

## Early evolution and habitability of rocky planets Arnaud Salvador

### ▶ To cite this version:

Arnaud Salvador. Early evolution and habitability of rocky planets. Planetology. Université Paris Saclay (COmUE), 2018. English. NNT: 2018SACLS439 . tel-02134107

## HAL Id: tel-02134107 https://theses.hal.science/tel-02134107v1

Submitted on 20 May 2019

**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.





# Evolution primitive et habitabilité des planètes rocheuses

Thèse de doctorat de l'Université Paris-Saclay préparée à l'Université Paris-Sud

Ecole doctorale n°579 Sciences mécaniques et énergétiques, matériaux et géosciences (SMEMAG) Spécialité de doctorat : Structure et évolution de la Terre et des autres planètes

Thèse présentée et soutenue à Orsay, le 05 novembre 2018, par

### **M. ARNAUD SALVADOR**

Composition du Jury :

<b>M. François Costard</b> Directeur de Recherche, Laboratoire GEOPS (UMR 8148)	Président
M. Gaël Choblet Chargé de Recherche, LPG Nantes (UMR 6112)	Rapporteur
<b>M. Franck Selsis</b> Directeur de Recherche, LAB Bordeaux (UMR 5804)	Rapporteur
Mme Doris Breuer Professeure, DLR Institute of Planetary Research, Berlin	Examinatrice
<b>M. Henri Samuel</b> Chargé de Recherche, IPGP (UMR 7154)	Examinateur
Mme Anne Davaille Directrice de Recherche, Laboratoire FAST (UMR 7608)	Directrice de thèse
Mme Hélène Massol Maître de Conférences, Laboratoire GEOPS (UMR 8148)	Co-directrice de thèse

## UNIVERSITÉ PARIS-SACLAY

Thèse de doctorat de l'Université Paris-Sud

# Early Evolution and Habitability of Rocky Planets

Auteur : Arnaud Salvador Encadrement : Dr. Anne DAVAILLE Dr. Hélène MASSOL

En vue de l'obtention du diplôme de Doctorat de l'Université Paris-Sud Spécialité : Planétologie

Ecole Doctorale n°579 Sciences Mécaniques et Energétiques, Matériaux et Géosciences (SMEMAG) Préparée conjointement au laboratoire Fluides, Automatique et Systèmes Thermiques (FAST) et au laboratoire Géosciences Paris-Sud (GEOPS)

Université Paris-Saclay

## Abstract

Université Paris-Sud

Préparée conjointement au laboratoire Fluides, Automatique et Systèmes Thermiques (FAST) et au laboratoire Géosciences Paris-Sud (GEOPS)

Doctorat de l'Université Paris-Sud

#### Early Evolution and Habitability of Rocky Planets

by Arnaud Salvador

At the end of the accretion phase, rocky planets grow through high energetic impact processes. Combined with other heat sources, they most likely melt the surface of the planets, forming an ocean of molten rocks. The cooling and solidification of this early so-called magma ocean strongly influences the earliest compositional differentiation and volatile distribution of the planet. Indeed, this common early evolution stage of rocky planets witnesses the degassing of the atmosphere, and sets the initial conditions for the long-term evolution of the planets. It is thus of major importance in understanding the formation of the primitive water ocean, the onset of thermally driven mantle convection, and the diversity of observed terrestrial planets.

Using a coupled magma ocean-atmosphere thermal evolution model, we investigated the cooling of the planet and the surface conditions reached at the end of this early stage. We studied how the initial volatile content and the distance from the star influence the formation of a water ocean at the end of the cooling, for both cloud-free and cloudy atmospheres. We then extended this approach to planets orbiting colder stars than the Sun.

The relative amount of  $H_2O$  and  $CO_2$  in the atmosphere can preclude water ocean formation, leading to solid surface planets without water ocean. Scaling laws are derived to predict the formation of a water ocean as a function of the initial volatile content. The presence of a thick cloud cover extends clement surface conditions close to the star, and allows for water ocean formation on early Venus. Such temperate conditions might be suitable for the emergence of life and suggest that, depending on the cloud cover, the Earth and Venus might not be as different as previously thought at the end of the magma ocean stage. For stars colder than the Sun, water ocean formation is shifted to lower stellar fluxes. The cooling effect of clouds becomes less efficient for cold stars, where the location of the temperate zone's inner edge tends to be independent of the cloud cover.

### Résumé

Les planètes rocheuses achèvent leur formation dans des processus collisionnels très énergétiques. L'énergie libérée lors des impacts majeurs a vraisemblablement fondu la surface des planètes, formant ainsi un océan de roches en fusion. Le refroidissement et la solidification de cet « océan de magma » conditionnent la différenciation chimique du manteau et la distribution des éléments volatils entre les différents réservoirs de la planète. C'est lors de cette phase évolutive, commune aux planètes rocheuses, que l'atmosphère est formée par dégazage des volatils et que les conditions initiales de l'évolution future des planètes se mettent en place. C'est donc une phase évolutive de première importance pour comprendre l'apparition des océans d'eau primitifs, le démarrage de la convection thermique du manteau et l'actuelle diversité des planètes telluriques.

Un modèle numérique couplant l'évolution thermique de l'océan de magma en interaction avec l'atmosphère a été utilisé pour étudier le refroidissement de la planète et les conditions de surface résultantes. Nous avons examiné l'influence du contenu initial en volatil combiné avec la distance orbitale de la planète sur la formation des premiers océans d'eau à la fin du refroidissement, pour des atmosphères avec et sans nuages. Cette approche a ensuite été étendue aux planètes rocheuses extra-solaires orbitant des étoiles froides.

Le contenu relatif en  $H_2O$  et  $CO_2$  de l'atmosphère peut empêcher la formation d'océans, menant à des planètes ayant une surface solide sans océans d'eau. Des lois d'échelle prédisent la formation d'océans en fonction du contenu initial en volatil. Une épaisse couche nuageuse diminue la température de surface et maintient des conditions clémentes plus proches de l'étoile, rendant ainsi possible la formation d'un océan sur Vénus. Ces conditions de surface tempérées pourraient alors être favorables à l'émergence de la vie et suggèrent qu'en fonction de la couverture nuageuse, la Terre et Vénus pourraient être dans un état relativement similaire à la fin de la phase océan de magma, contrairement à ce qui est généralement admis. Plus la température de l'étoile est froide, et plus la formation d'un océan est restreinte à des flux stellaires faibles. L'effet refroidissant des nuages est atténué pour les étoiles froides autour desquelles la position du bord interne de la zone habitable tend à être indépendante de la couverture nuageuse.

## Remerciements

Je me suis longuement questionné sur la manière d'écrire les pages qui suivent, étant donné qu'il m'a toujours semblé bien difficile de rendre hommage, avec de simples mots, à toutes les personnes qui ont contribué, de près ou de loin, à l'aboutissement de cette thèse. Je tiens d'abord à m'excuser auprès de celles et ceux que j'aurais oublié de mentionner ci-dessous.

Je commencerai ici par adresser mes plus sincères remerciements à Hélène Massol et Anne Davaille, mes directrices de thèse, qui m'ont guidé tout au long de cette aventure. Hélène, merci pour la confiance que tu m'as accordée, et ce dès le M1, alors qu'il commençait à devenir pressant pour moi de trouver un stage. C'est alors que tu m'as initié à la recherche, sur ce sujet passionnant qu'est l'évolution primitive des planètes rocheuses et l'étude de la phase océan de magma. Merci pour la grande liberté que tu m'as accordée, ta grande sympathie, ta profonde humanité, ton écoute, ta disponibilité, ta pédagogie et ta rigueur scientifique qui m'a toujours inspiré. Je n'omettrai pas de mentionner ici ton amour des chats, qui n'a pas manqué de nous rapprocher et qui a joué un rôle essentiel dans le bon déroulement de cette thèse.

Anne, merci d'avoir été mon encadrante pendant ces trois dernières années et de m'avoir accueilli au FAST. Tu m'as ouvert la porte de ton laboratoire expérimental dans lequel j'ai pu découvrir avec fascination, des heures durant, l'évolution des colloïdes, et assister en direct au démarrage de la subduction... Merci pour tes nombreuses relectures d'articles, ton exigence scientifique, ton soutien et ta compréhension lorsque l'enseignement prenait du temps, mais aussi pour tes conseils avisés au cours de la thèse et pour l'après thèse. Tu m'as toujours encouragé à donner le maximum. Merci aussi d'avoir sans cesse favorisé mon intégration au sein du réseau CREEP et auprès des nombreux chercheurs invités.

Merci à toutes les deux d'avoir rassemblé les conditions nécessaires au bon déroulement de cette thèse, que ce soit au sein des laboratoires ou en me permettant de participer à tant de conférences pendant ces trois années au cours desquelles j'ai réellement pu m'épanouir.

Je remercie chaleureusement les chercheuses et chercheurs qui ont humblement accepté de prendre part à mon jury de thèse et qui ont évalué mes travaux : Doris Breuer (DLR, Berlin), Gaël Choblet (LPG, Nantes), François Costard (GEOPS, Orsay), Henri Samuel (IPGP, Paris), et Franck Selsis (LAB, Bordeaux). Merci à Gaël Choblet et Franck Selsis d'avoir pris la peine de rapporter mon travail et d'y avoir apporté leur éclairage à travers la constructivité de leurs remarques et la pertinence de leurs questions. Merci à François Costard d'avoir présidé le jury. Je voudrais également exprimer ici ma profonde gratitude envers la bienveillance dont les membres du jury ont fait preuve à mon égard. J'ai aussi grandement apprécié la diversité et la pertinence des questions posées lors de la discussion qui a suivi l'exposé.

Je tiens ensuite à remercier toutes les personnes avec qui j'ai pu collaborer sur ce projet de recherche : Emmanuel Marcq, pour sa disponibilité et sa réactivité infaillible lors des nombreux échanges concernant le modèle atmosphérique ; Philippe Sarda, qui n'a jamais laissé un sms sans réponse et avec qui j'ai toujours pris grand plaisir à converser ; et Eric Chassefière, qui a initié ce projet de modélisation du refroidissement de l'océan magmatique en interaction avec l'atmosphère, et cela bien avant mon arrivée au sein du laboratoire. Merci également à William Pluriel dont le travail réalisé en stage de M2 a pu être mis à profit dans le modèle couplé.

Viennent ensuite les personnes dont l'aide technique a été un véritable atout pour mener à bien ce projet. Je tiens à remercier infiniment Claude Mercier (IAS, Orsay) pour son aide précieuse et capitale lors de la prise en main du cluster de l'Institut d'Astrophysique Spatiale (ERM/INSU/Univ. Paris-Sud) permettant l'exécution simultanée d'un nombre considérable de simulations et favorisant les études de sensibilité menées lors de cette thèse.

La mise en place des expériences de laboratoire menées au FAST a été rendue possible tout d'abord grâce au professionnalisme et à la grande disponibilité de l'équipe technique (constituée de Rafaël Pidoux et de Johannes Amarni pour la construction du dispositif expérimental), ensuite grâce aux expertises d'Alban Aubertin et de Lionel Auffray, mises à profit lors de la mise en place du système d'acquisition et de mesures, et enfin grâce à l'aide de Babacar Ndoye. Tous ont été de bon conseil et prêts à aider dans la bonne humeur. La vie au laboratoire n'aurait pas été la même sans le dynamisme, la positivité et la poésie de Nathalie Aucuit, personne d'une grande et rare humanité. Merci Nathalie pour ta présence, ton amitié et ton aide précieuse sur les manipulations expérimentales. Merci également à Amza Ouedraogo pour sa contribution lors de la calibration. J'ai réellement apprécié nos échanges, toujours trop courts, mais teintés d'une douceur peu commune.

Un grand merci également à Chiara Marmo pour sa gentillesse et son aide dans l'utilisation du scanner laser 3–D, et à Bertrand Saint-Bezar pour la photogrammétrie.

Ayant eu la chance de préparer ma thèse au sein de deux laboratoires, j'ai pu côtoyer un grand nombre de personnes parmi lesquelles beaucoup ont favorisé un environnement de travail plus qu'agréable.

Mes premières pensées vont aux membres de l'équipe de géomorphologie planétaire et interactions subsurface-atmosphère du 509 : François Costard, Hélène, Laure Dupeyrat, Frédéric Schmidt, Sylvain Bouley, Antoine Séjourné, Julien Gargani et Chiara Marmo. Merci à tous pour votre accueil chaleureux et la bonne ambiance qui règne au 509. Merci également aux anciens doctorants du 509 : Jennifer Fernando, Anne-Thérèse Auger, François Andrieu, François Landais, et les autres, pour les moments de discussion et de partage. Mention spéciale à Jennifer pour m'avoir transmis quelques commandes UNIX qui ont vite fait partie de mon quotidien, et pour le partage de son expérience avec nous. Le monde parfois opaque de la recherche aurait été bien difficile à appréhender sans tes conseils. De même pour Monsieur Landais, grand maître du GPU Xeon Phi. Merci aussi à Jinjin, Alina, Axel, Elodie, Mathilde et Stéphane pour les échanges toujours agréables.

A GEOPS, je remercie par ailleurs Claire Boukari, Evelyne Crinon et Carlos Pallares pour leur grande sympathie. Merci aussi à Xavier Quidelleur pour sa disponibilité et ses nombreux conseils. Un grand merci à Valérie Godard pour les belles discussions amicales, les nombreuses photos, et pour le partage toujours enthousiaste de son précieux savoir-faire. Merci aussi à Jacques-Marie Bardintzeff pour les quelques discussions passionnantes que nous avons eues.

Merci à tous les permanents du FAST, et notamment Neil Ribe, Ludovic Pauchard, et Sophie Mergui dont les discussions partagées ont toujours été agréables. Merci également à tous les non-permanents du FAST, la team sport, Wen, Manon, Adama, Perrine, Chen, Maxime aka poulain (mention spéciale pour les entraînements intensifs), Yiqin, Romaric et les autres. Merci à Gianluca et Nicolo, sans qui mon vocabulaire italien ne serait pas aussi riche. Merci à Marguerite pour les échanges toujours plaisants, les nombreux conseils et les partages de « tips » avec Wen. Pour la plupart d'entre vous, j'aurais bien du mal à résumer en quelques lignes combien votre présence a été propice à un environnement de travail agréable, et je sais que les échanges se poursuivront bien au-delà de la thèse.

Je suis intimement persuadé qu'un laboratoire aurait bien du mal à fonctionner sans le professionnalisme des personnes en charge de la gestion financière, administrative ou pédagogique, et sans leur grande humanité. Je voudrais ainsi remercier Monique Sainte-Rose et Mai Guerrib du FAST, Mauricette Dufour, Georgette Raboux, Catherine Thiery, Kim Ho et Chris Weigel de GEOPS. Merci aussi à Chantal Rock pour sa disponibilité, son écoute et sa grande gentillesse.

Par ailleurs, j'ai eu le grand plaisir de pouvoir faire du monitorat au cours de ces trois années et je tiens ici à remercier tous les étudiants avec qui j'ai eu la chance d'interagir. J'ai réellement apprécié leur indiviualité, leur dynamisme, leur enthousiasme et leur curiosité. Il m'a parfois été bien utile, en leur compagnie, de prendre du recul sur la recherche. Parmi les équipes pédagogiques dont j'ai pu faire partie, je voudrais remercier chaleureusement Laure Dupeyrat pour sa grande sympathie, sa bonne humeur, et pour tous les moments de partage. Merci à Sophie Sepulcre pour l'organisation infaillible de GEOS 101. Un grand merci également à Michel Menou, sans qui le module de Projet Professionnel serait bien différent, et avec qui j'ai éprouvé un grand plaisir à discuter autour de la pédagogie, mais aussi du rôle social de l'enseignant et du personnel de la faculté, tout cela au détour de quelques oraux improvisés.

En dehors des laboratoires FAST et GEOPS ou de l'université Paris-Sud, je remercie particulièrement Nathalie Carrasco du LATMOS, dont l'aide précieuse lors de ma recherche de stage en M1 a été déterminante, puisqu'elle m'a permis d'entrer en contact avec Hélène. Merci pour ta grande disponibilité et pour ta bienveillance. J'en profite pour remercier ici Ludovic Vettier, collègue pongiste, et Patrick Galopeau du LATMOS pour le temps consacré aux discussions plus ou moins scientifiques.

Je remercie également le réseau européen CREEP (ITN) pour m'avoir convié aux workshops de Sète et de Rome, ainsi que toutes les personnes impliquées et avec qui j'ai pu échanger : Andréa Tommasi, Sylvie Demouchy, Taras Gerya, Paul Tackley, Boris Kaus, Alida Lefter. Merci aussi à Simon Preuß, Jana Schierjott, ainsi qu'à tous les CREEPers et autres CREEP friends. Merci également à toutes les personnes que j'ai pu rencontrer et avec qui j'ai eu le plaisir d'échanger en conférences : Cédric Gillmann, Irene Bonati, Apurva Oza, et bien d'autres...

Parmi le corps enseignant, il est des personnes dont la passion transparaît et qui ne vous laissent pas indifférent. Au cours de mon cursus, j'ai ainsi eu la chance de pouvoir assister aux enseignements de Thomas Widemann, dont l'humilité et l'humanité m'ont profondément marqué et inspiré. J'ai aussi eu le privilège d'écouter les histoires fascinantes d'André Brahic à propos de l'exploration du système solaire par les sondes Voyager et Cassini ; ou encore de découvrir les systèmes de représentation du monde, des présocratiques à Newton, contés et contextualisés par Efthymios Nicolaïdis. Ces personnes ont constitué pour moi une grande source d'inspiration et de motivation, et je leur en suis profondément reconnaissant.

Merci également à Henri Martin, du LMV de Clermont-Ferrand, qui a été le premier à me faire découvrir la notion d'océan magmatique, façonnant ainsi mon intérêt pour l'évolution primitive des planètes rocheuses.

Un grand merci à Martha Boeglin pour sa gentillesse et sa grande pédagogie, elle qui m'a donné les clés pour entamer avec sérénité la rédaction de cette thèse. Je recommande d'ailleurs chaleureusement son site internet scriptoria.org pour tout projet d'écriture.

Cela va de soi, mais il me semble essentiel de le rappeler ici : la réalisation d'une thèse ne peut se résumer au simple cadre académique, mais s'étend bien au-delà, aussi bien dans le temps que dans l'espace, et je suis intimement convaincu que rien n'aurait été possible sans les personnes mentionnées ci-après.

Ainsi, ma thèse aurait été tout autre sans la présence de David Dubois. Je suis vraiment content d'avoir pu vivre cette belle et unique aventure avec toi, tel un véritable compagnon de route. Difficile et même impossible à résumer en quelques lignes, j'évoquerai simplement ici le souvenir impérissable de nos longues nuits de travail, à Centrale ou partout ailleurs, bercées par les mélodies de Bach ou Chopin, et accompagnées des thés les plus parfumés dans la douce lueur d'une lumière apaisante. Merci aussi pour tes relectures et tes corrections du présent manuscrit.

Jeanne (Bousquet), merci infiniment pour ta présence et ton soutien inconditionnel depuis tant d'années. Notre amitié est une véritable bénédiction et nos nombreuses discussions et échanges m'ont véritablement porté et inspiré pendant toutes ces années.

François (Melgar), ce n'est pas que sur les routes que nous cheminons ensemble. Ta poésie, ton amitié et tes précieux conseils m'ont accompagné infailliblement tout au long de ces années parsemées d'épreuves, et je ne peux qu'exprimer ici ma profonde gratitude pour ta belle présence. Merci par ailleurs pour tes corrections.

Je tiens à remercier également Merve (Erguner) qui a toujours cru en moi, qui m'a encouragé dans cette voie dès le master 1, et qui m'a toujours soutenu malgré le temps consacré à la thèse. Mes premières années à Paris auraient été bien différentes sans toi, et je t'en suis infiniment reconnaissant. Je tiens aussi à remercier toute la famille Erguner, que j'ai eu la chance de côtoyer, et dont j'ai toujours eu le sentiment de faire partie intégrante grâce à leur accueil si chaleureux. Je voudrais ainsi exprimer ma profonde gratitude envers M. Kudsi Erguner, dont la bienveillance, la sagesse et l'humilité ont été et resteront pour moi une grande source d'inspiration et de motivation pour mon travail et ma vie personnelle. Je témoigne également mon immense reconnaissance à M<sup>me</sup> Arzu Erguner, Anneciğim, dont la grande délicatesse, le raffinement et la tendre générosité ont fait naître en moi une admiration profonde. Raffinement et générosité qui n'ont pas manqué de s'étendre à l'accueil et à la cuisine dont je suis bien loin d'avoir été insensible. Un immense merci à Selman qui a été comme un grand frère pour moi et dont je n'oublierai pas la profonde gentillesse, l'enthousiasme, mais aussi l'amour et le partage du sucuk yumurta. Merci aussi à Sinan pour les pauses plus ou moins culturelles, les innombrables recommandations/références culinaires, et plus généralement pour tous les moments passés ensemble. Pour finir, un grand merci à Anneanneciğim, dont la présence et les interminables parties de cartes ont toujours été d'un tendre réconfort. Merci à tous pour les beaux moments passés en votre si belle compagnie.

Mathias (Pobrezo), « mon gars », merci pour ton amitié depuis tant d'années, prost. De même, merci à Guo Yin et Pichet dont les rencontres et les amitiés m'ont littéralement fait voyager. M. Arsac, j'ai également une pensée pour nos rapports de stage qui auront été, en quelque sorte, les précurseurs de ces travaux. Merci aussi à Nicolas Lazzerini et Yvon (Delerablée) pour les sorties parisiennes, j'attends vos soutenances respectives avec impatience !

Merci Garima (Singh) pour ton soutien moral, tes encouragements pour achever ce manuscrit, la profondeur de nos échanges et tous les bons moments partagés. Merci Manon (Gille) pour ta présence et pour ce parfait séjour en Bretagne qui a été le contexte idéal pour la rédaction de l'introduction. Merci aussi à Kadir et Ania qui, au-delà de leur amitié, m'ont hébergé dans un moment difficile et ont ainsi bien facilité la fin de la rédaction. Merci Tara (Hill) pour les moments de détente et d'exploration culinaire qui m'ont toujours bien ressourcé.

Merci à Sybille pour son soutien, sa bienveillance et pour m'avoir chaleureusement accueilli à Orléans, à toute heure du jour et de la nuit. Merci aussi à Florent Dubois et le restaurant La Mangeoire à Orléans pour l'organisation irréprochable et la qualité du buffet. Merci à Phurbu pour son grand cœur et les encouragements pour achever l'écriture de ce manuscrit, soutiens agrémentés de puissantes saveurs de la cuisine tibétaine. Merci à Sébastien Onomo Mbassi pour sa gentillesse, sa compagnie, et les discussions nocturnes.

Merci à toutes celles et ceux qui m'ont initié aux Sciences bien avant l'université : M<sup>lle</sup> Rouquet, M<sup>me</sup> Amouroux, M. Maroncle et les autres ; et également à celles dont l'enseignement de l'anglais a sans aucun doute été profitable ici : M<sup>me</sup> Crozat et Ms. Force.

Venons-en maintenant à la famille, élément essentiel à l'accomplissement de ces travaux. Merci à ma sœur Aurélie, pour son soutien et son amour. Merci d'être venue d'aussi loin pour assister à la soutenance. Merci à mes grands-parents, les présents comme ceux qui sont partis trop tôt, pour m'avoir accompagné pendant toutes ces années. Merci à mes oncles et tante, Luis, Edouard, Fati. Merci aussi à Bertrand et Catherine, à Cathy et Daniel. Merci à tous pour votre soutien et votre présence tout au long de mon parcours, vous avez tous contribué à mon épanouissement, et ma vie aurait été toute autre sans vous tous.

Enfin, merci à mon père et à ma mère, pour leur amour inconditionnel qui a rendu tout cela possible. Merci à vous qui avez fait de moi ce que je suis aujourd'hui, vous qui avez toujours cru en moi et m'avez encouragé, dans les hauts comme dans les bas. Ce travail de thèse vous est dédié.

Je finirai par remercier le présent lecteur, pour son intérêt, en espérant qu'il trouve ici quelques éléments de réponse, ou mieux encore de nouveaux questionnements, et qu'il ressente au travers de sa lecture le plaisir que j'ai pu éprouver à l'écriture de ce manuscrit.

