPITRE 7

Algorithme d'inversion et observations

Sommaire

| | | |
|-----|--|----|
| 7.1 | Algorithme d'inversion des profils d'abondance | 76 |
| 7.2 | Modèle atmosphérique et spectroscopique | 78 |
| 7.3 | Observations utilisées | 78 |

Le spectre infrarouge thermique d'une planète, riche en bandes d'absorption, peut renseigner efficacement sur la composition de l'atmosphère. L'information disponible à partir de ces bandes va de la détection de nouveaux composés à la détermination de la distribution verticale des abondances de ces gaz. La possibilité ou non d'obtenir ces informations dépend de plusieurs facteurs : le rapport signal-à-bruit des mesures, le degré de superposition des signatures spectrales des différents constituants, le contraste des signatures spectrales déterminé par le gradient de température atmosphérique et la présence d'autres sources d'opacité comme les nuages ou les aérosols.

Les observations au limbe permettent d'obtenir une meilleure résolution verticale et la longueur du chemin optique dans l'atmosphère constitue un avantage pour extraire de l'information sur des molécules traces présentant des signatures peu intenses.

Comme pour l'inversion du profil thermique nous utilisons, quand cela est possible, les deux types de géométrie (limbe et nadir) afin d'extraire le maximum d'information verticale sur l'abondance des constituants.

Les profils verticaux de température que nous avons obtenus par inversion (voir Partie II), sont indispensables pour inverser les profils verticaux d'abondance des molécules traces de l'atmosphère de Titan. Nous nous intéressons ici à C_2H_2 , C_2H_4 , C_2H_6 , CH_3C_2H , C_3H_8 , C_4H_2 , C_6H_6 , HCN , HC_3N et CO_2 . Dans cette partie, nous allons détailler les inversions des profils d'abondance de ces molécules à $54^\circ S$, $15^\circ S$, $54^\circ N$, $79^\circ N$. Dans un premier temps, nous décrirons l'algorithme d'inversion, le modèle spectroscopique et les observations utilisées. Puis, nous détaillerons les inversions des différents profils en les comparant aux différentes latitudes. Enfin, nous aborderons les inversions des profils verticaux d'opacité des aérosols.

Dans la Partie II Section 4.1, nous avons décrit comment, à partir de la solution de l'équation de transfert de rayonnement appliquée aux géométries nadir et limbe, il

était possible de déduire de l'information sur le profil vertical de température. Les Eq. 4.1 et 4.2 sont également valables pour déduire l'abondance des constituants, nous les rappellons ici.

Pour une observation au nadir, nous avons :

$$I_\nu(\mu, 0) = B_\nu(T, \tau_1)e^{-\tau_1/\mu} + \int_0^\infty B_\nu(T(z))WF(z, \nu)dz \quad (7.1)$$

avec $WF(z, \mu) = -\frac{d}{dz}e^{-\tau/\mu} = -\frac{dTr_\nu}{dz}$ où Tr_ν est la transmission à la fréquence ν . $Tr = \exp(-\int_0^s kqn ds)$ où n est la densité atmosphérique totale, q l'abondance du constituant, s la position le long de la ligne de visée et k le coefficient d'absorption.

Pour une observation au limbe, nous avons :

$$I_\nu = - \int_{-\infty}^{\ln(p_{tang})} B_\nu(T)WF(\ln p, \nu)d\ln p = - \int_{-\infty}^{\ln(p_{tan})} B_\nu(T) \frac{\partial}{\partial \ln p} \left[Tr - \frac{Tr^2(p_{tang})}{Tr} \right] d\ln p \quad (7.2)$$

où p_{tang} est la pression au point tangent. En infrarouge thermique moyen et lointain, $B_\nu(T)$ dépend fortement de la température. La transmission Tr_ν dépend principalement de la quantité d'absorbant le long de la ligne de visée et faiblement de la température.

Nous connaissons maintenant la distribution verticale de la température (et donc $B_\nu(T)$), et à partir des spectres observés, il est donc possible de remonter à l'abondance des constituants (incluse dans le terme de transmission Tr), à partir des mesures de I_ν .

7.1 Algorithme d'inversion des profils d'abondance

Pour déduire les profils d'abondance nous utilisons un algorithme d'inversion basé sur la méthode d'inversion linéaire contrainte. Celui-ci, écrit par Bruno Bézard en fortran 77, suit la méthode d'inversion décrite par Conrath et al. (1998) et Ignatiev et al. (1999) et est basé sur les mêmes principes que ceux de l'inversion de la température, où dans ce cas, la température est remplacée par le logarithme de l'abondance.

L'équation 4 de la Partie II devient :

$$\Delta I_i = \sum_{j=1}^N \frac{\partial I_i}{\partial \ln q_j} \Delta \ln q_j \quad (7.3)$$

où i représente l'indice sur les fréquences et j celui sur les niveaux atmosphériques. Les algorithmes d'inversion des abondances utilisent généralement le $\ln(q_j)$, plutôt que q_j pour éviter de converger éventuellement vers des valeurs négatives et parce que l'abondance peut varier de plusieurs ordres de grandeur le long d'un même profil vertical.

La matrice des kernels prend alors la forme

$$K_{ij} = \frac{\partial I_i}{\partial \ln q_j} \quad (7.4)$$

et

$$\Delta I = K \Delta \ln q \quad (7.5)$$

Pour inverser l'abondance d'une molécule, nous avons

$$\ln q_1 = \ln q_0 + \alpha S K^T C^{-1} \Delta I \quad (7.6)$$

où q_0 est l'abondance en entrée et q_1 est l'abondance en sortie de la première itération. Plusieurs itérations sont nécessaires avec en entrée, le profil d'abondance obtenu en sortie de l'itération précédente, pour assurer une bonne convergence de la solution. S est définie exactement de la même manière que dans la partie II : $S_{ij} = \exp[-(z_i - z_j)^2 / 2L^2]$ est la matrice de corrélation avec le paramètre L , exprimé en échelles de hauteur, qui contrôle le lissage vertical du profil inversé. Cette matrice gaussienne permet de filtrer la solution $\ln(q_j)$ verticalement, i.e. l'abondance inversée dans chaque couche j est corrélée avec les abondances des autres couches sur une distance qui vaut L échelles de hauteur.

La matrice C a la même forme que celle de l'inversion de la température, et est donnée ci-dessous.

L'algorithme peut prendre en compte simultanément plusieurs spectres au limbe et un spectre au nadir. Il peut inverser simultanément les profils verticaux de 3 absorbants. En notant a , b et c , ces absorbants, $\ln(q)$ de l'absorbant a est donné par l'équation (avec des équations similaires qui s'appliquent pour les absorbants b et c) :

$$\ln q_{n+1} = \ln q_n + \alpha S_a K_a^T C^{-1} \Delta I \quad (7.7)$$

où l'indice $n \geq 0$ fait référence au numéro de l'itération, avec q_0 le profil initial, q_1 , le profil en sortie de l'itération 1, etc. La matrice C est la même pour les trois absorbants et vaut :

$$C = \alpha K_a S_a K_a^T + \beta K_b S_b K_b^T + \gamma K_c S_c K_c^T + E \quad (7.8)$$

Les paramètres α , β , γ sont des scalaires qui contrôlent l'écart entre les profils d'abondance inversés et leurs profils initiaux respectifs. Plus ces scalaires sont petits et moins les profils inversés ont la possibilité de s'éloigner de leur profils initiaux.

Comme pour l'inversion du profil thermique, il faut effectuer plusieurs itérations avant que les profils verticaux des absorbants aient convergé, trois à quatre itérations suffisent généralement. Le profil vertical d'abondance est simplement obtenu par l'exponentiation de $\ln q_N$ où N est le nombre total d'itérations.

Dans la pratique, l'un des absorbants est toujours la brume d'aérosols, contraint dans l'algorithme par les points spectraux dans le continuum entre les bandes ou raies moléculaires. Il est alors important de choisir les gammes spectrales relativement étroites afin de ne pas avoir les émissions de plus de deux molécules dans la même gamme spectrale.

Au cours de ma thèse, j'ai ajouté dans l'algorithme d'inversion le calcul des barres d'erreur sur les profils d'abondance causées par le bruit spectral. Comme pour le calcul des barres d'erreur sur les profils thermiques, nous nous sommes inspirés de Conrath et al. (1998) et l'erreur sur le logarithme de l'abondance de l'absorbant a vaut :

$$\sigma_{\ln q_a}(j) = \sqrt{\sum_i (R_{a_{ij}})^2 E_{ii}} \quad (7.9)$$

avec $R_{a_{ij}} = S_a K_a^T C^{-1}$ où la matrice C est définie par l'équation 7.8. Les équations sont similaires pour les absorbants b et c .

7.2 Modèle atmosphérique et spectroscopique

Pour que le code puisse calculer des spectres comparables aux spectres observés, il faut qu'il tienne compte des paramètres physiques de l'atmosphère de Titan et des raies spectrales des molécules apparaissant sur le spectre. Le modèle atmosphérique utilisé ici est basiquement le même que celui utilisé pour l'inversion du profil de température (voir Partie II). La seule différence réside dans le profil de température qui est maintenant celui que nous avons inversé à partir de la bande ν_4 de CH_4 présente dans le FP4. De plus, comme le FP3 possède beaucoup plus de signatures de molécules que le FP4, il faut inclure les profils verticaux d'abondance d'un certain nombre d'absorbants qui varie suivant la gamme spectrale utilisée.

Dans l'intervalle spectral du FP3 (entre 600 et 1100 cm^{-1}), nous considérons les opacités des raies de C_2H_2 , C_2H_4 , C_2H_6 , C_3H_8 , $\text{CH}_3\text{C}_2\text{H}$, C_4H_2 , C_6H_6 , HCN , HC_3N et CO_2 . Les paramètres spectroscopiques de ces molécules sont issus de la banque de données GEISA 2003 (Jacquinet-Husson et al. 2005) à l'exception de HCN , C_4H_2 , $\text{CH}_3\text{C}_2\text{H}$, C_6H_6 , C_2H_6 et HC_3N .

Pour HCN , nous utilisons le fichier spectroscopique plus complet de HITRAN 2004 (Rothman et al. 2005), qui inclue les isotopes H^{13}CN et HC^{15}N et une mise à jour des intensités des raies (typiquement 15 % plus élevées que dans GEISA 2003). Les fichiers spectroscopiques utilisés pour C_4H_2 , $\text{CH}_3\text{C}_2\text{H}$, et C_6H_6 sont détaillés dans Vinatier et al. (2007). Concernant le C_2H_6 , nous utilisons un fichier spectral différent de celui utilisé par Vinatier et al. (2007). Ce nouveau fichier a été fourni par Vander Auwera (2007) à l'équipe CIRS. Cette nouvelle liste de raies inclue les raies de la bande $3\nu_4$ centrée à 791 cm^{-1} , de la bande ν_9 à 821 cm^{-1} et de deux bandes chaudes associées ($\nu_9 + \nu_4 - \nu_4$ et $\nu_9 + 2\nu_4 - 2\nu_4$), ce qui améliore grandement la modélisation des spectres observés. Pour le HC_3N , nous utilisons maintenant le fichier spectroscopique qui nous a été fourni par Antoine Jolly et Yves Bénéilan (Jolly et al., 2007) du Laboratoire Inter-Universitaire des Systèmes Atmosphériques, qui nous permet d'améliorer de façon très nette la modélisation de la bande ν_5 avec une bande chaude qui se superpose à l'aile de la branche Q aux grands nombres d'onde et qui n'est pas prise en compte dans GEISA 2003 et HITRAN 2004.

7.3 Observations utilisées

Les observations que j'ai utilisées ont été acquises par le FP3 en même temps que celles enregistrées par le FP4 (voir Partie II, tous les plans focaux acquièrent des données simultanément). Ces spectres ont une résolution spectrale de 0.5 cm^{-1} . Les latitudes des spectres acquis par le FP3 et le FP4 diffèrent légèrement, et il en est de même pour les altitudes des spectres au limbe. La Table 7.1 liste les observations utilisées.

Les profils d'abondance aux trois latitudes moyennes ont été inversés à partir de spectres au nadir et au limbe, alors que ceux à 79°N l'ont été à partir de spectres au

| Sélections des spectres du FP3 moyennés au limbe | | | | | |
|--|------|-------|----------------------|--|---------------------------------------|
| survol | lat. | long. | résol. vert. (km) | altitude (km) | nombre de spectres moyennés |
| T15 | 54°S | 280°E | ~ 35 km | 194, 227, 252, 286, 327, 368, 409, 450, 491 | 57, 57, 47, 69, 37 34, 36, 34, 35 |
| Tb | 15°S | 260°E | ~ 30 km | 212, 248, 284, 321, 355, 391, 427, 463 | 26, 27, 26, 28, 26, 27, 26, 27 |
| T10 | 54°N | 66°E | ~ 33km | 219, 255, 291, 327, 365, 404, 442, 481, 519 | 48, 50, 49, 22, 22, 22, 22, 22, 22 |
| T3 | 79°N | 80°E | ~ 50 km | 171, 205, 254, 310, 365, 421, 462, 501 | 29, 29, 45, 40, 46, 37, 49, 71 |

| Sélections des spectres du FP3 moyennés au nadir | | | | | |
|--|------|-------|---------------------|------------------|--------------------------------|
| survol | lat. | long. | angle d'émission | altitude (km) | nombre de spectres moyennés |
| T15 | 55°S | 122°E | 56° | - | 82 |
| Tb | 12°S | 22°E | 37° | - | 74 |
| T10 | 55°N | 114°E | 55° | - | 14 |

TAB. 7.1: Caractéristiques des spectres enregistrés par le FP3 moyennés au limbe et au nadir utilisés pour les inversions des profils d'abondance à 54°S, 15°S, 54°N et 79°N. La résolution spectrale vaut 0.5 cm^{-1} . Ces spectres sont tous issus de la version 2.0.1 de la base de données de CIRS.

limbe uniquement. Les altitudes données dans la Table 7.1 sont les altitudes nominales correspondant à la base de données de CIRS. Or pour inverser les profils d'abondance, j'ai appliqué une correction en altitude que j'ai déterminée à partir de l'émission de la ν_4 de CH_4 (voir Partie II, Section 5.1.2). Ces corrections valent +30 km à 13°S, 0 km à 54°S, -25 km à 54°N et -5 km à 79°N. J'applique les mêmes valeurs de décalage pour les FP3 car cette correction prend à la fois en compte les erreurs de pointage (égales pour les plans focaux FP4 et FP3) et le fait que la grille en altitude, déterminée à partir de l'équilibre hydrostatique, dépende du profil de température à basse altitude.

La Fig. 7.1 montre un spectre enregistré par le FP3 de CIRS à 54°S avec une visée au limbe à 200 km. On y voit très nettement les émissions dues aux bandes de C_2H_2 , C_2H_4 , C_2H_6 , $\text{CH}_3\text{C}_2\text{H}$, C_3H_8 , C_4H_2 , C_6H_6 , HCN , HC_3N et CO_2 .

Dans les Sections suivantes, nous allons détailler les résultats concernant les profils d'abondance pour toutes les molécules citées ci-dessus à 54°S, 15°S, 54°N et 79°N.

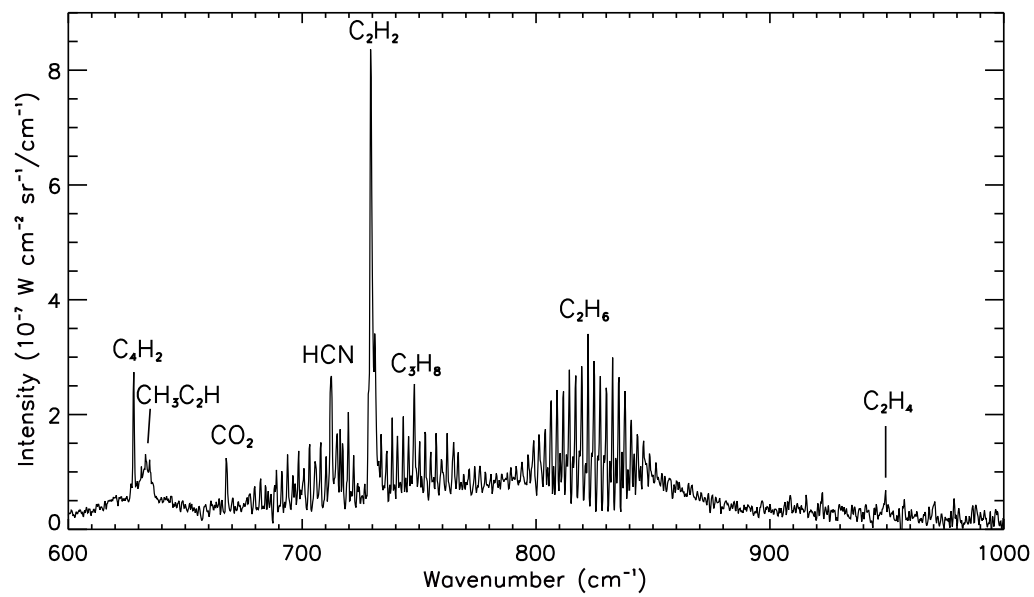


FIG. 7.1: Exemple de spectre enregistré par le FP3 à 54°S et au limbe avec une altitude du point tangent de 200 km.

CHAPITRE 8

Profils d'abondance inversés à 54°S, 15°S, 54°N et 79°N : résultats

Sommaire

| | | |
|------------|---|-----------|
| 8.1 | L'acétylène (C₂H₂) et le cyanure d'hydrogène (HCN) | 81 |
| 8.1.1 | Correction du décalage spectral | 82 |
| 8.1.2 | Lissage vertical | 83 |
| 8.1.3 | Spectres modélisés et kernels | 85 |
| 8.1.4 | Profils d'abondances inversés de C ₂ H ₂ et HCN | 89 |
| 8.2 | L'éthane (C₂H₆) | 91 |
| 8.3 | Le propane (C₃H₈) | 92 |
| 8.4 | L'éthylène (C₂H₄) | 94 |
| 8.5 | Le diacétylène (C₄H₂) et le méthylacétylène (CH₃C₂H) | 95 |
| 8.6 | Le cyanoacétylène (HC₃N), le dioxyde de carbone (CO₂) et le benzène (C₆H₆) | 97 |

Nous décrivons les différentes inversions en les regroupant par gamme spectrale inversée (qui correspond à une ou deux molécules). Les profils verticaux d'abondance seront présentés simultanément à 54°S, 15°S, 54°N et 79°N afin de mettre en évidence les variations latitudinales. Je présente ici les résultats correspondant à la version 2.0.1 des observations, le même travail avait été réalisé pour les versions 1.7 et 2.0 de ces spectres. Le papier Vinatier et al. 2007 utilise les données de la version 2.0, ce qui est présenté dans cette thèse constitue la dernière mise à jour des profils verticaux d'abondance.

8.1 L'acétylène (C₂H₂) et le cyanure d'hydrogène (HCN)

L'émission la plus intense de la gamme spectrale du FP3 est la branche Q de l'acétylène, située à 729 cm⁻¹. De plus, ses branches P et R, très nettement visibles, s'étendent de 650 à 800 cm⁻¹. Ces deux branches se superposent à l'émission d'autres molécules comme le HCN, le cyanoacétylène (HC₃N), le dioxyde de carbone (CO₂) le propane (C₃H₈) et un certain nombre d'isotopes comme H¹³CN, HC¹⁵N (Vinatier et al. 2007), ¹³C¹²CH₂ (Nixon et al., 2007) et C₂HD (Coustenis et al. 2007), qui ont été

découverts grâce aux données enregistrées par CIRS. Il est donc nécessaire d'inverser en premier le profil d'abondance de C_2H_2 , afin de l'utiliser ensuite pour reproduire les autres bandes d'émission qui sont dans la même gamme spectrale que les branches P et R de C_2H_2 .

Le premier intervalle spectral que j'inverse est compris entre 705 et 740 cm^{-1} , il inclue une partie de la branche P de C_2H_2 ainsi que la branche Q, et inclue également la branche Q de la ν_2 de HCN à 713 cm^{-1} . J'inverse les profils d'abondance de ces deux molécules simultanément avec le profil d'opacité des aérosols afin de reproduire correctement le continuum.

Pour chaque latitude, je commence par effectuer des inversions avec des profils de HCN et C_2H_2 constants avec l'altitude en entrée de l'algorithme. Ces profils initiaux ont des abondances qui varient d'un facteur 10 pour chaque molécule. Je compare ensuite les profils obtenus en sortie de l'inversion les uns avec les autres. Pour les niveaux sondés par les émissions spectrales, les profils inversés sont bien contraints et convergent vers les mêmes valeurs d'abondance sur une certaine gamme d'altitude. Pour les niveaux non contraints par les observations, les profils divergent les uns des autres en se rapprochant chacun de leur profils initiaux respectifs. La Fig. 8.1 donne l'exemple de ce test pour l'inversion de HCN à 54°S. Les profils initiaux d'abondance sont constants avec l'altitude et tels que $q_{HCN} = 1 \times 10^{-8}$ (tirets rouges), $q_{HCN} = 1 \times 10^{-7}$ (tirets noirs) et $q_{HCN} = 1 \times 10^{-6}$ (tirets bleus) et les profils inversés correspondants sont représentés en traits pleins (avec les mêmes couleurs que les profils initiaux). Nous pouvons noter que dans les trois cas, les profils d'abondance inversés convergent très nettement vers un profil d'abondance qui n'est pas constant avec l'altitude et varie entre 2×10^{-8} à 10 mbar et 4×10^{-7} à 0.2 mbar et est constant au-dessus, jusqu'au niveau 0.05 mbar. Au-dessus de ce niveau, les trois profils inversés divergent, et ont tendance à converger vers leurs profils initiaux respectifs. En effet, à ces altitudes élevées, le rapport signal-à-bruit est moins bon, et les profils d'abondance solution sont moins bien contraints. Ce premier test nous donne une idée assez précise de la forme du profil vertical d'abondance de HCN et de la gamme d'altitudes sur laquelle l'abondance est bien contrainte.

Dans une seconde étape, j'effectue une inversion à partir d'un profil d'abondance en entrée qui correspond approximativement à celui vers lequel les différents profils inversés ont convergé.

8.1.1 Correction du décalage spectral

Il peut parfois exister un léger décalage spectral (de l'ordre de 0.05 cm^{-1}) d'origine instrumental entre les nombres d'onde des raies tabulées et ceux observés. Ce léger décalage est repérable sur les résidus des spectres des émissions des molécules dont les branches Q sont les plus piquées comme celle de C_2H_2 . Sur les résidus, un tel décalage apparaît comme une signature très piquée négative (ou positive), directement suivie d'une signature positive (ou négative) (voir la Fig. 8.2, (a)). Afin de déterminer de la façon la plus correcte les profils d'abondance, il est nécessaire de corriger ce décalage spectral. La Fig. 8.2 montre des exemples de résidus entre les spectres calculés et observés à 54°N sans correction du décalage spectral (a) et en appliquant une correction de 0.05 cm^{-1} (b) qui permet d'obtenir des spectres calculés reproduisant mieux les

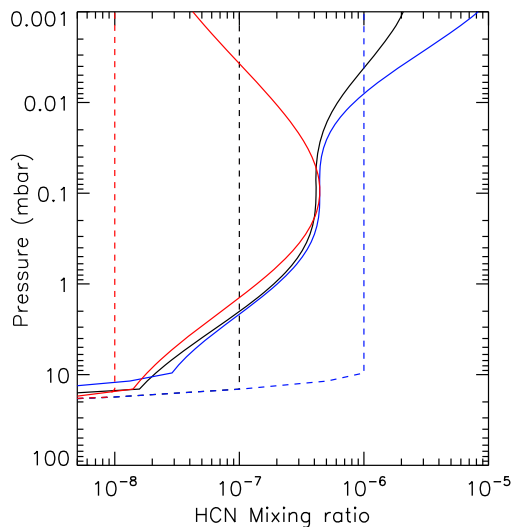


FIG. 8.1: Comparaison des profils inversés de HCN à 54°S à partir de 3 profils initiaux d'abondance constants avec l'altitude et égaux à 1×10^{-8} (tirets rouges), 1×10^{-7} (tirets noirs) et 1×10^{-6} (tirets bleus). Les profils inversés de HCN correspondants sont représentés en traits pleins.

spectres observés. Cette correction consiste en un décalage spectral de tout le spectre calculé de 0.05 cm^{-1} afin qu'il se superpose parfaitement au spectre observé.

A 54°S, une correction similaire permet de reproduire les données, à 79°N, elle vaut 0.02 cm^{-1} et à 15°S, elle est nulle. J'ai déterminé ces valeurs en appliquant différentes valeurs de décalage aux spectres calculés et en comparant les résidus rms obtenus. La correction correspondant aux valeurs de rms les plus faibles est celle que j'applique pour toutes les autres gammes spectrales que j'inverse car on ne s'attend pas à ce que cette correction varie avec la fréquence. La Fig. 8.3, où sont reportés les profils d'abondance inversés à 54°N de C_2H_2 et HCN sans (rouge) et avec (noir) correction, montre l'effet de ce décalage qui agit surtout à basse altitude, là où le rapport signal-à-bruit des spectres est élevé (la signature spectrale est alors bien dessinée), et il semble avoir un effet plus important là où le profil n'est pas contraint. Comme nous le verrons plus loin, cet écart entre les profils inversés (dans la gamme d'altitude où ils sont contraints par les observations) ne dépasse pas l'amplitude des barres d'erreur que nous calculons.

8.1.2 Lissage vertical

Un des paramètres d'entrée de l'algorithme est la longueur de corrélation L (exprimée en échelles de hauteur) sur laquelle les profils verticaux inversés sont lissés. La valeur minimale de L doit correspondre à la résolution spatiale de l'observation. Le fait de considérer que les abondances inversées soient décorréliées sur une hauteur inférieure à la résolution n'aurait pas de sens car cela supposerait qu'il y a de l'information sur une gamme d'altitudes plus restreinte que celle résolue par les observations. Pour les latitudes 54°S et 15°S, dont les profils thermiques sont comparables (voir Fig. 5.5, Partie II), l'échelle de hauteur $H = RT/mg$ (avec $R=8.31 \text{ J.mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$, $m=27 \text{ g.mol}^{-1}$ et $g = 1.35 \text{ m.s}^{-2}$), varie entre 34 km ($T=150 \text{ K}$) et 41 km ($T=180 \text{ K}$). A haute latitude nord, elle varie entre 34 km ($T=150 \text{ K}$) et 46 km ($T=200 \text{ K}$). Rappelons que les résolutions verticales des observations que nous utilisons sont comprises entre 30 et 35 km pour les latitudes 54°S, 15°S et 54°N, et 50 km à 79°N. J'applique généralement une

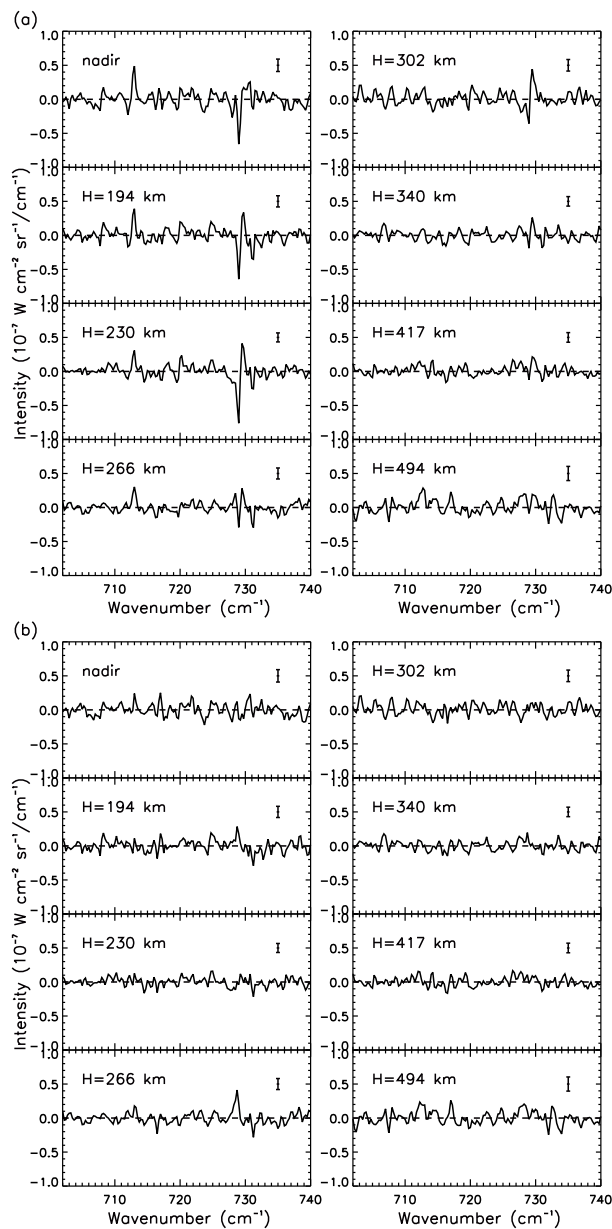


FIG. 8.2: Effet du décalage spectral des spectres observés sur les résidus entre les spectres calculés et observés. (a) Résidus entre les spectres calculés et observés à 54°N sans corriger le décalage spectral des spectres observés. Autour de 713 et 729 cm^{-1} apparaissent des signatures dépassant largement le niveau de bruit qui sont liées au fait que les spectres calculés et observés sont légèrement décalés en fréquence. (b) Résidus des spectres observés et calculés avec correction du décalage spectral. Seul le bruit est visible.

valeur $L = 1$ ou $1.5 \times H$, les points du profil d'abondance inversé sont alors corrélés sur une gamme d'altitude supérieure à la résolution verticale des observations. Cependant, pour certaines observations, $L=1$ ou 1.5 permet une bonne reproduction des données mais les profils verticaux d'abondance inversés présentent des oscillations dont la réalité est discutable, et qui correspondraient plutôt à des artefacts de l'inversion. Pour illustrer ce fait, la Fig. 8.4 (en haut) montre les profils d'abondance de C_2H_2 et de HCN inversés à 54°S avec $L=1.5$ (noir) et $L=2.5$ (rouge) échelles de hauteur.

La différence est surtout visible sur le profil d'abondance de HCN qui présente

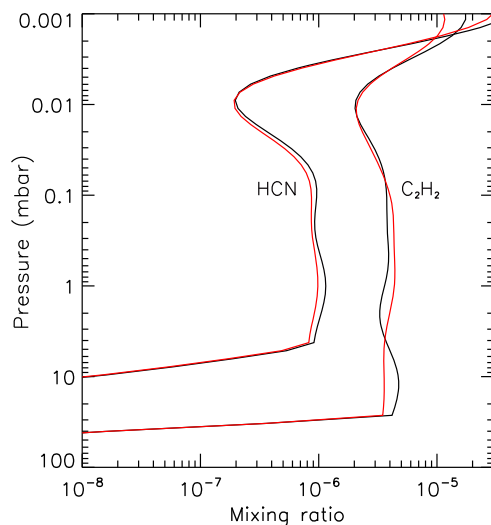


FIG. 8.3: Effet du décalage spectral des spectres observés sur les inversions de HCN et C_2H_2 à $54^\circ N$. En noir : Profils d'abondance de HCN et C_2H_2 inversés sans correction du décalage spectral. En rouge : Profils de HCN et C_2H_2 inversés en corrigeant les spectres calculés du décalage spectral instrumental.

des oscillations avec un lissage tel que $L=1.5$, celles-ci sont grandement réduites avec $L=2.5$. La Fig. 8.4 (en bas), qui compare les intensités à 729.25 cm^{-1} (branche Q de C_2H_2) et 712.25 cm^{-1} (branche Q de HCN), montre que la modélisation des spectres n'est pas sensiblement dégradée en appliquant une longueur de corrélation supérieure. Les oscillations, qui sont plus marquées pour HCN que pour C_2H_2 , s'expliquent probablement par le fait que le rapport signal-à-bruit de HCN est moins élevé que celui de C_2H_2 . L'algorithme a alors tendance à reproduire le bruit qui se superpose à l'émission de la branche Q de HCN.

Les lissages verticaux appliqués diffèrent d'une latitude à une autre et d'une molécule à l'autre suivant le rapport signal-à-bruit. A $54^\circ S$, j'ai généralement appliqué une longueur de corrélation égale à 2.5 échelles de hauteur (H), à $15^\circ S$ $L=3\times H$, à $54^\circ N$ $L=1\times H$ et à $79^\circ N$ $L=1.5\times H$.

8.1.3 Spectres modélisés et kernels

Je ne présenterai ici que la comparaison entre les spectres observés et calculés à $54^\circ N$, qui correspondent aux résidus (b) de la Fig. 8.2. Les spectres observés sont représentés en tirets noirs sur la Fig. 8.5, et les spectres synthétiques en rouge. Je présenterai également les kernels correspondant aux émissions de C_2H_2 et HCN à $54^\circ S$, $54^\circ N$ et $79^\circ N$ afin de mettre en évidence leur évolution vers les hautes latitudes nord (les kernels des émissions à $15^\circ S$ sont similaires à ceux à $54^\circ S$).

La Fig. 8.6 montre les kernels correspondant à la branche Q de HCN calculés à 712.25 cm^{-1} (graphes de gauche) et ceux de C_2H_2 calculés à 729.25 cm^{-1} (graphes de droite) dans la branche Q (traits pleins) et à 682 cm^{-1} dans la branche P (tirets). Ils sont donnés pour les trois latitudes $54^\circ S$ (a), $54^\circ N$ (b) et $79^\circ N$ (c).

Nous allons d'abord nous intéresser au HCN. Des spectres au nadir ont été utilisés

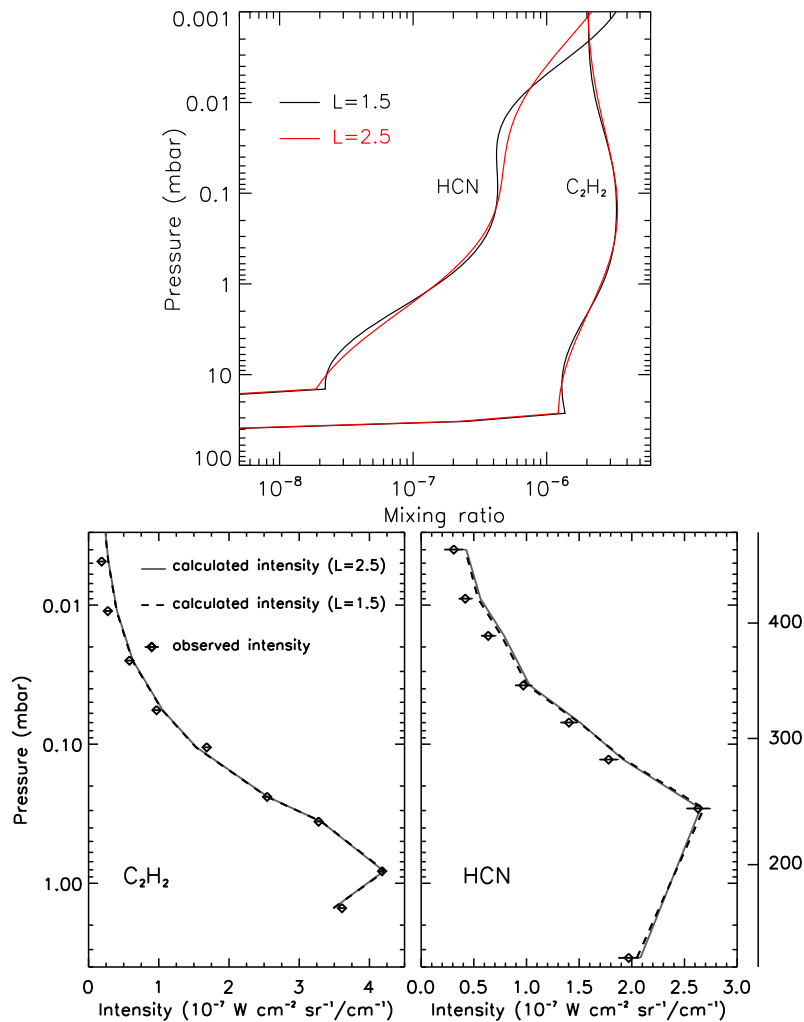


FIG. 8.4: En haut : Profils inversés de C₂H₂ et HCN à 54°S avec des longueurs de corrélation différentes : avec $L=1.5$ échelles de hauteur (noir) et 2.5 échelles de hauteur (en rouge). En bas : Profils d'intensité observés à 54°S à 729.25 cm⁻¹ (branche Q de C₂H₂) et 712.25 cm⁻¹ (branche Q de HCN) représentés par des losanges noirs. Ils sont comparés aux profils calculés avec une longueur de corrélation égale à 1.5 échelles de hauteur (tirets noirs) et avec $L=2.5$ (traits pleins gris). Les barres d'erreur sont données pour le niveau $\pm 1\sigma$.

pour les inversions des profils à 54°S et 54°N. A 54°S, le kernel du spectre nadir présente un maximum à 12 mbar (94 km) et la largeur à mi-hauteur de ce kernel nous indique que l'émission sonde jusqu'à 1 mbar (186 km). A 54°N, il pique à 4 mbar (123 km) et de l'information est présente entre 6 mbar (110 km) et 12 mbar (165 km) (en utilisant la largeur à mi-hauteur). A 54°N, l'émission nadir de HCN provient donc d'une région plus élevée que celle à 54°S. Ce phénomène s'explique par le fait que la température à 54°N est une dizaine de degrés plus faible qu'à 54°S, l'émission thermique dans l'hémisphère nord provient donc d'une altitude plus élevée, là où la température est plus élevée.

Un point très important à prendre en compte concerne les niveaux pour lesquels les profils de température à ces deux latitudes sont contraints. A 54°S, le profil thermique est contraint au-dessus du niveau 8 mbar (107 km) alors qu'à 54°N, il est contraint au-dessus du niveau de 1.5 mbar (161 km) (voir Partie II, Section 5.1.3). Comme les profils thermiques ne sont pas contraints sous ces deux niveaux, il n'est pas possible de

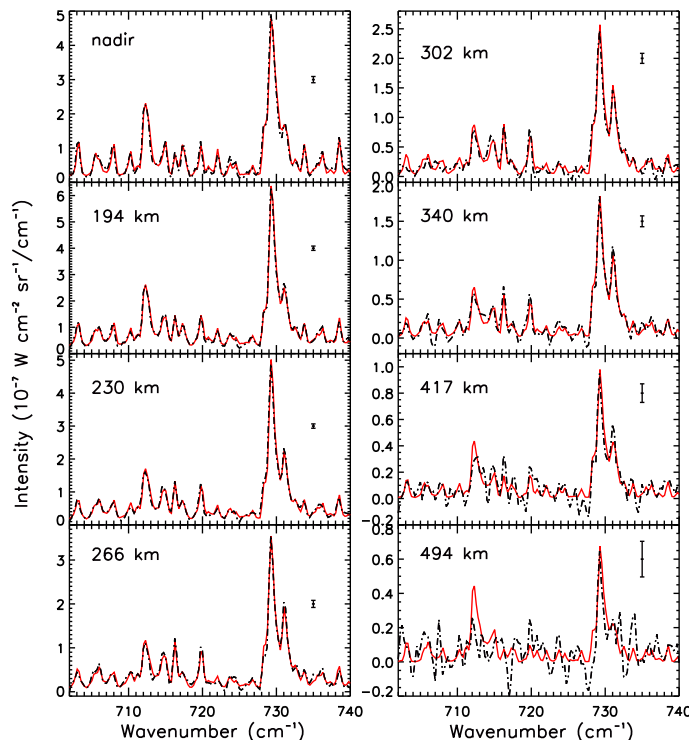


FIG. 8.5: Comparaison entre les spectres observés (tirets noirs) et les spectres calculés (traits pleins rouges) à 54°N entre 705 et 740 cm^{-1} pour le nadir et 7 limbes. Les altitudes indiquées prennent en compte la correction en altitude déterminée à partir de la bande ν_4 de CH_4 (voir Partie II, Section 5.1.2). La branche Q de HCN est visible à 713 cm^{-1} et la branche Q de C_2H_2 à 729 cm^{-1} . Les autres signatures spectrales visibles sont principalement dues aux branches P et R de la bande de C_2H_2 . Le rapport signal-à-bruit décroît avec l'altitude car la densité atmosphérique décroît.

déduire une information fiable sur l'abondance de HCN bien que les kernels de HCN sondent des niveaux plus bas. Les limbes sondent les gammes de pressions 0.8 - 0.002 mbar (198-498 km) à 54°S , et 0.5 - 0.007 mbar (197 - 415 km) 54°N . A 54°N à 494 km, l'émission de la branche Q de HCN est noyée dans le bruit (voir Fig. 8.5), alors qu'à 54°S , la radiance de HCN dépasse le niveau $3\text{-}\sigma$.

A 79°N , nous avons utilisé 8 spectres au limbe qui sondent entre 0.9 mbar (167 km) et 0.0017 mbar (499 km). Tous les limbes sont optiquement minces et sondent approximativement les altitudes des points tangents. Le profil thermique à 79°N (voir Partie II, Section 5.2.2) n'est pas contraint sous le niveau 1 mbar.

Enfin, les kernels correspondant à l'émission nadir de HCN à 15°S provient de la région 14 - 0.7 mbar (87 - 206 km) avec un maximum de contribution à 3.5 mbar (137 km). Les 8 spectres au limbe utilisés pour l'inversion sont optiquement minces et sondent des niveaux compris entre 0.3 mbar (244 km) et 0.002 mbar (493 km).

Intéressons-nous maintenant au C_2H_2 dont les kernels sont représentés sur les graphes de droite de la Fig. 8.6. A 54°S et 54°N , nous avons tracé les kernels calculés à 729.25 cm^{-1} (branche Q, représentés en traits pleins) et 682 cm^{-1} (branche P, représentés en tirets). A 729.25 cm^{-1} , le kernel à 54°S sonde la gamme 5 - 0.3 mbar (120 - 242 km) avec un maximum à 1.5 mbar (169 km); à 54°N , il sonde une gamme plus élevée en altitude comprise entre 1.8 et 0.1 mbar (150 - 270 km). Les kernels à 682 cm^{-1} sondent des niveaux plus bas (voir Fig.8.6, tirets), car cette fréquence correspond à un multiplet peu intense de la branche P de C_2H_2 qui est donc moins opaque

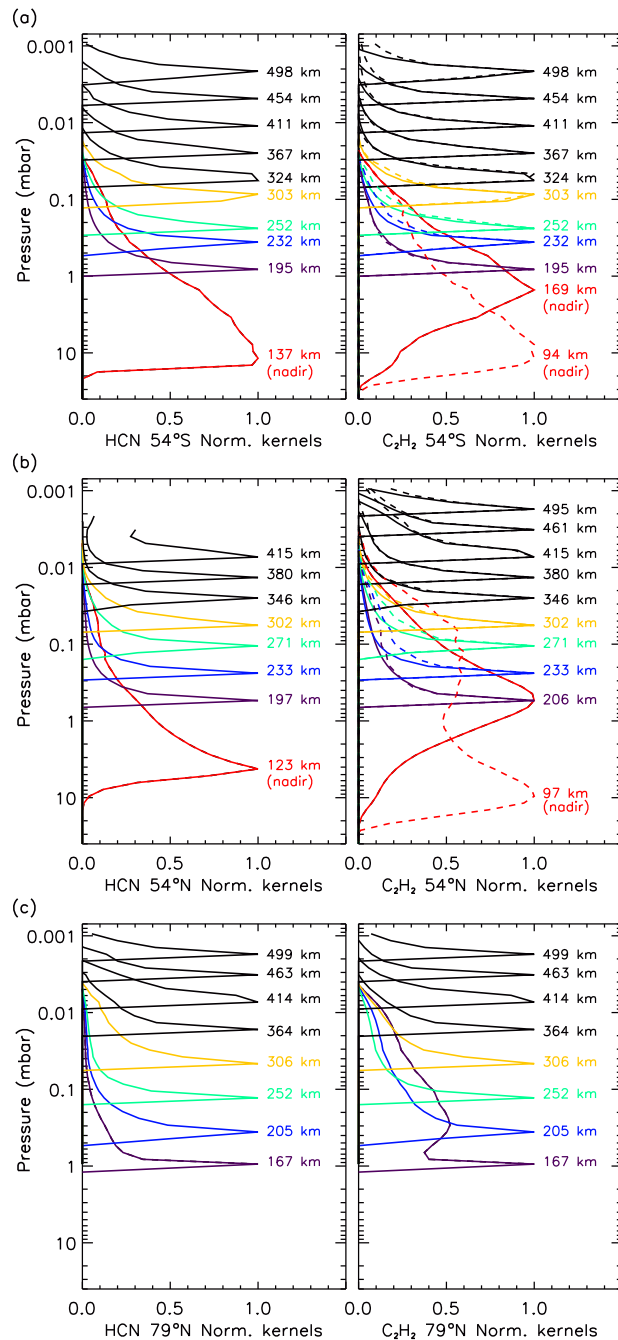


FIG. 8.6: Kernels correspondant aux émissions de C_2H_2 à 729.25 cm^{-1} (à droite, traits pleins) et 712.25 cm^{-1} (à gauche, traits pleins) à 54°S (a), 54°N (b) et 79°N (c). Les kernels correspondant aux émissions nadir sont représentés en rouge. Les tirets des graphes de droite (a) et (b) donnent les kernels calculés à 682 cm^{-1} , dans la branche P de C_2H_2 .

que la branche Q. Cependant, étant donné que les profils de température ne sont pas contraints sous les niveaux 8 mbar à 54°S et 1.5 mbar à 54°N , il existe une très grande incertitude sur l'abondance de l'acétylène sous ces deux niveaux.

Les émissions à 729.25 cm^{-1} et 682 cm^{-1} des spectres au limbe des trois latitudes sont optiquement minces et sondent aux niveaux des points tangents. Dans les trois cas, les gammes d'altitudes sondées sont comparables (entre 1 et 0.002 mbar).

Enfin, à 15°S , le kernel correspondant à l'émission nadir est très similaire à celui à

54°S et les limbes sondent des niveaux compris entre 1.5 mbar (170 km) et 0.002 mbar (496 km).

8.1.4 Profils d'abondances inversés de C_2H_2 et HCN

La Fig. 8.14 donne les profils de C_2H_2 (en haut, à gauche) et HCN (en haut, à droite) inversés à 54°S (noir), 15°S (rouge), 54°N (bleu), et 79°N (orange).

Les barres d'erreur de chaque profil prennent en compte trois incertitudes, celle causée par le bruit, l'incertitude sur la correction en altitude et les incertitudes du profil de température. L'erreur due au bruit est calculée à partir de la matrice de covariance de la solution (voir Section 7.1, Eq. 7.9).

L'erreur sur le profil de température affecte également les abondances inversées. Pour chaque molécule, j'effectue des inversions des profils d'abondance en incorporant successivement au modèle atmosphérique le profil de température maximal et minimal, qui sont définis par les erreurs sur la température (voir partie II, Fig. 6.1).

La dernière erreur à être prise en compte est celle causée par l'incertitude sur la détermination de la correction en altitude (voir Partie II, Section 5.1.2) qui vaut ± 7 km. J'ai inversé successivement les profils d'abondance de HCN et C_2H_2 avec les altitudes des spectres calculés décalées de $+7$ km et -7 km et en utilisant les profils de température inversés pour ces mêmes décalages. Ces incertitudes génèrent les erreurs les plus importantes sur les abondances. Comme ces trois erreurs sont indépendantes à un niveau donné, nous les sommions quadratiquement :

$$\sigma_q = \sqrt{\sigma_{q_{shift}}^2 + \sigma_{q_{bruit}}^2 + \sigma_{q_T}^2} \quad (8.1)$$

où $\sigma_{q_{bruit}}$ est l'erreur due au bruit, $\sigma_{q_{shift}}$ celle due à l'incertitude sur la correction en altitude et σ_{q_T} celle sur le profil de température.

D'après les modèles photochimiques, les molécules que nous étudions ici se forment dans la haute atmosphère, et il est attendu que leurs profils verticaux d'abondance croissent avec l'altitude. En effet, une fois formées, elles diffusent vers les basses altitudes, peuvent être impliquées dans des réactions chimiques, et sont finalement perdues par condensation dans la basse stratosphère (sauf C_2H_4). Les minima d'abondance que nous obtenons pour le C_2H_2 et le HCN à 54°N vers 0.01 mbar sont très surprenants. Un minimum d'abondance de C_2H_2 est également observé à 79°N vers 0.07 mbar.

Il est important de vérifier la réalité de ces minima. Prenons les cas de C_2H_2 et HCN à 54°N. La Fig. 8.7 représente la comparaison entre les profils verticaux d'intensités observées dans les branches Q de HCN et C_2H_2 à 54°N (losanges avec les barres d'erreurs à $1-\sigma$), comparées aux intensités calculées (en tirets) de ces mêmes branches avec les profils verticaux d'abondance représentées en bleu sur la Fig. 8.14 (en haut). Ces intensités calculées reproduisent de façon satisfaisante les intensités observées et sont le plus souvent comprises dans les barres d'erreur à $1-\sigma$. En revanche, si nous considérons un profil d'abondance de C_2H_2 constant avec l'altitude et égal à 4.3×10^{-6} (abondance moyenne des trois points les plus bas du profil de la Fig. 8.14), alors les intensités calculées (représentées en trait plein gris) ne reproduisent pas du tout les données au-dessus du niveau 0.3 mbar. Les intensités calculées sont alors bien supérieures (au-delà de $4-\sigma$ pour les points à 0.06 mbar et 0.025 mbar) aux intensités

observées. La décroissance de l'abondance avec l'altitude est donc indispensable pour reproduire les intensités observées. Le cas de HCN est similaire à celui de C₂H₂ (voir Fig. 8.14, en haut à gauche).

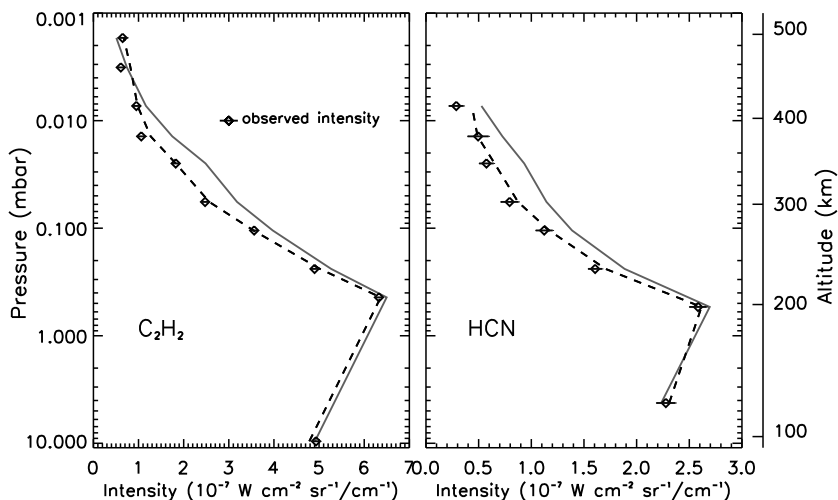


FIG. 8.7: A gauche : Profils d'intensité de C₂H₂ à 729.25 cm⁻¹ observé (losanges) à 54°N. Il est comparé d'une part au profil d'intensité calculé avec un profil vertical d'abondance de C₂H₂ constant avec l'altitude tel que $q_{C_2H_2} = 4.3 \times 10^{-6}$, représenté en traits pleins gris, et d'autre part au profil d'intensité (tirets) correspondant au profil vertical d'abondance de C₂H₂ de la Fig. 8.14 (en haut à gauche, en bleu). A droite : Profils d'intensité de HCN à 712.25 cm⁻¹ observé (losanges) à 54°N. Il est comparé d'une part au profil d'intensité calculé avec un profil vertical d'abondance de HCN constant avec l'altitude tel que $q_{HCN} = 9.5 \times 10^{-7}$, représenté en traits pleins gris, et d'autre part au profil d'intensité (tirets) correspondant au profil vertical d'abondance de HCN de la Fig. 8.14 (en haut à droite, en bleu).

Une dernière remarque porte sur le fait qu'à haute latitude nord, les abondances à basse altitude ne sont pas forcément les abondances de la latitude du point tangent. En effet, nous avons vu dans la Partie II qu'à 82°N, le limbe le plus bas du profil de température, optiquement épais, sonde un point le long de la ligne de visée qui est plus en avant que le point tangent et situé à une latitude de 65°N (du fait de la géométrie de l'observation). Les profils d'abondance à 79°N subissent le même effet, c'est-à-dire que le profil solution est une sorte de combinaison du profil d'abondance à 65°N à basse altitude et celui à 79°N à haute altitude.

Nous discuterons de la forme et de l'évolution en latitude des profils verticaux d'abondance dans la Section 10.2.

Les inversions des abondances des molécules suivantes seront moins détaillées, j'ai appliqué dans tous les cas la même démarche pour converger vers les profils d'abondance qui semblent constituer les meilleures solutions. Je donnerai uniquement les grandes lignes et les paramètres utilisés pour chaque molécule.

8.2 L'éthane (C_2H_6)

La bande ν_9 de l'éthane, centrée à 822 cm^{-1} , est la deuxième signature spectrale la plus intense du FP3. Elle s'étend principalement de 790 à 850 cm^{-1} et est très nettement visible sur les spectres de CIRS (voir Fig. 8.8). Pour obtenir les profils d'abondance de C_2H_6 , j'inverse la gamme spectrale $803 - 840\text{ cm}^{-1}$.

Comme mentionné précédemment, la nouvelle liste de raies fournie par Vander Auwera (2007) permet de bien mieux reproduire la bande de C_2H_6 que le fichier spectroscopique de GEISA 2003 (voir Vinatier et al. 2007 en annexe A, pour un exemple de la modélisation des spectres observés avec le fichier issu de GEISA).

La Fig. 8.8 (gauche) montre la modélisation de la bande de C_2H_6 entre 804 et 840 cm^{-1} à 54°S pour le spectre au nadir et 4 spectres au limbe. Les résidus correspondants sont représentés sur la même figure à droite.

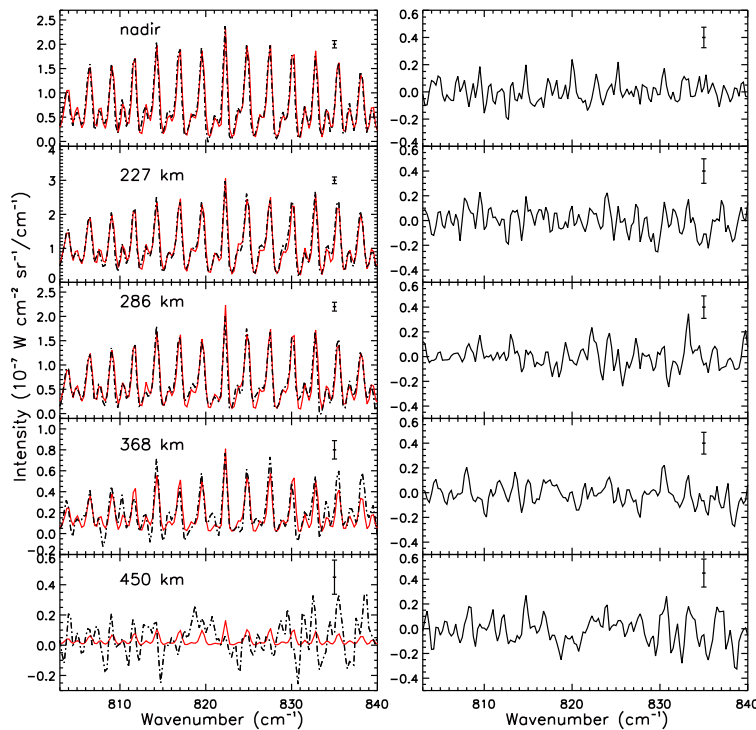


FIG. 8.8: A gauche : Comparaison de l'émission de C_2H_6 observée à 54°S (tirets noirs) avec celle calculée (traits pleins rouges) au nadir et au limbe à 227, 286, 368 et 450 km. Les barres d'erreur correspondent aux écarts à $\pm 1\text{-}\sigma$. A droite : Résidus correspondants (radiance calculée moins radiance observée). Les barres d'erreur correspondent aux écarts à $\pm 1\text{-}\sigma$.

A 54°S le lissage vertical appliqué vaut 2 échelles de hauteur; à 15°S , il vaut 3 échelles de hauteur; à 54°N , $L=1.3\times H$ et à 79°N , $L=1.5\times H$.

La Table 8.1 donne les gammes d'altitudes sondées par les kernels correspondant aux émissions nadir à 819.75 cm^{-1} . La pression au niveau du maximum du kernel est indiquée, ainsi que les pressions p_{max} et p_{min} qui font respectivement référence aux pressions maximales et minimales données par la largeur à mi-hauteur du kernel. Comme pour HCN et C_2H_2 , le kernel correspondant à l'émission nadir à 54°N sonde une gamme d'altitude plus élevée que celle sondée à 54°S et 15°S en raison de la forte

diminution de température stratosphérique dans l'hémisphère nord.

| Caractéristiques des kernels nadir de l'émission de C ₂ H ₆ à 819.75 cm ⁻¹ | | | |
|---|--------------------|------------------|---------------------|
| | maximum | P _{max} | P _{min} |
| 54°S | 1.5 mbar (169 km) | 14 mbar (87 km) | 0.16 mbar (272 km) |
| 15°S | 1.5 mbar (170 km) | 14 mbar (87 km) | 0.29 mbar (244 km) |
| 54°N | 0.36 mbar (215 km) | 9.6 mbar (97 km) | 0.057 mbar (302 km) |

TAB. 8.1: Caractéristiques des kernels au nadir correspondant aux émissions à 819.75 cm⁻¹ à 54°S, 15°S et 54°N.

| Niveaux des maxima des kernels des émissions au limbe de C ₂ H ₆ à 819.75 cm ⁻¹ | | | |
|--|---------------------|---------------------|---------------------|
| 54°S | 15°S | 54°N | 79°N |
| 0.82 mbar (195 km) | 0.29 mbar (244 km) | 0.54 mbar (197 km) | 0.94 mbar (167 km) |
| 0.36 mbar (233 km) | 0.13 mbar (284 km) | 0.24 mbar (232 km) | 0.36 mbar (205 km) |
| 0.24 mbar (252 km) | 0.07 mbar (315 km) | 0.11 mbar (271 km) | 0.13 mbar (252 km) |
| 0.1 mbar (293 km) | 0.038 mbar (347 km) | 0.057 mbar (302 km) | 0.046 mbar (306 km) |
| 0.046 mbar (335 km) | 0.017 mbar (389 km) | 0.031 mbar (335 km) | 0.017 mbar (364 km) |
| 0.025 mbar (367 km) | 0.009 mbar (420 km) | 0.014 mbar (380 km) | 0.007 mbar (414 km) |
| 0.011 mbar (411 km) | - | 0.007 mbar (415 km) | 0.003 mbar (463 km) |

TAB. 8.2: Niveaux des maxima des kernels correspondant aux émissions au limbe à 819.75 cm⁻¹ à 54°S, 15°S, 54°N et 79°N.

La Table 8.2 donne les altitudes des maxima des kernels correspondant aux émissions au limbe à 819.75 cm⁻¹. A 54°S, 15°S et 54°N, ces kernels sont tous optiquement minces et sondent approximativement les altitudes des lignes de visée. A 79°N, les deux kernels des émissions au limbe les plus bas ont leurs maxima au niveau des lignes de visée mais présentent également une contribution plus optiquement épaisse sondant vers 0.1 mbar. Ceci signifie que l'émission des deux limbes les plus bas ne provient pas uniquement de l'altitude du point tangent, mais également de points plus en avant de la ligne de visée, et donc à des latitudes plus basses que 79°N, du fait de la géométrie de cette observation.

La Fig. 8.14 (en bas, à gauche) montre les profils d'abondance de C₂H₆ inversés à 54°S (noir), 15°S (rouge), 54°N (bleu) et 79°N (vert). Les pointillés représentent les zones où l'éthane n'est pas contraint par les observations.

8.3 Le propane (C₃H₈)

La branche Q de la bande ν_{21} du propane est centrée à 748 cm⁻¹. Elle se superpose à un multiplet de la branche R de C₂H₂, il est donc indispensable d'incorporer dans le modèle atmosphérique, le profil d'abondance de C₂H₂ inversé précédemment (voir Section 8.1.4). La Fig. 8.9 montre la comparaison entre les spectres observés à 15°S

| Caractéristiques des kernels nadir de l'émission de C_3H_8 à 748 cm^{-1} | | | |
|---|--------------------|-----------------|--------------------|
| | maximum | P_{max} | P_{min} |
| 54°S | 3.4 mbar (137 km) | 14 mbar (87 km) | 0.67 mbar (204 km) |
| 15°S | 2.8 mbar (145 km) | 14 mbar (87 km) | 0.24 mbar (254 km) |
| 54°N | 6.36 mbar (109 km) | 14 mbar (85 km) | 0.54 mbar (197 km) |

TAB. 8.3: Caractéristiques des kernels au nadir correspondant aux émissions à 748 cm^{-1} à 54°S , 15°S et 54°N .

(tirets noirs), un au nadir et 3 au limbe, et les spectres calculés correspondants (en rouge). Pour souligner l'émission de C_3H_8 , un spectre calculé sans propane est superposé en bleu, l'émission de C_3H_8 est ainsi nettement visible sur les spectres au limbe à 242 et 278 km. Pour inverser l'abondance de C_3H_8 , j'utilise la gamme spectrale $740\text{-}755\text{ cm}^{-1}$.

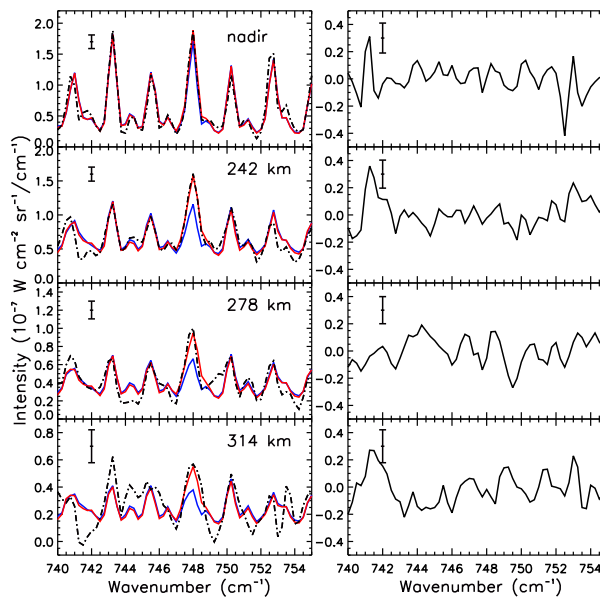


FIG. 8.9: A gauche : Comparaison de l'émission de C_3H_8 observée à 15°S (tirets noirs) avec l'émission calculée (traits pleins rouges) au nadir et au limbe à 242, 278, et 314 km. Ces spectres sont comparés aux spectres calculés sans émission de propane afin de mettre en évidence sa signature spectrale qui se superpose à celle d'un multiplet de la branche R de C_2H_2 . Les barres d'erreur correspondent aux écarts à $\pm 1\text{-}\sigma$. A droite : Résidus correspondants. Les barres d'erreur correspondent aux écarts à $\pm 1\text{-}\sigma$.