# Contents

Al	bstra	t	iii		
$\mathbf{Li}$	st of	Figures	xvii		
$\mathbf{Li}$	List of Tables xxiii				
$\mathbf{Li}$	st of	Abbreviations	xxv		
1	Intr	oduction	1		
	1.1	The Quest for Extra-Terrestrial Life: Habitability of Rocky Planets	1		
		1.1.1 The Inner Edges of the Classical Habitable Zone	2		
		1.1.2 The Outer Edges of the Classical Habitable Zone	3		
		1.1.3 Empirical Limits of the Habitable Zone	4		
		1.1.4 Beyond the Classical Habitable Zone	4		
	1.2	Formation of Terrestrial Planets and Volatile Delivery	7		
		1.2.1 Act I: From Dust Grains to Planetesimals	7		
		1.2.2 Act II: The Runaway and Oligarchic Accretion Phase	11		
		1.2.3 Act III: The Last Stage of Planetary Formation: From Plan	<b>-</b> -		
		tary Embryos to Terrestrial Planets	12		
	1.3	Early Evolution of Terrestrial Planets: the Magma Ocean Stage	14		
		1.3.1 The Magma Ocean Hypothesis	14		
		1.3.2 Thermal Evolution of the Magma Ocean	21		
		Crystallization and Chemical Differentiation	21		
		Atmosphere Degassing and Evolution			
2	Met	nods	33		
	2.1	Magma Ocean	33		
		2.1.1 Initial Conditions	33		
		2.1.2 Magma Ocean Cooling	33		
		2.1.3 Magma Ocean Viscosity	39		
		2.1.4 Radiogenic Heating	41		
	2.2	Atmospheric Model	41		
		2.2.1 Vertical Structure	42		
		2.2.2 Clouds and Albedo Calculations	42		
	2.3	Magma Ocean - Atmosphere Coupling	44		
		2.3.1 Heat Transfer	44		
		2.3.2 Volatiles Partitioning and Degassing	46		
		2.3.3 Numerical Method	47		
2	The	Belative Influence of H <sub>2</sub> O and CO <sub>2</sub> on the Primitive Surf	200		
J	Con	ditions and Evolution of Rocky Planets	ale K1		
	3.1	Introduction	51		
	0.1 2 0	Methods	51 52		
	0.4				

		3.2.1	Magma Ocean	53
			Initial State	54
			Magma Ocean Viscosity	54
			Magma Ocean's Thermal Regime	57
		3.2.2	Mantle - Atmosphere Coupling	60
	3.3	Result	ts	63
		3.3.1	Thermal Evolution for Different Solar Distances	63
		3.3.2	Influence of the Initial $CO_2$ Content	66
		3.3.3	Influence of the Initial $H_2O$ Content	69
		3.3.4	Scaling Laws	71
	3.4	Discus	ssion	75
		3.4.1	Grey Radiative-Convective Versus Non-Grey (k-correlated) At-	
			mosphere	75
		3.4.2	Influence of the Clouds	76
		3.4.3	Limitations	78
	3.5	The E	Carth and Venus	79
		3.5.1	Early Earth	80
		3.5.2	Venus	80
	3.6	Concl	usion	82
	3.7	Apper	ndix	84
		3.7.1	Appendix A: Magma Ocean Viscosity	84
		3.7.2	Appendix B: Processes Occurring During Magma Ocean Solid-	
			ification	84
		3.7.3	Appendix C: Fate of the Volatiles	86
4	Ear	ly Ear	th and Early Venus: From Magma Ocean to Temperate	Э
	Sur	face C	onditions	87
	4.1	Introc	luction	87
	4.2	Metho	pds	89
		4.2.1	Magma Ocean	89
		4.2.2	Atmospheric Model and Incident Stellar Flux	91
		4.2.3	Magma Ocean - Atmosphere Coupling	92
	4.3	Result	ts	93
		4.3.1	Effect of a Variable Albedo on the Thermal Evolution in the	
			Clear-Sky Case	93
		4.3.2	Thermal Evolution With and Without Clouds for a Given Volatile	
			Content at Venus' Distance	95
		4.3.3	Influence of $H_2O$ , $CO_2$ and Solar Distance on the Formation of	
			an Ocean	98
		4.3.4	Albedo Evolution and Albedo at ERCS	100
		4.3.5	Scaling Analysis	103
	4.4	Discus	ssion	106
		4.4.1	Influence of the Albedo on the Location of the Inner Edge of	
			the Temperate Zone	106
			Clear-Sky	106
			Cloudy-Sky	106
		4.4.2	Importance of Atmospheric Escape	106
		4.4.3	Inheritance from the Magma Ocean Cooling	107
			The Early Earth	107
			Early Venus	108
	4.5	Concl	usion	111

 $\operatorname{xiv}$ 

5	Pri	nitive	Evolution and Early Habitability of Rocky Exoplanets	113
	5.1	Introd	uction	113
	5.2	Metho	ds	117
	5.3	Result	8	121
		5.3.1	Thermal Evolution of an Earth-Like Planet Orbiting Different	
			Star-Types	121
		5.3.2 5.3.3	Inner Edge of the Temperate Zone Around Different Star-Types Inner Edge of the Temperate Zone: Influence of the Initial	123
		0.0.0	Volatile Content	194
		534	Influence of the Clouds	121
	5.4	Scalin	o Analysis	127
	5.5	Conclu		120
	5.6	Perspe	ectives: Influence of Planetary Mass	131
6	Ger	ieral C	Conclusions and Perspectives	135
٨	Dág		ubstantial	120
A	$\Delta 1$	Introd		140
	<i>A</i> .1	A.1.1	La recherche de vie extra-terrestre : habitabilité des planètes	140
			rocheuses	140
			La bordure interne de la zone habitable classique	141
			La bordure externe de la zone habitable classique	142
			Limites empiriques de la zone habitable	143
			Au-delà de la zone habitable classique	144
		A.1.2	Formation des planètes telluriques et apport de volatils	147
			Acte I : des grains de poussière aux planétésimaux	147
			Acte II : la phase d'accrétion accélérée et oligarchique	154
			Acte III : des embryons planétaires aux planètes telluriques	155
		A.1.3	Evolution primitive des planètes telluriques : la phase océan de	
			magma	157
			L'hypothèse de l'océan de magma	157
			Evolution thermique de l'océan de magma	160
	A.2	Métho	de numérique : le modèle couplé océan de magma – atmosphère	169
		A.2.1	Modèle interne : l'océan de magma	169
			Conditions initiales	169
			Le refroidissement de l'océan de magma	169
			La viscosité de l'océan magmatique	172
		A.2.2	Le modèle atmosphérique	175
			Structure verticale	175
			Nuages et calculs d'albédo	176
		A.2.3	Le couplage océan de magma – atmosphère	177
			Le transfert de chaleur	177
			Répartition des volatils et dégazage	178
			Méthode numérique	183
	A.3	L'influ	ence relative de l'eau et du dioxyde de carbone sur les conditions	
		de sur	face précoces et sur l'évolution des planètes telluriques	185
		A.3.1	Evolution thermique en fonction de la distance à l'étoile $\ . \ . \ .$	185
		A.3.2	Influence du contenu initial en $CO_2 \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	187
		A.3.3	Influence du contenu initial en $H_2O$	191
		A.3.4	Influence combinée des contenus initiaux en $CO_2$ et $H_2O$ : lois	
			d'échelle	194

Bibliog	Bibliography 2		
A.6	Conclu	sion générale et perspectives	217
		tial en volatils	214
	A.5.5	Bordure interne de la zone tempérée : influence du contenu ini-	
	A.J.4	rents types spectral	214
	A 5 4	matique	212
	A.5.3	Influence de l'étoile sur l'évolution thermique de l'océan mag-	
	A.5.2	Méthode	210
	A.5.1	Contexte	208
A.5	Evolut	ion primitive et habitabilité des exoplanètes	208
	A.4.4	Discussion	204
	A.4.3	Lois d'échelle et habitabilité de Vénus	204
		formation d'un océan primitif, avec et sans nuages	200
	A.4.2	Influence de l'eau, du $CO_2$ , et de la distance au Soleil sur la	
	A.4.1	L'évolution thermique de Vénus avec et sans nuages	200
	de sur	face tempérées	200
A.4	Terre	jeune et Vénus primitive : de l'océan de magma à des conditions	
	A.3.5	Scénarios d'évolution possibles de Vénus	198

# List of Figures

1.1	Classical habitable zones boundaries for stars of different temperatures	3
1.2	Cumulative number of exoplanet detections per year	6
1.3	HL Tauri protoplanetary disk	$\overline{7}$
1.4	Putative parent body locations and water content at the time of Earth's	
	growth	9
1.5	D/H ratios in different objects of the solar system	10
1.6	The growth of terrestrial planets from a disk of planetary embryos and	
	planetesimals	13
1.7	Numerical simulation of the Moon-forming impact	15
1.8	Picture of the Moon	16
1.9	Schematic crystallization of the lunar magma ocean	17
1.10	Schematic of differentiation and accretion leading to rocky planets with	
	a molten surface	18
1.11	Timeline of early solar system processes	19
1.12	Origin of the solar system as hypothesized by Georges-Louis Leclerc	
	Buffon in 1749	20
1.13	Crystallization of the magma ocean and corresponding temperature	
	profile	22
1.14	Melting curves for different mantle compositions	23
1.15	Formation of a dense basal magma ocean as proposed by Labrosse et	
	al. (2007)	25
1.16	Emergence of two types of terrestrial planet during the solidification of	
	the magma ocean	28
0.1	Initial and final stars of the model with the different processor considered	24
2.1	Turical magnets accept on the model with the different processes considered	04 94
2.2	Typical magma ocean crystallization sequence	04 95
2.5	Typical magina ocean degassing sequence	55
2.4	and corresponding schematic cross section	36
2.5	Solidus and liquidus profiles of chondritic mantle considered in this study.	38
2.0	Viscosity laws for different rheologies encountered during magma ocean	00
2.0	solidification	40
27	Schematic view of the atmospheric 1–D column when clouds are con-	40
2.1	sidered	11
2.8	Flowchart of the different processes occuring in the magma ocean –	11
2.0	atmosphere system	45
29	Flowchart of the numerical method	49
2.0		10
3.1	Schematic temperature profile and cross section of a magma ocean	
	planet surrounded by its outgassed atmosphere	55
3.2	Solidus and liquidus profiles of chondritic mantle	56
3.3	Viscosity as a function of temperature for different rheologies	59

3.4	Atmospheric temperature profiles for planets located at different dis-	69
3.5	Thermal evolution of the magma ocean for two different distances from	03
0.0	the Sun	65
3.6	Thermal evolution of the magma ocean for two different initial $CO_2$ contents at two different solar distances $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	67
3.7	Surface temperature and water condensation as a function of $CO_2$ and solar distance at EBCS	68
38	Tropopause altitude as a function of $CO_2$ and solar distance at EBCS	60
$\frac{3.9}{3.9}$	Thermal evolution of the magma ocean for two different initial water contents at two different solar distances	70
3.10	Water condensation at ERCS as a function of the initial volatile content	10
	and solar distance	72
3.11	Water condensation at ERCS as a function of the dimensionless volatile content and solar distance	73
3.12	Water condensation at ERCS as a function of the dimensionless volatile content and dimensionless solar distance for grey and non-grey atmo-	
	spheres	74
3.13	Surface temperatures obtained at ERCS for the range of solar distances and initial $CO_2$ contents explored for water-rich and water-poor magma	
0.1.4	ocean planets	75
3.14	Dimensionless surface temperatures at ERCS for the range of parame-	76
3 15	Thermal evolution of the magma ocean when considering a grey and a	70
0.10	non-grev atmosphere	77
3.16	Thermal evolution of the magma ocean with and without water clouds	78
3.17	Water condensation diagram for the early Earth as a function of $H_2O$ and $CO_2$	81
3.18	Water condensation diagram for Venus depending on albedo and solar	01
2 10	Venue' perceible evolution depending on albede and color constant	04 02
3.19	Thermal evolution of the magma according for different viscosity laws	00 84
3.20 3.21	Bayleigh number of the solidifying lower mantle and characteristic over-	04
0.21	turning time of the gravitationally unstable solid layer	85
4.1	Temperature profile and corresponding schematic cross section of the	
	coupled magma ocean – atmosphere system $\ . \ . \ . \ . \ . \ . \ .$	90
4.2	Main variables evolution during magma ocean cooling when considering	
	a constant and a changing albedo	94
4.3	Main variables evolution during magma ocean cooling when considering	0.0
	clouds or not	96
4.4	Atmospheric temperature profile evolution at Venus' distance	97
4.5	water ocean formation at ERCS as a function of solar distance, $H_2O_1$ ,	100
4.6	Surface temperature and albedo at EBCS as a function of $CO_2$ , solar	100
4.0	distance and cloud cover	101
4.7	Albedo evolution at different solar distances for clear-sky and cloudy	101
	atmospheres	102
4.8	Water ocean formation at ERCS as a function of dimensionless volatile	
	content, solar distance, and cloud cover, and comparison with constant	
	albedo simulations	104

4.9	Water ocean formation at ERCS as a function of dimensionless volatile content, solar distance, and cloud cover, and the case of Venus Surface temperature and water accean depth at EPCS for the Farth and	105
4.10	Venus depending on $CO_2$ content and cloud cover	109
5.1	Mass-orbital distance diagram of discovered exoplanets	116
5.2	Albedo as a function of surface temperature calculated with our atmo- spheric model only	118
5.3	Young Sun and Trappist-1 radiation spectra, and spectral reflectance of an Earth-like planet	120
5.4	Temperatures, albedo, and heat fluxes during the MO cooling of a cloud free planet orbiting the faint young Sun and Trappist 1	199
5.5	Location of the inner edge of the temperate zone at ERCS for cloud- free planets orbiting different types of stars and comparison with other	122
-	studies	123
5.6	Water ocean formation diagram as a function of the insolation flux $F_{\downarrow}$ , star temperature $\mathcal{T}_{\text{eff}\odot}$ , and initial volatile content $x^*$ for cloud-free	
5.7	planets	125
5.8	volatile content $x^*$ and cloud coverage for different stars	126
0.0	as a function of star temperature $\mathcal{T}_{\text{eff}}$	128
5.9	Early water ocean formation as a function of $x^*$ and $F^*_{\downarrow}$ , accounting respectively for the influence of the initial volatile content and the stellar	
5.10	parameters	$\frac{130}{132}$
A.1	Limites de la zone habitable en fonction de la température de l'étoile .	142
A.2 A.3	Effectif cumule des detections d'exoplanetes par an	145
A.4	effondrement gravitationnel selon l'hypothèse de la nébuleuse Observations de disques de débris autour d'étoiles jeunes et illustrations	148
A.5	correspondantes	149
1.0	(projet DSHARP)	150
A.6 A.7	Emplacement des corps parents supposés de différents objets et contenu	191
A.8	en eau au moment de la croissance de la Terre	153
• •	nétaires et de planétésimaux	156
A.9 A 10	Simulation numerique de l'impact geant qui aurait forme la Lune Photographie de la Lune	158
A 11	Cristallisation schématique de l'océan de magma lunaire	161
A.12	Cristallisation schématique de l'océan de magma et profil de tempéra- ture associé	163
A.13	Emergence de deux types de planètes rocheuses au cours de la solidifi-	100
A.14	Température de fusion (solidus) et de cristallisation (liquidus) en fonc-	100
A.15	tion de la profondeur pour un manteau chondritique	170
	modèle	170

A.16 Profil de température simplifié du système couplé océan de magma –	
atmosphère et coupe schématique correspondante	171
A.17 Lois de viscosité pour différentes rhéologies observées lors de la solidi-	
fication de l'océan magmatique	174
A.18 Représentation schématique de la colonne atmosphérique unidimen-	
sionnelle lorsque les nuages sont pris en compte	177
A.19 Diagramme des différents processus et rétroactions dans le système cou-	
plé océan de magma – atmosphère	179
A.20 Schéma simplifié du dégazage de l'océan magmatique	180
A.21 Séquence typique de dégazage de l'océan magmatique	182
A 22 Evolution thermique d'une planète en phase océan de magma en fonc-	
tion de sa distance à l'étoile	186
A 23 Profils de température atmosphérique pour des planètes situées à dif-	100
férontes distances du Soloil	188
A 24 Evolution thermique de l'océan magnetique nour deux contenus ini	100
A.24 Evolution thermique de l'ocean magnatique pour deux contenus mi-	100
that $x \in CO_2$ a differences distances de l'étoile	169
A.25 Temperature de surface et formation d'un ocean d'eau à l'ERCS en	100
Fonction du contenu initial en $CO_2$ et de la distance au Solein	190
A.26 Evolution thermique de l'ocean magmatique pour deux contenus ini-	100
tiaux en eau en fonction de la distance a l'étoile	192
A.27 Formation d'un océan d'eau à l'ERCS en fonction du contenu initial en	100
volatils et de la distance au Soleil	193
A.28 Condensation d'un océan d'eau à l'ERCS en fonction du contenu en	
volatils adimensionné et de la distance au Soleil	194
A.29 Evolution schématique du flux infrarouge sortant $F_{IR}$ en fonction de la	
température de surface	196
A.30 Condensation d'un océan d'eau à l'ERCS en fonction du contenu en	
volatils et de la distance adimensionnés, pour les atmosphères grises et	
non-grises	197
A.31 Scénarios d'évolution possibles de Vénus	198
A.32 Evolution des variables principales pendant le refroidissement de l'océan	
magmatique pour une planète située à la distance de Vénus avec et sans	
nuages	201
A.33 Evolution du profil de température de l'atmosphère à la distance de	
Vénus	202
A.34 Formation d'un océan d'eau à l'ERCS en fonction de la distance au	
Soleil, de $H_2O$ et $CO_2$ , et de la couverture nuageuse	203
A.35 Formation d'un océan d'eau à l'ERCS en fonction du contenu en volatils	
adimensionné, de la distance au Soleil, de la couverture nuageuse, et le	
cas de Vénus	205
A.36 Diagramme masse – distance orbitale des exoplanètes actuellement dé-	
couvertes	209
A.37 Comparaison schématique de la zone habitable autour d'étoiles plus ou	
moins chaudes	210
A.38 Réflectance spectrale d'une planète analogue à la Terre et émission	
énergétique normalisée d'un corps noir à la température du Soleil jeune	
et de Trappist-1	211
A.39 Températures, albédo, et flux de chaleur au cours du refroidissement	
d'une planète océan de magma sans nuages, en orbite autour du Soleil	
ieune et de Trappist-1	213
Journe of the trapped to the second s	-10

A.40	Bordure interne de la zone tempérée à l'ERCS pour des planètes sans	
	nuages en fonction de la température de l'étoile et comparaison avec	
	d'autres études	215
A.41	Formation d'un océan d'eau à l'ERCS en fonction du flux stellaire $F_{\downarrow}$ ,	
	de la température de l'étoile $\mathcal{T}_{\text{eff}\odot}$ , et du contenu initial en volatils $x^*$	
	pour des planètes sans nuages	216

# List of Tables

$2.1 \\ 2.2$	$\begin{array}{llllllllllllllllllllllllllllllllllll$	41 47
$3.1 \\ 3.2$	Constant parameters used in this study	58 62
4.1 4.2 4.3	Physical variables used in Chapter 4     Condensation limits coefficients       Condensation limits coefficients     Inner edges of the temperate zone found in literature and corresponding parameters	94 104 110
$5.1 \\ 5.2$	Physical variables used in Chapter 5	120 128

# List of Abbreviations

- AU Astronomical Unit, 1 AU = mean Earth-Sun distance ( $\approx 150 \times 10^6$  km)
- CAI Calcium-Aluminum-rich Inclusions
- CMB Core-Mantle Boundary
- $\mathbf{ERCS} \quad \mathbf{End} \text{ of } \mathbf{R} apid \ \mathbf{Cooling} \ \mathbf{S} tage$
- HZ Habitable Zone
- IHZ Inner edge of the Habitable Zone
- $\mathbf{IR}$  Infra $\mathbf{R}$ ed
- JFC Jupiter Family Comet
- MB Main Belt
- MO Magma Ocean
- $\mathbf{Myr} \qquad \mathbf{Million \ year}$
- OHZ Outer edge of the Habitable Zone
- OLR Outgoing Longwave Radiation
- **OSR** Outgoing Shortwave Radiation
- **SNC** Shergottites Nakhlites Chassignites
- TOA Top Of the Atmosphere
- $\mathbf{ULVZ} \quad \mathbf{Ultra} \ \mathbf{Low} \ \mathbf{V} elocity \ \mathbf{Z} one$

### Chapter 1

## Introduction

Terrestrial planets in the solar system show very different surface conditions, with only the Earth supporting life and having a geodynamic regime such as plate tectonics. This thesis addresses the question of the origin of these differences by studying the early evolution of the planets. To start with, the following chapter discusses how the habitability of terrestrial planets is defined, what makes a planet habitable, and emphasizes why the early evolution is determinant for the habitability.

### 1.1 The Quest for Extra-Terrestrial Life: Habitability of Rocky Planets

"Are we alone in the Universe?" is one of the age-long and vertiginous question that has always fascinated mankind. Today, this question is still a leading one in modern astronomy and planetary sciences. Back in the last century and certainly related to the beginning of the space age, it motivated the establishment of criteria to define whether life can exist or not somewhere else in the Universe (e.g., Huang, 1959; Huang, 1960: Dole, 1964; Shklovskii and Sagan, 1966; Hart, 1978). Based on what we know on Earth, the concept of habitable planet relies on the presence of liquid water on the surface of a rocky planet, a necessary condition for the emergence and development of life. The "habitable zone" (HZ) (Huang, 1959; Huang, 1960; Hart, 1979; Kasting, Whitmire, and Reynolds, 1993) has thus been classically defined as the circumstellar region where a habitable planet can be found, i.e., where liquid water is stable at the surface of said planet. Life could also develop under the surface of a terrestrial planet located beyond the habitable zone, by using another energy for its metabolism than the starlight. However, this would not likely modify the surface environment in a detectable way (Rosing, 2005). If we thus restrict ourselves to the classical case of planetary surface habitability, then, climate models are classically used to calculate surface conditions to define the limits of the habitable zone.

The inner edge of the HZ (IHZ) corresponds to the closest distance from the star where water vapor can condense at the surface, whereas the outer edge (OHZ) is the farthest distance where liquid water can be sustained at the surface and beyond which it freezes. Classical HZ studies follow the so-called inverse climate modeling: a surface temperature is prescribed and atmospheric models calculate the solar flux (and corresponding orbital distance) needed to sustain it under a stable climate, where radiative equilibrium is achieved, i.e., when the incoming absorbed flux  $F_{abs}$  equals the outgoing flux at the top of the atmosphere  $F_{abs} = F_{\uparrow}$  (e.g., Kasting, Whitmire, and Reynolds, 1993; Kopparapu et al., 2013).

Life relies on the presence of liquid water and carbon-based chemistry that is able to create its building blocks. Prior to be potentially liquid, water needs to be abundant at the surface of a planet. Carbon can be provided by atmospheric  $CO_2$  which is the main atmospheric component of terrestrial planets in the solar system<sup>1</sup>. Also, the carbon-silicate cycle is responsible for maintaining surface temperatures above the freezing point of water far from the star (Walker, Hays, and Kasting, 1981; Kasting, 1988). By blocking the escape of heat to space, the greenhouse effect of  $H_2O$  and  $CO_2$  makes them critical in controlling surface temperature, a key parameter for the presence of liquid water. Thus,  $H_2O-CO_2$  atmospheres have been generally considered in HZ studies.

#### 1.1.1 The Inner Edges of the Classical Habitable Zone

Close from the star, surface temperature rises and water evaporation increases, increasing atmospheric water vapor which in turn enhances the atmospheric greenhouse effect. Close enough from the star, beyond a certain critical insolation, atmospheric water is so abundant that the atmosphere becomes optically thick/opaque at all thermal wavelengths, blocking the escape of heat to space so that the surface temperature increase "runs away" (Goldblatt and Watson, 2012; Goldblatt et al., 2013; Leconte et al., 2013). This runaway surface temperature increase then inevitably leads to the complete evaporation of the ocean (Simpson, 1927; Komabayasi, 1967; Ingersoll, 1969; Kasting, Pollack, and Ackerman, 1984), ruling out the habitability en route. The absorbed stellar flux is then larger than the outgoing flux radiated by the planet that levels out at a constant value, the so-called Nakajima limit, throughout the surface temperature increase (Nakajima, Hayashi, and Abe, 1992). Thermal equilibrium cannot be restored until surface temperature becomes so high that the lower atmosphere and surface begin to radiate in the visible and near-IR, where water vapor opacity is weak. This results in an abrupt climatic transition between a stable temperate and a stable hellish climate. The runaway greenhouse limit is defined as the distance where the insolation threshold is reached and constitutes an optimistic<sup>2</sup> inner boundary of the habitable zone. Today, it is the most commonly used IHZ limit (Figure 1.1).