A 54°S , le profil d'abondance de cette molécule a été inversé avec un lissage vertical de 3 échelles de hauteur ; à 15°S , $L=3\times H$; à 54°N , $L=2.5\times H$ et à 79°N , $L=2\times H$.

La Table 8.3 donne les gammes d'altitudes sondées par les émissions au nadir à 748 cm^{-1} et la Table 8.4 liste les altitudes des maxima des kernels au limbe pour les quatre latitudes. Les émissions des limbes à 748 cm^{-1} sont toutes optiquement minces et sondent approximativement les altitudes des lignes de visées.

La Fig. 8.14 (en bas, à droite) représente les profils verticaux d'abondance inversés

| Niveaux des maxima des kernels de l'émission au limbe de C ₃ H ₈ à 748 cm ⁻¹ | | | |
|---|---------------------|--------------------|---------------------|
| 54°S | 15°S | 54°N | 79°N |
| 0.82 mbar (195 km) | 0.29 mbar (244 km) | 0.54 mbar (197 km) | 0.94 mbar (167 km) |
| 0.36 mbar (233 km) | 0.13 mbar (284 km) | 0.24 mbar (232 km) | 0.36 mbar (205 km) |
| 0.24 mbar (252 km) | 0.07 mbar (315 km) | 0.11 mbar (271 km) | 0.13 mbar (252 km) |
| 0.1 mbar (293 km) | 0.038 mbar (347 km) | - | 0.046 mbar (306 km) |
| 0.046 mbar (335 km) | - | - | 0.017 mbar (364 km) |
| 0.025 mbar (367 km) | - | - | - |

TAB. 8.4: Niveaux des maxima des kernels correspondant aux émissions au limbe à 748 cm⁻¹ à 54°S, 15°S, 54°N et 79°N.

de C₃H₈ à 54°S (noir), 15°S (rouge), 54°N (bleu) et 79°N (vert). Les barres d'erreur sont données au niveau des maxima des kernels.

8.4 L'éthylène (C₂H₄)

L'éthylène présente deux signatures, l'une à 922.5 cm⁻¹ et l'autre à 949 cm⁻¹. Le rapport signal-à-bruit de ces deux signatures n'est généralement pas très élevé et celles-ci sont généralement visibles sur deux à trois spectres à une même latitude (excepté à 79°N). Pour inverser les profils d'abondance de cette molécule, j'utilise la gamme spectrale 917 - 953 cm⁻¹. La Fig. 8.10 montre deux exemples de modélisation de spectres observés, l'un à 54°S (a) avec les résidus correspondants, et l'autre à 79°N (b). A 54°S, l'émission de l'éthylène apparaît de façon assez nette jusqu'à 227 km alors qu'à 79°N, l'émission est visible sur cinq spectres au limbe, soit jusqu'à 360 km.

A 54°S, 15°S et 54°N, le profil vertical d'abondance de C₂H₄ est lissé sur 3 échelles de hauteur et à 79°N, j'ai appliqué une longueur de corrélation de 1.5 échelles de hauteur.

La Table 8.5 donne les gammes de pressions sondées par les spectres au nadir à 54°S, 15°S et 54°N et la Table 8.6 donne les altitudes des maxima des kernels correspondant aux émissions au limbe à 949.5 cm⁻¹. Toutes les émissions au limbe sont optiquement minces, excepté les trois limbes les plus bas qui présentent une légère contribution plus optiquement épaisse dont le maximum est situé vers 0.02 mbar. A 79°N, comme pour les molécules précédentes, le profil vertical d'abondance de C₂H₄ est une combinaison de l'abondance à plus basse latitude (vers 65°N) à basse altitude et de l'abondance à 79°N à haute altitude.

La Fig. 8.15 (en haut, à gauche) donne les profils d'abondance de l'éthylène inversés à 54°S (noir), 15°S (rouge), 54°N (bleu) et 79°N (orange).

L'abondance de l'éthylène présente la surprenante particularité de décroître avec l'altitude à toutes les latitudes (jusqu'à 0.01 mbar). Nous avons testé la réalité de cette décroissance en vérifiant qu'un profil d'abondance constant avec l'altitude et égal à l'abondance correspondant au spectre au nadir ($q=5 \times 10^{-7}$) ne permet pas de modéliser le spectre au limbe (voir Vinatier et al. 2007, en annexe).

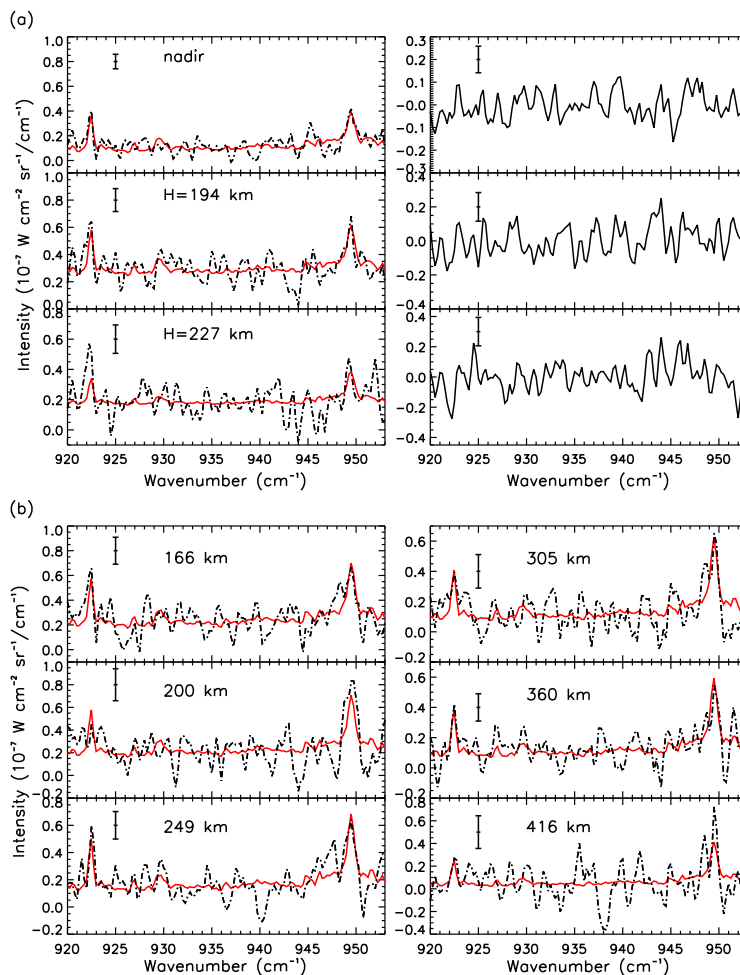


FIG. 8.10: (a) **A gauche :** Comparaison entre l'émission de C_2H_4 observée à $54^\circ S$ (tirets noirs) avec l'émission calculée (traits pleins rouges) au nadir et au limbe à 194 et 227 km. Les barres d'erreur correspondent aux écarts à $\pm 1-\sigma$. La signature de l'éthylène est noyée dans le bruit au-delà de 227 km. (a) **A droite :** Résidus correspondants (radiance calculée moins radiance observée). Les barres d'erreur donnent les écarts à $\pm 1-\sigma$.

(b) : Comparaison entre l'émission de C_2H_4 observée à $79^\circ N$ (tirets noirs) et l'émission calculée (traits pleins rouges) au limbe à 166, 200, 249, 305, 360, 416 km. Les barres d'erreur correspondent aux écarts à $\pm 1-\sigma$. A $79^\circ N$, le C_2H_4 est détecté de façon certaine jusqu'à 416 km.

8.5 Le diacétylène (C_4H_2) et le méthylacétylène (CH_3C_2H)

La branche Q de la bande ν_8 de C_4H_2 est centrée à 628 cm^{-1} et la ν_9 de CH_3C_2H est centrée à 633 cm^{-1} . Ces deux émissions spectrales, bien que proches l'une de l'autre, sont bien séparées à la résolution de 0.5 cm^{-1} . J'inverse les abondances de ces molécules simultanément en utilisant la gamme spectrale $610 - 650\text{ cm}^{-1}$.

La Fig. 8.11 (à gauche) montre les émissions de ces deux molécules observées (tirets noirs) à $54^\circ N$ au nadir et sur 4 limbes dont les lignes de visée sont comprises entre 266 et 494 km. Nous pouvons remarquer que le C_4H_2 est détecté jusqu'à 494 km alors que le rapport signal-à-bruit de l'émission de CH_3C_2H n'est plus assez élevé au-dessus de 340 km.

La Table 8.7 donne les gammes d'altitudes sondées par les émissions au nadir de C_4H_2 à 628 cm^{-1} et CH_3C_2H à 633 cm^{-1} .

| Caractéristiques des kernels nadir de l'émission de C ₂ H ₄ à 949.5 cm ⁻¹ | | | |
|--|-------------------|------------------|--------------------|
| | maximum | P _{max} | P _{min} |
| 54°S | 3.4 mbar (137 km) | 16 mbar (84 km) | 0.67 mbar (204 km) |
| 15°S | 7.8 mbar (107 km) | 18 mbar (81 km) | 1.9 mbar (162 km) |
| 54°N | 5.2 mbar (116 km) | 14 mbar (85 km) | 0.29 mbar (224 km) |

TAB. 8.5: Niveaux des maxima des kernels correspondant à l'émission de C₂H₄ à 949.5 cm⁻¹ au nadir à 54°S, 15°S et 54°N.

| Niveaux des maxima des kernels au limbe de l'émission de C ₂ H ₄ à 949.5 cm ⁻¹ | | | |
|---|--------------------|--------------------|---------------------|
| 54°S | 15°S | 54°N | 79°N |
| 0.82 mbar (195 km) | 0.29 mbar (244 km) | 0.54 mbar (197 km) | 0.94 mbar (167 km) |
| 0.36 mbar (233 km) | - | 0.24 mbar (232 km) | 0.36 mbar (205 km) |
| - | - | 0.11 mbar (271 km) | 0.13 mbar (252 km) |
| - | - | - | 0.046 mbar (306 km) |
| - | - | - | 0.017 mbar (364 km) |
| - | - | - | 0.006 mbar (426 km) |

TAB. 8.6: Niveaux des maxima des kernels au limbe calculés à 949.5 cm⁻¹ à 54°S, 15°S, 54°N et 79°N. A 54°S, 15°S et 54°N, l'éthylène n'est détecté que sur peu de spectres au limbe.

| Caractéristiques des kernels nadir de l'émission de C ₄ H ₂ à 628 cm ⁻¹ | | | |
|--|--------------------|-------------------|--------------------|
| | maximum | P _{max} | P _{min} |
| 54°S | 1.0 mbar (186 km) | 3.4 mbar (137 km) | 0.24 mbar (252 km) |
| 15°S | 1.5 mbar (170 km) | 6.4 mbar (114 km) | 0.24 mbar (254 km) |
| 54°N | 0.54 mbar (197 km) | 15 mbar (85 km) | 0.13 mbar (260 km) |

| Caractéristiques des kernels nadir de l'émission de CH ₃ C ₂ H à 633 cm ⁻¹ | | | |
|---|-------------------|------------------|--------------------|
| | maximum | P _{max} | P _{min} |
| 54°S | 1.8 mbar (160 km) | 14 mbar (87 km) | 0.36 mbar (233 km) |
| 15°S | 3.4 mbar (137 km) | 17 mbar (81 km) | 0.5 mbar (215 km) |
| 54°N | 9.1 mbar (98 km) | 19 mbar (79 km) | 1.8 mbar (152 km) |

TAB. 8.7: Niveaux des maxima des kernels correspondant aux émissions nadir de C₄H₂ à 628 cm⁻¹ et CH₃C₂H à 633 cm⁻¹ à 54°S, 15°S et 54°N.

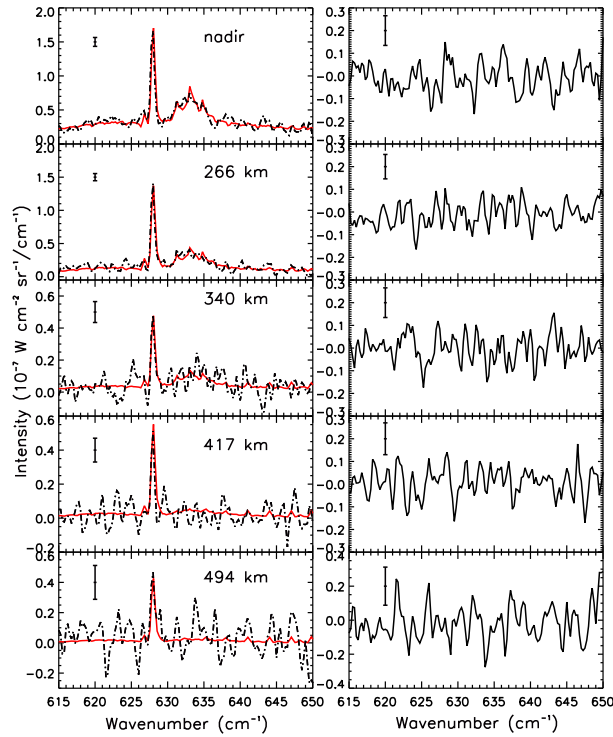


FIG. 8.11: A gauche : Comparaison des émissions de C_4H_2 (630 cm^{-1}) et $\text{CH}_3\text{C}_2\text{H}$ (633 cm^{-1}) observées à 54°N (tirets noir) avec les émissions calculées (traits pleins rouges) au nadir et au limbe à 266, 340, 417 et 494 km. Les barres d'erreur correspondent aux écarts à $\pm 1\text{-}\sigma$. A droite : Résidus correspondants.

Les émissions au limbe de C_4H_2 sont optiquement minces aux 4 latitudes avec des maxima de kernels qui pointent au niveau des altitudes de visée avec, à 79°N , une légère contribution plus optiquement épaisse provenant du niveau 0.01 mbar.

Les émissions au limbe de $\text{CH}_3\text{C}_2\text{H}$ proviennent dans la plupart des cas des mêmes altitudes que celles de C_4H_2 , mais le rapport signal-à-bruit de l'émission de $\text{CH}_3\text{C}_2\text{H}$ devient mauvais au-dessus de 0.025 mbar (367 km) à 54°S , 0.31 mbar (357 km) à 15°S , 0.025 mbar (345 km) à 54°N et 0.002 mbar (493 km) à 79°N . Les émissions au limbe de $\text{CH}_3\text{C}_2\text{H}$ sont toutes optiquement minces. A haute latitude nord, l'émission provient donc de la latitude de visée (79°N), cependant, à basse altitude, il y a une incertitude sur la valeur de l'abondance à cette latitude car le profil de température sonde alors la latitude 65°N .

La Fig. 8.15 montre les profils d'abondance inversés de C_4H_2 (en haut, à droite) et $\text{CH}_3\text{C}_2\text{H}$ (en bas, à gauche) à 54°S (noir), 15°S (rouge), 54°N (bleu) et 79°N (orange).

8.6 Le cyanoacétylène (HC_3N), le dioxyde de carbone (CO_2) et le benzène (C_6H_6)

La gamme spectrale $660 - 675 \text{ cm}^{-1}$ contient les émissions de HC_3N à 663 cm^{-1} , CO_2 à 667 cm^{-1} et C_6H_6 à 673 cm^{-1} .

Nous avons choisi d'inverser dans un premier temps les profils d'abondance de HC_3N et CO_2 qui présentent les signatures les plus intenses. Ensuite, j'incorpore les

| Niveaux des maxima des kernels de l'émission au limbe de C ₄ H ₂ à 628 cm ⁻¹ | | | |
|---|---------------------|----------------------|---------------------|
| 54°S | 15°S | 54°N | 79°N |
| 0.82 mbar (195 km) | 0.29 mbar (244 km) | 0.54 mbar (197 km) | 1.0 mbar (166 km) |
| 0.36 mbar (233 km) | 0.13 mbar (284 km) | 0.21 mbar (238 km) | 0.34 mbar (207 km) |
| 0.24 mbar (252 km) | 0.07 mbar (315 km) | 0.10 mbar (271 km) | 0.13 mbar (250 km) |
| 0.1 mbar (293 km) | 0.031 mbar (357 km) | 0.052 mbar (307 km) | 0.041 mbar (313 km) |
| 0.046 mbar (335 km) | 0.017 mbar (389 km) | 0.025 mbar (345 km) | 0.016 mbar (367 km) |
| 0.025 mbar (367 km) | 0.009 mbar (420 km) | 0.013 mbar (384 km) | 0.006 mbar (424 km) |
| 0.011 mbar (411 km) | 0.004 mbar (462 km) | 0.006 mbar (424 km) | 0.003 mbar (466 km) |
| 0.005 mbar (454 km) | 0.002 mbar (493 km) | 0.003 mbar (463 km) | 0.002 mbar (493 km) |
| - | - | 0.0015 mbar (502 km) | - |

TAB. 8.8: Niveaux des maxima des kernels correspondants aux émissions au limbe de C₄H₂ à 628 cm⁻¹ à 54°S, 15°S, 54°N et 79°N.

profils d'abondance inversés de ces deux molécules dans le modèle atmosphérique afin d'inverser dans un second temps l'abondance de C₆H₆. La Fig. 8.12 montre deux exemples de comparaison entre les spectres observés et calculés à 54°S (a) et 79°N (b). Nous pouvons noter qu'à 54°S, HC₃N n'est pas détecté à basse altitude, alors qu'une faible émission semble dépasser le niveau de bruit à 252 km. Par contre, à 79°N, l'intensité de cette bande domine très nettement tous les spectres, ce qui laisse supposer un enrichissement important à cette latitude. Le CO₂ est facilement détecté à toutes les latitudes, et le benzène est détecté à 79°N uniquement.

Intéressons-nous d'abord au cas de HC₃N. A 54°S (voir Fig. 8.12, (a)), l'émission de cette molécule ne dépasse pas le bruit sur le spectre au nadir que nous utilisons, et sur les limbes à 194 et 227 km. En revanche, à 252 km, il semble que la branche Q de HC₃N soit détectée à 3- σ , ce qui suppose une forte croissance de l'abondance de cette molécule avec l'altitude. J'ai effectué une inversion à partir de ces spectres et ai obtenu le profil d'abondance représenté en noir sur la Fig. 8.15 (en bas, à droite). Ce profil croît très fortement avec l'altitude. Etant donné le faible rapport signal-à-bruit de l'émission de HC₃N à 252 km, il faut s'assurer que l'intensité observée à 663 cm⁻¹ est bien due à cette molécule et non pas à du bruit. Pour cela, j'ai effectué deux larges sélections de spectres au limbe autour de 250 km afin d'augmenter le rapport signal-à-bruit des spectres observés, la première a des lignes de visée comprises entre 180 et 240 km (soit une altitude moyenne de 210 km) et la seconde entre 240 et 310 km (soit une altitude moyenne de 272 km). Chacune de ces sélections comprend environ 115 spectres.

Les résidus entre les spectres calculés et observés sans émission de HC₃N sont représentés sur la Fig. 8.13 (en noir). A 210 km, l'émission de HC₃N n'est pas visible, alors qu'à 272 km, elle dépasse le niveau 3- σ . Ces résidus sont également comparés avec ceux correspondant à la différence entre le spectre observé et calculé avec une émission de HC₃N dont l'abondance est de 0.3×10^{-9} à 210 km et de 2×10^{-9} à 272 km. Ces abondances ont été déduites indépendamment, l'une à partir du spectre au limbe moyenné à 210 km et l'autre à partir du spectre moyenné à 272 km, en supposant l'abondance constante avec l'altitude. Nous obtenons donc une variation d'un facteur 10 entre ces deux altitudes qui correspondent aux pressions 0.15 mbar (272 km) et 0.5

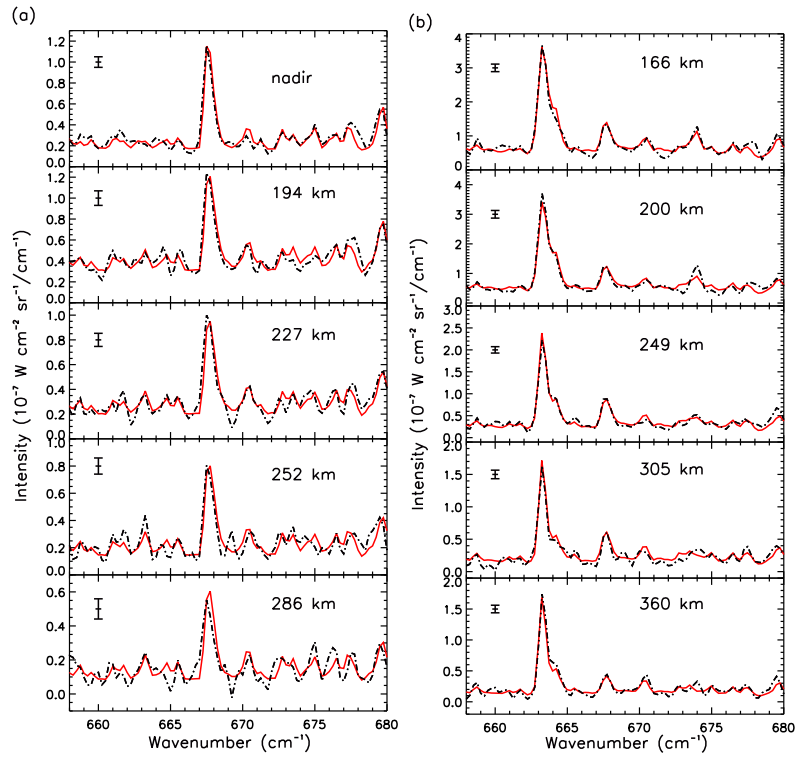


FIG. 8.12: (a) : Comparaison des émissions de HC_3N (663 cm^{-1}), CO_2 (667 cm^{-1}) et C_6H_6 (674 cm^{-1}) observées (tirets noirs) avec les émissions calculées (traits pleins rouges) à $54^\circ S$ au nadir et au limbe à 194, 227, 252 et 286 km. Les barres d'erreur correspondent aux écarts à $\pm 1\text{-}\sigma$. (b) : Comparaison entre les spectres observés et calculés entre 658 et 680 cm^{-1} à $79^\circ N$ pour 5 spectres au limbe dont les lignes de visée sont comprises entre 166 et 360 km. L'émission de HC_3N domine celle de CO_2 et C_6H_6 qui sont visibles sur tous les spectres. Les barres d'erreur correspondent aux écarts à $\pm 1\text{-}\sigma$.

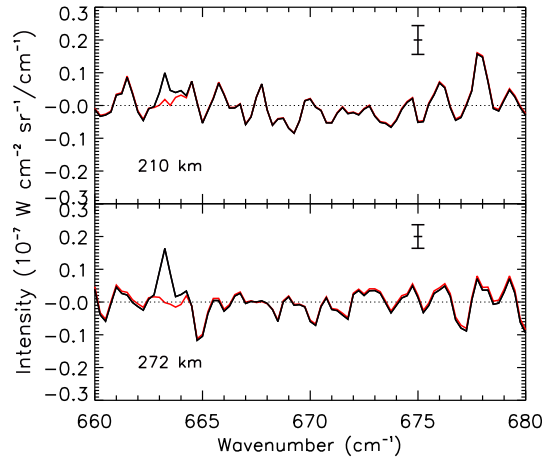


FIG. 8.13: Résidus entre les spectres observés au limbe moyennés autour de 210 km (en haut) et autour de 272 km (en bas) et les spectres calculés sans émission de HC_3N (en noir) et avec (en rouge). A 210 km, la différence entre les résidus calculés avec une abondance constante avec l'altitude de HC_3N égale à 0.3×10^{-9} et avec une abondance nulle ne dépasse pas $2\text{-}\sigma$ à 663 cm^{-1} alors qu'à 272 km, pour une abondance constante de HC_3N égale à 2×10^{-9} , la différence entre les deux résidus dépasse $3\text{-}\sigma$. Notons qu'à 210 km, la signature spectrale visible à 678 cm^{-1} correspond à l'émission de C_2HD (voir Partie IV).

| Caractéristiques des kernels nadir de l'émission de HC ₃ N à 663.25 cm ⁻¹ | | | |
|---|--------------------|--------------------|---------------------|
| | maximum | P _{max} | P _{min} |
| 54°S | 0.03 mbar (356 km) | 0.16 mbar (272 km) | 0.007 mbar (432 km) |
| 15°S | - | - | - |
| 54°N | 0.67 mbar (189 km) | 14.4 mbar (85 km) | 0.19 mbar (242 km) |

| Caractéristiques des kernels nadir de l'émission de CO ₂ à 667.5 cm ⁻¹ | | | |
|--|-------------------|------------------|--------------------|
| | maximum | P _{max} | P _{min} |
| 54°S | 14.4 mbar (87 km) | 22 mbar (75 km) | 3.4 mbar (137 km) |
| 15°S | 11.8 mbar (94 km) | 22 mbar (75 km) | 0.15 mbar (170 km) |
| 54°N | 9.6 mbar (97 km) | 20 mbar (75 km) | 3.4 mbar (129 km) |

TAB. 8.9: Niveaux des maxima des kernels correspondant aux émissions nadir de HC₃N à 663.25 cm⁻¹ et CO₂ à 667.5 cm⁻¹ à 54°S, 15°S et 54°N.

| Niveaux des maxima des kernels de l'émission au limbe de HC ₃ N à 663.25 cm ⁻¹ | | | |
|--|---------------------|---------------------|---------------------|
| 54°S | 15°S | 54°N | 79°N |
| 0.82 mbar (195 km) | 0.29 mbar (244 km) | 0.54 mbar (197 km) | 1.0 mbar (166 km) |
| 0.36 mbar (233 km) | 0.13 mbar (284 km) | 0.24 mbar (233 km) | 0.36 mbar (205 km) |
| 0.24 mbar (252 km) | 0.07 mbar (315 km) | 0.10 mbar (271 km) | 0.13 mbar (250 km) |
| 0.10 mbar (293 km) | 0.031 mbar (357 km) | 0.057 mbar (302 km) | 0.046 mbar (306 km) |
| 0.046 mbar (335 km) | 0.017 mbar (389 km) | 0.025 mbar (345 km) | 0.017 mbar (364 km) |
| 0.025 mbar (367 km) | 0.009 mbar (420 km) | - | 0.006 mbar (426 km) |
| - | 0.004 mbar (462 km) | - | 0.003 mbar (466 km) |
| - | 0.002 mbar (493 km) | - | 0.002 mbar (497 km) |

TAB. 8.10: Niveaux des maxima des kernels correspondant aux émissions au limbe de HC₃N à 663.25 cm⁻¹ à 54°S, 15°S, 54°N et 79°N.

mbar (210 km), en accord avec le profil d'abondance inversé de la Fig. 8.15. Ainsi la forte croissance de l'abondance de HC₃N avec l'altitude semble réelle et n'est pas liée au bruit.

A 15°S, la variation avec l'altitude de l'émission de HC₃N est similaire à celle à 54°S. En effet, celle-ci n'est pas visible sur le spectre au nadir, ni sur les 2 premiers spectres au limbe utilisés, ce qui laisse supposer une faible abondance à ces niveaux, alors que sur le spectre au limbe sondant 304 km, son émission est de l'ordre de 3- σ . A nouveau le profil d'abondance inversé est très pentu comme le montre la Fig. 8.15 (rouge).

A 54°N, HC₃N est très nettement visible sur le spectre au nadir et trois limbes (entre 194 et 266 km) pour lesquels la détection est de l'ordre de 6- σ alors que pour le spectre au limbe à 302 km, l'intensité de l'émission chute brutalement pour atteindre environ 2- σ . Enfin à 79°N, HC₃N est détecté sur plusieurs spectres au limbe.

Le profil vertical d'abondance inversé à 54°S a été lissé sur 2.5 échelles de hauteur, sur 3 échelles de hauteur à 15°S, sur 2 échelles de hauteur à 54°N et sur 1.5 échelles de hauteur à 79°N.

Les différents niveaux sondés par les émissions de HC₃N au limbe et au nadir sont

donnés dans les Tables 8.9 et 8.10. Les maxima des kernels correspondant aux émissions au limbe de CO_2 sont situées aux mêmes niveaux que ceux des émissions de HC_3N ; le CO_2 n'est généralement pas détecté au-dessus de 0.02 mbar (sauf à $79^\circ N$).

Nous pouvons remarquer qu'à $54^\circ S$, le kernel correspondant à l'émission nadir de HC_3N sonde un niveau très élevé en altitude, ce qui vient du fait que l'abondance vers 10 mbar est très faible, et l'émission provenant de cette zone est bien plus faible que celle provenant de niveaux où l'abondance est plus élevée. Les kernels des trois spectres au limbe les plus bas montrent tous un maximum secondaire de forte amplitude à 0.03 mbar (356 km), qui est le même niveau que celui sondé par l'émission au nadir. A $15^\circ S$, l'émission au nadir sonde vers 0.002 mbar, et les kernels des émissions au limbe sondent également en partie cette zone, et montrent un second minimum piqué à l'altitude de la ligne de visée. Ceci s'explique également par le fait que le profil d'abondance de HC_3N croît très vite avec l'altitude.

Le CO_2 est très nettement visible aux quatre latitudes étudiées. J'ai appliqué différents lissages verticaux au profil inversé de CO_2 : la longueur de corrélation est $L = 2.5$ échelles de hauteur à $54^\circ S$, $L=3\times H$ à $15^\circ S$, $L=2\times H$ à $54^\circ N$ et $L=1.5\times H$ à $79^\circ N$. Les gammes de pressions sondées par les spectres au nadir sont données dans la Table 8.9, et les altitudes sondées par les spectres au limbe sont similaires à celles sondées par l'émission de HC_3N (voir Table 8.10).

La Fig. 8.16 (à gauche) compare les profils d'abondance de CO_2 inversés à $54^\circ S$, $15^\circ S$, $54^\circ N$ et $80^\circ N$.

Après avoir inversé les profils d'abondance de ces deux molécules, j'ai incorporé les profils obtenus dans le modèle atmosphérique afin d'inverser les profils d'abondance du benzène aux différentes latitudes. A $54^\circ S$, $15^\circ S$, et $54^\circ N$, l'émission de C_6H_6 à 674 cm^{-1} ne dépasse pas le niveau de bruit sur les différents spectres. Ils est donc impossible d'en déduire des profils verticaux, nous avons donc déterminé dans ces deux cas les limites supérieures à $3\text{-}\sigma$ de son abondance. A $54^\circ S$, en utilisant successivement le spectre au nadir et les deux spectres au limbe les plus bas (197 et 233 km), nous obtenons une limite supérieure de l'abondance de C_6H_6 de l'ordre de 0.6×10^{-9} à chacune des trois altitudes. A $15^\circ S$, à partir du spectre au nadir et du spectre au limbe sondant à 242 km, nous trouvons une limite supérieure de 1×10^{-9} , et à partir du spectre au limbe à 278 km, elle vaut 1.8×10^{-9} . A $54^\circ N$, à 194 et 240 km, nous trouvons une limite supérieure à $3\text{-}\sigma$ de l'abondance de C_6H_6 égale à 1×10^{-9} .

A haute latitude nord, C_6H_6 est détecté sur les quatre spectres au limbe les plus profonds (voir la Fig. 8.12 (b) à 166, 200, 244 et 305 km) et il est possible d'en déduire une distribution verticale d'abondance. Le profil d'abondance, inversé avec une longueur de corrélation égale à 2.5 échelles de hauteur, est présenté sur la Fig. 8.16 (à droite).

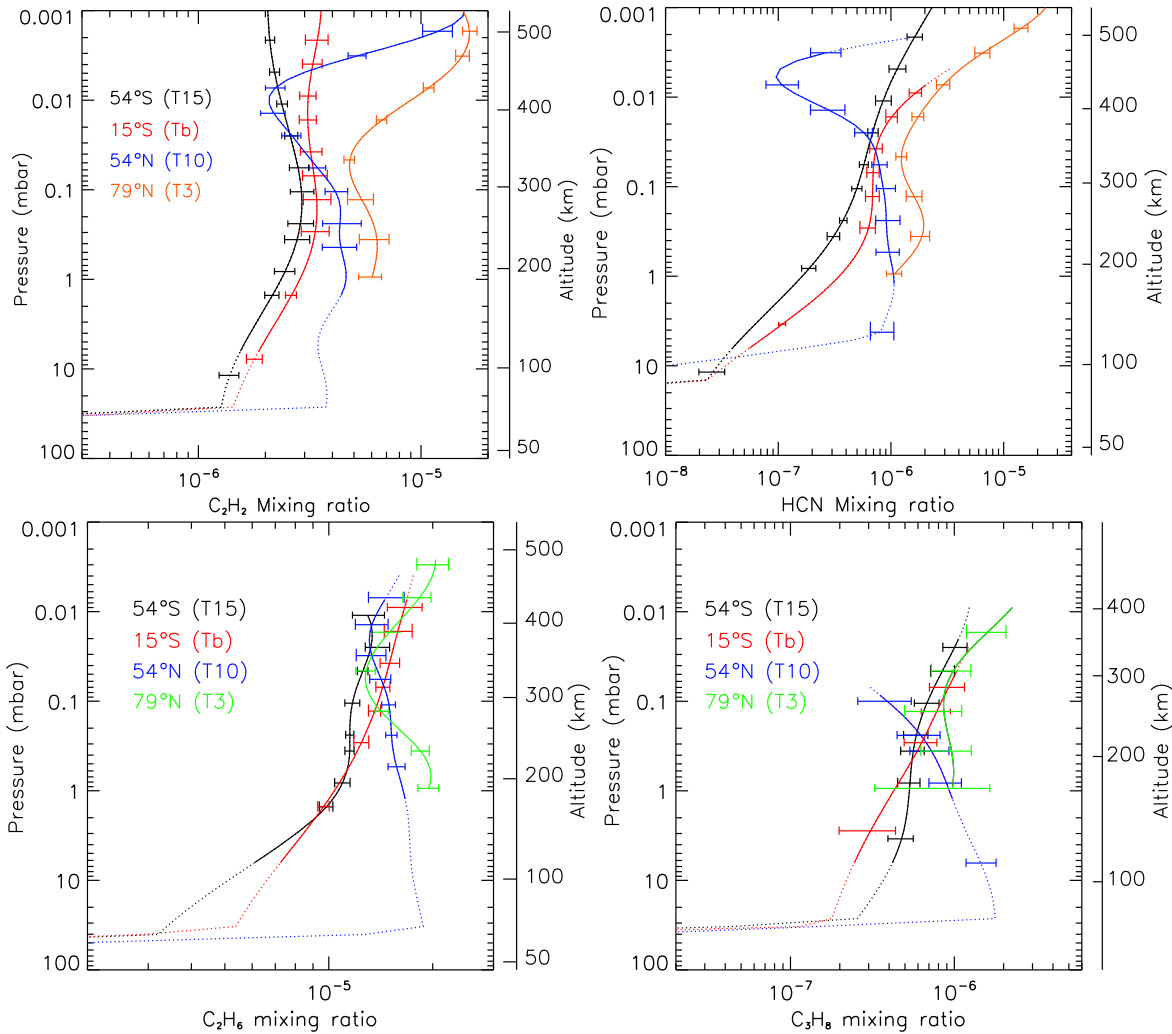


FIG. 8.14: En haut, à gauche : Profils inversés de C₂H₂ à 54°S (noir), 15°S (rouge), 54°N (bleu), et 79°N (orange). Les barres d'erreur sont données au niveau des maxima des kernels correspondant aux émissions de la branche Q (729 cm⁻¹) et de la branche P (682 cm⁻¹). L'échelle de hauteur fait référence à la latitude 15°S. En haut, à droite : Profils inversés de HCN à 54°S (noir), 15°S (rouge), 54°N (bleu), et 79°N (orange). Les barres d'erreur sont données aux niveaux des maxima des kernels correspondant à l'émission de la branche Q (713 cm⁻¹). L'échelle de hauteur fait référence à la latitude 54°S. En bas, à gauche : Profils verticaux d'abondance de C₂H₆ inversés à 54°S (noir), 15°S (rouge), 54°N (bleu) et 79°N (vert). Les barres d'erreur sont données au niveau des maxima des kernels correspondant aux émissions à 819.75 cm⁻¹. L'échelle de hauteur fait référence à la latitude 54°S. En bas, à droite : Profils d'abondance de C₃H₈ inversés à 54°S (noir), 15°S (rouge), 54°N (bleu) et 79°N (vert) Les barres d'erreur sont données aux niveaux des maxima des kernels correspondant aux émissions à 748 cm⁻¹. L'échelle de hauteur fait référence à la latitude 79°N.

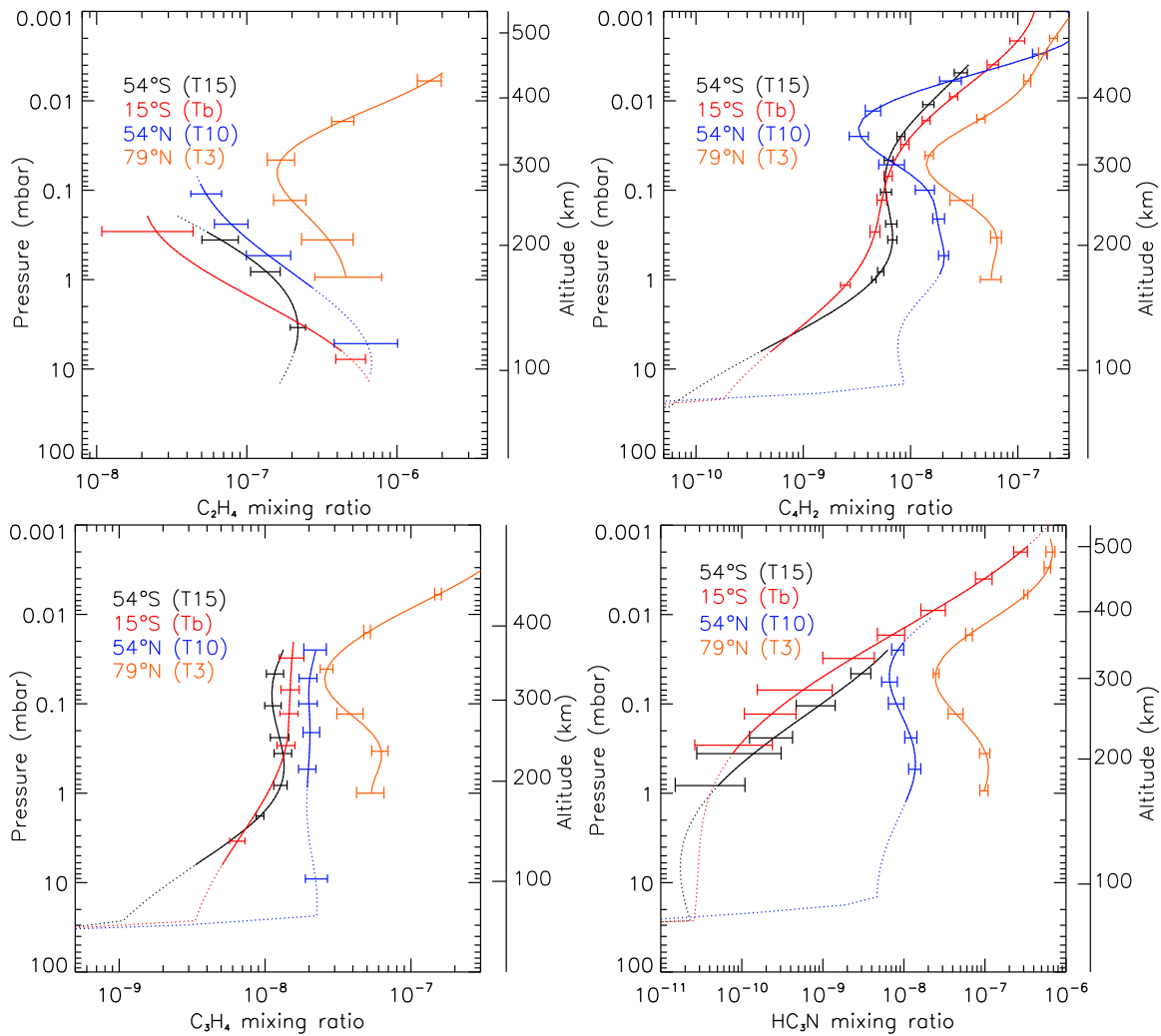


FIG. 8.15: En haut, à gauche : Profils d'abondance de C_2H_4 inversés à 54°S (noir), 15°S (rouge), 54°N (bleu) et 79°N (orange). Les barres d'erreur sont données aux niveaux des maxima des kernels correspondant aux émissions à 949 cm^{-1} . L'échelle de hauteur fait référence à la latitude 79°N. En haut, à droite : Profils d'abondance de C_4H_2 inversés à 54°S (noir), 15°S (rouge), 54°N (bleu) et 79°N (orange). Les barres d'erreur sont données aux niveaux des maxima des kernels correspondant aux émissions à 628 cm^{-1} . L'échelle de hauteur fait référence à la latitude 79°N. En bas, à gauche : Profils d'abondance de CH_3C_2H inversés à 54°S (noir), 15°S (rouge), 54°N (bleu) et 79°N (orange). Les barres d'erreur sont données aux niveaux des maxima des kernels correspondant aux émissions à 633 cm^{-1} . L'échelle de hauteur fait référence à la latitude 54°S. En bas, à droite : Profils d'abondance de HC_3N inversés à 54°S (noir), 54°N (bleu) et 79°N (orange). Les barres d'erreur sont données aux niveaux des maxima des kernels correspondant aux émissions à 663 cm^{-1} . L'échelle de hauteur fait référence à la latitude 79°N.

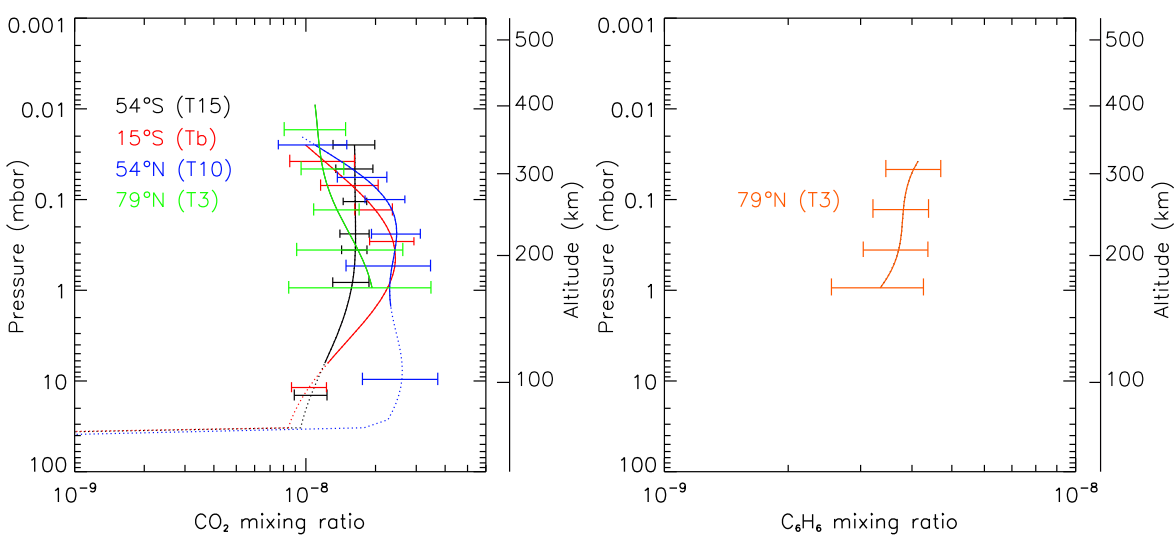


FIG. 8.16: A gauche : Profils d'abondance de CO₂ inversés à 54°S (noir), 15°S (rouge), 54°N (bleu) et 79°N (orange). Les barres d'erreur sont données aux niveaux des maxima des kernels correspondant aux émissions à 667.5 cm⁻¹. L'échelle de hauteur fait référence à la latitude 79°N. A droite : Profil d'abondance de C₆H₆ inversé à 79°N. Les barres d'erreur sont données aux niveaux des maxima des kernels correspondant aux émissions à 674 cm⁻¹.

CHAPITRE 9

Profils d'opacité des aérosols

Cette section présente un travail préliminaire portant sur l'opacité des aérosols déduite à partir de l'émission du continuum des spectres enregistrés par le plan focal FP3. Plusieurs études ont été menées sur l'opacité des aérosols à partir du continuum des spectres enregistrés en infrarouge lointain, en-deçà de 600 cm^{-1} (e.g. Samuelson and Mayo, 1991 et Mayo et Samuelson, 2005 qui ont utilisé les données de Voyager/IRIS, de Kok et al. 2007 qui ont utilisé les données CIRS), mais jamais à partir des données en infrarouge moyen. Les spectres au limbe enregistrés par CIRS peuvent nous permettre d'inverser les opacités des aérosols à différentes latitudes et altitudes dans la stratosphère, ce qui apportera des informations complémentaires à celles déduites à partir des données en infrarouge lointain ainsi que les données enregistrées in situ par DISR.

Comme il a été mentionné plus haut, nous inversons l'opacité des aérosols dans chaque gamme spectrale, en même temps que les abondances des molécules afin de reproduire au mieux le continuum. Nous obtenons ainsi en sortie de l'algorithme, l'opacité de chaque couche déterminée à une référence de 500 cm^{-1} . A partir du fichier donnant la variation spectrale supposée de l'opacité des aérosols donnée en entrée de l'algorithme, nous pouvons en déduire l'opacité des aérosols à chaque fréquence en appliquant un facteur multiplicatif. Nous allons nous intéresser ici aux fréquences 645, 670, 720, 810 et 935 cm^{-1} (chacune située dans un des intervalles spectraux utilisés pour les inversions successives des molécules citées dans la section précédente).

Jusqu'à présent, j'ai inversé les profils d'opacité des aérosols en appliquant un lissage vertical avec une longueur de corrélation égale à une échelle de hauteur. La Fig. 9.1 montre les profils d'opacité $d\tau/d\ln(p) \times \Delta\ln(p)$ (où $\Delta\ln(p) \sim 0.2$) inversés à 15°S . Les barres d'erreur restent à déterminer.

Les oscillations, particulièrement visibles sur le profil à 935 cm^{-1} , sont liées au fait que le rapport signal-à-bruit (voir la Fig. 8.10) dans la gamme spectrale considérée, est assez mauvais, le profil inversé tend alors à reproduire le bruit. Un lissage un peu plus important résoudrait ce problème.

Ces profils inversés sont proches des profils donnés en entrée de l'inversion, qui sont basés sur les résultats de DISR (Tomasko et al., 2005), c'est-à-dire que sous le

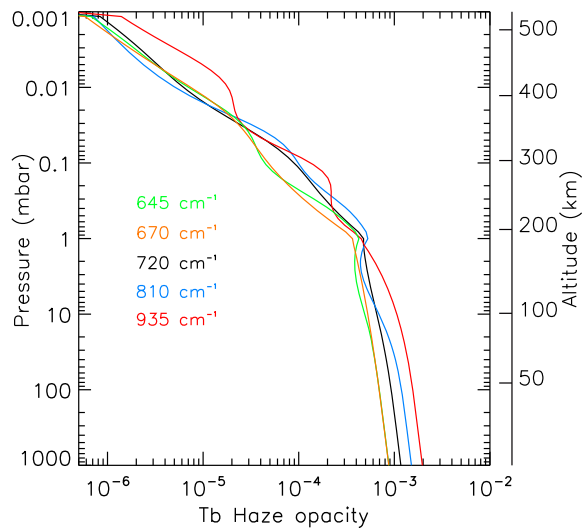


FIG. 9.1: Profils inversés d'opacité des aérosols ($d\tau/d\ln(p) \times \Delta\ln(p)$) à 15°S à 645 , 670 , 720 , 810 et 935 cm^{-1} .

niveau 1 mbar, nous entrons un profil initial d'opacité des aérosols ne croissant que peu avec la pression, alors qu'au-dessus, l'opacité décroît avec la même échelle de hauteur que la pression. En sortie de l'inversion, nous obtenons des profils verticaux en accord pour les différents nombres d'onde et en accord avec la distribution verticale déduite des données de DISR. Il sera intéressant de comparer ces profils avec ceux obtenus aux autres latitudes, en particulier à haute latitude nord où l'opacité des aérosols est plus élevée. L'étude de ces profils d'opacité fera l'objet d'une publication future.

CHAPITRE 10

Discussion

Sommaire

| | |
|---|------------|
| 10.1 Comparaison avec les résultats précédents | 107 |
| 10.1.1 Acétylène (C_2H_2) | 107 |
| 10.1.2 Cyanure d'hydrogène (HCN) | 108 |
| 10.1.3 L'éthane (C_2H_6) | 109 |
| 10.1.4 Le propane (C_3H_8) | 109 |
| 10.1.5 Le méthylacétylène (CH_3C_2H) | 109 |
| 10.1.6 Le diacétylène (C_4H_2) | 110 |
| 10.1.7 L'éthylène (C_2H_4) | 110 |
| 10.1.8 Le cyanoacétylène (HC_3N) | 111 |
| 10.1.9 Le dioxyde de carbone (CO_2) | 112 |
| 10.1.10 Le benzène (C_6H_6) | 112 |
| 10.2 Comparaison avec les modèles photochimiques | 112 |
| 10.2.1 Croissance de l'abondance avec l'altitude | 112 |
| 10.2.2 Enrichissement à haute latitude nord | 113 |
| 10.2.3 Minima d'abondance dans l'hémisphère nord à haute altitude | 114 |

10.1 Comparaison avec les résultats précédents

Nous allons maintenant comparer plus en détail les résultats obtenus ici avec ceux déduits des données de Voyager et des données au sol.

10.1.1 Acétylène (C_2H_2)

Le C_2H_2 présente un enrichissement d'un facteur 2.5 à 1 mbar entre $54^\circ S$ et $79^\circ N$. Les valeurs d'abondance que nous obtenons à partir des spectres au nadir (sondant vers 10 mbar) à $54^\circ S$ et $15^\circ S$ (1.4×10^{-6} et 1.8×10^{-6} respectivement) sont inférieures aux valeurs déduites par Coustenis et al. (3.5×10^{-6} , 2007). A $54^\circ N$, nous sommes en accord avec ces auteurs. A $79^\circ N$, nous pouvons comparer l'abondance de notre profil au niveau le plus bas (vers 1 mbar) avec les résultats de Coustenis et al. (2007) qui inversent les abondances en supposant que leurs distributions verticales sont constantes

avec l'altitude, à partir de spectres au nadir exclusivement, sondant jusqu'à la latitude 68°N. Rappelons que les profils que nous obtenons à 79°N sont une combinaison de l'abondance à 68°N à basse altitude et de l'abondance à 79°N à haute altitude. La comparaison entre les valeurs que nous obtenons et celles de Coustenis et al. à 68°N est légitime. Cependant, à haute latitude nord, l'information donnée par la ν_4 est limitée au dessus du niveau 2 mbar, la température n'est donc pas contrainte sous ce niveau alors que les kernels au nadir des absorbants (avec des profils verticaux d'abondance constants avec l'altitude) sondent des niveaux situés autour de 5 mbar. Pour évaluer cette incertitude, Coustenis et al. (2007) ont utilisé deux types de profils de température qui sont plus ou moins froids sous le niveau 2 mbar et obtiennent ainsi deux valeurs différentes de l'abondance de C₂H₂. La valeur que nous obtenons à 1 mbar est en accord avec les deux valeurs d'abondance obtenues par ces auteurs à 68°N.

Nous pouvons comparer le profil vertical d'abondance de C₂H₂ que nous obtenons à 15°S avec le profil déduit des données du satellite ISO à partir de la même gamme spectrale (Coustenis et al. 2003), mais en gardant à l'esprit que ce profil est moyenné sur le disque, alors que les données de CIRS sont résolues spatialement. Cette comparaison est possible car le profil moyenné sur le disque est plus fortement pondéré par la région équatoriale et parce que l'abondance de C₂H₂ varie peu latitudinalement. Le profil déduit des données de ISO a un gradient plus important et des abondances plus élevées (4.5×10^{-6} à 2 mbar et 9.5×10^{-6} à 0.2 mbar) que ce que nous obtenons ici. Ce désaccord n'est pas expliqué.

A partir des données de Voyager, Coustenis et al. (1991) ont déduit un profil d'abondance de C₂H₂ résolu verticalement à 70°N. Le profil vertical que nous obtenons à 79°N est en accord avec le profil issu des données Voyager à 0.1 mbar mais est environ 3 fois plus abondant vers 1 mbar.

10.1.2 Cyanure d'hydrogène (HCN)

Le gradient vertical du profil d'abondance de HCN diffère fortement entre 54°S-15°S et 54°N-79°N. L'enrichissement vers les hautes latitudes nord est particulièrement visible sous le niveau 0.1 mbar. Marten et al. (2002) ont déduit un profil vertical d'abondance de HCN moyenné sur le disque à partir d'observations en millimétrie avec le radiotélescope de l'IRAM. Leur profil vertical de HCN montre un changement du gradient du rapport de mélange (dq/dz) autour de 180 km, ce que nous observons également sur notre profil d'abondance inversé à 15°S. De plus, les abondances que nous obtenons sont en accord avec la distribution verticale de Marten et al. Cependant, il est à noter que, comme le profil d'abondance de HCN varie fortement sur le disque, la comparaison entre notre profil résolu spatialement et le profil moyenné sur le disque n'est pas totalement légitime car la distribution verticale de l'abondance de HCN varie fortement avec la latitude (voir Fig. 8.14).

Aux pressions sondées par les nadirs, nous obtenons des abondances à 54°S, 15°S et 54°N qui sont supérieures d'un facteur 2 à celle de Coustenis et al. 2007, ce qui s'explique par le fait que ces auteurs utilisent une distribution verticale de HCN constante avec l'altitude. Par contre, à 54°S et 15°S, l'accord est bon avec les résultats de Teanby et al. (2006) qui ont supposé un profil croissant avec l'altitude pour inverser les données au nadir. A 54°N, cependant, nous obtenons une valeur deux fois supérieure à la leur qui est due au fait que nous obtenons alors un profil vertical quasi constant sous le

niveau 0.1 mbar. A 79°N, nous obtenons une valeur en accord avec celle obtenue par Coustenis et al. 2007 à 68°N.

A 54°S, nous obtenons un profil d'abondance de HCN en accord avec celui de Teanby et al. (2007) déduit à 58°S à 1 mbar (~ 200 km) et moins abondant d'un facteur 2 à 0.1 mbar (~ 290 km). A 15°S, notre profil n'est pas en accord avec celui de Teanby et al., et à 79°N, notre profil est moins abondant que celui obtenu par ces auteurs à 82°N. En comparaison avec les résultats déduits des données de Voyager (Coustenis et al. 1991), le profil d'abondance déduit ici à 79°N est plus abondant d'un facteur 2.5 à 1 mbar et en accord à 0.1 mbar.

10.1.3 L'éthane (C_2H_6)

Au-dessus du niveau 0.1 mbar, l'abondance de C_2H_6 varie très peu avec la latitude, alors que sous ce niveau elle augmente d'un facteur 2 (à 1 mbar) entre 54°S-15°S et 79°N.

A partir des données de Voyager, Coustenis et Bézard (1995) ont montré que l'abondance de cette molécule ne variait pas significativement avec la latitude. Ce résultat a été confirmé par Flasar et al. (2005) et Coustenis et al. (2007). Les valeurs d'abondance que nous déduisons à partir des données au nadir sont en très bon accord à 54°S, 15°S et 54°N avec celles déduites par Coustenis et al. 2007. A 79°N, l'abondance obtenue à 1 mbar est en accord avec celle déterminée à 68°N par Coustenis et al. (2007).

A 79°N, le profil d'abondance inversé ici est compris dans les barres d'erreur du profil déduit des données de Voyager (Coustenis et al., 1991), le minimum d'abondance n'apparaît pas sur ce profil d'abondance du fait de la faible résolution spatiale de ces observations (200 km).

10.1.4 Le propane (C_3H_8)

Au-dessus du niveau 1 mbar, l'abondance du propane varie très peu d'une latitude à l'autre, cette molécule ne présente pas d'enrichissement au pôle nord au-delà des barres d'erreur. A 54°S, 15°S et 79°N, nous obtenons des profils d'abondance croissant avec l'altitude, tandis qu'à 54°N, il décroît d'un facteur 2.3 entre 1 mbar et 0.1 mbar, ce qui n'est pas prédit par les modèles photochimiques. A 15°S, l'abondance que nous obtenons au niveau 3 mbar, correspondant à l'émission au nadir, est en accord avec les résultats obtenus à partir des données CIRS (Flasar et al., 2005, Coustenis et al. 2007), les données ISO (Coustenis et al., 2003) et les observations au sol à haute résolution ($6.2 \pm 1.2 \times 10^{-7}$, Roe et al., 2003).

A 79°N, à 1 mbar, nous obtenons une abondance comprise entre 0.3 et 1.7×10^{-6} , ce qui est en accord avec les résultats de Coustenis et al. (1991, données Voyager) et avec Coustenis et al. (2007) à 68°N.

10.1.5 Le méthylacétylène (CH_3C_2H)

Le profil vertical de CH_3C_2H est pratiquement constant avec l'altitude au-dessus du niveau 1 mbar en variant très peu entre 54°S, 15°S et 54°N et il croît d'un facteur 2 entre 1 et 3 mbar, à 54°S et 15°S. Cette molécule est assez fortement enrichie à 79°N, en gagnant un facteur 5 par rapport aux valeurs observées dans l'hémisphère sud.

A 15°S, l'abondance que nous obtenons à partir de l'émission au nadir ($9.1 \pm 0.4 \times 10^{-9}$) est légèrement supérieure à celle obtenue à partir des données Voyager ($6.5^{+2.0}_{-2.5} \times 10^{-9}$, Coustenis and Bézard, 1995) et en accord avec la valeur disque moyennée obtenue à partir des données ISO (Coustenis et al. 2003).

Aux niveaux sondés par les spectres au nadir, nous déduisons à 54°S et 54°N des abondances de $9.1 \pm 0.1 \times 10^{-9}$ et $2.2 \pm 0.3 \times 10^{-8}$, respectivement, en accord avec celles obtenues par Coustenis et al. (2007).

Le profil vertical que nous obtenons à 79°N diffère de façon importante de celui déduit par Coustenis et al. (1991) à 70°N à partir des données Voyager en particulier à cause du minimum d'abondance que nous observons vers 0.05 mbar (~ 300 km) qui ne pouvait être déduit des données Voyager du fait de la résolution verticale des spectres (200 km). A 79°N, nous déduisons une abondance égale à $5.4 \pm 1 \times 10^{-8}$, en accord avec les résultats de Coustenis et al. (2007) à 68°N, déduits de données nadir uniquement.

10.1.6 Le diacétylène (C_4H_2)

Les profils verticaux de C_4H_2 observés à 54°S et 15°S sont relativement pentus. A 1 mbar, ils présentent un fort enrichissement à 54°N et 79°N (de l'ordre d'un facteur 20 entre 15°S et 79°N). Deux minima d'abondance sont très fortement marqués à 54°N et 79°N et situés respectivement vers 0.02 mbar et 0.05 mbar.

A 15°S, à partir de l'émission nadir, nous obtenons une valeur d'abondance de C_4H_2 égale à $2.5 \pm 0.25 \times 10^{-9}$. Cette valeur est légèrement supérieure à celle déduite par Coustenis et Bézard (1995) en utilisant les données Voyager enregistrées à l'équateur, et en accord avec la valeur déterminée à partir des spectres de ISO (Coustenis et al., 2003). En comparant nos résultats obtenus à 54°S, 54°N et 79°N aux niveaux sondés par les émissions au nadir, nous obtenons des abondances supérieures à celles obtenues par Coustenis et al. (2007), ce qui peut s'expliquer par le fait que les auteurs utilisent des profils d'abondance constants avec l'altitude alors que nous observons un fort gradient.

Comme pour le CH_3C_2H , le profil vertical obtenu ici à 79°N diffère fortement de celui déduit des données Voyager à 70°N (Coustenis et al., 1991) car nous observons un minimum d'abondance très marqué vers 0.05 mbar qui ne pouvait être observé à partir des spectres de Voyager étant donné leur résolution verticale.

10.1.7 L'éthylène (C_2H_4)

L'abondance de C_2H_4 présente la grande particularité de décroître avec l'altitude entre 10 et 0.1 mbar à toutes les latitudes observées ici. Cette décroissance n'est pas prédite par les modèles photochimiques 1-D sans qu'une source arbitraire à la surface ne soit incorporée dans le modèle (Lara et al., 1996). A 79°N, le profil d'abondance présente un minimum marqué vers 0.07 mbar.

A 15°S, à 8 mbar, nous déduisons un rapport de mélange de C_2H_4 égal à $4.9 \pm 1.0 \times 10^{-7}$, ce qui est environ 5 fois supérieur aux valeurs obtenues à partir des spectres de Voyager (Coustenis et Bézard, 1995), aux résultats moyennés sur le disque

de ISO (Coustenis et al. 2003) et à ceux déduits des spectres nadir de CIRS (Coustenis et al. 2007). Cette différence s'explique par le fait que ces auteurs ont utilisé des profils verticaux d'abondance de C_2H_4 constants avec l'altitude, alors que le profil que nous inversons est très fortement décroissant avec l'altitude (d'un facteur 15 entre 10 et 0.3 mbar).

A $79^\circ N$, l'abondance que nous déduisons à 1 mbar est 4.5 fois supérieure à celle déduite par Coustenis et al. (2007) à $68^\circ N$, en considérant leur abondance inversée avec leur profil de température froid.

Vervack et al. (2004) ont publié une réanalyse des données d'une occultation solaire de Voyager 1 UVS aux latitudes $4^\circ N$ (ingress) et $16^\circ S$ (egress). Ils ont déterminé le profil de densité de C_2H_4 au-dessus de 500 km et déduisent une abondance $1-3 \times 10^{-6}$. Cette valeur est ~ 80 fois supérieure à celle que nous dérivons à $15^\circ S$ à 240 km. Si cela est confirmé, ceci indiquerait que l'abondance de C_2H_4 présente un minimum à une altitude comprise entre 240 et 500 km.

10.1.8 Le cyanoacétylène (HC_3N)

HC_3N est la molécule qui présente le plus fort enrichissement entre $54^\circ S$ - $15^\circ S$ et $79^\circ N$, celui-ci est de l'ordre d'un facteur 500. Les profils d'abondance à $54^\circ S$ et $15^\circ S$ sont très fortement croissants avec l'altitude. Ceci peut s'expliquer par le fait que cette molécule est relativement facilement dissociée par les rayons UV de grande longueur d'onde qui pénètrent dans la stratosphère (car non absorbé par le méthane) contrairement au rayonnement UV court qui est absorbé par le méthane, C_2H_6 et C_2H_2 à haute altitude. A $54^\circ S$ et $79^\circ N$, des minima d'abondance sont observés vers 0.04 mbar, celui à $54^\circ S$ est assez peu marqué.