A more pessimistic IHZ is found at a larger distance/smaller insolation threshold, where the increase in stratospheric humidity, combined with enhanced photolysis<sup>3</sup>, results in strong water loss through atmospheric escape. This moist greenhouse or water loss limit is encountered when the upper atmospheric water vapor mixing ratio<sup>4</sup> exceeds  $\sim 2 \times 10^{-3}$ , corresponding to a 340 K surface temperature, allowing for efficient atmospheric water vapor escape (Kasting, 1988; Kasting, Whitmire, and Reynolds, 1993; Kopparapu et al., 2013; Ramirez, 2018). However, the hydrogen escape rate is a function of its mixing ratio in the upper atmosphere. Then, for higher non-condensible inventories than the Earth, hydrogen is more diluted within the atmosphere so that its mixing ratio is lower. Then, more water needs to be vaporized to reach the mixing ratio threshold and a higher surface temperature is required to trigger a moist greenhouse state (Selsis et al., 2007; Ramirez, 2018). The opposite is also true for planets with lower non-condensible inventories (Kasting, Whitmire, and Reynolds, 1993; Wordsworth and Pierrehumbert, 2014). This water loss limit is thus difficult to extrapolate to extrasolar planetary systems, where volatile content is highly unconstrained and thought to be highly variable (Raymond, Quinn, and

 $<sup>{}^{1}\</sup>text{CO}_{2}$  is believed to have been a major component of early Earth's atmosphere before it has been dissolved in a water ocean, reacted with surface rocks, and later on, consumed through biologic photosynthesis during the Great Oxygenation Event (e.g., Kasting, 1993; Arndt and Nisbet, 2012).  ${}^{2}$ Close from the star.

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>Chemical reaction in which upper atmospheric water is broken down by photons that dissociate and ionize  $H_2O$  into  $H^+$  and  $OH^-$  ions. Light  $H^+$  ions are then sensitive to atmospheric escape.

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup>The dimensionless water vapor mixing ratio is the abundance of water vapor relative to that of all other components in the atmosphere.



FIGURE  $1.1 - \text{Classical H}_2\text{O}-\text{CO}_2$  habitable zones boundaries for stars of different temperatures. The runaway greenhouse and the maximum greenhouse limits stand for the conservative (pessimistic) classical IHZ and OHZ, respectively. The recent Venus and early Mars correspond to the empirical (optimistic) limits for the IHZ and OHZ, respectively. Some solar system planets and confirmed exoplanets are shown. Based on work from Kopparapu et al. (2013).

Lunine, 2007). Furthermore, 4.5 billion years are needed to escape to space all of the hydrogen atoms in Earth's current ocean (Ramirez, 2018). Consequently, for waterrich planets, not enough water can be escaped within the lifetime of the planet to make it uninhabitable. In such cases, the moist greenhouse is not a limiting factor for habitability making the runaway greenhouse limit the commonly favored IHZ.

Given the importance of water vapor in the greenhouse processes for the IHZ, H<sub>2</sub>O-dominated atmospheres are classically considered to address its location.

#### 1.1.2 The Outer Edges of the Classical Habitable Zone

To sustain a substantial amount of liquid water at the surface of a planet located far from the star, surface temperature needs to be maintained above the freezing point of water. Note that the mean surface temperature has to be even slightly higher than 273 K to avoid a large fraction of the ocean to be frozen and prevent a runaway icealbedo feedback responsible for a global glaciation (Selsis et al., 2007). Such critical temperatures can be achieved because of a  $CO_2$  maximum greenhouse effect induced by the carbonate-silicate cycle. This cycle consists of an interplay between volcanism that releases  $CO_2$  into the atmosphere, and weathering of calcium and magnesium silicates in rocks and the subsequent precipitation and burial of carbonates that traps atmospheric  $CO_2$  (Sleep and Zahnle, 2001). Volcanism releases greenhouse gases into the atmosphere, including  $CO_2$ , which increases surface temperature. However, rainfall intensifies as temperature (and water evaporation) rises, which increases the production of carbonic acid and thus, the weathering rate of silicate minerals. Higher surface weathering decreases atmospheric carbon dioxide concentration and buffers the greenhouse effect. This negative feedback mechanism is known to stabilize Earth's surface temperature (Walker, Hays, and Kasting, 1981; Kasting, 1989).

As a consequence of this cycle, a planet far from the star, that receives less stellar flux, accumulates outgassed  $CO_2$  in the atmosphere due to low surface temperatures and weakened weathering.  $CO_2$  greenhouse effect thus maintains temperate surface conditions while the solar distance increases. However, far enough from the star, where a 10 bar atmospheric  $CO_2$  pressure is reached, the atmosphere becomes optically thick at all IR wavelengths. The greenhouse effect is no longer sufficient to overcome the cooling effect due to the strong Rayleigh scattering of such  $CO_2$ -dense atmospheres and surface temperature decreases below the freezing point of water (Kasting, Whitmire, and Reynolds, 1993; Kopparapu et al., 2013). The  $CO_2$  maximum greenhouse limit defines the OHZ (Figure 1.1) and  $CO_2$ -dominated atmospheres are generally considered to define its location. Note that a strong assumption implying the presence of plate tectonics is made when considering the carbonate-silicate cycle (Sleep and Zahnle, 2001).

#### 1.1.3 Empirical Limits of the Habitable Zone

Based on observational constraints, optimistic empirical limits have also been derived. They rely on assumptions concerning the presence of water on Mars and Venus in the past.

Venus mapping made by the Magellan spacecraft in the nineties, combined with observation from ground-based telescopes indicate a relatively young surface age (e.g., Smrekar, Davaille, and Sotin, 2018). It suggests an important resurfacing, either through catastrophic or equilibrium processes (e.g., Phillips et al., 1992; Strom, Schaber, and Dawson, 1994), without evidence of liquid water over at least the past billion years (Solomon and Head, 1991). Assuming that Venus formed wet, an optimistic idea is to say that Venus had liquid water until 1 Gyr ago. Using the dimmer solar flux at Venus' distance at that time (provided by solar evolution models, Gough, 1981) as the insolation threshold for the presence of liquid water, one can locate the corresponding "recent Venus" IHZ drawn in Figure 1.1 (Kasting, Whitmire, and Reynolds, 1993; Selsis et al., 2007; Kopparapu et al., 2013).

A similar approach can be used to draw an empirical OHZ limit. Numerous geological evidence such as the presence of valley networks or phyllosilicates formed by aqueous alteration suggest that Mars was habitable in the past, until  $\sim 3.8$  Gyr before present (Masursky, 1973; Pollack et al., 1987; Poulet et al., 2005; Bibring et al., 2006). Using the corresponding solar luminosity at Mars' orbit, Kasting, Whitmire, and Reynolds (1993) calculated the location of the early Mars limit for the OHZ (Figure 1.1).

#### 1.1.4 Beyond the Classical Habitable Zone

The pioneering HZ study of Kasting, Whitmire, and Reynolds (1993) is contemporary with the first confirmed detection of several terrestrial-mass planets orbiting the pulsar PSR B1257+12, located 2300 light years away from the Sun in the constellation of Virgo, that came in 1992 (Wolszczan and Frail, 1992). Three years later in 1995, the first confirmation of an exoplanet orbiting the main sequence star 51 Pegasi was made at the Haute-Provence Observatory, France, using the 193 cm diameter telescope (Mayor and Queloz, 1995). As of 14 September 2018, 3828 detections of exoplanets have been confirmed in 2860 systems, with 632 systems having more than one planet<sup>5</sup>. 4496 additional candidates from the Kepler mission are yet to be confirmed<sup>6</sup>. Particularly striking discoveries have been made such as the detection of a potentially habitable rocky planet orbiting our closest stellar neighbor Proxima Centauri (Anglada-Escudé et al., 2016), a red dwarf star located about 4.2 light-years away from Earth, or the detection of at least seven rocky planets orbiting Trappist-1 (Gillon et al., 2017), an ultra-cool red dwarf star located 39 light-years away from the Sun. Such an increasing number of discovered exoplanets (Figure 1.2) motivated a revision of the classical HZ boundaries defined in Kasting, Whitmire, and Reynolds (1993) by including, for instance, updates in the radiative transfer (Kopparapu et al., 2013), atmospheric dynamics (Leconte et al., 2013; Goldblatt et al., 2013; Wolf and Toon, 2015), or the influence of the planetary mass (Pierrehumbert, 2010; Kopparapu et al., 2014). Atmospheric compositions other than  $CO_2$ -H<sub>2</sub>O and their influence on the HZ extension have also been investigated. Desert worlds, with a limited surface water budget, appears to widen the HZ (Abe et al., 2011; Zsom et al., 2013; Kodama et al., 2015), while it is expected to be very narrow for waterworlds (Goldblatt, 2015). A wider habitable zone is found when considering other background gases such as methane (Ramirez and Kaltenegger, 2018), or hydrogen (Pierrehumbert and Gaidos, 2011). The effect of clouds have also been explored with both 1–D (e.g., Selsis et al., 2007; Zsom, Kaltenegger, and Goldblatt, 2012; Ramirez and Kasting, 2017) and 3–D models, where a stabilizing feedback has been found to strongly shift towards the star the IHZ for slowly rotating planets (Yang, Cowan, and Abbot, 2013; Yang et al., 2014). Note that all mentioned HZ studies focused on main-sequence stars but habitability has also been extended in time to pre- (Ramirez and Kaltenegger, 2014) and post-main sequence stars (Ramirez and Kaltenegger, 2016).

An extensive modeling effort have been also conducted to assess more precisely the habitability of specific systems such as Proxima Centauri or Trappist-1 (e.g., Ribas et al., 2016; Turbet et al., 2016; Meadows et al., 2016; Ribas et al., 2017; Turbet et al., 2018) and to infer the internal structure of their planets (Brugger et al., 2016; Grimm et al., 2018).

Both 1–D and 3–D global climate models have been continuously used (e.g., Ramirez et al., 2018). Indeed, 1–D model calculations are computationally efficient and inexpensive to investigate a wide range of stellar and planetary parameters, while 3–D models have high computational cost but account for more realistic simulations when focusing on certain physical processes such as planetary rotation rate (Yang, Cowan, and Abbot, 2013; Yang et al., 2014; Leconte et al., 2015; Wordsworth, 2015; Kopparapu et al., 2016; Way et al., 2016), or the influence of the initial climate state and assumptions of the oceanic heat transport (Boschi, Lucarini, and Pascale, 2013; Shields et al., 2014; Godolt et al., 2015). Importantly, 3–D models are able to treat water in the climate system self-consistently, including water vapor, clouds (dynamics and spatial distribution), surface ice, and oceans, and their respective spatial and temporal distributions along the simulations. However, uncertainties remain between 3–D climate models concerning water vapor radiative transfer (Yang et al., 2016), moist convection (Del Genio, 2016), and clouds (Flato et al., 2013). Note that by prescribing surface albedo and relative humidity in 1–D models obtained from 3–D models, similar conclusions can be drawn with both approaches concerning the habitability of a planet (Godolt, M. et al., 2016).

Nevertheless, 3–D climate calculations require to prescribe lots of boundary conditions, such as continental (and ice when present) distribution, relief and internal heat

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup>From The Extrasolar Planets Encyclopaedia.

<sup>&</sup>lt;sup>6</sup>From NASA Exoplanet Archive.



#### Cumulative Detections Per Year

FIGURE 1.2 – Cumulative number of exoplanet detections per year with corresponding detection method. Plot generated using the NASA Exoplanet Archive.

flux for the surface, obliquity, rotation rate for orbital parameters and oceanic heat transport. More importantly, both 1–D and 3–D climate models assume atmospheric mass and composition that are highly unconstrained for extra solar planetary systems. Then, most of these parameters are generally chosen from what is observed on Earth, an already habitable planet, or on other terrestrial planets of the solar system. It often implies strong assumptions regarding the past history of the planets, leading to the observed mimicked conditions. It is thus equivalent to consider hypothetical static states and isolate the surface conditions arise, or the possible future mechanisms that might affect them.

One of the strongest presupposition based on current Earth's state is to assume that water is already present at the surface of any planet, so that the volatile content is taken regardless of planetary formation history. The following section discuss processes of water delivery in the light of planetary formation theories. Then, if a planet acquires a substantial amount of water during its formation, there is no guarantee that temperate surface conditions will be reached as they result from complex interaction between the different planetary reservoirs (Foley and Driscoll, 2016) and the stellar environment. Thus, another major implicit hypothesis is to consider pre-existing and static Earth-like surface conditions and composition, independent from the thermal evolution or geodynamic regime of the planet, without taking into account any input from the interior. The importance of early planetary evolution to reach and sustain temperate surface conditions will be discussed in Section 1.3.



FIGURE 1.3 – Atacama Large Millimeter/submillimeter Array (ALMA) observation of HL Tauri protoplanetary disk, located at 450 light-years from our solar system. The dark rings are gaps believed to arise from the process of ongoing planet formation. Figure from ALMA partnership et al. (2015).

### 1.2 Formation of Terrestrial Planets and Volatile Delivery

Leading theories of planetary systems formation suggest, based on observational evidence and meteoritic records, that stellar systems originate in vast and cold volumes of gas and dust grains, the so-called "molecular clouds" (e.g., Montmerle et al., 2006). Stars form first in a stellar cluster by accreting material from a circumstellar disk. Planets then start to form from collisional processes while the disk progressively dissipates. The birthplace of planets is thus called the protoplanetary disk (Figure 1.3). Chemical elements constituting the disk necessarily determine the composition of any component of the planetary system. Along planetary formation, three subsequent stages, associated to bodies of different characteristic sizes, can be distinguished (e.g., Morbidelli et al., 2012; O'Brien et al., 2018).

#### 1.2.1 Act I: From Dust Grains to Planetesimals

The first stage of planetary formation is characterized by the presence of micron-sized dust grains that grow to kilometer-sized planetesimals. These grains of dust near the midplane of the protoplanetary nebula grow by accreting one another via low-velocity
collisions (Weidenschilling, 1997). The (transition) growth mechanisms linking these two length scales are still unclear given the fact that centimeter scale particles are too small for gravity to be effective during collisions and too big for electrostatic forces to stick them together (e.g., Kallenbach, Benz, and Lugmair, 2000; Morbidelli et al., 2012). However, pebble accretion has recently emerged as an extremely efficient process for the growth of planetesimals and giant planet cores (e.g., Ormel, C. W. and Klahr, H. H., 2010; Johansen and Lambrechts, 2017). Indeed, in gas-rich environments, millimeter-to-centimeter-sized pebbles<sup>7</sup> can accrete efficiently due to the friction exerted by the gas surrounding the pebbles, depending on the ratio between the friction time and the timescale to pass the Bondi radius of the accreting object.

Due to a decreasing temperature with respect to the distance from the star (e.g., Dodson-Robinson et al., 2009), it is generally agreed that this growth phase leads to a radial gradient of chemical properties. Thus, volatile elements can only be condensed far from the star. Furthermore, the dissipation of the gaseous solar nebula occurred faster than the sufficient temperature decrease to allow volatile condensation in the inner solar system (Albarède, 2009). This suggests that planetesimals in the inner disk (below the inner asteroid belt region) might have been made of dry and volatile poor material, explaining the lack of close-in volatile-rich primitive bodies. Based on laboratory analyses, Figure 1.4 illustrates this very trend: the water content in meteorites is strongly correlated with the heliocentric distance of the planetesimals from which they are thought to originate. The three classes of chondritic meteorites are depicted. Their respective mineralogy suggest that highly reduced water-poor enstatite chondrites (Hutson and Ruzicka, 2000), formed in a warm environment, close to the star. Conversely, ordinary chondrites are more enriched in water and thought to form in a colder environment, farther away from the star, while the waterrich carbonaceous chondrites formed even farther, explaining their high water and volatile contents (Robert, 2003). Note that chondrules ages analysis indicates similar accretion ages for the parent bodies of ordinary and carbonaceous chondrites: around 3.5 million years after CAI formation<sup>8</sup> (Villeneuve, Chaussidon, and Libourel, 2009). Comets originate from icy planetesimals in the outer solar system (Weidenschilling, 1997). They are the water richest objects and witness ice formation even farther away from the star: beyond the asteroid belt, between and beyond the giant planets orbits (Figure 1.4).

While the Earth is located at 1 AU, it appears much more water-rich than objects from its neighborhood. Indeed, the current Earth ocean mass (M<sub>EO</sub>) is estimated to be equal to  $1.4 \times 10^{21}$  kg, but there is still no clear view about the amount of water stored in the interior of our planet. Estimations for the mantle ranges from  $\approx 0.3$  M<sub>EO</sub> (Lécuyer, Gillet, and Robert, 1998) to  $\approx 8$  M<sub>EO</sub> (Marty, 2012) and even reach 50 M<sub>EO</sub> for the primitive mantle (Dreibus and Waenke, 1989; Righter and Drake, 1999; Abe et al., 2000). Furthermore, Nomura et al. (2014) estimated that the amount of hydrogen stored in the core is equivalent to 80 Earth oceans, while Badro, Côté, and Brodholt (2014) found a hydrogen-poor core. This discrepancy is mainly due to the difficulty to extrapolate the water content of the interior from surface samples and to the fact that even a tiny percentage of these massive reservoirs represents a lot of water.

Despite their proximity to the Sun, other terrestrial planets of the inner solar system also show evidence of early water endowment. The current high deuterium to hydrogen ratio (D/H) of Venus' atmosphere indicates a large deuterium enrichment

<sup>&</sup>lt;sup>7</sup>e.g., chondrules, boulders, or fragments of larger bodies.

<sup>&</sup>lt;sup>8</sup>Calcium-Aluminum-rich inclusions are believed to be the earliest formed materials in the solar system and thus define its formation age, 4.568 billion years ago (Bouvier et al., 2007; Burkhardt et al., 2008).



FIGURE 1.4 – Putative parent body locations and water content at the time of Earth's growth. Carbonaceous chondrites are the most rich in water, and are expected to come from C-type asteroids, predominantly in the asteroid belt. Ordinary chondrites are spectroscopically linked to S-type asteroids, which are predominant between 2 and 2.5 AU. Enstatite chondrites are very dry and are expected to come from E-type asteroids, which dominate the Hungaria region in the very inner asteroid belt at 1.8 AU. MB stands for Main Belt. From Morbidelli et al. (2012).

relative to hydrogen, likely due to a significant loss of water (Donahue et al., 1982; Krasnopolsky et al., 2013). Mass balance evidences also suggest similar carbon, nitrogen and water early abundances between the Earth and Venus (e.g., Lécuyer, Simon, and Guyot, 2000). On Mars, geomorphology features (e.g., Carr, 1996; Baker, 2006), surface mineralogy (e.g., Gendrin et al., 2005; Langevin et al., 2005; Poulet et al., 2005; Bibring et al., 2006), and even evidences of tsunamis (Rodriguez et al., 2016; Costard et al., 2017) in a hypothetic northern ancient ocean (Head et al., 1999) point out a wet past for the red planet.

Different scenarios of in situ/early water delivery have been proposed to explain such a water endowment. (i) The gravitational capture of a hydrogen-rich atmosphere from the gaseous nebula, before it dissipates, and its oxidation by FeO in the terrestrial magma ocean would produce water (Ikoma and Genda, 2006; Genda and Ikoma, 2008). However, it requires a fast growth of the planet, before solar nebula dissipation in about 10 Myr (Haisch, Lada, and Lada, 2001; Kita et al., 2005), which is too short compared to estimations of the timescale of Earth's accretion based on radiometric analyses (e.g., Kleine et al., 2009). Furthermore, the terrestrial D/H ratio differs of a factor 6 from which of the solar nebula<sup>9</sup> (Figure 1.5). Hydrodynamic escape over

 $<sup>^{9}</sup>$ Solar nebula D/H ratio has been estimated from measurements in Jupiter's atmosphere (Mahaffy et al., 1998).



FIGURE 1.5 – D/H ratios in different objects of the solar system. Diamonds distinguish data obtained by in-situ mass spectrometry measurements than circles that refer to data obtained by astronomical methods. f stands for the enrichment factor of the object compared to the protosolar nebula PSN (defined as the ratio  $[D/H]_{object}/[D/H]_{PSN}$ ). Figure from Altwegg et al. (2015).

billions of years could then increase the D/H ratio to a terrestrial value<sup>10</sup> (Genda and Ikoma, 2008) but this contradicts the 100 Myr timescale for the closure age of the atmosphere given by I-Xe isotopes (e.g., Wetherill, 1975). (ii) Water could be incorporated into olivine grains via direct adsorption from the solar nebula (Stimpfl et al., 2006; Muralidharan et al., 2008; King et al., 2010; Asaduzzaman, Muralidharan, and Ganguly, 2015). Accreted planetesimals would then be water-rich. Nevertheless, this scenario is inconsistent with the highly reduced material thought to form the Earth (e.g., Wood, Wade, and Kilburn, 2008; Rubie et al., 2011), or with the relatively water-poor enstatite chondrites formed near that location (Figure 1.4). Finally, this issue remains controversial, possibly due to the lack of primitive material similar to the Earth's mantle in meteoritic records (Drake and Righter, 2002).

Another possibility is that water has been brought to Earth by comets. These icerich objects have long been suspected to deliver a large amount of water (e.g., Chyba, 1987; Delsemme, 1992; Owen and Bar-Nun, 1995; Delsemme, 1998). Nevertheless, two main criticisms contradict this idea. First, the D/H ratio measured on most comets is twice the terrestrial value (Balsiger, Altwegg, and Geiss, 1995; Eberhardt et al., 1995; Bockelée-Morvan et al., 1998; Meier et al., 1998), without processes able to explain this difference. However, only Oort-cloud and Halley-type comets were measured at that time. Since then, Jupiter-family comets (JFC) 103P/Hartley 2 (Hartogh et al., 2011) and 45P/Honda-Mrkos-Pajdušáková (Lis et al., 2013) revealed a terrestrial D/H ratio supporting a Jupiter-family cometary delivery. Yet, the recent JFC 67P/Churyumov-Gerasimenko in situ analysis made during the Rosetta mission

 $<sup>^{10}</sup>$ It is thought that the D/H ratio is not significantly affected by water recycling in the deep mantle (e.g., Morbidelli et al., 2012).

(ESA) shows a larger D/H ratio (3 times the terrestrial value, Figure 1.5, Altwegg et al., 2015) and suggests a non-cometary origin for the Earth's oceans.

Given the number and diversity of comets compared to the lack of in situ measurements, a cometary origin cannot be completely ruled out based on this argument. A second main argument against a cometary delivery is the very low probability for comets to hit the Earth: among the planetesimals scattered by the gaseous giants, only one in a million comets would collide with the planet (Morbidelli et al., 2000). Moreover, the dust/ice ratio in comets shows that less than half of a comet mass is made of water ice (Küppers et al., 2005).

The important water endowment on terrestrial planets despite their location below 1.6 AU, and the difficulty to explain early water delivery through the nebula or comets opens the way for a later water endowment hypothesis. A later stage of planetary formation is of fundamental importance to shape the final characteristics and composition of terrestrial planets and has strong implications for volatile delivery.

# 1.2.2 Act II: The Runaway and Oligarchic Accretion Phase

The second stage of planetary formation is characterized by the presence of kilometersized objects in the protoplanetary disk: planetesimals, which gravitationally accrete one-another to form larger planetary embryos. Planetesimals' large size results in both large cross sections and efficient gravitational attraction, enhanced collision after collision, leading to a runaway accretion (e.g., Greenberg et al., 1978; Wetherill and Stewart, 1989; Kokubo and Ida, 1996; Weidenschilling et al., 1997), where larger bodies grow faster than smaller ones. Once the mass of the largest accreted bodies becomes important, they start to govern the dynamics and stop the runaway growth en route (Ida and Makino, 1993). Indeed, the runaway growth is a self-limiting process as the disk is emptied locally through the formation of a relatively small number of large oligarchs fed by planetesimals in their neighborhood (Kokubo and Ida, 1998; Kokubo and Ida, 2000; Thommes, Duncan, and Levison, 2003). In the meantime, relative velocities of surrounding small bodies is increased leading to disruptive mutual collisions. Small planetesimals are thus not able to grow anymore but participate in the growth of the largest planetary embryos only: this is the oligarchic growth (Kokubo and Ida, 1998; Kokubo and Ida, 2000; Chambers, 2006). Note that in such local processes, little radial mixing is expected and the chemical radial gradient of the planetesimal disk, if present, is preserved within the planetary embryos.

Unlike inner disk embryos, the growing giant planet cores become quickly massive enough so that they attract and accumulate substantial amounts of gas, mostly hydrogen and helium, before the protoplanetary disk dissipates. The reason is still unclear but beyond the snow line<sup>11</sup>, water ice increases the surface density of solid material leading to an enhanced runaway growth (e.g., Dodson-Robinson et al., 2009). It has been proposed that convergent migration processes between embryos triggered their rapid mutual accretion (Morbidelli et al., 2008; Lyra, Paardekooper, and Low, 2010; Sándor, Lyra, and Dullemond, 2011). Furthermore, to accrete material, ice-rock collisions occurring beyond the snow-line are more efficient than rock-rock "hit-andrun" collisions, where bodies bounce off each other. The resulting rapid formation of massive giant planets at the end of this second runaway/oligarchic growth stage significantly affects the subsequent planetary system dynamics. Conversely, for the inner solar system, planetary embryos are not yet representative of the current solar

<sup>&</sup>lt;sup>11</sup>The snow line, or frost line, is the theoretical distance from the star beyond which the temperature is cold enough for volatile compounds such as water to condense (solid condensation). Estimations of its location varies between 2 to 4 AU (e.g., Sasselov and Lecar, 2000; Martin and Livio, 2012).

system configuration: they are too many and neither scattered nor massive enough: a third stage is needed to form terrestrial planet-like bodies.