Nous pouvons comparer le profil que nous avons inversé à $15^\circ S$ avec le profil moyenné sur le disque obtenu par Marten et al. (2002) à partir de données au sol en millimétrique. Ils obtiennent un profil vertical d'abondance croissant extrêmement vite avec l'altitude, passant de 10^{-12} à 100 km à 10^{-8} à 400 km. L'abondance inversée ici passe de 10^{-10} à 1 mbar (190 km) à 4×10^{-9} à 0.03 mbar (357 km), ce qui correspond à une pente moins élevée que celle du profil de Marten et al.

A $54^\circ S$ et $15^\circ S$, nos profils inversés sont en accord (entre 200 et 350 km), aux barres d'erreur près, avec les profils d'abondance inversés par Teanby et al. (2007). Le profil que nous inversons à $54^\circ N$ est moins abondant que celui de ces auteurs à $67^\circ N$. Ceci va dans le sens de l'enrichissement général des molécules qui augmente vers les hautes latitudes nord. A $79^\circ N$, nous inversons un profil d'abondance assez différent de celui de Teanby et al. (à $82^\circ N$) qui présente de fortes variations verticales de l'abondance de HC_3N avec deux minima d'abondance entre 200 et 300 km et deux maxima dans cette même gamme d'altitude dont les amplitudes atteignent un facteur 10. Nous ne pouvons observer de telles "oscillations" car la résolution verticale des observations que nous utilisons est de l'ordre de 50 km, tandis que les observations utilisées par Teanby et al. ont une résolution de 10 km.

A $79^\circ N$, l'abondance que nous obtenons à 1 mbar est en accord avec celle du profil déduit des données Voyager à $70^\circ N$ (Coustenis et al. 1991) mais nous obtenons une valeur inférieure à 0.1 mbar avec la présence d'un minimum d'abondance vers 0.05 mbar qui ne pouvait être observé à partir des données Voyager.

A 54°S et 15°S, les abondances que nous inversons à partir des spectres au nadir sont inférieures d'un facteur 10 à celles déterminées par Coustenis et al. (2007). Ceci s'explique par le fait que notre profil inversé croît très fortement avec l'altitude tandis que celui utilisé par ces auteurs est constant avec l'altitude. Les résultats que nous obtenons à 54°S et 15°S sont en accord avec ceux de Teanby et al. (2006) qui supposent un profil vertical d'abondance de HC₃N fortement croissant avec l'altitude, tandis qu'à 54°N, nous obtenons une valeur légèrement inférieure à la leur. A 54°N, notre profil est quasiment constant avec l'altitude et l'abondance obtenue au niveau sondé par le nadir est en accord avec celle de Coustenis et al. (2007). A 79°N, l'abondance obtenue est en accord avec Coustenis et al. (2007).

10.1.9 Le dioxyde de carbone (CO₂)

Le CO₂ est réparti de façon très homogène dans la stratosphère, du moins pour les quatre latitudes étudiées ici et est enrichi d'un facteur 2 entre 54°S et 79°N. Avec C₂H₆, CO₂ est la molécule dont la variation latitudinale de l'abondance est la moins marquée. A 54°N, son rapport de mélange est constant avec l'altitude entre 1 et 0.1 mbar et décroît avec l'altitude au-dessus.

A 54°S et 15°S, les abondances que nous déduisons aux niveaux sondés par les observations au nadir sont en bon accord avec les résultats de de Kok et al. (2007) qui dérivent une abondance de CO₂ quasi constante entre 80°S et 30°N égale à ~15 ppm. Nous sommes également en très bon accord avec les résultats de Coustenis et al. (2007).

10.1.10 Le benzène (C₆H₆)

Grâce aux données enregistrées au limbe par CIRS, nous avons pu déterminer pour la première fois le profil vertical du rapport de mélange de C₆H₆ à 79°N. Ce profil est constant aux barres d'erreur près et est en accord avec la valeur obtenue par Coustenis et al. (2007) à partir d'un spectre au nadir. Cependant, à 54°S, 15°S et 54°N, l'émission de C₆H₆ ne dépasse pas celle du bruit et nous déduisons des limites supérieures à 3- σ de l'abondance du benzène. Vers 200 km, à 54°S elle vaut 0.6×10^{-9} et 1×10^{-9} à 15°S et 54°N. Ces valeurs sont en accord avec celles déduites par Coustenis et al. 2007 à partir de spectres au nadir de CIRS et la valeur à 15°S est en accord avec la valeur moyennée sur le disque obtenue à partir des données ISO (Coustenis et al. 2003).

10.2 Comparaison avec les modèles photochimiques

10.2.1 Croissance de l'abondance avec l'altitude

Les profils verticaux d'abondance que nous avons inversés à partir des données de CIRS présentent certaines caractéristiques communes. A 54°S et 15°S, les abondances croissent avec l'altitude (sauf dans le cas de C₂H₄), comme prédit par les modèles photochimiques. En effet, ces composés minoritaires sont formés dans la haute atmosphère et transportés vers la basse stratosphère (50-100 km) où ils sont perdus par condensation (Yung et al., 1984; Toubanc et al., 1995; Lara et al., 1996; Wilson and

Atreya, 2004). A l'équateur, la seule exception est l'éthylène (C_2H_4) dont l'abondance décroît avec l'altitude sous 240 km. Ce comportement peut être expliqué par les modèles photochimiques 1-D uniquement si une source importante existe dans la basse stratosphère (Yung et al., 1984) ou si un flux important provenant de la surface est ajouté (Lara et al. 1996), ce qui est peu probable. Cette décroissance avec l'altitude peut être reliée au fait que l'abondance de C_2H_4 mesurée dans la basse stratosphère n'excède pas l'abondance au niveau du piège froid ($\sim 1.2 \times 10^{-6}$ d'après le profil de température que nous avons inversé à $15^\circ S$), ce qui est le seul cas parmi toutes les molécules détectées. Le profil d'abondance de C_2H_4 pourrait alors résulter d'un puit dans la haute atmosphère et d'un enrichissement dans la basse stratosphère et la troposphère causé par le retour de la branche descendante de la cellule de circulation stratosphérique apportant de l'air enrichi du pôle nord (Crespin et al., 2005).

Les profils verticaux d'abondance des molécules présentent différentes pentes à une latitude donnée. Généralement, les modèles 1-D photochimiques ont des difficultés à reproduire simultanément les profils verticaux de toutes les molécules détectées. Le modèle de Wilson et Atreya (2004), qui est le plus récent, reproduit globalement la forme des profils, bien que certains désaccords existent. Leur profil de C_2H_2 croît d'un facteur 5 entre 150 et 450 km, tandis que nous observons une augmentation d'un facteur ~ 2 . Notre rapport de mélange de HCN à la même latitude est 3 fois inférieur au modèle nominal de Wilson et Atreya à 110 km, alors que les deux sont proches à 400 km. Le profil observé du propane est en accord avec le modèle photochimique. Le profil d'abondance de CH_3C_2H que nous inversons à $15^\circ S$ est moins pentu que celui du modèle, alors que les deux sont en accord vers 130 km. Le profil d'abondance de C_2H_6 que nous inversons à $15^\circ S$ est en assez bon accord avec le modèle de Wilson et Atreya. La limite supérieure que nous déduisons pour l'abondance de C_6H_6 à $15^\circ S$ est en accord avec leur profil d'abondance prédit qui montre des valeurs légèrement plus faibles aux pressions comparables. Notre limite supérieure est également en accord avec le profil vertical du benzène de Lebonnois (2005).

Certains désaccords sont probablement liés à l'existence de processus chimiques non pris en compte, et d'autres résultent probablement d'effets dynamiques à grande échelle qui ne sont pas inclus dans les modèles photochimiques 1-D.

A $54^\circ S$ et $15^\circ S$, les abondances des molécules varient très peu entre ces deux latitudes, ce qui est bien prédit par les modèles de circulation générale. En effet, dans l'hémisphère d'été (hémisphère sud actuellement) et aux latitudes équatoriales, la dynamique atmosphérique a des effets bien moins marqués sur les variations latitudinales d'abondance que dans l'hémisphère d'hiver. Dans l'hémisphère sud, la cellule de circulation stratosphérique remonte en apportant de l'air appauvri en molécules, celles-ci ayant condensé dans la branche descendante de la cellule au niveau du pôle d'hiver.

10.2.2 Enrichissement à haute latitude nord

A haute latitude nord, à basse altitude, un net enrichissement est généralement observé et est d'autant plus élevé vers le pôle. Cet enrichissement est lié à la subsidence de la cellule de circulation stratosphérique qui apporte de l'air enrichi provenant des hautes altitudes - où sont formées les molécules - vers les basses altitudes.

L'enrichissement est plus ou moins marqué suivant la molécule. Par exemple, HC_3N et HCN , qui ont des profils d'abondance très pentus à 54°S et 15°S , montrent un très fort enrichissement à haute latitude nord. Comme les abondances de ces molécules à haute altitude sont bien plus élevées qu'à basse altitude, la descente d'air du pôle d'hiver entraîne un net enrichissement à basse altitude. Pour les molécules qui présentent un faible gradient vertical d'abondance à latitude moyenne, comme C_2H_2 ou C_2H_6 , l'enrichissement est plus modéré.

10.2.3 Minima d'abondance dans l'hémisphère nord à haute altitude

A 54°N , à haute altitude, lorsque le rapport signal-à-bruit permet de déduire de l'information verticale au dessus du niveau 0.1 mbar, un minimum d'abondance vers 0.02 mbar (~ 360 km) apparaît sur les profils de C_2H_2 , HCN , C_4H_2 et plus légèrement pour C_2H_6 et HC_3N . Pour CO_2 et C_3H_8 le profil a tendance à décroître avec l'altitude, mais nous ne pouvons pas conclure à l'existence d'un minimum d'abondance vers 0.02 mbar, du fait du rapport signal-à-bruit trop faible.

A 79°N , un minimum d'abondance est également observé à une pression plus élevée, vers 0.07 mbar (280 km) pour C_2H_2 , HCN , C_2H_6 , C_2H_4 , C_4H_2 , $\text{CH}_3\text{C}_2\text{H}$ et HC_3N . Ces minima d'abondance concernent ainsi les mêmes molécules qu'à 54°N .

Ces minima d'abondance à haute latitude nord n'ont jamais été observés auparavant en raison de la résolution spatiale des observations de Voyager/IRIS. Ceux-ci n'étaient pas prédits par les modèles photochimiques et dynamiques. Si toutes les molécules possèdent un minimum d'abondance à une altitude bien précise, ceci pourrait s'expliquer par des phénomènes dynamiques. Ces molécules possèdent des temps de vie photochimique très variables, allant de 0.04 années pour C_4H_2 à 730 années pour C_2H_6 (voir Wilson et Atreya, 2004), et peuvent être soit supérieur ou inférieur aux temps caractéristiques dynamiques qui sont de l'ordre de 3 ans (soit ~ 0.1 année de Titan).

Quatrième partie

IV. Rapports isotopiques

CHAPITRE 11

Rapports isotopiques $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ et $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$

Sommaire

| | |
|---|------------|
| 11.1 Le rapport isotopique $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$: introduction | 118 |
| 11.1.1 Le rapport $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ dans le système solaire | 118 |
| 11.1.2 Mesure de $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ dans l'atmosphère de Titan | 120 |
| 11.1.3 Implications de la valeur du rapport $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ dans Titan | 120 |
| 11.2 Le rapport isotopique $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$: introduction | 121 |
| 11.2.1 Le rapport $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ dans le système solaire | 121 |
| 11.2.2 Mesure de $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ dans l'atmosphère de Titan | 122 |
| 11.2.3 Implications de la valeur du rapport $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ dans Titan | 123 |
| 11.3 Déterminations des rapports $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ et $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ à partir des données de CIRS | 124 |
| 11.3.1 Détection et modélisation de HC^{15}N et H^{13}CN | 124 |
| 11.3.2 Observations utilisées pour les inversions | 126 |
| 11.3.3 Inversion des abondances de HCN et ses isotopes | 127 |
| 11.3.4 Tests de la variation verticale des rapports $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ et $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ | 127 |
| 11.3.5 Profils d'abondance inversés de HC^{15}N et H^{13}CN | 132 |
| 11.3.6 Rapports isotopiques et calculs des barres d'erreur | 133 |
| 11.3.7 Rapport $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$: résultats, comparaison aux autres observations et implications | 137 |
| 11.3.8 Rapport $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$: résultats, comparaison aux autres observations et implications | 138 |

Deux atomes sont dits isotopes s'ils ont le même nombre de protons mais un nombre de neutrons différents. La différence de masse atomique distingue donc deux isotopes. Le rapport isotopique est égal au quotient du nombre d'isotopes lourds sur le nombre d'isotopes légers d'un élément donné. En planétologie, la connaissance de ces rapports fournit des informations sur l'évolution des différents corps du système solaire. La modification de la composition isotopique d'un élément, appelée fractionnement, peut être

causée par plusieurs phénomènes, comme l'échappement atmosphérique qui a tendance à enrichir l'atmosphère en isotope lourd car l'isotope léger s'échappe plus facilement. Les réactions chimiques peuvent également favoriser un isotope par rapport à un autre. Dans le cas d'une atmosphère planétaire, les rapports isotopiques sont toujours mesurés dans des molécules. Dans la pratique, ils sont déterminés de la manière suivante. Si nous nous intéressons au rapport isotopique d'un atome présent une seule fois dans une molécule, alors le rapport isotopique de l'atome considéré est donné par le quotient de l'abondance de l'isotope lourd de cette molécule sur l'abondance de son isotope léger. C'est le cas de N dans la molécule HCN, où le rapport $R = ^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ est donné par le rapport $q_{\text{HC}^{15}\text{N}}/q_{\text{HC}^{14}\text{N}}$, où q désigne l'abondance. Par contre, si nous cherchons à mesurer le rapport D/H dans le CH_4 , nous aurons $R = \text{D}/\text{H} = 0.25 \times q_{\text{CH}_3\text{D}}/q_{\text{CH}_4}$, car le méthane comporte 4 atomes d'hydrogène.

Le rapport isotopique d'un atome peut être mesuré au sein de la molécule la plus abondante de l'atmosphère qui constitue un réservoir atmosphérique de l'atome considéré. Par exemple, N_2 constitue le réservoir principal d'azote dans l'atmosphère de Titan et de la Terre. La mesure d'un rapport isotopique dans un tel réservoir nous donne de précieux renseignements sur l'évolution de la planète. Si ce rapport isotopique diffère de celui du matériaux de la nébuleuse primitive qui a été incorporé dans la planète, alors cela nous renseigne sur l'évolution de l'atmosphère et peut permettre, en particulier, de quantifier l'échappement planétaire. Si le rapport isotopique est déterminé dans une molécule autre que le réservoir atmosphérique principal de l'atome, et que la valeur de ce rapport diffère de celle mesurée dans le réservoir principal, alors il existe un processus de fractionnement au sein de l'atmosphère qui enrichit ou appauvrit l'isotope lourd par rapport à l'isotope léger.

Nous allons nous intéresser ici à trois rapports isotopiques mesurés dans l'atmosphère de Titan à partir des données enregistrées par CIRS : $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$, $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ et D/H. La détermination des rapports $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ et $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ dans le HCN est décrite dans cette Section et celle du rapport D/H dans le C_2H_2 sera décrite dans la Section 12.

Avant de nous focaliser sur la détermination des rapports $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ et $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ dans le HCN à partir des spectres enregistrés par CIRS, nous allons présenter succinctement ce que représente la mesure de ces rapports dans le système solaire, quelles sont leurs valeurs dans l'atmosphère de Titan et quelles en sont les implications.

11.1 Le rapport isotopique $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$: introduction

11.1.1 Le rapport $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ dans le système solaire

Le rapport isotopique $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ a été déterminé dans de nombreux objets du système solaire (voir pour exemple la Fig. 11.1 issue de Owen et al. 2001). Sur Terre $[^{15}\text{N}/^{14}\text{N}]_{\oplus} = 3.66 \times 10^{-3}$ dans N_2 (soit $[^{14}\text{N}/^{15}\text{N}]_{\oplus} = 272$, Fegley et al. 1995).

La valeur de ce rapport isotopique permet d'étudier l'évolution d'une atmosphère à condition de connaître sa valeur dans la nébuleuse primitive. Celle-ci est probablement similaire à la valeur du rapport $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ solaire, or celui-ci n'a pas été déterminé de façon certaine à ce jour. Cependant, il est possible d'utiliser les rapports isotopiques mesurés dans Jupiter qui sont proches de la valeur solaire et donc des rapports isotopiques de la nébuleuse primitive. En effet, Jupiter présente les mêmes abondances

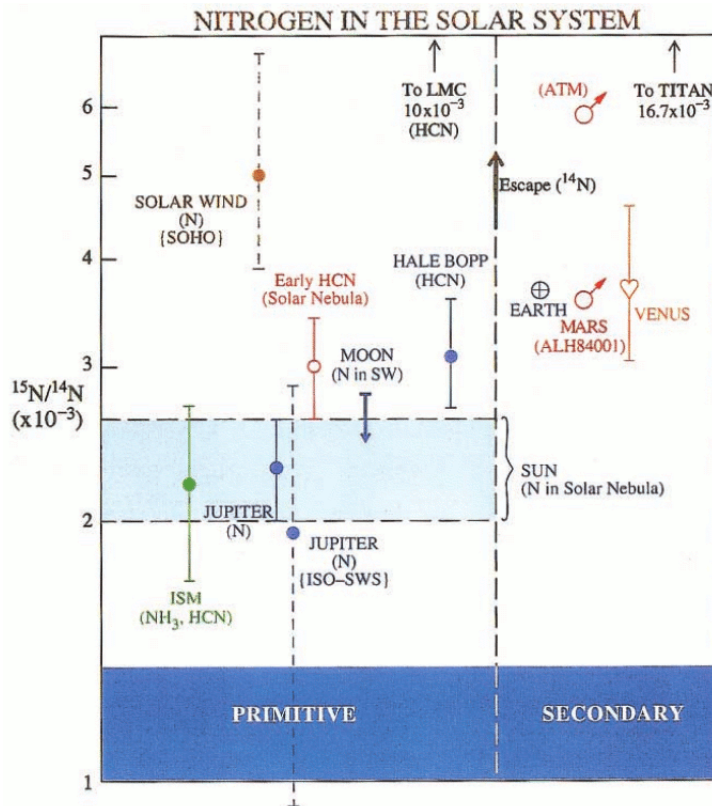


FIG. 11.1: Rapport isotopique $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ dans le système solaire. Figure issue de Owen et al. (2001). Partie gauche : Mesures de $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ dans des réservoirs primitifs d'azote : dans le milieu interstellaire local (Dahmen et al. 1995), le Grand Nuage de Magellan (Chin et al. 1999), le vent solaire (SOHO : Kallenbach et al. 1998) et une limite supérieure déduite des sols lunaires (Hashizume et al. 2000), la comète Hale Bopp (Jewitt et al. 19997), et deux mesures dans Jupiter à partir de l'instrument ISO/Short Wavelength Spectrometer (Fouchet et al. 2000) et in situ à partir de Galileo/GPMS (Owen et al. 2001). Le point "Early HCN" est une valeur déduite de celle mesurée dans Jupiter par Owen et al. (2001) en utilisant le travail de Terzieva and Herbst (2000). Cette valeur calculée est en accord avec la valeur observée dans la comète Hale Bopp. Partie droite : $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ mesuré sur Terre, Mars (Nier and McElroy 1977, Mathew and Marti 2001), Venus (Hoffman et al. 1980) et Titan (Marten et al. 1997). La flèche sur la ligne de division montre la direction de l'enrichissement de $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ résultant de l'échappement préférentiel de ^{14}N dans les atmosphères planétaires.

relatives de N, C, S, Ar, Kr et Xe que le Soleil (Owen et al. 1999, Mahaffy et al. 2000). D'après Mahaffy et al. (1998), les rapports D/H et $^3\text{He}/^4\text{He}$ de Jupiter sont égaux aux rapports isotopiques de la nébuleuse primitive, en supposant que l'atmosphère de Jupiter soit composée principalement du gaz de la nébuleuse primitive, avec une très faible contribution de source d'hydrogène ou d'hélium fractionné, issue des planétésimaux glacés. De plus, Jupiter présente les mêmes rapports isotopiques $^{36}\text{Ar}/^{38}\text{Ar}$ et $^{20}\text{Ne}/^{22}\text{Ne}$ que les rapports solaires (Mahaffy et al. 2000) et un rapport $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ proche de celui observé dans tout le système solaire (Niemann et al., 1998). Il existe donc de fortes présomptions pour que l'azote de Jupiter présente un rapport isotopique proche de la valeur solaire. Lors de sa plongée dans l'atmosphère de Jupiter, le 7 décembre 1995, l'instrument Galileo Probe Mass Spectrometer (GPMS) à bord de la sonde Galiléo, a acquis de nombreuses données in situ qui ont permis de déduire $^{15}\text{N}/^{14}\text{N} = (2.3 \pm 0.3) \times 10^{-3}$ dans le NH_3 (Owen et al. 2001). Cette valeur serait donc représentative de la valeur du rapport $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ dans la nébuleuse primitive. Nous allons voir ci-dessous

ce que vaut ce rapport dans l'atmosphère de Titan, comment il se compare à la valeur de $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ primitif et quelles en sont les implications.

11.1.2 Mesure de $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ dans l'atmosphère de Titan

La première détection certaine du HC^{15}N dans l'atmosphère de Titan est présentée dans la thèse de Taufiq Hidayat. Il a observé simultanément la raie HC^{15}N (3-2) à 258.16 GHz et la raie HC^{14}N (1-0) à 88.6 GHz avec le télescope de 30 mètres de l'IRAM. Il en déduit un rapport isotopique $^{14}\text{N}/^{15}\text{N} \sim 120$, inférieur à la valeur terrestre d'un facteur 2.3. Ces observations ont été ensuite reprises et complétées dans le papier de Marten et al. (2002) qui déduisent un rapport $\text{HC}^{14}\text{N}/\text{HC}^{15}\text{N}$ compris entre 60 et 70, soit un enrichissement ^{15}N qui vaut 3.9 - 4.5 fois l'enrichissement terrestre. Gurwell (2004) a également évalué ce rapport à partir des mêmes raies rotationnelles enregistrées par le Submillimeter Array. Il déduit deux valeurs possibles suivant le profil de température utilisé pour modéliser l'atmosphère. Avec le profil de température obtenu par Coustenis et Bézard (1995), il obtient une valeur $^{14}\text{N}/^{15}\text{N} = 94 \pm 13$, alors qu'en utilisant le profil de E. Lellouch (1990), il déduit un rapport égal à 72 ± 9 en accord avec la valeur de Marten et al.

Alors que toutes les valeurs obtenues depuis des observations au sol sont moyennées sur le disque de Titan (non résolu par les télescopes), la sonde Cassini permet de déduire ce rapport isotopique à une latitude précise de Titan. Le rapport isotopique $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ a été déterminé in situ grâce aux données de l'instrument Gas Chromatograph Mass Spectrometer (GCMS, Niemann et al. 2002) à bord de Huygens. Niemann et al. (2005) déduisent un rapport $^{14}\text{N}/^{15}\text{N} = 183 \pm 5$ dans le N_2 entre 36 et 41 km. Ce rapport isotopique a aussi été déterminé à partir des données de l'instrument Ion Neutral Mass Spectrometer (INMS, Waite et al. 2004) à bord de Cassini. A partir des données enregistrées à 1200 km, Waite et al. (2005) déduisent une valeur in situ du rapport $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ comprise entre 172 et 215. La valeur de surface correspondante est comprise entre 168 et 211, ce qui est en accord avec les résultats déduits des données du GCMS. Ces différents résultats sont résumés dans la Table 11.1.

11.1.3 Implications de la valeur du rapport $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ dans Titan

Avant de voir les implications des valeurs de ces rapports isotopiques, rappelons que le N_2 constitue le réservoir principal d'azote de l'atmosphère de Titan et que le HCN est une molécule issue de la dissociation de N_2 dans la haute atmosphère. Les différents résultats listés ci-dessus mettent en évidence deux points importants :

(i) La valeur du rapport $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ est plus élevée dans le N_2 de l'atmosphère de Titan que dans le NH_3 de l'atmosphère de Jupiter (supposée représenter la valeur de la nébuleuse solaire).

(ii) La comparaison des rapports $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ de Titan obtenus dans le HCN (compris entre 63 et 107, déduit des données millimétriques au sol) à ceux obtenus dans le N_2 (entre 178 et 188, mesures in situ GCMS) montre que le ^{15}N est enrichi d'un facteur 1.5 dans HCN par rapport à N_2 .

Nous allons détailler quelles sont les implications de ces deux remarques.

(i) L'atmosphère de Titan est probablement issue d'une atmosphère primitive de NH_3 dont le rapport isotopique $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ devait être celui de la nébuleuse primitive, et donc similaire à la valeur solaire. Pourquoi observe-t-on un enrichissement en ^{15}N dans le N_2 actuellement ? Cet enrichissement observé est provoqué par un échappement atmosphérique de l'azote, l'isotope lourd s'échappant plus difficilement que l'isotope léger. Cet échappement, qui s'effectue sur des temps géologiques est probablement lié à un échappement non thermique. En effet, en prenant pour valeur $g=1.35 \text{ m.s}^{-1}$ et $R=2575 \text{ km}$, la vitesse d'échappement de Titan vaut $v_{ech} = \sqrt{2gR} = 2.6 \cdot 10^3 \text{ m.s}^{-1}$, alors que la vitesse thermique vaut, si on s'intéresse à N_2 : $v_{th} = \sqrt{2kT/m} = 10.2 \text{ m.s}^{-1}$ en prenant $T = 170 \text{ K}$ (qui est une valeur moyenne de la température mesurée dans la thermosphère par l'instrument Huygens/HASI) et $m=27/(6.02 \cdot 10^{23}) \text{ g}$. En comparant ces deux vitesses, il est très net que, du fait de la faible température de la haute atmosphère de Titan, il ne peut exister un échappement atmosphérique thermique de N_2 . En revanche, un échappement non thermique existe au travers de la dissociation par impact de N_2 avec les électrons provenant de la magnétosphère de Saturne : $\text{N}_2 + e^- \rightarrow \text{N}^* + \text{N}^*$.

Tout ceci laisse donc supposer que l'atmosphère de Titan était auparavant plus massive qu'elle ne l'est aujourd'hui. Lunine et al. (1999), en supposant que la valeur terrestre du rapport $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ est représentative de la valeur de la nébuleuse solaire, et en utilisant la valeur du rapport mesuré dans le HCN en millimétrique (la mesure dans le N_2 n'avait pas encore été réalisée), ont déduit que l'atmosphère de Titan était 20 à 100 fois plus massive qu'elle ne l'est aujourd'hui. En utilisant la valeur déduite du GCMS, Niemann et al. (2005) ont réévalué la masse de l'atmosphère primitive, entre 2 et 10 fois la valeur actuelle. Enfin, Waite et al. (2005) concluent que l'atmosphère de Titan était au moins 50 % plus dense dans le passé.

(ii) La valeur obtenue d'après les observations millimétriques est mesurée non pas dans le N_2 (réservoir principal de N de Titan), mais dans le HCN qui est une molécule fille de N_2 . Le fait que le HCN soit plus enrichi en ^{15}N que ne l'est le N_2 suggère qu'un processus lié à la formation du HCN (ou à sa destruction) favorise (ou défavorise) l'isotope lourd par rapport à l'isotope léger. Les différentes possibilités seront détaillées plus loin dans la Section 11.3.8.

11.2 Le rapport isotopique $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$: introduction

11.2.1 Le rapport $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ dans le système solaire

^{12}C et ^{13}C sont respectivement des produits primaires et secondaires des processus thermonucléaires se produisant au sein des étoiles. Le rapport isotopique $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ mesuré dans le système solaire est donc, en principe, caractéristique du degré d'évolution de la galaxie où le système solaire s'est formé il y a 4,5 milliards d'années. La plupart du carbone de la nébuleuse protosolaire existait principalement sous forme solide, avec seulement 15-30 % sous forme de composés très volatiles que sont le CO et le CH_4 (Encrenaz et al. 1988). Les planètes, formées à partir des planétésimaux, devaient donc

toutes présenter le même rapport isotopique. En conséquence, la valeur du $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ est approximativement la même partout où elle est mesurée dans le système solaire (en tenant compte des barres d'erreur des mesures). Dans Mars, Vénus, Jupiter, Saturne et Titan, la valeur du rapport $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ est comparable à la valeur terrestre qui vaut 89^1 (Fegley et al. 1995), nous discuterons en détail cette valeur obtenue dans Titan à la Section 11.2.2. Ce rapport isotopique a aussi été mesuré dans une douzaine de comètes qui font partie des objets les plus primitifs du système solaire. Les valeurs obtenues dans ces objets sont généralement proches de la valeur terrestre, ou l'incluent dans leur barres d'erreur (e.g., la comète Linear où $^{12}\text{C}/^{13}\text{C} = 120 \pm 25$ dans le CN, E. Jehin, 2003). En revanche, le rapport isotopique mesuré dans le milieu interstellaire actuel, peut différer de celui mesuré dans les différents corps du système solaire. En effet, le système solaire s'est formé il y a 4.5 milliards d'années et était situé à un endroit différent de la Voie Lactée où le rapport $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ne présentait pas forcément la même valeur.

11.2.2 Mesure de $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ dans l'atmosphère de Titan

La valeur du rapport $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ dans le HCN de l'atmosphère de Titan a été déterminée pour la première fois par Hidayat et al.(1997). Les auteurs ont analysé la raie rotationnelle (4-3) à 345.34 GHz (millimétrique) enregistrée au JCMT (Mauna Kéa, Hawaii) et en ont déduit un rapport $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$, moyenné sur le disque, compris entre 70 et 120 en-dessous de 200 km. Cette valeur englobe la valeur terrestre à plus ou moins 25 %. Elle est également en accord avec celle calculée dans le C_2H_6 à 12 microns par Orton et al. (1992), à partir d'observations au sol en infrarouge thermique. Le rapport $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ dans le HCN a aussi été mesuré par Gurwell (2004) à partir de la même raie rotationnelle depuis le Submillimeter Array. Il déduit deux valeurs possibles de ce rapport suivant le profil de température qu'il utilise pour modéliser l'atmosphère. Avec le profil de température obtenu par Coustenis et Bézard (1995), il obtient une valeur égale à 132 ± 25 , alors qu'en utilisant le profil de Lellouch (1990), il déduit un rapport égal à 108 ± 20 . Les barres d'erreur du second incluent la valeur du rapport isotopique terrestre. D'autre part, en septembre 2006, Mark Gurwell nous a fait part du fait qu'il allait réactualiser son papier de 2004 en proposant une révision des valeurs de ce rapport isotopique. Il obtient de nouveaux résultats plus proches de la valeur terrestre (communication privée).

Ainsi, avant la mission Cassini/Huygens, les valeurs de ce rapport isotopique, moyennées sur le disque de Titan, étaient toutes en relativement bon accord et comparables à la valeur terrestre. Grâce aux instruments de la mission Cassini/Huygens qui résolvent parfaitement le disque de Titan, ce rapport peut maintenant être déterminé à des latitudes précises.

L'instrument GCMS à bord de Huygens a permis de déterminer la valeur de ce rapport à 10°S . En utilisant les mesures effectuées sur le méthane, Niemann et al.

¹La référence internationale du rapport isotopique $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ terrestre inorganique a été mesurée dans un carbonate de calcium provenant d'un fossile de bélemnite (animal apparenté à la seiche datant du Crétacé, -145.5 à -65.5 Ma), extrait de la formation géologique Pee Dee de Caroline du Sud (USA). Cette référence est souvent noté PDB, pour Pee Dee Belemnite. $[^{13}\text{C}/^{12}\text{C}]_{\text{PDB}} = 11237.2 \pm 2.9$ ppm.

| Observation | $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ | $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ | altitude | référence |
|-------------------------------------|---|---|----------------------|-----------------------|
| Observation sol millimétrique | 70 - 120 | - | en-dessous de 200 km | Hidayat et al. (1997) |
| | 132 ± 25 , 108 ± 20 | 94 ± 13 , 72 ± 9 | en-dessous de 300 km | Gurwell (2004) |
| | - | 60.5 - 70 | en-dessous de 350 km | Marten et al. (2002) |
| In situ Huygens/GCMS | 82.3 ± 1 | - | 18.2 - 6.14 km | Niemann et al. |
| | - | 183 ± 5 | 40.9 - 35.9 km | (2005) |
| In situ Cassini/INMS | 95.6 ± 0.1 | 172 - 215 | 1200 km | Waite et al. |
| | 81 | 168 - 211 | 0 km (estimation) | (2005) |
| Infrarouge Cassini/CIRS | 82_{-18}^{+27} (15°S) | - | 80 - 260 km | Bézar et al. (2007) |
| | 89_{-18}^{+22} (15°S) | 56_{-13}^{+16} (15°S) | 150 - 350 km | Vinatier et al. |
| | 68_{-12}^{+16} (83°N) | 56_{-9}^{+10} (83°N) | 165 - 300 km | 2007 (sous presse) |

TAB. 11.1: Valeurs des rapports isotopiques $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ et $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ mesurés dans l'atmosphère de Titan. Le rapport $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ terrestre est égal à 89 et le rapport $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ vaut 272 (Fegley et al., 1995). Les rapports isotopiques obtenus depuis le sol en millimétrique et les rapports obtenus à partir des données CIRS sont obtenues dans le HCN. Les rapports mesurés in situ par Huygens/GCMS et Cassini/INMS sont obtenus dans le N_2 et le CH_4 .

(2005) ont déduit un rapport $^{12}\text{C}/^{13}\text{C} = 82.3 \pm 1$ entre 18 et 6 km à 10°S . Les données de l'instrument Ion Neutral Mass Spectrometer (INMS) à bord de Cassini ont également permis de déduire ce rapport isotopique in situ. Waite et al. (2005) déduisent une valeur $^{12}\text{CH}_4/^{13}\text{CH}_4 = 95.6 \pm 1$ à 1200 km et l'estiment égale à 81 à la surface, ce qui est en accord avec les résultats du GCMS. Ces valeurs obtenues in situ sont donc elles aussi proches de la valeur terrestre et en accord avec les valeurs de $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ obtenues dans le HCN de Titan depuis le sol en millimétrique.

La Table 11.1 résume les différentes valeurs du rapport $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ mesurées dans l'atmosphère de Titan.

11.2.3 Implications de la valeur du rapport $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ dans Titan

En conclusion, les valeurs du rapport $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ mesurées dans le HCN et dans le CH_4 sont en bon accord avec la valeur terrestre, et donc proche du rapport isotopique mesuré dans de nombreux objets du système solaire. Rappelons que le méthane est le deuxième constituant le plus abondant de l'atmosphère de Titan. Cette molécule constitue le réservoir de carbone, et HCN est une molécule fille issue de la photodissociation du méthane dans la haute atmosphère.

Que signifie le fait que le rapport isotopique $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ mesuré dans Titan soit proche de celui des autres objets du système solaire ? Nous avons vu dans la Section 11.1.3 que le rapport $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ présentait un enrichissement dans le N_2 dû à l'échappement plus efficace de ^{14}N par rapport à ^{15}N . La mesure du rapport $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ dans le méthane, le réservoir principal de carbone, montre un enrichissement en ^{13}C très faible comparé à la valeur terrestre. Or, le carbone présente un nombre de masse proche de celui de ^{14}N , il devrait donc aussi être fractionné par échappement et l'atmosphère devrait s'enrichir en ^{13}C au cours des temps géologiques. En fait, cet enrichissement n'est pas observé car le méthane a une durée de vie bien inférieure à l'âge de Titan. Nous savons que le méthane est irrémédiablement détruit par photodissociation dans la

haute atmosphère, et tout le méthane de Titan aurait ainsi dû disparaître en quelques dizaines de millions d'années. La seule explication à la valeur de l'abondance de CH_4 observée aujourd'hui est que cette molécule possède très probablement une source interne et a été/est libérée soit de façon continue, soit discontinue au cours d'épisodes de dégazage. Il s'ensuit donc un renouvellement du méthane atmosphérique. A priori, le méthane a été piégé dans l'intérieur de Titan avec un rapport $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ qui correspond à la valeur mesurée dans tout le système solaire. Le renouvellement du méthane tend donc à restaurer un rapport $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ primordial et limite ainsi la diminution de ce rapport par échappement. En fait, pour qu'il y ait un enrichissement de ^{13}C par rapport à ^{12}C , il faut que le taux d'échappement soit non négligeable face au taux de destruction de CH_4 par photodissociation. Or les mesures des profils de densité de N_2 , CH_4 et Ar par l'instrument INMS semblent indiquer que ces deux taux sont du même ordre de grandeur (R. Yelle, communication privée).

Nous avons vu que le HCN ne semble pas présenter un enrichissement plus important en ^{13}C que le CH_4 . Comme le HCN est une molécule fille de CH_4 , cela signifie que le carbone ne présente pas de phénomène de fractionnement dans la formation/destruction de HCN.

Nous venons de voir les valeurs des rapports $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ et $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ mesurés dans HCN, N_2 et CH_4 . Les observations depuis le sol sont moyennées sur le disque de Titan, et les mesures réalisées par l'instrument GCMS ne concerne qu'une seule latitude. Dans le cas de INMS, les résultats concernant une seule latitude ont actuellement été publiés. L'instrument CIRS, avec ses nombreux survols de Titan et sa bonne résolution spatiale, permettra de déterminer ce rapport à plusieurs latitudes et altitudes. Nous allons présenter dans les sections suivantes les déterminations de ces rapports isotopiques dans le HCN à 15°S et 80°N à partir des données nadir et des données au limbe et la recherche d'éventuelles variations latitudinales et verticales de ces deux rapports.

11.3 Déterminations des rapports $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ et $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ à partir des données de CIRS

11.3.1 Détection et modélisation de HC^{15}N et H^{13}CN

Jusqu'à présent, HC^{15}N et H^{13}CN n'avaient jamais été détectés dans la gamme de longueur d'onde observées par CIRS ($7\ \mu\text{m}$ - $1\ \text{mm}$). Nous avons mis en évidence les émissions de ces deux isotopes en effectuant des inversions des profils d'abondance de HCN et C_2H_2 . Pour ce faire, j'ai modélisé les bandes d'émission des différentes molécules en utilisant la banque de données GEISA 2003. En modélisant les spectres enregistrés à 15°S (survol Tb, voir Partie 7.3), nous nous sommes aperçus que les spectres calculés au limbe et au nadir ne reproduisaient pas deux émissions observées à $706\ \text{cm}^{-1}$ et $711\ \text{cm}^{-1}$. La Fig. 11.2 montre, en traits pleins gris, les spectres calculés avec le fichier spectroscopique de GEISA 2003, comparés aux spectres observés à 15°S (gauche), représentés en diamants reliés par des pointillés.

Ces deux émissions à $706\ \text{cm}^{-1}$ et $711\ \text{cm}^{-1}$, apparaissent sur plusieurs spectres au-delà du niveau de bruit, et peuvent donc être dues à des composés dont les bandes ne sont pas incluses dans GEISA 2003. Avant de rechercher d'éventuelles signatures de

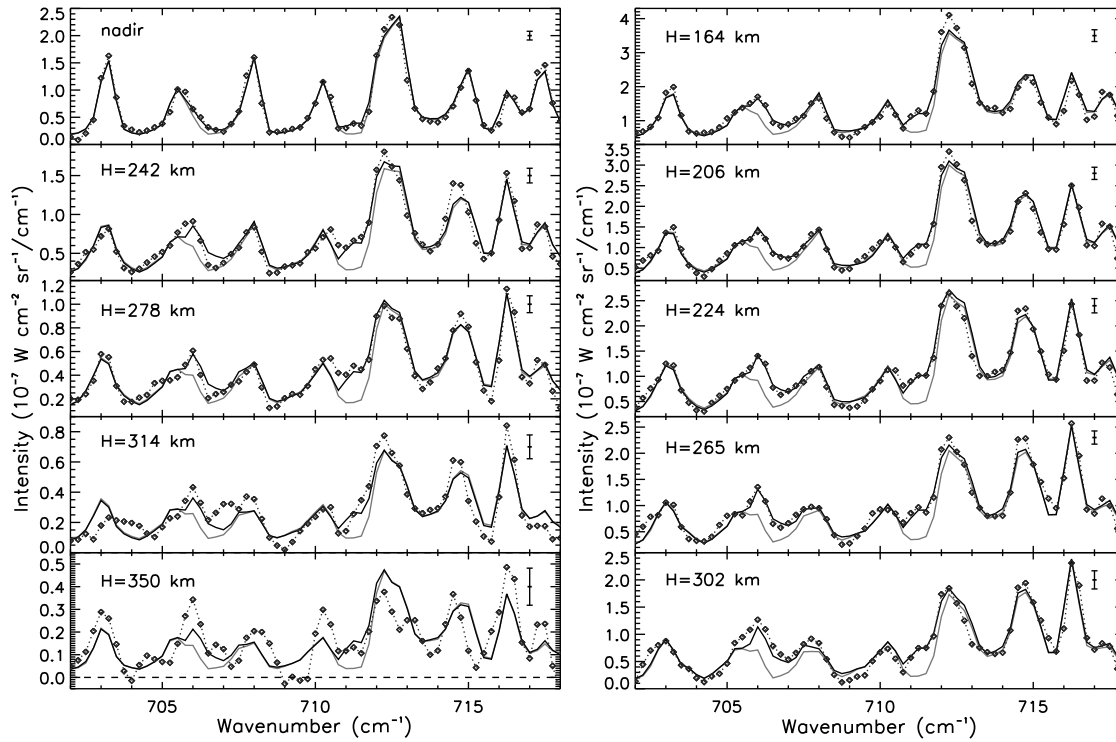


FIG. 11.2: Comparaison entre les spectres observés (pointillés avec diamants) et calculés incluant les émissions de HC^{15}N et H^{13}CN (traits pleins noirs), pour le nadir et 4 limbes à 15°S (à gauche) et 5 limbes à 83°N (à droite). Les spectres calculés sans les émissions des deux isotopes sont aussi présentés (traits pleins gris), afin de souligner la détection de H^{13}CN à 706 cm^{-1} et HC^{15}N à 711 cm^{-1} sur le spectre nadir et sur les limbes. Les profils d'abondance de $\text{H}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$, H^{13}CN et HC^{15}N correspondants sont présentés dans la Fig. 11.8. Les barres d'erreur égales aux valeurs des rms des fits sont données pour chaque spectre (en haut à droite).

molécules non détectées sur Titan, il faut d'abord s'assurer que l'émission n'est pas due à une bande chaude² d'une molécule connue, ou à l'émission de l'isotope d'une molécule, qui ne seraient pas inclus dans la base de données spectrales utilisée. Ce fut le cas ici. Après vérification dans la littérature, ces deux émissions se sont avérées être celles des deux isotopes de $\text{H}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$ (qui sera noté HCN dans la suite) : H^{13}CN et HC^{15}N . Le papier de G. Duxbury et Y. Gang (1989) présente les mesures expérimentales des intensités des bandes de plusieurs isotopes du $\text{H}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$ autour de 710 cm^{-1} (la bande du HCN que nous observons avec CIRS est située à 713 cm^{-1}). En particulier, ils étudient la bande ν_2 de HC^{15}N située à 711 cm^{-1} et la ν_2 de H^{13}CN située à 706 cm^{-1} . Ces deux bandes constituent donc deux très bonnes candidates pour les 2 émissions observées à ces deux mêmes nombres d'onde sur les spectres de CIRS. Comme le fichier spectroscopique de GEISA ne liste pas cette bande des isotopes, nous avons effectué le calcul de ce fichier.

²La population N_ν d'un niveau vibrationnel ν est reliée à la population N_0 du niveau fondamental par le facteur de Boltzmann :

$$\frac{N_\nu}{N_0} = \exp\left(-\frac{E_\nu}{kT}\right) \quad (11.1)$$

Toutes les bandes dont l'état inférieur n'est pas le fondamental sont appelées bandes chaudes car les populations des niveaux inférieurs de ces transitions, et par conséquent les intensités des transitions, croissent avec la température.

Pour modéliser cette bande, j'ai utilisé un code écrit par Bruno Bézard qui modélise la bande spectrale Σ -II des molécules présentant une géométrie linéaire non symétrique (géométrie C_{∞}^V). J'ai inclus les paramètres listés dans G. Duxbury et Y. Gang (1989) pour le HCN et ses deux isotopes afin d'obtenir en sortie 3 fichiers spectraux listant chacun les intensités des raies spectrales de chaque isotope. Les paramètres présents dans ce papier donnaient les intensités spectrales pour un rapport terrestre (Duxbury et Gang utilisent un échantillon de HCN obtenu à partir de la pyrolyse du méthylamine). Pour valider ces intensités, j'ai comparé le fichier spectroscopique calculé de HCN avec celui issu de GEISA. Les intensités relatives des raies calculées présentaient un très bon accord avec celles listées dans GEISA, mais en absolu, elles étaient plus intenses d'un facteur 1.083. Les intensités calculées de ces trois isotopes ont donc été divisées par ce facteur.

Les spectres synthétiques, calculés en incluant les fichiers spectroscopiques de HC^{15}N et H^{13}CN reproduisaient correctement l'émission de H^{13}CN autour de 706 cm^{-1} , alors que l'émission de HC^{15}N à 711 cm^{-1} étaient encore sous-estimée. Comme ces spectres synthétiques étaient calculés avec les rapports isotopiques terrestres ($^{12}\text{C}/^{13}\text{C} = 89$ et $^{14}\text{N}/^{15}\text{N} = 272$), ce premier test nous montrait que le rapport $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ dans le HCN de Titan était proche du rapport terrestre dans cette même molécule. En revanche, la sous-évaluation de la bande d'émission de HC^{15}N signifiait que le rapport isotopique $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ dans Titan était différent du rapport terrestre et supérieur à celui-ci. En testant différentes valeurs de rapports $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$, j'ai déduit qu'un rapport $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ enrichi d'un facteur 4.5 par rapport à la valeur terrestre permettait de reproduire l'émission de HC^{15}N . Cette valeur était en accord avec celles obtenues depuis le sol (voir Section 11.1.2). Nous avons alors fait part de cette détection et de cette première détermination des rapports isotopiques dans le HCN à l'équipe CIRS. L'équipe travaillant à Oxford nous a alors signalé que dans la base de données spectrales qu'ils utilisaient, HITRAN 2004, les bandes des isotopes HC^{15}N et H^{13}CN étaient listées. Comme les raies spectrales que nous avons calculées présentaient des intensités légèrement différentes de celles listées dans HITRAN, nous avons choisi, pour effectuer une étude plus approfondie de ces rapports isotopiques, d'utiliser les fichiers spectraux de cette base de données.

11.3.2 Observations utilisées pour les inversions

Les émissions des deux isotopes lourds de HCN apparaissent à la fois sur plusieurs spectres au limbe et sur le spectre nadir des observations réalisées à 15°S ; elles permettent donc en théorie, de détecter d'éventuelles variations verticales des ces rapports isotopiques. D'autre part, les spectres enregistrés à d'autres latitudes peuvent montrer d'éventuelles variations latitudinales. Je me suis donc focalisée sur l'étude des spectres à 15°S et à 83°N car les hautes latitudes nord présentent les variations latitudinales d'abondance les plus marquées.

Les spectres que j'ai utilisés pour les inversions à 15°S sont les mêmes que ceux utilisés pour les inversions des profils d'abondance des molécules présentées dans la Partie III. Les caractéristiques de ces observations sont données dans la Table 7.1.

J'ai choisi de ne pas utiliser les spectres enregistrés à 80°N (survol T3, voir Partie II, Section 7.3) car ils présentent un rapport signal-à-bruit moins bon que d'autres enregistrés à 83°N , ce qui rend difficile la détermination des rapports isotopiques. D'autre

part, la résolution verticale de ces spectres au limbe est d'environ 50 km et ne permet pas d'étudier de possibles variations verticales des rapports isotopiques. J'ai donc préféré utiliser les données enregistrées au cours du survol T4 de Titan, à 83°N (voir Partie I, Section 5.2). Ces données sondent jusqu'à 305 km avec une résolution verticale d'environ 10 km. L'intérêt d'utiliser des spectres au limbe enregistrés au-dessus de 300 km est limité pour cette étude car la faible émission de ces isotopes devient rapidement noyée dans le bruit à haute altitude.

J'ai moyenné les spectres sur des segments d'altitudes couvrant 20 km chacun, centrés autours de 159, 178, 201, 218, 239, 260, 281 et 298 km, ce qui correspond à une dizaine de spectres moyennés par intervalle d'altitude. Les observations enregistrées au nadir n'ont pas été utilisées pour inverser les profils à 83°N car celles-ci, du fait de leurs angles d'émission élevés à ces latitudes (les orbites de Cassini étaient alors faiblement inclinées par rapport au plan équatorial de Saturne), sondent des niveaux comparables à ceux sondés par les limbes.

11.3.3 Inversion des abondances de HCN et ses isotopes

Afin d'obtenir les profils d'abondance de HCN et de ses isotopes, j'ai utilisé les profils de température inversés à 15°S et 83°N (voir Partie II, Sections 5.1.4 et 5.2.3).

J'inverse les abondances de HC^{15}N et H^{13}CN en utilisant la gamme spectrale comprise entre 700 et 730 cm^{-1} , qui inclue le HCN à 713 cm^{-1} , H^{13}CN à 706 cm^{-1} , HC^{15}N à 711 cm^{-1} et les branches P et Q de C_2H_2 . Puisque la bande d'émission de HCN et de ses deux isotopes est superposée à l'émission de la branche P de C_2H_2 , il faut d'abord connaître la contribution de l'acétylène à 706, 711 et 713 cm^{-1} en inversant le profil d'abondance de C_2H_2 avant d'inverser ceux des isotopes de HCN. J'ai effectué dans un premier temps, l'inversion des profils verticaux de HCN et C_2H_2 simultanément car ces deux molécules présentent les émissions les plus intenses dans la gamme 700-730 cm^{-1} . Les profils d'abondance de HC^{15}N , H^{13}CN ont été inversés dans une seconde étape. Pour cela, ils sont considérés par l'algorithme d'inversion comme deux molécules à part entière. J'ai donc créé un fichier spectral pour chaque isotope (le fichier spectral de HITRAN réunit les raies d'émission de tous les isotopes dans un même fichier) et j'ai rajouté dans le code de transfert radiatif les paramètres permettant de modéliser leurs émissions et leurs profils verticaux d'abondance (masse moléculaire, loi de saturation, paramétrisation de la fonction de partition). Nous supposons que HC^{15}N et H^{13}CN suivent la même loi de saturation que HCN.

Nous avons choisi un filtrage vertical (voir Partie II) des profils d'abondance inversés égal à 3 échelles de hauteur à 15°S et 4 échelles de hauteur à 83°N .

La figure 11.2 présente les spectres modélisés à 15°S et 83°N correspondant aux profils d'abondance des 2 isotopes présentés Fig. 11.8. Les détections de HC^{15}N et H^{13}CN sont clairement validées en comparant les spectres calculés sans leurs émissions (traits pleins gris) et avec leurs émissions (traits pleins noirs).

11.3.4 Tests de la variation verticale des rapports $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ et $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$

Nous allons détailler ci-dessous l'étude de la variation verticale du rapport isotopique $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ à 15°S . La même démarche a été appliquée à 83°N ainsi que pour le rapport $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ aux deux latitudes, dont nous donnerons simplement les résultats.

La Fig. 11.3 (gauche) présente le profil inversé de HC^{15}N (traits plein noirs) avec un lissage dont la longueur de corrélation (notée L) vaut 3 échelles de hauteurs, comparé au profil vertical d'abondance inversé de HCN (tirets noirs). Les barres d'erreur des

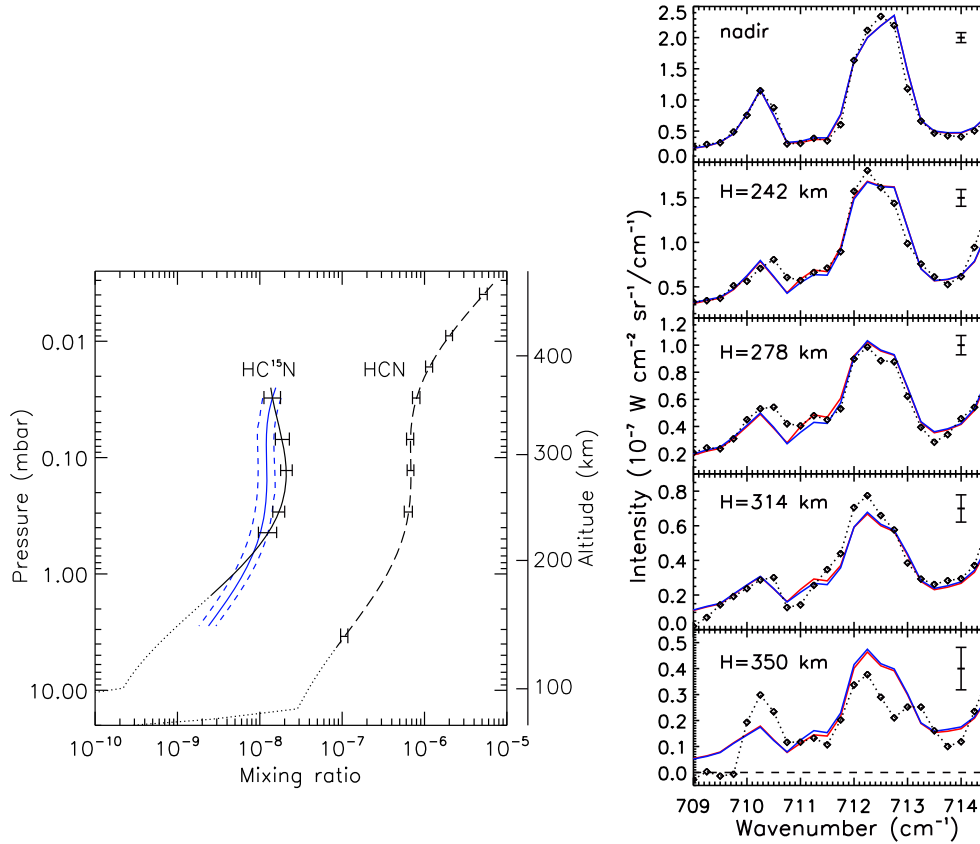


FIG. 11.3: **A gauche :** profils inversés d'abondance de $\text{H}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$ (tirets) à 15°S . Le HC^{15}N inversé avec un lissage vertical égal à 3 échelles de hauteur est présenté en trait plein noir, celui inversé avec un lissage $L=200$ (proportionnel au profil vertical d'abondance de HCN , voir texte) est présenté en trait plein bleu. **A droite :** comparaisons entre les spectres observés (diamants noirs reliés par des pointillés) et les spectres calculés avec le profil d'abondance lissé avec $L=3$ (en rouge), et ceux calculés avec un profil homothétique à celui de HCN (en bleu).

deux profils sont données aux niveaux des maxima des kernels. Comme le montre la comparaison entre les spectres calculés (Fig. 11.3, droite, trait rouge) et les spectres observés (pointillés-diamants), le profil vertical de HC^{15}N calculé avec $L=3$ donne une bonne modélisation des spectres observés. Cependant, il suggère que le rapport isotopique $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ augmente avec l'altitude, d'un facteur ~ 2 entre 200 et 300 km (voir Fig.11.4). Nous allons vérifier si cette croissance est bien réelle. Pour cela, j'ai d'abord effectué une inversion en forçant le profil d'abondance de HC^{15}N à être proportionnel au profil de HCN , afin de voir si les spectres calculés reproduisent de façon satisfaisante les spectres observés. Dans la théorie, cette contrainte est réalisée en appliquant une longueur de corrélation L infinie dans l'algorithme d'inversion. Le profil obtenu en sortie ne possède qu'un paramètre libre et donc qu'un seul point d'information. Dans la pratique, l'inversion est effectuée avec $L=200$. Pour les profils inversés avec $L = 3$ échelles de hauteur, le profil vertical présente plusieurs points d'information avec chacun un étalement vertical sur environ 3 échelles de hauteur. Le profil de HC^{15}N calculé

avec $L=200$ est présenté sur la Fig. 11.3 en bleu. Dans ce cas, bien que les kernels pointent des altitudes données, il n'est pas correct de disposer les barres d'erreur au niveaux des maxima des kernels. Comme un très fort lissage vertical est appliqué au profil, les différents points verticaux de ce profil ne sont donc plus indépendants les uns des autres, ils sont corrélés, et il en est de même pour les barres d'erreur qui sont également corrélées entre elles le long du profil. Nous avons donc choisi de représenter, pour ce profil, une enveloppe d'erreur dont l'amplitude est constante le long du profil vertical (Fig.11.3, tirets bleus).

Si nous comparons les χ^2 réduits (χ^2/n , avec $n=35-1$, où n est le nombre de degrés de liberté, avec 35 points spectraux observés indépendants utilisés pour l'inversion, i.e. un point tous les 0.5 cm^{-1} et 1 paramètre libre) pour chaque spectre, nous les trouvons relativement proches dans les cas où $L=3$ et $L=200$. Par exemple, à 15°S , le χ^2 réduit du fit du spectre nadir obtenu avec $L = 200$ vaut 1.018 fois celui correspondant au profil calculé avec $L=3$. Pour le limbe à 284 km, là où les profils d'abondance diffèrent le plus, nous obtenons $[\chi^2/n]_{L=200} = 1.027 \times [\chi^2/n]_{L=3}$. Dans ces deux cas, ceci crée un écart du spectre calculé au spectre observé qui est en-dessous de la barre des $1-\sigma$. En effet, cette limite correspondrait à un accroissement du $[\chi^2/n]_{L=200}$ qui serait égal à $1 + 1/34 = 1.029$ fois $[\chi^2/n]_{L=3}$ ³. Ces résultats laissent déjà supposer qu'une éventuelle variation verticale du rapport $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ sera difficile à mettre en évidence.

La Fig.11.4 montre la comparaison entre les rapports isotopiques $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ calculés à partir des profils d'abondance de HC^{15}N inversés avec $L=3$ et $L=200$. Le rapport isotopique obtenu dans le cas où $L=3$ est représenté en traits pleins noirs et celui du cas $L=200$ en tirets-pointillés.

Ces mêmes tests ont été réalisés pour les inversions des rapports isotopiques $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ à 83°N et $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ aux deux latitudes. Dans tous les cas, les χ^2 réduits des profils d'abondance de HC^{15}N et H^{13}CN proportionnels aux profils de HCN permettent de conclure que ces profils d'abondance reproduisent correctement les spectres observés. Les rapports isotopiques $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ et $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ constants avec l'altitude, dont nous verrons plus loin les valeurs, permettent donc une bonne modélisation des données.

Des tests supplémentaires ont été réalisés afin de contraindre la variation verticale du rapport isotopique. Seuls les tests réalisés sur le rapport $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ à 15°S seront présentés ici. J'ai effectué plusieurs inversions en forçant ce profil vertical inversé de HC^{15}N à avoir des pentes différentes (en appliquant une longueur de corrélation $L=200$). J'ai d'abord testé des profils de HC^{15}N qui augmentent fortement avec l'altitude afin de voir quelle était la limite supérieure de l'accroissement du rapport $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ avec l'altitude. En forçant le rapport isotopique à augmenter d'un facteur ~ 5 entre 200 et 280 km, j'obtiens le profil vertical présenté dans la Fig. 11.5 (à gauche, en rouge) et les spectres correspondants - comparés aux spectres observés - sont présentés sur la même figure à droite. Les kernels des profils de HC^{15}N calculés

³ De façon générale, lorsque qu'une distribution calculée (ici le spectre calculé) représente correctement la distribution parente (ici le spectre observé), alors le χ^2 réduit (χ^2/n , où n représente le nombre de degrés de liberté) vaut environ 1. Si la distribution calculée est modifiée et s'éloigne de la moyenne de la distribution parente, alors le χ^2 réduit augmente. La distribution calculée s'éloigne de plus de $1-\sigma$ de la valeur moyenne de la distribution parente lorsque le nouveau χ^2 réduit atteint la valeur $1+1/\nu$, où ν représente le nombre de degrés de libertés. Elle s'éloigne de $2-\sigma$ lorsque le χ^2 réduit atteint la valeur $1+4/\nu$ et de $3-\sigma$ lorsqu'il atteint la valeur $1+9/\nu$.

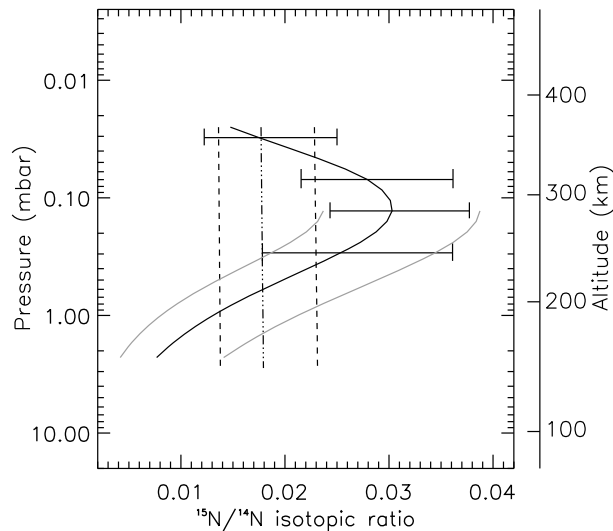


FIG. 11.4: Distributions verticales du rapport isotopique $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ à 15°S . *En trait plein noir : rapport isotopique déduit du profil vertical d'abondance de HCN présenté sur la Fig. 11.3 et le profil de HC^{15}N inversé avec une longueur de corrélation de 3 échelles de hauteur. Les barres d'erreur sont situées aux niveaux des maxima des kernels de HC^{15}N . L'enveloppe grise représente l'erreur déduite à partir de l'observation au nadir. Le tiret-pointillé représente le rapport isotopique calculé avec le même profil vertical d'abondance de HCN et un profil vertical de HC^{15}N proportionnel à celui du HCN. Les tirets représentent l'enveloppe d'erreur de ce rapport isotopique constant.*

avec $L=3$ (profil vertical noir de la Fig. 11.5) et $L=200$ avec une pente élevée (profil rouge) sondent les mêmes niveaux pour les émissions au limbe. Le kernel au nadir du profil rouge sonde vers 3 mbar, tandis que celui du profil noir sonde vers 5 mbar, ce qui s'explique par le fait que le profil rouge étant moins abondant que le profil noir à basse altitude, et le profil thermique étant le même, l'émission provient alors d'une altitude plus élevée. Ce profil d'abondance de HC^{15}N (rouge) est également une solution vu qu'il modélise correctement les spectres observés (voir Fig. 11.5, droite). Nous sommes donc confrontés ici à un problème : plus nous augmentons la pente du profil, plus nous perdons d'information dans les bas niveaux de la stratosphère, car les niveaux sondés par le nadir sont de plus en plus élevés. Il n'est donc pas possible de contraindre une éventuelle augmentation du rapport isotopique $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ à 15°S . Un meilleur rapport signal-à-bruit permettrait de résoudre ce problème.

De la même manière, ce problème s'est posé pour les profils verticaux d'abondance de HC^{15}N à 83°N , et H^{13}CN à 15°S et 83°N . En conclusion, compte tenu du faible rapport signal-à-bruit des émissions de ces deux isotopes, il n'est pas possible de contraindre une quelconque croissance des rapports $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ et $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ avec l'altitude.

J'ai également cherché à contraindre la limite supérieure d'une éventuelle décroissance avec l'altitude de ces deux rapports isotopiques. Pour cela, j'ai effectué des inversions des profils d'abondance de HC^{15}N et H^{13}CN en forçant les profils inversés de ces isotopes à présenter un accroissement de leur abondance avec l'altitude moins important que ceux des profils nominaux de HC^{15}N et H^{13}CN (proportionnels à ceux de HCN). Dans les différents cas, j'ai comparé les χ^2 réduits moyens (prenant en compte tous les spectres) obtenus avec les nouveaux profils d'abondance des isotopes présentant

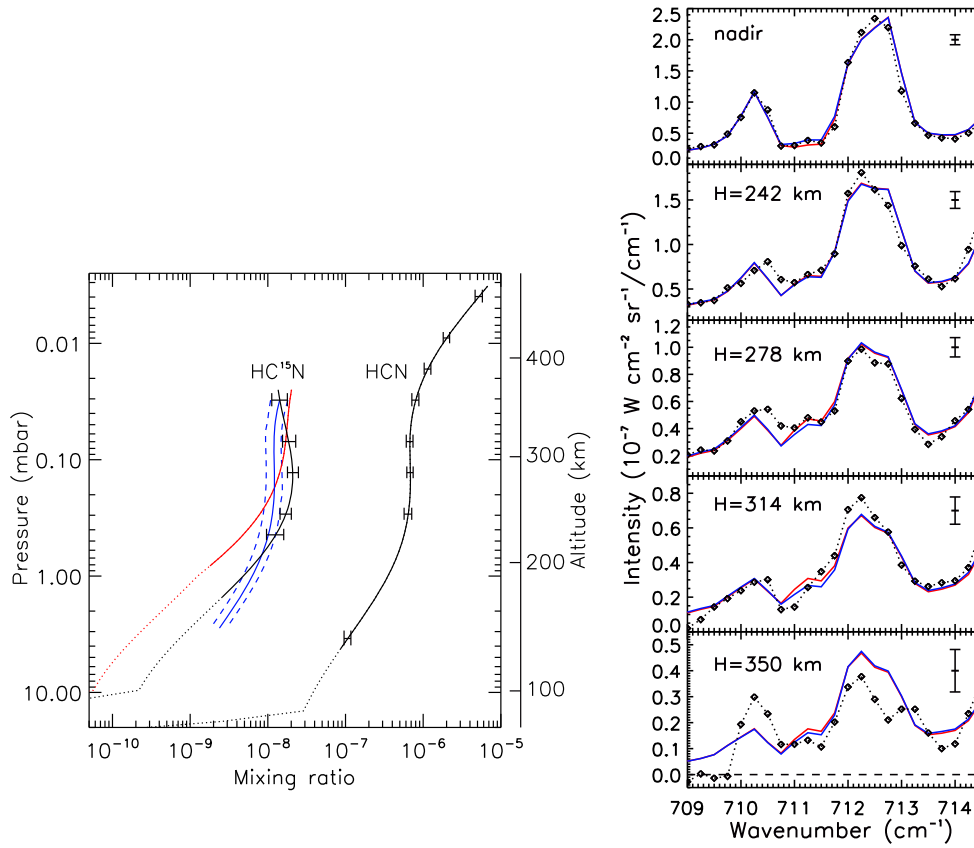


FIG. 11.5: Test de la pente du profil d'abondance de HC^{15}N à 15°S . **A gauche :** profils inversés d'abondance de HCN (traits pleins) à 15°S . Le HC^{15}N inversé avec un lissage verticale égal à 3 échelles de hauteur est présenté en trait plein noir, celui inversé avec un lissage $L=200$ (proportionnel au profil vertical d'abondance de HCN , voir texte) est présenté en trait plein bleu et celui correspondant à une augmentation du rapport isotopique d'un facteur 5 entre 200 et 280 km est présenté en rouge. **A droite :** comparaison entre les spectres observés (diamants noirs, pointillés) et les spectres calculés avec un profil d'abondance de l'isotope proportionnel à celui du HCN (bleu) et calculés avec le profil présentant une pente 5 fois supérieure (en rouge).

des pentes différentes. Intéressons-nous ici à l'exemple de $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ à 15°S . J'ai effectué une inversion en forçant le profil d'abondance de H^{13}CN à être constant avec l'altitude, ceci correspond à une décroissance du rapport $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ d'un facteur 2.5 entre 150 et 250 km. Dans ce cas, le χ^2 réduit moyen vaut 1.032 fois celui obtenu avec un profil vertical de H^{13}CN inversé avec $L=3$. Etant donné que ce χ^2 réduit prend en compte 8 spectres de 35 points spectraux chacun, l'erreur à $1\text{-}\sigma$ correspond à une limite du χ^2 réduit qui vaut $\sim 1+1/(8\times 35) \sim 1.0036$. A $3\text{-}\sigma$, la limite du χ^2 réduit vaut $1+9/(8\times 35) = 1.032$ (voir note de bas de page 3), ce qui correspond à la valeur du χ^2 réduit obtenu avec un profil de H^{13}CN constant avec l'altitude. Une décroissance du rapport $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ d'un facteur 2.5 de 150 à 250 km correspond donc à la limite à $3\text{-}\sigma$ (i.e., il y a 99 % de chances pour que la décroissance soit inférieure à la valeur trouvée) d'une telle variation compatible avec les spectres observés.

Nous avons effectué cette analyse pour l'ensemble de nos données et trouvé que la décroissance verticale du rapport $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ n'est pas contrainte à 15°S , mais à 83°N , ce rapport ne peut décroître de plus d'un facteur 4 entre 170 et 300 km. Concernant le rapport $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$, nous concluons qu'il ne peut décroître de plus d'un facteur 2.5 entre

150 et 250 km à 15°S , et d'un facteur 2 entre 170 et 300 km à 83°N . Etant donné que les variations verticales de ces rapports isotopiques sont faiblement contraintes, nous avons choisi de forcer les profils d'abondance de HC^{15}N et H^{13}CN à être proportionnels à celui de HCN dans les processus d'inversion. Les rapports isotopiques ainsi obtenus sont constants avec l'altitude. Dans tous les cas, comme le montre la Fig. 11.2, les spectres calculés modélisent bien les spectres observés.

11.3.5 Profils d'abondance inversés de HC^{15}N et H^{13}CN

Les kernels correspondants aux profils de HCN et de ses deux isotopes inversés à 15°S et 83°N avec $L=200$ sont présentés respectivement sur les Figs. 11.6 et 11.7. Pour chacune des 2 figures, les kernels de HCN calculés à 712.25 cm^{-1} (tirets noirs) sont tracés sur chaque graphe afin d'être comparés avec les kernels de HC^{15}N , calculés à 711.25 cm^{-1} (à gauche, traits pleins gris) et ceux de H^{13}CN , calculés à 706 cm^{-1} (à droite, traits pleins gris).

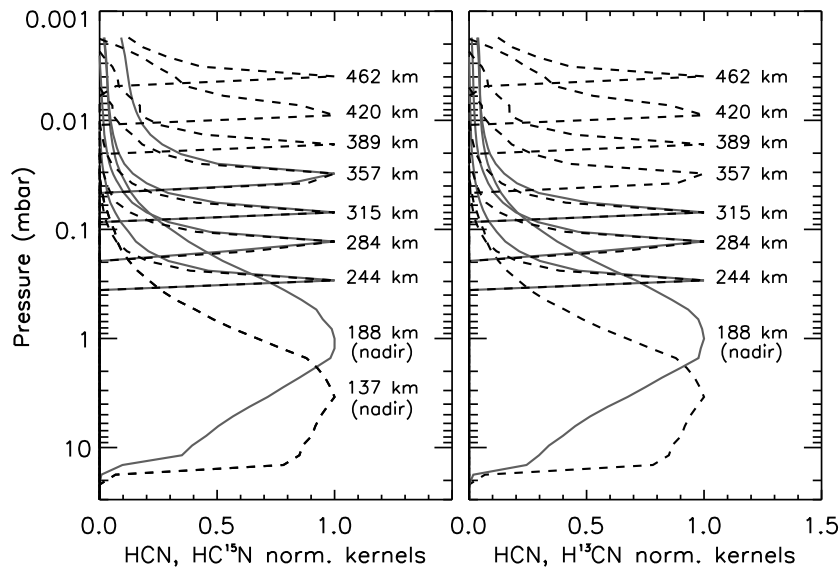


FIG. 11.6: Kernels normalisés inversés à 15°S , correspondant aux profils d'abondance de HC^{15}N , H^{13}CN et HCN présentés Fig. 11.8, calculés respectivement à 711.25 cm^{-1} (à gauche, traits pleins gris), 706 cm^{-1} (à droite, traits pleins gris) et 712.25 cm^{-1} (tirets, sur les deux graphes pour comparaison).

A 15°S , dans la branche Q de HCN à 712.25 cm^{-1} , le spectre enregistré au nadir sonde les niveaux compris entre 14 mbar (87 km) et 0.7 mbar (206 km) (donnés par la largeur à mi-hauteur du kernel) avec un maximum à 3 mbar (137 km). Cependant le profil de température n'est pas contraint en deçà de 3 mbar, il existe donc une très forte incertitude sur la valeur de l'abondance sous ce niveau. Pour inverser le profil d'abondance de HCN à 15°S , j'ai utilisé 7 limbes sondant entre 0.3 mbar (244 km) et 0.004 mbar (462 km).

Le kernel calculé à 706 cm^{-1} , correspondant à l'émission au nadir de H^{13}CN , sonde la gamme 5 - 0.2 mbar (soit 122 - 265 km) avec un maximum à 1 mbar (188 km). Les kernels calculés aux limbes pour ce même isotope sondent des niveaux compris entre 0.3 et 0.07 mbar (244 et 315 km). Seuls 3 spectres au limbe sont utilisés pour l'inversion

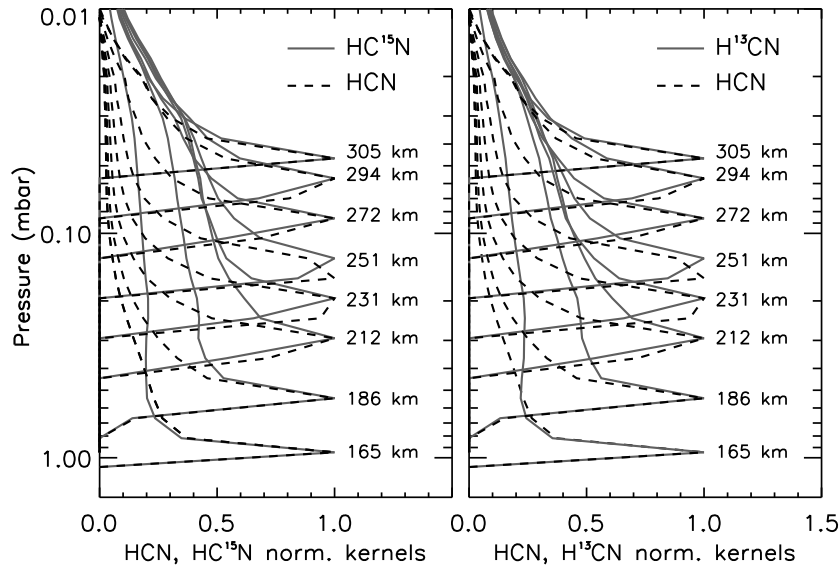


FIG. 11.7: Kernels normalisés inversés à 83°N , correspondant aux profils d'abondance de HC^{15}N , H^{13}CN et HCN présentés Fig. 11.8, calculés respectivement à 711.25 cm^{-1} (à gauche, traits pleins gris), 706 cm^{-1} (à droite, traits pleins gris) et 712.25 cm^{-1} (tirets, sur les deux graphes pour comparaison).

du profil d'abondance de H^{13}CN car le rapport signal-à-bruit devient trop faible à plus haute altitude (voir Fig. 11.2 à 350 km).

Le kernel de HC^{15}N calculé au nadir sonde des niveaux très similaires à celui du H^{13}CN . Quatre spectres au limbe ont été utilisés pour inverser le profil de HC^{15}N sondant jusqu'à 0.04 mbar (357 km).

A 83°N , HCN et ses deux isotopes ont été inversés en utilisant 8 spectres au limbe sondant la région 0.95 - 0.05 mbar (165 - 305 km). Ces altitudes sont suffisamment élevées pour que le milieu soit optiquement mince. Il est important de noter que, comme le profil de température sonde une gamme de latitudes s'étendant de 69°N à 83°N sous 250 km (voir Partie II, Section 5.2.2), les rapports de mélange des molécules sondent également une large gamme de latitude sous cette altitude, ce qui peut entraîner une incertitude sur le profil d'abondance sous ce niveau.

La Fig. 11.8 montre les profils verticaux des abondances de HCN , HC^{15}N et H^{13}CN à 15°S (à gauche) et à 83°N (à droite).

11.3.6 Rapports isotopiques et calculs des barres d'erreur

Avant de présenter les valeurs des rapports isotopiques obtenus à partir des spectres de CIRS, nous allons voir en détail comment nous avons effectué le calcul des barres d'erreur de ces rapports. L'abondance de chaque isotope est affectée par les incertitudes sur le profil de température, celle sur la correction en altitude ($\pm 7\text{ km}$) et celle liée au bruit. Les barres d'erreur des rapports isotopiques prennent donc en compte ces différentes sources d'incertitude qui ont chacune une origine différente. Celle sur le profil de température provient intrinsèquement du bruit sur les spectres enregistrés par le FP4, celle sur la correction en altitude trouve son origine dans la qualité de

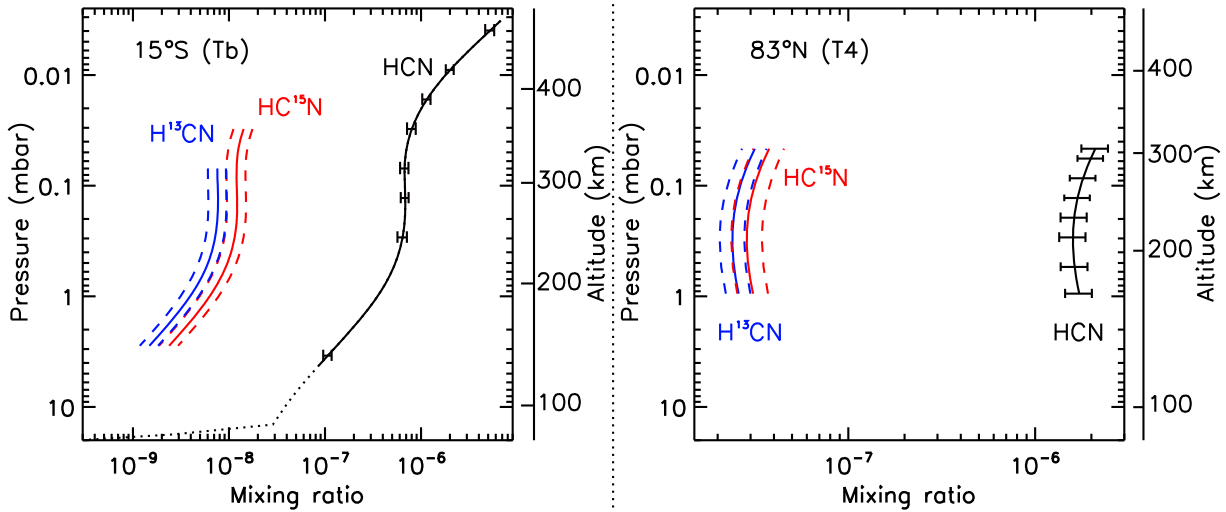


FIG. 11.8: Profils verticaux d'abondance de HCN, H^{13}CN et HC^{15}N inversés à 15°S et 83°N avec des rapports isotopiques constants avec l'altitude. HCN (noir), H^{13}CN (bleu) et HC^{15}N (rouge) à 15°S (à gauche) et 80°N (à droite). Les barres d'erreur de HCN sont données au niveaux des maxima des kernels (elles sont corrélées sur 3 ou 4 échelles de hauteur, étant donné le filtrage vertical du profil). Les enveloppes d'erreur sont données pour chaque isotope en tirets.

la reproduction du spectre FP4. Enfin, l'incertitude liée au bruit est due au bruit des spectres enregistrés par le FP3 (qui est décorrélié de celui du FP4). Ces trois incertitudes sont donc décorréliées les unes des autres. Nous pouvons ainsi sommer quadratiquement les erreurs sur le rapport isotopique causées par chacune de ces incertitudes, sans que n'apparaissent de termes de corrélation, et nous obtenons :

$$\left(\frac{\sigma_R}{R}\right)^2 \simeq \left(\frac{\sigma_R}{R}\bigg|_T\right)^2 + \left(\frac{\sigma_R}{R}\bigg|_{\text{shift}}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_R}{R}\bigg|_{\text{bruit}}\right)^2 \quad (11.2)$$

où R définit le rapport isotopique considéré : $R = q_{\text{HC}^{15}\text{N}}/q_{\text{HCN}}$ ou $q_{\text{H}^{13}\text{CN}}/q_{\text{HCN}}$ avec q l'abondance de l'isotope. σ_R représente l'écart type à la valeur moyenne du rapport dans les différents cas suivants : l'indice " T " réfère à l'incertitude sur le profil de température, dans ce cas, σ_R est l'écart type causé par l'incertitude sur la température. Il en est de même pour les deux autres écarts types dus à l'incertitude sur la correction en altitude (indice " shift ") et au bruit (indice " bruit ").

Nous allons voir maintenant comment sont déterminées ces différentes erreurs re-

latives. L'erreur sur un rapport $R = u/v$ s'exprime de la façon suivante ⁴ (Bevington, 1992) :

$$\frac{\sigma_R^2}{R^2} \simeq \frac{\sigma_u^2}{u^2} + \frac{\sigma_v^2}{v^2} - 2\frac{\sigma_{uv}^2}{uv} \quad (11.6)$$

Dans la pratique, tout le problème réside dans la détermination du terme de corrélation $2\frac{\sigma_{uv}^2}{uv}$. Or le problème est grandement simplifié lorsque u et v sont décorrélés, puisque ce terme est alors nul.

Erreur relative due à l'incertitude sur la température :

L'incertitude sur la température agit de la même manière sur l'abondance de deux isotopes. Par exemple, une valeur de la température plus élevée que le profil de température moyen implique des abondances de chacun des deux isotopes plus faibles que les valeurs moyennes pour modéliser les spectres observés. Les incertitudes, liées à l'erreur sur la température, sont donc corrélées. Dans ce cas, il faudrait calculer, si on s'intéresse au rapport $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$:

$$\left(\frac{\sigma_R}{R} \Big|_T\right)^2 = \left(\frac{\sigma_{q_{HCN}}^T}{q_{HCN}}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_{q_{HC^{15}N}}^T}{q_{HC^{15}N}}\right)^2 - 2\frac{(\sigma_{q_{HCN}q_{HC^{15}N}}^T)^2}{q_{HCN}q_{HC^{15}N}} \quad (11.7)$$

où $\sigma_{q_{...}}^T$ réfère à l'écart type à la valeur moyenne de l'abondance de l'isotope due à l'incertitude sur la température. Il faut alors bien tenir compte du terme de corrélation qui n'est pas nul. Pour des raisons de simplicité, nous avons préféré calculer l'erreur relative directement sur le rapport de la façon suivante :

$$\frac{\sigma_R}{R} \Big|_T = \frac{R - R_T}{R} \quad (11.8)$$

où R est la valeur moyenne du rapport isotopique et R_T , celle calculée avec un des deux extrema du profil de température donné par l'enveloppe des erreurs supérieures ou inférieures.

Erreur relative due à l'incertitude sur la correction en altitude :

L'incertitude sur la correction en altitude génère également des variations d'abondance de deux isotopes qui sont corrélées. En effet, une correction appliquée aux altitudes utilisées dans les inversions, génère un nouveau profil de température qui implique

⁴La déviation standard d'une quantité $x=f(u, v, \dots)$ qui dépend d'au moins deux variables mesurées u et v est donnée par l'équation de propagation des erreurs :

$$\sigma_x^2 \simeq \sigma_u^2 \left(\frac{\partial x}{\partial u}\right)^2 + \sigma_v^2 \left(\frac{\partial x}{\partial v}\right)^2 + \dots + 2\sigma_{uv}^2 \left(\frac{\partial x}{\partial u}\right) \left(\frac{\partial x}{\partial v}\right) + \dots \quad (11.3)$$

Les deux premiers termes de droite correspondent aux moyennes des carrés des déviations de x produites par les incertitudes de u et v . Généralement ces termes dominent les incertitudes. Dans le cas où x s'exprime sous forme d'un rapport $x = \frac{u}{v}$, l'équation 11.3 s'écrit :

$$\sigma_x^2 \simeq \sigma_u^2 \left(\frac{1}{v}\right)^2 + \sigma_v^2 \left(-\frac{u}{v^2}\right)^2 + 2\sigma_{uv}^2 \left(\frac{1}{v}\right) \left(-\frac{u}{v^2}\right) \quad (11.4)$$

ce qui donne :

$$\frac{\sigma_x^2}{x^2} \simeq \frac{\sigma_u^2}{u^2} + \frac{\sigma_v^2}{v^2} - 2\frac{\sigma_{uv}^2}{uv} \quad (11.5)$$

une augmentation ou une diminution de l'abondance de chaque isotope suivant que la température est plus élevée ou moins élevée que le profil de température moyen. Les abondances de chaque isotopes vont être augmentées ou diminuées simultanément pour modéliser les spectres observés. Du fait de cette corrélation, nous calculons donc l'incertitude relative du rapport isotopique due à l'erreur sur la correction en altitude de la même manière que celle due à l'incertitude sur la température :

$$\frac{\sigma_R}{R} \Big|_{shift} = \frac{R - R_{shift}}{R} \quad (11.9)$$

Erreur relative due au bruit :

Si les bandes d'émission des deux isotopes sont assez éloignées, alors le bruit sur chacune des deux bandes d'émission n'est pas corrélé et l'erreur ainsi créée sur les abondances est également décorrélée. Nous ne pouvons donc calculer cette erreur relative de la même manière que les deux précédentes car le bruit agit différemment sur les abondances des deux isotopes. Par contre, il est aisé d'utiliser l'équation 11.6 où le terme de corrélation est alors nul. Et ainsi :

$$\left(\frac{\sigma_R}{R} \Big|_{bruit} \right)^2 = \left(\frac{\sigma_{q_{HCN}}^{bruit}}{q_{HCN}} \right)^2 + \left(\frac{\sigma_{q_{HC^{15}N}}^{bruit}}{q_{HC^{15}N}} \right)^2 \quad (11.10)$$

où q_{HCN} et $q_{HC^{15}N}$ sont les valeurs moyennes des abondances obtenues en sortie de l'inversion, $\sigma_{q_{HCN}}$ l'écart type à la valeur moyenne q_{HCN} causée par le bruit, et $\sigma_{q_{HC^{15}N}}$ l'écart type à la valeur moyenne $q_{HC^{15}N}$.

L'algorithme d'inversion effectue les calculs d'abondance sous forme de $\ln(q)$, afin d'éviter d'éventuelles valeurs négatives de l'abondance qui pourraient être obtenues au cours de l'inversion. Il en est de même pour les barres d'erreur des profils d'abondance inversés, qui sont également calculés sous forme logarithmiques. Nous avons alors choisi de garder cette forme pour le calcul de l'erreur relative sur le rapport due au bruit, et nous obtenons :

$$\left(\sigma_{\ln(R)} \Big|_{bruit} \right)^2 = \left(\ln(err_{q_{HCN}}) \right)^2 + \left(\ln(err_{q_{HC^{15}N}}) \right)^2 \quad (11.11)$$

Avec $err_{q_{HCN}} = q_{HCN}^+ / q_{HCN}$, où q_{HCN}^+ est l'abondance donnée par l'erreur supérieure due au bruit (la borne inférieure pourrait également être utilisée puisque les logarithmes des barres d'erreur sont calculés de façon symétrique). Il en est de même pour $HC^{15}N$.

Dans la pratique, comme l'algorithme d'inversion fournit le logarithme de l'erreur sur l'abondance due au bruit, nous avons choisi d'effectuer le calcul des barres d'erreur sur le rapport isotopique en appliquant la somme quadratique des écart-types sur les logarithmes des erreurs, c'est-à-dire :

$$\left(\sigma_{\ln(R)} \right)^2 \simeq \left(\sigma_{\ln(R)} \Big|_T \right)^2 + \left(\sigma_{\ln(R)} \Big|_{shift} \right)^2 + \left(\sigma_{\ln(R)} \Big|_{bruit} \right)^2 \quad (11.12)$$

Et comme les erreurs $\frac{\sigma_R}{R} \Big|_T$ et $\frac{\sigma_R}{R} \Big|_{bruit}$ sont petites, de l'ordre de quelques pourcents, nous pouvons utiliser le fait que $\ln(1+x) \sim x$, et obtenons le logarithme de l'erreur totale sur le rapport isotopique :

$$\sigma_{\ln(R)} \simeq \sqrt{\left(\ln\left(1 + \frac{\sigma_R}{R} \Big|_T\right)\right)^2 + \left(\ln\left(1 + \frac{\sigma_R}{R} \Big|_{\text{shift}}\right)\right)^2 + (\sigma_{\ln(R)}|_{\text{bruit}})^2} \quad (11.13)$$

Nous obtenons ainsi les bornes supérieures et inférieures du rapport isotopique en multipliant (pour la borne supérieure) ou en divisant (pour la borne inférieure) la valeur moyenne du rapport isotopique par $\exp(\sigma_{\ln(R)})$. Cette méthode de calcul de l'erreur présente l'avantage de donner des barres d'erreur symétriques en logarithme.

11.3.7 Rapport $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$: résultats, comparaison aux autres observations et implications

A 15°S , nous obtenons un rapport $^{12}\text{C}/^{13}\text{C} = 89_{-18}^{+22}$, ce qui correspond à $[^{13}\text{C}/^{12}\text{C}]_{15^\circ\text{S}} = (1_{-0.2}^{+0.3}) \times [^{13}\text{C}/^{12}\text{C}]_{\oplus}$. Les barres d'erreur incluent donc le rapport $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ terrestre (89). Nous avons étudié les variations verticales du rapport $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ et avons conclu qu'il ne peut décroître de plus d'un facteur 2 entre 150 et 250 km.

A 83°N , nous obtenons une valeur $^{12}\text{C}/^{13}\text{C} = 68_{-12}^{+16}$, qui correspond à $[^{13}\text{C}/^{12}\text{C}]_{83^\circ\text{N}} = (1.3 \pm 0.3) \times [^{13}\text{C}/^{12}\text{C}]_{\oplus}$. L'étude des variations verticales du rapport $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ nous montre qu'il ne peut décroître de plus d'un facteur 2 (limite supérieure à $3\text{-}\sigma$) entre 170 et 300 km. En revanche, étant donné le faible rapport signal sur bruit, il n'est pas possible de contraindre la limite supérieure d'une possible croissance de ce rapport.

La Fig. 11.9 résume ces résultats en donnant la valeur moyenne du rapport $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ (en pointillés) mesurés dans le HCN en fonction du rapport isotopique terrestre, à 15°S (noir) et 83°N (gris) avec les enveloppes d'erreur correspondantes (traits pleins).

Compte tenu des barres d'erreur, ces deux valeurs sont en accord entre elles, il est donc possible de les combiner pour obtenir une valeur moyenne du rapport $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ et réduire les barres d'erreur. Pour cela, nous utilisons les formules données par Bevington (1992) qui fournissent la valeur moyenne μ la plus probable ainsi que la variance σ_μ^2 d'une série de données (x_i, σ_i) :

$$\mu = \frac{\sum(x_i/\sigma_i^2)}{\sum(1/\sigma_i^2)} \quad (11.14)$$

$$\sigma_\mu^2 = \frac{1}{\sum(1/\sigma_i^2)} \quad (11.15)$$

La valeur obtenue vaut alors 75 ± 12 . Celle-ci, comme la valeur mesurée à 15°S , incluent le rapport $^{12}\text{C}/^{13}\text{C} = 82.3 \pm 1$ obtenue dans le CH_4 in situ à 10°S , entre 18 et 6 km, à partir des données GCMS (Niemann et al. 2005). L'instrument Cassini/INMS a également permis d'obtenir une valeur de ce rapport in situ. Waite et al. (2005) obtiennent une valeur $^{12}\text{C}/^{13}\text{C} = 95.6 \pm 0.1$ à 1200 km, qui leur permet d'estimer une valeur égale à 81 près de la surface. Les valeurs de ce rapport isotopique que nous déduisons ici dans le HCN, dans la gamme d'altitude comprise entre 100 et 350 km, incluent les résultats obtenus in situ dans le CH_4 .

Le résultat que nous obtenons près de l'équateur peut être comparé avec les valeurs de ce même rapport obtenu à partir des données millimétriques acquises depuis le sol. En effet, puisque ces données sol ne résolvent pas le disque de Titan, l'émission enregistrée provient alors principalement de la région équatoriale. Hidayat et al. (1997)

(voir Table 11.1) obtiennent un rapport $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ compris entre 70 et 120 en dessous de 200 km, nous obtenons ici une valeur de ce rapport comprise entre 63 et 87, qui est donc en très bon accord avec leur résultat. Nous sommes également en accord avec le résultat obtenu par Gurwell (2004) lorsqu'il utilise le profil de température déduit de Lellouch (1990). Cependant, il est à noter que l'analyse des observations moyennées sur le disque enregistrées depuis le sol suppose que le profil vertical de HCN ne varie pas avec la latitude, ce qui est inexact d'après les données Voyager et Cassini.

D'autre part, ce rapport isotopique a également été mesuré à partir des données nadir de CIRS, dans le CH_4 , CH_3D , C_2H_2 et C_2H_6 vers 10 mbar. Nixon et al. (2007), déduisent les valeurs de ces rapports à 65°S , 40°S , 0°N , 35°N et 71°N . En combinant les valeurs trouvées à toutes les latitudes (afin de réduire les barres d'erreur), ils trouvent $[^{12}\text{C}/^{13}\text{C}]_{\text{CH}_4} = 78.0 \pm 2.7$, $[^{12}\text{C}/^{13}\text{C}]_{\text{C}_2\text{H}_2} = 83.9 \pm 3.1$ et $[^{12}\text{C}/^{13}\text{C}]_{\text{C}_2\text{H}_6} = 89.9 \pm 7.2$. Ce qui correspond en combinant toutes ces valeurs, à un rapport $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ égal à 81.2 ± 2 , ce qui est en très bon accord avec les mesures in situ du GCMS. Ce rapport a également été déterminé par Bézard et al. (2007) dans le CH_3D qui trouvent $^{12}\text{C}/^{13}\text{C} = 82_{-18}^{+27}$, une valeur qui englobe les précédentes.

Le carbone présent dans HCN, C_2H_2 et C_2H_6 est directement issu du méthane, puisque ces trois molécules sont produites par la photodissociation du méthane. Comme les rapports isotopiques $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ observés dans ces trois molécules sont similaires, cela signifie que le carbone ne subit pas de processus de fractionnement décelable au cours de la formation de HCN qui pourrait l'enrichir en l'un ou l'autre des deux isotopes du carbone.

11.3.8 Rapport $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$: résultats, comparaison aux autres observations et implications

J'ai étudié les variations verticales du rapport $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ aux deux latitudes. A 15°S , étant donné le faible rapport signal-à-bruit, ces variations ne peuvent être contraintes. A 83°N , ce rapport isotopique ne peut décroître de plus d'un facteur 4 (limite supérieure à $3\text{-}\sigma$) entre 170 et 300 km.

A 15°S , nous obtenons dans le HCN, un rapport $^{14}\text{N}/^{15}\text{N} = 56_{-13}^{+16}$ (i.e., $[^{15}\text{N}/^{14}\text{N}]_{15^\circ\text{S}} = 4.9_{-1.0}^{+1.5} [^{15}\text{N}/^{14}\text{N}]_{\oplus}$). A 83°N , nous obtenons $^{14}\text{N}/^{15}\text{N} = 56_{-9}^{+10}$ (i.e., $[^{15}\text{N}/^{14}\text{N}]_{15^\circ\text{S}} = 4.9_{-0.7}^{+0.9} [^{15}\text{N}/^{14}\text{N}]_{\oplus}$). Ce rapport ne présente donc aucune variation méridionale, et en combinant les deux valeurs, nous obtenons $^{14}\text{N}/^{15}\text{N} = 56 \pm 8$.

Ces résultats sont résumés sur la Fig. 11.9 qui donne les valeurs des rapports $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ dans le HCN à 15°S et 83°N en fonction du rapport isotopique terrestre.

Il est possible de comparer la valeur de $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ obtenue à 15°S avec les valeurs déduites des observations au sol réalisées en millimétrique. Dans l'introduction de cette partie, nous avons vu que Marten et al. (2002) obtenaient un rapport $\text{HC}^{14}\text{N}/\text{HC}^{15}\text{N}$ compris entre 60 et 70. La valeur que nous obtenons ici à partir des observations CIRS est comprise entre 43 et 72. Elle est donc en bon accord avec celle déduite par Marten et al. Nous avons également vu plus haut que Mark Gurwell (2004) obtenait deux valeurs de ce rapport suivant le profil vertical de température qu'il utilisait pour modéliser l'atmosphère. Avec le profil de Coustenis and Bézard (1995), il obtient $^{14}\text{N}/^{15}\text{N} = 94 \pm 13$ et avec celui de E. Lellouch (1990), il déduit $^{14}\text{N}/^{15}\text{N} = 72 \pm 9$. Nous sommes donc en accord avec ce dernier résultat.

La valeur de ce rapport isotopique a également été déterminée in situ dans le N_2 , à

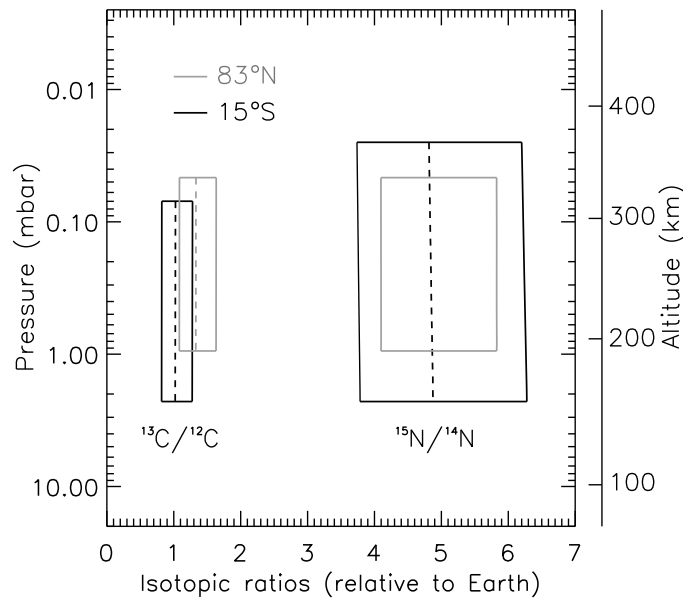


FIG. 11.9: Valeurs moyennes des rapports isotopiques $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ et $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ (tirets) à 15°S (noir) et 83°N (gris) en unité du rapport isotopique terrestre. Les enveloppes d'erreur à $1-\sigma$ sont indiquées en trait pleins. L'échelle de hauteur fait référence au profil à 15°S .

partir des données du GCMS à bord de Huygens dans la basse atmosphère, entre 36 et 41 km, ainsi qu'à partir de Cassini/INMS à 1200 km. Niemann et al. (2005) déduisent des mesures du GCMS un rapport $^{14}\text{N}/^{15}\text{N} = 183 \pm 5$ dans le N_2 . Waite et al. (2005) déduisent une valeur de ce rapport comprise entre 172 et 215 à 1200 km, et l'estiment comprise entre 168 et 211 près de la surface, ce qui inclue la valeur obtenue à partir du GCMS. Le N_2 est donc appauvri en ^{15}N par rapport au HCN.

Comme N_2 est le réservoir principal d'azote de l'atmosphère de Titan, la valeur du rapport $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ dans le HCN, supérieure à celle obtenue dans le N_2 suggère qu'il existe un important fractionnement de HCN au cours de sa formation ou de sa destruction qui favorise le ^{15}N par rapport au ^{14}N . Les valeurs obtenues ici, à partir des données CIRS à 15°S et 83°N , confirment les résultats précédents. L'homogénéité de ce rapport entre l'équateur et les hautes latitudes nord montre que le phénomène de fractionnement ne se produit pas dans une zone précise de l'atmosphère de Titan.

L'origine de ce fractionnement n'est pas clairement identifiée à ce jour. Plusieurs hypothèses sont envisageables. La première étape de formation du HCN est la dissociation de N_2 principalement par le rayonnement UV lointain ($\lambda < 100$ nm) et, dans une moindre mesure, par les électrons issus de la magnétosphère de Saturne qui précipitent dans l'atmosphère de Titan. Le N_2 se dissocie en ^{2D}N et en ^{4S}N dont une partie réagit avec les radicaux CH_3 issus de la photodissociation du méthane, pour former le HCN (e.g. Wilson et Atreya, 2004). Le reste se recombine avec ^{2D}N pour reformer du N_2 . La réaction du méthane avec les ions N^+ , issus de la photoionisation de N_2 , constitue une autre possibilité de formation du HCN.

Le HCN diffuse ensuite vers les basses couches atmosphériques où il condense. Un autre facteur de perte de HCN, proposée par McKay (1996) et Lara et al. (1999), est dû aux aérosols. Les mécanismes de fractionnement peuvent se produire à ces différentes étapes :

1- La photodissociation de N_2 pourrait être relativement efficace. Elle a lieu pour des longueurs d'onde inférieures à 100 nm, principalement au travers de mécanismes de prédissociation pour lesquels des transitions ont lieu vers les états de Rydberg et les états de valence. Ces états ont des temps de vie assez longs pour présenter des structures rotationnelles et vibrationnelles, et ainsi des raies d'absorption relativement étroites (e.g. Haverd et al. 2005, Lewis et al. 2005, Stark et al. 2005). Les bandes vibrationnelles des deux isotopes $^{14}\text{N}^{15}\text{N}$ et $^{15}\text{N}^{15}\text{N}$ peuvent être décalées de quelques dizaines de cm^{-1} comparées aux bandes de $^{14}\text{N}_2$ (Sprengers et al. 2003, Lewis et al. 2005). La valeur de ce décalage est supérieure à la largeur de raie. Pour un continuum d'irradiation provenant du Soleil, les longueurs d'onde correspondant aux raies d'absorption de $^{14}\text{N}_2$ (isotope le plus abondant) sont plus rapidement atténuées que celles correspondant aux raies d'absorption de $^{14}\text{N}^{15}\text{N}$ et $^{15}\text{N}^{15}\text{N}$ (isotopes les moins abondants). Ces derniers peuvent ainsi subir la photodissociation à des niveaux plus profonds que ceux où le $^{14}\text{N}_2$ est dissocié. Ce processus peut potentiellement augmenter le rapport isotopique $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ mais des calculs précis raie par raie, prenant en compte le spectre solaire (et non pas un continuum), sont nécessaires pour estimer quantitativement quelle est l'importance de ce phénomène de fractionnement.

2- Le fractionnement pourrait également se produire dans les réactions de formation du HCN (i.e., principalement $^{45}\text{N} + \text{CH}_3$ d'après Wilson et Atreya 2004), mais ces phénomènes n'ont pas été étudiés, ni en laboratoire, ni aux travers de calculs ab initio.

3- La condensation de HCN dans la basse stratosphère est supposée consommer plus efficacement le ^{15}N dans la phase gazeuse. Des effets similaires sur le rapport isotopique D/H sont observés sur Terre lors de la condensation de l'eau. Ceci constitue donc un mécanisme d'appauvrissement de ^{15}N et non pas d'enrichissement.

4- La photolyse de HCN est un mécanisme de perte mineur car la plupart des radicaux CN sont très rapidement recyclés en HCN. D'après Waite et al. (2005), le fractionnement de HCN induit par la photodissociation ne serait pas suffisant pour rendre compte de l'enrichissement observé.

5- Une autre origine de ce fractionnement pourrait être liée à la formation photochimique des aérosols s'il constitue un puits important pour le HCN (McKay 1996, Lara et al. 1999 et Vinatier et al. 2007). A nouveau, des mesures en laboratoire seraient nécessaires pour quantifier ce phénomène.

Ainsi la question du fractionnement de HCN reste ouverte.

Le travail que j'ai réalisé sur les inversions des rapports isotopiques $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ et $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ dans le HCN de Titan, à 15°S et 83°N a donné lieu à une publication reproduite en Annexe B.

CHAPITRE 12

Rapport isotopique D/H dans le C_2H_2

Sommaire

| | |
|--|-----|
| 12.1 Le rapport D/H dans le système solaire | 141 |
| 12.2 Le rapport D/H dans l'atmosphère de Titan | 142 |
| 12.3 Détermination du rapport D/H dans le C_2H_2 à partir des données CIRS à 54°S, 15°S et 54°N | 144 |
| 12.3.1 Inversions des profils verticaux d'abondance de C_2HD | 144 |
| 12.3.2 Rapport D/H dans le C_2H_2 à partir des données de CIRS : résultats et conclusions | 149 |

12.1 Le rapport D/H dans le système solaire

Le deutérium, formé au moment du Big Bang par la nucléosynthèse primordiale, est constamment détruit au sein des étoiles où les réactions thermonucléaires le transforment en 3He . Sa valeur dans l'univers ne peut donc que décroître. La mesure de D/H dans le disque protosolaire nous indique la valeur de ce rapport il y a 4.6 milliards d'années, alors que la mesure dans le milieu interstellaire local nous renseigne sur la valeur actuelle. Dans la nébuleuse solaire, l'hydrogène se présentait principalement sous deux formes : l'hydrogène moléculaire (H_2) et H_2O solide. Dans l'hydrogène, le rapport D/H valait probablement $(2.35 \pm 0.3) \times 10^{-5}$, qui est une valeur moyenne du rapport D/H dans le nuage protosolaire (Geiss and Goeckler, 1998) et Jupiter (Mahaffy et al. 1998, Lellouch et al. 2001).

L'eau solide présente un rapport D/H différent de celui observé dans H_2 , du fait de réactions chimiques qui enrichissent H_2O solide en deutérium. Ce phénomène existe également pour d'autres molécules. Dans les glaces du système solaire, la valeur du rapport D/H est d'autant plus élevée que la température est basse. L'enrichissement dépend aussi du type de glace considéré, il diffère suivant qu'il est mesuré dans H_2O , CH_4 ou HCN.

Les planètes géantes, assez massives pour avoir accrété de l'hydrogène gazeux, présentent donc un rapport D/H avec un enrichissement différent. La mesure du rapport D/H dans Jupiter, qui est principalement constituée de gaz de la nébuleuse

solaire, doit être représentatif de la valeur de la nébuleuse. Dans le cas de Saturne, un faible enrichissement est attendu (de l'ordre de 10 %), dû à la contribution de son noyau de glace. En revanche, dans le cas d'Uranus et Neptune, qui sont essentiellement constituées de glace, un enrichissement plus significatif est attendu. C'est également le cas pour les comètes qui sont constituées à 80% d'eau.

12.2 Le rapport D/H dans l'atmosphère de Titan

Dans l'atmosphère de Titan, le rapport D/H a été mesuré dans le CH₄ à partir de données acquises par Voyager, le télescope ISO (Infrared Space Observatory) et d'autres par des télescopes au sol. Toutes ces observations concernent les bandes ν_6 de CH₃D à 1156 cm⁻¹ et ν_4 du CH₄ à 1305 cm⁻¹. Connaissant l'abondance du méthane, il est possible de déterminer le profil de température et l'abondance de CH₃D par inversion des spectres, et ainsi d'en déduire le rapport D/H en effectuant le rapport des abondances de CH₃D et de CH₄. Les données enregistrées par Voyager/IRIS ont permis à Coustenis et al. (1989b) de déduire un rapport isotopique D/H = $1.5^{+1.4}_{-0.5} \times 10^{-4}$. Les observations menées depuis le sol par Orton et al. (1992) au IRTF (Infrared Telescope Facility, Mauna Kea, Hawaii) leur ont permis de déterminer une valeur D/H = $7.75 \pm 2.25 \times 10^{-5}$. En utilisant les données enregistrées par ISO, Coustenis et al. (2003) ont obtenu D/H = $0.87^{+0.32}_{-0.19} \times 10^{-4}$. Et plus récemment, en 2005, Penteadó et al. ont déduit D/H = $1.25 \pm 0.25 \times 10^{-4}$, en utilisant les données au sol de l'instrument Texas/IRTF.

La mission Cassini apporte de nouvelles déterminations de ce rapport isotopique. En utilisant les spectres enregistrés par Cassini/CIRS et les mêmes bandes de CH₃D et de CH₄ que celles citées ci-dessus, Coustenis et al. (2007) déduisent un rapport isotopique égal à $1.17^{+0.16}_{-0.21} \times 10^{-4}$ à moyenne latitude. Ce rapport semble peu varier sur le disque de Titan. Ce rapport a été réactualisé à $1.32^{+0.15}_{-0.11} \times 10^{-4}$ par Bézard et al. (2007) à partir de sélections de spectres dans la région équatoriale. Une valeur a également été obtenue à partir des données in situ enregistrées par l'instrument Huygens/GCMS à 10°S, avec lesquelles Niemann et al. (2005) déduisent un rapport D/H = $2.3 \pm 0.5 \times 10^{-4}$ dans le H₂ entre 67 et 125 km, légèrement supérieure à la valeur obtenue dans le CH₄ à partir des données de Cassini/CIRS. En fait, le GCMS mesure le rapport D/H dans le H₂ issu de la fragmentation de CH₄ par l'ionisation qui a lieu à l'intérieur de l'instrument. Or le H₂ est également présent dans l'atmosphère de Titan qui est analysée par le GCMS, avec une abondance de $(1 \pm 0.4) \times 10^{-3}$ (déduite des données IRIS, Courtin et al. 1995). La valeur du rapport D/H mesurée par le GCMS prend donc en compte la valeur dans le H₂ atmosphérique et dans le H₂ provenant du CH₄. Comme cette valeur est plus élevée que celle mesurée dans le méthane, il semblerait que la valeur du rapport D/H mesurée dans le H₂ atmosphérique seul soit plus élevée que celle mesurée par le GCMS. La valeur de rapport qui est plus élevée dans H₂ que dans CH₄ serait vraisemblablement due à l'échappement d'hydrogène (H et H₂) qui privilégie H par rapport à D et qui enrichirait donc l'atmosphère en deutérium.

La Table 12.1 résume les différentes valeurs du rapport D/H obtenues dans l'atmosphère de Titan. Le rapport D/H mesuré dans le méthane de Titan est de l'ordre de 1.10^{-4} , et dans l'hydrogène, il est de l'ordre de 2.10^{-4} . Ces valeurs sont très proches

| Observation | D/H | Moléc. | latitude | référence |
|----------------------|---------------------------------------|-------------------------------|----------------|---------------------------|
| Voyager | $1.5_{-0.5}^{+1.4} \times 10^{-4}$ | CH ₄ | équatoriale | Coustenis et al. (1989b) |
| Sol : IRTF | $(0.78 \pm 0.23) \times 10^{-4}$ | CH ₄ | disque-moyenné | Orton et al. (1992) |
| Telescope ISO | $0.87_{-0.19}^{+0.32} \times 10^{-4}$ | CH ₄ | disque-moyenné | Coustenis et al. (2003) |
| Sol : IRTF | $(1.25 \pm 0.25) \times 10^{-4}$ | CH ₄ | disque-moyenné | Penteado et al. (2005) |
| Cassini/CIRS | $1.17_{-0.28}^{+0.23} \times 10^{-4}$ | CH ₄ | lat. moyennes | Coustenis et al. (2007) |
| | $1.32_{-0.11}^{+0.15} \times 10^{-4}$ | CH ₄ | 15°S | Bézar et al. (2007) |
| Huygens/GCMS | $(2.3 \pm 0.5) \times 10^{-4}$ | H ₂ | in situ : 10°S | Niemann et al. (2005) |
| Cassini/CIRS | $0.96_{-0.7}^{+0.9} \times 10^{-4}$ | C ₂ H ₂ | 54°S | travail de thèse |
| Observations | $2.4_{-0.3}^{+0.45} \times 10^{-4}$ | C ₂ H ₂ | 15°S | (Coustenis et al., 2007b, |
| aux limbes | $2.7_{-0.6}^{+0.7} \times 10^{-4}$ | C ₂ H ₂ | 54°N | en préparation) |

TAB. 12.1: Comparaison des différentes valeurs du rapport D/H obtenues à partir d'observations spatiales et depuis le sol dans le CH₄, H₂ et C₂H₂.

de la valeur standard terrestre (Standard Mean Ocean Water, SMOW) qui vaut 1.6×10^{-4} .

Connaître la valeur du rapport D/H dans le méthane de Titan - qui est le réservoir principal d'hydrogène - permet de contraindre la formation et l'évolution de ce satellite. Le méthane de l'atmosphère de Titan est détruit par photodissociation sur une échelle de temps de l'ordre de 10 millions d'années, Cette période est probablement trop courte pour que le CH₄ subisse un fractionnement significatif par échappement. Comme le CH₄ provient de l'intérieur de Titan, la valeur du rapport D/H dans le méthane atmosphérique actuel serait similaire à celui des planétésimaux qui ont formé le satellite. Le méthane était très certainement présent dans les planétésimaux, puisqu'il a été détecté dans un nombre important de comètes du nuage de Oort (Gibb et al. 2003) et plus récemment dans la comète 9P/Tempel 1 par la mission Deep Impact (Mumma et al. 2005).

D'après Hersant et al. (2006), vu les conditions de pression régnant à l'intérieur de Titan, le CH₄ - comme les gaz volatiles - se trouve nécessairement sous forme d'hydrate de méthane (ou clathrate¹ de méthane) qui pourrait remonter vers la surface sous l'effet du cryovolcanisme. Ces auteurs privilégient ainsi le fait que le CH₄ provient directement de la nébuleuse solaire et non pas de l'intérieur de Titan où il pourrait être produit à partir de H₂O et CO₂. Dans ce cas, le rapport D/H mesuré dans le CH₄ de l'atmosphère de Titan devrait être représentatif de celui de la nébuleuse solaire.

A l'opposé, d'autres auteurs comme Atreya et al. (2006), penchent plutôt pour une origine interne du méthane puisque que Huygens n'a détecté ni xenon, ni krypton, gaz qui devraient avoir été également apportés par les planétésimaux qui ont formé Titan. Si le méthane est dégazé, alors il devrait en être de même de ces gaz rares. Atreya et al. (2006) suggèrent que le méthane pourrait s'être formé au sein de l'océan d'eau et d'ammoniac supposé exister sous la surface de Titan. Sous des conditions thermiques et de pression favorables, qui auraient pu exister au cours de la phase de chauffage résultant de l'accrétion de Titan, des phénomènes de serpentisation

¹Un clathrate est un composé chimique constitué d'un complexe d'inclusion formé d'une ou plusieurs molécules hôtes qui emprisonnent une autre molécule. Un clathrate de méthane est constitué d'une cage de glace d'eau renfermant une molécule de CH₄.

à basse température auraient pu se mettre en place, des réactions entre l'eau et la roche auraient alors libéré de l'hydrogène gazeux qui, à son tour, aurait réagi avec des matériaux carbonés pour produire du méthane. Celui-ci aurait été stocké sous forme de clathrates et libéré dans l'atmosphère soit progressivement, soit au cours des différentes périodes de l'histoire géologique de Titan, soit épisodiquement, lors d'impacts. Ainsi, le rapport D/H mesuré dans le méthane serait représentatif du rapport D/H mesuré dans l'eau de la nébuleuse solaire.

A partir des données enregistrées par CIRS, il est également possible de déduire le rapport D/H dans le C_2H_2 . Le C_2HD a été détecté par Athéna Coustenis (Coustenis et al. 2007b) à 678 cm^{-1} à partir de sélections enregistrées avec une géométrie au nadir. Nous pouvons remarquer que la bande d'émission de C_2HD est située relativement loin en nombre d'onde de C_2H_2 (729 cm^{-1}), ce qui n'est pas le cas de $H^{13}CN$ (706 cm^{-1}) et $HC^{15}N$ (711 cm^{-1}) dont les bandes d'émission sont situées à proximité de celles de $H^{12}C^{14}N$ (713 cm^{-1}). En effet, la substitution d'un atome par son isotope provoque un changement de fréquence de vibration de la molécule. Les changements de la symétrie de la molécule, et en particulier la modification de son moment dipolaire, peut altérer grandement le spectre avec émergence de nouvelles bandes. La modification des fréquences de vibration et des moments d'inertie sont plus marqués pour une substitution d'un atome H par son isotope D que pour ^{12}C en ^{13}C ou ^{14}N en ^{15}N . J'ai participé à l'étude de ce rapport isotopique en déterminant sa valeur à partir des données enregistrées au limbe. Ce travail d'analyse, effectué à $54^\circ S$, $15^\circ S$ et $54^\circ N$, sera exposé dans les sections qui suivent. Les méthodes d'analyse utilisées étant les mêmes que celles présentées ci-dessus pour les déterminations des rapports $^{15}N/^{14}N$ et $^{12}C/^{13}C$, elle seront moins détaillées ici.

12.3 Détermination du rapport D/H dans le C_2H_2 à partir des données CIRS à $54^\circ S$, $15^\circ S$ et $54^\circ N$

12.3.1 Inversions des profils verticaux d'abondance de C_2HD

Pour inverser l'abondance de C_2HD , j'utilise la gamme spectrale $670 - 690\text{ cm}^{-1}$. Les signatures de CO_2 , HC_3N , C_6H_6 , et C_2H_2 apparaissent également dans cette zone. Pour chacune des trois latitudes, j'ai donc incorporé dans le modèle atmosphérique les profils verticaux de ces molécules que j'ai inversés au préalable (voir Partie III). La base de données GEISA n'inclue pas la bande d'émission de C_2HD , nous utilisons le fichier spectroscopique qui nous a été fourni par Antoine Jolly et Yves Bénilan (voir Coustenis et al. 2007b, article en préparation).

Les caractéristiques des spectres au limbe utilisés pour réaliser les inversions à $54^\circ S$, $15^\circ S$ et $54^\circ N$ sont décrites dans la Table 7.1. Chaque inversion prend en compte quatre spectres au limbe sondant les altitudes 194, 227, 252, et 286 km à $54^\circ S$; 242, 278, 314 et 349 km à $15^\circ S$ et 201, 237, 273 et 309 km à $54^\circ N$.

J'ai également utilisé des spectres au nadir moyennés afin de sonder des niveaux plus bas que ceux sondés par les spectres au limbe. A $54^\circ S$, la sélection au nadir comprend 883 spectres enregistrés entre les survols Tb et T20 dans la gamme de latitude $50^\circ S - 60^\circ S$, avec un angle d'émission moyen de 28° . A $15^\circ S$, j'utilise une

sélection de 3054 spectres acquis entre les survols Tb et T20, entre 10°S et 20°S, avec un angle d'émission moyen de 32°. Ces sélections d'un grand nombre de spectres au nadir me permettent d'obtenir un meilleur rapport signal-à-bruit que les sélections que j'ai utilisées pour inverser les abondances des molécules mineures (voir Partie III). A 54°N, j'ai gardé la même sélection que celle utilisée pour inverser les abondances des autres molécules, celle-ci est décrite dans la Table 7.1.

Les profils de température incorporés dans le modèle atmosphérique sont ceux de la Fig. 5.5 (Partie II). Les profils de température à 56°S et 13°S ne sont pas contraints sous le niveau 7 mbar (~ 110 km), et celui à 56°N n'est pas contraint sous le niveau 1.5 mbar du fait des basses températures de la stratosphère à cette latitude.

La Fig. 12.1 montre la détection de C₂HD à 54°S ((a), à gauche) et 15°S ((b), à gauche) à 678 cm⁻¹ sur le nadir et plusieurs limbes par comparaison des spectres calculés avec la bande d'émission de C₂HD (en bleu), sans l'émission de C₂HD (orange) et les spectres observés (tirets noirs). La détection est également mise en évidence sur les résidus correspondants (différence entre les intensités observées et les intensités calculées, à droite) avec (bleu) et sans (tirets orange) émission de C₂HD. A ces deux latitudes, les résidus calculés avec et sans émission de C₂HD sont quasiment superposés, excepté autour de 678 cm⁻¹. Ils nous montrent que la détection sur le spectre nadir et les deux premiers limbes ne dépasse pas le niveau 2-σ. A 54°N, la détection est également claire sur plusieurs spectres.

Les profils d'abondance de C₂HD inversés à 54°S et 15°S correspondant à ces spectres calculés sont représentés sur la Fig.12.2 (noir). Ces profils d'abondance ont été inversés avec une longueur de corrélation de 3 échelles de hauteur (L=3). Dans un premier temps, cette longueur de corrélation a été appliquée aux trois latitudes. Le profil inversé à 54°N est représenté sur la Fig. 12.3 en noir. Nous pouvons noter, en comparant les formes des profils verticaux d'abondance de C₂HD et C₂H₂, que les distributions verticales des rapports isotopiques D/H ne sont pas constantes avec l'altitude.

Intéressons-nous d'abord au cas à 54°S. Le rapport isotopique D/H décroît avec l'altitude entre 10 mbar et 1 mbar. Tout le problème est de prouver si cette décroissance est réelle ou non. Le premier point à vérifier concerne la contrainte de ce rapport. En particulier, il faut que l'émission de C₂H₂ sonde les mêmes niveaux que ceux sondés par l'émission de C₂HD. La Fig. 12.4 (gauche) montre les kernels correspondant aux émissions de ces deux molécules. L'émission de la branche Q de C₂H₂ (pointillés bleus) du spectre nadir sonde autour de 1.5 mbar (170 km). Dans la branche P, à 682 cm⁻¹ (pointillés noirs), l'acétylène sonde vers 10 mbar (100 km), du fait de l'intensité moins élevée que dans la branche Q. Le kernel correspondant à l'émission nadir de C₂HD à 678 cm⁻¹ (traits pleins rouges) sonde vers 15 mbar (95 km). Les émissions aux limbes des kernels à 678, 682 et 729 cm⁻¹ sondent les mêmes altitudes. Le profil de température est contraint entre 7 mbar et 2 μbar, ce qui est au-dessus des pressions correspondant aux maxima des kernels des émissions au nadir de C₂HD et C₂H₂ (voir Fig. 12.4). Or l'incertitude sur le profil de température affecte de la même manière les abondances de C₂HD et C₂H₂ et le rapport q_{C₂HD}/q_{C₂H₂} est donc peu affecté par cette incertitude.

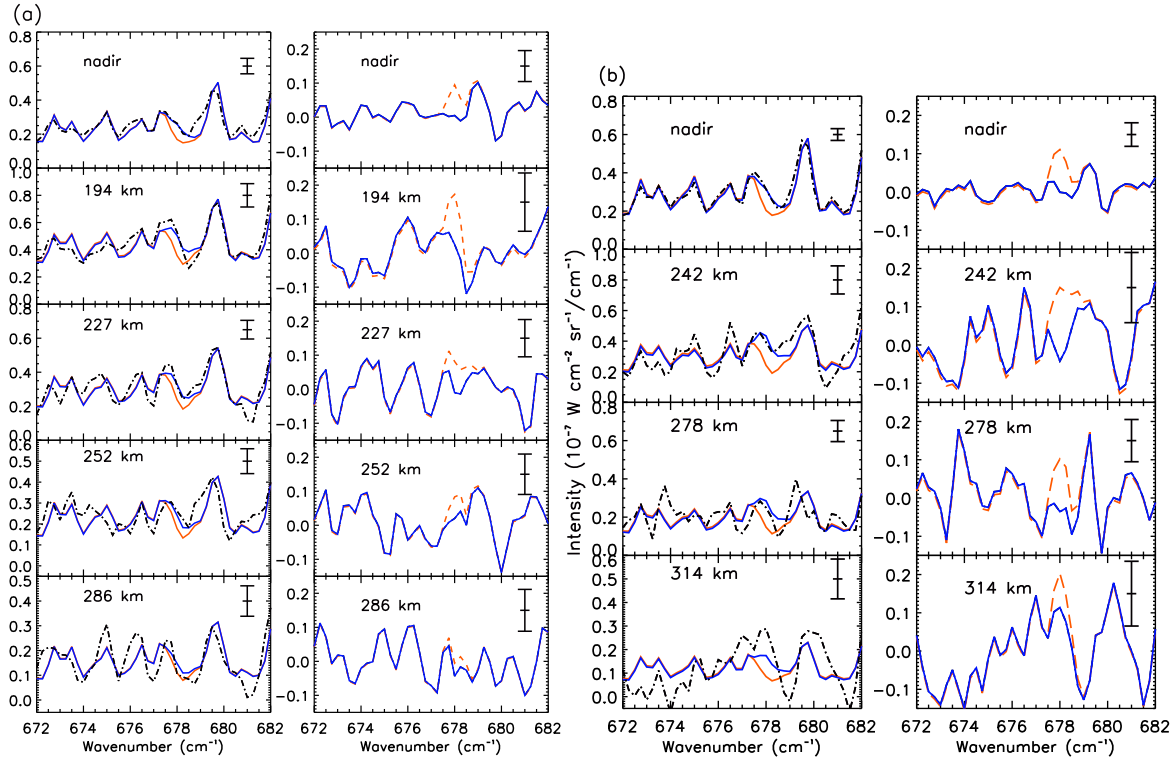


FIG. 12.1: (a) **A gauche :** Comparaison entre les spectres calculés avec et sans émission de C₂HD et les spectres observés à 54°S. **A droite :** spectres calculés (bleu) avec le profil d'abondance de C₂HD de la Fig. 12.2 (en noir), comparés aux spectres calculés sans émission de l'isotope (orange) et aux spectres observés (tirets-pointillés noirs). (a) **A droite :** Résidus correspondants à la différence entre les spectres observés et les spectres calculés avec l'émission de C₂HD (bleu) et sans cette émission (tirets oranges). Les barres d'erreur correspondent au niveau $\pm 1\text{-}\sigma$. (b) : **Idem** à 15°S.