# 1.2.3 Act III: The Last Stage of Planetary Formation: From Planetary Embryos to Terrestrial Planets

The third and last stage of planetary formation is dominated by giant collisions between embryos whose size ranges from hundreds to thousands of kilometers. It witnesses the formation and orbital configuration setting of the terrestrial planets in the inner part of the solar system, while the gas giants are already formed. At the beginning of this third stage, the orbits of the giants are inherited from their gravitational interactions with the gas disk during the runaway phase and likely differ from their current locations. Indeed, the density of the nebular gas tends to contain the motion of planetesimals and embryos pre-isolated in the gas disk. When the gas disk dissipates, not enough background material for dynamical friction is left and embryos and planetesimals are free to move due to effective gravitational perturbations which increases their eccentricity. Orbits then crosses each other which strongly increases the number of collisions (Chambers and Wetherill, 1998). A strong distinction between the terrestrial planets region and the asteroid belt region can be made (Chambers and Wetherill, 2001; Raymond, Quinn, and Lunine, 2004; Raymond, Quinn, and Lunine, 2005; O'Brien, Morbidelli, and Levison, 2006). The latter is strongly affected by Jupiter perturbations while the former is not. Thus, in the inner part, embryos can accrete through low-velocity collisions due to relatively small and stable eccentricities. However, resonances with Jupiter rapidly increase asteroid belt embryos' and planetesimals' eccentricities that can both collide with one another and be expelled out of the belt. Thereby, most of the original population of the asteroid belt region leaves it, including all embryos. Some objects end up their journey into the Sun, others are ejected on a hyperbolic orbit, while part of them are accreted by the growing terrestrial planets closer to the Sun (Figure 1.6). Finally, in about 30–100 Myr, a small number of terrestrial planets is formed on stable and well-separated orbits between 0.5 and 2 AU (Chambers, 2001; Raymond, Quinn, and Lunine, 2004; Raymond, Quinn, and Lunine, 2005; O'Brien, Morbidelli, and Levison, 2006).

This classical scenario assumes that giant planets are roughly located in their current location on static orbits. Its major issue is that it cannot account for the small size of Mars. To solve this discrepancy, Hansen (2009) showed that if planetesimals and embryos thought to form the terrestrial planets are initially confined to a narrow annulus, between 0.7 and 1 AU, the current solar system configuration can be reproduced. This initial configuration yet poses the problem of explaining a protoplanetary disk truncated between 1 AU and the inner edge of the asteroid belt at 2 AU.

To investigate the ability of giant planets to sculpt the inner disk, Walsh et al. (2011) included for the first time dynamic orbits for the giant planets in their planetary formation model. They consider two migration regimes. (i) Inward migration of Jupiter first occurs when it is the only giant planet in the disk (Lin and Papaloizou, 1986). (ii) Once Saturn is massive enough, it brakes Jupiter's motion and even reverse its direction: both planets migrate outward in a 2:3 resonance<sup>12</sup> (Masset and Snellgrove, 2001; Morbidelli and Crida, 2007). A reversal of Jupiter's migration at 1.5 AU is then able to explain the disk's truncation, required to create a small Mars. Furthermore, this so-called "Grand Tack" scenario also reproduces the current small asteroid belt mass. Indeed, Jupiter's inward migration first completely depletes the asteroid belt which is repopulated by scattered planetesimals afterwards. Thus, the

<sup>&</sup>lt;sup>12</sup>Saturn orbits twice the Sun within 3 orbital periods of Jupiter.



FIGURE 1.6 – The growth of terrestrial planets from a disk of planetary embryos and planetesimals. Each panel shows the major semi-axis and eccentricity of the bodies in the system at a given time, reported in the top left of each panel. The size of the representations of embryos and protoplanets accounts for their masses. The representation of Jupiter is not to scale with respect to the representation of the embryos. A system of three terrestrial planets, the most massive of which has approximately the mass of the Earth, is eventually formed inside 2 AU, whereas only a small fraction of the original planetesimal population survives within the asteroid belt boundaries. From Morbidelli et al. (2012).

inner asteroid belt contains planetesimals initially inside the orbit of Jupiter while the outer part is repopulated by farther planetesimals. It accounts for explaining the asteroids diversity within the relatively narrow asteroid belt, where the classical growth in radially confined feeding zones fails.

Apart from the processes described in the previous sections, water delivery by primitive planetesimals and/or planetary embryos from the outer asteroid belt might be possible (Morbidelli et al., 2000; Raymond, Quinn, and Lunine, 2004; Raymond, Quinn, and Lunine, 2005; O'Brien, Morbidelli, and Levison, 2006; Raymond, Quinn, and Lunine, 2006; Raymond, Quinn, and Lunine, 2007; Lunine et al., 2007). Similar D/H ratio between carbonaceous chondrites and terrestrial planets supports this idea (Dauphas, Robert, and Marty, 2000; Alexander et al., 2012) and tends to favor this hypothesis compared to other scenarios. However, one has to keep in mind that D/H ratio measurements are still subject to debate because of possible contamination and multiple fractionation processes (e.g., Stephant, 2014; Stephant, Remusat, and Robert, 2016; Stephant et al., 2018). Indeed, terrestrial contamination can rapidly affect the surface of fresh extraterrestrial samples and lead to measurement misinterpretations (Stephant et al., 2018). A common feature in both classical and Grand Tack scenario is that water is delivered by asteroids that are mostly accreted during planets formation and not later on in a late veneer bombardment. Also, this delivery is not uniform and accelerates towards the end of the accretion phase. Finally, it is crucial to realize that terrestrial planets end their accretion with a consequent amount of water to start their future evolution.

Another important outcome of this last stage of planetary formation is that it produces frequent quasi-tangent collisions of Mars-size embryos with the inner protoplanets (Agnor, Canup, and Levison, 1999; Morishima, Stadel, and Moore, 2010; Elser et al., 2011). Such collisions result in the fragmentation of the impactor (Canup and Asphaug, 2001) whose debris' accretion likely form a satellite (Figure 1.7) (Canup and Esposito, 1996). This scenario is the generally accepted one to explain Earth's moon formation (Benz, Slattery, and Cameron, 1986; Benz, Slattery, and Cameron, 1987; Ida, Canup, and Stewart, 1997; Canup, 2008). The consequences of such large impacts are discussed in the following section.

# 1.3 Early Evolution of Terrestrial Planets: the Magma Ocean Stage

# 1.3.1 The Magma Ocean Hypothesis

By observing the Moon at night, one can easily distinguishes two different colors: most of the Moon's surface appears white, while small parts, more or less circular seem darker, grayish (Figure 1.8). Lunar samples, brought to Earth from the Apollo missions in the early seventies (from Apollo 11, 07/1969 to Apollo 17, 12/1972) unveiled the fact that the Earth and the Moon have been made up from a common reservoir of materials and allowed to characterize the mineralogy of the surface. Despite most of Apollo landing sites were located in mare terrains (apart from Apollo 16, 04/1972 that landed in the Descartes Highlands), which were expected to be ancient seas where life could have developed and let potential bio-signatures, highlands fragments have been sampled since Apollo 11 in 1969. Thus, the white terrains, the highlands have been identified as anorthosites, where plagioglase crystals are responsible for the white color. Conversely, the dark terrains constituting the lowlands, or lunar mare, are basaltic products of volcanic processes. Given the fact that the Moon lacks an atmosphere, preventing any erosion of the surface, and plate tectonics, the



FIGURE 1.7 – Numerical simulation of the Moon-forming impact in which a  $0.13M_{\oplus}$  impactor collides a  $0.89M_{\oplus}$  target. Both objects are differentiated and contain 70% forsterite and 30% iron by mass. (a-e) Snapshots at progressive times looking down on the plane of the impact, with distances shown in unit of  $10^3$  km (note the change in scale between the different frames). Color scales with particle temperature in kelvin. The debris disk formed after the impact coalesces as it orbits the Earth and forms the Moon. (e) The final bound planet-disc system has an angular momentum equal to that of the current Earth-Moon system and contains  $1.01M_{\oplus}$  after accounting for escaping material. (f) A close-up of the final thermal state of the planet. The partial red ring of high temperature material in the planet's interior is iron from the impactor's core that has accreted onto the Earth's core. From Canup (2008).



FIGURE 1.8 – Picture of the Moon taken with a Newton 150/750 cm
 Skywatcher<sup>®</sup> telescope from Arpajon sur Cère, France, on December
 2015. One can easily distinguish the contrast between the white bright anorthositic crust and the dark grayish basaltic mare.

surface stayed almost intact, apart from cratering processes, since its formation. Thus, lunar samples witness the formation of the Moon's surface, 4.4–4.6 billion years ago. To explain the presence of light Ca and Al-rich anorthite minerals, Smith et al. (1970) and Wood et al. (1970) proposed that the old lunar highlands were formed by flotation of a less dense feldspar-rich crust on a denser molten layer (Figure 1.9). This suggested that early in its history, the Moon was molten to great depths and it gave birth to the "magma ocean" hypothesis. Such an initial molten stage has been interpreted as the result of Moon's formation itself, coming from the highly energetic collision between the proto-Earth and Theia, a Mars-sized body (Canup, 2008), and the subsequent accretion of hot debris (Figure 1.7). This scenario also accounts for compositional similarities between the Earth and the Moon, and for the current Earth-Moon system's angular momentum. This event is believed to be the last major event of Earth's accretion (Canup, 2004), and also to have significantly melted the Earth. Note that the hypothesis of Moon's formation by a single giant impact is difficult to reconcile with nearly identical isotopic signatures between the two bodies (Wiechert et al., 2001; Touboul et al., 2007; Touboul, Puchtel, and Walker, 2015). Rufu, Aharonson, and Perets (2017) recently showed that an alternative scenario where the Moon is built by many large impacts (Ringwood, 1986) is possible and in better agreement with isotopic records. Following each impact, they proposed that a new moonlet forms from the disk and merges with the growing Moon while it migrates outwards. This scenario is also consistent with the mass and angular momentum of the Moon but assumes perfect merging. A better understanding of moonlet merging is needed to test the multi-impact hypothesis.

Given the high frequency of large impacts expected at the end of the accretion



FIGURE 1.9 – Schematic crystallization of the lunar magma ocean. The lighter minerals float and form the primary anorthosite crust on top of the molten layer. Courtesy of the Lunar and Planetary Institute.

phase of terrestrial planets (Section 1.2.3), it is most likely that all terrestrial planets experienced such an early molten stage (Figure 1.10). A timeline of early solar system processes related to magma oceans is depicted in Figure 1.11.

Interestingly, the idea that rocky planets were originally molten has been intuited since the XVII<sup>th</sup> century, long before the magma ocean hypothesis. Indeed, René Descartes (1596–1650) in his Principia philosophiae (1644) proposed that planets were initially bright stars, like the Sun, and evolved to darker planet-like bodies made of different layers. Later on, in 1694, Gottfried Wilhelm Leibniz (1646–1716) stated in his posthumously published book  $Protogaea^{13}$  that "the earth was liquid at the beginning [...] and it agrees with the general laws of bodies that solids harden out of liquids". Fifty years later, in the first volume of his monumental 36-volume Histoire naturelle générale et particulière (1749–1789), Georges-Louis Leclerc, comte de Buffon (1707-1788) attempted to describe the origin of the solar system. Given the fact that all planets orbit the Sun in a same plan and in the same direction, he suggested that planets' motion originates from a single and common impetus. He proposed that planets result from fragments of the collision between a comet and the Sun, the latter being fragmented by the shock<sup>14</sup> (Figure 1.12). Although the mechanisms at play are now known to be different, the hypothesis of an early molten stage that cools down and differentiates persists.

Apart from conversion of kinetic energy to heat during giant impacts, other heat sources also suggest that the Earth's mantle underwent partial if not total melting early during its history. Radioactive decay of short-lived radioisotopes of the mantle is an additional and significant heat source (e.g., Carlson and Lugmair, 2000). Back in 1955, Urey (1955) emphasized the importance of the abundant <sup>26</sup>Al for melting rocks. To effectively heat planetesimals given its short half-life ( $7.17 \times 10^5$  years), it requires that they formed in less than 3 Myr after the formation of the first solids,

<sup>&</sup>lt;sup>13</sup>Literally "primitive Earth".

<sup>&</sup>lt;sup>14</sup>"Ne peut-on pas imaginer avec quelque sorte de vraisemblance, qu'une comète tombant sur la surface du Soleil, aura déplacé cet astre, et qu'elle en aura séparé quelques petites parties auxquelles elle aura communiqué un mouvement d'impulsion dans le même sens et par un même choc, en sorte que les planètes auraient autrefois appartenu au corps du Soleil, et qu'elles en auraient été détachées par une force impulsive commune à toutes, qu'elles conservent encore aujourd'hui ?"



FIGURE 1.10 – Schematic of differentiation and accretion, showing the last stages of accretion: from planetesimals to rocky planets. Magma oceans (red) (which may be internal or external) likely occur multiple times and to varying extents. Rocky planets finally present a molten surface at the end of the accretion sequence. From Elkins-Tanton (2012).



FIGURE 1.11 – Timeline of early solar system processes related to magma oceans, constraining the age of the Moon-forming impact, by using models and data from the Moon and the Earth. Figure from Elkins-Tanton (2012).

before <sup>26</sup>Al was extinct. Thus, rapidly-accreted objects whose radius is larger than 20 km appear to have been molten (Hevey and Sanders, 2006). Long-lived isotopes <sup>238</sup>U, <sup>235</sup>U, <sup>232</sup>Th, and <sup>40</sup>K, responsible for today's radiogenic heating of the mantle, were more abundant early in the solar system and also contributed to internal heating.

Metal-silicate differentiation is another early internal heat source (e.g., Birch, 1965; Flasar and Birch, 1973; Sasaki and Nakazawa, 1986). Indeed, both separation of metallic from silicate components, and sinking of dense metallic diapirs to the center of the planet through gravitational instabilities (Stevenson, 1990), induce large viscous heating (Ricard, Šrámek, and Dubuffet, 2009; Monteux et al., 2009). In the case of minor impacts, this mechanism is likely a local process and occurs at discrete intervals over the accretionary timescale.

Another potentially significant early energy source is tidal heating by the newlyformed Moon. After its formation, the Moon was much closer to the Earth than today. This vicinity is expected to result in enhanced tidal interaction with strong tidal heating, and might sustain a magma ocean for much longer (Sears, 1992; Zahnle et al., 2007; Sleep, Zahnle, and Lupu, 2014). Zahnle et al. (2007) showed that this effect could even overwhelm the radioactive heating.

The combination of the different mechanisms and heat sources mentioned above makes the existence of an early molten stage on terrestrial planets a generally accepted theory. Geochronologic evidences support the existence of one or more magma ocean stages on Earth, with  $^{182}$ Hf/ $^{182}$ W and  $^{142}$ Nd/ $^{144}$ Nd isotopes measurements, suggesting at least one major differentiation event in a terrestrial magma ocean experienced by Earth's mantle within the first 150 Myr of planetary accretion (Boyet et al., 2003; Boyet and Carlson, 2005). Also, geochemical evidences from Ne, Ar, and Xe analysis point out to very early and extensive degassing (Fanale, 1971; Sarda, Staudacher, and Allègre, 1985; Moreira, 2013), compatible with the MO hypothesis.



FIGURE 1.12 – Origin of the solar system as hypothesized by Georges-Louis Leclerc Buffon in his *Histoire naturelle générale et particulière*, tome I, 1749. Drawn by N. Blakey and carved by S. Fessard. Planets were believed to be fragments of the Sun, expelled out by a collision with a comet whose passage spreads lots of smoke. Resulting planets' orbits are depicted with circles.

### 1.3.2 Thermal Evolution of the Magma Ocean

Magma ocean solidification strongly influences the earliest compositional differentiation, the volatile content of terrestrial planets, and represents the starting point for the cooling to clement and potentially habitable conditions, and for the onset of the interior dynamic regime of the planet. Hence, numerical investigations had been conducted in the past decades to characterize its evolution.

# Crystallization and Chemical Differentiation

Abe (1993a), Abe (1993b), and Abe (1997) first studied the thermal and chemical evolution of the magma ocean to investigate its effect on the chemical differentiation of the silicate mantle. Abe (1997) considered two different types of magma ocean: a transient and a sustained MO. The latter refers to a MO sustained over the accretion period by a thick blanketing atmosphere, while the former is formed by a single large impact and would cool down and solidify within a relatively short period. The main goal was to look for discriminating chemical signatures and to constrain a scenario for the early Earth. To do so, Abe introduced in their model a temperature-dependent viscosity. The viscosity of partial melt and solid phase then varies with the melt fraction, while the viscosity of the melt/liquid phase is kept constant (at 100 Pa.s). Abe (1997) also added pressure-dependent partition coefficients to treat more realistically chemical fractionation at lower mantle pressure. They tracked the transport of compatible (e.g., Mg, Cr) and incompatible (e.g., Al, Na, Fe) trace elements along the cooling to monitor chemical differentiation. Overall, they considered melt-solid differentiation, convective heat and mass transport, melt-solid phase change, and viscosity variation with melt fraction.

Contemporary with Abe's group work and to better constrain early differentiation, Solomatov and Stevenson (1993b) and Solomatov and Stevenson (1993a) specifically addressed the crystallization of the magma ocean, and the role of MO convection in suspension or sedimentation of particles of different sizes.

Later on, Solomatov (2000) and Solomatov (2007) developed a parameterized approach to study the thermal evolution of the magma ocean. The crystallization sequence considered in these studies is shown in Figure 1.13. This approach is used in our work and further described in Chapter 2. Solomatov (2000) also emphasized the different processes occurring during MO solidification and that might influence its evolution. It appears that today, most of them are still poorly constrained.

Both low viscosity and high temperature difference within the magma ocean makes it a vigorously convecting system. In such a case, the temperature profile is assumed to be adiabatic and isentropic. The incipient crystallization of the MO locates at depth, where this adiabat first intersects the melting curve. Two scenarii can then be addressed regarding uncertainties in determining experimentally the Earth's mantle liquidus: either mantle crystallization has started at the core mantle boundary (Andrault et al., 2011), or at mid-mantle depth (Fiquet et al., 2010). However, differences arise for chondritic (Andrault et al., 2011), peridotite (Fiquet et al., 2010), pyrolitic (Nomura et al., 2014; Tateno, Hirose, and Ohishi, 2014), and basaltic (Andrault et al., 2014) material (Figure 1.14). Due to the uncertainties concerning mantle composition and experimental techniques, this issue remains controversial. In the present work, we chose to consider the classical scenario of bottom-up solidification depicted in Figure 1.13, using liquidus and solidus obtained experimentally for a chondritic-type mantle in Andrault et al. (2011).

During solidification, whether growing crystals remain suspended within the magma or settle down has strong implications regarding the chemical evolution of the magma



FIGURE 1.13 – Crystallization of the magma ocean where the adiabat (black line) first intersects the liquidus (red line) at depth following a bottom-up crystallization scenario. (a) The adiabatic temperature in the lower part of the magma ocean is below the liquidus, convection is controlled by melt viscosity (thin arrows). The surface boundary layer and cold plumes are shown with blue color. (b) High viscosity, gravitationally unstable region, with the maximum packing crystal fraction, forms near the bottom of the magma ocean ( $\phi = \phi_c$  curve is shown with a green dashed line which corresponds to the temperature of the rheological transition). (c) Cooling beyond  $\phi = \phi_c$  proceeds via solid state convection (thick arrows) which is still fast at this stage. The temperature in the high viscosity region below solidus (blue line) can be superadiabatic. Turbulent convection near the surface is switching to a plate tectonics type of convection. The base of the mantle remains partially molten (basal magma ocean) because of the high temperature of the core. (d)  $\phi > \phi_c$  everywhere and the rate of cooling and crystallization of the remaining melt are controlled by solid-state convection and melt percolation. The primordial crust may start forming at that time (brown). The gray and black crystals schematically illustrate different mineral phases. From Solomatov (2015).



FIGURE 1.14 – Melting curves obtained for peridotite (F-10, Fiquet et al., 2010), chondritic-type mantle (A-11, Andrault et al., 2011), midocean ridge basalt (A-14, Andrault et al., 2014), and wet-pyrolite (N-14, Nomura et al., 2014). Dashed curves stand for adiabatic profiles (M-07, Matas et al. (2007); H-05, Hernlund, Thomas, and Tackley (2005); K-10, Katsura et al. (2010); BS-81, Brown and Shankland (1981); B-01, Bunge, Ricard, and Matas (2001)). From Andrault et al. (2016).

ocean. It is still a poorly understood topic as the only observational constraint available is the present-day structure of the Earth's mantle. Two end-members of crystallization scenarios can be distinguished: fractional crystallization/solidification and batch (or equilibrium) crystallization. In the fractional solidification, minerals settle from flow and are effectively removed from communication with the ambient and remnant magma ocean liquids (melt-solid separation). The residual melt composition evolves with the removal of each crystals package and becomes more and more enriched in incompatible elements<sup>15</sup>, that are going preferentially in the liquid phase. Being denser than the ambient melt, crystals sink and produce cumulate layers at the base of the MO, whose composition depends on the melt constitution. Both the melt and the cumulate layers evolve progressively towards Fe-rich (denser) composition.

In batch crystallization, crystals and co-existing liquid remain in contact and in equilibrium throughout solidification. Thus, no compositional fractionation occurs and a fully homogeneous mantle composition is expected.

The crystallization sequence is responsible for an iron enrichment of the melt and results in a gravitationally unstable stratification, where denser Fe-rich materials accumulate on top of lighter elements. The fractional crystallization of the entire MO has

<sup>&</sup>lt;sup>15</sup>Incompatible elements are unsuitable in size and/or charge to the cation sites of minerals of which they are included. Thus, they have difficulty entering the solid phase and stay preferentially in the liquid phase.

thus been proposed to be followed by a whole-mantle overturn (Elkins-Tanton, Parmentier, and Hess, 2003; Elkins-Tanton, Hess, and Parmentier, 2005; Elkins-Tanton et al., 2005). This scenario might explain various features of early planetary evolution: an early and brief magnetic field on Mars; compositional heterogeneity of differentiated mantle cumulates, consistent with ages and compositions of inferred source regions for the  $SNC^{16}$  martian meteorites; an earliest crust-forming event with composition consistent with surface and meteorites data. Nevertheless, a major issue concerning the global overturn hypothesis is that the resulting stably stratified mantle is resistant to any thermal or thermochemical mantle convection, accounting for an initially non-convecting solid-state mantle after the cumulate overturn (Tosi, Plesa, and Breuer, 2013; Plesa, Tosi, and Breuer, 2014). Post-MO overturn might be relevant to explain the preservation of early isotopic reservoirs on Mars and the absence of plate tectonics, but hard to reconcile with its late volcanic history (Tosi, Plesa, and Breuer, 2013), that is thought to originate from long-term vigorous mantle convection (Li and Kiefer, 2007; O'Neill et al., 2007; Grott and Breuer, 2010; Sekhar and King, 2014). Such a major overturn event seems also in contradiction with current Earth's mantle dynamics.

Instead of a global late overturn, leading to a stably stratified mantle and preventing further mantle convection, Maurice et al. (2017) suggested that a slow solidifying magma ocean induces convection in the solidified part. This continuous mixing during solidification allows for a partly homogeneous mantle, favorable for long-term mantle convection (Maurice et al., 2017). Similarly, Ballmer et al. (2017) showed that in a slow MO cooling, due to the presence of a steam blanketing atmosphere, compositional heterogeneities generated by fractional crystallization are erased by incremental overturns. The most Fe-enriched cumulates crystallizing at the end of solidification then turn over as small diapirs, and might reconcile with seismic measurements at the base of the mantle. Boukaré, Parmentier, and Parman (2018) provide a dimensionless parameter that compares the respective contribution of cumulate viscosity and MO cooling rate to characterize the timing of thermo-chemical convection relative to MO solidification. It allows to quantify the amount of mantle mixing during MO solidification. A combination of batch and fractional crystallization for Mars' MO would provide moderate compositional gradient, that might then be a way to facilitate the onset of post-overturn convection and to preserve primordial compositional heterogeneities evidenced by isotopic signatures of the SNC meteorites (Foley et al., 2005).

A melt has a greater volume than a solid silicate of the same composition. However, due to compressibility, this difference diminishes at high pressure and a melt sufficiently enriched in heavy elements (such as iron) might then become denser than solids at depth, and sink downwards to the CMB. This has been proposed to explain the formation of an iron-rich molten layer at the base of the mantle (Labrosse, Hernlund, and Coltice, 2007, Figure 1.15). Note that the survival of this molten layer could explain the existence of both an unsampled geochemical reservoir, containing the missing budget of heat-producing elements, and the presence of ultra low velocity zones<sup>17</sup> (ULVZs) at the core-mantle boundary imaged by seismic tomography. Such a basal magma ocean hypothesis is in agreement with the mid-depth mantle crystallization scenario. A fundamental parameter to constrain is the iron partition coefficient between melt and solid, which has been investigated both theoretically (Stixrude et al.,

<sup>&</sup>lt;sup>16</sup>Shergottites Nakhlites Chassignites define a group of achondritic (differentiated) meteorites believed to originate from Mars.