Afin de tester la validité de cette possible décroissance du rapport isotopique D/H avec l'altitude, j'ai effectué un test d'inversion en forçant le rapport isotopique D/H à être constant avec l'altitude, ce qui revient à forcer le profil vertical de C₂HD inversé à être homothétique à celui de C₂H₂. L'idée est de voir comment la modélisation des spectres est alors dégradée. Pour cela, j'ai utilisé en entrée de l'inversion de l'abondance de C₂HD, un profil a priori de C₂HD égal à celui de C₂H₂ et j'ai appliqué une longueur de corrélation de 200 échelles de hauteur (comme cela avait été fait pour les rapports ¹²C/¹³C et ¹⁴N/¹⁵N, voir Section 11.3.4). Le profil vertical de C₂HD correspondant est représenté sur la Fig. 12.2 (en rouge, en haut). En comparant les deux profils d'abondance de C₂HD inversés avec L=3 ou L=200, nous constatons qu'ils diffèrent principalement vers 10 mbar (niveau sondé par l'émission nadir de C₂HD). Le χ^2/n réduit (avec n = 42 points spectraux de mesure indépendants) calculé pour le spectre nadir de l'inversion avec L=200 vaut 1.031 fois le χ^2/n de celui inversé avec L=3. On s'attend à ce qu'une variation de 1- σ autour de l'intensité calculée avec L=3 corresponde à $\Delta\chi^2/n \sim 0.024$. Ce nouveau profil d'abondance de C₂HD (rouge), inversé en supposant le rapport isotopique D/H constant avec l'altitude, génère donc un spectre qui s'écarte légèrement au-delà de 1- σ du spectre calculé avec L=3. Si l'on compare le χ^2/n moyenné sur les 4 spectres, on obtient $\langle\chi^2/n\rangle_{L=200} = 1.0059 \langle\chi^2/n\rangle_{L=3}$, ce qui est très proche du $\Delta\langle\chi^2/n\rangle \sim 1/(4 \times 42) \sim 6 \times 10^{-3}$ pour une erreur à 1- σ .

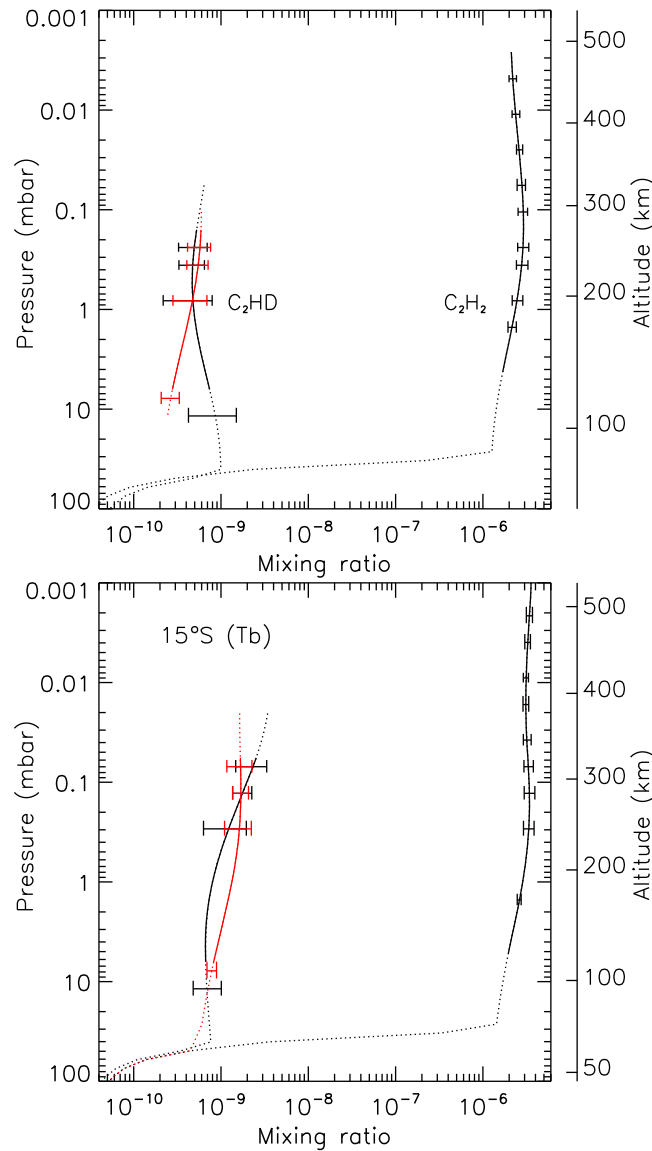


FIG. 12.2: En haut : Profils d'abondance de C_2HD et C_2H_2 inversés à $54^\circ S$. Les profils d'abondance de C_2HD inversés avec $L=3$ (en noir) et $L=200$ (homothétique au profil d'abondance de C_2H_2 , en rouge) sont représentés. Les parties en pointillés signalent les zones où les profils inversés ne sont pas contraints. Les barres d'erreur sont données au niveau des maxima des kernels. En bas : Idem à $15^\circ S$

Les spectres calculés avec un rapport isotopique D/H constant avec l'altitude ne s'éloignent pas plus, en moyenne, de $1-\sigma$ des spectres calculés avec $L=3$, ils reproduisent donc également de façon correcte les spectres observés.

Les kernels correspondant à ce nouveau profil d'abondance de C_2HD (homothétique à celui de C_2H_2) sondent des niveaux comparables à celui déterminé avec $L=3$ (voir la Fig. 12.4, à droite).

Comme les profils de C_2HD inversés à $15^\circ S$ et $54^\circ N$ avec $L=3$ correspondent également à des rapports isotopiques variant avec l'altitude, j'ai effectué des inversions en contraignant le profil d'abondance inversé de C_2HD à être homothétique à celui de C_2H_2 afin de tester si un rapport isotopique constant avec l'altitude permet de re-

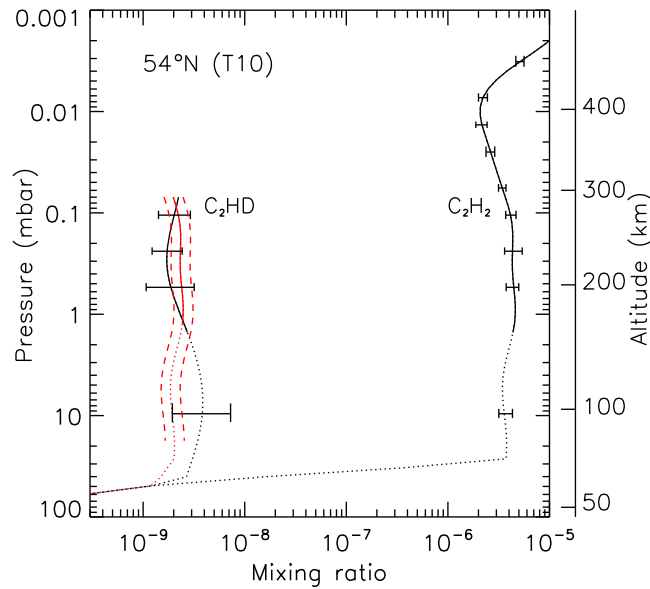


FIG. 12.3: A gauche : Profils d'abondance de C_2HD et C_2H_2 inversés à $54^\circ N$. Les profils d'abondance de C_2HD inversés avec $L=3$ (en noir) et $L=200$ (homothétique au profil d'abondance de C_2H_2 , en rouge) sont représentés. Les parties en pointillés signalent les zones où les profils inversés ne sont pas contraints. Les barres d'erreur sont données au niveau des maxima des kernels.

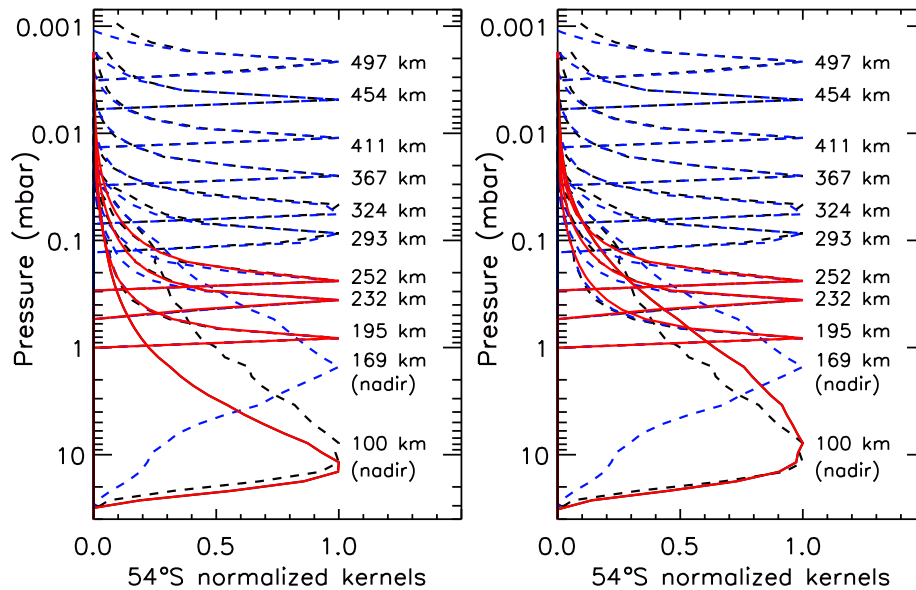


FIG. 12.4: Kernels normalisés à $54^\circ S$, calculés à 678 cm^{-1} (C_2HD , rouge), 682 cm^{-1} (branche P de C_2H_2 , tirets noirs) et 729 cm^{-1} (branche Q de C_2H_2 , tirets bleus), correspondant à un rapport isotopique D/H variant avec l'altitude (à gauche) et à un rapport D/H constant avec l'altitude (à droite), dont les profils verticaux sont respectivement présentés en noir et en rouge sur la Fig. 12.2. Les altitudes sont données aux niveaux des maxima des kernels.

produire les spectres observés. Les profils d'abondance de l'isotope ainsi obtenus sont représentés sur les Figs. 12.2 (b) et 12.3 en rouge. Ces profils sont relativement peu éloignés des profils inversés avec $L=3$ (en noir) et la comparaison des χ^2 réduits obtenus pour les deux lissages ($L=3$ et $L=200$) permet de conclure qu'un rapport isotopique constant avec l'altitude reproduit de façon satisfaisante les données.

12.3.2 Rapport D/H dans le C₂H₂ à partir des données de CIRS : résultats et conclusions

Les barres d'erreur sur le rapport isotopique D/H ont été calculées de la même manière que celles des rapports ¹³C/¹²C et ¹⁵N/¹⁴N (voir Section 11.3.6).

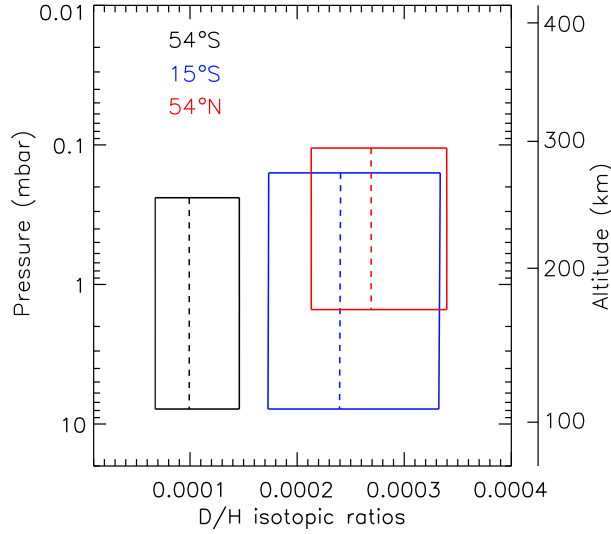


FIG. 12.5: Rapports isotopiques D/H obtenus à 54°S (noir), 15°S (bleu) et 54°N (rouge). Les valeurs moyennes sont données en tirets et les enveloppes d'erreur en traits pleins.

La Fig. 12.5 résume les valeurs des rapports D/H dans le C₂H₂ obtenus à 54°S (noir), 15°S (bleu) et 54°N (en rouge) avec les gammes d'altitudes sondées. Les tirets donnent les valeurs moyennes du rapport et les traits pleins les enveloppes d'erreur à 1-σ. A 54°S, nous obtenons $D/H = 9.6_{-3}^{+4.5} \times 10^{-5}$; à 15°S, il vaut $2.4_{-0.68}^{+0.94} \times 10^{-4}$ et à 54°N $D/H = 2.7_{-0.6}^{+0.7} \times 10^{-4}$. Nous pouvons remarquer que les valeurs de D/H à 15°S et 54°N sont similaires, alors qu'elles sont ~2 fois supérieures à la valeur de 54°S. Il est difficile de dire s'il existe un réel enrichissement entre 54°S et 15°S - 54°N compte tenu des barres d'erreur relativement grandes (1-σ). Par la suite, il sera intéressant d'inverser ce rapport à plusieurs latitudes afin de voir si le rapport isotopique D/H varie réellement avec la latitude. Si cette variation était réelle, elle serait difficile à interpréter.

Si nous prenons en compte les trois valeurs du rapport D/H et que nous les moyennons, nous obtenons, en utilisant les équations 11.14 et 11.15, **D/H = 1.7 ± 0.4 × 10⁻⁴ dans le C₂H₂**. Cette valeur, ainsi que celles mesurées pour chaque latitude, sont compatibles avec celles obtenues précédemment dans le méthane et dans H₂ (voir Table 12.1). Le C₂H₂ étant créé à partir de la photodissociation de CH₄, et les rapports isotopiques mesurés dans ces deux molécules étant relativement similaires, on peut donc en déduire qu'il n'existe probablement pas de processus de fractionnement qui enrichissent, ou appauvrissent le deutérium de C₂H₂.

Le travail que j'ai réalisé sur les inversions du rapport isotopiques D/H dans l'acétylène de Titan, à 54°S, 15°S et 54°N a donné lieu à la participation à la rédaction d'un article mené par Athéna Coustenis (Coustenis et al. 2007b, en préparation).

Cinquième partie

V. Conclusions et perspectives

CHAPITRE 13

Conclusions et perspectives

Sommaire

| | |
|-----------------------------|-----|
| 13.1 Conclusions | 153 |
| 13.2 Perspectives | 155 |

13.1 Conclusions

L'objectif de mon travail de thèse était l'analyse des spectres émis en infrarouge thermique par l'atmosphère de Titan, enregistrés par l'instrument Cassini/CIRS.

J'ai eu la chance d'intégrer l'équipe CIRS quelques mois après la mise en orbite de la sonde Cassini autour de Saturne, c'est-à-dire au moment où les premiers spectres de l'atmosphère de Titan ont été acquis par l'instrument. Les centaines de milliers de spectres qui seront enregistrés tout au long de la mission, prolongée jusqu'en 2010, balayent toute la surface de Titan, ainsi qu'une partie importante de son atmosphère, allant de la tropopause à la basse mésosphère. L'analyse de tous ces spectres demandera de nombreuses années. Nous nous sommes partagés la tâche au sein de l'équipe CIRS, certains travaillent principalement sur l'étude des profils de température, d'autres sur la détection de nouveaux composés, sur la dynamique atmosphérique, sur les nitriles, les composés oxygénés, ... et nous avons choisi de nous focaliser sur l'étude des spectres enregistrés au limbe de Titan, à haute résolution spatiale et spectrale, afin de déduire les profils verticaux d'abondance des hydrocarbures principalement, aux différentes latitudes observées.

Au cours de ces trois années, je me suis focalisée sur l'analyse des spectres enregistrés au-dessus de 4 latitudes : 54°S, 15°S, 54°N et 79°N, et ce dans le but d'étudier les variations verticales et latitudinales des profils verticaux d'abondance de C₂H₂, C₂H₄, C₂H₆, CH₃C₂H, C₃H₈, C₄H₂, C₆H₆, HCN, HC₃N et CO₂.

La première étape de ce travail a consisté en l'inversion des profils de température de l'atmosphère à ces quatre latitudes, afin d'inverser dans un second temps, les profils d'abondance des molécules minoritaires de l'atmosphère de Titan. Pour cela, j'ai analysé les spectres au limbe acquis entre 1100 et 1400 cm⁻¹ par les détecteurs du plan focal FP4 de CIRS. La première version du profil de température à 15°S (à

partir des données enregistrées pendant le survol Tb) est présentée dans le papier de Flasar et al. (2005). Pour la première fois, nous avons pu mettre en évidence l'existence d'une stratopause dans l'atmosphère de Titan, qui a également été observée in situ par l'instrument Huygens/HASI. Je me suis ensuite focalisée sur les spectres au limbe enregistrés pendant le survol T3, ce qui m'a permis d'inverser le profil de température à 80°N. Nous avons alors mis en évidence une stratosphère plus froide et une mésosphère plus chaude que celles de l'équateur. De plus, l'altitude et la température de la stratopause diffèrent à ces deux latitudes (Vinatier et al., 2007). L'étude des spectres enregistrés à 54°S et 54°N (survol T15 et T10 respectivement) nous ont permis de confirmer cette tendance (voir Partie II).

La partie III de ce manuscrit relate la méthode d'inversion des profils verticaux d'abondance ainsi que les résultats obtenus en utilisant les profils de température inversés précédemment. Avant la mission Cassini, seuls quelques profils verticaux étaient disponibles pour les modélisateurs (température stratosphérique et abondances de C_2H_2 , C_2H_6 , C_2H_4 , CH_3C_2H , C_3H_8 , C_4H_2 , C_2N_2 , HCN et HC_3N). La plupart des profils verticaux étaient déduits des données de Voyager à 70°N, entre 100 et 300 km (avec une résolution verticale de 200 km). Des observations millimétriques depuis le sol ont également permis de déduire les profils verticaux de HCN et HC_3N moyennés sur le disque.

Mon travail de thèse a porté sur la détermination de nouveaux profils verticaux d'abondance en utilisant les spectres enregistrés entre 600 et 1100 cm^{-1} par les détecteurs du plan focal FP3 de CIRS. Suivant le rapport signal-à-bruit des signatures spectrales, il m'a été possible de déduire les distributions verticales des rapports de mélange de certains constituant entre 100 et 500 km, avec une résolution verticale de l'ordre de 30 km, bien meilleure que celle des observations de Voyager. Nous avons ainsi présenté pour la première fois, les variations latitudinales des profils verticaux d'abondance de ces molécules. Certaines caractéristiques de ces profils, comme l'augmentation de l'abondance de la plupart des molécules avec l'altitude ou l'enrichissement vers les hautes latitudes nord, peuvent être expliquées par les modèles photochimiques et les modèles de circulation générale. D'autres phénomènes, comme par exemple la présence de minima d'abondance qui n'avaient jamais été observés auparavant, ne sont pas prédits par les modèles et sont visibles sur un certain nombre de profils à haute latitude nord.

En utilisant l'émission du continuum entre 600 et 1100 cm^{-1} (les études précédentes s'intéressaient à la gamme spectrale en-deçà de 600 cm^{-1}), il m'a également été possible de déterminer des profils verticaux de l'absorption des aérosols à 15°S (voir Partie II). Cette étude fera l'objet d'un travail plus poussé dans une prochaine publication.

Les résultats que j'ai obtenus à 15°S (profil de température, d'abondance et d'opacité des aérosols) ont été utilisés, conjointement avec ceux de Huygens, par Tomasko et al. (2007) pour calculer le profil vertical du taux de refroidissement de l'atmosphère de Titan et le comparer au taux de chauffage solaire.

La dernière partie de ce manuscrit relate les résultats que j'ai obtenus concernant l'analyse des rapports isotopiques $^{12}C/^{13}C$ et $^{14}N/^{15}N$ dans le HCN, et D/H dans le C_2H_2 . Grâce aux données CIRS, nous avons pu détecter pour la première fois l'émission de $H^{13}CN$ et $HC^{15}N$ en infraouge thermique (Vinatier et al., 2007b), ce

qui nous a permis de confirmer les résultats déduits des données enregistrées au sol en millimétrique (Marten et al. 2002). Je me suis focalisée sur la détermination de ces rapports isotopiques à 15°S et 80°N et j'ai montré qu'il ne présentent pas de variation mesurable avec la latitude. Nous déduisons une valeur du rapport $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ dans le HCN supérieure à celle obtenue in situ par l'instrument Huygens/GCMS dans le N_2 , qui constitue le réservoir principal d'azote. Ceci suggère l'existence d'un processus de fractionnement, non identifié actuellement, qui favorise la formation de HC^{15}N par rapport à HC^{14}N . La valeur du rapport isotopique $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ dans le HCN est en accord avec celle obtenue in situ dans le CH_4 (réservoir principal de carbone), l'isotope lourd du carbone ne présente donc pas de fractionnement notable. Je me suis également intéressée à la détermination du rapport D/H dans le C_2H_2 à 54°S, 15°S et 54°N. En effet, le C_2HD a été détecté pour la première fois grâce aux spectres de CIRS (Coustenis et al. 2007, en préparation). J'obtiens ainsi des valeurs du rapport isotopique D/H en accord à 15°S et 54°N, mais qui diffèrent à 54°S. Cette tendance devra être confirmée par la suite en étudiant d'autres latitudes.

Au cours de ma thèse, j'ai pu me familiariser avec les méthodes d'inversion des spectres et en comprendre les difficultés. L'une des principales est de déterminer les altitudes où les profils sont contraints par les observations. Les profils d'abondance ne peuvent être inversés de façon correcte qu'aux altitudes où le profil de température est lui-même bien contraint par les observations. La latitude sondée peut également différer de celle indiquée dans les bases de données de CIRS en raison de la géométrie de certaines observations (limbe ou nadir) dont les lignes de visée traversent plusieurs latitudes. Il est bien souvent nécessaire d'effectuer de très nombreux tests avant de valider la forme d'un profil vertical non prédit. De même, il est parfois difficile d'extraire l'information verticale du profil d'abondance d'une molécule présentant une émission spectrale avec un faible rapport signal-à-bruit. Enfin, les données étant régulièrement ré-étalonnées au cours de la mission, nous sommes contraints de recommencer intégralement notre travail d'inversion afin de mettre à jour les profils d'abondance inversés.

13.2 Perspectives

Il reste un nombre considérable de données à analyser et les spectres enregistrés par CIRS offrent des perspectives d'étude variées.

Tous d'abord il est important de déduire la température atmosphérique et les abondances des molécules à toutes les latitudes afin qu'elles soient utilisées par les modélisateurs pour contraindre les modèles photochimiques et de circulation générale de l'atmosphère de Titan.

En plus d'effectuer les inversions systématiques des spectres au limbe à 0.5 cm^{-1} de résolution, il reste de très nombreux points à aborder en utilisant tous les spectres enregistrés par CIRS. En particulier, une observation détaillée de la région polaire nord, qui constitue actuellement la région où la dynamique génère les effets les plus visibles sur les abondances des molécules et des aérosols, permettra de contraindre à la fois la chimie atmosphérique et la dynamique. De même, les modèles de circulation générale prédisent un enrichissement résiduel de l'abondance des molécules autour de l'hémisphère sud, qu'il reste à confirmer (ou non) par les observations.

Les aérosols ont un effet très important sur le forçage radiatif et l'étude de leur opacité à partir des spectres de CIRS en infrarouge thermique apportera de nouvelles informations sur leur distribution verticale et latitudinale ainsi que sur leur signature spectrale. Les spectres enregistrés dans la nuit polaire sont particulièrement intéressants, car cette zone ne peut être observée par les autres instruments qui détectent le rayonnement solaire réfléchi en visible et proche infrarouge (VIMS et ISS).

Le méthane (CH_4), originaire de la surface/sous-surface, est le second constituant le plus abondant de l'atmosphère de Titan, il joue un rôle primordial dans la chimie atmosphérique. A partir des données de Huygens/GCMS, une valeur très précise de son abondance a été déterminée à 10°S . Une autre valeur a également été déterminée à 15°S à partir des données de CIRS. Il sera intéressant d'étudier la distribution latitudinale de son abondance afin de vérifier l'hypothèse actuelle selon laquelle le CH_4 est réparti de façon homogène à toutes les latitudes sous l'effet de la dynamique atmosphérique.

L'analyse de nouveaux spectres permettra d'affiner les valeurs des rapports isotopiques obtenues dans ce travail de thèse.

Enfin, pour toutes les grandeurs physiques citées ci-dessus, étant donné la durée totale de la mission (2004-2010), il sera très certainement possible d'observer des variations temporelles dues à des effets saisonniers ou dynamiques.

Remerciements

En tout premier, je tiens à exprimer ma profonde gratitude envers Bruno Bézard, mon directeur de thèse. Il m'a appris énormément de choses en trois ans, m'a laissé toute mon autonomie et a toujours été très disponible pour répondre à toutes mes questions et pour me guider dans mon travail. Je le remercie pour la totale confiance qu'il m'a accordée et pour ses encouragements. Merci de m'avoir poussée à présenter mon travail, ce qui m'a offert la possibilité d'aller à de nombreux congrès et de rencontrer tous les spécialistes de l'atmosphère de Titan. Pour tout cela, à nouveau, je l'en remercie sincèrement.

Je souhaite également remercier toutes les personnes de l'équipe CIRS qui font un travail gigantesque de réduction de données, sans quoi les analyses présentées dans cette thèse n'auraient pu être menées. Merci également à toutes les autres personnes de cette équipe pour leur accueil et en particulier à Mike Flasar qui a fait en sorte que je me sente très rapidement comme un membre à part entière de l'équipe CIRS. Je mesure la chance que j'ai d'avoir débuté ma thèse dans cette équipe au tout début des observations de Titan par Cassini, et je suis également consciente de la grande chance que j'ai de pouvoir maintenant continuer en post-doc.

Je tiens à remercier chaleureusement toutes les personnes du pôle planéto du LESIA (pardonnez-moi de ne pas vous citer en détails car vous êtes trop nombreux) pour leur accueil, leur bonne humeur et pour tous les bons moments passés avec eux, en particuliers, j'ai de très bons souvenirs de congrès ... dont le mémorable DPS de Louisville.

Je tiens également à remercier Frédéric Hourdin et Caitlin Griffith pour avoir accepté de rapporter ma thèse. Caitlin, merci également pour ton incroyable enthousiasme si communicatif. Je suis également reconnaissante envers Marie-Claire Gazeau et Jean-Pierre Lebreton pour avoir pris le temps de lire le manuscrit et d'avoir accepté d'être mes examinateurs. Enfin, je souhaite remercier chaleureusement Marcello qui a suivi mon parcours depuis la licence (où je voulais déjà me diriger vers la planétologie) et qui m'a soutenue et conseillée à de nombreuses reprises ces sept dernières années. Merci pour tout et merci d'avoir accepté de présider ma soutenance.

Merci également à Sébastien Lebonnois et Audrey Crespin pour leurs explications sur la photochimie et la dynamique atmosphérique. Merci aussi Audrey pour tous les bons moments passés dans les divers meetings.

J'ai rencontré énormément de personnes à l'Observatoire de Meudon qui ont fait que ces trois années de thèse ont été incroyablement enrichissantes. Je pense en

premier à un certain nombre d'étudiants avec qui se sont noués des liens d'amitié et avec qui j'ai passé de très bons moments : Julio, Etienne, Evelyne, Patrick, Fabio, Sophie et Sylvain qui étaient dans le bâtiment 14 qui a accueilli mon bureau pendant 2 ans ; merci également à Alberto, David, Mathieu, Emilie, Emmanuel avec qui j'ai partagé mon second bureau. Merci à Olga pour sa bonne humeur communicative. Merci aussi à Aurélie, Frédéric, Arielle, Jérémie, Sandrine, Erwan, Benoit, Laurent, Ioannis, Céline et Adeline. Merci à Jacqueline Mondellini pour son amitié. Merci à Suda, Aurélie et Daniel pour leur aide. Merci également à toutes les autres personnes avec qui j'ai passé d'agréables moments (Marie, Pierre, Bernard, ...).

Je souhaiterais également remercier certains enseignants que j'ai croisés et qui ont cru en moi, m'ont soutenue et/ou m'ont toujours donnés (et me donnent encore) de précieux conseils : Guillaume Aulanier, Roland Grappin, Mme Fayolle, Kyan Schahmaneche, et enfin merci à Alain Laverne qui m'a poussée dès la licence à faire un stage en astrophysique, ce qui a été déterminant pour la suite.

Tout ceci n'aurait pu être possible sans ma famille, je remercie donc tout particulièrement mes parents, mon frère Marc et mes grands-parents pour leur intérêt et pour le soutien qu'ils m'ont toujours apporté depuis de si nombreuses années.

Enfin, merci à toi Cyril, qui est toujours là et qui m'apporte tant ...

Annexes

ANNEXE A

Article : Vinatier et al. (2007a)

Available online at www.sciencedirect.com

ICARUS

Icarus 188 (2007) 120–138

www.elsevier.com/locate/icarus

Vertical abundance profiles of hydrocarbons in Titan's atmosphere at 15° S and 80° N retrieved from Cassini/CIRS spectra

Sandrine Vinatier^{a,*}, Bruno Bézard^a, Thierry Fouchet^a, Nick A. Teanby^b, Remco de Kok^b, Patrick G.J. Irwin^b, Barney J. Conrath^c, Conor A. Nixon^d, Paul N. Romani^e, F. Michael Flasar^e, Athena Coustenis^a

^a LESIA, Observatoire de Paris, 5 place Jules Janssen, F-92195 Meudon, France^b Atmospheric, Oceanic & Planetary Physics, Department of Physics, University of Oxford, Clarendon Laboratory, Parks Road, Oxford, OX1 3PU, UK^c CRSR, Cornell University, Ithaca, NY 14853, USA^d Department of Astronomy, University of Maryland, College Park, MD 20742, USA^e NASA/Goddard Space Flight Center, Code 693, Greenbelt, MD 20771, USA

Received 22 June 2006; revised 30 October 2006

Available online 21 December 2006

Abstract

Limb spectra recorded by the Composite InfraRed Spectrometer (CIRS) on Cassini provide information on abundance vertical profiles of C₂H₂, C₂H₄, C₂H₆, CH₃C₂H, C₃H₈, C₄H₂, C₆H₆ and HCN, along with the temperature profiles in Titan's atmosphere. We analyzed two sets of spectra, one at 15° S (Tb flyby) and the other one at 80° N (T3 flyby). The spectral range 600–1400 cm⁻¹, recorded at a resolution of 0.5 cm⁻¹, was used to determine molecular abundances and temperatures in the stratosphere in the altitude range 100–465 km for Tb and 170–495 km for T3. Both temperature profiles show a well defined stratopause, at around 310 km (0.07 mbar) and 183 K at 13° S, and 380 km (0.01 mbar) with 207 K at 80° N. Near the north pole, stratospheric temperatures are colder and mesospheric temperatures are warmer than near the equator. C₂H₂, C₂H₆, C₃H₈ and HCN display vertical mixing ratio profiles that increase with height at 15° S and 80° N, consistent with their formation in the upper atmosphere, diffusion downwards and condensation in the lower stratosphere, as expected from photochemical models. The CH₃C₂H and C₄H₂ mixing ratios also increase with height at 15° S. But near the north pole, their profiles present an unexpected minimum around 300 km, observed for the first time thanks to the high vertical resolution of the CIRS limb data. C₂H₄ is the only molecule having a vertical abundance profile that decreases with height at 15° S. At 80° N, it also displays a minimum of its mixing ratio around the 0.1-mbar level. For C₆H₆, an upper limit of 1.1 ppb (in the 0.3–10 mbar range) is derived at 15° S, whereas a constant mixing ratio profile of 3⁺³_{-1.5} ppb is inferred near the north pole. At 15° S, the vertical profile of HCN exhibits a steeper gradient than other molecules, which suggests that a sink for this molecule exists in the stratosphere, possibly due to haze formation. All molecules display a more or less pronounced enrichment towards the north pole, probably due, in part, to subsidence of air at the north (winter) pole that brings air enriched in photochemical compounds from the upper atmosphere to lower levels.

© 2006 Elsevier Inc. All rights reserved.

Keywords: Titan; Abundances, atmosphere; Infrared observations

1. Introduction

Titan's atmosphere shows a complex photochemistry initiated by the dissociation of its two most abundant components, nitrogen and methane. This chemistry leads to the formation

of hydrocarbons and nitriles and produces a thick haze responsible for the orange color of the satellite. Many organic compounds were detected for the first time by the Voyager 1 infrared spectrometer IRIS (Hanel et al., 1981) in the infrared region 200–1500 cm⁻¹. Latitudinal temperature variations were found (Flasar et al., 1981) and most molecular abundances presented a strong enrichment at high northern latitudes (Coustenis and Bézard, 1995). Vertical distributions of temperature and profiles

* Corresponding author. Fax: +33 1 45 07 79 59.

E-mail address: sandrine.vinatier@obspm.fr (S. Vinatier).

of hydrocarbons and nitriles (C_2H_2 , C_4H_2 , C_2H_6 , CH_3C_2H , HCN, HC_3N and C_2N_2) could only be inferred near the north pole from a particular set of Voyager 1 data that included limb spectra covering the altitude range 100–300 km, albeit with a low vertical resolution (~ 200 km) (Coustenis et al., 1991). Despite the large error bars due to the low signal-to-noise ratio, most profiles displayed an increase with height, in agreement with photochemical models that predict that compounds are formed in the upper atmosphere, and are transported to lower levels by eddy diffusion and dynamical effects (e.g., a circulation cell). Heterodyne ground-based observations in the millimeter range nicely complement the infrared data and permit the retrieval of disk-averaged vertical profiles of CO, HCN, HC_3N and CH_3CN (Hidayat et al., 1997; Marten et al., 2002; Gurwell, 2004). Two seasons after Voyager, in 1997, the Short Wavelength Spectrometer (SWS) of the Infrared Space Observatory (ISO) recorded spectra of Titan in the range 7–30 μm , which provided disk-averaged abundances and allowed for the first detection of water vapor and tentatively of benzene (Coustenis et al., 1998, 2003).

Currently, the Composite InfraRed Spectrometer (CIRS) on the Cassini spacecraft records spectra between 7 μm and 1 mm at a resolution up to 0.5 cm^{-1} . Cassini will fly over Titan 44 times during the nominal mission, and CIRS will perform about 18 dedicated limb geometry observations of its atmosphere at high spectral resolution. The main advantage of this geometry is that, in the optically thin limit, the emission originates mostly from the region around the tangent height along the line of sight. Vertical profiles can then be retrieved from limb-viewing observations at different altitudes. The angular resolution available with the CIRS limb sequences is much better than with Voyager and allows the retrieval of profiles with a good vertical resolution, typically a scale height. The second advantage is the increase of the path length compared to nadir observations, which improves the detectability of trace species. CIRS also provides high spatial resolution nadir observations that cover all of Titan's disk to study latitudinal and longitudinal variations of temperature (Flasar et al., 2005) and of molecular abundances (Flasar et al., 2005; Teanby et al., 2006; Coustenis et al., 2006).

One-dimensional models (Yung et al., 1984; Toubanc et al., 1995; Lara et al., 1996; Wilson and Atreya, 2004) have been developed to investigate the photochemistry of Titan. Up to now, these models have been mostly constrained by Voyager-derived abundances (relating to the lower stratosphere) and disk-averaged vertical profiles of nitriles derived from ground-based millimetric observations. Being produced in the upper atmosphere and transported downwards to their condensation sink, the hydrocarbons and nitrile mixing ratios are predicted to increase with height in the stratosphere and mesosphere. Their vertical profiles depend on the various chemical sources and sinks but also critically on the vertical transport parametrized as an eddy diffusion coefficient. Recent General Circulation Models that couple photochemistry and transport of chemical compounds (Lebonnois et al., 2001; Hourdin et al., 2004) are able to reproduce the enrichment observed in many species at high northern latitudes. These studies show that both the latitudinal

and vertical gradient of the chemical species also strongly depend on the atmospheric dynamics. Determination of the vertical abundance profiles by CIRS is thus expected to provide valuable information not only on the chemical processes but also on the stratospheric circulation.

In this paper, we focus on the first two long-integration limb observations recorded by CIRS during the Tb flyby on 13 December 2004 and during the T3 flyby on 15 February 2005. Details of these observations are given in Section 2. The retrieval algorithm and the radiative transfer model are presented in Section 3. The temperature retrievals from the Tb and T3 data are described in Section 4. Section 5 presents the technique used to retrieve the abundance profiles and the results obtained for all the hydrocarbons and for HCN. Finally, in Section 6, our results are compared with previous work and photochemical models.

2. Observations

CIRS is a Fourier transform spectrometer that incorporates 3 focal planes, which cover all together the range 7 μm –1 mm. Focal plane 1 (FP1), with a 3.9-mrad circular field of view (2.5 mrad at FWHM), records spectra in the far-infrared between 10 and 600 cm^{-1} (17–1000 μm). Two other focal planes cover the mid-infrared region: the 600–1100 cm^{-1} spectral range (9–17 μm) with Focal Plane 3 (FP3) and the 1100–1400 cm^{-1} range (7–9 μm) with Focal Plane 4 (FP4). The two latter focal planes consist of two parallel linear arrays each composed of ten detectors, with a field of view of 0.273 mrad per detector. This configuration is particularly suitable for limb observations, as the arrays are positioned along a Titan radius, so that each detector has a line of sight probing a particular level (at the tangent height) in Titan's atmosphere. Levels in the lower stratosphere, optically thick in a limb-viewing geometry, can be sounded by nadir observations. More details about CIRS are given in Kunde et al. (1996) and Flasar et al. (2004).

2.1. Tb selection (15° S)

The Tb flyby occurred on 13 December 2004. During this flyby, FP3 and FP4 recorded limb spectra with a spectral resolution of 0.5 cm^{-1} at a latitude of 15° S . The mean vertical resolution of the observations, limited by the pixel angular size, is about 33 km. Although lines of sight range from 205 to 980 km, we have decided for our inversions, to keep only the spectra below 500 km, because at higher levels non-LTE effects can appear (Coustenis et al., 1989) and the signal becomes too weak. For both FP3 and FP4, the tangent altitudes are distributed non-uniformly with height: they are grouped, as expected, around the targeted altitudes of sight (each group of averaged spectra is recorded by the same detector) with a separation of ~ 35 km between each set of spectra. We therefore averaged the individual spectra (~ 27) recorded by each detector. We used eight selections of FP3 spectra at mean nominal altitudes of 212, 248, 284, 320, 355, 391, 427 and 463 km. Similarly for FP4, the altitudes of the averaged spectra are 205, 240, 276, 312, 348, 384, 420 and 456 km.

Table 1
Characteristics of the averaged spectra used for the inversions of Tb and T3 data

| | Lat. | Long. | Spectral resolution | Emission angle | Altitude (km) | Number of averaged spectra |
|---------------------------------------|-------|--------|-----------------------|----------------|--|--------------------------------|
| Tb selection (averaged limb spectra) | | | | | | |
| FP3 | 15° S | 260° E | 0.5 cm ⁻¹ | – | 212, 248, 284, 320, 355, 391, 427, 463 | 26, 27, 26, 27, 26, 27, 26, 27 |
| FP4 | 13° S | 260° E | 0.5 cm ⁻¹ | – | 205, 240, 276, 312, 348, 384, 420, 456 | 26, 27, 26, 27, 26, 27, 26, 27 |
| Tb selection (averaged nadir spectra) | | | | | | |
| FP1 | 13° S | 139°E | 15.5 cm ⁻¹ | 22° | – | 43 |
| FP3 | 12° S | 13°E | 0.5 cm ⁻¹ | 37° | – | 80 |
| FP4 | 9° S | 29°E | 0.5 cm ⁻¹ | 36° | – | 80 |
| T3 selection (averaged limb spectra) | | | | | | |
| FP3 | 79° N | 81°E | 0.5 cm ⁻¹ | – | 172, 205, 254, 310, 365, 421, 462, 501 | 30, 30, 44, 40, 45, 37, 49, 69 |
| FP4 | 82° N | 88°E | 0.5 cm ⁻¹ | – | 172, 205, 255, 310, 365, 420, 462, 501 | 28, 29, 42, 40, 43, 36, 49, 68 |

FP3 and FP4 selections of nadir spectra at latitudes between 8° and 20° S, recorded on 13 December 2004 were also used, with emission angles between 30 and 40°. The averaged FP3 nadir spectrum, composed of 80 spectra, has a mean latitude of 12° S and a mean emission angle of 37°. The averaged nadir FP4 spectrum is also composed of 80 spectra and has a mean latitude of 9° S with a mean emission angle of 36°.

We also used FP1 nadir spectra in order to retrieve information on the temperature around the tropopause (~100 mbar, ~48 km). The averaged FP1 nadir spectrum is composed of 43 spectra at a spectral resolution of 15.5 cm⁻¹, a mean latitude of 13° S and a mean emission angle of 22°. Table 1 summarizes the characteristics of the selected Tb observations.

2.2. T3 selection (80° N)

The T3 flyby, on 15 February 2005, was the second flyby in which limb spectra at the highest spectral resolution (0.5 cm⁻¹) were recorded. In contrast to the Tb observations, the latitudes probed here are situated near the north pole, at 80° N.

About 44 spectra were acquired per detector, which yields an improved signal-to-noise ratio compared to the Tb ones. The vertical resolution of the observations was approximately 50 km. Despite lines of sight that span the range 90 to 1187 km, in this work we will only focus on spectra corresponding to altitudes between 130 and 500 km. Below the 130-km level, emission bands are optically thick and give redundant information; at levels higher than 500 km, the signal is still detectable but some non-LTE effects may appear especially in the ν₄ band of methane.

T3 limb spectra are distributed roughly homogeneously in height, so that we averaged spectra in adjacent 40-km bins, which yields between 30 and 69 spectra per bin (Table 1). Spectra that were particularly noisy or presented an abnormal variation of their continuum were removed from our selections. The nominal altitudes of the averages of FP3 and FP4 spectra are almost the same and equal to 172, 205, 254, 310, 365, 421, 462 and 501 km.

We did not use nadir observations in our analysis of T3 data because no nadir spectra were acquired at latitudes higher than 75° N. This is quite close to 80° N, but at these very high latitudes, the meridional variation of temperature (and probably

abundance) seems to be significant in a 5° range (Flasar et al., 2005). Moreover, with the orbits of the spacecraft that still are very close to Titan's orbiting plane, emission angles near the north pole are very high, so that such observations do not effectively probe levels below those probed by the limb viewing geometry. The characteristics of the T3 averaged spectra are summarized in Table 1.

3. Retrieval algorithm and radiative transfer model

As emission intensities of molecular bands depend on both temperature and abundance, the temperature profile must be known as a first step before retrieving any information on abundances. Temperature is deduced from the emission of the ν₄ methane (CH₄) band centered at 1305 cm⁻¹ (7.7 μm) in the FP4 range. A stratospheric abundance of 1.6% was used in our model, as inferred from CIRS data (Flasar et al., 2005). This abundance was assumed to be constant over the disk in the whole stratosphere.

We retrieved the temperature profile from limb and nadir spectra by using a constrained linear inversion method described in Conrath et al. (1998). The algorithm minimizes the quadratic difference (χ²) between measured and calculated spectra over a specified spectral range with the additional constraint that the solution profile lies close to the reference one. Starting from an initial guess profile T₀, an approximate solution T₁ is derived from the equation:

$$T_n = T_{n-1} + \alpha SK^T C^{-1} \Delta I, \quad (1)$$

with $n = 1$, where ΔI is the difference vector between observed and calculated intensities, K is the kernel matrix with K_{ij} equal to the derivative of the i th intensity with respect to the temperature at grid level j , S is a normalized two-point Gaussian correlation matrix (with a correlation length L in scale heights) that provides a vertical filtering of the solution. Matrix C is equal to:

$$C = \alpha K S K^T + E, \quad (2)$$

where E is a diagonal matrix with E_{ii} equal to the square of the noise equivalent spectral radiance (NESR) at the i th spectral point and α is a scalar parameter that controls the emphasis placed on the proximity of the solution T₁ and the reference

profile T_0 (lower α values correspond to stronger filtering of the solution). We set this parameter so that the traces of the two matrices summed in Eq. (2) are similar.

The non-linearity of the problem requires an iterative process in which T_{n+1} is obtained from Eq. (1) after updating the reference profile to T_n and recalculating the kernel matrix for profile T_n . We used 3 iterations, a number we found sufficient to ensure convergence, as the χ^2 no longer significantly decreases afterwards.

The spectral interval used in the ν_4 methane band is 1215–1309 cm^{-1} , which covers the Q - and P -branches. In addition, to constrain temperatures around the tropopause, the spectral range 40–110 cm^{-1} , recorded by FP1, was used in the analysis of the Tb flyby (see below).

Mixing ratio profiles were derived from limb and nadir spectra by using the same inversion method as described above but by replacing the temperature by the logarithm of the mole fraction of the absorber. Presently, the algorithm can retrieve vertical profiles of up to 3 different absorbers (a , b and c) from a given spectral region. As for temperature, the $\log(q)$ of absorber a (similar formulas apply for absorbers b and c) is iteratively obtained from:

$$\log(q_{n+1}) = \log(q_n) + \alpha S_a K_a^T C^{-1} \Delta I \quad (3)$$

with

$$C = \alpha K_a S_a K_a^T + \beta K_b S_b K_b^T + \gamma K_c S_c K_c^T + E. \quad (4)$$

The inversion kernels then represent the derivative of the i th intensity with respect to the logarithm of the mole fraction at grid level j .

Synthetic spectra and inversion kernels are computed from a line-by-line radiative transfer program. The atmospheric grid consists of 70 levels equally spaced in $\log(p)$ between 1457 and 0.9×10^{-3} mbar. Collision-induced opacity from N_2 – N_2 , N_2 – CH_4 , N_2 – H_2 and CH_4 – CH_4 was included in the model. Absorption coefficients were calculated from subroutines provided by A. Borysow (<http://www.astro.ku.dk/~aborysow/programs/>) and based on the works of Borysow and Frommhold (1986b, 1986a, 1987) and Borysow and Tang (1993). We considered molecular opacities from CH_4 , CH_3D , C_2H_6 , C_2H_2 , C_2H_4 , C_3H_8 , $\text{CH}_3\text{C}_2\text{H}$, C_4H_2 , C_6H_6 , HCN , H_3CN and CO_2 lines. Spectroscopic parameters were extracted from the Geisa 2003 database (Jacquinet-Husson et al., 2005) with the exception of HCN , C_4H_2 , $\text{CH}_3\text{C}_2\text{H}$ and C_6H_6 .

For HCN , we used the more complete linelist in HITRAN 2004 (Rothman et al., 2005), which includes the H^{13}CN and HC^{15}N isotopes and updated line intensities (typically 15% higher than in Geisa). We multiplied the Lorenz broadening coefficients by 1.106 that is the ratio of the N_2 - to air-broadening halfwidths in the ν_1 band (Rinsland et al., 2003) and used the temperature exponent in this paper. The $\text{CH}_3\text{C}_2\text{H}$ line parameters were provided by G. Graner (personal communication), based on constants of Peckala et al. (1991) for the frequency calculations and Blanquet et al. (1992) for intensities of individual lines. We generated a linelist for the ν_8 fundamental and $\nu_8 + \nu_9 - \nu_9$ hot band of C_4H_2 using molecular constants of Arié and Johns (1992) and band intensities of Kooops et al. (1984).

For these two molecules, we assumed a Lorentz halfwidth of $0.1 \text{ cm}^{-1} \text{ atm}^{-1}$ at 296 K that varies as $T^{-0.75}$. For C_6H_6 , we used a linelist provided by M. Dang-Nhu (private communication) and generated from the molecular constants and band strength compiled in Dang-Nhu and Plíva (1989). The Lorentz halfwidths were taken as $0.13 - 0.0005 \times J$, based on N_2 -broadened measurements in the ν_{14} band for $J = 17$ and the J -dependence of self-broadened values (Waschull et al., 1998). We included haze opacity assuming solely absorption and no scattering, and with a gray spectral variation in each spectral range considered for the retrievals.

4. Temperature retrieval

In the ν_4 band of methane, a continuum emission from the stratospheric haze is visible between the CH_4 multiplets, especially in limb spectra. Based on the DISR/Huygens results (Tomasko et al., 2005), the haze optical depth is assumed to decrease slowly with height, and vary as $p^{0.1}$, up to the 1-mbar level. Above this level, the haze opacity decreases with altitude with the pressure scale height. The integrated haze opacity (down to the surface) was adjusted in order to fit the emission between the CH_4 multiplets in the low frequency wing of the P -branch. We derived $\tau \sim 0.0075$ at the 1-mbar level for both selections. A correlation length (as defined in Section 3) of 1 scale height was applied for the retrieval of the temperature profiles at both latitudes.

4.1. Tb temperature profile

The Tb profile was derived from both nadir and limb spectra. First, we retrieved temperatures near the tropopause using an averaged FP1 nadir spectrum between 40 and 110 cm^{-1} (at a resolution of 15.5 cm^{-1}), and assuming that the continuum opacity originates from collision-induced absorption only (no haze opacity included in this spectral range). Levels probed here cover pressures between 74 mbar (52 km) and 170 mbar (39 km). Then, we used this inverted vertical temperature profile as a first guess to retrieve the temperature profile in the stratosphere with nadir and limb FP4 spectra. The whole spectral range 1215–1309 cm^{-1} was used at a sampling of 0.5 cm^{-1} .

Fig. 1 shows some examples of fits of the ν_4 methane band for the nadir and 3 limb spectra at 235, 270 and 306 km (these altitudes differ from the nominal ones given in Table 1 because they take into account an altitude correction, see below).

An important point to take into account for inversions of limb spectra is the pointing error of CIRS, which can be up to 2 mrad (Flasar et al., 2004). This pointing error implies a shift in altitude of the limb spectra compared to the nominal altitude given in the database and it must be first determined before analyzing the data. Note that, even if the pointing error is null, a “correction” in height allows us to correct for errors in the pressure grid that result from assumptions in the temperature profile at levels deeper than the height range of our retrieval. As a consequence, different temperature profiles that model the same observation and that fit correctly the observed

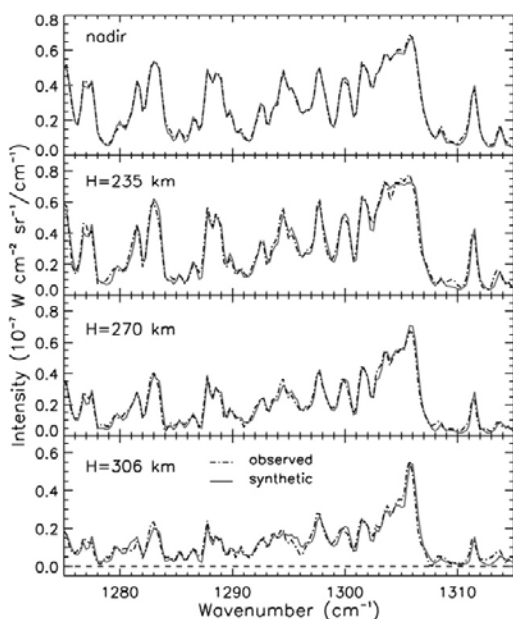


Fig. 1. Fits of the ν_4 CH₄ band observed at 13° S (Tb flyby) between 1275 and 1315 cm^{-1} for the averaged nadir spectrum (upper panel), and 3 limb spectra at 235, 270 and 306 km (altitudes taken account the altitude correction). Observed spectra are in dot-dashed line and calculated spectra in solid line. The retrieved temperature profile corresponds to the best fit (in a least square sense) of the whole set of limb and nadir spectra.

spectra can yield or not a correction in height compared to the tangent height given in the data.

The altitudes given in the database did not yield satisfactory fits of the limb spectra. The set of limb spectra actually allows us to estimate this correction in height, as the relative intensity of the Q - and P - (or R -) branches and the shape of the Q -branch itself are very sensitive to the altitude. We ran the inversion procedure with different shifts in height (the same for each average spectrum, the pointing error being the same for all detectors as their relative positions are fixed) and retained the value that minimizes the residuals of the fits. We obtained an altitude shift of about +30 km with an uncertainty of ± 7 km (this correction is taken into account in Fig. 1). This shift was also applied to the FP3 spectra used to retrieve abundance profiles, as they were recorded simultaneously with the FP4 spectra. Fig. 2 shows the comparison between the ν_4 CH₄ band spectra calculated with shifts of 30 km (solid line), 15 km (dashed line), and 45 km (dotted line) using the temperature profile shown in Fig. 4 to illustrate the sensitivity to this shift in height.

Fig. 3 shows the inversion kernels for the Tb spectral set (left), calculated at 1305 cm^{-1} (Q -branch) and at 1253 cm^{-1} (a multiplet in the P -branch). The peak in the kernel function indicates the level of maximum temperature information. At 1305 cm^{-1} , the nadir FP4 average probes pressure levels between 0.8 and 0.024 mbar (195 and 251 km) at half maximum of the kernels. At 1253 cm^{-1} , where the line opacity is

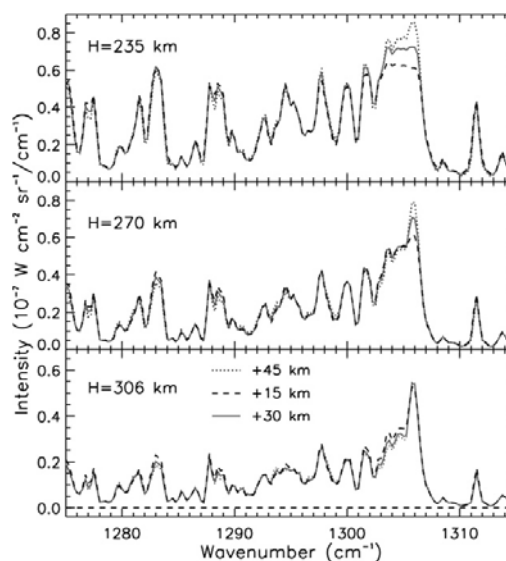


Fig. 2. Spectra of the ν_4 band of CH₄ calculated at three tangent altitudes (235, 270 and 306 km) with different altitude shifts. In each case, the temperature profile corresponds to the best fit (in a least square sense) of the whole set of limb and nadir spectra recorded at 13° S. Spectra calculated with a shift of 30 km (solid lines) provide the best fit of the observed spectra (Fig. 1). Shifts of 45 km (dotted lines) and 15 km (dashed lines) disagree with the observations.

smaller, it probes at deeper levels, in the 3.4–0.2 mbar region (134–260 km) with a maximum at 0.7 mbar (202 km). Limb spectra probe pressures between 0.3 and 0.002 mbar (241 and 490 km), taking into account the shift in altitude.

4.2. T3 temperature profile

The T3 profile was retrieved only from limb spectra. We used the same procedure as for Tb to determine the best altitude shift to fit the data and inferred a value of about -5 km compared to nominal altitudes in the CIRS database. The error on this shift is approximately ± 7 km. Limb spectra probe pressure levels between 0.9 mbar (170 km) and 0.002 mbar (495 km). Below 170 km, emission features are optically thick even in the P - and R -branches. As a result, for lines of sight at deeper levels, the region of maximum information (and maximum contribution to the emission) is not located around the tangent point, but closer to the spacecraft along the ray path and thus at a higher altitude. Since Cassini orbits are presently nearly in Titan's orbital plane, such limb observations acquired near 80° N actually probe lower latitudes (down to 65° N, see below).

For targeted latitudes close to the equator (as is the case for Tb), the probed latitude does not vary significantly even for optically thick lines of sight, whereas the longitude does. Temperature and abundance present small longitudinal variations (Flasar et al., 2005; Teanby et al., 2006) but large latitudinal variations, especially towards high latitudes. Therefore, the abundances or temperatures deduced from optically thick emis-

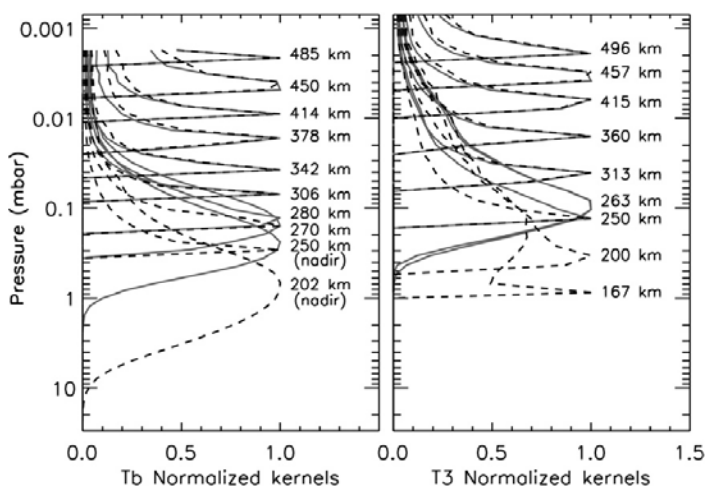


Fig. 3. Kernels calculated at 1305 cm^{-1} (solid line) and 1253 cm^{-1} (dashed line) at 13° S (Tb, left) and 80° N (T3, right). The altitudes corresponding to the peaks of the kernels at 1305 cm^{-1} are indicated.

sion bands at high latitudes must be interpreted carefully as they do not originate from the nominal latitude of the pointing (but from lower latitudes).

Moreover, it is worth noting that even for relatively transparent spectral intervals, it is possible in principle for the maximum emission to originate from locations along the ray path other than the tangent point. The contribution from a given point is essentially proportional to the Planck radiance and the gradient of the transmittance along the ray path. Since the Planck radiance in this spectral region is a very strong function of the temperature, strong temperature gradients along the ray path can potentially influence the location of maximum emission. Then, for observations near the north pole that have ray paths that cross several latitudes, the optically thin spectral intervals may actually probe latitudes somewhat different than expected by the geometry of observation. It is not possible to evaluate this effect as we do not know the temperature gradients along the ray path.

Fig. 3 shows the kernels of the T3 inverted temperature profile at 1305 cm^{-1} (Q -branch) and 1253 cm^{-1} (P -branch). Note that the two deepest kernels at 1305 cm^{-1} are optically thick, whereas the kernels calculated at 1253 cm^{-1} for the same selections present optically thin contributions. We therefore decided to keep these two spectra in the retrieval process, while being aware that part of the information given by the two deepest points of the T3 vertical profile (see Fig. 4) originates from latitudes less than 80° N (down to 65° N as calculated from the geometry of the ray path).

4.3. Results

The Tb and T3 retrieved temperature profiles are shown in Fig. 4 (Tb profile: solid line; T3 profile: dot-dashed line). Areas without information are indicated as dotted lines. Error bars are given at pressures that correspond to the kernel maxima at 1305 cm^{-1} . These error bars are the quadratic sum of

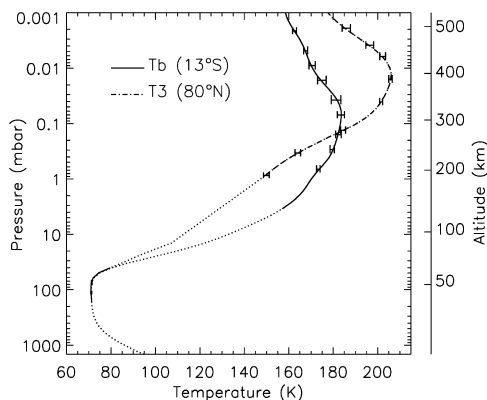


Fig. 4. Retrieved thermal profiles at 13° S (Tb, solid line) and 80° N (T3, dashed line). Dotted parts of the profiles represent areas without information, and temperature profiles are then set equal to the input guess profile. The altitude scale refers to the Tb profile.

an error due to the noise and an error due to the shift uncertainty ($\pm 7\text{ km}$). Error bars due to noise are calculated from the correlation matrices in the inversion algorithm, based on the NESR (noise equivalent spectral radiance) of the spectra estimated from deep space spectra. However, the rms of the residuals of the fits are always significantly larger than the NESRs, which means that either the actual NESR in the Titan spectra is higher than expected or that model uncertainties are larger than the noise level. In any case, we conservatively considered the residuals as a better indicator of the uncertainty level and multiplied the temperature uncertainty generated by the retrieval algorithm by the ratio rms/NESR . We also evaluated errors on the retrieved temperature profiles caused by the uncertainty of 7 km on the shift value. Two inversions with a shift differing by $\pm 7\text{ km}$ from the nominal one were done, and the retrieved tem-

perature profiles then yielded the uncertainties due to the shift error.

We did not account for the uncertainty on the methane abundance ($1.6 \pm 0.5 \times 10^{-2}$; Flasar et al., 2005) used in the temperature retrieval. Instead we ran a test to evaluate its effect on the derived temperature and abundance profiles. We used the stratospheric value measured by the GCMS aboard Huygens ($1.41 \pm 0.07 \times 10^{-2}$; Niemann et al., 2005) to retrieve a temperature profile at 13° S. After having adjusted the altitude correction (lower by about 5 km compared to that corresponding to a mole fraction of 1.6%), we obtained a profile that is warmer than the nominal one at all altitudes by less than 1 K. The retrieved abundance profiles are then systematically lower, with a difference of at most 15%. The effect is thus relatively small, generally within the error bars from the other sources, and systematic rather than random.

Each of the two temperature profiles presents a well defined stratopause. For Tb, near the equator, it is situated at 0.07 mbar (312 km) with a temperature of 183 K. Near the north pole (T3), it is situated higher at a pressure of 0.01 mbar (383 km) with a larger temperature of ~ 207 K. The stratosphere near the north pole is colder and the mesosphere is warmer than at 13° S.

5. Abundance profiles retrieval

These retrieved temperature profiles were then incorporated in the atmospheric model in order to derive molecular abundances. We retrieved abundance profiles from specific intervals in which the emission is dominated by one or two absorbers. For each spectral range studied, in order to obtain the best fit of the continuum, mainly due to haze emission, the haze absorption profile was systematically retrieved simultaneously with the gas profiles.

One of the input parameters in the algorithm is the correlation length (L) of the solution that provides a smoothing of the inverted profile (see Section 3). Large values of this parameter yield smoother, non-oscillating profiles, but the resid-

uals between calculated and observed spectra then tend to be larger. We first ran the retrieval algorithm with a smoothing of about one scale height (comparable with the spatial resolution of the observations), but the inverted abundance profiles always presented strong oscillations, the reality of which can be questioned. Increasing of the width of the smoothing function up to 3 scale heights considerably reduces these oscillations and does not degrade significantly the fit, as illustrated in Fig. 5. The intensity profiles in the Q -branches of C_2H_2 and HCN calculated for $L = 1$ and $L = 3$ are indeed very close. The $L = 1$ profile reduces the discrepancy compared to $L = 3$ with the observations by at most half of the $1\text{-}\sigma$ error bar (defined as the rms value of the residuals over the whole spectral range used). The $L = 3$ profile agrees with all data points within the $2\text{-}\sigma$ error level, which we regard as satisfactory given that systematic modeling errors may be present (e.g., due to inaccuracies in the spectroscopic data). Therefore we applied a smoothing of 3 scale heights to most of the molecules except for methylacetylene and diacetylene for the T3 inversion, as discussed in Section 5.3.