<sup>&</sup>lt;sup>17</sup>Patches on the CMB of extremely low seismic velocities which indicate a change of material properties.



FIGURE 1.15 – Schematic illustration of the formation of a dense basal magma ocean. Iron-rich liquid descends as a rain of droplets in the shallower magma ocean, accumulates on top of the solid mantle and undergoes diapiric instability and rapid transport to the core. From Labrosse, Hernlund, and Coltice (2007).

2009; Boukaré, Ricard, and Fiquet, 2015) and experimentally (Andrault et al., 2011; Nomura et al., 2011; Tateno, Hirose, and Ohishi, 2014), but a clear understanding is still lacking. Using a two-phase thermodynamic model, Boukaré, Ricard, and Fiquet (2015) computed self-consistently the density contrasts between melt and solid during fractional crystallization. They showed that even if melts are lighter than crystals for isochemical compositions, iron-rich melts become easily denser than solids in the deep mantle. Recently, Boukaré and Ricard (2017) emphasized the possibility of a homogeneous snow regime, where crystals snow upwards across the MO from the bottom to the top. They suggested that different types of stable and unstable crystallization could have existed simultaneously at different depths.

Maas and Hansen (2015) studied the role of planetary rotation in the differentiation of the convecting MO. They showed that crystal settling in a rotating poorly viscous MO is inhomogeneous, and results in an asymmetric accumulation of crystals. While at the poles, silicate crystals sink and accumulate at the bottom of the MO, they can be kept in suspension and accumulate at middepth at the equator. At the poles, it leads to a bottom-up solidification with a gravitationally stable stratified layer at the bottom, irrespective of the rotation rate, as proposed by (Solomatov, 2007). However, it could account for the formation of a basal magma ocean at the CMB near the equator (Labrosse, Hernlund, and Coltice, 2007).

Focusing on interior processes only, the models described previously do not consider the presence of an atmosphere or do not explicitly consider any interaction with it during the thermal evolution. They did not address the surface conditions reached at the end of the accretion nor water ocean formation. However, the mentioned processes have implications regarding both the surface conditions and potential habitability of the planet. For instance, the internal structure resulting from the chemical differentiation influences the volatile distribution: the existence of an isolated molten layer at the base of the mantle might trap volatiles that could no longer be outgassed during magma ocean solidification. Also, a global overturn event would suddenly release a significant amount of heat from the mantle that could potentially destabilize any temperate climate.

Furthermore, chemical differentiation controls the mixing and the long-term cooling of the whole mantle. The resulting conditions at the core mantle boundary have strong implications for the core cooling itself, which is a key ingredient regarding the magnetic history of the Earth (Monteux, Andrault, and Samuel, 2016). The magnetic field is responsible for a shielding effect against stellar radiation that reduces atmospheric escape efficiency, and is thus thought to maintain temperate conditions suitable for the development of life (e.g., Foley and Driscoll, 2016; Brain et al., 2016).

More generally, the internal structure inherited from the MO stage is determinant for the subsequent geodynamic regime and long-term evolution of the planet. Indeed, the mantle convection regime controls the heat flow and the volatile degassing from the interior through volcanism for example. Plate tectonics on Earth is thus thought to regulate the carbonate-silicate cycle, which stabilizes climate and maintains temperate surface conditions on Earth (e.g., Foley and Driscoll, 2016). On the contrary, abrupt major resurfacing events might destabilize the climate and be harmful for the development of life.

During MO solidification, volatiles going preferentially in the liquid are progressively expelled onto the atmosphere. This interplay between MO solidification and atmosphere formation is important to consider when looking at the surface conditions. Such processes are discussed in the following.

### Atmosphere Degassing and Evolution

In the magma ocean stage, the planet is overheated compared to the surrounding space. Indeed, the heat flux going out of the magma ocean is much higher than the incoming stellar radiation. To cool down and reach thermodynamic equilibrium, a planet radiates heat to space. However, the surface is not directly in contact with space if an atmosphere is present, and thus, the cooling rate can be limited by the presence of an atmosphere containing greenhouse gases. Investigations about the formation of a steam, H<sub>2</sub>O-dominated atmosphere, its blanketing and greenhouse effect at the end of the accretion have been initiated by Matsui and Abe (1984). The pioneer work of Matsui and Abe is twofold: first, they studied the atmosphere impact-induced formation and evolution (Matsui and Abe, 1984; Abe and Matsui, 1985; Matsui and Abe, 1986; Matsui and Abe, 1986; Abe and Matsui, 1988; Abe, 1993a), and then, as described in the previous section, they focused on the thermal and chemical evolution/differentiation of the molten mantle under such an atmosphere (Abe, 1993a; Abe, 1993b; Abe, 1995; Abe, 1997).

First, using a grey atmosphere<sup>18</sup> and considering impact energy distribution and impact degassing processes, they emphasized the formation of impact-induced atmospheres, formed by shock-heated evaporation (release) of volatile elements during collisions (Matsui and Abe, 1984). Planetesimals are thus dehydrated and a H<sub>2</sub>O atmosphere is formed after successive collisions. Then, they discussed the implications

<sup>&</sup>lt;sup>18</sup>The grey approximation assumes that the gaseous absorption of radiation is wavelength independent.

of such an atmosphere for the early terrestrial planets: its blanketing effect blocks the escape of impact-generated heat to space and can maintain the surface temperature above the solidus temperature, resulting in the formation of a magma ocean (Abe and Matsui, 1985; Matsui and Abe, 1986; Matsui and Abe, 1986).

At the end of the accretion, they argued that an impact-generated  $H_2O$  atmosphere is likely to condense and form a hot proto-ocean on Earth (consistently with estimated temperatures of the Archean ocean, e.g., Oskvarek and Perry, 1976), while such condensation did not occur on Venus (Matsui and Abe, 1986).

In Abe and Matsui (1986), they considered more realistic conditions for the thermal and atmospheric evolution of the growing Earth. They included a temperaturedependent degassing and the dissolution of water vapor into silicate melt, accounting for both dehydration of planetesimals and rehydration of the mantle. They predicted that (i) the final mass of an impact-generated  $H_2O$  atmosphere at the end of accretion is similar to the current one, thus accounting for an impact origin for the atmosphere; and that (ii) most of  $H_2O$  brought by planetesimals is retained in the interior of the proto-earth.

Abe and Matsui (1988) then increased the complexity of their previous atmospheric model: they considered both  $H_2O$  and  $CO_2$  (while  $CO_2$  was not considered in Matsui and Abe, 1986), using wavelength-pressure-temperature dependent absorption (i.e., non-grey absorption) for both species, they included condensation of  $H_2O$  with proper wet convective lapse rate, non-ideal behaviors of  $H_2O$  at high pressure, and Rayleigh scattering (at short wavelengths). Their one-dimensional radiative-convective spherical (instead of plane-parallel for their previous studies) model has then been used to study more rigorously the evolution of an impact-generated  $H_2O-CO_2$  atmosphere at the final stage of the accretion. They prescribed different values for the internal flux to account for different accretion steps. Using the present Earth radius and mass, this variation of the internal flux was accounting only for energy inputs (and not mass inputs). Thus, they calculated the resulting atmospheric structure at different accretion steps, corresponding to different surface temperatures, the lowest being the last accretion step. They confirmed that a water ocean formed at the end of the accretion on early Earth, with surface conditions consistent with Archean estimations. More surprisingly, they found that, accounting for the wet convection, a proto-ocean can also be formed on early Venus. Similar conclusions have been drawn independently by Zahnle, Kasting, and Pollack (1988) and Kasting (1988) using their own one-dimensional climate models.

These groundbreaking studies were however prescribing both atmospheric composition and internal heat flux, without computing self-consistently the interaction between the mantle and the atmosphere.

Elkins-Tanton (2008) first included  $CO_2$  in the volatile transfer while coupling magma ocean solidification and volatile degassing. Initially, the volatiles, namely H<sub>2</sub>O and CO<sub>2</sub>, are dissolved within the magma ocean according to solubility laws from Papale (1997). As the magma crystallizes, incompatible volatiles go preferentially in the residual liquid, which becomes enriched in volatiles. When melt saturation limit is reached, volatiles are exsolved from the magma. Due to its lower solubility in melt, CO<sub>2</sub> is degassed completely and faster than water, which is partitioned between solid cumulates, evolving liquids, and the growing atmosphere. The volatile transfer modeled in the present work follows this approach (Chapter 2).

Using a coupled magma ocean-atmospheric model, Hamano, Abe, and Genda (2013) studied the cooling and solidification of magma ocean planets including  $H_2O$  degassing from the magma ocean, grey radiative-convective equilibrium calculations for a cloud-free atmosphere, and water loss associated with hydrodynamic escape.



FIGURE 1.16 – Emergence of two types of terrestrial planet during the solidification of the magma ocean as emphasized by Hamano, Abe, and Genda (2013). Adapted from Elkins-Tanton (2013).

Depending on their respective location from the Sun, they emphasized two distinct types of planets resulting from the solidification of the magma ocean (Figure 1.16). Type I planets are formed beyond a certain critical distance, where rapid cooling (i.e., in about 1 Myr, depending on the initial water inventory) can occur and a water ocean is formed at the end of the solidification. Type II planets, located below a critical distance, lose their water and solidify only through hydrodynamic escape that desiccates the planet in about 100 Myr. Indeed, because of their proximity to the Sun, the absorbed stellar flux is maintained above the radiation limit, responsible for a runaway greenhouse that keeps the planet molten until enough water is lost and the blanketing effect of the atmosphere reduced. The solidification rate of type II planets is then mainly governed by the water loss rate due to hydrodynamic escape. They estimated the location of the critical distance separating the two types of planets to be farther away from the Sun than Venus' distance. Then, they proposed that the Earth and Venus diverged from their early molten stage due to their respective location from the Sun.

At the same time, Lebrun et al. (2013) also developed a coupled model to calculate self-consistently the thermal evolution of the magma ocean in interaction with the atmosphere, using the atmospheric model of Marcq (2012). Compared to Hamano's group model, they do not consider atmospheric escape but take into account  $CO_2$ in both degassing and radiative processes. Lebrun et al. (2013) also include internal heating produced by radioactive decay of short (<sup>26</sup>Al) and long period (U, Th, K) elements. In such models, the heat flux from the magma ocean is much higher than the incoming stellar radiation: atmospheres are heated from below. The surface temperature is established not by the radiative equilibrium between the incoming and outgoing solar radiation, but by the equilibrium between the heat flux transported by convection in the magma ocean to the surface and the heat flux radiated from the surface, that depends on the atmospheric composition. The cooling is thus buffered by the blanketing effect of the atmosphere. Lebrun et al. (2013) showed that the degassing of the blanketing atmosphere delays the cooling and solidification of the MO for about 1 Myr. The amount of initial greenhouse gases and their degassing path strongly influence the duration of the magma ocean phase. Radiogenic heating also delays magma ocean solidification.

Lupu et al. (2014) investigated the post-impact atmospheric chemistry of different and multicomponents composition depending on surface composition. They found that post-giant impacts atmospheres are dominated by  $H_2O$  and  $CO_2$  for the two different surface compositions simulated, reflecting either the composition of the bulk silicate Earth or of the Earth's continental crust. They emphasized spectral signatures of post-giant-impact on earthlike planets, that are however beyond the detection capabilities of current instrumentation for exoplanet observation. The MO cooling timescale estimated is on the order of 1 Myr, that is similar to other studies (Hamano, Abe, and Genda, 2013; Lebrun et al., 2013). Note that they specify atmospheric pressures and do not explicitly model the degassing from the interior. While their atmospheric model is quite exhaustive, accounting both for radiative-convective and chemical processes by computing self-consistently the atmospheric chemistry and structure, they limited their study to a cloud-free Earth-like planet, located at 1 AU, and orbiting a current Sun-like star. The faint young Sun, relevant for the moon-forming impact is thus not addressed, nor planets located at different distances from the star.

Then, Hamano et al. (2015) improved their previous atmospheric model by replacing their grey radiative transfer model by a non-grey code, to calculate thermal emission and reflection spectra from the planet. They thus included planetary albedo computations, instead of prescribing it to a constant value as was done previously (Hamano, Abe, and Genda, 2013; Lebrun et al., 2013). Using their line-by-line high resolution spectra, they investigated the spectral evolution and detectability of cloudfree magma ocean planets for both type I and type II planets.

# Thesis Outline

The habitability of a terrestrial planet classically relies on the presence of liquid water on its surface. Then, to be habitable, the first fundamental condition for a planet is to acquire a substantial amount of water during its lifetime.

Current theories of planetary formation suggest an early water delivery for rocky planets, so that when they reach their final mass at the end of the accretion phase, most of the water is already accreted. However, large uncertainties remain regarding the amount of volatile delivered, making the initial amount of volatile a highly unconstrained parameter.

At the end of the accretion phase, due to energetics of accretionary impacts combined with other heat sources, it is most likely that terrestrial planets experienced a molten stage: the so-called magma ocean stage.

The cooling and solidification of this early molten stage witnesses the outgassing of the atmosphere, the compositional differentiation of the planet, and the formation of the solid surface. The initial amount of volatile, including water, is then distributed between the different reservoirs of the planet. Thus, magma oceans represent the starting point for cooling to potentially clement and habitable conditions, and set the primordial conditions for the onset of thermally driven mantle convection, and more generally for the long-term evolution of the planet.

The evolution of the magma ocean stage is thus of primary importance in determining the surface conditions and to characterize the early habitability of a planet. Indeed, if a rocky planet accreted a substantial amount of water, the second requirement for its habitability is to harbor temperate surface conditions, suitable for sustaining water in the liquid phase.

Using a coupled magma ocean-atmosphere model described in Chapter 2, we simulate the cooling of the magma ocean in interaction with the outgassed atmosphere.

In Chapter 3, we first investigate the relative influence of the initial volatile content, namely  $H_2O$  and  $CO_2$ , on the thermal evolution and resulting surface conditions of the coupled system, for planets located at different distances from the young Sun.

Then, in Chapter 4, using an updated version of our atmospheric model including planetary albedo computations and clouds, we focus on the cases of early Venus and early Earth. Depending on the cloud cover, we show that a water ocean can be formed on early Venus at the end of the magma ocean stage.

Finally, in Chapter 5, we extend our approach to exoplanets orbiting colder stars than the Sun.

Throughout the chapters the following questions will be addressed.

- How does the initial volatile content influence the thermal evolution and the primitive surface conditions of rocky planets? (Chapter 3)
- How is the early water ocean formation sensitive to the initial H<sub>2</sub>O-CO<sub>2</sub> content? (Chapter 3)
- Can we predict the formation of a water ocean at the end of the magma ocean stage? (Chapter 3)
- How do clouds influence the MO cooling and early habitability? (Chapter 4)
- Was Venus once habitable in the past? (Chapter 4)
- How does the host star affect the early evolution and habitability of rocky planets? (Chapter 5)

- How does the initial H<sub>2</sub>O–CO<sub>2</sub> content affect the location of the IHZ? (Chapter 5)
- Can we account for the stellar properties using a dimensionless parameter in predicting the IHZ? (Chapter 5)

# Chapter 2

# Methods

In order to solve the thermal evolution of the coupled MO-atmosphere system, we developed a 1–D numerical model based on Lebrun et al. (2013). We describe here the methodology used to simulate this evolution, in the case of one sequence of MO cooling, following a giant impact event at the end of the accretion of the planet, such as the Moon-forming impact.

# 2.1 Magma Ocean

# 2.1.1 Initial Conditions

We assume an initial potential temperature  $T_{pot} = 4000$  K due to post-giant impact heating (Hostetler and Drake, 1980; Tonks and Melosh, 1993). Given the Earth's mantle liquidus for a chondritic composition (Andrault et al., 2011), this temperature would correspond to an entirely molten Earth's mantle, all the way down to the coremantle boundary (Figures 2.1 and 2.2).

We consider that any pre-existing atmosphere has been eroded during the impact so that no atmosphere is present at first (Figures 2.1 and 2.3). Thus, the planet initially radiates as a blackbody  $F_{bb}$ , whose temperature is the equilibrium temperature  $T_{eq}$ . This condition is used to determine an initial surface temperature  $T_{surf}$  following (Lebrun et al., 2013)  $F_{bb} = \sigma_{SB}(T_{surf}^4 - T_{eq}^4)$ , where  $\sigma_{SB}$  is the Stefan-Boltzmann constant.

We explore a range of volatile content compatible with current estimations of initial volatile content accreted by terrestrial planets of the solar system (see Chapter 1). At the start, volatiles are dissolved within the magma ocean as mass fractions  $X_0$  of the MO. H<sub>2</sub>O and CO<sub>2</sub> initial contents vary from  $X_{0H_2O} = 0.12 \times 10^{-2}$  wt% to  $X_{0H_2O} = 4.67 \times 10^{-2}$  wt% and from  $X_{0CO_2} = 0.1 \times 10^{-2}$  wt% to  $X_{0CO_2} = 14 \times 10^{-2}$  wt%, corresponding to 0.03 and 1.25 Earth's ocean for water, and partial pressures varying between  $P_{CO_2} = 7$  bar and  $P_{CO_2} = 1000$  bar for CO<sub>2</sub>.

#### 2.1.2 Magma Ocean Cooling

The secular cooling SC of the MO is governed by the conservation of energy and is written (e.g., Abe, 1997; Solomatov, 2000; Lebrun et al., 2013):

$$SC = \int_{R_b}^{R_p} \rho C_p \frac{dT(r)}{dt} r^2 dr = R_p^2 F_{conv} + R_b^2 F_b + H_{int} + H_{sol}, \qquad (2.1)$$

where  $\rho$  is the averaged density of melt and solid,  $C_p$  the specific heat, T the radial temperature, and r the planetary radius variable. t is time.  $R_p$  and  $R_b$  stand respectively for the planetocentric altitude of the spherical planet surface and that of the base of the magma ocean, from which the heat fluxes  $F_{conv}$  and  $F_b$  are respectively



FIGURE 2.1 – Simplified views of the initial and final stages of the model with the different processes considered. Typical crystallization and degassing sequences are shown in Figures 2.2 and 2.3, respectively.



FIGURE 2.2 – Typical magma ocean crystallization sequence of our model starting from an entirely molten mantle at t = 0 (red,  $\phi = 1$  all the way down to the CMB), and reaching a solid-state mantle at t = n (blue,  $\phi > \phi_c$ ).



FIGURE 2.3 – Typical magma ocean degassing sequence of our model for  $H_2O$ . All the water is initially dissolved within the molten mantle and is distributed between the different reservoirs during the solidification.



FIGURE 2.4 – (a) Temperature profile, solidus and liquidus (black, red, and green curves, respectively) of the (b) schematic cross section of the magma ocean surrounded by the atmosphere (light blue area).  $F_{conv}$  stands for the convective heat flux going out of the magma ocean (red dotted arrows);  $F_{abs}$  (dashed black arrows going through the atmosphere) is the absorbed part of the total incident stellar flux  $F_{\downarrow}$  (black arrows), while the reflected part is equal to  $\alpha F_{\downarrow}$  (dashed black arrows). The outgoing longwave radiation at the top of the atmosphere  $F_{IR}$  controls the cooling of the planet (blue arrows). Clouds, when present are located in the moist troposphere.

emitted (Figure 2.4b).  $H_{int}$  corresponds to the internal heat from radioactive elements and  $H_{sol}$  to the latent heat of solidification. We do not take into account  $F_b$  and  $H_{sol}$ which are negligible compared to  $F_{conv}$ . The MO cools down from above by losing its heat to outer space through the outgassing atmosphere.

The heat transfer is characterized by the Rayleigh number Ra, that compares the driving thermal buoyancy forces to the resisting effects of thermal diffusion and viscous dissipation:

$$Ra = \frac{\alpha_T g \Delta T H^3}{\kappa \nu},\tag{2.2}$$

where  $\alpha_T$  is the thermal expansion coefficient, g is the gravity,  $\Delta T$  is the temperature difference within the MO of thickness H,  $\kappa = k/\rho C_p$  is the thermal diffusivity with k,  $\rho$  and  $C_p$  the thermal conductivity, the density and the specific heat respectively, and  $\nu = \eta/\rho$  is the kinematic viscosity with  $\eta$  the dynamic viscosity.

When the Rayleigh number exceeds a certain critical value, advection overcomes diffusion, and heat is transferred through convective motions. The resulting convective heat flux  $F_{conv}$  at the surface scales as (Solomatov, 2000; Solomatov, 2007):

$$F_{conv} = C_0 k \frac{T_{pot} - T_{surf}}{H} Ra^n, \qquad (2.3)$$

where  $T_{pot}$  and  $T_{surf}$  are the potential and surface temperature respectively.  $C_0 = 0.089$  and n = 1/3 are constants which depend on the regime and pattern of convection

(Malkus, 1954; Siggia, 1994; Grossmann and Lohse, 2000; Solomatov, 2007; Davaille and Limare, 2015). Their values are still debated for the very high Ra of a MO but n = 1/3 is usually taken, which implies that heat losses are governed solely by local instabilities of the upper thermal boundary layer and are independent of the MO thickness (Solomatov, 2007; Lebrun et al., 2013; Davaille and Limare, 2015). The upper thermal boundary layer thickness scales as:

$$\delta = \frac{k(T_{pot} - T_{surf})}{F_{conv}}.$$
(2.4)

At the surface of the planet,  $T_{liq} = 2000$  K and  $T_{sol} = 1400$  K, while at depth, we use experimentally determined solidus and liquidus profiles of chondritic mantle (Andrault et al., 2011). Note that Lebrun et al. (2013) used liquidus and solidus profiles based on Abe (1997).

The location of the first solids within the mantle then depends on their respective density compared to the liquids, and the curvature of their melting curves compared to the mantle adiabat's. Recent petrological experiments show that they vary significantly depending on the chemical composition of the starting material: chondritic (Andrault et al., 2011), fertile peridotite (Figuet et al., 2010), mid-ocean ridge basalt (Andrault et al., 2014), olivine system (Nomura et al., 2011), and pyrolitic material (Tateno, Hirose, and Ohishi, 2014). The two last studies report strong Fe enrichment in the melt, which would therefore be denser than the solids. This would support the idea of a basal magma ocean (Labrosse, Hernlund, and Coltice, 2007). On the other hand, thermodynamical calculations (Boukaré, Ricard, and Fiquet, 2015) obtain slightly different melting curves. This model of the solid-liquid equilibrium in the MgO-FeO-SiO<sub>2</sub> system (Al and Ca not being present in the melt) confirms that the melt is lighter than the solid of same composition for all mantle conditions. But it also shows that for the P-T conditions of the lowermost mantle, crystallization may lead to the formation of solids lighter than the surrounding melt (as they are more Mg-rich and less Fe-rich). Again, this would favor the formation of a basal magma ocean. However, Andrault et al. (2012) point out that the presence or absence of Al can also influence the density inversion. Thus, as the formation of an individual magma ocean at the base of the mantle is still debated, we consider the simpler case of a magma ocean of chondritic composition (such as Andrault et al., 2011) crystallizing from bottom-up (Figures 2.2, 2.4, and 2.5). We consider the details of neither petrological nor geochemical processes even if they might be important to generate stratification in a planet (Elkins-Tanton, 2008; Maurice et al., 2017). Unless these processes create an early light stagnant lid at the surface of the magma ocean, they should not affect significantly the surface heat flux (Solomatov, 2007; Jaupart and Mareschal, 2011), which is one of the main parameter controlling the surface conditions we are interested in.

As solidification proceeds, zones of different rheology develop, and the convective time scales within each zone are expected to be different given their respective viscosity. This has no influence on  $F_{conv}$ , but it will affect the secular cooling defined in equation 2.1, and therefore the MO temporal evolution. If we assume that as soon as the local geotherm reaches the solidus, it stays locked to it, then the mantle secular cooling SC in equation 2.1 is reduced to the integration of the temperature profile over the molten upper layer only (i.e., between the solidification front and the surface). This implies that the growing solid layer underneath does not become unstable and does not overturn before the whole molten layer has solidified. It gives a minimum estimate of the MO solidification time. However, for Earth-sized planets, scaling



FIGURE 2.5 – Solidus (red line) and liquidus (green line) of chondritic mantle, redrawn after Andrault et al. (2011). Adiabatic temperature profiles (black lines) shown at different cooling steps. The adiabats first intersect the solidus at depth, which causes solidification to occur from the base of the mantle towards the surface.

analysis and numerical simulations suggest that convection has the time to develop in the solid layer before the whole MO solidification. This tends to homogenize the temperature in the whole mantle. Moreover, rotation and differentiation could also enhance mantle thermal homogenization (e.g., Moeller and Hansen, 2013; Maas and Hansen, 2015; Maurice et al., 2017). That is why we have chosen to approximate these 3–D complex processes by reducing the secular cooling, in equation 2.1, to the integration of the adiabatic temperature profile T(r) over the whole mantle. This constitutes one of the limitations of our 1–D model.