We estimated error bars for each abundance profile. The propagation of the noise level in the inverted profile was calculated from the covariance matrix of the solution retrieved using the NESR as the measurement error. As explained in Section 4.3, the error due to noise was finally scaled by the factor rms/NESR . Another error source is the temperature uncertainty that also affects the retrieved abundance profiles. For each molecule, we performed inversions using the minimum and maximum temperature profiles (defined by the temperature errors, see Fig. 4) in order to quantify this uncertainty.

The last error taken into account arises from the uncertainty in our determination of the altitude correction (see Section 4.1) that amounts to about 7 km. Abundance profiles were successively retrieved shifting the tangent point altitudes by +7 km and -7 km and using the temperature profiles inverted with the corresponding viewing altitudes. This uncertainty generates the

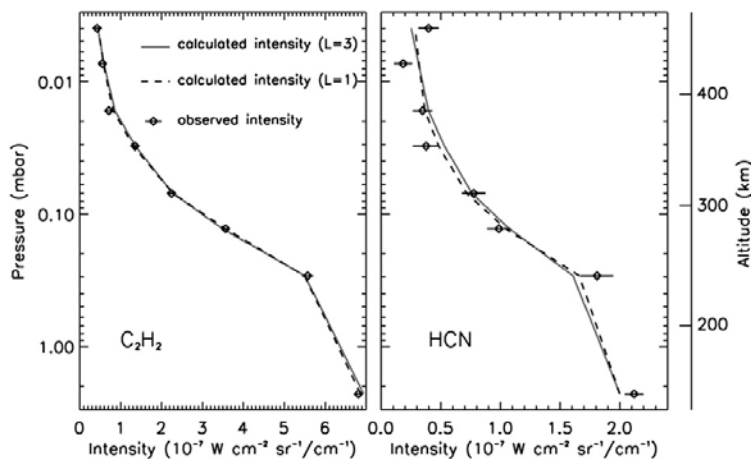


Fig. 5. Plot of the spectral intensity profile recorded at 15° S (diamonds with error bars) in the C_2H_2 Q -branch at 729.25 cm^{-1} (left) and HCN Q -branch at 712.25 cm^{-1} (right). It is compared with intensity profiles calculated with a smoothing of one scale height ($L = 1$, dashed line) and $L = 3$ scale heights (solid line).

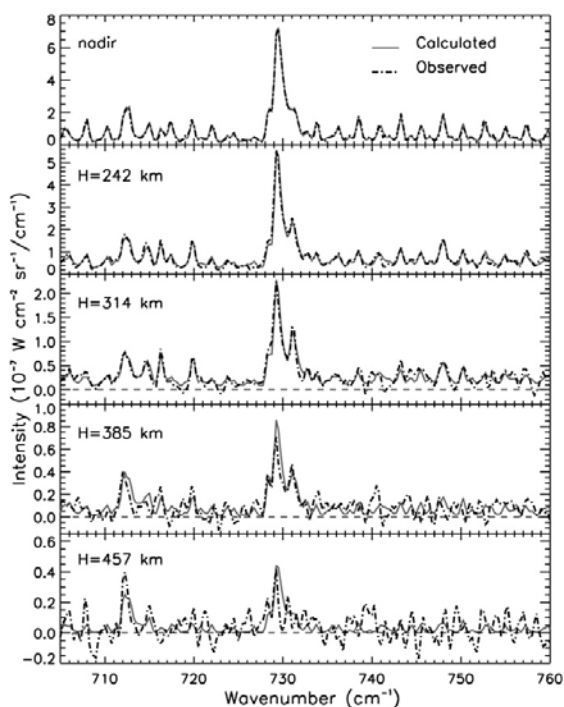


Fig. 6. Comparison between observed spectra (dot-dashed line) and calculated spectra at 15° S, for the nadir and 4 limb spectra at 242, 314, 385 and 457 km (altitudes corrected for the pointing error). The HCN Q -branch is visible at 713 cm^{-1} , the C_2H_2 Q -branch at 729 cm^{-1} and the C_3H_8 Q -branch at 748 cm^{-1} , overlapping with a C_2H_2 line.

biggest error on the abundances compared to those due to noise or temperature effects. As these three error bars are independent at a given level, they were added quadratically. Final error bars are presented on all abundance profiles at levels where the inversion kernels reach their maxima.

5.1. Acetylene and hydrogen cyanide mixing ratio profiles

Acetylene (C_2H_2) shows one of the strongest emission features of the mid-infrared spectrum at 729 cm^{-1} , where its ν_5 Q -branch is located. Inversions of its vertical distribution were done using the interval 705–740 cm^{-1} that includes the Q -branch and most of the P -branch of C_2H_2 . This range also includes the HCN ν_2 Q -branch at 713 cm^{-1} , which was retrieved simultaneously with the C_2H_2 band (Fig. 6). We did calculations for isotopic abundances corresponding to $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ equal to the terrestrial value (Hidayat et al., 1997) and $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ equal to 4.5 times the terrestrial value (Marten et al., 2002).

Tb inversions of the HCN and C_2H_2 profiles were performed combining a nadir averaged spectrum and 7 averaged limb spectra. The inversion kernels give the dependence of the emitted intensity upon the logarithm of the mixing ratio as a function of altitude, and thus represent the information content of the spectra. These functions are presented for the Q -branch of C_2H_2

in Fig. 7 for Tb (left) and T3 (right). At 729.25 cm^{-1} (C_2H_2 Q -branch), the nadir spectrum probes levels (given by the full width of the kernel at half maximum) from 5 mbar (120 km) to 0.36 mbar (230 km) with a maximum at 2.3 mbar (151 km). Information at higher levels is provided by the limb spectra between 0.29 mbar (241 km) and 0.004 mbar (459 km), where the limb kernel maxima are located. At higher altitudes, the signal-to-noise ratio is too weak to infer any information on the abundance. The nadir emission of the HCN Q -branch at 713 cm^{-1} probes levels between 11 mbar (92 km) and 1.2 mbar (177 km) with a maximum at 6.3 mbar (113 km). HCN limb kernels have their maxima at the same levels as those of C_2H_2 (Fig. 7).

We deduced the T3 inverted vertical profiles of C_2H_2 and HCN from 8 limb spectra that probe between 168 and 500 km (Fig. 7, right panels). No information at lower altitudes is available, because spectra with lines-of-sight deeper than 168 km yield optically thick emission bands of C_2H_2 and HCN. Their emission then originates from higher altitudes than the tangent points. As can be seen in Fig. 7, the T3 kernels are all optically thin except for the deepest level (168 km) that presents two components. The optically thick one probes around 0.3 mbar (215 km) and is representative of the emission at a latitude of $\sim 69^\circ$ N (because of the observation geometry, see Section 4.2). An optically thin contribution, due to the wings of individual lines in the Q -branch, probes the tangent altitude (168 km; 0.95 mbar). This optically thin emission then mostly comes from $\sim 80^\circ$ N. This deepest spectrum, that partly probed $\sim 80^\circ$ N, was then included in the dataset used for inversion.

Fig. 6 shows the fit of the C_2H_2 and HCN features for several altitudes at 15° S. The corresponding retrieved mixing ratio profiles are plotted in Fig. 15. It is noteworthy that HCN presents a steeper gradient than C_2H_2 at these equatorial latitudes. Near the north pole, both mixing ratios are enhanced and their vertical profiles show similar gradients.

5.2. Ethane mixing ratio profiles

The ν_9 ethane (C_2H_6) emission band is centered at 822 cm^{-1} and extends from 790 to 860 cm^{-1} approximately. Inversions were done using the 803–840 cm^{-1} interval.

We retrieved the Tb mixing ratio profile from one nadir averaged spectrum and 6 averaged limb spectra. The nadir spectrum probes levels between 12 mbar (92 km) and 0.24 mbar (251 km) with a maximum of its kernel at 3.4 mbar (135 km). Limb spectra probe levels from 0.29 mbar (241 km) up to 0.007 mbar (427 km).

For T3, the C_2H_6 abundance profile was retrieved from 8 limb spectra. The kernels for the two deepest spectra, with tangent point altitudes of 166 and 200 km, show an optically thin part probing levels very close to the tangent point. But they also show an optically thick contribution, as their kernels clearly present a second shallower maximum around 0.1 mbar, higher than their tangent point altitude (Fig. 7). As explained above, because of the geometry of the observation, the optically thick emission comes from a closer distance along the line-of-sight, and therefore more equatorward latitudes: $\sim 65^\circ$ N for

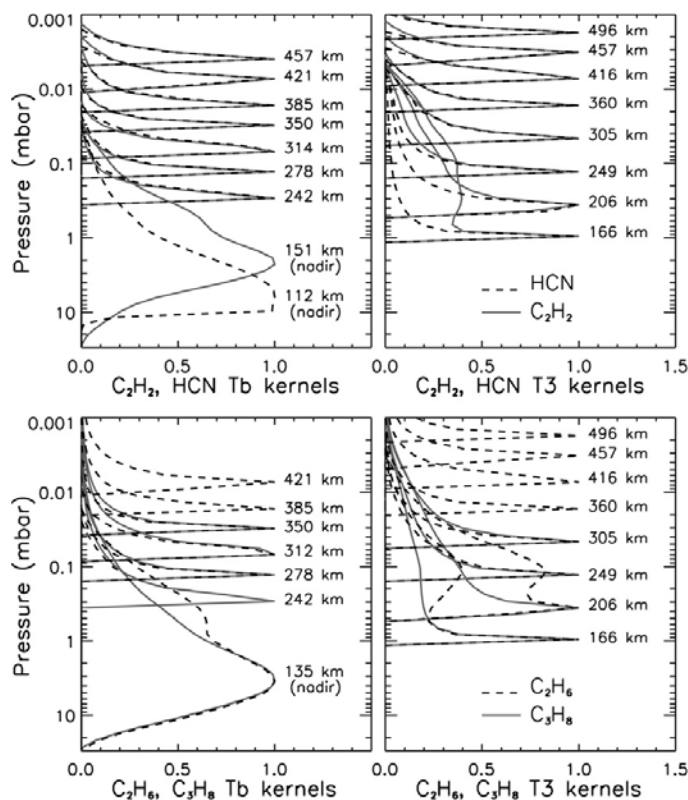


Fig. 7. Upper panels: normalized inversion kernels of C_2H_2 at 729.25 cm^{-1} (solid gray line) and HCN at 712.25 cm^{-1} (dashed line) at 15° S (Tb, left) and 80° N (T3, right). Lower panels: normalized inversion kernels of C_2H_6 at 819.75 cm^{-1} (solid gray line) and C_3H_8 at 748 cm^{-1} (dashed line) at 15° S (left) and 80° N (right).

the 166 km spectrum and $\sim 68^\circ\text{ N}$ for that at 200 km. Despite this fact, we used these two spectra to invert the mixing ratio profile because they contain important information at the latitude of 80° N . Fig. 8 presents spectral fits in the region of the C_2H_6 band. The retrieved vertical abundance profile is plotted in Fig. 15 for Tb (left) and for T3 (right). Note that the C_2H_6 mixing ratios do not show a significant enhancement between 15° S and 80° N .

5.3. Methylacetylene and diacetylene mixing ratio profiles

The diacetylene (C_4H_2) ν_8 Q -branch is located at 628 cm^{-1} and the methylacetylene (CH_3C_2H) ν_9 emission band is located around 633 cm^{-1} . As these emission bands overlap, the mixing ratio profiles of the two molecules were retrieved simultaneously.

For Tb, one nadir and 7 limb averaged spectra were used. At 628 cm^{-1} , the nadir spectrum probes the 9.6–0.2 mbar pressure range (98–260 km range) with a maximum at 2.3 mbar (151 km). At 633 cm^{-1} , slightly deeper levels are probed for an emission maximum at 4.2 mbar (127 km) with information extending from 14 to 0.6 mbar (86 to 210 km). For both mole-

cules, limb spectra probe the range 0.29–0.004 mbar (241 and 495 km), as shown in Fig. 9.

For the T3 inversion, we used 8 averaged limb spectra probing between 1 and 0.002 mbar (166 km up to 495 km). The inversion kernels for all spectra peak at the tangent altitudes, because the bands are mostly optically thin. Therefore, the mixing ratio retrieved at all altitudes refer to a latitude range centered at 80° N (typically 70 – 90° N). The signal-to-noise ratio of C_4H_2 is still acceptable above 495 km, but we have chosen not to consider higher levels because of possible departure from LTE that could induce some error on the retrieved abundance profile. The signal-to-noise ratio of CH_3C_2H becomes poor around 450 km. Fits of observed spectra are presented in Fig. 10 and the corresponding retrieved mixing ratio profiles are shown in Fig. 15. The T3 C_4H_2 and CH_3C_2H profiles present an unexpected behavior as their mixing ratios decrease with height up to ~ 0.1 mbar and then increase above. This minimum is necessary to reproduce the observed intensity as a function of altitude. Fig. 11 gives the intensity profile at 628 cm^{-1} as a function of pressure level. It shows that a constant profile (dotted line) without this minimum does not reproduce the C_4H_2 band intensities. Profiles retrieved with $L = 3$ or $L = 2$ are more effective at fitting the intensity profile, but the discrepancy with

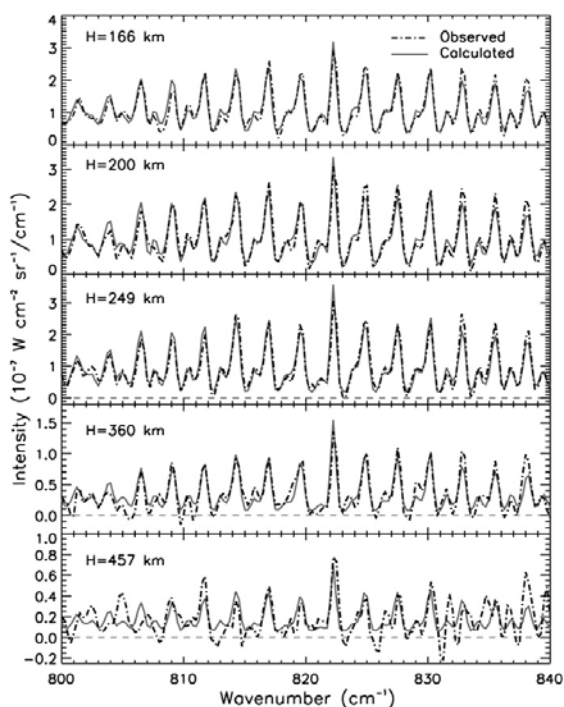


Fig. 8. Comparison of the observed C_2H_6 emission band at $80^\circ N$ (dot-dashed line) with the spectra (solid gray line) calculated at 166, 200, 249, 360 and 457 km (taking into account the altitude correction).

the observed spectra at 314 and 360 km still largely exceeds the noise level. A profile retrieved with a correlation length of 1.2 scale heights (comparable to the vertical resolution of the observations, ~ 50 km) allows us to reproduce the whole intensity profile within the noise level. It is thus clear that this marked abundance minimum at 0.1 mbar found for both C_4H_2 and CH_3C_2H is real (see discussion in Section 6).

5.4. Propane mixing ratio profiles

In the CIRS spectra, propane (C_3H_8) appears through its ν_{21} Q -branch located at 748 cm^{-1} superposed on top of a C_2H_2 line. The spectral range $737\text{--}763\text{ cm}^{-1}$ was used to retrieve the C_3H_8 mixing ratio profile. It is situated in the R -branch of C_2H_2 , so that the retrieved profiles of acetylene (shown in Fig. 15) were used in the atmospheric model to invert the propane mixing ratio profiles.

For Tb, the nadir spectrum gives relevant information on the abundance of C_3H_8 from 14 mbar to 0.6 mbar (86–203 km) with a maximum of its kernel that occurs at 2.8 mbar (143 km). The C_3H_8 Q -branch is visible on 4 limb spectra that probe between 0.29 (241 km) and 0.07 mbar (312 km). No information can be obtained at higher levels as the signal-to-noise ratio is too low.

For T3, we used 4 limb spectra to retrieve the abundance profile. Emission at 748 cm^{-1} is essentially optically thin, so

that the contribution to the emission peaks at the altitude of the observations and the C_3H_8 abundance pertains to a latitude region centered at $80^\circ N$ for all altitudes.

Fits of the C_3H_8 band are shown in Fig. 6 and the corresponding vertical profiles are displayed in Fig. 15. The propane profile does not appear to vary significantly between the two latitudes.

5.5. Ethylene mixing ratio profiles

Ethylene (C_2H_4) has its ν_7 Q -branch at 948 cm^{-1} . Inversions of C_2H_4 abundances were done using the $917\text{--}953\text{ cm}^{-1}$ spectral range. Unfortunately, the signal-to-noise ratio in this spectral region is quite poor for both Tb and T3 spectra.

The set of spectra used for Tb inversion includes the nadir spectrum that probes the 1.6–12 mbar range (162–92 km) with a maximum of contribution to the emission at 5.2 mbar (120 km). We used one limb spectrum to deduce information on C_2H_4 abundances around 0.29 mbar (242 km); higher limb spectra display a too low signal-to-noise ratio. Fits of the C_2H_4 emission band are displayed in Fig. 12. As shown in Fig. 15, the retrieved vertical profile decreases with altitude between 10 mbar and 0.1 mbar, a feature unique among all molecules investigated at $15^\circ S$. Fig. 12 also shows models that have a constant vertical mixing ratio profile of C_2H_4 equal to 2.6×10^{-7} (solid gray line). The fits of the nadir spectrum with the constant-with-height or the decreasing-with-height C_2H_4 profile have the same reduced χ^2 (χ^2/n with $n = 71$). In contrast, the reduced χ^2 of the fit of the limb spectrum at 242 km with the constant vertical profile is equal to 1.25 times that corresponding to the C_2H_4 profile plotted in Fig. 15, a difference that is quite significant statistically. The spectrum calculated at nadir is similar to that corresponding to a decreasing-with-height profile, whereas, at 242 km, it produces a C_2H_4 emission feature well above the noise level. In other words, if the abundance was constant with height, C_2H_4 would be detectable on the limb spectrum at 242 km, which is clearly not the case. Therefore, the decrease of ethylene with altitude seems real.

No values are given below the 15-mbar level because nadir observations do not probe deeper, and C_2H_4 does not necessarily condense in Titan's atmosphere.

The T3 inversion was done with 6 limb spectra that have tangent points from 0.95 to 0.007 mbar (166 and 416 km). As in the case of C_2H_6 (see above), the 2 deepest limb spectra are associated with inversion kernels that show secondary maxima. The lowest one is located at the tangent point altitude and the second one is situated around the 0.1-mbar level. Again, because of the geometry of high-latitude observations, this optically thick part of the emission originates from lower latitudes. For the limb spectrum at 166 km, information from this optically thick part pertains to latitudes around $65^\circ N$, and for the limb spectrum at 200 km, to latitudes around $\sim 68^\circ N$. We have chosen to keep these two spectra for the inversion because the optically thin part of the emission is not negligible. Fits of C_2H_4 are plotted in Fig. 13 for 166, 249, 305 and 416 km. The retrieved C_2H_4 profile decreases with altitude between 1 and 0.1 mbar

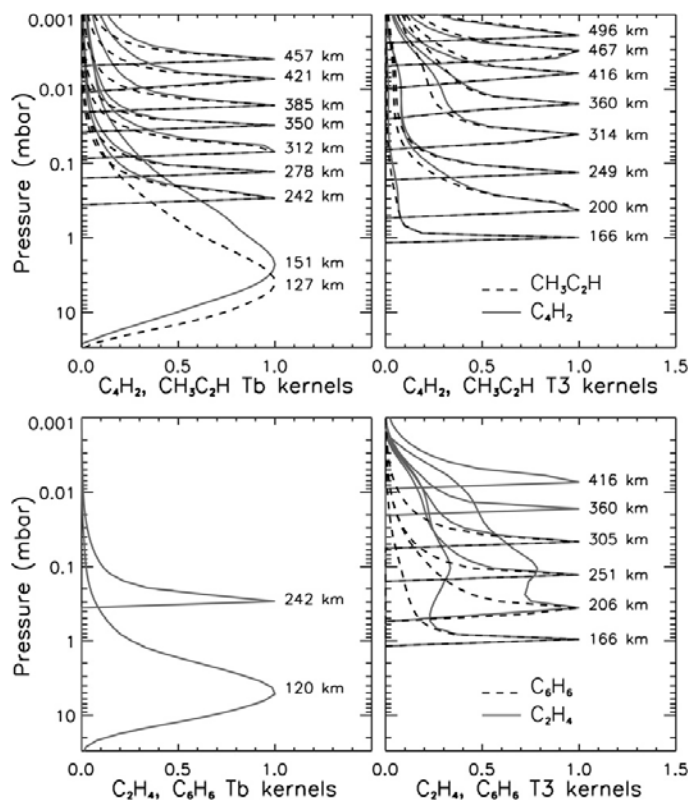


Fig. 9. Upper panels: normalized inversion kernels of C_4H_2 at 628 cm^{-1} (solid gray line) and CH_3C_2H at 633.25 cm^{-1} (dashed line) at 15° S (Tb, left) and 80° N (T3, right). Lower panels: normalized inversion kernels of C_2H_4 at 949.5 cm^{-1} (solid gray line) at 15° S (left) and 80° N (right) and C_6H_6 at 674 cm^{-1} (dashed line) at 80° N (right).

and increases at higher levels (Fig. 15); it presents a minimum at altitudes comparable to those of C_4H_2 and CH_3C_2H .

5.6. Benzene mixing ratio profiles

Benzene (C_6H_6) is detected through the Q -branch of the ν_4 band at 674 cm^{-1} . This emission does not appear in the Tb spectra, so that only an upper limit can be determined at 15° S . For T3, the band is visible in 4 limb spectra, allowing us to infer a vertical abundance profile. This C_6H_6 band is situated in the R -branch of the HC_3N band centered at 663 cm^{-1} , and not very far from the CO_2 ν_2 band at 667 cm^{-1} . The HC_3N band is not visible at 15° S , but very strong near the north pole due to the large enhancement of HC_3N at high latitudes (Flasar et al., 2005; Teanby et al., 2006). CO_2 shows a clear emission feature on both Tb and T3 spectra. Therefore, the abundance of HC_3N and CO_2 were first retrieved before analyzing the C_6H_6 emission. Vertical profiles of CO_2 are presented in de Kok et al. (2006).

For Tb, we inferred an upper limit of the C_6H_6 mixing ratio of 1.1 ppb at the $3\text{-}\sigma$ level, in the 1–10 mbar range (from the nadir spectrum) and also at 0.3 mbar (from the deepest limb spectrum).

We retrieved the T3 vertical abundance profile from limb spectra in the range $670\text{--}690\text{ cm}^{-1}$ that probe 0.95 to 0.046 mbar (168 and 307 km). This band is optically thin at all levels (Fig. 9). Fits of observed spectra are presented in Fig. 14. The retrieved mixing ratio profile, shown in Fig. 15, is mainly constant with altitude in the region where information is accessible, and seems to be enhanced compared to 15° S , given the upper limit obtained for Tb.

6. Discussion

The present analysis shows that limb observations by CIRS provide a very powerful means of deducing information on the mixing ratio profiles of trace constituents in Titan's atmosphere. The profiles obtained here are compared with previous observations from Voyager, ISO and ground-based telescopes as well as compared to models.

6.1. Temperature profiles

The vertical temperature profile we retrieved for Tb is essentially the same as that shown in Flasar et al. (2005) as a first analysis of the same dataset. The two temperature profiles

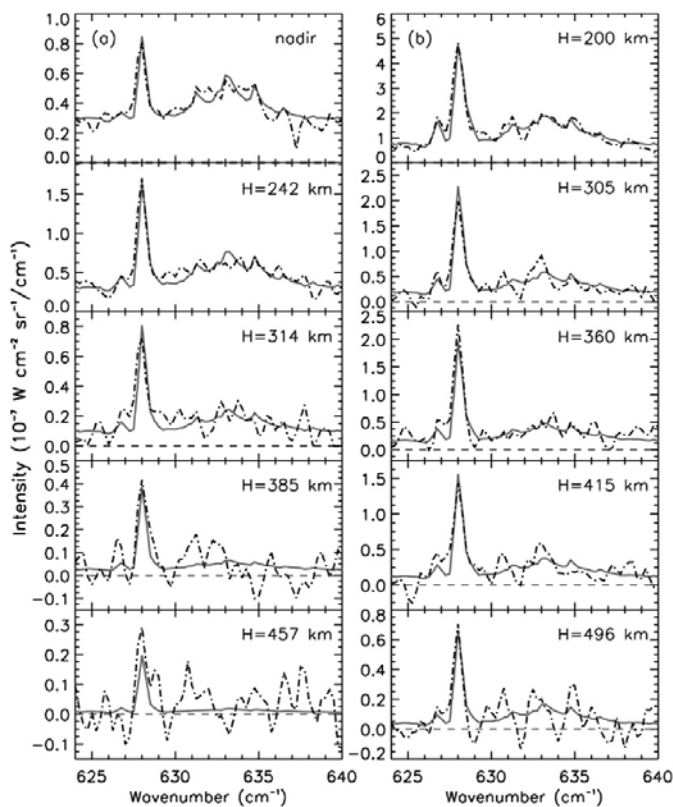


Fig. 10. Comparison of the observed C_4H_2 and $\text{CH}_3\text{C}_2\text{H}$ emission bands (dot-dashed line) with the calculated spectra (solid gray line) at 15° S (a) and 80° N (b), for different altitudes and the nadir at 15° S .

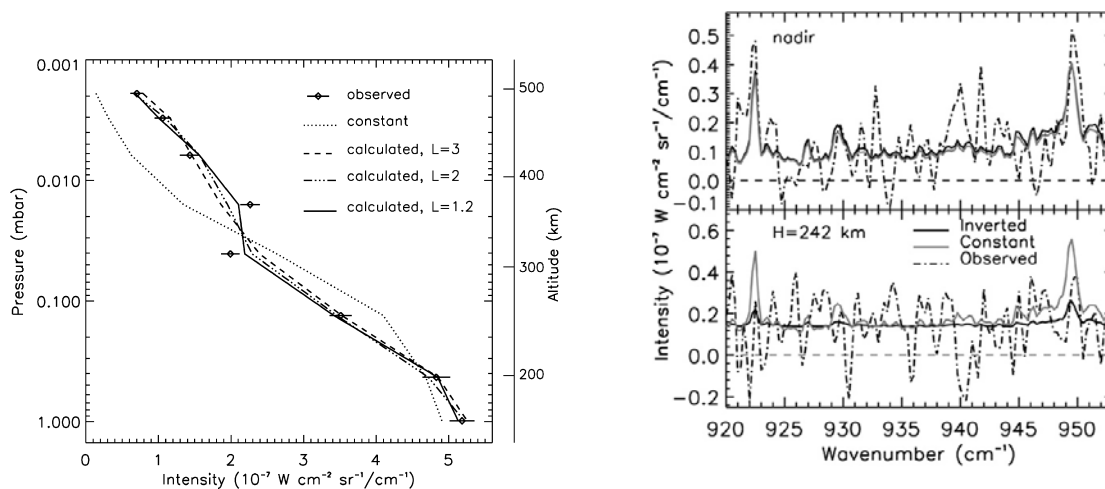


Fig. 11. Plot of the observed intensity recorded at 80° N (diamonds with error bars) at the peak of the C_4H_2 Q-branch at 628 cm^{-1} . This profile is compared with the intensities calculated with a constant mixing ratio profile (dotted line), and profiles retrieved with a smoothing of $L=3$ (dashed line), $L=2$ (dot-dashed line) and $L=1.2$ (solid line) scale heights.

Fig. 12. Comparison of the C_2H_4 emission bands observed at 15° S (dot-dashed line) for the nadir and 242 km, with a calculated spectrum corresponding to the retrieved C_2H_4 profile plotted in Fig. 15 (solid black line) and a calculated spectrum modeled with a constant mixing ratio profile equal to 2.6×10^{-7} (solid gray line). For the nadir, the two calculated spectra are very close to each other whereas they strongly differ at 242 km.

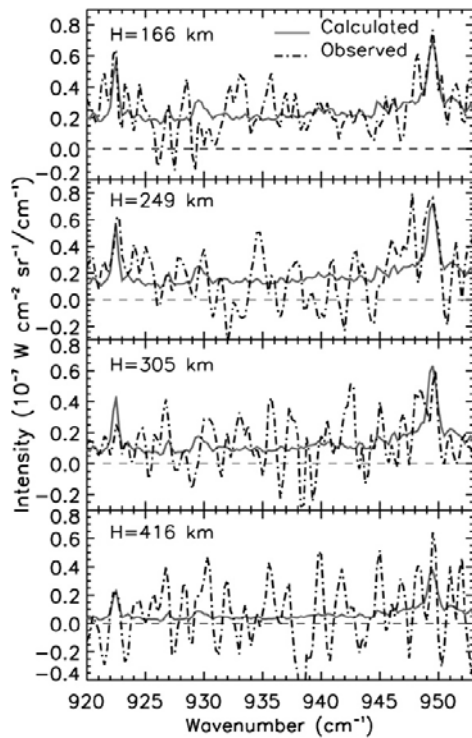


Fig. 13. Fit of the observed C_2H_4 emission bands (dot-dashed line) by the calculated spectra (solid gray line) at $80^\circ N$, for viewing altitudes of 166, 249, 305 and 416 km.

derived in the present study at $13^\circ S$ and $80^\circ N$ show well defined stratopauses. Near the north pole, the stratosphere is colder and the mesosphere warmer than near the equator. Titan's north winter solstice occurred in October 2002, so that the CIRS data we analyzed were recorded during the beginning of winter in the northern hemisphere. Flasar et al. (2005) found that stratospheric temperatures are maximum near the equator and steeply decrease towards high northern latitudes (much more than towards the south). The 1-mbar temperature thus varies from ~ 170 K at 0° to ~ 150 K at $60^\circ N$. At the same pressure level, we infer a temperature of $149^{+1.7}_{-0.7}$ K at $80^\circ N$. It is not straightforward to conclude that the temperature remains constant at latitudes polewards of $60^\circ N$. Because of the geometry of the observations, a large part of the information in the Q -branch originates from latitudes $\sim 66^\circ N$ as it is optically thick at this pressure level, whereas in the weaker multiplets of the P - and R -branches that are optically thin, information originates from around $80^\circ N$ (mostly 70 – $90^\circ N$).

These particularly low temperatures in the stratosphere may be explained by high northern latitudes lying in the polar night, and by both the lack of solar heating and enhanced thermal cooling due to the thicker haze (Bézard et al., 1995). On the other hand, the high mesospheric temperatures likely result from dynamical effects. Titan General Circulation Models predict that during winter in the northern hemisphere, a circula-

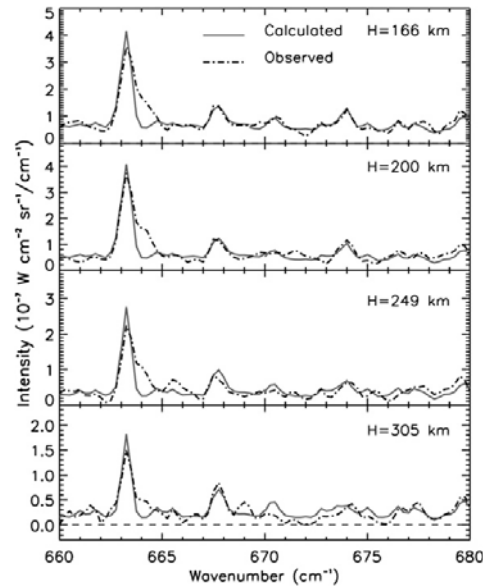


Fig. 14. Fit of the observed C_6H_6 emission bands at 674 cm^{-1} (dot-dashed line) by the calculated spectra (solid gray line) at $80^\circ N$, for viewing altitudes of 166, 200, 249 and 305 km. Other features in this spectral region are due to HC_3N (663 cm^{-1}) and CO_2 (667 cm^{-1}). The misfit around 664 cm^{-1} is likely due to a missing hot band of HC_3N in the spectroscopic database.

tion cell is upwelling over the south pole and subsiding over the north pole (Hourdin et al., 1995; Lebonnois et al., 2001; Luz et al., 2003; Hourdin et al., 2004). The north pole subsidence can generate a heating of the mesosphere by adiabatic compression of the atmosphere. Moreover, as mentioned by Teanby et al. (2006) who inferred the same pattern in the temperature profiles from low to high northern latitudes, atmospheric levels above 300 km at the north pole are under constant sunlight, which could add a warming effect.

6.2. Mixing ratio profiles: comparison with previous observations

Most of the vertical mixing ratio profiles of the molecules studied here show a more or less significant enhancement toward the north pole.

The acetylene mixing ratio shows a limited enrichment (about 50%) at the north pole. The mixing ratio we derive at 2 mbar for the $15^\circ S$ -spectrum is in very good agreement with that retrieved from CIRS nadir spectra by Flasar et al. (2005) and Coustenis et al. (2006). At both latitudes, the mixing ratio is essentially constant with height in the region 0.02–2 mbar (3 – 4×10^{-6} at $15^\circ S$ and 5 – 6×10^{-6} at $80^\circ N$). Above this region, C_2H_2 increases significantly with height at least at $80^\circ N$ where information is accessible. The vertical profile obtained for Tb can be compared with the profile retrieved by ISO in the same wavenumber range (Coustenis et al., 2003) with the caveat in mind that the ISO profile corresponds to a disk average, in contrast to CIRS data that are spatially resolved. The

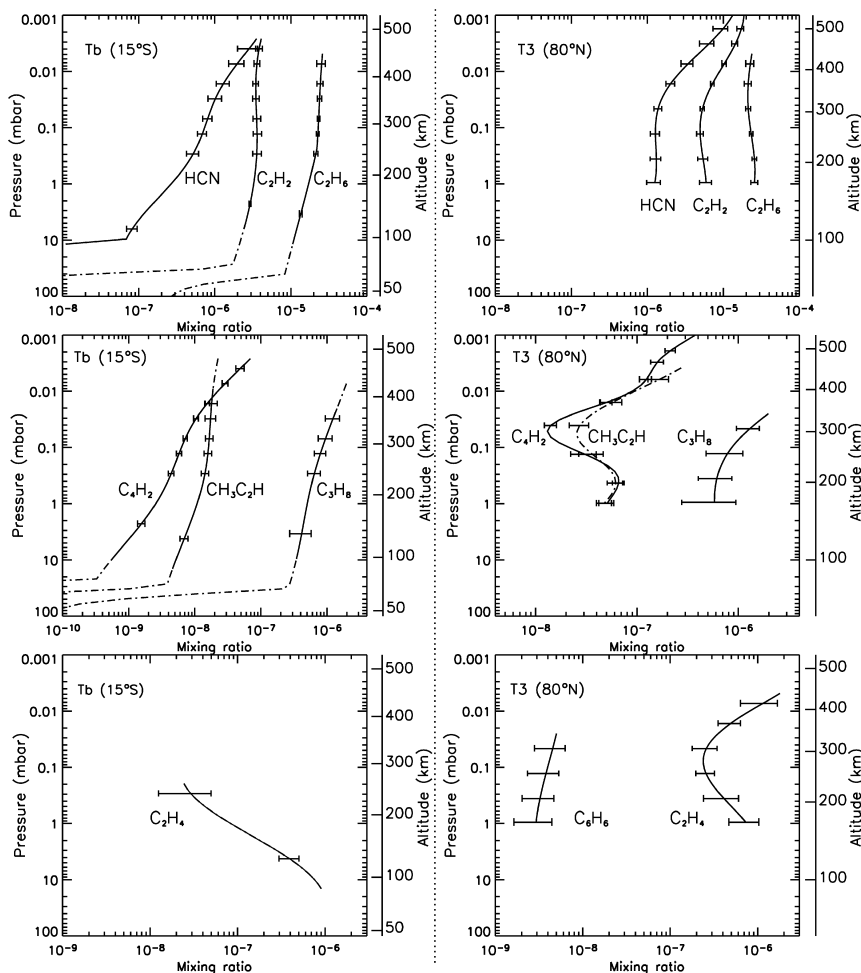


Fig. 15. Retrieved abundance profiles of HCN, C_2H_2 , C_2H_6 , C_4H_2 , CH_3C_2H , C_3H_8 , C_2H_4 and C_6H_6 at $15^\circ S$ (left panel) and $80^\circ N$ (right panel). Error bars are given at levels of kernel maxima, solid lines correspond to levels where emission bands give information, except for the CH_3C_2H plotted in dot-dashed line for a better readability.

comparison with our Tb profile is still meaningful since the disk average is more heavily weighted toward equatorial latitudes and because C_2H_2 does not show marked latitudinal variations (Flasar et al., 2005). The derived ISO profile has a much steeper gradient than ours with in addition larger mixing ratios at all altitudes (4.5×10^{-6} at 2 mbar and 9.5×10^{-6} at 0.2 mbar). This discrepancy is not understood. From a selection of nadir spectra at $15^\circ S$, Coustenis et al. (2006) also found that a profile with a vertical gradient much less steep than the ISO profile is required to fit the whole C_2H_2 band.

Voyager data provided a vertically-resolved profile of C_2H_2 at a latitude of $70^\circ N$ (Coustenis et al., 1991). Our profile at $80^\circ N$ agrees with the Voyager profile above the 0.1 mbar-level, but is larger by a factor of about 2.5 at 1 mbar.

At $80^\circ N$, we can also compare the abundance at the lowest level of our profile (1 mbar) with results obtained by Coustenis

et al. (2006). Note however that they retrieved abundances from nadir data exclusively, which probe Titan's stratosphere only up to about $68^\circ N$. In addition, at high northern latitudes, information on the temperature from the ν_4 methane band is limited to above the ~ 2 -mbar level and, below, the inverted profile blend smoothly with the initial guess profile used in the retrieval algorithm. On the other hand, the contribution functions of the absorbers, assumed to be constant-with-height above the condensation level, peak around 5 mbar, so that the derived mixing ratios are strongly affected by temperature uncertainties. To assess this error source, Coustenis et al. tested two types of retrieved temperature profiles. The initial guess profile, in the first case ("warm"), is that retrieved by Flasar et al. (2005) at $15^\circ S$ (similar to our Tb profile in Fig. 4), and in the second case ("cold") it is the one we obtained at $80^\circ N$ (Fig. 4), which exhibits much colder temperatures below 2–3 mbar. These two

acceptable temperature profiles yield different abundances for the same molecule, the cold case leading to a larger abundance (see Coustenis et al., 2006, for more details).

The C₂H₂ mixing ratio we retrieved at 80° N at 1 mbar is in agreement with Coustenis et al.'s results at 68° N based on either their warm or cold temperature profile.

The slope of the HCN mixing ratio profile differs dramatically at the north pole compared to the equator, with a much steeper gradient at 15° S. The enrichment toward the north pole is particularly noticeable below the 0.05-mbar level. Marten et al. (2002) retrieved the vertical distribution of HCN from millimeter observations at the IRAM 30-m telescope. Their disk-averaged HCN vertical profile has a change in the mixing ratio gradient (dq/dz) around 180 km that we do not infer with CIRS limb data. Our retrieved vertical distribution at 15° S is very close to the Marten et al. (2002) profile below 300 km but we obtain larger HCN abundances at higher altitudes (about twice larger at 400 km). Above 300 km, our HCN profile is actually intermediate between those of Marten et al. (2002) and Tanguy et al. (1990), also derived from ground-based millimeter observations. At pressures probed by nadir spectra (around 6 mbar), we obtain abundance that is consistent with Coustenis et al. (2006). We are also in good agreement with Teanby et al. (2006) who modeled the CIRS nadir spectra with a scaled Marten et al. profile rather than with a profile that is constant with height. The steep gradient shown by the Tb vertical distribution will be discussed in Section 6.4. At 80° N, the HCN mixing ratio we obtained at 1 mbar is in agreement with the Coustenis et al. (2006) value they obtained at 68° N assuming a cold temperature profile below the 2–3 mbar level.

Like acetylene, the ethane profile does not vary between the Tb and T3 latitudes. At 1 mbar, the mixing ratio is enhanced by ~80% at 80° N, while above the 0.4-mbar level, it is similar at the two latitudes. Coustenis and Bézard (1995) showed that this molecule did not vary significantly with latitude at the time of the Voyager encounter. This result was confirmed by CIRS nadir observations (Flasar et al., 2005; Coustenis et al., 2006), and the C₂H₆ abundance retrieved here at 15° S (1.4×10^{-5} at 3 mbar) is consistent with their results. Moreover, the C₂H₆ mixing ratio found in our analysis at 80° N agrees with the moderate equator-to-pole gradient found by Coustenis et al. (2006).

Within error bars, propane does not show an enrichment toward the north pole. A C₃H₈ mixing ratio of 5×10^{-7} was deduced from Voyager data near the 1-mbar level at 70° N, in good agreement with our retrieved profile at 80° N. The mixing ratio at 15° S at the level probed by nadir measurements (3.5 mbar) is consistent with those inferred from CIRS nadir spectra (Flasar et al., 2005; Coustenis et al., 2006), ISO data (Coustenis et al., 2003) and high resolution ground-based observations ($6.2 \pm 1.2 \times 10^{-7}$; Roe et al., 2003). At 80° N, the abundance we retrieved ($3\text{--}9 \times 10^{-7}$ at 1 mbar) also agrees with that Coustenis et al. (2006) derived from nadir spectra at 68° N.

Methylacetylene and diacetylene have mixing ratio profiles that increase with altitude at 15° S, with a steeper gradient for C₄H₂. The mixing ratio obtained in this work at ~2.3 mbar (constrained by the nadir spectrum) for C₄H₂ is consistent with

the ISO value whereas, for CH₃C₂H, we infer an abundance higher than the ISO one. Mixing ratios obtained here are very close to those deduced from CIRS nadir spectra (Flasar et al., 2005; Coustenis et al., 2006). The T3 vertical profiles of these two molecules are highly unexpected as they show a minimum around 0.1 mbar that could not be inferred from Voyager data at 70° N, because of the low vertical resolution of the spectra (200 km) (Coustenis et al., 1991). The mixing ratios of about 5×10^{-8} for CH₃C₂H and C₄H₂ we have found at the 1-mbar level are respectively 1.7 and 2.5 times larger than those derived by Coustenis et al. (2006) at 68° N. These differences likely originate from the use of constant-with-height mixing ratio profiles in the Coustenis et al. analysis of nadir spectra.

Benzene is not visible at 15° S but shows a clear signature near the north pole on several limb spectra. We have derived the first vertical profile of C₆H₆. The profile we obtained at 80° N is constant with altitude within error bars. Our mixing ratio at 1 mbar is similar to that inferred by Coustenis et al. (2006) at 68° N. At 15° S, the upper limit we inferred is consistent with the mole fraction suggested by ISO observations (4×10^{-10} ; Coustenis et al., 2003).

Ethylene exhibits a large increase (~10 times) of its mixing ratio profile between 15° S and 80° N. The most striking feature is the decrease of its mixing ratio with altitude at both latitudes at levels lower than the 0.1-mbar level. This decrease is not predicted by one-dimensional photochemical models unless a surficial source is arbitrarily added, as in Lara et al. (1996). The mixing ratio at 4 mbar that we derived at 15° S is about 50% larger than that determined by Coustenis et al. (2006) and Flasar et al. (2005). This discrepancy likely results from the difference in the C₂H₄ vertical profiles; Coustenis et al. assumed a constant-with-height mixing ratio profile whereas we retrieved a profile that strongly decreases with height. At 80° N, the abundance we infer at 1 mbar is about 3.5 times larger than their value at 68° N, considering their abundance retrieved with a cold temperature profile.

Vervack et al. (2004) published a reanalysis of the Voyager 1 UVS solar occultations at latitudes of 4° N (ingress) and 16° S (egress). Density profile information was derived for N₂, CH₄, C₂H₂, C₂H₄, HCN and HC₃N down to 500 km, an altitude close to the uppermost altitude probed at 15° S with CIRS limb observations. Relative to N₂, the C₂H₂ and C₂H₄ mixing ratios at 500 km were determined to be $2\text{--}6 \times 10^{-6}$ and $1\text{--}3 \times 10^{-6}$, respectively. For HCN only an upper limit could be set (1.5×10^{-4}) due to confusion with HC₃N opacity beyond 130 nm at the UVS resolution. This upper limit is consistent with the HCN mixing ratio we infer at 15° S ($2\text{--}3 \times 10^{-6}$ at 450 km). The UVS value for C₂H₂ is in excellent agreement with ours at 450 km (4×10^{-6}). Finally, Vervack et al.'s C₂H₄ mixing ratio at 500 km is about 2 orders of magnitude larger than the CIRS value at 240 km. If this is confirmed, this would indicate that, following its decrease from 120 to 240 km, the C₂H₄ mixing ratio starts to increase upwards above some level below 500 km.

acceptable temperature profiles yield different abundances for the same molecule, the cold case leading to a larger abundance (see Coustenis et al., 2006, for more details).

The C₂H₂ mixing ratio we retrieved at 80° N at 1 mbar is in agreement with Coustenis et al.'s results at 68° N based on either their warm or cold temperature profile.

The slope of the HCN mixing ratio profile differs dramatically at the north pole compared to the equator, with a much steeper gradient at 15° S. The enrichment toward the north pole is particularly noticeable below the 0.05-mbar level. Marten et al. (2002) retrieved the vertical distribution of HCN from millimeter observations at the IRAM 30-m telescope. Their disk-averaged HCN vertical profile has a change in the mixing ratio gradient (dq/dz) around 180 km that we do not infer with CIRS limb data. Our retrieved vertical distribution at 15° S is very close to the Marten et al. (2002) profile below 300 km but we obtain larger HCN abundances at higher altitudes (about twice larger at 400 km). Above 300 km, our HCN profile is actually intermediate between those of Marten et al. (2002) and Tanguy et al. (1990), also derived from ground-based millimeter observations. At pressures probed by nadir spectra (around 6 mbar), we obtain abundance that is consistent with Coustenis et al. (2006). We are also in good agreement with Teany et al. (2006) who modeled the CIRS nadir spectra with a scaled Marten et al. profile rather than with a profile that is constant with height. The steep gradient shown by the Tb vertical distribution will be discussed in Section 6.4. At 80° N, the HCN mixing ratio we obtained at 1 mbar is in agreement with the Coustenis et al. (2006) value they obtained at 68° N assuming a cold temperature profile below the 2–3 mbar level.

Like acetylene, the ethane profile does not vary between the Tb and T3 latitudes. At 1 mbar, the mixing ratio is enhanced by ~80% at 80° N, while above the 0.4-mbar level, it is similar at the two latitudes. Coustenis and Bézard (1995) showed that this molecule did not vary significantly with latitude at the time of the Voyager encounter. This result was confirmed by CIRS nadir observations (Flasar et al., 2005; Coustenis et al., 2006), and the C₂H₆ abundance retrieved here at 15° S (1.4×10^{-5} at 3 mbar) is consistent with their results. Moreover, the C₂H₆ mixing ratio found in our analysis at 80° N agrees with the moderate equator-to-pole gradient found by Coustenis et al. (2006).

Within error bars, propane does not show an enrichment toward the north pole. A C₃H₈ mixing ratio of 5×10^{-7} was deduced from Voyager data near the 1-mbar level at 70° N, in good agreement with our retrieved profile at 80° N. The mixing ratio at 15° S at the level probed by nadir measurements (3.5 mbar) is consistent with those inferred from CIRS nadir spectra (Flasar et al., 2005; Coustenis et al., 2006), ISO data (Coustenis et al., 2003) and high resolution ground-based observations ($6.2 \pm 1.2 \times 10^{-7}$; Roe et al., 2003). At 80° N, the abundance we retrieved ($3\text{--}9 \times 10^{-7}$ at 1 mbar) also agrees with that Coustenis et al. (2006) derived from nadir spectra at 68° N.

Methylacetylene and diacetylene have mixing ratio profiles that increase with altitude at 15° S, with a steeper gradient for C₄H₂. The mixing ratio obtained in this work at ~2.3 mbar (constrained by the nadir spectrum) for C₄H₂ is consistent with

the ISO value whereas, for CH₃C₂H, we infer an abundance higher than the ISO one. Mixing ratios obtained here are very close to those deduced from CIRS nadir spectra (Flasar et al., 2005; Coustenis et al., 2006). The T3 vertical profiles of these two molecules are highly unexpected as they show a minimum around 0.1 mbar that could not be inferred from Voyager data at 70° N, because of the low vertical resolution of the spectra (200 km) (Coustenis et al., 1991). The mixing ratios of about 5×10^{-8} for CH₃C₂H and C₄H₂ we have found at the 1-mbar level are respectively 1.7 and 2.5 times larger than those derived by Coustenis et al. (2006) at 68° N. These differences likely originate from the use of constant-with-height mixing ratio profiles in the Coustenis et al. analysis of nadir spectra.

Benzene is not visible at 15° S but shows a clear signature near the north pole on several limb spectra. We have derived the first vertical profile of C₆H₆. The profile we obtained at 80° N is constant with altitude within error bars. Our mixing ratio at 1 mbar is similar to that inferred by Coustenis et al. (2006) at 68° N. At 15° S, the upper limit we inferred is consistent with the mole fraction suggested by ISO observations (4×10^{-10} ; Coustenis et al., 2003).

Ethylene exhibits a large increase (~10 times) of its mixing ratio profile between 15° S and 80° N. The most striking feature is the decrease of its mixing ratio with altitude at both latitudes at levels lower than the 0.1-mbar level. This decrease is not predicted by one-dimensional photochemical models unless a surfacial source is arbitrarily added, as in Lara et al. (1996). The mixing ratio at 4 mbar that we derived at 15° S is about 50% larger than that determined by Coustenis et al. (2006) and Flasar et al. (2005). This discrepancy likely results from the difference in the C₂H₄ vertical profiles; Coustenis et al. assumed a constant-with-height mixing ratio profile whereas we retrieved a profile that strongly decreases with height. At 80° N, the abundance we infer at 1 mbar is about 3.5 times larger than their value at 68° N, considering their abundance retrieved with a cold temperature profile.

Vervack et al. (2004) published a reanalysis of the Voyager 1 UVS solar occultations at latitudes of 4° N (ingress) and 16° S (egress). Density profile information was derived for N₂, CH₄, C₂H₂, C₂H₄, HCN and HC₃N down to 500 km, an altitude close to the uppermost altitude probed at 15° S with CIRS limb observations. Relative to N₂, the C₂H₂ and C₂H₄ mixing ratios at 500 km were determined to be $2\text{--}6 \times 10^{-6}$ and $1\text{--}3 \times 10^{-6}$, respectively. For HCN only an upper limit could be set (1.5×10^{-4}) due to confusion with HC₃N opacity beyond 130 nm at the UVS resolution. This upper limit is consistent with the HCN mixing ratio we infer at 15° S ($2\text{--}3 \times 10^{-6}$ at 450 km). The UVS value for C₂H₂ is in excellent agreement with ours at 450 km (4×10^{-6}). Finally, Vervack et al.'s C₂H₄ mixing ratio at 500 km is about 2 orders of magnitude larger than the CIRS value at 240 km. If this is confirmed, this would indicate that, following its decrease from 120 to 240 km, the C₂H₄ mixing ratio starts to increase upwards above some level below 500 km.

6.3. Mixing ratio profiles: Comparison with photochemical models

Most of the molecules studied here exhibit a general increase of their mixing ratio with altitude in the stratosphere. This result is predicted by photochemical models, because these trace components are formed in the upper atmosphere, are transported downward and are lost by condensation in the lower stratosphere (50–100 km) (Yung et al., 1984; Toubanc et al., 1995; Lara et al., 1996; Wilson and Atreya, 2004). The only exception near the equator is C_2H_4 that decreases with height in the stratosphere (below 300 km). This behavior can be explained by 1-D photochemical models only if a large source exists in the lower stratosphere (Yung et al., 1984) or if a large flux from the surface is added (Lara et al., 1996), which seems unlikely. The decrease with height may be related to the fact that the C_2H_4 mixing ratio measured in the lower stratosphere does not exceed the value at the cold trap (about 1.2×10^{-6} according to our temperature profile at 13° S), a feature unique among the detected species. The C_2H_4 profile could then result from a photochemical sink in the upper stratosphere, combined with advection in the lower stratosphere and troposphere through the return branch of the Hadley cell, which brings enriched air from the high northern latitudes (Crespin et al., 2005).

Molecules present different slopes in their vertical distributions at a given latitude. Generally, 1-D photochemical models have problems to reproduce simultaneously the vertical profiles of all detected species. In this regard, the most recent model of Wilson and Atreya (2004) does overall a good job although significant discrepancies remain (besides the case of C_2H_4 mentioned above). Their C_2H_2 profiles increase by a factor of 5 between 150 and 450 km while we observe only a $\sim 30\%$ change at 15° S. Our HCN mixing ratio at the same latitude is 3 times lower than Wilson and Atreya's nominal model at 110 km while the two agree at 450 km. The observed propane profile is also about 3 times larger than in the nominal photochemical model. The CH_3C_2H we infer is much less steep than modeled. While the two agree around 130 km, the photochemical profile is more than an order of magnitude larger than observed at 400 km. The ethane mixing ratio profile we infer agrees reasonably well with their model. The upper limit we inferred for the C_6H_6 mixing ratio at 15° S is consistent with their predicted abundance profile that exhibits slightly lower values at comparable pressures. Our upper limit is also consistent with the benzene vertical profile of Lebonnois (2005).

While some discrepancies are likely due to unknowns in the chemical schemes, others probably result from large-scale dynamical effects not included in one-dimensional models.

As the vertical profile of a given compound depends on the various chemical sources and sinks as well as on eddy mixing and advection by the general circulation, our observations shed new light on these processes.

6.4. A sink for HCN in the stratosphere?

Some chemical species, formed in the upper atmosphere and chemically stable at lower levels, can be used as tracers

of the atmospheric circulation and mixing. The case of C_2H_6 and HCN is particularly interesting. Both species are thought to be largely formed above 600 km and transported to lower altitudes where their chemical time constants are longer than the eddy diffusion time (Wilson and Atreya, 2004). However, their vertical profiles in the stratosphere and lower mesosphere are not similar, as one would then expect. The gradient in the ethane mole fraction (dq/dz) at 15° S is about $2 \times 10^{-8} \text{ km}^{-1}$ in the range 250–450 km, increasing to about $7 \times 10^{-8} \text{ km}^{-1}$ from 150 to 250 km. In contrast, the HCN gradient decreases with altitude from about $1.5 \times 10^{-8} \text{ km}^{-1}$ around 400 km to $4 \times 10^{-9} \text{ km}^{-1}$ around 200 km (Fig. 15). Uncertainties of these values do not exceed a factor of two. These significant differences suggest that at least one of the two species may be not chemically inert in the region probed by CIRS. In the framework of a one-dimensional model (e.g., Wilson and Atreya, 2004), the continuity equation for the concentration gradient dq/dz can be written as:

$$(1 + z/R)^2 K n dq/dz = P, \quad (5)$$

where K is the eddy mixing coefficient, n the atmospheric number density, R the planetary radius, and P the net production rate of the species above altitude z (normalized to the surface).

Assuming that the ethane profile at 15° S represents planet-averaged conditions, Eq. (5) can be used to derive a profile for K assuming that P is known from photochemistry. We used the ethane production rate $P = 1.6 \times 10^9 \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ from Wilson and Atreya (2004) (also consistent with Lara et al., 1996) and determined $K(z)$ so that the C_2H_6 profile calculated from Eq. (5) agrees with the measured one within uncertainties. The vertical integration is done upwards starting from the condensation level defined as where dq/dz given by Eq. (5) is equal to the gradient corresponding to the saturation law. Fig. 16 shows the derived K profile and associated C_2H_6 profile. Our K profile is similar to that of Wilson and Atreya (2004) in the range 100–200 km and about twice larger at and above 300 km.

Using this same K profile, HCN profiles generated with constant production rates clearly do not reproduce the observations (Fig. 16). This problem was initially noted by Lara et al. (1996) who could not fit simultaneously the HCN and C_2 hydrocarbon profiles. The lower part of the profile, above the condensation level, requires a production rate as low as $\sim 3 \times 10^7 \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ while the profile around 400 km seems to indicate a production rate at least 10 times larger. To reproduce the HCN profile, it is then necessary to assume that the integrated net production rate strongly decreases with depth, meaning that a large fraction of the HCN is chemically lost in the 100–450 km region. We accordingly introduced a loss term, constant between 200 and 400 km ($23 \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$) and that decreases to zero at 145 and 455 km. In this model, which yields the HCN profile shown as a solid line in Fig. 16, the integrated production rate is $3.1 \times 10^7 \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ below 145 km and $6.2 \times 10^8 \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ at 455 km. For comparison, the HCN production rate calculated by Wilson and Atreya (2004), in agreement with Yung et al. (1984), is $2 \times 10^8 \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ while the source of N in all forms produced by N_2 dissociation is $5.6 \times 10^8 \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$.

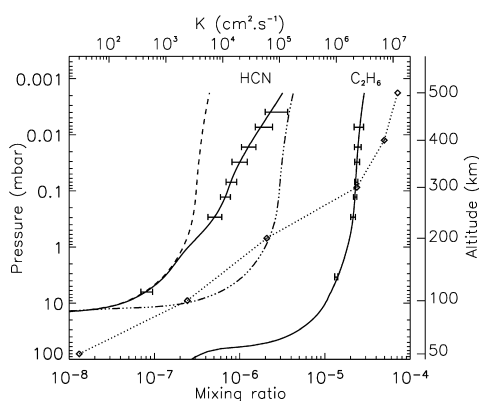


Fig. 16. C_2H_6 and HCN vertical profiles calculated from the continuity-diffusion equation. The C_2H_6 profile corresponds to a net production rate of $1.6 \times 10^9 \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ and the eddy mixing profile shown here (dot-diamonds line). HCN profiles calculated with the same eddy mixing profile and net production rate of 3×10^7 (dashed line) and $3 \times 10^8 \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ (dot-dashed line) are shown. The HCN profile shown in solid line incorporates a chemical sink in the stratosphere (see text). Data points retrieved at 15° S are indicated for comparison.

Our simple model suggests that most of the N produced from N_2 dissociation ends up as HCN in the upper atmosphere ($>500 \text{ km}$) and that most of this HCN is then chemically lost in the lower atmosphere (150–450 km) above the condensation level at $\sim 90 \text{ km}$. A possible sink for HCN in the stratosphere is haze formation, through HCN polymerization or copolymerization with hydrocarbons, as initially suggested by McKay (1996). Investigating the chemical pathways to haze formation, Wilson and Atreya (2004) predict a production peaking around 140–300 km with aromatic molecules being the main contributor and HCN polymerization playing a significant role. However, the various processes investigated by these authors do not lead to the large loss rate we suggest for HCN. To fit simultaneously the HCN and C_2 hydrocarbon profiles, Lara et al. (1999) introduced a loss term for HCN due to incorporation into the haze through polymerization or sticking. They concluded that a loss rate of $3\text{--}5 \times 10^8 \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ allowed them to reproduce the observations, a value close to what we infer.

Despite the limits of our simple one-dimensional model we suggest that the difference in the HCN and C_2H_6 vertical gradients points to the existence of an important sink for HCN in the stratosphere. This sink, not predicted by existing photochemical models, might be haze formation as proposed by McKay (1996) and Lara et al. (1999). However, the large loss rate we infer, a few $10^8 \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$, cannot presently be reproduced by the pathways that have been investigated up to now (Wilson and Atreya, 2004). Other pathways for haze formation clearly need to be explored through laboratory studies.

6.5. South-to-north enrichment

The north polar enhancement of most of the trace species can probably be explained by dynamical effects. Titan General Circulation Models predict that air generally upwells near

the summer pole and descends near the winter pole, as a single stratospheric circulation cell (see Lebonnois et al., 2001; Hourdin et al., 2004). Therefore the subsidence at the north pole brings air enriched in molecules formed at high altitudes to lower levels in the stratosphere and mesosphere. The vertical gradient is controlled by chemistry as well as dynamics. Molecular profiles that have a small vertical gradient near the equator (C_2H_2 or C_2H_6) do not show a high enhancement near the north pole because subsidence does not affect very much their profiles. In contrast, HCN shows a strong increase of its mole fraction between the 1 and 0.1-mbar levels, by more than an order of magnitude between 110 and 450 km. Hourdin et al. (2004) suggested that the latitudinal abundance contrast that differs from one molecule to another is mostly connected to their condensation level (the higher the condensation, the larger the latitudinal gradient). As a result, Hourdin et al. (2004) predict an enrichment of the $50\text{--}70^\circ \text{ N}$ region relative to the $0\text{--}30^\circ \text{ N}$ of a factor of 3 for C_2H_2 (at 150 km) and 6 for HCN (at 107 km) at the time of the Cassini observations analyzed here. We observe factors of 2 and 20 for these two molecules respectively between 15° S and 80° N , in qualitative agreement with the model.

The marked minimum of C_4H_2 , CH_3C_2H and C_2H_4 around 0.1 mbar observed at the north pole but not at 15° S seems very hard to explain by dynamical effects only. Lebonnois et al.'s (2001) model predicts a drop in the C_4H_2 and CH_3C_2H abundances near 390 km due to photochemical destruction. However, this drop, visible at low latitudes, occurs significantly higher than in our retrieved profiles ($\sim 300 \text{ km}$) and vanishes at the north pole as a result of subsidence, which is at odds with our findings. It is worth noting that these three molecules have very short chemical lifetimes (between 0.04 and 1.5 years, according to Wilson and Atreya, 2004) compared to other compounds mentioned in this study that display at least 40 times longer chemical lifetimes (except C_6H_6). These molecules are chemically reactive on a timescale lower or comparable to the dynamical ones (Lebonnois et al., 2001). This suggests that an unknown sink, specific to high winter latitudes, exists for these three molecules. A possibility is the formation of the multiple haze layers seen between 200 and 500 km in Cassini images of the north polar hood (Porco et al., 2005).

To better understand the atmospheric circulation and photochemistry in Titan, it is clearly important to retrieve abundance profiles from limb observations at other latitudes. Such information on a fine grid in latitude would provide strong constraints on the extension of the Hadley cell(s) and of the putative polar vortex as well as on the latitudinal mixing by waves. Twenty CIRS limb observations dedicated to composition measurements have been planned over the nominal Cassini tour. Also, during FP1 far-infrared limb composition sequences, FP3 and FP4 limb spectra are recorded simultaneously, providing as a by-product additional coverage in the mid-infrared range. From the T18 flyby of Titan in September 2006, the inclination of the orbits will start to increase, offering better visibility of the polar regions. This will allow lines-of-sight in polar limb-viewing geometry to extend over a more restricted range of latitudes compared to the present situation. It is particularly important to specify, with a good resolution, the composition and

temperature structure near the winter pole as it appears to vary rapidly with latitude. Also nadir observations of polar regions should allow us to probe deeper in the stratosphere than with the present orbit geometry (our analysis of T3 data is limited to pressure levels less than 1 mbar). Finally, significant variations in composition are predicted to occur over the 4-year nominal mission (Hourdin et al., 2004) and the changes that will be monitored by CIRS limb measurements will add other tight constraints on Titan's general circulation. An extended mission beyond 2008, covering the transition period after equinox, will bring valuable information on the evolution of the circulation regime, particularly in the polar vortex.

Acknowledgments

We would like to thank E. Lellouch and D. Jennings for their helpful comments.

References

- Arié, E., Johns, J.W.C., 1992. The bending energy levels of C_4H_2 . *J. Mol. Spectrosc.* 155, 195–204.
- Bézar, B., Coustenis, A., McKay, C.P., 1995. Titan's stratospheric temperature asymmetry: A radiative origin? *Icarus* 113, 267–276.
- Blanquet, G., Walrand, J., Dang-Nhu, M., 1992. Absolute line intensities of the ν_9 band of propyne at 15.5 μm . *Spectrochim. Acta A* 48, 1231–1233.
- Borysow, A., Frommhold, L., 1986a. Collision-induced rototranslational absorption spectra of N_2-N_2 pairs for temperatures from 50 to 300 K. *Astrophys. J.* 311, 1043–1057.
- Borysow, A., Frommhold, L., 1986b. Theoretical collision-induced rototranslational absorption spectra for modeling Titan's atmosphere— H_2-N_2 pairs. *Astrophys. J.* 303, 495–510.
- Borysow, A., Frommhold, L., 1987. Collision-induced rototranslational absorption spectra of CH_4-CH_4 pairs at temperatures from 50 to 300 K. *Astrophys. J.* 318, 940–943.
- Borysow, A., Tang, C., 1993. Far infrared CIA spectra of N_2-CH_4 pairs for modeling of Titan's atmosphere. *Icarus* 105, 175–183.
- Conrath, B.J., Gierasch, P.J., Ustinov, E.A., 1998. Thermal structure and para hydrogen fraction on the outer planets from Voyager IRIS measurements. *Icarus* 135, 501–517.
- Coustenis, A., Bézar, B., 1995. Titan's atmosphere from Voyager infrared observations. IV. Latitudinal variations of temperature and composition. *Icarus* 115, 126–140.
- Coustenis, A., Bézar, B., Gautier, D., 1989. Titan's atmosphere from Voyager infrared observations. I. The gas composition of Titan's equatorial region. *Icarus* 80, 54–76.
- Coustenis, A., Bézar, B., Gautier, D., Marten, A., Samuelson, R., 1991. Titan's atmosphere from Voyager infrared observations. III. Vertical contributions of hydrocarbons and nitriles near Titan's north pole. *Icarus* 89, 152–167.
- Coustenis, A., Salama, A., Lellouch, E., Encrenaz, T., Bjoraker, G.L., Samuelson, R.E., de Graauw, T., Feuchtgruber, H., Kessler, M.F., 1998. Evidence for water vapor in Titan's atmosphere from ISO/SWS data. *Astron. Astrophys.* 336, L85–L89.
- Coustenis, A., Salama, A., Schulz, B., Ott, S., Lellouch, E., Encrenaz, T., Gautier, D., Feuchtgruber, H., 2003. Titan's atmosphere from ISO mid-infrared spectroscopy. *Icarus* 161, 383–403.
- Coustenis, A., Achterberg, R.K., Conrath, B.J., Jennings, D.E., Marten, A., Gautier, D., Nixon, C.A., Flasar, F.M., Teanby, N.A., Bézar, B., Samuelson, R.E., Carlson, R.C., Lellouch, E., Bjoraker, G.L., N., R.P., Taylor, F.W., Irwin, P.G.J., Fouchet, T., Hubet, A., Orton, G.S., Kunde, V.G., Vinatier, S., Mondellini, J., Abbas, M.M., Courtin, R., 2006. The composition of Titan's stratosphere from Cassini/CIRS mid-infrared spectra. *Icarus*. Submitted for publication.
- Crespin, A., Lebonnois, S., Hourdin, F., Rannou, P., 2005. Seasonal variations of Titan's stratospheric composition in the LMD/SA Global Climate Model. *Bull. Am. Astron. Soc.* 37, 718.
- Dang-Nhu, M., Plíva, J., 1989. Intensities in the ν_4 , ν_{12} , ν_{13} , and ν_{14} bands of benzene. *J. Mol. Spectrosc.* 138, 423–429.
- de Kok, R., Irwin, P.G.J., Teanby, N.A., Lellouch, E., Bézar, B., Vinatier, S., Nixon, C., Fletcher, L., Howett, C., Calcutt, S.B., Bowles, N.E., Flasar, F.M., Taylor, F.W., 2006. Oxygen compounds in Titan's stratosphere as observed by Cassini/CIRS. *Icarus*. In press.
- Flasar, F.M., Samuelson, R.E., Conrath, B.J., 1981. Titan's atmosphere—Temperature and dynamics. *Nature* 292, 693–698.
- Flasar, F.M., Kunde, V.G., Abbas, M.M., Achterberg, R.K., Ade, P., Barucci, A., Bézar, B., Bjoraker, G.L., Brasunas, J.C., Calcutt, S., Carlson, R., C'esarsky, C.J., Conrath, B.J., Coradini, A., Courtin, R., Coustenis, A., Edberg, S., Edgington, S., Ferrari, C., Fouchet, T., Gautier, D., Gierasch, P.J., Grossman, K., Irwin, P., Jennings, D.E., Lellouch, E., Mamoutkine, A.A., Marten, A., Meyer, J.P., Nixon, C.A., Orton, G.S., Owen, T.C., Pearl, J.C., Prangé, R., Raulin, F., Read, P.L., Romani, P.N., Samuelson, R.E., Segura, M.E., Showalter, M.R., Simon-Miller, A.A., Smith, M.D., Spencer, J.R., Spilker, L.J., Taylor, F.W., 2004. Exploring the Saturn system in the thermal infrared: The composite infrared spectrometer. *Space Sci. Rev.* 115, 169–297.
- Flasar, F.M., Achterberg, R.K., Conrath, B.J., Gierasch, P.J., Kunde, V.G., Nixon, C.A., Bjoraker, G.L., Jennings, D.E., Romani, P.N., Simon-Miller, A.A., Bézar, B., Coustenis, A., Irwin, P.G.J., Teanby, N.A., Brasunas, J., Pearl, J.C., Segura, M.E., Carlson, R.C., Mamoutkine, A., Schinder, P.J., Barucci, A., Courtin, R., Fouchet, T., Gautier, D., Lellouch, E., Marten, A., Prangé, R., Vinatier, S., Strobel, D.F., Calcutt, S.B., Read, P.L., Taylor, F.W., Bowles, N., Samuelson, R.E., Orton, G.S., Spilker, L.J., Owen, T.C., Spencer, J.R., Showalter, M.R., Ferrari, C., Abbas, M.M., Raulin, F., Edgington, S., Ade, P., Wishnow, E.H., 2005. Titan's atmospheric temperatures, winds, and composition. *Science* 308, 975–978.
- Gurwell, M.A., 2004. Submillimeter observations of Titan: Global measures of stratospheric temperature, CO, HCN, HC_3N , and the isotopic ratios $^{12}C/^{13}C$ and $^{14}N/^{15}N$. *Astrophys. J.* 616, L7–L10.
- Hanel, R., Conrath, B., Flasar, F.M., Kunde, V., Maguire, W., Pearl, J.C., Pirraglia, J., Samuelson, R., Herath, L., Allison, M., Cruikshank, D.P., Gautier, D., Gierasch, P.J., Horn, L., Koppany, R., Ponnampuruma, C., 1981. Infrared observations of the saturnian system from Voyager I. *Science* 212, 192–200.
- Hidayat, T., Marten, A., Bézar, B., Gautier, D., Owen, T., Matthews, H.E., Paubert, G., 1997. Millimeter and submillimeter heterodyne observations of Titan: Retrieval of the vertical profile of HCN and the $^{12}C/^{13}C$ ratio. *Icarus* 126, 170–182.
- Hourdin, F., Talagrand, O., Sadourny, R., Courtin, R., Gautier, D., McKay, C.P., 1995. Numerical simulation of the general circulation of the atmosphere of Titan. *Icarus* 117, 358–374.
- Hourdin, F., Lebonnois, S., Luz, D., Rannou, P., 2004. Titan's stratospheric composition driven by condensation and dynamics. *J. Geophys. Res.* 109, doi:10.1029/2004JE002282. E12005.
- Jacquinet-Husson, N., Scott, N.A., Chédin, A., Garceran, K., Armante, R., Chursin, A.A., Barbe, A., Birk, M., Brown, L.R., Camy-Peyret, C., Claveau, C., Clerbaux, C., Coheur, P.F., Dana, V., Daumont, L., Debacker-Barilly, M.R., Flaud, J.M., Goldman, A., Hamdouni, A., Hess, M., Jacquemart, D., Kopke, P., Mandin, J.Y., Massie, S., Mikhailenko, S., Nemtchinov, V., Nikitin, A., Newnham, D., Perrin, A., Perevalov, V.I., Regalia-Jarlot, L., Rublev, A., Schreier, F., Schult, I., Smith, K.M., Tashkun, S.A., Teffo, J.L., Toth, R.A., Tyuterev, V.G., Vander Auwera, J., Varanasi, P., Wagner, G., 2005. The 2003 edition of the GEISA/IASI spectroscopic database. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Trans.* 95, 429–467.
- Koops, T., Visser, T., Smit, W.M.A., 1984. The harmonic force field and absolute infrared intensities of diacetylene. *J. Mol. Struct.* 125, 179–196.
- Kunde, V.G., Ade, P.A., Barney, R.D., Bergman, D., Bonnal, J.-F., Borelli, R., Boyd, D., Brasunas, J.C., Brown, G., Calcutt, S.B., Carroll, F., Courtin, R., Cretolle, J., Crooke, J.A., Davis, M.A., Edberg, S., Fetting, R., Flasar, M., Glenar, D.A., Graham, S., Hagopian, J.G., Hakun, C.F., Hayes, P.A., Herath, L., Horn, L., Jennings, D.E., Karpati, G., Kellebenz, C., Lakew, B., Lindsay, J., Lohr, J., Lyons, J.J., Martineau, R.J., Martino, A.J., Matsumura, M., McCloskey, J., Melak, T., Michel, G., Morell, A., Mosier, C., Pack, L., Plants,

ANNEXE B

Article : Vinatier et al. (2007b)



Available online at www.sciencedirect.com

Icarus 191 (2007) 712–721

ICARUS

www.elsevier.com/locate/icarus

The Titan $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ and $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ isotopic ratios in HCN from Cassini/CIRS

Sandrine Vinatier^{a,*}, Bruno Bézard^a, Conor A. Nixon^b

^a LESIA, Observatoire de Paris, 5 place Jules Janssen, F-92195 Meudon, France

^b Department of Astronomy, University of Maryland, College Park, MD 20742, USA

Received 20 February 2007; revised 30 May 2007

Available online 4 July 2007

Abstract

We report the detection of H^{13}CN and HC^{15}N in mid-infrared spectra recorded by the Composite Infrared Spectrometer (CIRS) aboard Cassini, along with the determination of the $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ and $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ isotopic ratios. We analyzed two sets of limb spectra recorded near $13\text{--}15^\circ\text{S}$ (Tb flyby) and 83°N (T4 flyby) at 0.5 cm^{-1} resolution. The spectral range $1210\text{--}1310\text{ cm}^{-1}$ was used to retrieve the temperature profile in the range $145\text{--}490\text{ km}$ at 13°S and $165\text{--}300\text{ km}$ at 83°N . These two temperature profiles were then incorporated in the atmospheric model to retrieve the abundance profile of $\text{H}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$, H^{13}CN and HC^{15}N from their bands at 713 , 706 and 711 cm^{-1} , respectively. The HCN abundance profile was retrieved in the range $90\text{--}460\text{ km}$ at 15°S and $165\text{--}305\text{ km}$ at 83°N . There is no evidence for vertical variations of the isotopic ratios. Constraining the isotopic abundance profiles to be proportional to the HCN one, we find $^{12}\text{C}/^{13}\text{C} = 89^{+22}_{-18}$ at 15°S , and 68^{+16}_{-12} at 83°N , two values that are statistically consistent. A combination of these results yields a $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ value equal to 75 ± 12 . This global result, as well as the 15°S one, envelop the value in Titan's methane (82.3 ± 1) [Niemann, H.B., and 17 colleagues, 2005. *Nature* 438, 779–784] measured at 10°S and is slightly lower than the terrestrial inorganic standard value (89). The $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ isotopic ratio is found equal to 56^{+16}_{-13} at 15°S and 56^{+10}_{-9} at 83°N . Combining the two values yields $^{14}\text{N}/^{15}\text{N} = 56 \pm 8$, which corresponds to an enrichment in ^{15}N of about 4.9 compared with the terrestrial ratio. These results agree with the values obtained from previous ground-based millimeter observations [Hidayat, T., Marten, A., Bézard, B., Gautier, D., Owen, T., Matthews, H.E., Paubert, G., 1997. *Icarus* 126, 170–182; Marten, A., Hidayat, T., Biraud, Y., Moreno, R., 2002. *Icarus* 158, 532–544]. The $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ ratio found in HCN is ~ 3 times higher than in N_2 [Niemann, H.B., and 17 colleagues, 2005. *Nature* 438, 779–784], which implies a large fractionation process in the HCN photochemistry.
© 2007 Elsevier Inc. All rights reserved.

Keywords: Titan; Abundances, atmosphere; Infrared observations

1. Introduction

The complex chemistry of Titan's atmosphere was first revealed by Voyager 1 in 1980. It is initiated by the ultraviolet and electron dissociation of its two major constituents, CH_4 and N_2 , and leads to a suite of hydrocarbons and nitriles. The most abundant nitrile in Titan is HCN (hydrogen cyanide). A vertical profile of this molecule was first determined from Voyager 1 limb data at 70°N with a vertical resolution of about 200 km (Coustenis et al., 1991). HCN was also detected from Earth through millimeter observations, and the most recent studies of this molecule were done by Hidayat et al. (1997), Marten et al.

(2002) and Gurwell (2004), who provided disk-averaged vertical mixing ratio profiles.

Millimeter observations allowed the authors to estimate the $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ and $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ isotopic ratio in HCN. The spread in the ground-based $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ratio deduced by Hidayat et al. (1997) and Gurwell (2004) (see Table 1) is large enough to encompass the terrestrial inorganic standard reference value (equal to 89; Fegley, 1995). In situ measurements realized by the Huygens/GCMS and the Cassini/INMS instruments yield comparable $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ isotopic ratios in CH_4 that are slightly lower than the terrestrial value (Niemann et al., 2005; Waite et al., 2005; see Table 1). Consequently, the $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ isotopic ratio in HCN does not seem to be strongly enriched compared to CH_4 . As HCN is formed from the dissociation of N_2 and CH_4 , the latter being the main reservoir of carbon in Titan's atmosphere,

* Corresponding author. Fax: +33 1 45 34 76 83.

E-mail address: sandrine.vinatier@obspm.fr (S. Vinatier).

Table 1

The Earth $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ratio is equal to 89 and the $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ ratio is equal to 272 (Fegley, 1995). Isotopic ratios obtained from ground-based millimeter observations, as well as from CIRS infrared spectra are derived in HCN, whereas GCMS and INMS in situ measurements yield isotopic ratios in CH_4 and N_2

| Observation | $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ | $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ | Altitude | Reference |
|--------------------------------------|--|---|--|---|
| Ground-based millimeter observations | 70–120 132 ± 25, 108 ± 20 | – 94 ± 13, 72 ± 9 60.5–70 | Below 200 km Below 300 km Below 350 km | Hidayat et al. (1997) Gurwell (2004) Marten et al. (2002) |
| In situ Huygens/GCMS | 82.3 ± 1 | – 183 ± 5 | 18.2–6.14 km 40.9–35.9 km | Niemann et al. (2005) |
| In situ Cassini/INMS | 95.6 ± 0.1 81 | 172–215 168–211 | 1200 km (in situ) 0 km (estimation) | Waite et al. (2005) |
| Infrared Cassini/CIRS | 89 $^{+22}_{-18}$ (15° S) 68 $^{+16}_{-12}$ (83° N) | 56 $^{+16}_{-13}$ (15° S) 56 $^{+10}_{-9}$ (83° N) | 150–350 km 165–300 km | This study |

these results imply that carbon does not undergo significant fractionation in the HCN formation process. Moreover, both the relatively short lifetime of methane in Titan's atmosphere (~100 Myr; Yung et al., 1984; Wilson and Atreya, 2004) and the small enrichment of the $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ ratio compared with the $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ ratio in N_2 suggest a continuous or periodic replenishment of CH_4 on Titan at a rate higher than the escape rate.

Marten et al. (2002), using ground-based millimeter observations, showed that the $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ ratio in HCN is enhanced by a factor lying in the range 3.9–4.5 compared to the terrestrial value [$(^{14}\text{N}/^{15}\text{N})_{\oplus} = 272$; Fegley, 1995]. Gurwell (2004) also evaluated the $\text{HC}^{14}\text{N}/\text{HC}^{15}\text{N}$ ratio and concluded that ^{15}N was enriched by a factor of 2.9–3.8 times the Earth value (see Table 1). The nitrogen isotopic ratio was also determined from in situ data recorded by the GCMS. Niemann et al. (2005) retrieved a $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ ratio in N_2 equal to 183 ± 5 , lower than the terrestrial value by a factor ~1.5. Waite et al. (2005), using Cassini/INMS in situ measurements at 1200 km, estimated this same isotopic ratio, and derived results in agreement with the GCMS one (see Table 1). Therefore, the $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ ratio in N_2 (the main reservoir of nitrogen in Titan) is about 3 times lower than measured in HCN. This implies that a fractionation process exists in the HCN chemistry and favors the HC^{15}N isotope. From the $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ isotopic ratio derived in HCN (4.5 times the terrestrial value), Lunine et al. (1999) estimated that the primitive atmosphere of Titan was 20 to 100 times more massive than today. Using $^{15}\text{N}/^{14}\text{N} = 1.5 \times (^{15}\text{N}/^{14}\text{N})_{\oplus}$, Niemann et al. (2005) re-evaluated the mass of the primitive atmosphere to be between 2 and 10 times today's value while Waite et al. (2005) conclude that Titan's atmosphere was at least 50% denser in the past. Most of this primitive atmosphere was thus lost by atmospheric escape over geological times (Lunine et al., 1999).

We report here the detection of H^{13}CN and HC^{15}N in the thermal infrared region from spectra recorded by the infrared spectrometer Cassini/CIRS, which allows for a new determination of the $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ and $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ratios in HCN. We analyze spectra recorded at 13–15° S and 83° N and we investigate the vertical and latitudinal variations of these isotopic ratios. Section 2 presents the observational datasets. Principles of the HCN, HC^{15}N and H^{13}CN mixing ratio profile retrievals, as well as the results, are given in Section 3 and a discussion is presented in Section 4.

2. Observations

CIRS incorporates 3 focal planes, which cover all together the range 7 μm –1 mm. Focal Plane 1 (FP1), with a 3.9-mrad circular field of view (2.5 mrad at FWHM), records spectra in the far-infrared between 10 and 600 cm^{-1} (17–1000 μm). The mid-infrared region is covered by Focal Plane 3 (FP3) and Focal Plane 4 (FP4), which measure the spectral ranges 600–1100 cm^{-1} (9 to 17 μm) and 1100–1500 cm^{-1} (7 to 9 μm), respectively. FP3 and FP4 consist of two parallel linear arrays each composed of ten detectors, with a field of view of 0.273 mrad per detector. This configuration is particularly suitable for limb observations, as the arrays are positioned along a Titan radius, so that each detector has a line of sight probing a particular level (at the tangent height) in Titan's atmosphere. Levels in the lower stratosphere, optically thick in a limb-viewing geometry, can be sounded by nadir observations, albeit with a lower vertical resolution. More details about CIRS are given in Kunde et al. (1996) and Flasar et al. (2004).

2.1. The 15° S selection (Tb flyby)

The first set of limb spectra that we used in this study was acquired during the Tb flyby, on 13 December 2004, with long integration limb observations performed at 0.5 cm^{-1} resolution by FP3 and FP4 over latitudes of 15° S and 13° S, respectively. The mean vertical resolution of the observations, limited by the pixel angular size, is about 33 km. We averaged the individual spectra (~27) recorded by each detector. Eight selections of FP3 spectra were used at mean nominal altitudes of 212, 248, 284, 320, 355, 391, 427 and 463 km; for FP4, the altitudes of the averaged spectra were 205, 240, 276, 312, 348, 384, 420 and 456 km.

We also used selections of 80 nadir spectra recorded by FP3 and FP4 at mean latitudes of 12° S and 9° S, respectively, with a mean emission angle of 37°.

These selections are described in more detail in Vinatier et al. (2007).

2.2. The 83° N selection (T4 flyby)

The second set of limb spectra we analyzed here was acquired during the T4 flyby, on 1 April 2005, over a latitude of

83° N at a resolution of 0.5 cm^{-1} . In contrast to the Tb observations, the vertical resolution of the T4 observations was approximately 10 km. T4 limb spectra are distributed roughly homogeneously in height, so that we averaged spectra in adjacent 20-km bins, which yields an averaged value of 10 spectra per bin. The nominal altitudes of the FP3 and FP4 spectral averages are almost the same and equal to 159, 178, 201, 218, 239, 260, 281 and 298 km.

We did not use nadir observations in our analysis of T4 data for two reasons. The first one is that no nadir spectra were recorded at latitudes above 75° N, and that, at these very high latitudes, the meridional variation of temperature (and probably abundance) seems to be significant in a 5° range (Flasar et al., 2005). The second reason is connected to the high values of emission angles near the north pole (orbits of the spacecraft were still very close to Titan's orbiting plane), so that such observations do not effectively probe levels below those probed by the limb viewing geometry.

3. HCN, H¹³CN and HC¹⁵N mixing ratio retrievals

Emission band intensity depends on both temperature and molecular abundances. Therefore, the determination of the vertical abundance profile requires the knowledge of the temperature profile as a first step.

3.1. Temperature profile retrieval

The vertical temperature profile is determined by using the ν_4 methane (CH₄) emission band at 1305 cm^{-1} ($7.7 \mu\text{m}$) at several altitudes, and by assuming that the CH₄ abundance is constant in the whole stratosphere and equal to 1.41%, as inferred from the GCMS data (Niemann et al., 2005). We use a constrained linear inversion algorithm combining both nadir and limb spectra as described in Vinatier et al. (2007). The principle of the temperature retrieval consists in the modification of an initial temperature profile by the algorithm to minimize the quadratic difference (χ^2) between measured and calculated spectra while not moving too far from the reference profile. The new calculated temperature profile is then used as a first guess of a new iteration process. After 3 iterations, the convergence is ensured, as the χ^2 no longer significantly decreases afterwards. The spectral interval used in the ν_4 CH₄ band is $1215\text{--}1309 \text{ cm}^{-1}$, which covers the Q- and P-branches. CH₄ spectroscopic parameters are extracted from the Geisa 2003 database (Jacquinot-Husson et al., 2005). Collision-induced opacity from N₂–N₂, N₂–CH₄, N₂–H₂ and CH₄–CH₄ are included in the model.

A vertical filtering of the solution is applied and characterized by a correlation length equal to 1 scale height at both latitudes. Parts of the temperature profiles that are not constrained by data blend smoothly in with the initial guess profile used in the retrieval algorithm. The radiative transfer model and the retrieval algorithm are described in more detail in Vinatier et al. (2007).

In the ν_4 CH₄ band, a continuum emission from the stratospheric haze is visible between the CH₄ multiplets, especially

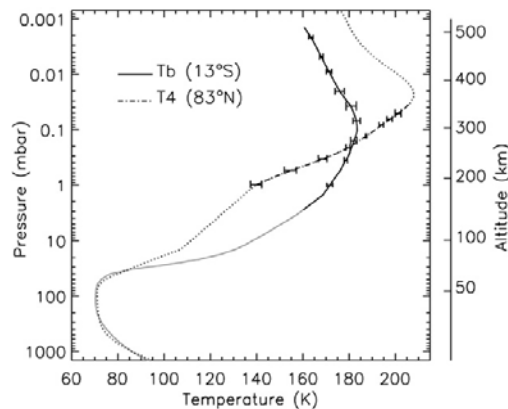


Fig. 1. Temperature profiles retrieved at 13° S (Tb, solid black line) and 83° N (T4, dot-dashed line). Parts of the T4 profile in dotted lines are equal to the initial temperature profile given as input of the inversion algorithm; at 13° S the initial guess profile is that deduced from HASI data (Fulchignoni et al., 2005) (solid gray line). The altitude scale refers to the 15° S profile.

in limb spectra. We used the same haze model based on the DISR/Huygens results (Tomasko et al., 2005) as described in Vinatier et al. (2007), i.e., the haze optical depth is assumed to decrease slowly with height, varying as $p^{0.1}$, up to the 1-mbar level. Above this level, the haze opacity decreases with altitude with the pressure scale height. We adjusted the integrated haze opacity (down to the surface) in order to fit the emission between the CH₄ multiplets in the low frequency wing of the P-branch.

We used the temperature profile deduced from HASI data (Fulchignoni et al., 2005) as an initial guess in the retrieval of our temperature profile at 13° S. At 83° N, our initial thermal profile was equal to the temperature profile retrieved at 80° N by Vinatier et al. (2007). Because no data were available at this latitude above the 0.01-mbar level (300 km), the stratopause in the retrieved thermal profile is not constrained.

The retrieved temperature profiles are plotted in Fig. 1. The 13° S profile (solid black line) displays information between 3 mbar (145 km) and 0.002 mbar (490 km), and at 83° N, it is constrained between 1 mbar (165 km) and 0.05 mbar (300 km). Error bars are given at pressures that correspond to the maxima of the inversion kernels at 1305 cm^{-1} . These error bars are the quadratic sum of an error due to noise and another one due to limb altitude uncertainties (see below for more details). Error bars due to noise are calculated from the correlation matrices in the inversion algorithm, based on the noise equivalent spectral radiance (NESR) of the spectra, which is estimated from deep space spectra. As the rms of the residuals of the fits are always systematically larger than the NESR, we scaled this error by the factor rms/NESR (see Vinatier et al., 2007 for more details). We did not take into account the uncertainty of the methane abundance ($1.41 \pm 0.07 \times 10^{-2}$; Niemann et al., 2005), because it has a very small effect, within the error arising from the other sources.

In our temperature retrieval, we applied a correction in height that results from both the pointing error of CIRS and

assumptions in the temperature profile at deeper levels that are not constrained by CIRS data. We were able to determine this correction by fitting the P - and Q -branches of the ν_4 CH_4 band, as the shape of the Q -branch and also the relative intensity of the P - (or R -) and Q -branches are very sensitive to the viewing altitude. The method used here is the same as in Vinatier et al. (2007). For the Tb profile (13° S), we found a correction of $+30 \pm 7$ km compared to nominal data. For T4 (83° N), the correction was $+5 \pm 7$ km. The altitudes indicated in the figures of this paper take account of this altitude shift. More details about this altitude correction and its effect are given in Vinatier et al. (2007).

Another important point concerns the retrieval of the temperature profile at 83° N. The Q -branch is optically thick on several averaged limb spectra and the deepest level probed is around 0.13 mbar (250 km), whereas the P -branch is optically thin down to the 1-mbar level (164 km). As a result, and particularly for the Q -branch, the region of maximum information is not located around the tangent point, but closer to the spacecraft along the ray path and therefore at higher altitude. Since Cassini orbits were nearly in Titan's orbital plane during the two flybys studied here, such limb observations acquired near 83° N probed lower latitudes (down to 69° N, as calculated from the geometry of the ray path). As a consequence, the temperature profile below 250 km is a "composite" profile that includes information from the Q -branch originating from latitudes less than 83° N, and information from the P -branch related to the latitudes at the tangent points (i.e., 83° N). This problem is much less pronounced for targeted latitudes close to the equator (which is the case for Tb) because the limb observation geometry is different: the probed latitude does not vary significantly (even for optically thick lines of sight), whereas the longitude does. Previous studies showed that temperature and abundance present small longitudinal variations (Flasar et al., 2005; Teanby et al., 2006; Coustenis et al., 2007) but large latitudinal variations, especially towards high latitudes.

3.2. Mixing ratio profile retrieval

The retrieved thermal profile is then used to model observed spectra in the range $700\text{--}730\text{ cm}^{-1}$, which includes the emission bands of $\text{H}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$ (713 cm^{-1}), H^{13}CN (706 cm^{-1}), and HC^{15}N (711 cm^{-1}). Mixing ratio profiles were derived from limb and nadir spectra by using the same inversion method as for temperature (described above), but by replacing the temperature by the logarithm of the mixing ratio of the absorbers studied [see also Vinatier et al. (2007) for more details concerning the method]. Up to three vertical profiles can be retrieved at the same time by the algorithm. To reproduce satisfactorily the continuum between molecular emission bands, we always retrieve the haze vertical opacity profile simultaneously with the mixing ratio profiles of the molecules we consider. We treat the haze opacity as solely absorption with no scattering, and assume a gray variation in each spectral range considered for the retrievals.

Synthetic spectra and inversion kernels are computed from a line-by-line radiative transfer program. Collision-induced opac-

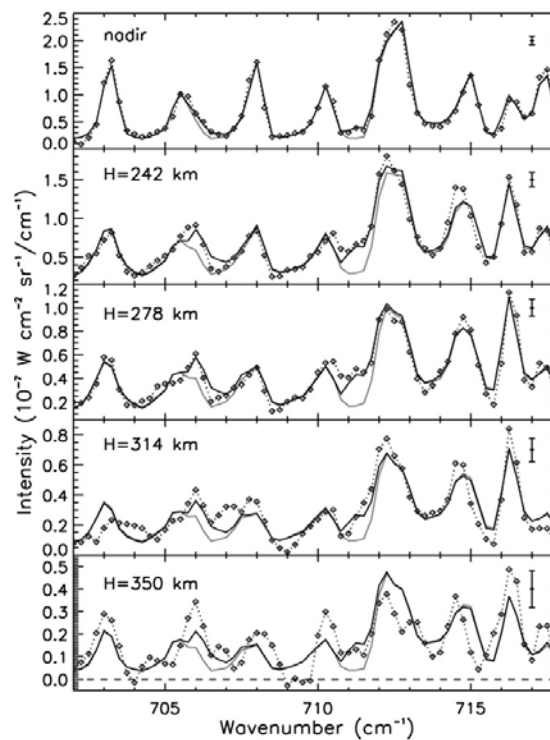


Fig. 2. Comparison of the observed spectra (dotted line with diamonds) with calculated spectra that include the HCN isotope emission bands (solid line) and synthetic spectra without the isotope emissions (solid gray line) for nadir and 4 limb spectra at 15° S. Mixing ratio profiles of HCN used here is displayed in Fig. 6, the isotopic vertical mixing ratio profiles are proportional to the HCN one with the ratios $^{12}\text{C}/^{13}\text{C} = 89$ and $^{14}\text{N}/^{15}\text{N} = 56$. Detections of H^{13}CN at 706 cm^{-1} and HC^{15}N at 711 cm^{-1} are clear on the nadir and several limb spectra. Error bars equal to the rms of the residuals are indicated for each spectrum (top right).

ity from $\text{N}_2\text{--N}_2$, $\text{N}_2\text{--CH}_4$, $\text{N}_2\text{--H}_2$ and $\text{CH}_4\text{--CH}_4$ was included in the model. HCN spectroscopic parameters were extracted from HITRAN 2004 (Rothman et al., 2005), which includes the H^{13}CN and HC^{15}N isotopes. We assume that these two isotopes follows the same saturation law as HCN in the lower part of the stratosphere. In the spectral range studied here ($700\text{--}730\text{ cm}^{-1}$), C_2H_2 also displays many strong emission features from its ν_5 band (with its Q -branch at 729 cm^{-1}). Its spectroscopic parameters were extracted from the Geisa 2003 database (Jacquinot-Husson et al., 2005). Therefore, we first retrieved the mixing ratio profiles of C_2H_2 at both latitudes and incorporated them in the atmospheric models used to retrieve the mixing ratio profile of HCN and its two isotopes.

A vertical filtering of the solution is applied with a correlation length equal to 3 scale heights at 15° S and 4 scale heights at 83° N for HCN and its 2 isotopes. This choice avoids the presence of strong oscillations on the retrieved vertical abundance profiles that appear with lower vertical filtering (e.g., of about 1 scale height). Arguments for this choice are detailed in Vinatier et al. (2007). The main point is that this large fil-

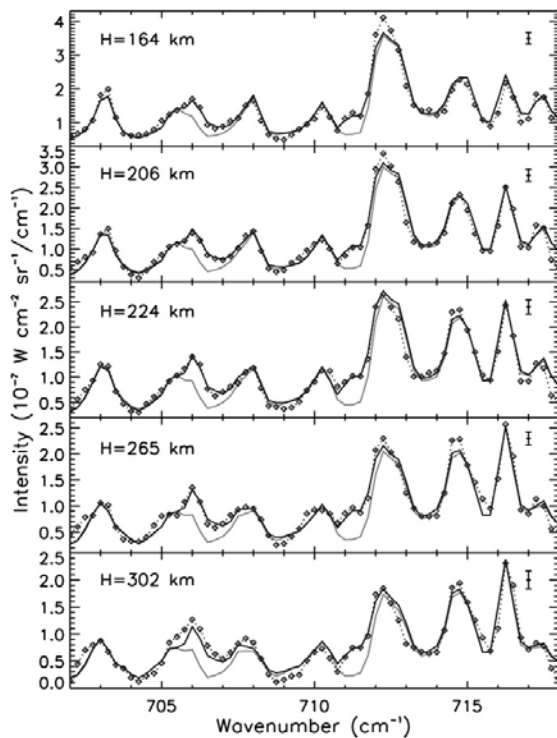


Fig. 3. Comparison of the observed spectra (dotted line with diamonds) with calculated spectra that include H^{13}CN and HC^{15}N emission bands (solid line) and synthetic spectra without the isotope emissions (solid gray line), at 83°N , for 5 limb spectra. Mixing ratio profiles of HCN used here is displayed in Fig. 6, the isotopic vertical mixing ratio profiles are proportional to the HCN one with the ratios $^{12}\text{C}/^{13}\text{C} = 68$ and $^{14}\text{N}/^{15}\text{N} = 56$. H^{13}CN and HC^{15}N are well detectable on several limb spectra. Error bars equal to the rms of the residuals are indicated for each spectrum (top right).

tering does not significantly degrade the fits beyond the noise level.

3.3. Results

Figs. 2 and 3 show some fits of the observed spectra at 15°S and 83°N in the spectral range $701\text{--}718\text{ cm}^{-1}$. Comparisons of observed spectra with spectra calculated without the HCN isotope emission bands (solid gray line) and synthetic spectra including them (solid black lines) clearly validate the detection of H^{13}CN and HC^{15}N in the nadir and several limb spectra. Note that the altitudes are corrected by the same altitude shift as deduced from the ν_4 CH_4 band (see above).

3.3.1. The $\text{H}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$ retrieved vertical profile

The inversion kernels of HCN are plotted in Figs. 4 and 5, at 15°S and 83°N , respectively. The inversion kernels give the dependence of the emitted intensity upon the logarithm of the mixing ratio as a function of altitude and thus represent the information content of the spectra. In each figure, the HCN inversion kernels calculated at 712.25 cm^{-1} (dashed line) are

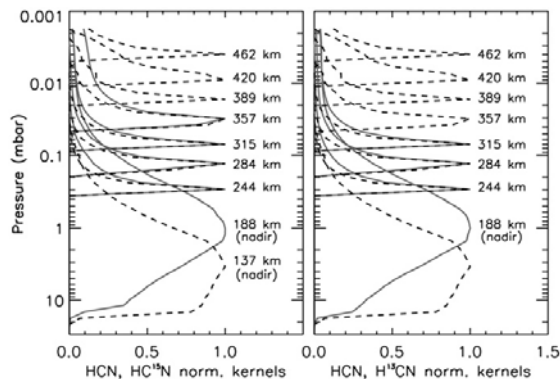


Fig. 4. Normalized inversion kernels of HC^{15}N at 711.25 cm^{-1} (left panel, solid gray line) and H^{13}CN at 706 cm^{-1} (right panel, solid gray line) at 15°S , compared in both cases with the $\text{H}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$ normalized kernels at 712.25 cm^{-1} (dashed line). Altitudes are given where kernels reach their maxima. The corresponding HCN vertical mixing ratio profile is plotted in Fig. 6. The corresponding H^{13}CN and HC^{15}N retrieved vertical profiles are proportional to the HCN one with $^{12}\text{C}/^{13}\text{C} = 89$ and $^{14}\text{N}/^{15}\text{N} = 56$.

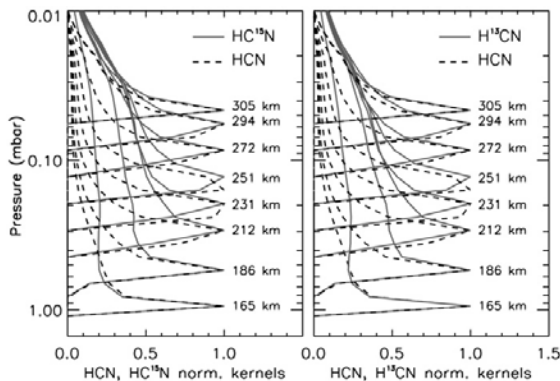


Fig. 5. Normalized inversion kernels of HC^{15}N at 711.25 cm^{-1} (left panel, solid gray line) and H^{13}CN at 706 cm^{-1} (right panel, solid gray line) at 83°N , compared in both cases with the HCN normalized kernels at 712.25 cm^{-1} (dashed line). Altitudes are given at kernel maxima of H^{13}CN and HC^{15}N . The corresponding HCN vertical mixing ratio profile is plotted in Fig. 6. The corresponding H^{13}CN and HC^{15}N retrieved vertical profiles are proportional to the HCN one with $^{12}\text{C}/^{13}\text{C} = 68$ and $^{14}\text{N}/^{15}\text{N} = 56$.

plotted in both panels for comparison with the H^{13}CN kernels at 706 cm^{-1} (right panel, solid gray line) and HC^{15}N kernels at 711.25 cm^{-1} (left panel, solid gray line) calculated with isotope abundance profiles proportional to the HCN one (see Section 3.3.2).

At 15°S , we used both nadir and limb spectra to retrieve the abundance profile of HCN and its isotopes. At 712.25 cm^{-1} (HCN Q -branch), the nadir spectrum probes levels (given by the full width of the kernels at half maximum) between 14 mbar (87 km) and 0.7 mbar (206 km) with a maximum at 3 mbar (37 km). To retrieve the HCN profile, we used 7 limb spectra that probe levels between 0.3 mbar (244 km) and 0.004 mbar (462 km).

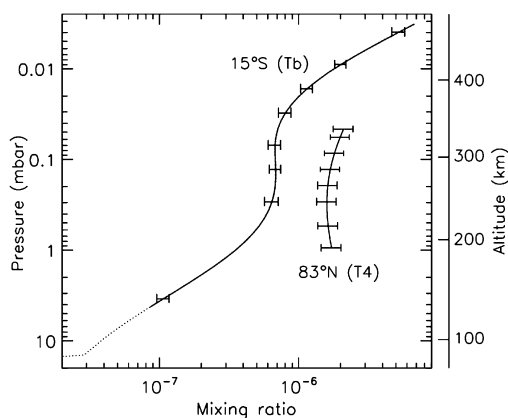


Fig. 6. Retrieved mixing ratio profiles of HCN at 15°S and 83°N . Parts where the temperature profile is not constrained are displayed as dotted lines. Error bars (correlated between levels through the filtering of the solution) are plotted at levels where kernels reach their maxima (see Figs. 4 and 5). The altitude scale refers to the Tb profile.

At 83°N , HCN was inverted from 8 limb spectra probing levels between 0.95 mbar (165 km) and 0.05 mbar (305 km). Its emission is optically thin on all limb spectra. Note that the temperature profile at 83°N probes a large latitude range (between 69°N and 83°N) below the 250 km level (0.13 mbar), which may introduce some uncertainties on the abundance profile below this level.

Fig. 6 gives the vertical profiles of HCN retrieved at 15°S and 83°N . Error bars for HCN are given at levels where its kernels are maximal. Note that the errors are correlated over ~ 3 scale heights due to the filtering of the solution. These errors are the quadratic sum of an error due to noise, temperature uncertainties, and uncertainties in the altitude correction (see Section 3.1) equal to about ± 7 km. Uncertainties due to noise are calculated in the same way as for the temperature profile, and we also multiplied this error by the factor rms/NESR. The error due to temperature uncertainties is estimated by retrieving extreme abundance profiles that use the minimum and maximum temperature profiles (defined by the temperature errors, see Fig. 1). The estimation of errors due to the altitude correction is performed by retrieving the abundance profile successively with the $+7$ km and -7 km shift while using the inverted temperature profile with the corresponding viewing altitudes.

3.3.2. Isotopic ratio vertical variations

We investigated the vertical variation of the H^{13}CN and HC^{15}N mixing ratio and found that vertical profiles proportional to the HCN one yield good fits of the data. The results of this analysis concerning $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ are given in Fig. 7, which displays the comparison between two $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ isotopic ratio vertical distributions calculated at 15°S . The first one, in solid black line, is deduced from HCN and HC^{15}N vertical mixing ratio profiles retrieved with a correlation length equal to 3 scale heights ($L = 3$). The second one, in dotted-dashed line, is deduced from the same retrieved HCN vertical abundance profile but with a HC^{15}N mixing ratio profile proportional to the HCN

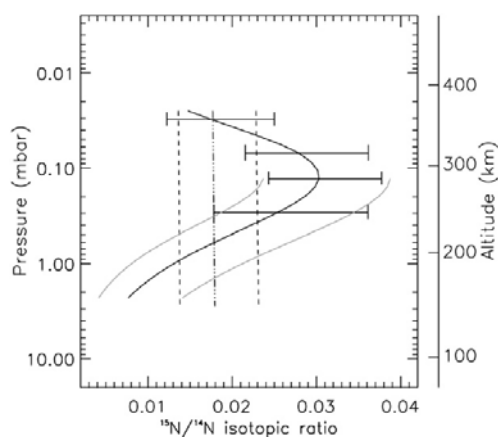


Fig. 7. Vertical distribution of the $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ isotopic ratio at 15°S . The solid black line corresponds to the isotopic ratio deduced from the vertical abundance profile of HCN displayed in Fig. 6 and a HC^{15}N profile retrieved with a correlation length equal to 3 scale heights. Error bars are plotted at the HC^{15}N kernel maxima. The gray envelope corresponds to the error deduced for the nadir viewing. The dot-dashed line presents the isotopic ratio calculated using the same HCN abundance profile and a HC^{15}N profile proportional to the HCN one. The dashed lines represent the error envelope of this constant-with-height isotopic ratio.

one (i.e., $L = \infty$), which yields to a constant $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ ratio with height. Taken at face value, the isotopic ratio profile retrieved with $L = 3$ would suggest an increase of the $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ ratio by a factor of 1.7 between 200 and 300 km. However, the error bars are rather large and the two retrieved isotopic ratio profiles with $L = 3$ and $L = \infty$ yield similar fits of the data and almost the same reduced χ^2 (χ^2/n with $n = 35$, the number of independent spectral points used for the retrieval) for all spectra. As an example, the reduced χ^2 of the fit of the nadir spectrum with the scaled HC^{15}N profile is equal to 1.018 times that corresponding to the $L = 3$ profile, and for the limb spectrum at 284 km (where profiles differ the most), the reduced χ^2 for the scaled profile is equal to 1.027 times that for the $L = 3$ vertical profile. Thus, the vertical gradient in the $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ ratio, retrieved with a relatively small correlation length is not statistically significant. Similar tests were made for the vertical isotopic ratio profile of $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ at 15°S , and the two isotopic ratios at 83°N , and we found that isotope vertical profiles proportional to the $\text{H}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$ one gave very satisfactory fits of data (with a reduced χ^2 always lower than 1.021 times the one corresponding to the spectral fits with isotopic profiles retrieved with $L = 3$ or 4).

Additionally, we made several tests to investigate the vertical variations of the isotopic ratios. We tested different vertical gradients for the isotope vertical profiles (keeping the same HCN profile as displayed in Fig. 6). Considering the signal-to-noise ratio, we were not able to constrain any possible increase with height of the $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ and $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ isotopic ratios, but we could derive a $3\text{-}\sigma$ upper limit of their decrease with height. The $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ vertical variation is not constrained at 15°S , but at 83°N , we found that it cannot decrease by more than a factor of 4 between 170 and 300 km. Concerning the $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ isotopic

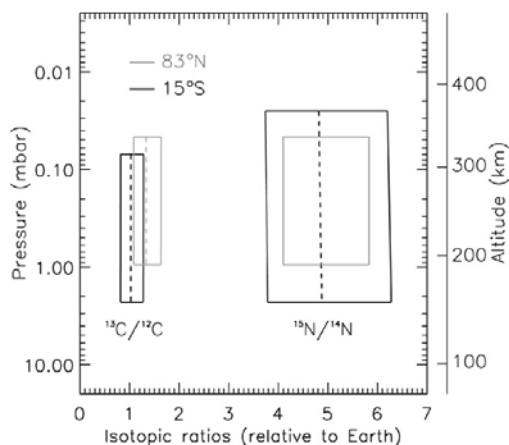


Fig. 8. Mean values of the $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ and $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ isotopic ratios (dashed lines) at 15°S (black) and 83°N (gray) relative to the Earth isotopic ratios. The $1\text{-}\sigma$ error envelopes are indicated as solid lines. The altitude scale refers to the 15°S profile.

ratio, we conclude that it cannot decrease by more than a factor of 2.5 between 150 and 250 km at 15°S , and a factor of 2 between 170 and 300 km at 83°N .

As no vertical variation of these isotopic ratios is evidenced by the observations, we forced the retrieved vertical profiles of H^{13}CN and HC^{15}N to be proportional to the HCN one in the retrieval process.

3.3.3. The $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ isotopic ratio

The inversion kernels corresponding to the retrieved H^{13}CN mixing ratio profile (proportional to the HCN one) are plotted in Figs. 4 and 5, at 15°S and 83°N , respectively. At 15°S , like for the HCN inversion, we used both nadir and limb spectra to retrieve the abundance profile of this isotope. The nadir emission of H^{13}CN at 706 cm^{-1} probes levels in the 5–0.20 mbar range (122–265 km) with a maximum at 1 mbar (188 km). The highest part of the H^{13}CN mixing ratio profile is constrained by the emission from 3 limb spectra that probe the 0.3–0.07 mbar range (244–315 km); at higher levels, the signal-to-noise ratio becomes too weak (see Fig. 2 at 350 km).

At 83°N , H^{13}CN was inverted from 8 limb spectra probing levels between 0.95 mbar (165 km) and 0.05 mbar (305 km). Their emissions are optically thin on all limb spectra.

Fig. 8 displays the $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ isotopic ratios at 15°S (black) and 83°N (gray) relative to the Earth value (dotted lines) along with the corresponding $1\text{-}\sigma$ error envelopes (solid line). These error envelopes include uncertainties due to noise, uncertainties on temperature and altitude correction. At 15°S , $^{13}\text{C}/^{12}\text{C} = (1_{-0.2}^{+0.3}) \times [^{13}\text{C}/^{12}\text{C}]_{\oplus}$ and at 83°N , $^{13}\text{C}/^{12}\text{C} = (1.3 \pm 0.3) \times [^{13}\text{C}/^{12}\text{C}]_{\oplus}$.

3.3.4. The $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ isotopic ratio

Figs. 4 and 5 display the kernels corresponding to the HC^{15}N mixing ratio profile (proportional to the HCN one) at 15°S and 83°N , respectively. The HC^{15}N mixing ratio profile is de-

duced by using the nadir and 4 limb spectra that probe up to 0.04 mbar (357 km). At 711.25 cm^{-1} the nadir emission probes levels comparable to those of the H^{13}CN .

At 83°N , HC^{15}N was inverted from 8 limb spectra probing levels between 0.95 mbar (165 km) and 0.05 mbar (305 km).

The deduced $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ isotopic ratios at 15°S and 83°N , in Earth value units, are presented in Fig. 8. At both latitudes, the central value of $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ (dashed lines) is equal to 4.9 times the Earth ratio, but with differences in error bars and altitude ranges. At 15°S , $^{15}\text{N}/^{14}\text{N} = (4.9_{-1.0}^{+1.5}) \times [^{15}\text{N}/^{14}\text{N}]_{\oplus}$ and at 83°N it is equal to $4.9_{-0.7}^{+0.9}$ times the Earth isotopic ratio.

4. Discussion

4.1. Temperature profile and HCN vertical mixing ratio profile

As described in Section 3.1, the first guess used in the retrieval process is the HASI temperature profile, which differs from that used in Vinatier et al. (2007). Also, we used a methane abundance of 1.41% as inferred from the GCMS aboard Huygens, whereas Vinatier et al. (2007) chose 1.6% as inferred from CIRS (Flasar et al., 2005). Concerning the temperature profile at 83°N , it can be compared with the thermal profile retrieved at 80°N by Vinatier et al. (2007) from another set of limb spectra recorded earlier in the Cassini mission (during the T3 flyby). The profile retrieved here is generally in very good agreement with their profile in the range where there is information (0.05–1 mbar), except near the 1-mbar level where the temperature in this study is lower by 9 K than what was found from the T3 flyby. The HCN vertical profile we found in this study at 15°S is an update of the vertical profile found by Vinatier et al. (2007), with slight differences due to the temperature profile in the atmospheric model.

At 83°N , the HCN vertical mixing ratio is in agreement with the one derived in our previous work at 80°N (Vinatier et al., 2007), despite the difference in the methane abundance (and thus in the temperature profile) between the two investigations.

We can compare the vertical HCN profile retrieved at 15°S with the profile deduced from ground-based millimeter observations (disk-averaged), which are more heavily weighted towards low latitudes. Our HCN profile is very close to the Hidayat et al. (1997) profile below 200 km, but becomes larger at higher levels (by almost a factor of 2 at 300 km). On the other hand, it is very close to the Marten et al. (2002) profile below 400 km, and larger at higher altitudes.

4.2. The $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ isotopic ratio

We have investigated the vertical variations of the $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ isotopic ratio at 15°S and 83°N and conclude that it does not decrease by more than a factor of 2.5 in the 150–250 km range at 15°S , and a factor of 2 in the 170–300 km range at 83°N . We therefore constrained the retrieved H^{13}CN vertical profiles to be proportional to the HCN one, which yields good fits of the data within noise level.

At 15°S , we found that the $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ratio is equal 89_{-18}^{+22} (i.e., $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}_{15^\circ\text{S}} = (1_{-0.2}^{+0.3}) \times [^{13}\text{C}/^{12}\text{C}]_{\oplus}$). At 83°N , the retrieved

$^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ isotopic ratio is equal to 68^{+16}_{-12} (which corresponds to $[\text{C}^{13}/\text{C}^{12}]_{83^\circ\text{N}} = (1.3 \pm 0.3) \times [\text{C}^{13}/\text{C}^{12}]_{\oplus}$). The two determinations are thus consistent within error bars. If we combine the two values, we obtain $^{12}\text{C}/^{13}\text{C} = 75 \pm 12$. Our results obtained near the equator can be compared with the disk-averaged $\text{H}^{12}\text{CN}/\text{H}^{13}\text{CN}$ isotopic ratio obtained from ground-based millimeter observations (as most of the information originates from equatorial regions). Hidayat et al. (1997), from their analysis of the (4–3) HC^{13}N rotational line at 345.34 GHz recorded at the JCMT (Mauna Kea, Hawaii), found that for altitudes below 200 km the $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ratio lies between 70 and 120, in agreement with our results (63–87). Gurwell (2004) also determined the $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ isotopic ratio in HCN from the same rotational line observed at the Submillimeter Array. He inferred two different results, depending on the temperature profile used in the radiative transfer model. Assuming the Coustenis and Bézard (1995) temperature profile, he retrieved $^{12}\text{C}/^{13}\text{C} = 132 \pm 25$, while using Lellouch's (1990) thermal profile leads to $^{12}\text{C}/^{13}\text{C} = 108 \pm 20$. The latter value agrees with our result. However, it should be noticed that the analysis of the ground-based disk-averaged observations assume that the HCN profile does not vary with latitude, which is not true from Voyager and Cassini observations. The analysis of ground based millimeter observations could probably be improved by considering a latitudinal gradient in the HCN distribution.

The $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ isotopic ratio was also determined in situ by the GCMS instrument during the Huygens descent in Titan's atmosphere on 14 January 2005. From the methane measurements, Niemann et al. (2005) found a $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ isotopic ratio equal to 82.3 ± 1 between 18 and 6 km around 10°S . Waite et al. (2005), from their study of the Cassini/INMS in situ data at 1200 km derived $^{12}\text{CH}_4/^{13}\text{CH}_4 = 95.6 \pm 0.1$, which leads to an estimated value equal to 81 at the surface, in agreement with the GCMS results. The range of the carbon isotopic ratio found in HCN in this study (between 100 and 350 km) envelops the in situ results relative to CH_4 (the main reservoir of carbon in Titan's atmosphere). As a consequence, it does not appear that carbon undergoes significant fractionation in the HCN formation process.

4.3. The $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ isotopic ratio

The vertical variations of the $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ isotopic ratio were explored at both latitudes. At 15°S , because of the poor signal-to-noise ratio, they cannot be constrained, whereas at 83°N , we set an upper limit of a factor of 4 on its vertical decrease between 170 and 300 km. We then forced the retrieved HC^{15}N profiles to be proportional to the HCN one, which allows a good reproduction of the data within noise level.

At 15°S , we retrieved a $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ isotopic ratio equal to 56^{+16}_{-13} (i.e., $[\text{N}^{15}/\text{N}^{14}]_{15^\circ\text{S}} = (4.9^{+1.5}_{-1.0}) \times [\text{N}^{15}/\text{N}^{14}]_{\oplus}$), and at 83°N , we retrieved $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ equal to 56^{+10}_{-9} (i.e., $[\text{N}^{15}/\text{N}^{14}]_{83^\circ\text{N}} = (4.9^{+0.9}_{-0.7}) \times [\text{N}^{15}/\text{N}^{14}]_{\oplus}$). Therefore no latitudinal variations are observed between 15°S and 83°N . If we combine these two results, we obtain $^{14}\text{N}/^{15}\text{N} = 56 \pm 8$.

This value can be compared with the $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ isotopic ratio deduced from ground-based millimeter observations.

Marten et al. (2002) studied HCN (at 88.6 GHz) and HC^{15}N (258.16 GHz) among other nitriles and deduced a value for the $\text{HC}^{14}\text{N}/\text{HC}^{15}\text{N}$ ratio in the range 60–70. In this study, we obtain an averaged value that lies between 48 and 64, which is in agreement with Marten et al.'s results. Gurwell (2004) also retrieved the $\text{HC}^{14}\text{N}/\text{HC}^{15}\text{N}$ isotopic ratio from millimeter observations assuming two different temperature profiles. He derived $^{14}\text{N}/^{15}\text{N} = 94 \pm 13$ with the Coustenis and Bézard (1995) thermal profile and $^{14}\text{N}/^{15}\text{N} = 72 \pm 9$ with that from Lellouch (1990). Our results agree with Gurwell's second result within error bars.

The $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ isotopic ratio was also determined by the Huygens/GCMS instrument from N_2 measurements. Niemann et al. (2005) deduced an isotopic ratio equal to 183 ± 5 (between 36 and 41 km), which corresponds to an enrichment of ^{15}N compared to ^{14}N equal to about 1.5 times the terrestrial value. $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ was also derived from in situ Cassini/INMS measurements at 1200 km by Waite et al. (2005) who found a value in the range 172–215, corresponding to an estimated value at the surface in the range 168–211, encompassing the GCMS values. The ^{15}N enrichment in HCN is thus higher than in N_2 by a factor of about 3 (considering the GCMS results). As N_2 is the main reservoir of nitrogen in Titan's atmosphere, the higher $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ ratio in HCN, a product of the coupled photochemistry of N_2 and CH_4 , implies that fractionation processes occur in Titan's atmosphere, which favor HC^{15}N compared to HC^{14}N .

As a first step, HCN formation involves the dissociation of N_2 by extreme UV photons and by electrons. Nitrogen atoms in the ground state (^4S) then react with CH_3 radicals, a direct product of methane photolysis, to form HCN (e.g., Wilson and Atreya, 2004). Reaction of methane with N^+ ions, formed from electron impact and photoionization of N_2 , provides another pathway for HCN production. HCN is then diffused to the lower atmosphere and eventually lost by condensation. Incorporation in the photochemical haze has also been proposed as an important loss mechanism for HCN (McKay, 1996; Lara et al., 1999).

Fractionation mechanisms may operate at these different steps. The first one, photodissociation of N_2 , may actually be quite efficient. Dissociation of N_2 occurs at wavelengths lower than 100 nm, mostly by a predissociation mechanism, in which a transition occurs to Rydberg and valence states. These states have a long enough lifetime to exhibit vibrational and rotational structure and thus relatively narrow absorption lines (e.g., Haverd et al., 2005; Lewis et al., 2005; Stark et al., 2005). The isotopic shift of the $^{14}\text{N}^{15}\text{N}$ and $^{15}\text{N}^{15}\text{N}$ vibration bands relative to the $^{14}\text{N}_2$ bands can reach a few tens of cm^{-1} (Sprengers et al., 2003; Lewis et al., 2005), larger than the linewidth. For continuum irradiation from the Sun, wavelengths corresponding to $^{14}\text{N}_2$ line absorption are more rapidly attenuated than those corresponding to the less abundant isotopes. The latter can then undergo photodissociation at levels deeper than $^{14}\text{N}_2$ that is self-shielded. This process can potentially increase the $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ atom ratio but precise line-by-line calculations, taking into account the solar spectrum, are needed to assess its fractionation effect in Titan.

Fractionation might also occur in the formation reactions themselves (i.e., mostly $^{45}\text{N} + \text{CH}_3$ according to Wilson and Atreya, 2004) but, to our knowledge, such effects were investigated neither through laboratory measurements nor ab initio calculations. HCN condensation in the lower stratosphere is expected to deplete the heavy isotope in the gas phase as compared with the solid due to isotopic effects similar to those observed for H_2O on Earth. This loss mechanism cannot therefore explain the observed enrichment in (gaseous) HC^{15}N . Photolysis is only a minor loss process in Titan's atmosphere as most of the CN radicals are recycled back to HCN. According to Waite et al. (2005), the isotopic fractionation induced by the HCN photodissociation is not sufficient to account for the observed enrichment in HC^{15}N . Finally, a possibility is the formation of the photochemical haze if it is a significant loss process for HCN as advocated by McKay (1996), Lara et al. (1999) and Vinatier et al. (2007). Unfortunately, here again, the appropriate laboratory measurements are missing.

5. Conclusions

High-spatial resolution and vertically-resolved data recorded by CIRS allowed us to detect HC^{15}N and H^{13}CN in the infrared range and to retrieve the $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ and $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ isotopic ratios. The vertical variations of the $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ ratio cannot be constrained at 15°S , while at 83°N an upper limit of its decrease between 170 and 300 km was set to a factor of 4. As concerns $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$, its decrease with height at 15°S cannot exceed a factor of 2.5 between 150 and 250 km, and a factor of 2 between 170 and 300 km at 83°N . Assuming no vertical variations, the $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ratios inferred at 15°S and 83°N agree within error bars (89^{+22}_{-18} at 15°S and 68^{+16}_{-12} at 83°N). The $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ ratio was found equal to 56^{+16}_{-13} at 15°S and 56^{+10}_{-9} at 83°N , i.e., enriched by a factor of 4.9 compared to the Earth. The isotopic ratio values that we obtained here from Cassini/CIRS infrared spectra confirm values derived from previous ground-based millimeter observations. The range in the $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ratio we derived here in HCN encompasses the carbon isotopic ratio in CH_4 deduced in situ from Huygens/GCMS data (82.3 ± 1). We find an enrichment of ^{15}N in HCN that is higher by a factor of about 3 than that in N_2 obtained from in situ measurements, implying the existence of fractionation processes in the HCN photochemistry. Simulations as well as laboratory experiments will be necessary to identify and quantify these processes. Moreover, until the end of Cassini mission, CIRS will extend its coverage over all Titan's surface, which will permit us to improve the accuracy of these isotopic ratios both latitudinally and vertically.

Acknowledgments

We are grateful to the CIRS Investigation Team for their involvement in planning observational sequences and data reduction. The study presented here could not have been done without them. We also thank Tobias Owen for his helpful comments. This research was funded by the Centre National d'Études Spatiales (CNES), the Centre National de la Recherche

Scientifique (CNRS) and the Programme National de Planétologie (PNP) de l'INSU.