## 2.1.3 Magma Ocean Viscosity

Viscosity is a parameter of primary importance in controlling the vigor of convection (equation 2.2). The most important effect on magma viscosity is the presence of crystals, i.e., viscosity is controlled by the respective proportion of crystals to melt, depending itself on the temperature. This melt fraction  $\phi$  is defined as (Abe, 1997):

$$\phi = \frac{T - T_{sol}}{T_{liq} - T_{sol}},\tag{2.5}$$

where  $T_{liq}$  and  $T_{sol}$  are the liquidus and solidus temperatures, respectively, and ranges from  $\phi = 1$  for the liquid phase to  $\phi = 0$  for the solid phase.

While the viscosity of a melt/crystal mixture varies little at high liquid fractions (Einstein, 1906), it increases rapidly when the liquid fraction approaches the critical crystals packing value  $\phi_c$ , where the connectivity of solid particles resists motion. A drastic change of viscosity occurs at the critical melt fraction  $\phi_c \approx 0.4$  and results in a transition from fluid-like behavior to solid-like behavior (Abe, 1997; Solomatov, 2000). To overcome this rheological transition, Solomatov (2000) parameterized the dependence of the solid-state viscosity on the melt fraction.

When  $\phi > \phi_c$ , the viscosity of the magma is the viscosity of a magmatic liquid containing crystals (Roscoe, 1952):

$$\eta = \frac{\eta_l}{\left(1 - \frac{(1-\phi)}{(1-\phi_c)}\right)^{2.5}},$$
(2.6)

with

$$\eta_l = A_a \exp\left(\frac{B_a}{T_{pot} - 1000}\right) \tag{2.7}$$

the viscosity of the magmatic liquid derived from the Vogel-Fulcher-Tammann equation, where  $A_a = 0.00024$  Pa.s and  $B_a = 4600$  K (Karki and Stixrude, 2010).

When  $\phi < \phi_c$ , the viscosity of the magma is controlled by the viscosity of the solid particles (Kelemen et al., 1997; Mei et al., 2002; Solomatov, 2007):

$$\eta = \eta_s \exp(-\alpha_\eta \phi) \tag{2.8}$$

with, after Karato and Wu (1993),

$$\eta_s = \frac{\mu}{2A} \left(\frac{h}{b}\right)^{2.5} \exp\left(\frac{E + PV}{RT_{pot}}\right),\tag{2.9}$$

where P, V are pressure and volume, R is the perfect gas constant,  $E = 240 \text{ kJ.mol}^{-1}$ stand for the activation energy,  $h = 10^{-3} \text{ m}$  is the grain size, b = 0.5 nm is the



FIGURE 2.6 – Viscosity laws as a function of temperature for different rheologies. The black dashed line represents the viscosity law of our model. Over the temperature range, we used different laws for totally liquid magma:  $\phi=1$  and  $T\geq T_{liq}$  (red dashed line, equation 2.7 after Karki and Stixrude, 2010), partially liquid:  $\phi_c < \phi < 1$  and  $T_{\phi_c} < T < T_{liq}$  (red line, equation 2.6 after Roscoe, 1952), and for solid materials:  $\phi=0$  and  $T\leq T_{sol}$  (green line, equation 2.8 after Kelemen et al., 1997). We used an analytic expression for the mush stage, between  $T_{\phi_c}$  and  $T_{sol}$  ( $0 < \phi < c$ ):  $\eta_{\text{analytic}} = \eta_s \times \exp\left(a_{mush} \times \phi_{int}^3 + b_{mush} \times \phi_{int}^2\right)$ .

Burger vector length,  $\mu = 80$  GPa is the shear modulus, and  $A = 5.3 \times 10^{15}$  is the preexponential factor.

Equation 2.6 leads to infinite viscosity values around the rheology transition when the crystal fraction reaches  $1 - \phi_c$  (Figure 2.6). However, recent experimental data (Takei and Holtzman, 2009) suggest that for very small melt volume fractions ( $\phi < 0.01$ ), viscosity is lower than expected due to melt contiguity, and that the classical rheology transition between equations 2.6 and 2.8 is too abrupt to be realistic. In order to better model this transition and take into account these more recent results, we interpolated the liquid state (equation 2.6) and the solid state (equation 2.8) viscosity laws with a third-order polynomial (see Figure 2.6). The upper boundary for this interpolation must (i) correspond to a liquid-state behavior, as we interpolate the viscosity between the liquid state ( $\phi_0$ ) and the solid state; (ii) be higher than the critical liquid fraction  $\phi_c$ ; (iii) be low enough to account for the mush rheology.

This interpolation provides a continuous viscosity law for the explored temperature range, and smooths the rheology transition between the vigorously convective liquidstate and the solid-like mantle. Importantly, it also allows the refinement of the time steps at that critical stage and consequently, better constraints on pressures and temperatures.

# 2.1.4 Radiogenic Heating

The internal heating due to radioactive elements decay  $H_{int}$  is calculated from the current concentrations of uranium, thorium and potassium in the mantle (Schubert, Turcotte, and Olson, 2001; Jaupart and Mareschal, 2011). Short-lived isotope <sup>26</sup>Al is thought to significantly contribute to early heating (Urey, 1955) relevant for magma ocean studies, and is included in the model. From the initial concentration and the decay rate, the total radiogenic heating is computed as:

$$H_{int} = 0.9928[U]_c H_{238_U} \exp(-\lambda_{238_U}(t-t_0)) + 0.0072[U]_c H_{235_U} \exp(-\lambda_{235_U}(t-t_0)) + [Th]_c H_{232_{Th}} \exp(-\lambda_{232_{Th}}(t-t_0)) + 1.17 \times 10^{-4} [K]_c H_{40_K} \exp(-\lambda_{40_K}(t-t_0)) + 5 \times 10^{-5} [Al]_c H_{26_{Al}} \exp(-\lambda_{26_{Al}t}t),$$
(2.10)

where  $\lambda_i$  and  $H_i$  are the decay constant and the heat production per isotope mass unit for each isotope *i*, *t* is time and  $t_0$  is the age of the planet.  $[U]_c$ ,  $[Th]_c$ ,  $[K]_c$ , and  $[Al]_c$  correspond to the current element concentrations in the silicate Earth, using chondritic values (Table 2.1 and references therein; Allègre et al., 1995; McDonough and Sun, 1995; Taylor and McLennan, 1995; Lodders, 1998; Javoy, 1999).

ppm]
999)
.999)
999)
1998)
9 .(

TABLE 2.1 – Radiogenic heat production parameters<sup>a</sup>.

<sup>a</sup>From Rybach (1988) for U, Th, and K, and from Šrámek et al. (2011) for Al.

<sup>b</sup>Current natural abundance.

<sup>c</sup>Initial natural abundance.

# 2.2 Atmospheric Model

The atmospheric model used here is the 1–D plane-parallel radiative-convective model initially developed by Marcq (2012), and updated recently in Marcq et al. (2017) and Pluriel, Marcq, and Turbet (2018). The atmosphere is made of H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>, and N<sub>2</sub>, where water vapor is the only condensible species. The plane-parallel atmosphere approximation is valid while the maximal scale height of the atmosphere is much lower than the radius of the planet, which is always the case in our simulations (valid until  $H_{\rm atm}/R_{\rm planet} \approx 0.3$ ). The atmosphere can be treated as a grey emitter, where the absorption of each species is constant for all wavelengths; or as non-grey atmosphere using wavelength-dependent absorption coefficients for both H<sub>2</sub>O and CO<sub>2</sub>. Apart from most of the calculations in Chapter 3, we made use of the non-grey atmospheric model.

Three different versions of the atmospheric model have been included in the coupled model along the thesis. The first one, used in Chapter 3, is the update of the one originally developed in Marcq (2012) and published in Marcq et al. (2017). Compared to the Marcq (2012) version, a bad handling of the k-correlated method, that severely underestimated the outgoing longwave radiation, has been corrected. Also, since Marcq et al. (2017), the height of the atmosphere is no longer fixed at 600 km, but is scaled according to pressure to reach 0.1 Pa at TOA (pressure coordinates). Further details can be found in the cited paper. The second version, used in Chapter 5 includes true computation for the albedo, with and without clouds. This second version of the model has not been published until an updated opacity database has been included. This updated opacity database is the only difference between the second and third (latest) version of the model (Pluriel, Marcq, and Turbet, 2018), which has been used in Chapter 4.

# 2.2.1 Vertical Structure

The atmosphere can be divided in up to three different vertical layers, namely from the planetary surface to the top of the atmosphere: (1) dry unsaturated troposphere, (2) moist water saturated troposphere (containing the clouds whenever present), (3) mesosphere (Figure 2.4a). The vertical structures possible are: (1 + 2 + 3), (1 + 3), and (2 + 3). The mesosphere is isothermal with a temperature of 200 K and purely radiative, while convection occurs in the tropospheres. A moist adiabatic lapse rate is used in the moist troposphere and differs from the dry adiabatic lapse rate, to account for latent heat released from condensation (Kasting, 1988; Marcq, 2012; Marcq et al., 2017). At the beginning of our simulations, high surface temperatures and low water vapor pressures preclude water condensation so that the moist troposphere is absent (1 + 3). Conversely at the end of some simulations, partial pressures of H<sub>2</sub>O exceed the saturation pressure of water until the surface and the dry troposphere is absent (2 + 3). In such a case,  $P_{surf}(H_2O)$  is set to the saturation pressure and all water in excess condenses into a water ocean at the surface of the planet. Intermediate cases present all three vertical layers (1 + 2 + 3).

# 2.2.2 Clouds and Albedo Calculations

The atmosphere is heated from below so that the atmospheric temperature decreases from the surface to the top of the atmosphere. Then, water condensation occurs first in the cold upper layers as soon as the saturation pressure is reached. The user can choose to take into account clouds or not. If clouds are included, they are considered to be present throughout the atmosphere wherever water condensation occurs, i.e., in the moist troposphere. Both scattering in the visible range and opacity in the thermal domain are modeled. Clouds optical and microphysical properties are based on present day water Earth's clouds. In Marcq (2012) and Marcq et al. (2017) (and thus in Chapter 3), they are computed following Kasting (1988) parameterization, i.e., assuming a simplified Mie behavior of liquid water cloud droplets with a 5  $\mu$ m mean radius. IR optical properties are detailed in (Marcq, 2012). In the visible domain, the scattering effect of clouds  $\alpha$  is roughly parameterized following:

$$\alpha = (1 - \exp(-\tau_c))\alpha_{\text{clouds}} + \exp(-\tau_c)\alpha_{\text{clear}}, \qquad (2.11)$$

where  $\tau_c$  stands for the vertical integrated cloud opacity at 1  $\mu$ m,  $\alpha_{clear} = 0.2$  is the albedo in the cloud-free regime, and  $\alpha_{clouds}$  is the albedo of the clouds themselves. Note that Marcq (2012) and Lebrun et al. (2013) were prescribing a clouds' albedo value  $\alpha_{clouds} = 0.7$  according to present-day Venus, while Marcq et al. (2017) and Salvador et al. (2017) used  $\alpha_{clear} = \alpha_{clouds} = 0.2$  based on dense atmosphere radiative transfer models, predicting low albedo value for H<sub>2</sub>O-dominated atmospheres (Leconte et al., 2013; Goldblatt et al., 2013; Hamano et al., 2015).

Prescribing the albedo in both cloud-free and cloudy simulations was a major limitation of our atmospheric model (Marcq, 2012; Marcq et al., 2017). It has thus been updated in order to address this specific aspect. On that purpose, the spectral range has been extended to optical and near-UV domains. Rayleigh scattering opacity has been implemented following a simple  $\lambda^{-4}$  spectral dependency for Rayleigh cross sections of H<sub>2</sub>O and CO<sub>2</sub> (Pluriel, Marcq, and Turbet, 2018). Gaseous line absorption has also been extended to the visible spectral range, as well as absorption by the continuum (i.e., collision induced absorption, dimer absorption, and far line wing absorption) following Turbet et al. (2017) and Tran et al. (2018). Clouds IR opacity is similar to Marcq et al. (2017), and scattering phase function is assumed to follow the analytical Henyey-Greenstein expression given by Kasting (1988).

Rayleigh scattering, atmospheric gaseous opacity, and Mie scattering from clouds are then used to calculate the spectral reflectance of the atmosphere using the DISORT solver (Stamnes et al., 1988). Note that given the  $\lambda^{-4}$  dependence of Rayleigh scattering, it is much more efficient at shorter wavelengths, corresponding to the visible range<sup>1</sup>. Without clouds, Rayleigh scattering competes with gaseous absorption. Rayleigh scattering then fails to compensate for H<sub>2</sub>O and CO<sub>2</sub> absorption in the near infrared, so that the spectral reflectance from these wavelengths is low. Conversely, with clouds, Mie scattering maintains a higher spectral reflectance (Pluriel, Marcq, and Turbet, 2018). For the same atmospheric composition and surface temperature, one can thus expect a higher reflectance with clouds than without clouds.

Once the spectral reflectance is computed, the resulting Bond albedo  $\alpha$  is calculated by weighting the reflectivity of each band  $R(\sigma)$  with respect to the stellar radiation  $B_{\sigma}$ , assuming that the star radiates as a black body of effective temperature  $T_{eff}$ :

$$\alpha(R, T_{eff}) = \frac{\int_0^\infty R(\sigma) B_\sigma(T_{eff}) d\sigma}{\int_0^\infty B_\sigma(T_{eff}) d\sigma} = \frac{\pi}{\sigma_{\rm SB} T_{eff}^4} \int_0^\infty R(\sigma) B_\sigma(T_{eff}) d\sigma, \qquad (2.12)$$

where  $\sigma$  is the wavenumber and  $\sigma_{SB} = 5.67 \times 10^{-8} \text{ W.m}^{-2} \text{.K}^{-4}$  is the Stefan-Boltzmann constant.

A detailed description of the updates can be found in Pluriel, Marcq, and Turbet (2018). Overall, using this latest version, we now consider the feedback between the albedo, the outgassed atmospheric composition, and planetary surface temperature, for both cloud-free and cloudy atmospheres (Chapters 4 and 5).

Note that modeling clouds in a 1–D model cannot account for their vertical or latitudinal distribution. Thus, we only address the two end-member cases here: either a clear-sky or a fully cloudy atmosphere (Figure 2.7). However, in the case of magma ocean planets, where the entire surface is molten, the atmosphere is uniformly heated from below, and the heat flux coming from the mantle is thought to be isotropic and

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>The predominance of IR radiation in the radiative transfer of magma ocean planet atmospheres explains why it was neglected in previous versions of the atmospheric model Marcq (2012) and Marcq et al. (2017), where  $\lambda > 1 \,\mu$ m.


FIGURE 2.7 – Schematic view of the atmospheric 1–D column (between the vertical dashed lines) when clouds are considered. Such a case corresponds to a 100% cloud cover. Both IR blanketing (heating) and visible reflecting (cooling) effects are computed in the model.

independent of local time or latitude. It supports the idea that either clouds might be homogeneously distributed over the entire planet, accounting for a fully cloudy atmosphere, or no clouds would be present at all.

## 2.3 Magma Ocean - Atmosphere Coupling

#### 2.3.1 Heat Transfer

The thermal evolution of the MO is strongly influenced by the formation of a thermal blanketing outgassed atmosphere (Figure 2.8). Atmospheric models used to investigate the feedback between the two reservoirs are, to date, only 1–D model (e.g., Elkins-Tanton, 2008; Hamano, Abe, and Genda, 2013; Lebrun et al., 2013; Lupu et al., 2014). An atmospheric column is likely sufficient to study the early MO evolution as the dominating heat flux is coming from a global MO, that is not thought to depend on the location on the planet (i.e., latitude or local solar time). These 1–D models present the advantage to be computationally cheap, which facilitates the coupling with other modules.

Due to similar composition ( $H_2O-CO_2$  dominated atmospheres) and volatile inventory (from several tens to several hundred bars), our atmospheric model has been inspired by models dedicated to runaway greenhouse studies (Ingersoll, 1969; Rasool and Bergh, 1970; Kasting, 1988; Nakajima, Hayashi, and Abe, 1992). While such models start from temperate conditions and, triggered by higher insolation, reach unstable (out of radiative equilibrium) warm climates where oceans are vaporized, our model starts at very hot surface temperatures, and the system cools down to potentially reach temperate surface conditions with the formation of water oceans. Thus, the major difference between the two types of models is the computation of the radiative balance. Runaway greenhouse models are in global radiative balance:



FIGURE 2.8 – Flowchart of the different processes occuring in the magma ocean - atmosphere system. Note that atmospheric escape is not included in our model. From Massol et al. (2016).

the absorbed stellar flux integrated over the whole planet  $F_{abs}$  equals the outgoing flux radiated at the top of the atmosphere  $F_{IR}$  so that  $F_{abs} = F_{IR}$ . Conversely, MO planet's atmospheres are out of global radiative balance: in addition to the absorbed stellar flux, the significant internal heat flux going out of the MO has to be radiated.

The cooling of the whole magma ocean-atmosphere system is then based on the following heat flux balance:

$$F_{IR} = F_{abs} + F_{conv}, \tag{2.13}$$

where  $F_{IR}$  is the net flux radiated by the planet at the top of the atmosphere (TOA) and represents the heat going out of the whole system, considering the thermal insulating atmosphere.  $F_{abs} = (1 - \alpha)F_{\downarrow}$  is the net incident stellar flux, or absorbed stellar flux (written  $F_{\odot}$  in Chapter 3), which is a fraction of the total incident stellar flux  $F_{\downarrow}$  at TOA (also written  $\mathcal{F}_0$  in Chapter 3), depending on the albedo  $\alpha$ , which is the measure of the reflected flux out of the total solar radiation received (Figure 2.4b). It appears that as soon as the convective flux from the magma ocean  $F_{conv}$  is negligible compared to the absorbed stellar flux  $F_{abs}$ , the latter becomes determinant in controlling the surface conditions, so that  $\alpha$  and  $F_{\downarrow}$  will be determinant for the primitive water ocean formation.

The outgoing longwave radiation  $F_{IR}$  calculated by the atmospheric model depends on the surface temperature and on the atmospheric opacity, that is controlled by the atmospheric vertical structure and the amount of greenhouse gases in the atmosphere. Both surface temperatures and surface pressures of gaseous species are prescribed by the internal model at each time step.

The total stellar insolation  $F_{\downarrow}$  is a function of the star-planet distance and the type of star. At Earth's distance and considering the current Sun, it corresponds to the solar constant, or total solar irradiance  $S_{\odot}$ . For our magma ocean stage simulations in the solar system, we account for a lower stellar luminosity predicted by standard stellar evolutionary models (e.g., Gough, 1981; Bahcall, Pinsonneault, and Basu, 2001). The Sun at that time was emitting  $\sim 70\%$  of the present-day luminosity. The incident stellar flux is an input of the atmospheric model. Details of incident stellar flux calculations slightly varied between the different versions of the atmospheric model implemented in our coupled model along this thesis, and are explicitly mentioned in each chapter.

#### 2.3.2 Volatiles Partitioning and Degassing

A magma can contain dissolved volatiles only up to its saturation limit. The latter depends on the species (H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>) considered, on temperature and pressure, on the magma composition, and on the phase (liquid or solid). As the magma ocean crystallizes, the dissolved volatiles go preferentially in the residual liquid, which becomes enriched in volatiles. If the saturation limit is reached, all volatiles in excess of saturation exsolve in bubbles. Then, an efficient degassing implies (i) rapid convective velocities to carry supersaturated liquid to low pressures where exsolution occurs, (ii) that bubbles rise rapidly enough so that they can reach the surface before being carried back down with the flow of convecting fluids (Elkins-Tanton, 2008). The convective velocity can be written (Priestley, 1957; Priestley, 1959; Solomatov, 2007; Elkins-Tanton, 2008):

$$v_{conv} = 0.6 \left(\frac{\alpha_T g H F_{conv}}{\rho C_p}\right)^{1/3}, \qquad (2.14)$$

and is on the order of  $0.5 \text{ m.s}^{-1}$  at the beginning of the MO solidification. For the MO depths modeled here, the whole MO vigorous circulation would be completed in a few weeks. In the meantime, when a batch of melt travels upwards, pressure decreases and so does volatiles solubility. Exsolved volatiles easily separate from the melt, reach the surface, and burst to the growing atmosphere. A few weeks is much shorter than a typical time step of the model, and thus, we can reasonably assume that at each time step, all volatiles in excess of saturation are degassed to the atmosphere (Figure 2.3). When approaching solid-state convection, convective velocity is on the order of several million years, we then assume that volatiles are carried up and then exsolved by upwards melt percolation. The percolation velocity, given by (Solomatov, 2007):

$$v_{perc} = \frac{g\Delta\rho d^2\phi_l^2}{150\eta_l(1-\phi_l)},\tag{2.15}$$

is higher than the velocity of the solidification front. Thus, we assume that volatiles can travel up to the surface faster than the solidification front, so that volatiles are in equilibrium between the liquid part of the magma ocean and the atmosphere at each time step. This assumption is no longer valid if a conductive lid, thick enough to isolate the mantle, develops on top of the magma ocean. The flotation of buoyant minerals (such as the flotation of the anorthosite crust on the Moon), as well as a high crystal fraction at the end of the magma ocean solidification can lead to the formation of a buoyant or a quenched crust respectively, but these cases are not addressed in our model. Thus, we consider that the volatiles, initially dissolved within the magma ocean, are either degassed to the atmosphere, or distributed between the remaining melt and the crystallized mantle following:

$$k_{vol}X_{vol}M_{solid} + X_{vol}M_{liquid} + \frac{4\pi R_p^2}{g}P(X_{vol}) = X_0M_0,$$
(2.16)

Parameter description	Notation	Value
$H_2O$ partition coefficient - Perovskite	$k_{\mathrm{H_2O}_{perov}}$	$10^{-4}$
$CO_2$ partition coefficient - Perovskite	$k_{\rm CO_{2perov}}$	$5 \times 10^{-4}$
$H_2O$ partition coefficient - Lherzolite	$k_{\mathrm{H}_{2}\mathrm{O}_{lherz}}$	$1.1 \times 10^{-2}$
$\mathrm{CO}_2$ partition coefficient - Lherzolite	$k_{\rm CO_{2lherz}}$	$2.1 \times 10^{-3}$

TABLE 2.2 – Distribution coefficients for  $H_2O$  and  $CO_2$ .

where the initial volatile mass fraction  $X_0$  relative to the MO initial mass  $M_0$  is distributed between the solid and liquid part of the mantle, as a fraction  $X_{vol}$  of masses  $M_{solid}$  and  $M_{liquid}$  respectively, and the atmosphere of partial pressure  $P(X_{vol})$ (Figure 2.3; Elkins-Tanton, 2008; Lebrun et al., 2013). The amount of volatiles that can be stored within the solid part of the MO is determined by the partition coefficient  $k_{vol}$  for each volatile species (Elkins-Tanton, 2008):

$$k_{vol} = \frac{M_{s_{perov}} k_{vol_{perov}} + M_{s_{lherz}} k_{vol_{lherz}}}{M_{s_{perov}} + M_{s_{lherz}}},$$
(2.17)

where  $M_{s_{perov}}$  and  $M_{s_{lherz}}$  represent respectively the masses of the solid phases for perovskite and lherzolite,  $k_{vol_{perov}}$  and  $k_{vol_{lherz}}$  are the corresponding partition coefficients (Table 2.2; Elkins-Tanton, 2008). Assuming that the MO and the atmosphere are in equilibrium, their volatiles partial pressures  $P(X_{vol})$  are given by (Pan, Holloway, and Hervig, 1991; Carroll and Holloway, 1994; Jendrzejewski et al., 1997):

$$P(X_{\rm H_2O}) = \left(\frac{X_{\rm H_2O}}{6.8 \times 10^{-8}}\right)^{1/0.7},$$
(2.18)

$$P(X_{\rm CO_2}) = \frac{X_{\rm CO_2}}{4.4 \times 10^{-12}}.$$
(2.19)

The amount of degassed volatiles is then used as an input of the atmospheric model.

The way volatiles are degassed strongly depends on the solubility laws, that in turn, influence surface temperatures. Other recent solubility laws for a mixture of  $H_2O-CO_2$  might then be worth to implement in coupled models for further studies (Papale, 1999; Liu, Zhang, and Behrens, 2005; Witham et al., 2012; Burgisser, Alletti, and Scaillet, 2015).

#### 2.3.3 Numerical Method

The MO and the atmosphere exchange heat and volatiles at the surface of the planet. From the initial conditions, we use the solubility laws to calculate the partial pressures of each gas in the atmosphere (equations 2.18 and 2.19). Partial pressures and surface temperature are then used as inputs of the atmospheric model in order to calculate the heat flux at the top of the atmosphere  $F_{IR}$  and the albedo  $\alpha$ . This outgoing radiation must balance the heat flux radiated from the surface of the magma ocean. Both heat fluxes depend on the surface temperature. An iterative loop is thus used to reach the balance between the two fluxes. Once convergence occurs on the outgoing heat flux, the next potential temperature is calculated following equation 2.1, from which the corresponding partial pressures are calculated. The surface temperature corresponding to the heat flux balance then becomes the new initial surface temperature. The iterative loop used to balance the outgoing atmospheric flux and the convective flux from the MO is based on an adjustment of the surface temperature. While the absolute difference between the two fluxes is above a certain threshold  $\epsilon = 10^{-1}$ , a  $\Delta T_s$  variation is applied to the surface temperature and the heat fluxes are calculated again, by keeping the same potential temperature and partial pressures of gas. A flow chart of the numerical method is shown in Figure 2.9.