References

- Coustenis, A., Bézard, B., 1995. Titan's atmosphere from Voyager infrared observations. IV. Latitudinal variations of temperature and composition. *Icarus* 115, 126–140.
- Coustenis, A., Bézard, B., Gautier, D., Marten, A., Samuelson, R., 1991. Titan's atmosphere from Voyager infrared observations. III. Vertical contributions of hydrocarbons and nitriles near Titan's north pole. *Icarus* 89, 152–167.
- Coustenis, A., and 24 colleagues, 2007. The composition of Titan's stratosphere from Cassini/CIRS mid-infrared spectra. *Icarus* 189, 35–62.
- Fegley, B., 1995. Global Earth physics. In: Ahrens, T. (Ed.), *A Handbook of Physical Constants*. American Geophysical Publication, Washington, DC, pp. 320–345.
- Flasar, F.M., and 24 colleagues, 2004. Exploring the Saturn system in the thermal infrared: The Composite Infrared Spectrometer. *Space Sci. Rev.* 115, 169–297.
- Flasar, F.M., and 44 colleagues, 2005. Titan's atmospheric temperatures, winds, and composition. *Science* 308, 975–978.
- Fulchignoni, M., and 42 colleagues, 2005. In situ measurements of the physical characteristics of Titan's environment. *Nature* 438, 785–791.
- Gurwell, M.A., 2004. Submillimeter observations of Titan: Global measures of stratospheric temperature, CO, HCN, HC_3N , and the isotopic ratios $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ and $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$. *Astrophys. J.* 616, L7–L10.
- Haverd, V.E., Lewis, B.R., Gibson, S.T., Stark, G., 2005. Rotational effects in the band oscillator strengths and predissociation linewidths for the lowest $^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$ transitions of N_2 . *J. Chem. Phys.* 123, 214304.
- Hidayat, T., Marten, A., Bézard, B., Gautier, D., Owen, T., Matthews, H.E., Paubert, G., 1997. Millimeter and submillimeter heterodyne observations of Titan: Retrieval of the vertical profile of HCN and the $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ratio. *Icarus* 126, 170–182.
- Jacquinet-Husson, N., and 41 colleagues, 2005. The 2003 edition of the GEISA/IASI spectroscopic database. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Trans.* 95, 429–467.
- Kunde, V.G., and 50 colleagues, 1996. Cassini infrared Fourier spectroscopic investigation. In: Horn (Ed.), *Cassini/Huygens: A Mission to the Saturnian System*. In: Proc. SPIE, vol. 2803, pp. 162–177.
- Lara, L.-M., Lellouch, E., Shematovich, V., 1999. Titan's atmospheric haze: The case for HCN incorporation. *Astron. Astrophys.* 341, 312–317.
- Lellouch, E., 1990. Atmospheric models of Titan and Triton. *Ann. Geophys.* 8, 653–660.
- Lewis, B.R., Gibson, S.T., Zhang, W., Lefebvre-Brion, H., Robbe, J.-M., 2005. Predissociation mechanism for the lowest $^1\Pi_u$ states of N_2 . *J. Chem. Phys.* 122, 144302.
- Lunine, J.I., Yung, Y.L., Lorenz, R.D., 1999. On the volatile inventory of Titan from isotopic abundances in nitrogen and methane. *Planet. Space Sci.* 47, 1291–1303.
- Marten, A., Hidayat, T., Biraud, Y., Moreno, R., 2002. New millimeter heterodyne observations of Titan: Vertical distributions of nitriles HCN, HC_3N , CH_3CN , and the isotopic ratio $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ in its atmosphere. *Icarus* 158, 532–544.
- McKay, C.P., 1996. Elemental composition, solubility, and optical properties of Titan's organic haze. *Planet. Space Sci.* 44, 741–747.
- Niemann, H.B., and 17 colleagues, 2005. The abundances of constituents of Titan's atmosphere from the GCMS instrument on the Huygens probe. *Nature* 438, 779–784.
- Rothman, L.S., and 29 colleagues, 2005. The HITRAN 2004 molecular spectroscopic database. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Trans.* 96, 139–204.
- Sprengers, J.P., Ubachs, W., Baldwin, K.G.H., Lewis, B.R., Tchang-Brillet, W.-Ü.L., 2003. Extreme ultraviolet laser excitation of isotopic molecular nitrogen: The dipole-allowed spectrum of $^{15}\text{N}_2$ and $^{14}\text{N}^{15}\text{N}$. *J. Chem. Phys.* 119, 3160–3173.
- Stark, G., Huber, K.P., Yoshino, K., Smith, P.L., Ito, K., 2005. Oscillator strength and linewidth measurements of dipole-allowed transitions in $^{14}\text{N}_2$ between 93.5 and 99.5 nm. *J. Chem. Phys.* 123, 214303.

- Teanby, N.A., Irwin, P.G.J., de Kok, R., Nixon, C.A., Coustenis, A., Bézard, B., Calcutt, S.B., Bowles, N.E., Flasar, F.M., Fletcher, L., Howett, C., Taylor, F.W., 2006. Latitudinal variations of HCN, HC_3N , and C_2N_2 in Titan's stratosphere derived from Cassini CIRS data. *Icarus* 181, 243–255.
- Tomasko, M.G., and 39 colleagues, 2005. Rain, winds and haze during the Huygens probe's descent to Titan's surface. *Nature* 438, 765–778.
- Vinatier, S., Bézard, B., Fouchet, T., Teanby, N.A., de Kok, R., Irwin, P.G.J., Conrath, B.J., Nixon, C.A., Romani, P.N., Flasar, F.M., Coustenis, A., 2007. Vertical abundance profiles of hydrocarbons in Titan's atmosphere at 15° S and 80° N retrieved from Cassini/CIRS spectra. *Icarus* 188, 120–138.
- Waite, J.H., and 21 colleagues, 2005. Ion neutral mass spectrometer results from the first flyby of Titan. *Science* 308, 982–986.
- Wilson, E.H., Atreya, S.K., 2004. Current state of modeling the photochemistry of Titan's mutually dependant atmosphere and ionosphere. *J. Geophys. Res.* 109, doi:10.1029/2003JE002181. E06002.
- Yung, Y.L., Allen, M., Pinto, J.P., 1984. Photochemistry of the atmosphere of Titan—Comparison between model and observations. *Astrophys. J.* 55, 465–506.

ANNEXE C

Article : Flasar et al. (2005)

Titan's Atmospheric Temperatures, Winds, and Composition

F. M. Flasar,^{1*} R. K. Achterberg,² B. J. Conrath,³ P. J. Gierasch,³ V. G. Kunde,⁴ C. A. Nixon,⁴ G. L. Bjoraker,¹ D. E. Jennings,¹ P. N. Romani,¹ A. A. Simon-Miller,¹ B. Bézard,⁵ A. Coustenis,⁵ P. G. J. Irwin,⁶ N. A. Teanby,⁶ J. Brasunas,¹ J. C. Pearl,¹ M. E. Segura,⁷ R. C. Carlson,² A. Mamoutkine,² P. J. Schinder,³ A. Barucci,⁵ R. Courtin,⁵ T. Fouchet,⁵ D. Gautier,⁵ E. Lellouch,⁵ A. Marten,⁵ R. Prangé,⁵ S. Vinatier,⁵ D. F. Strobel,^{8,†} S. B. Calcutt,⁶ P. L. Read,⁶ F. W. Taylor,⁶ N. Bowles,⁶ R. E. Samuelson,⁴ G. S. Orton,⁹ L. J. Spilker,⁹ T. C. Owen,¹⁰ J. R. Spencer,¹¹ M. R. Showalter,¹² C. Ferrari,¹³ M. M. Abbas,¹⁴ F. Raulin,¹⁵ S. Edgington,⁹ P. Ade,¹⁶ E. H. Wishnow¹⁷

Temperatures obtained from early Cassini infrared observations of Titan show a stratopause at an altitude of 310 kilometers (and 186 kelvin at 15°S). Stratospheric temperatures are coldest in the winter northern hemisphere, with zonal winds reaching 160 meters per second. The concentrations of several stratospheric organic compounds are enhanced at mid- and high northern latitudes, and the strong zonal winds may inhibit mixing between these latitudes and the rest of Titan. Above the south pole, temperatures in the stratosphere are 4 to 5 kelvin cooler than at the equator. The stratospheric mole fractions of methane and carbon monoxide are $(1.6 \pm 0.5) \times 10^{-2}$ and $(4.5 \pm 1.5) \times 10^{-5}$, respectively.

Unlike other moons in the solar system, Titan has a substantial atmosphere and offers an interesting comparison with Earth and the other planets. Its pressure at the surface is 1.5 times Earth's, but its temperature is much colder, 90 to 94 K (1–3). Like Earth, Titan's atmosphere

is primarily N₂, but CH₄ (not O₂) is the next-most abundant constituent. Dissociation of CH₄ and N₂ by ultraviolet sunlight and energetic electron impact leads to a rich mixture of organic compounds (4–6). Titan's winter polar atmosphere may be analogous to the terrestrial Antarctic ozone hole but with different chemistry. Infrared observations from the Voyager spacecraft indicated cold stratospheric temperatures, strong circumpolar winds, and an enhanced concentration of several organic compounds in the north-polar region, which was coming out of winter in 1980 to 1981 (7–9). This enhanced concentration suggests that the winter polar atmosphere was isolated from that at low latitudes. Titan has a 16-day period and rotates slowly, like Venus. Both have atmospheres that rotate globally much faster than their surfaces. Unlike Venus, however, Titan has a large seasonal modulation in its stratospheric temperatures and winds (2, 7).

Here we summarize results from early Cassini orbiter observations of Titan by the Composite Infrared Spectrometer (CIRS). The observations were made on 2 July 2004 (flyby T0), shortly after Cassini was inserted into orbit around Saturn, and on 13 December 2004 (flyby TB). CIRS consists of two Fourier-transform spectrometers, which together measure thermal emission from 10 to 1400 cm⁻¹ (wavelengths 1 mm to 7 μm) at an apodized spectral resolution selected between 0.5 and 15.5 cm⁻¹ (10, 11). The far-infrared interferometer (10 to 600 cm⁻¹) has a 4-mrad field of view on the sky. The mid-infrared interferometer consists of two 1 × 10 arrays of 0.3-mrad pixels, which together span 600 to 1400 cm⁻¹.

Like Earth, Titan has a well-defined stratosphere. It has been well characterized at altitudes up to ~225 km by Voyager radio-occultation and infrared observations (1, 7, 8)

and also by the Infrared Space Observatory (12). Titan stellar occultations have been used to probe the mesosphere at altitudes of 300 to 500 km (13, 14). In this region, the retrieved temperature profiles show great variability, possibly because of the influence of vertically propagating waves. The accuracy of the retrieved temperatures decreases at altitudes below ~300 km because of the uncertain contribution of aerosol absorption to the signal. None of these observations defined the stratopause, which is the maximum in the temperature profile separating the mesosphere from the underlying stratosphere. The stratopause temperature and its location are determined by the vertical variation of aerosol heating, infrared cooling to space by C₂H₆, and, to a lesser extent, heating of CH₄ in its near-infrared bands (15). At these altitudes, CH₄ is well mixed, but the aerosols tend to decrease with altitude and C₂H₆ increases slowly with altitude (6). The spatial resolution of the mid-infrared detector arrays allowed CIRS to observe Titan's atmosphere on the limb, where the line of sight extends through the atmosphere to deep space. In this mode, the altitude coverage and vertical resolution was determined by the array pixels (11). Figure 1A shows that vertical profiles up to the 0.01-mbar level (410 km) are feasible. At 15°S, a well-defined stratopause is evident near 0.07 mbar (310 km) with a temperature of 186 K.

CIRS mapped stratospheric temperatures over much of Titan (Fig. 1, B and C) in the second half of 2004, with its mid-infrared arrays in the nadir-viewing mode. This corresponded to early southern summer (solstice was in October 2002). The warmest temperatures were near the equator. Temperatures were moderately colder at high southern latitudes (by 4 to 5 K near 1 mbar), but they were coldest at high latitudes in the north, where it was winter. The thermal wind equation relates the variation of zonally averaged temperatures with latitude to the variation of the mean zonal winds along cylinders parallel to Titan's rotation axis (16). The derived zonal winds (Fig. 1D) were weakest at high southern latitudes and increased northward. The maximum winds were at low and mid-northern latitudes, reaching 160 m s⁻¹ between 20°

¹NASA/Goddard Space Flight Center, Code 693, Greenbelt, MD 20771, USA. ²Science Systems and Applications, 5900 Princess Garden Parkway, Suite 300, Lanham, MD 20706, USA. ³Department of Astronomy, Cornell University, Ithaca, NY 14853, USA. ⁴Department of Astronomy, University of Maryland, College Park, MD 20742, USA. ⁵Laboratoire d'Études Spatiales et d'Instrumentation en Astrophysique (LESIA), CNRS–Unité Mixte de Recherche (UMR) 8109, Observatoire de Paris, 5 place Jules Janssen, F-91925 Meudon Cedex, France. ⁶Atmospheric, Oceanic, and Planetary Physics, Clarendon Laboratory, Parks Road, University of Oxford, Oxford OX1 3PU, UK. ⁷QSS Group, 4500 Forbes Boulevard, Suite 200, Lanham, MD 20706, USA. ⁸Department of Earth and Planetary Science, Johns Hopkins University, Baltimore, MD 21218, USA. ⁹Jet Propulsion Laboratory, 4800 Oak Grove Drive, Pasadena, CA 91109, USA. ¹⁰University of Hawaii, Institute of Astronomy, 2680 Woodlawn Drive, Honolulu, HI 96822, USA. ¹¹Department of Space Studies, Southwest Research Institute, 1050 Walnut Street, Suite 400, Boulder, CO 80302, USA. ¹²Search for Extraterrestrial Intelligence (SETI) Institute, 515 North Whisman Road, Mountain View, CA 94043, USA. ¹³Commissariat de l'Énergie Atomique, Saclay, Service d'Astrophysique, 91191 Gif-sur-Yvette Cedex, France. ¹⁴NASA/Marshall Space Flight Center, SD50 NSSTC, Huntsville, AL 35812, USA. ¹⁵Laboratoire Interuniversitaire des Systèmes Atmosphériques, Université de Paris 7 and 12, CNRS-UMR 7583, 61 Avenue General de Gaulle, 94010 Creteil Cedex, France. ¹⁶Department of Physics and Astronomy, University of Cardiff, 5 The Parade, Cardiff CF24 3YB, UK. ¹⁷Lawrence Livermore National Laboratory and Space Sciences Laboratory, University of California, Berkeley, L-041, Livermore, CA 94551, USA.

*To whom correspondence should be addressed. E-mail: f.m.flasar@nasa.gov

†Present address: LESIA, CNRS-UMR 8109, Observatoire de Paris, 5 place Jules Janssen, F-91925 Meudon Cedex, France.

CASSINI REVEALS TITAN

and 40°N. The zonal winds at the 10-mbar level in Fig. 1D, which are not known, were set to zero. The errors from this assignment should not materially affect the displayed winds where they were strong, at low latitudes and in the north. The largest relative errors are likely to be at high southern latitudes, where the derived winds were smallest (16).

The CIRS observations, taken with earlier studies, indicate that the strongest zonal winds migrate seasonally in the stratosphere. Voyager infrared observations, taken in 1980 shortly after the northern spring equinox, indicated that the strongest winds were at mid- and high northern latitudes, and also at high southern latitudes (8). Subsequent stellar-occultation

central-flash data provided information on the winds on the 0.25-mbar isobar in the upper stratosphere. An occultation of Sgr 28 in 1989, during northern summer, showed a strong jet (175 m s⁻¹) centered at 65°S (13, 17). A more complex wind structure was observed in December 2001, a few months before northern winter solstice; a 220-m s⁻¹ jet was centered near 60°N, and a somewhat weaker jet had a maximum near 20°S, with strong winds extending to 60°S (18). The CIRS data indicate that the southern-hemispheric winds have weakened and the strongest northern-hemispheric winds have migrated toward the equator (Fig. 1D). This is not a simple hemispheric reflection of the high-latitude jet observed during the Sgr

28 occultation, which occurred approximately one-half-Titan year earlier (13).

The lower temperatures at the south pole of Titan during early summer are in marked contrast to the south-polar warming seen in Saturn's stratosphere (19). A radiative explanation by itself is not straightforward, because the radiative relaxation time in Titan's upper stratosphere is so short (~1 year, compared with Saturn's orbital period of 29.5 years). Time-dependent radiative models of Titan, which assume opacities that are uniform in latitude, predict that the south pole near 1 mbar is 16 to 17 K warmer than the equator at the current season (20). Instead, it is 4 to 5 K colder. The gaseous opacity in the stratosphere

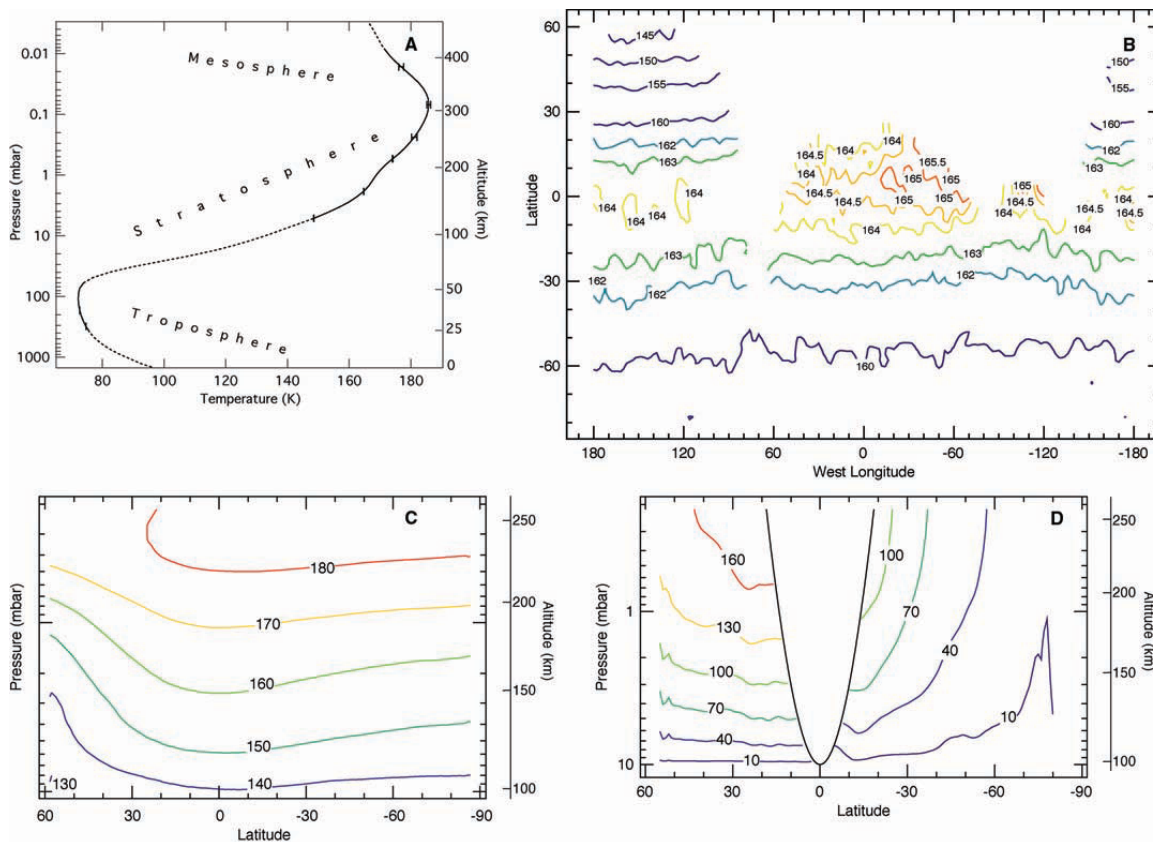


Fig. 1. Temperatures and zonal winds in Titan's atmosphere. (A) Vertical temperature profile near 15°S, retrieved from a combination of nadir- and limb-viewing spectra (16). The dashed portions of the curve represent the regions where temperatures are not well constrained by the spectra and are more influenced by the Voyager radio-occultation profiles (7) and radiative mesospheric models (15) used as the initial estimate. (B) Temperatures (K) on the 1.8-mbar isobar, obtained from nadir-viewing spectra at 3-cm⁻¹ resolution. The map is a combination of observations taken on 2 July 2004, which were primarily in the southern hemisphere at longitudes centered near 0°, and observations on 13 December 2004, which were in both hemispheres at longitudes centered near 146°W. The horizontal resolution is 5° of great-circle arc. The temperature errors from instrument noise are 0.2 K at most locations, increasing to ~0.4 K at high

northern latitudes, where there are fewer data. (C) Meridional cross section of stratospheric temperatures (K) averaged over available longitudes [see (B) for horizontal coverage] and pressure as the vertical coordinate (altitude is indicated on the right). The errors in zonal-mean temperature from noise range from 0.03 to 0.1 K. (D) Zonal winds (m s⁻¹), calculated from the temperatures in (C) using the thermal wind equation for a thick atmosphere (16). Positive numbers indicate eastward velocities. Winds at the 10-mbar level have been set equal to zero. At low latitudes within the parabola, this boundary condition is insufficient for calculating the winds, and they have been omitted (16). At 15° latitude, the noise in temperatures propagates into errors of 6 and 9 m s⁻¹ at the 5- and 0.5-mbar levels, respectively; at higher latitudes the error decreases roughly as 1/tan (latitude).

could be heterogeneously distributed so that it cools less at low latitudes than at high latitudes, whereas fewer aerosols at the south pole could lead to less solar heating there (21).

The colder south pole may also be a manifestation of a lagged stratospheric cross-equatorial circulation (8). Although the radiative relaxation time is short compared with seasonal time scales, temperatures and zonal winds are coupled because of the thermal wind equation. The need to transport axial angular momentum from the hemisphere going into summer, where meridional temperature gradients are weakening, to that going into winter, where the gradients are strengthening, adds an inertia to the system that causes a phase lag of about one full season. It may be that the

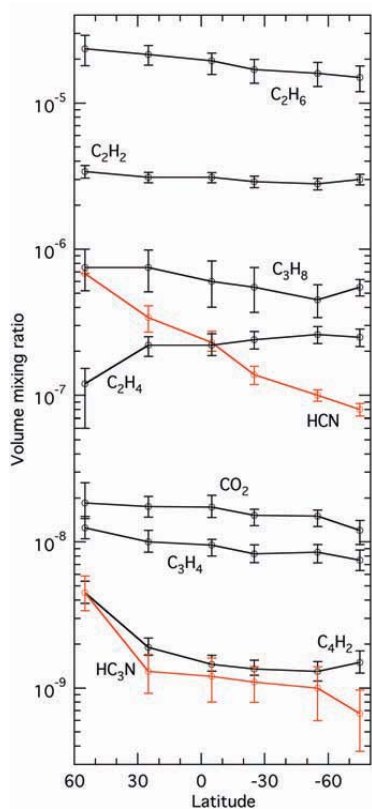


Fig. 2. Meridional distribution of several hydrocarbons and nitriles, retrieved from the spectral regions displayed in fig. S3, but at a resolution of 3 cm⁻¹ (16). The vertical distribution of the gases was assumed to be uniform above the condensation level in the lower stratosphere. The temperature profile in Fig. 1A was used as an initial estimate, and the stratospheric temperatures were retrieved at different latitudes from radiances in the ν_4 band of CH₄. The errors indicated include those from noise in the spectral region containing the emission lines of the individual molecules, as well as from noise in the retrieved stratospheric temperatures.

circulation is transporting angular momentum northward in early southern summer, with an attendant upwelling at high southern latitudes and adiabatic cooling. The vertical velocities required are small, about 0.05 cm s⁻¹ (16). Two-dimensional coupled radiative-dynamical models with parameterized eddy mixing, which simulate the transport of radiatively active gaseous constituents and aerosols, have been developed to predict Titan's seasonal behavior. Although these models have been tuned to reproduce the stratospheric temperatures observed by Voyager reasonably well, they fail to account for the cooler south-polar temperatures observed now, instead predicting temperatures ~10 K warmer than at the equator (22).

Titan's atmosphere is rich in organics: hydrocarbons and nitriles (figs. S1 to S3). Hydrocarbons form from the photolytic and catalytic dissociation of CH₄. Nitriles are created by dissociation of N₂ from ultraviolet sunlight and impacts by energetic electrons from photoionization and the magnetosphere, followed by reactions with hydrocarbon radicals (4–6). Voyager 1 infrared data (9), which were obtained during Titan's early northern spring, showed that the concentrations of nitriles (HCN, HC₃N, and C₂N₂) and the more photochemically active hydrocarbons (C₂H₄, C₃H₄, and C₄H₂) were enhanced at high northern latitudes by factors of 10 to 100, compared with the concentrations at low latitudes. The CIRS observations in early northern winter show an enhancement of several of the same constituents at northern latitudes (Fig. 2), but by a smaller amount. Indeed, C₂H₄ now shows not an enhancement, but a twofold depletion at high northern latitudes. If the Voyager results are typical, then one can expect a build-up of the relative concentrations of these organic compounds through the winter into early spring. Numerical simulations suggest that the enhancement of these species is associated with an axisymmetric meridional circulation that subsides in the polar region during winter and early spring (22, 23). Most of the enhanced species have larger mixing ratios at higher altitudes, where they are photochemically formed. Subsidence brings these enriched parcels of atmosphere down to the levels of the observed emission, ~1 to 10 mbar (9). Subsidence also brings the species into winter shadow, where they are shielded from further photodissociation (24). For the enhancements to persist at high northern latitudes, lateral mixing with the atmosphere at other latitudes must be inhibited, compared with the transport by the meridional circulation.

Titan's strong circumpolar winds (Fig. 1D) may facilitate this isolation, which is also a critical ingredient of the terrestrial Antarctic polar vortex during winter (25). There, the concentrations of species such as CH₄ and HF imply strong descent from the mesosphere well into the stratosphere, and these gases

have sharp gradients across the polar vortex (26). Indeed, the whole process leading to the ozone hole within the vortex—the cold polar temperatures leading to the formation of stratospheric clouds, which denitrify the polar atmosphere by heterogeneous chemistry, liberating gaseous Cl₂; its photodissociation in the spring into Cl, which in turn irreversibly destroys O₃—requires the polar air to be isolated from the warmer, lower-latitude air that contains reactive nitrogen compounds (25). Planetary waves, which normally efficiently mix air masses, are unable to penetrate the polar vortex until later in spring, when polar temperatures rise and the circumpolar winds weaken. Planetary-scale waves on Titan have not been well characterized yet. The CIRS observations indicate that any thermal contrasts associated with waves are small at present. The maximum zonal variation in temperature observed in the available coverage shown in Fig. 1B is <1 to 1.5 K.

In the southern hemisphere, where it was summer, the hydrocarbons and nitriles were more uniformly distributed with latitude (Fig. 2). The numerical simulations (23) attribute such flat structure to rising motions in the summer hemisphere, bringing material impoverished in the trace organics from altitudes below their condensation level in the lower stratosphere. An interesting result pertains to C₂H₄. Recent analysis of Keck broad-band filter observations acquired from 1999 to 2002 suggests that C₂H₄ was 12 to 20 times as abundant in the south-polar region as at the equator (27). The CIRS data show little enhancement at the south pole. The relevant C₂H₄ photolysis rate [from (28), adapted for full illumination and $\lambda > 160$ nm] is 2×10^{-7} s⁻¹, or a 60-day lifetime for an individual molecule. Although a 12- to 20-fold enhancement in C₂H₄ could be removed in 150 to 180 days photochemically, it is not clear what caused the enhancement reported from the Keck data, because the period of observation was already middle to late spring in the southern hemisphere, a period when rising motions are predicted (23), and the diurnally averaged solar illumination changes slowly.

CH₄ is a condensable gas in Titan's troposphere. Analysis of Voyager's far-infrared and radio-occultation data indicate that its mole fraction near the surface ranges from 0.06 at low latitudes to 0.02 at high latitudes (3). The lifetime of CH₄ in Titan's atmosphere is only 4×10^7 years (29), and it requires a surface or interior source if the current inventory is typical of Titan's long-term history. The distribution of stratospheric CH₄ is probably uniform (17). Analyses of Voyager's infrared observations (in the ν_4 band of CH₄ near 1300 cm⁻¹) and radio-occultation soundings led to estimates of the CH₄ stratospheric mole fraction in the range 0.005 to 0.045 (table S1). Part of this uncertainty resulted because the CH₄ ν_4 -band line-formation region is near 1 mbar, where Voyager radio-occultation data have large

CASSINI REVEALS TITAN

errors. Uncertainties in the argon abundance and the cold-trapping constraint applied in the tropopause region also contributed to the errors in the estimated CH_4 mole fraction. The use of the pure rotational lines of CH_4 in the far-infrared (fig. S2B) eliminates many of these ambiguities. The line-formation region is in the stratosphere between 3 and 20 mbar (140 to 80 km altitude), which mostly lies between the two regions accessible to direct-temperature sounding, the upper troposphere and tropopause region between 500 and 50 mbar (20 to 60 km), and the upper stratosphere between 5 and 0.5 mbar (130 to 230 km). Nevertheless, interpolation between the two altitude ranges constrains the temperatures sufficiently to make an improved determination of the stratospheric CH_4 abundance. The optically thick ν_4 band is not too sensitive to the CH_4 abundance, but is more sensitive to the stratospheric temperatures, because it is on the Wien tail of the Planck function. The rotational lines are almost optically thin, and therefore they are more sensitive to the stratospheric CH_4 abundance but less sensitive to temperature, because they lie at wave numbers below those at the peak emission (fig. S1) (30). Figure S4 illustrates fits for synthetic spectra with different CH_4 mole fractions. The best fit in a least-squares sense to all the rotational lines corresponds to a mole fraction of $(1.6 \pm 0.5) \times 10^{-2}$. This is comparable to the mole fraction determined at 1000- to 1200-km altitude from remote-sensing and in situ measurements (table S1), indicating that CH_4 is fairly well mixed up to these altitudes.

In addition to containing CH_4 , the far-infrared contains rotational lines of stratospheric emission from CO and HCN (fig. S2A). The rotational line-formation region of CO is similar to that of CH_4 . We find from a least-

squares fit of all the lines observed in independent selections of spectra from the T0 and TB flybys that the CO mole fraction is $(4.5 \pm 1.5) \times 10^{-5}$, assuming that it is uniform with altitude (31). This is consistent with the determination $[(5.0 \pm 1.0) \times 10^{-5}]$ by Gurwell and Muhleman (32), and marginally consistent with what Hidayat *et al.* (33) inferred below the 1-mbar level from disk-averaged heterodyne millimeter observations $[(2.5 \pm 0.5) \times 10^{-5}]$. Within the errors, it is also consistent with the tropospheric value $[(3.2 \pm 1.0) \times 10^{-5}]$ derived from 5- μm spectra (34), although one cannot rule out that the stratosphere has a higher concentration. One might expect the mole fractions of CO in the stratosphere and troposphere to be more or less equal, because CO does not condense at the temperatures and abundances observed, and the time constant for photochemical adjustment under current conditions is $\sim 10^9$ years (4).

References and Notes

- G. F. Lindal *et al.*, *Icarus* **53**, 348 (1983).
- D. M. Hunten *et al.*, in *Saturn*, T. Gehrels, M. S. Matthews, Eds. (Univ. of Arizona Press, Tucson, AZ, 1984), pp. 671–759.
- R. E. Samuelson, N. R. Nath, A. Borysow, *Planet. Space Sci.* **45**, 959 (1997).
- Y. L. Yung, M. Allen, J. P. Pinto, *Astrophys. J. (Suppl.)* **55**, 465 (1984).
- D. Toublanc *et al.*, *Icarus* **113**, 2 (1995).
- E. H. Wilson, S. K. Atreya, *J. Geophys. Res.* **109**, E06002, 10.1029/2003JE002181 (2004).
- F. M. Flasar, R. E. Samuelson, B. J. Conrath, *Nature* **292**, 693 (1981).
- F. M. Flasar, B. J. Conrath, *Icarus* **85**, 346 (1990).
- A. Coustenis, B. Bézard, *Icarus* **115**, 126 (1995).
- V. Kunde *et al.*, in *Cassini/Huygens: A Mission to the Saturnian Systems*, L. Horn, Ed. (SPIE Proceedings, The International Society for Optical Engineering, Bellingham, WA, 1996), pp. 162–177.
- F. M. Flasar *et al.*, *Space Sci. Rev.* **115**, 169 (2004).
- A. Coustenis *et al.*, *Icarus* **161**, 383 (2003).
- W. B. Hubbard *et al.*, *Astron. Astrophys.* **269**, 541 (1993).
- B. Sicardy *et al.*, *Icarus* **142**, 357 (1999).
- R. V. Yelle, *Astrophys. J.* **383**, 380 (1991).
- Materials and methods are available as supporting material on Science Online.
- F. M. Flasar, *Planet. Space Sci.* **46**, 1125 (1998).
- A. Bouchez, thesis, California Institute of Technology (2004); available at www.gps.caltech.edu/~antonin/thesis/.
- F. M. Flasar *et al.*, *Science* **307**, 1247 (2005).
- F. Hourdin *et al.*, *Icarus* **117**, 358 (1995).
- B. Bézard, A. Coustenis, C. P. McKay, *Icarus* **113**, 267 (1995).
- F. Hourdin, S. Lebonnois, D. Luz, P. Rannou, *J. Geophys. Res.* **109**, E12005, 10.1029/2004JE002282 (2004).
- S. Lebonnois, D. Toublanc, F. Hourdin, P. Rannou, *Icarus* **152**, 384 (2001).
- Y. L. Yung, *Icarus* **72**, 468 (1987).
- M. R. Schoeberl, M. R. Hartman, *Science* **251**, 46 (1991).
- J. T. Bacmeister, M. R. Schoeberl, M. E. Summers, J. R. Rosenfeld, X. Zhu, *J. Geophys. Res.* **100**, 11669 (1995).
- H. G. Roe, I. de Pater, C. P. McKay, *Icarus* **169**, 440 (2004).
- J. I. Moses *et al.*, *Icarus* **143**, 244 (2000).
- D. Strobel, *Planet. Space Sci.* **30**, 839 (1982).
- A. Coustenis *et al.*, *Icarus* **102**, 240 (1993).
- To fit the CO rotational lines, we also had to fit the HCN lines. To do so, we used the vertical profile derived by Marten *et al.* (35) from disk-averaged millimeter observations, but scaled by a constant factor, $2.5_{-1.1}^{+1.5}$ (where +1.5 and -1.1 are the error values) for a selection of T0 spectra centered at 7°S and 2.8 ± 1 for a selection of TB spectra centered at 17°N .
- M. A. Gurwell, D. O. Muhleman, *Icarus* **117**, 375 (1995).
- T. Hidayat, A. Marten, B. Bézard, D. Gautier, *Icarus* **133**, 109 (1998).
- E. Lellouch *et al.*, *Icarus* **162**, 125 (2003).
- A. Marten, T. Hidayat, Y. Biraud, R. Moreno, *Icarus* **158**, 532 (2002).
- S. Albright, M. H. Elliott, and J. S. Tingley assisted with instrument commanding and data processing; D. Crick, M. de Cates, and S. Brooks assisted with observation designs; and N. Stone helped with data analysis. We acknowledge support from the NASA Cassini Project, the British Particle Physics and Astronomy Research Council, the Centre National d'Études Spatiales (CNES), and the Institut National des Sciences de l'Univers (CNRS/INSU).

Supporting Online Material

www.sciencemag.org/cgi/content/full/308/5724/975/DC1

Materials and Methods
Figs. S1 to S4
Table S1
References

16 February 2005; accepted 14 April 2005
10.1126/science.1111150

REPORT

The Cassini UVIS Stellar Probe of the Titan Atmosphere

Donald E. Shemansky,^{1*} A. Ian F. Stewart,² Robert A. West,³ Larry W. Esposito,² Janet T. Hallett,¹ Xianming Liu¹

The Cassini Ultraviolet Imaging Spectrometer (UVIS) observed the extinction of photons from two stars by the atmosphere of Titan during the Titan flyby. Six species were identified and measured: methane, acetylene, ethylene, ethane, diacetylene, and hydrogen cyanide. The observations cover altitudes from 450 to 1600 kilometers above the surface. A mesopause is inferred from extraction of the temperature structure of methane, located at 615 km with a temperature minimum of 114 kelvin. The asymptotic kinetic temperature at the top of the atmosphere determined from this experiment is 151 kelvin. The higher order hydrocarbons and hydrogen cyanide peak sharply in abundance and are undetectable below altitudes ranging from 750 to 600 km, leaving methane as the only identifiable carbonaceous molecule in this experiment below 600 km.

On 13 December 2004, the Cassini UVIS observed the occultation of two stars, Shaula (λ Sco) and Spica (α Vir) near the end of the

second Titan flyby (labeled T_B). Both measurements of atmospheric transmission were obtained in egress: Spica was in the northern

hemisphere over a range of latitudes and Shaula at a southern latitude, -36° (fig. S1). Observations were made with the extreme ultraviolet (EUV) and the far ultraviolet (FUV) UVIS channels (1). Data from Spica were compromised by spacecraft pointing drift but provide useful comparative atmospheric structural information at lower altitudes (2). The spectral range of the FUV observations (110 nm to 190 nm) is effective for the identification and determination of the hydrocarbon species abundances. These complement and extend solar occultation results from Voyager 1 and 2 in 1980 to 1981 (3, 4) into the range 900 to 1200 km for CH_4 . Our data

ANNEXE D

Liste des publications en tant que co-auteur

- **Titan’s atmospheric temperatures, winds, and composition.** M. Flasar et 45 collègues, 2005. *Science* 308, 975-978.
- **Vertical profiles of HCN, HC₃N, and C₂H₂ in Titan’s atmosphere derived from Cassini/CIRS data,** N. A. Teanby, P. Irwin, R. de Kok, S. Vinatier, B. Bézard, C. Nixon, M. Flasar, S. Calcutt, N. Bowles, L. Fletcher, C. Howett and F. Taylor, 2007. *Icarus* 186, 364-384.
- **Oxygen compounds in Titan’s stratosphere as observed by Cassini/CIRS,** R. de Kok, P. Irwin, N. Teanby, E. Lellouch, B. Bézard, S. Vinatier, C. Nixon, L. Fletcher, C. Howett, S. Calcutt, N. Bowles, M. Flasar, 2007. *Icarus* 186, 354-363.
- **The composition of Titan’s stratosphere from Cassini/CIRS mid-infrared spectra.** A. Coustenis et 24 collègues, 2007. *Icarus* 189, 35-62.
- **The ¹³C/¹²C isotopic ratio in Titan hydrocarbons from Cassini/CIRS infrared spectra.** C. Nixon, R. Achterberg, S. Vinatier, B. Bézard, A. Coustenis, P. Irwin, N. Teanby, R. de Kok, P. Romani, D. Jennings, G. Bjoraker, M. Flasar, 2007. *Icarus*, soumis.
- **Heat balance in Titan’s atmosphere.** M. Tomasko, B. Bézard, L. Doose, S. Engel, E. Karkoschka, S. Vinatier, 2007. *Planet. Space Sci.*, accepté.

Bibliographie

- Achterberg, R. K., Conrath, B. J., Gierasch, P. J., Flasar, F. M., Nixon, C. A., 2007. Titan's middle atmospheric temperature and dynamics as observed by the Cassini Composite Infrared Spectrometer. *Icarus*, accepté.
- Ahrens, T. J. (Ed.), 1995. *Global earth physics a handbook of physical constants*.
- Arié, E., Johns, J. W. C., 1992. The bending energy levels of C₄H₂. *J. Mol. Spectrosc.* 155, 195–204.
- Atreya, S. K., Adams, E. Y., Niemann, H. B., Demick-Montelara, J. E., Owen, T. C., Fulchignoni, M., Ferri, F., Wilson, E. H., 2006. Titan's methane cycle. *PSS* 54, 1177–1187, doi :10.1016/j.pss.2006.05.028.
- Bevington, P. R., Robinson, D. K., 1992. *Data reduction and error analysis for the physical sciences*. New York : McGraw-Hill, 1992, 2nd ed.
- Bézar, B., Coustenis, A., McKay, C. P., 1995. Titan's stratospheric temperature asymmetry : A radiative origin ? *Icarus* 113, 267–276.
- Bézar, B., Nixon, A. N., Kleiner, I., Jennings, D. E., 2007. Detection of ¹³CH₃D on Titan. *Icarus*, accepté.
- Blanquet, G., Walrand, J., Dang-Nhu, M., 1992. Absolute line intensities of the ν_9 band of propyne at 15.5 μ m. *Spectrochim. Acta.* 48A, 1231–1233.
- Borysow, A., Frommhold, L., 1986a. Collision-induced rototranslational absorption spectra of N₂-N₂ pairs for temperatures from 50 to 300 K. *Astrophys. J.* 311, 1043–1057.
- Borysow, A., Frommhold, L., 1986b. Theoretical collision-induced rototranslational absorption spectra for modeling Titan's atmosphere - H₂-N₂ pairs. *Astrophys. J.* 303, 495–510.
- Borysow, A., Frommhold, L., 1987. Collision-induced rototranslational absorption spectra of CH₄-CH₄ pairs at temperatures from 50 to 300 K. *Astrophys. J.* 318, 940–943.
- Borysow, A., Tang, C., 1993. Far Infrared CIA Spectra of N₂-CH₄ pairs for modeling of Titan's atmosphere. *Icarus* 105, 175–183.
- Broadfoot, A. L., Sandel, B. R., Shemansky, D. E., Holberg, J. B., Smith, G. R., Strobel, D. F., McConnell, J. C., Kumar, S., Hunten, D. M., Atreya, S. K., Donahue, T. M., Moos, H. W., Bertaux, J. L., Blamont, J. E., Pomphrey, R. B., Linick, S., 1981.

- Extreme ultraviolet observations from Voyager 1 encounter with Saturn. *Science* 212, 206–211.
- Brown, M. E., Bouchez, A. H., Griffith, C. A., 2002. Direct detection of variable tropospheric clouds near Titan's south pole. *Nature* 420, 795–797.
- Clarke, D. W., Ferris, J. P., 1997. Chemical Evolution on Titan : Comparisons to the Prebiotic Earth. *Origins of Life and Evolution of the Biosphere* 27, 225–248.
- Conrath, B. J., Gierasch, P. J., Ustinov, E. A., 1998. Thermal structure and para hydrogen fraction on the outer planets from Voyager IRIS measurements. *Icarus* 135, 501–517.
- Coustenis, A., and 24 colleagues, 2007. The composition of Titan's stratosphere from Cassini/CIRS mid-infrared spectra. *Icarus* 189, 35–62, doi :10.1016/j.icarus.2006.12.022.
- Coustenis, A., Bézard, B., 1995. Titan's atmosphere from Voyager infrared observations. IV : Latitudinal variations of temperature and composition. *Icarus* 115, 126–140.
- Coustenis, A., Bézard, B., Gautier, D., 1989a. Titan's atmosphere from Voyager infrared observations. I - The gas composition of Titan's equatorial region. *Icarus* 80, 54–76.
- Coustenis, A., Bézard, B., Gautier, D., 1989b. Titan's atmosphere from Voyager infrared observations. II - The CH₃D abundance and D/H ratio from the 900–1200 cm⁻¹ spectral region. *Icarus* 82, 67–80.
- Coustenis, A., Bézard, B., Gautier, D., Marten, A., Samuelson, R., 1991. Titan's atmosphere from Voyager infrared observations. III - Vertical contributions of hydrocarbons and nitriles near Titan's north pole. *Icarus* 89, 152–167.
- Coustenis, A., Jennings, D. E., Jolly, A., Benillan, Y., Nixon, C. A., Gautier, D., Vinatier, S., Bjoraker, G. L., Romani, P. N., Royer, E. Detection of the C₂HD and the D/H ratio on Titan, 2007b. En préparation.
- Coustenis, A., Salama, A., Lellouch, E., Encrenaz, T., Bjoraker, G. L., Samuelson, R. E., de Graauw, T., Feuchtgruber, H., Kessler, M. F., 1998. Evidence for water vapor in Titan's atmosphere from ISO/SWS data. *Astron. Astrophys.* 336, L85–L89.
- Coustenis, A., Salama, A., Schulz, B., Ott, S., Lellouch, E., Encrenaz, T., Gautier, D., Feuchtgruber, H., 2003. Titan's atmosphere from ISO mid-infrared spectroscopy. *Icarus* 161, 383–403.
- Crespin, A., Lebonnois, S., Hourdin, F., Rannou, P., 2005. Seasonal variations of Titan's stratospheric composition in the LMD/SA Global Climate Model. *Bull. Amer. Astron. Soc.* 37, 718.
- Dang-Nhu, M., Blanquet, G., Walrand, J., Raulin, F., 1989. Spectral intensities in the ν_4 -band of benzene at 15 μm . *J. Mol. Spectros.* 134, 237–239.

- Dang-Nhu, M., Plíva, J., 1989. Intensities in the ν_4 , ν_{12} , ν_{13} , and ν_{14} bands of benzene. in 138, 423–429.
- de Kok, R., Irwin, P. G. J., Teanby, N. A., Lellouch, E., Bézard, B., Vinatier, S., Nixon, C. A., Fletcher, L., Howett, C., Calcutt, S. B., Bowles, N. E., Flasar, F. M., Taylor, F. W., 2007. Oxygen compounds in Titan's stratosphere as observed by Cassini CIRS. *Icarus* 186, 354–363.
- de Kok, R., Irwin, P. G. J., Teanby, N. A., Nixon, C. A., Jennings, D. E., Fletcher, L., Howett, C., Calcutt, S. B., Bowles, N. E., Flasar, F. M., Taylor, F. W., 2007. Characteristics of Titan stratospheric aerosols and condensate clouds from Cassini/CIRS infrared spectra. *Icarus*, sous presse, doi :10.1016/j.icarus.2007.04.003.
- Duxbury, G., Gang, Y., 1989. Fourier transform spectroscopy of HCN in the 14- μm region. *Journal of Molecular Spectroscopy* 138, 541–561.
- Encrenaz, T., D'Hendecourt, L., Puget, J. L., 1988. The interpretation of the 3.2-3.5 micron emission feature in the spectrum of Comet P/Halley - Abundances in the comet and in interstellar matter. *A&A* 207, 162–173.
- Fegley, B., 1995. in *Global Earth Physics : A Handbook of Physical Constants*. T. Ahrens, Ed. American Geophysical Publication, Washington DC, 320–345.
- Flasar, F. M., and 44 colleagues, 2004. Exploring the Saturn system in the thermal infrared : the Composite Infrared Spectrometer. *Space Sci. Rev.* 115, 169–297.
- Flasar, F. M., and 45 colleagues, 2005. Titan's atmospheric temperatures, winds, and composition. *Science* 308, 975–978.
- Flasar, F. M., Samuelson, R. E., Conrath, B. J., 1981. Titan's atmosphere - Temperature and dynamics. *Nature* 292, 693–698.
- Fulchignoni, M., and 42 colleagues, 2005. In situ measurements of the physical characteristics of Titan's environment. *Nature* 438, 785–791.
- Geiss, J., Gloeckler, G., 1998. Abundances of deuterium and helium-3 in the protosolar cloud. *Space Science Reviews* 84, 239–250.
- Gibb, E. L., Mumma, M. J., dello Russo, N., Disanti, M. A., Magee-Sauer, K., 2003. Methane in Oort cloud comets. *Icarus* 165, 391–406.
- Gillett, F. C., 1975. Further observations of the 8-13 micron spectrum of Titan. *ApJL* 201, L41–L43.
- Gillett, F. C., Forrest, W. J., Merrill, K. M., 1973. 8-13 Micron Observations of Titan. *ApJL* 184, L93–L95.
- Griffith, C. A., and 26 colleagues, 2005. The Evolution of Titan's Mid-Latitude Clouds. *Science* 310, 474–477.
- Gurwell, M. A., 2004. Submillimeter observations of Titan : global measures of stratospheric temperature, CO, HCN, HC₃N, and the isotopic ratios ¹²C/¹³C and ¹⁴N/¹⁵N. *Astrophys. J.* 616, L7–L10.

- Hanel, R., Conrath, B., Flasar, F. M., Kunde, V., Maguire, W., Pearl, J. C., Pirraglia, J., Samuelson, R., Herath, L., Allison, M., Cruikshank, D. P., Gautier, D., Gierasch, P. J., Horn, L., Koppany, R., Ponnampertuma, C., 1981. Infrared observations of the Saturnian system from Voyager 1. *Science* 212, 192–200.
- Haverd, V. E., Lewis, B. R., Gibson, S. T., Stark, G., 2005. Rotational effects in the band oscillator strengths and predissociation linewidths for the lowest $^1\Pi_u-X^1\Sigma_g^+$ transitions of N_2 . *J. Chem. Phys.* 123, 214304.
- Herzberg, G., 1945. *Molecular spectra and molecular structure. Vol.2 : Infrared and Raman spectra of polyatomic molecules.* New York : Van Nostrand, Reinhold, 1945.
- Hidayat, T., 1997. Observations hétérodynes millimétriques et submillimétrique de Titan : étude de la composition chimique de son atmosphère, rapport de thèse.
- Hidayat, T., Marten, A., Bézard, B., Gautier, D., Owen, T., Matthews, H. E., Paubert, G., 1997. Millimeter and submillimeter heterodyne observations of Titan : retrieval of the vertical profile of HCN and the $^{12}C/^{13}C$ ratio. *Icarus* 126, 170–182.
- Hourdin, F., Lebonnois, S., Luz, D., Rannou, P., 2004. Titan's stratospheric composition driven by condensation and dynamics. *J. Geophys. Res.* 109, E12005, doi :10.1029/2004JE002282.
- Hourdin, F., Talagrand, O., Sadourny, R., Courtin, R., Gautier, D., McKay, C. P., 1995. Numerical simulation of the general circulation of the atmosphere of Titan. *Icarus* 117, 358–374.
- Hunten, D. M., Tomasko, M. G., Flasar, F. M., Samuelson, R. E., Strobel, D. F., Stevenson, D. J., 1984. *Titan*, pp. 671–759. Saturn.
- Ignatiev, N. i., Moroz, V. i., Zasova, L. V., Khatuntsev, I. v., 1999. Water vapour in the middle atmosphere of Venus : An improved treatment of the Venera 15 ir spectra. *Planet. Space Sci.* 47, 1061–1075.
- Jacquinet-Husson, N., and 41 colleagues, 2005. The 2003 edition of the GEISA/IASI spectroscopic database. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 95, 429–467.
- Jacquinet-Husson, N., and 47 colleagues, 1999. The 1997 spectroscopic GEISA databank. *J. Quant. Spectro. Rad. Trans.* 62, 205–254.
- Jehin, E., Arpigny, C., Manfroid, J., Hutsemékers, D., Zucconi, J.-M., Schulz, R., Stüwe, J. A., 2003. The $^{12}C/^{13}C$ and $^{14}N/^{15}N$ Isotopic Ratios in Comet C/2000 WM1 (LINEAR). In : Charbonnel, C., Schaerer, D., Meynet, G. (Eds.), *Astronomical Society of the Pacific Conference Series*, pp. 182.
- Jolly, A., Benilan, Y., Fayt, A., 2007. New infrared integrated band intensities for HC_3N and extensive line list for the ν_5 and ν_6 bending modes. *Journal of Molecular Spectroscopy* 242, 46–54.
- Koops, T., Visser, T., Smit, W. M. A., 1984. The harmonic force field and absolute infrared intensities of diacetylene. *J. Mol. Struct.* 125, 179–196.

- Kuiper, G. P., 1944. Titan : a Satellite with an Atmosphere. *ApJ* 100, 378–343.
- Kunde, V. G., and 50 colleagues, 1996. Cassini infrared Fourier spectroscopic investigation. In : Horn, L. (Ed.), *Cassini/Huygens : A Mission to the Saturnian System*, Proc. SPIE Vol. 2803, pp. 162–177.
- Lara, L. M., Lellouch, E., López-Moreno, J. J., Rodrigo, R., 1996. Vertical distribution of Titan’s atmospheric neutral constituents. *J. Geophys. Res.* 101, 23261–23283.
- Lara, L.-M., Lellouch, E., Shematovich, V., 1999. Titan’s atmospheric haze : the case for HCN incorporation. *Astron. Astrophys.* 341, 312–317.
- Lebonnois, S., 2005. Benzene and aerosol production in Titan and Jupiter’s atmospheres : a sensitivity study. *Planet. Space Sci.* 53, 486–497.
- Lebonnois, S., Toubanc, D., Hourdin, F., Rannou, P., 2001. Seasonal variations of Titan’s atmospheric composition. *Icarus* 152, 384–406.
- Lellouch, E., 1990. Atmospheric models of Titan and Triton. *Annales Geophysicae* 8, 653–660.
- Lellouch, E., Bézard, B., Fouchet, T., Feuchtgruber, H., Encrenaz, T., de Graauw, T., 2001. The deuterium abundance in Jupiter and Saturn from ISO-SWS observations. *A&A* 370, 610–622.
- Lewis, B. R., Gibson, S. T., Zhang, W., Lefebvre-Brion, H., Robbe, J.-M., 2005. Predissociation mechanism for the lowest $^1\Pi_u$ states of N_2 . *J. Chem. Phys.* 122, 144302.
- Low, F. J., Rieke, G. H., 1974. Infrared Photometry of Titan. *ApJL* 190, L143–L145.
- Lunine, J. I., Yung, Y. L., Lorenz, R. D., 1999. On the volatile inventory of Titan from isotopic abundances in nitrogen and methane. *Planet. Space Sci.* 47, 1291–1303.
- Luz, D., Hourdin, F., 2003. Latitudinal transport by barotropic waves in Titan’s stratosphere. I. General properties from a horizontal shallow-water model. *Icarus* 166, 328–342.
- Luz, D., Hourdin, F., Rannou, P., Lebonnois, S., 2003. Latitudinal transport by barotropic waves in Titan’s stratosphere. II. Results from a coupled dynamics-microphysics-photochemistry GCM. *Icarus* 166, 343–358.
- Mahaffy, P. R., Donahue, T. M., Atreya, S. K., Owen, T. C., Niemann, H. B., 1998. Galileo Probe Measurements of D/H and $^3\text{He}/^4\text{He}$ in Jupiter’s Atmosphere. *Space Science Reviews* 84, 251–263.
- Mahaffy, P. R., Niemann, H. B., Alpert, A., Atreya, S. K., Demick, J., Donahue, T. M., Harpold, D. N., Owen, T. C., 2000. Noble gas abundance and isotope ratios in the atmosphere of Jupiter from the Galileo Probe Mass Spectrometer. *JGR* 105, 15061–15072.
- Marten, A., Hidayat, T., Biraud, Y., Moreno, R., 2002. New millimeter heterodyne observations of Titan : vertical distributions of nitriles HCN, HC_3N , CH_3CN , and the isotopic ratio $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ in its atmosphere. *Icarus* 158, 532–544.

- Mayo, L. A., Samuelson, R. E., 2005. Condensate clouds in Titan's north polar stratosphere. *Icarus* 176, 316–330.
- McKay, C. P., 1996. Elemental composition, solubility, and optical properties of Titan's organic haze. *Planet. Space Sci.* 44, 741–747.
- Meier, R., Owen, T. C., 1999. Cometary Deuterium. *Space Science Reviews* 90, 33–43.
- Mumma, M. J., DiSanti, M. A., Magee-Sauer, K., Bonev, B. P., Villanueva, G. L., Kawakita, H., Dello Russo, N., Gibb, E. L., Blake, G. A., Lyke, J. E., Campbell, R. D., Aycok, J., Conrad, A., Hill, G. M., 2005. Parent volatiles in Comet 9P/Tempel 1 : before and after impact. *Science* 310, 270–274.
- Niemann, H. B., and 17 colleagues, 2005. The abundances of constituents of Titan's atmosphere from the GCMS instrument on the Huygens probe. *Nature* 438, 779–784.
- Niemann, H. B., and 18 colleagues, 2002. The Gas Chromatograph Mass Spectrometer for the Huygens Probe. *Space Science Reviews* 104, 553–591.
- Niemann, H. B., Atreya, S. K., Carignan, G. R., Donahue, T. M., Haberman, J. A., Harpold, D. N., Hartle, R. E., Hunten, D. M., Kasprzak, W. T., Mahaffy, P. R., Owen, T. C., Way, S. H., 1998. The composition of the Jovian atmosphere as determined by the Galileo probe mass spectrometer. *JGR* 103, 22831–22846.
- Nixon, C. A., Achterberg, R. K., Vinatier, S., Bézard, B., Coustenis, A., Irwin, P. G. J., Teanby, N. A., de Kok, R., Romani, P. N., Jennings, D. E., Bjoraker, G. L., Flasar, F. M. The $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ isotopic ratio in Titan hydrocarbons from Cassini/CIRS infrared spectra. *Icarus*, soumis.
- Nixon, C. A., and 14 colleagues, 2007. Meridional variations of C_2H_2 and C_2H_6 in Jupiter's atmosphere from Cassini CIRS infrared spectra. *Icarus* 188, 47–71.
- Orton, G., 1992. Ground-based observations of Titan's thermal spectrum. In : Kaldeich, B. (Ed.), *ESA SP-338 : Symposium on Titan*, pp. 81–85.
- Owen, T., Mahaffy, P., Niemann, H. B., Atreya, S., Donahue, T., Bar-Nun, A., de Pater, I., 1999. A low-temperature origin for the planetesimals that formed Jupiter. *Nature* 402, 269–270.
- Owen, T., Mahaffy, P. R., Niemann, H. B., Atreya, S., Wong, M., 2001. Protosolar Nitrogen. *ApJL* 553, L77–L79.
- Pekkala, K., Graner, G., Wlodarczak, G., Demaison, J., Koput, J., 1991. A global treatment of the $\nu_9 = 1$ and $\nu_{10} = 2$ vibrational levels of propyne. *J. Mol. Spectrosc.* 149, 214–229.
- Penteado, P. F., Griffith, C. A., Greathouse, T. K., de Bergh, C., 2005. Measurements of CH_3D and CH_4 in Titan from Infrared Spectroscopy. *ApJL* 629, L53–L56.
- Porco, C. C., and 35 colleagues, 2005. Imaging of Titan from the Cassini spacecraft. *Nature* 434, 159–168.

- Raulin, F., Owen, T., 2002. Organic Chemistry and Exobiology on Titan. *Space Science Reviews* 104, 377–394, doi : 10.1023/A :1023636623006.
- Rinsland, C. P., Malathy Devi, V., Smith, M. A. H., Benner, D. C., Sharpe, S. W., Sams, R. L., 2003. A multispectrum analysis of the ν_1 band of $\text{H}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$: Part II. Air- and N_2 -broadening, shifts and their temperature dependences. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 82, 343–362.
- Roe, H. G., Bouchez, A. H., Trujillo, C. A., Schaller, E. L., Brown, M. E., 2005. Discovery of Temperate Latitude Clouds on Titan. *ApJL* 618, L49–L52.
- Roe, H. G., Greathouse, T. K., Richter, M. J., Lacy, J. H., 2003. Propane on Titan. *Astrophys. J.* 597, L65–L68.
- Rothman, L. S., and 29 colleagues, 2005. The HITRAN 2004 molecular spectroscopic database. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* 96, 139–204.
- Samuelson, R. E., Maguire, W. C., Hanel, R. A., Kunde, V. G., Jennings, D. E., Yung, Y. L., Aikin, A. C., 1983. CO_2 on Titan. *JGR* 88, 8709–8715.
- Samuelson, R. E., Mayo, L. A., 1991. Thermal infrared properties of Titan’s stratospheric aerosol. *Icarus* 91, 207–219.
- Sprengers, J. P., Ubachs, W., Baldwin, K. G. H., Lewis, B. R., Tchang-Brillet, W.-Ü. L., 2003. Extreme ultraviolet laser excitation of isotopic molecular nitrogen : The dipole-allowed spectrum of $^{15}\text{N}_2$ and $^{14}\text{N}^{15}\text{N}$. *J. Chem. Phys.* 119, 3160–3173.
- Stark, G., Huber, K. P., Yoshino, K., Smith, P. L., Ito, K., 2005. Oscillator strength and linewidth measurements of dipole-allowed transitions in $^{14}\text{N}_2$ between 93.5 and 99.5 nm. *J. Chem. Phys.* 123, 214303.
- Tanguy, L., Bézard, B., Marten, A., Gautier, D., Gerard, E., Paubert, G., Lecacheux, A., 1990. Stratospheric profile of HCN on Titan from millimeter observations. *Icarus* 85, 43–57.
- Teanby, N. A., Irwin, P. G. J., de Kok, R., Nixon, C. A., Coustenis, A., Bézard, B., Calcutt, S. B., Bowles, N. E., Flasar, F. M., Fletcher, L., Howett, C., Taylor, F. W., 2006. Latitudinal variations of HCN, HC_3N , and C_2N_2 in Titan’s stratosphere derived from Cassini CIRS data. *Icarus* 181, 243–255.
- Teanby, N. A., Irwin, P. G. J., de Kok, R., Vinatier, S., Bézard, B., Nixon, C. A., Flasar, F. M., Calcutt, S. B., Bowles, N. E., Fletcher, L., Howett, C., Taylor, F. W., 2007. Vertical profiles of HCN, HC_3N , and C_2H_2 in Titan’s atmosphere derived from Cassini/CIRS data. *Icarus* 186, 364–384.
- Tokunaga, A., Beck, S., Geballe, T., Lacy, J., 1980. The Detection of C_2H_2 on Saturn and Titan. In : *Bulletin of the American Astronomical Society*, Volume 12 of *Bulletin of the American Astronomical Society*, pp. 669.
- Tomasko, M. G., and 39 colleagues, 2005. Rain, winds and haze during the Huygens probe’s descent to Titan’s surface. *Nature* 438, 765–778.

- Tomasko, M. G., Bézard, B., Doose, L., Engel, S., Karrkochka, E., Vinatier, S., 2007. Heat balance in Titan's atmosphere. *Planet. Space. Sci.*, soumis.
- Toublanc, D., Parisot, J. P., Brillet, J., Gautier, D., Raulin, F., McKay, C. P., 1995a. Erratum : Photochemical modeling of Titan's Atmosphere. *Icarus* 117, 218.
- Toublanc, D., Parisot, J. P., Brillet, J., Gautier, D., Raulin, F., McKay, C. P., 1995b. Photochemical modeling of Titan's atmosphere. *Icarus* 113, 2–26. Erratum : *Icarus* 117, 218.
- Tyler, G. L., Eshleman, V. R., Anderson, J. D., Levy, G. S., Lindal, G. F., Wood, G. E., Croft, T. A., 1981. Radio science investigations of the Saturn system with Voyager 1 - Preliminary results. *Science* 212, 201–206.
- Vander Auwera, J., Moazzen-Ahmadi, N., Flaud, J.-M., 2007. Toward an Accurate Database for the 12 μm Region of the Ethane Spectrum. *ApJ* 662, 750–757.
- Vervack, R. J., Sandel, B. R., Strobel, D. F., 2004. New perspectives on Titan's upper atmosphere from a reanalysis of the Voyager 1 UVS solar occultations. *Icarus* 170, 91–112.
- Vinatier, S., Bézard, B., Fouchet, T., Teanby, N. A., de Kok, R., Irwin, P. G. J., Conrath, B. J., Nixon, C. A., Romani, P. N., Flasar, F. M., Coustenis, A., 2007. Vertical abundance profiles of hydrocarbons in Titan's atmosphere at 15°S and 80°N retrieved from Cassini/CIRS spectra. *Icarus* 188, 120–138.
- Vinatier, S., Bézard, B., Nixon, C. A., 2007. The Titan $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ and $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ isotopic ratios in HCN from Cassini/CIRS. *Icarus*, sous presse, doi :10.1016/j.icarus.2007.06.001.
- Waite, J. H., and 15 colleagues, 2004. The Cassini Ion and Neutral Mass Spectrometer (INMS) Investigation. *Space Science Reviews* 114, 113–231.
- Waite, J. H., and 21 colleagues, 2005. Ion Neutral Mass Spectrometer Results from the First Flyby of Titan. *Science* 308, 982–986.
- Washul, J., Heiner, Y., Sumpf, B., Kronfeldt, H. D., 1998. Diode laser spectroscopy in the 9.8- μm ν_{14} band of benzene. II - Self-, air-, and noble-gas broadening coefficients. *J. Mol. Spectrosc.* 190, 140–149.
- Wilson, E. H., Atreya, S. K., 2004. Current state of modeling the photochemistry of Titan's mutually dependent atmosphere and ionosphere. *J. Geophys. Res.* 109, doi : 10.1029/2003JE002181. E06002.
- Yelle, R. V., Strobell, D. F., Lellouch, E., Gautier, D., 1997. The Yelle Titan Atmosphere Engineering Models. In : Wilson, A. (Ed.), *ESA Special Publication*, Volume 1177 of *ESA Special Publication*, pp. 243–256.
- Yung, Y. L., Allen, M., Pinto, J. P., 1984. Photochemistry of the atmosphere of Titan - Comparison between model and observations. *Astrophys. J.* 55, 465–506.