To limit the computation time, the time step is as a function of the cooling rate (equation 2.1). I also implemented a criterion relative to the liquid fraction to better constrain the conditions approaching water ocean formation time.

#### Model Improvements

To summarize, the following updates have been made compared to the previous work of Lebrun et al. (2013):

- A continuous viscosity law from liquid (equation 2.6) to solid rheology (equation 2.8) in agreement with experimental studies (Takei and Holtzman, 2009) has been implemented. Using an optimized, adaptive time step allows a better precision on the variable  $(T_{surf}, P(X_{vol}))$  at the rheological transition.
- More recent solidus-liquidus profiles for a chondritic mantle from Andrault et al. (2011) have been included.
- Three different versions of the atmospheric model have been implemented, with different processes considered, implying different input and output variables. The inclusion of the albedo computations, with and without clouds, thus accounts for a more sophisticated coupled evolution. It broadened the coupled model framework to cloudy planets. Also, considering the stellar parameters now allows to extend our calculations to other stellar systems, making possible further habitability investigations of recently detected and promising exoplanets.
- The coupled model has been made more user friendly with the creation of distinct modules for planetary constants, and for input parameters, extensively varied in this work (namely the volatile content, the solar distance, and the stellar parameters). This optimization allowed to run an important number of simulations simultaneously using the IAS clusters (ERM/Univ. Paris-Sud), and the outputs have been completely reorganized to facilitate data processing.



FIGURE 2.9 – Flowchart of the numerical method.

## Chapter 3

# The Relative Influence of $H_2O$ and $CO_2$ on the Primitive Surface Conditions and Evolution of Rocky Planets

The content of this chapter has been published in Journal of Geophysical Research: Planets on July, 2017: Salvador et al. (2017).

## Abstract

How the volatile content influences the primordial surface conditions of terrestrial planets and, thus, their future geodynamic evolution is an important question to answer. We simulate the secular convective cooling of a 1–D magma ocean (MO) in interaction with its outgassed atmosphere. The heat transfer in the atmosphere is computed either using the grey approximation or using a k-correlated method. We vary the initial CO<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>O contents (respectively from  $0.1 \times 10^{-2}$  to  $14 \times 10^{-2}$  wt% and from 0.03 to 1.4 times the Earth Ocean current mass) and the solar distance from 0.63 to 1.30 AU. A first rapid cooling stage, where efficient MO cooling and degassing take place, producing the atmosphere, is followed by a second quasi steady state where the heat flux balance is dominated by the solar flux. The end of the rapid cooling stage (ERCS) is reached when the mantle heat flux becomes negligible compared to the absorbed solar flux. The resulting surface conditions at ERCS, including water ocean formation, strongly depend both on the initial volatile content and solar distance D. For  $D > D_C$ , the "critical distance", the volatile content controls water condensation and a new scaling law is derived for the water condensation limit. Although today's Venus is located beyond  $D_C$  due to its high albedo, its high  $CO_2/H_2O$ ratio prevents any water ocean formation. Depending on the formation time of its cloud cover and resulting albedo, only 0.3 Earth ocean mass might be sufficient to form a water ocean on early Venus.

## 3.1 Introduction

Based on theory and observations, it is generally accepted that the mantle of terrestrial planets has been partially or totally molten at the end of the accretion process, behaving rheologically as a liquid during the first evolution stages of these bodies (Wood et al., 1970; Safronov, 1978; Hostetler and Drake, 1980). It is thus likely that terrestrial planets experienced, early in their history, a magma ocean stage where rapid cooling takes place (Matsui and Abe, 1986)(see also Elkins-Tanton, 2012; Solomatov, 2015; Massol et al., 2016, for reviews). The heating sources involved, and especially the heat conversion from impacts, are not particularly specific to the Earth, since the mechanisms of planetesimal and planet building are common to all planetary systems. However, after a rapid cooling stage, the heat flux released from the interior will depend on the convective patterns and tectonic style of the planet. Recent literature emphasizes how important it is to couple the different planetary envelopes from the core to the atmosphere, in order to understand the diversity of tectonic regimes (Foley, Bercovici, and Elkins-Tanton, 2014; Foley and Driscoll, 2016; Gillmann and Tackley, 2014; Gillmann, Golabek, and Tackley, 2016). Indeed, an important number of feedbacks, not always well understood, arise from the interaction between the different envelopes which can lead to surface conditions and evolutionary scenarios totally different (see Foley and Driscoll, 2016, for a review). However, most of these models postulate rather than calculate surface conditions at the end of the rapid cooling stage (hereafter "ERCS") to infer the subsequent geodynamic evolution.

Apart from setting the initial state for subsequent geodynamic regimes, another important motivation to develop predictive models of P-T surface conditions at ERCS is to forecast surface water condensation. The latter strongly depends on the starplanet distance. Historically, habitable zones (HZ) are defined as the range of orbits around a star within which a planetary surface can maintain liquid water (e.g., Hart, 1979; Kasting, Whitmire, and Reynolds, 1993). The inner edge of this zone is located where runaway greenhouse conditions prevent the existence of liquid water at the surface because of a too high surface temperature. This inner limit depends on the volatile content of the atmosphere as well as on the atmospheric heat transfer model used (for a review see Lammer et al., 2009). Depending on the models, the inner limit for our solar system ranges between 0.75 and 0.99 AU (Abe et al., 2011; Kopparapu et al., 2013). Following the detection of potentially habitable exoplanets located in the habitable zone of their star, recent literature has improved and complexified radiativeconvective atmospheric models to predict more precisely the HZ limits. For instance, Kopparapu et al. (2013) recent 1–D radiative-convective, cloud-free, climate model places the inner and outer edges at respectively 0.99 and 1.7 AU for our solar system. These limits may vary with planetary mass, type of star (Kopparapu, 2013; Kopparapu et al., 2014), or with planetary albedo, especially for CO<sub>2</sub>-rich atmospheres (Selsis et al., 2007).

In these models, planetary atmospheres are usually considered as  $H_2O$ -dominated with a maximum of 150 bar of  $CO_2$  (Abe et al., 2011). Nevertheless, considering the Earth's volatiles budget,  $CO_2$  appears to be the second most abundant component (Poldervaart, 1955). Inventories estimate that 60 bar of  $CO_2$  can be trapped in carbonate rocks (Ronov and Yaroshevsky, 1969; Holland, 1978). Other stellar systems with different scenarios of planet formation may also lead to more volatile-rich planets, such as the Gliese 581 system (Selsis et al., 2007). Hence, it seems that more  $CO_2$ -rich atmospheres might be plausible. Furthermore, measurements on oceanic basalts show that total terrestrial carbon might be very high, as high as thousands of ppm  $CO_2$ (Sarda and Graham, 1990; Pineau and Javoy, 1994; Cartigny et al., 2008; Helo et al., 2011). Of course, large uncertainties remain depending on the formation processes and origins of volatile elements (Raymond, Quinn, and Lunine, 2007; Morbidelli et al., 2012; Marty, 2012). For example, atmospheric water content of Earth-mass planets may range between 0.3 and 1000 water oceans, depending on accretion duration and planet position within the protoplanetary disk (Ikoma and Genda, 2006; Elkins-Tanton, 2011; Lammer et al., 2014). Note that  $H_2O$  dominates the outgoing thermal IR spectrum. Thus,  $CO_2$  and reduced species in the case of reducing atmospheres (Hashimoto, Abe, and Sugita, 2007; Schaefer and Fegley, 2010) would play the similar role of noncondensable components with some IR opacity (Marcq, 2012).

Upon accretion, Mercury, Venus, the Earth, Mars and the Moon were probably not so far from each other in terms of volatile content. Then, the bodies evolved differently to give the current diversity of terrestrial planets. To predict surface conditions at ERCS, we conducted a numerical study of the thermal evolution of a magma ocean in interaction with the atmosphere (based on Lebrun et al. (2013) and the recently updated (Marcq et al., 2017) radiative-convective code from Marcq (2012)). We investigate the relative influence of the MO initial volatile content for two species,  $H_2O$  and  $CO_2$ , combined with the solar distance, using two different atmospheric radiative-convective heat transfer models: grey or non-grey.

Section 3.2 presents the numerical model, focusing on the updates made since Lebrun et al. (2013). It allows to solve simultaneously (i) the convective thermal evolution of the magma ocean, (ii) the radiative-convective heat transfer within the outgassed atmosphere, and (iii) the interaction between these two reservoirs through the heat and mass balance at the planet surface. Section 3.3 discusses the main variables (P-T, atmospheric composition) evolution during MO cooling, and which conditions allow for water condensation on the surface at the end of the rapid cooling stage (ERCS). From this systematic study, scaling laws for the HZ inner edge location are derived as a function of volatile content and distance to the star and discussed in Section 3.4. Section 3.5 then investigates how the differences between the Earth and Venus might have arisen.

## 3.2 Methods

We summarize below the main ingredients of our model, which constitutes an update of Lebrun et al. (2013), and detail the changes compared to this previous model.

#### 3.2.1 Magma Ocean

We assume that the mantle has been strongly warmed up due to the energy brought by the impacts occurring during the accretion. Secular cooling (SC) of the MO is then controlled by the conservation of energy following (e.g., Abe, 1997; Solomatov, 2000; Lebrun et al., 2013):

$$SC = \int_{R_b}^{R_p} \rho C_p \frac{dT(r)}{dt} r^2 dr = R_p^2 F_{conv} + R_b^2 F_b + H_{int} + H_{sol}, \qquad (3.1)$$

where  $\rho$  is the averaged density of melt and solid,  $C_p$  the specific heat, T the radial temperature, and r the planetary radius variable. t is time.  $R_p$  and  $R_b$  stand respectively for the planetocentric altitude of the spherical planet surface and that of the base of the magma ocean, from which the heat fluxes  $F_{conv}$  and  $F_b$  are respectively emitted.  $H_{int}$  corresponds to the internal heat from radioactive elements and  $H_{sol}$  to the latent heat of solidification. We do not take into account  $F_b$  and  $H_{sol}$  which are negligible compared to  $F_{conv}$ .

#### Initial State

An initial potential temperature  $T_{pot}$  of 4000 K is consistent with both post-majorimpact conditions (e.g., Canup, 2008; Tonks and Melosh, 1993) and theoretical thermodynamical calculations (e.g., Stixrude et al., 2009). This supports the idea of a totally molten mantle during the accretion phase. We shall therefore consider an Earth-like planet with a mantle which is initially completely molten.

The location of the first solids within the mantle then depends on their respective density compared to the liquids, and the curvature of their melting curves compared to the mantle adiabat's. Recent petrological experiments show that they vary significantly depending on the chemical composition of the starting material: chondritic (Andrault et al., 2011), fertile peridotite (Fiquet et al., 2010), mid-ocean ridge basalt (Andrault et al., 2014), olivine system (Nomura et al., 2011), and pyrolitic material (Tateno, Hirose, and Ohishi, 2014). The two last studies report strong Fe enrichment in the melt, which would therefore be denser than the solids. This would support the idea of a basal magma ocean (Labrosse, Hernlund, and Coltice, 2007). On the other hand, thermodynamical calculations (Boukaré, Ricard, and Figuet, 2015) obtain slightly different melting curves. This model of the solid-liquid equilibrium in the  $MgO-FeO-SiO_2$  system (Al and Ca not being present in the melt) confirms that the melt is lighter than the solid of same composition for all mantle conditions. But it also shows that for the P-T conditions of the lowermost mantle, crystallization may lead to the formation of solids lighter than the surrounding melt (as they are more Mg-rich and less Fe-rich). This would favor again the formation of a basal magma ocean. However, Andrault et al. (2012) point out that the presence or absence of Al can also influence the density inversion.

Thus, as the formation of an individual magma ocean at the base of the mantle is still debated, we consider the simpler case of a magma ocean of chondritic composition (such as Andrault et al., 2011) crystallizing from bottom-up (Figures 3.1 and 3.2). We neither consider the details of petrological nor geochemical processes, even if they might be important to generate stratification in a planet (Elkins-Tanton, 2008; Maurice et al., 2017). Unless these processes create an early light stagnant lid on the surface during the magma ocean stage, they should not affect significantly the surface heat flux (Solomatov, 2007; Jaupart and Mareschal, 2011), which is one of the main parameter controlling the surface conditions we are interested in.

#### Magma Ocean Viscosity

Initially, the MO is in a totally molten state. During solidification, the melt fraction  $\phi$  ranges from 1 (totally molten) to 0 (totally solid) and is defined following Abe (1997):

$$\phi = \frac{T - T_{sol}}{T_{liq} - T_{sol}} \tag{3.2}$$

where  $T_{sol}$  and  $T_{liq}$  are respectively the solidus and liquidus temperatures (see Figure 3.2). As solidification proceeds, the liquid fraction  $\phi$  decreases and the connectivity of the crystalline network becomes important, leading to an abrupt viscosity increase. The viscosity of the MO fluid therefore strongly depends on its temperature and crystal content (e.g., Solomatov, 2007).



FIGURE 3.1 – (a) Temperature profile, solidus and liquidus (black, red, and green curves respectively),  $\Delta T_{sa}$  stands for superadiabatic temperature difference. (b) Schematic cross section of a planet in the magma ocean stage surrounded by its atmosphere.  $F_{conv}$  stands for the convective heat flux out of the magma ocean (red dotted arrows),  $F_{\odot}$  is the absorbed incoming stellar flux (black dashed arrows). These two incoming heat fluxes balance the outgoing infrared flux at the top of the atmosphere,  $F_{IR}$  (orange plain arrows). See text for the definition and expression of the different heat fluxes (Sections 3.2.1 and 3.2.2).

56



FIGURE 3.2 – Solidus (red line) and liquidus (green line) profiles of a chondritic mantle, redrawn after Andrault et al. (2011). Adiabatic temperature profiles (black lines) shown at different cooling stages. The adiabats first intersect the solidus deeper, which causes solidification to occur from the base of the mantle towards the surface. Parameters used are given in Table 3.2.

When  $\phi > \phi_c$ , where  $\phi_c$  is the critical melt fraction (typically  $\approx 0.4$ ), the viscosity of the magma is the viscosity of a magmatic liquid containing crystals (Roscoe, 1952):

$$\eta = \frac{\eta_l}{\left(1 - \frac{(1-\phi)}{(1-\phi_c)}\right)^{2.5}},\tag{3.3}$$

with

$$\eta_l = A_a \exp\left(\frac{B_a}{T_{pot} - 1000}\right) \tag{3.4}$$

the viscosity of the magmatic liquid derived from the Vogel-Fulcher-Tammann equation, where  $A_a = 0.00024$  Pa.s and  $B_a = 4600$  K (Karki and Stixrude, 2010).

When  $\phi < \phi_c$ , the viscosity of the magma is controlled by the viscosity of the solid particles (Kelemen et al., 1997; Mei et al., 2002; Solomatov, 2007):

$$\eta = \eta_s \exp(-\alpha_\eta \phi) \tag{3.5}$$

with, after Karato and Wu (1993),

$$\eta_s = \frac{\mu}{2A} \left(\frac{h}{b}\right)^{2.5} \exp\left(\frac{E + PV}{RT_{pot}}\right),\tag{3.6}$$

where P, V are pressure and volume, R is the perfect gas constant, and other parameters are defined in Table 3.1.

Recent experimental data (Takei and Holtzman, 2009) suggest that for very small melt volume fractions ( $\phi < 0.01$ ), viscosity is lower than expected due to melt contiguity and that the classical rheology transition between equations 3.3 and 3.5 is too abrupt to be realistic. In order to model this transition, we interpolate with a third-order polynomial between the liquid state (equation 3.3), and the solid state (equation 3.5) (see Figure 3.3 and the associated discussion in Appendix A).

This interpolation gives a continuous viscosity law for the explored temperature range and smooths the rheology transition between the vigorously convective liquid-state and the solid-like mantle (Figure 3.20). It also allows the refinement of the time steps at that critical stage and consequently, better constraints on pressures and temperatures. Compared to Lebrun et al. (2013), this new treatment of the rheology produces a smoother transition from a liquid MO to a solid-state mantle but does not change drastically the dynamics (Figure 3.20).

#### Magma Ocean's Thermal Regime

In equation 3.1, the surface heat flux extracted from the mantle  $F_{conv}$  depends on the intensity of convection in the MO and writes

$$F_{conv} = C_0 k \frac{T_{pot} - T_{surf}}{H} Ra(H, T_{pot} - T_{surf})^n, \qquad (3.7)$$

where the Rayleigh number associated with temperature difference  $\Delta T$  over a mantle thickness H is

$$Ra(H,\Delta T) = \frac{\alpha_T g \Delta T H^3}{\kappa \nu}, \qquad (3.8)$$

where  $\kappa$  is the thermal diffusivity,  $k = \kappa \rho C_p$  is the thermal conductivity,  $\alpha_T$  is the thermal expansion coefficient,  $\nu = \eta / \rho$  is the kinematic viscosity and  $\eta$  is the dynamic viscosity.  $C_0$  is a constant which depends on the pattern of convection (Table 3.1) (e.g., Siggia, 1994). The value of the exponent n is still debated for the very high Ra

Parameter description	Notation	Value	Unit
Planetary con	estants		
Planetary radius	$R_p$	6378	km
Radius of the base of the MO	$\dot{R_b}$	3493	$\rm km$
Initial depth of the MO	$(R_p - R_b)$	2885	$\rm km$
Mean density of the planet	$\rho_p$	5515	${ m kg.m^{-3}}$
Melt density	$ ho_m$	4000	${ m kg.m^{-3}}$
Solid density	$ ho_s$	4200	${ m kg.m^{-3}}$
Averaged density of melt and solid	ho	4100	${ m kg.m^{-3}}$
Mass of the planet	$M_p$	$5.994\times10^{24}$	$_{ m kg}$
Gravitational acceleration	g	9.81	$\mathrm{m.s}^{-2}$
Averaged solar constant	$\mathcal{F}_0^{\prime}$	243	$W.m^{-2}$
Thermal diffusivity	$\kappa$	$10^{-6}$	$\mathrm{m}^2.\mathrm{s}^{-1}$
Thermal expansion coefficient	$lpha_T$	$3 \times 10^{-5}$	none
Specific heat	$C_p$	1000	$J.kg^{-1}.K^{-1}$
Pattern of convection, coefficient	$C_0$	0.089	none
Regime of convection, coefficient	$n_{liq}$	1/3	none
	$n_{sol}$	1/3	none
Stefan-Boltzmann constant	$\sigma_{ m SB}$	$5.67  imes 10^{-8}$	$W.m^{-2}.K^{-4}$
Bolometric albedo	$\alpha$	0.2	none
$H_2O$ mass absorption coefficient (grey)	$k_{H_2O}$	$10^{-2}$	$\mathrm{m}^2.\mathrm{kg}^{-1}$
$CO_2$ mass absorption coefficient (grey)	$k_{CO_2}$	$10^{-4}$	$\mathrm{m}^2.\mathrm{kg}^{-1}$
Viscosity-related p	parameters		
Coefficient in melt fraction-dependent viscosity	$lpha_\eta$	26	none
Shear modulus	$\mu$	80	GPa
Pre-exponential factor	A	$5.3 imes10^{15}$	none
Grain size	h	$10^{-3}$	m
Burger vector length	b	0.5	nm
Activation energy	E	240	$kJ.mol^{-1}$
Classic critical liquid fraction	$\phi_c$	0.4	none
$Distribution \ coefficients$	for the volat	tiles	
$H_2O$ partition coefficient - Perovskite	$k_{H_2O_{perov}}$	$10^{-4}$	none
$CO_2$ partition coefficient - Perovskite	$k_{CO_{2perov}}$	$5  imes 10^{-4}$	none
$H_2O$ partition coefficient - Lherzolite	$k_{H_2O_{lherz}}$	$1.1  imes 10^{-2}$	none
CO <sub>2</sub> partition coefficient - Lherzolite	$k_{CO_{2lherz}}$	$2.1 \times 10^{-3}$	none

TABLE 3.1 - Constant parameters used in this study.



FIGURE 3.3 – Viscosity laws as a function of temperature for different rheologies. The black dashed line represents the viscosity law of our model. Over the temperature range, we used different laws for totally liquid magma:  $\phi=1$  and  $T \ge T_{liq}$  (equation 3.4 after Karki and Stixrude (2010), red dashed line), partially liquid:  $\phi_c < \phi < 1$  and  $T_{\phi_c} < T < T_{liq}$  (equation 3.3 after Roscoe (1952), red line), and for solid materials:  $\phi=0$  and  $T \le T_{sol}$  (equation 3.5 after Kelemen et al. (1997), green line). We used an analytic expression for the mush stage, between  $T_{\phi_c}$  and  $T_{sol}$  ( $0 < \phi < \phi_c$ ):  $\eta_{analytic} = \eta_s \times \exp\left(a_{mush} \times \phi_{int}^3 + b_{mush} \times \phi_{int}^2\right)$ .

of a MO but is usually taken as n = 1/3, which implies that the surface heat transfer  $(F_{conv})$  is a local process and is independent of the MO depth (e.g., Solomatov, 2015).

As solidification proceeds, zones of different rheology develop, and the convective time scales within each zone are expected to be different given their respective viscosity. This has no influence on  $F_{conv}$  as discussed above, but it will affect the secular cooling defined in equation 3.1, and therefore the MO temporal evolution. If we assume that as soon as the local geotherm reaches the solidus, it stays locked to it, then the mantle secular cooling SC in equation 3.1 is reduced to the integration of the temperature profile over the molten upper layer only (i.e., between the solidification front and the surface). This implies that the growing solid layer underneath does not become unstable and does not overturn before the whole molten layer has solidified. It gives a minimum estimate of the MO solidification time. However, for Earth-sized planets, scaling analysis and numerical simulations suggest that convection has the time to develop in the solid layer before the whole MO solidification (see discussion in Appendix B). This tends to homogenize the temperature in the whole mantle. Moreover, rotation and differentiation could also enhance mantle thermal homogenization (e.g., Moeller and Hansen, 2013; Maas and Hansen, 2015; Maurice et al., 2017). That is why we have chosen to approximate these 3–D complex processes by reducing the secular cooling in equation 3.1 to the integration of the adiabatic temperature profile T(r) over the whole mantle. This constitutes one of the limitations of our 1–D model.

#### 3.2.2 Mantle - Atmosphere Coupling

The internal model is coupled with a 1–D radiative-convective atmospheric thermal evolution model through both heat flux balance and volatile balance. It has been developed by Marcq (2012), and we use here its most recent update (Marcq et al., 2017). It is generally assumed that during the early history of terrestrial planets, the primordial atmosphere was lost (e.g., Cameron, 1983; Ahrens, 1993). Then, degassing of planetary interiors results in the formation of secondary atmospheres (e.g., Rubey, 1951; Holland, 1962) that are assumed to be compositionally dominated by  $H_2O$  and  $CO_2$ . Most likely, this outgassing mainly occurs during MO solidification (e.g., Elkins-Tanton, 2008; Lebrun et al., 2013; Hamano, Abe, and Genda, 2013) (see Massol et al., 2016, for a review). Here we consider that the atmosphere is formed through MO degassing, following a single giant impact, and that at early times, no atmosphere is present.

Most of our calculations are based on the grey version of the atmospheric model, which numerically runs much faster and allows an easier understanding of the system. Nevertheless, Section 3.4.1 also presents calculations carried out with a non-grey atmosphere to discuss the effect of the radiative transfer treatment. The grey model is radiative-convective but assumes constant mass absorption coefficients for H<sub>2</sub>O and CO<sub>2</sub> over the spectral range from 0 to  $10^4$  cm<sup>-1</sup>. It provides cruder estimates of the resulting heat flux going out of the atmosphere. The non-grey approximation uses wavelength-dependent mass absorption coefficients for both species, from highresolution spectra computed by KSPECTRUM (Eymet, Coustet, and Piaud, 2016) (see Section 3.4.1 and Marcq et al. (2017) for more details).

Figure 3.1 summarizes the heat sources for the atmosphere:

1. At the top of the atmosphere, the absorbed solar flux  $F_{\odot}$  (or  $F_{abs}$ ), defined as

$$F_{abs} = F_{\odot} = \sigma_{\rm SB} T_{eq}^4 = (1 - \alpha) \times \frac{\mathcal{F}_0}{D^2},$$
 (3.9)

where  $\sigma_{\rm SB}$  is the Stefan-Boltzmann constant,  $T_{eq}$  the equilibrium temperature (depending only on the absorbed solar flux),  $\alpha$  the bolometric albedo ( $\alpha = 0.2$  in our calculations), D the planet-star distance (in AU),  $\mathcal{F}'_0$  the averaged solar constant over the surface of a planet for a young sun-like star ( $\mathcal{F}'_0 = \mathcal{F}_0/4$ ) and  $\mathcal{F}_0$  the solar constant. Starting from an initial flux  $\mathcal{F}_{0,t=0}$  around 70% of the present-day value (Ezer and Cameron, 1965), the solar constant increases with time to reach the present-day value as

$$\mathcal{F}_{0,t} = \mathcal{F}_{0,t=0} \left[ 1 + 0.4 \left( 1 - \frac{t}{t_0} \right) \right]^{-1}, \qquad (3.10)$$

where t is the time,  $t_0$  the age of the solar system (see equation 1 in Gough (1981), and Table 2 in Bahcall, Pinsonneault, and Basu (2001)) and with an early solar constant equal to 972 W.m<sup>-2</sup>, corresponding to an averaged solar constant over the surface of the planet  $\mathcal{F}'_0 = 243 \text{ W.m}^{-2}$ . At the surface, the resulting radiative heat flux depends on the chemical composition of the atmosphere and especially on the greenhouse gases concentrations.

2. At the planetary surface, the internal heat flux  $F_{conv}$ , resulting from the initial heat gained during accretion. This flux strongly decreases during MO cooling and finally becomes even lower than the absorbed solar flux  $F_{\odot}$ .

As described in Lebrun et al. (2013), the outgoing radiative flux  $F_{IR}$  escaping into space from the top of the atmosphere, must balance the incoming fluxes  $F_{\odot}$  and  $F_{conv}$ (see Figure 3.1 for schematic view).

Figure 3.4 shows two typical atmospheric temperature profiles. Based on atmospheric pressures and composition, the absorption, emission and diffusion (i.e., opacity) coefficients of each atmospheric infinitesimal layer in the radiative part of the atmosphere (mesosphere) are calculated. This atmospheric layer is isothermal (Figure 3.4). When the optical depth of the atmosphere  $\langle \tau \rangle_{\lambda} = 2/3$ , i.e., the altitude where effective emission to space and attenuation of sunlight occurs, is reached, convective motions control heat transfer of the underlying layer(s). If the water vapor saturation is reached, condensation occurs, and the moist troposphere has a different convective lapse rate  $(\partial T/\partial P)_S$  than the dry troposphere due to latent heat release from condensation (Figure 3.4a). If the moist troposphere extends to the surface (saturation pressure reached at the surface), any water in excess of 100% saturation is assumed to condense and form a water ocean (Marcq et al., 2017). Note that moist greenhouse atmospheres have no unsaturated troposphere compared to fully runaway greenhouse atmospheres, where water oceans have been evaporated (Kasting, 1988).

A global emissivity of the atmosphere  $\varepsilon$  is calculated by the atmospheric model as a function of  $T_{surf}$ ,  $P_{H_2O}$  and  $P_{CO_2}$ . The resulting  $F_{IR}$  flux (also known as Outgoing Long-wave Radiation, "OLR") quantifies the cooling of the planet. It depends on the atmospheric composition, evolving as magma ocean degasses. After several iterations, we obtain a surface temperature resulting from the flux equilibrium  $F_{conv} + F_{\odot} = F_{IR}$ for the atmospheric composition.

Volatile exchanges between the two reservoirs are modeled using the same parametrization as Lebrun et al. (2013), in which we assume that the time for a liquid parcel within the convective MO to reach the surface is shorter than the global cooling time. It implies that the dissolved volatiles in the MO are in equilibrium with the atmospheric pressure at each time step (see Appendix C for details and used solubility laws).

Figure		$\begin{array}{c}X_{0_{H_2O}}\\[4pt] [\mathrm{M_{EO}}\end{array}]$	$P_{H_2O}$ [bar]		$P_{CO_2}$ [bar]	Distance from the Sun [AU]	Absorbed solar flux $F_{\odot}$ [W.m <sup>-2</sup> ]	$\operatorname{Atmosphere}$
Figure 3.2	1.4	0.371	99.7	сл	357.3	1	194	grey
Figure 3.4	2.3	0.621	167	сл	357.3	$0.77 \ \& \ 1.30$	$328 \ \& \ 115$	$\operatorname{grey}$
Figures 3.5	2.3	0.621	167	J	357.3	$0.77 \ \& \ 1.30$	$328 \ \& \ 115$	grey
Figure 3.6	2.3	0.621	167	1 & 10	71.5 & 715	$0.77 \ \& \ 1.00$	$328 \ \& \ 194$	grey
Figure 3.7	2.3	0.621	167	0.1 - 14	7 - 1000	0.63 - 1.30	490 - 115	grey
Figure 3.8	2.3	0.621	167	0.1 - 14	7 - 1000	0.63 - 1.30	490 - 115	grey
Figure 3.9	$0.7 \ \& \ 2.3$	0.186 & 0.621	50 & 167	IJ	357.3	$0.77 \ \& \ 1.00$	$328 \ \& \ 194$	grey
Figure 3.10	0.12 - 4.67	$0.031 {-} 1.243$	8.35 - 334	0.1 - 14	7 - 1000	0.63 - 1.30	490 - 115	grey
Figure 3.11	0.12 - 4.67	$0.031 {-} 1.243$	8.35 - 334	0.1 - 14	7 - 1000	0.63 - 1.30	490 - 115	grey
Figure 3.12	0.12 - 4.67	$0.031 {-} 1.243$	8.35 - 334	0.1 - 14	7 - 1000	0.63 - 1.30	490 - 115	grey & non-grey
Figure 3.13	0.12 & 4.67	0.031 & 1.243	8.35 & 334	0.1 - 14	7 - 1000	0.63 - 1.30	490 - 115	grey
Figure 3.14	0.12 – 4.67	$0.031 {-} 1.243$	8.35 - 334	0.1 - 14	7 - 1000	0.63 - 1.30	490 - 115	grey
Figure 3.15	2.3	0.621	167	J	357.3	1	194	grey & non-grey
Figure $3.16^*$	2.3	0.621	167	0.1	7	1	194	grey
Figure 3.17	0.12 – 4.67	$0.031 {-} 1.243$	8.35 - 334	0.1 - 14	7 - 1000	1	194	grey
Figure 3.18	3.76	1	269	1.25	00	0.72	$\mathcal{F}_{t=0}$ - $\mathcal{F}_{t=4.56}$ & $lpha=0.2-0.7$	non-grey
Figure 3.19	ppm & $3.76$	ppm & $1$	ppm & $269$	1.25	06	0.72	$\mathcal{F}_{t=0}$ - $\mathcal{F}_{t=4.56}$ & $lpha=0.2-0.7$	non-grey
*All simulati	ons are cloud-fi	ree excepted in l	Figure 3.16.					

TABLE 3.2 – Physical variables used in this chapter.

Chapter 3. The Relative Influence of H<sub>2</sub>O and CO<sub>2</sub> on the Primitive Surface Conditions and Evolution of Rocky Planets



FIGURE 3.4 – Atmospheric temperature profiles for planets located at (a) 0.77 (red) and (b) 1.30 AU (blue) at the end of the rapid cooling stage. At 1.30 AU, the moist troposphere reached the surface and formation of a 480 m deep water ocean occurs. Parameters used for the calculations are given in Table 3.2.

We vary the initial volatiles concentration as much as possible within the limit of our model, in particular to keep a realistic atmospheric height compared to the planetary radius, limited by our plane-parallel approximation. For H<sub>2</sub>O, we test initial amounts (hereafter [H<sub>2</sub>O]<sub>t0</sub>) varying from 0.03 to 1.24 times the current ocean mass on Earth (0.03–1.24 M<sub>EO</sub>), corresponding to partial pressures of 8 bar and 333 bar, equivalent to  $1.17 \times 10^{-3}$  and  $4.67 \times 10^{-2}$  weight percent (wt%) of water, respectively. Regarding the initial CO<sub>2</sub> content, we vary the concentration from  $10^{-3}$  to  $14 \times 10^{-2}$ wt% (written [CO<sub>2</sub>]<sub>t0</sub>), corresponding to partial pressures varying between approximately 5 and 1000 bar (note that Venus has a surface pressure of 92 bar and more than 95% of CO<sub>2</sub> in the atmosphere).

## 3.3 Results

All calculations thereafter simulate an Earth-like planet with the same mass, density, radius, gravity, solidus, and liquidus depth profiles and starting with an entire molten mantle. We consider that these Earth-like planets are orbiting a young Sun. Our calculations follow the grey approximation in most cases.

#### 3.3.1 Thermal Evolution for Different Solar Distances

Figure 3.5 shows a standard thermal evolution for a given volatile content and two different solar distances. In the totally liquid magma ocean ( $\phi = 1, T_{pot} \ge T_{liq}$ ), heat is evacuated efficiently through vigorous convective motions (see Figures 3.5a–3.5d) which allow efficient volatile degassing (left part of Figures 3.5e and 3.5f). As shown in the left part of Figures 3.5a and 3.5b, during this early stage, surface and potential temperatures decrease together with time. As cooling proceeds, solidification occurs from the base of the mantle to the surface (Section 3.2.1). With crystallization, the liquid fraction decreases, which increases viscosity and slows down convection efficiency inducing a decrease of the convective heat flux coming from the mantle  $F_{conv}$  (Figures 3.5c and 3.5d). The infrared flux going out of the atmosphere,  $F_{IR}$  (or OLR), characterizing the global cooling of the planet (including the atmosphere),

is controlled by  $F_{conv}$  at early times. When  $F_{conv}$  becomes negligible compared to the incoming absorbed solar flux  $F_{\odot}$ ,  $F_{IR}$  is controlled by the solar flux (right part of Figures 3.5c and 3.5d). If no significant temporal variation of  $F_{\odot}$  (and so of  $F_{IR}$ ) occurs on the cooling time scale, the planet then evolves in a quasi steady state, all variables remaining more or less constant.

We consider that when the convective heat flux from the mantle becomes an order of magnitude lower than the absorbed solar flux  $(F_{conv} \leq 0.1 \times F_{\odot})$ , the end of the rapid cooling stage ("ERCS") is reached. This particular time is indicated by a vertical dotted line in our figures. The system has then evacuated most of its internal heat, and both the outgoing longwave radiation  $F_{IR}$  and surface temperature  $T_{surf}$  are controlled almost solely by the absorbed solar flux  $F_{\odot}$ . So a MO will always undergo two different dynamic regimes:

- 1. Before ERCS, a stage comparable to the "soft magma ocean" of Abe (Abe, 1993a) is characterized by efficient MO convection, formation of the atmosphere, strong decrease of surface and potential temperatures, solidification from the bottom to the top of the magma ocean, and decrease of the heat fluxes. Surface conditions are controlled by the cooling of the mantle, and the solar distance is not the main parameter controlling thermal evolution. This first regime ends at ERCS and sets the surface conditions of the planet for its future geodynamic evolution.
- 2. After ERCS, the surface temperature  $T_{surf}$  and the outgoing thermal flux  $F_{IR}$  are mainly controlled by the incident absorbed solar flux  $F_{\odot}$  ( $F_{IR} \approx F_{\odot}$ ) and by the atmospheric volatile content. As the main variables are related to  $F_{\odot}$  which evolves slowly with time, this second regime can be consider as a quasi steady state regime (even if the surface is still partially molten in some cases) where the atmospheric composition do not evolve significantly (right part of our figures). The OLR is approximately equal to the absorbed solar flux (global radiative balance).

Thus, depending on  $F_{\odot}$  (or solar distance), different surface conditions may exist at ERCS, as illustrated in Figures 3.4 and 3.5:

- 1. At large planet-star distances, the surface of the planet is solid,  $T_{surf} < T_{sol}$  (blue curves in Figures 3.4 and 3.5, corresponding to a planet located at 1.30 AU). Potential temperature can still be higher than the solidus with remaining melt. Depending on P-T surface conditions (or atmospheric volatile content), the moist troposphere can extend to the surface (Figure 3.4b) and a water ocean can form (type I planets from Hamano, Abe, and Genda, 2013; Lebrun et al., 2013)).
- 2. If the planet is close enough to the star, the surface of the planet is partially molten with  $T_{sol} < T_{surf} < T_{liq}$  (red curves in Figures 3.4 and 3.5). The planet remains for longer in the magma ocean stage, and convection continues until  $T_{pot}$  reaches  $T_{surf}$ . The quasi steady state following ERCS implies a molten surface over most of the lifetime of the planet as long as no volatile escape occurs in the upper atmosphere (type II planets from Hamano, Abe, and Genda, 2013; Lebrun et al., 2013)).
- 3. Another hypothetical case could be considered if the planet is very close to the star: the surface of the planet might be totally liquid  $(T_{surf} > T_{liq})$ . The planet would stay molten over its entire lifetime even if the convection ends, when all the internal flux will have been evacuated, at  $T_{pot} = T_{surf}$  and Ra < 650.



FIGURE 3.5 – Thermal evolution of the magma ocean for two different distances from the Sun: 0.77 AU (a, c, and e, red) and 1.30 AU (b, d, and f, blue), grey atmosphere, without clouds,  $[H_2O]_{t_0}=0.621$  $M_{EO}$ ,  $[CO_2]_{t_0}=5\times10^{-2}$  wt%. ERCS is indicated by the vertical dotted lines.  $P_{H_2O}atm$  corresponds to the uncondensed H<sub>2</sub>O partial pressure remaining in the atmosphere if condensation occurs at surface and stores water in the oceans (here a 480 m deep water ocean is formed at 1.30 AU). Corresponding thermal atmospheric profiles at ERCS are shown in Figure 3.4. Parameters used for the calculations are given in Table 3.2.

ERCS definition allows for comparison between different surface conditions of planets at the same evolution stage. Introducing this newly defined particular time is more appropriate than using the end of the magma ocean phase which is not always reached, particularly for planets close to their star.

#### 3.3.2 Influence of the Initial CO<sub>2</sub> Content

We conducted calculations for a large range of H<sub>2</sub>O and CO<sub>2</sub> contents. We first investigate the effect of the CO<sub>2</sub> content for a given water content fixed at 0.6 Earth ocean. At early times, whatever the solar distance, the surface temperature  $T_{surf}$  and the outgoing infrared flux  $F_{IR}$  are respectively higher and lower for high CO<sub>2</sub> contents (red curves in Figure 3.6) than for low CO<sub>2</sub> concentrations (blue curves in Figure 3.6). Due to a lower solubility of CO<sub>2</sub> in the melt than H<sub>2</sub>O (Appendix C), most of CO<sub>2</sub> is degassed earlier than H<sub>2</sub>O (Figures 3.6e and 3.6f). Thus, at early times, CO<sub>2</sub> is the major component of the atmosphere and controls its opacity. Acting alone as a greenhouse gas, carbon dioxide tends to increase the surface temperature. This blanketing effect explains why the surface temperature is higher at early times for  $[CO_2]_{t_0} = 10^{-1}$  wt% (Figures 3.6a and 3.6b). As degassing proceeds,  $P_{H_2O}$  increases while  $P_{CO_2}$  remains almost constant in the atmosphere (Figures 3.6e and 3.6f), thus increasing the humidity ratio H<sub>2</sub>O/CO<sub>2</sub>, as well as the mixing ratio ( $P_{H_2O}/(P_{CO_2} + P_{N_2})$ ), and atmosphere's opacity.

At 0.77 AU, because water does not condense, the humidity ratio at ERCS is higher, in turn inducing a higher opacity for a lower initial  $CO_2$  content (Figures 3.6a and 3.6c). The mesosphere is thinner in that case, its bottom altitude is higher and following the tropospheres' adiabatic gradients, it results in a higher surface temperatures at ERCS (Figure 3.6g).

At 1 AU, the moist troposphere extends to the surface: saturation vapor pressure is reached at the surface for  $[CO_2]_{t_0} = 10^{-2}$  wt% (Figure 3.6h). The formation of an ocean then causes an important decrease of atmospheric  $P_{H_2O}atm$ , while all H<sub>2</sub>O remains in vapor phase for the higher  $[CO_2]_{t_0}$ , when no ocean is formed (Figure 3.6f). Thus, at 1 AU and for the same initial water content, because of water ocean formation, the humidity ratio is lower for low CO<sub>2</sub> than for high CO<sub>2</sub> contents. It decreases the atmosphere's opacity and results in a lower mesosphere's bottom altitude (Figure 3.6h) and a colder surface temperature in that case. Also, note that ERCS is reached less abruptly for higher initial CO<sub>2</sub> contents. Indeed, when condensation occurs, increasing the CO<sub>2</sub> content counteracts the effect of rapid H<sub>2</sub>O vapor loss through condensation process.

Figure 3.7 summarizes surface conditions at ERCS for various initial CO<sub>2</sub> contents and for solar distances ranging from 0.63 to 1.30 AU. Above a certain  $[CO_2]_{t_0}$  threshold  $(5 \times 10^{-2} \text{ wt\%}$  corresponding to  $P_{CO_2} = 357 \text{ bar}$ ), water condensation strongly depends the on CO<sub>2</sub> content, whereas below this value, it only depends on the solar distance. A third type of planetary surface might exist at ERCS: far from the Sun, and for high CO<sub>2</sub> contents, this type III planet has a solid surface and no water ocean (orange area of Figure 3.7), thus differing from the type I planets of Hamano, Abe, and Genda (2013).

Concerning surface temperatures, two opposite behaviors arise from either side of the critical distance  $D_C$ : far from the star  $(D > D_C)$ , increasing CO<sub>2</sub> induces higher surface temperatures; close to the star  $(D < D_C)$ , increasing the CO<sub>2</sub> content lowers surface temperatures at ERCS (Figure 3.7). Indeed, the opacity  $\tau$  of the radiative layers in the upper atmosphere, and thus the blanketing effect, depends on the humidity ratio H<sub>2</sub>O/CO<sub>2</sub>. As H<sub>2</sub>O absorption is higher, an increase in CO<sub>2</sub> "dilutes" the water vapor, thus decreasing the atmosphere's opacity. Atmosphere is then more transparent to thermal radiation for higher CO<sub>2</sub> contents, which induces lower surface temperatures as heat is more efficiently evacuated to space. Conversely, beyond  $D_C$  where water can condense, increasing CO<sub>2</sub> prevents water condensation



FIGURE 3.6 – Thermal evolution of the magma ocean for two different initial CO<sub>2</sub> contents:  $10^{-2}$  (blue curves) and  $10^{-1}$  wt% (red curves), and two different solar distances: 0.77 AU (a, c, e, and g, crosses in Figures 3.7 and 3.8) and 1 AU (b, d, f, and h, squares in Figures 3.7 and 3.8), grey radiative-convective atmosphere, without clouds,  $[H_2O]_{t_0}=0.621$  M<sub>EO</sub>. At ERCS, for D=0.77 AU,  $P_{H_2O}/P_{CO_2}=1.17$  for  $[CO_2]_{t_0}=10^{-2}$  wt%, and  $P_{H_2O}/P_{CO_2}=0.13$  for  $[CO_2]_{t_0}=10^{-1}$  wt%. For D=1 AU,  $P_{H_2O}/P_{CO_2}=0.19$  for  $[CO_2]_{t_0}=10^{-2}$  wt%, and  $P_{H_2O}/P_{CO_2}=0.145$  for  $[CO_2]_{t_0}=10^{-1}$  wt%. At 1 AU, for  $[H_2O]_{t_0}=0.621$  M<sub>EO</sub> and  $[CO_2]_{t_0}=10^{-2}$  wt%, a 910 m deep water ocean is formed at ERCS. Parameters used for the calculations are given in Table 3.2.



FIGURE 3.7 – Isotherms (black lines) and solidus temperature (red line) as a function of CO<sub>2</sub> content and solar distance at ERCS. Below water condensation limit (blue line), a water ocean can condense at the surface of the planet. Crosses and squares correspond to calculations shown on Figure 3.6. The different types of planet are represented by colored areas. The dashed lines stand for the limits obtained by considering a secular cooling only occurring over the liquid-state mantle (i.e., between the solidification front  $R_S$  and the surface, see Section 3.2.1 and Appendix B). Parameters used for the calculations are given in Table 3.2.

and favors an increase of atmospheric water vapor, thus increasing the blanketing effect and warming the surface.

In fact, the surface temperature depends on the atmospheric vertical structure. Figure 3.8 shows the altitude of the tropopause (i.e., the base of the mesosphere), which is related to the thermal transparency of the atmosphere, and indicates from where thermal radiation is emitted. If the blanketing effect of the atmosphere is important, the altitude where the optical depth,  $\langle \tau \rangle_{\lambda}$ , is equal to 2/3 is high, as well as the surface temperature. Conversely, when the atmosphere is more transparent, i.e., for a lower humidity ratio, this altitude decreases. From this altitude downwards, the lapse rates within the underlying layers set surface temperature (e.g., Figure 3.6g). If a water ocean is formed, i.e., the moist troposphere reaches the surface, atmospheric opacity is lower, as well as surface temperatures. It thus explains well the strong correlation between surface temperatures and altitude of the tropopause.

68



FIGURE 3.8 – Water condensation limit (blue line), surface temperature isotherms (black lines), and solidus temperature (red line), compared to the altitude of the tropopause (green isolines), as a function of the CO<sub>2</sub> content and solar distance at ERCS. The green lines also correspond to the altitude where the optical depth  $\langle \tau \rangle_{\lambda} = 2/3$ : mesosphere's bottom altitude, which can be understood as a direct measure of the atmospheric opacity. Grey atmosphere, cloud-free. Parameters used for the calculations are given in Table 3.2.

#### 3.3.3 Influence of the Initial H<sub>2</sub>O Content

We conduct the same sensibility study for various initial water contents. Figure 3.9 compares the time evolution of the main variables for two representative solar distances and two representative water contents with a fixed CO<sub>2</sub> concentration. As discussed in Section 3.3.2, the atmospheric thermal structure depends on the vertical layering and specifically on the altitude of the tropopause. Below the radiative mesosphere, the temperature profile follows the moist and dry adiabatic lapse rates. Regarding opacity, increasing H<sub>2</sub>O is similar to decreasing CO<sub>2</sub> (as humidity ratio is defined as  $H_2O/CO_2$ ); thus, we obtain opposite behaviors for the two components.

At early times, whatever the distance, higher H<sub>2</sub>O content increases atmosphere's opacity, thus decreases  $F_{IR}$  (Figures 3.9c and 3.9d), and as moist troposphere is thin at that moment, it results in higher surface temperatures (as previously described for CO<sub>2</sub>).

Close to the star (Figures 3.9a, 3.9c, 3.9e, 3.9g), where no condensation occurs and as degassing proceeds, humidity ratio, and so opacity, is always greater for  $[H_2O]_{t_0} = 0.621 M_{EO}$  than for  $[H_2O]_{t_0} = 0.186 M_{EO}$ . More water vapor in the atmosphere results



FIGURE 3.9 – Comparison of the thermal evolution of the magma ocean between two water contents: 0.186 (blue curves) and 0.621 M<sub>EO</sub> (red curves), for a grey radiative-convective atmosphere, at 0.77 AU (a, c, e, and g, crosses in Figure 3.10) and 1 AU from the Sun (b, d, f, and h, squares in Figure 3.10),  $[CO_2]_{t_0}=5\times10^{-2}$  wt%. At ERCS, for D=0.77 AU,  $P_{H_{2O}}/P_{CO_2}=0.07$  for  $[H_2O]_{t_0}=0.186$  M<sub>EO</sub>, and  $P_{H_{2O}}/P_{CO_2}=0.265$  for  $[H_2O]_{t_0}=0.621$  M<sub>EO</sub>. For D=1 AU,  $P_{H_{2O}}/P_{CO_2}=0.073$  for  $[H_2O]_{t_0}=0.186$  M<sub>EO</sub>, and  $P_{H_{2O}}/P_{CO_2}=0.226$  for  $[H_2O]_{t_0}=0.621$  M<sub>EO</sub>. At 1 AU and for  $[H_2O]_{t_0}=0.621$  M<sub>EO</sub>, a 243 m deep water ocean is formed at ERCS. Parameters used for the calculations are given in Table 3.2.

in a higher tropopause and higher surface temperatures (Figure 3.9g). Conversely, at 1 AU (Figures 3.9b, 3.9d, 3.9f, and 3.9h), where condensation occurs for  $[H_2O]_{t_0} = 0.621$   $M_{EO}$ , atmospheric  $P_{H_2O}atm$  strongly decreases (Figure 3.9f), opacity becomes lower than for  $[H_2O]_{t_0} = 0.186$   $M_{EO}$ : the resulting surface temperature is lower for higher water content.

It is important to note that beyond  $D_C$ , even if no ocean is formed at the surface (above the condensation limit), higher water contents lead to thicker moist tropospheres. The adiabatic lapse rate being steeper in the dry troposphere than in the moist troposphere, it may result in lower surface temperatures for higher water contents (Figure 3.13).

Condensation limits at ERCS as a function of solar distance and CO<sub>2</sub> content are plotted in Figure 3.10, for various initial H<sub>2</sub>O contents. Water condensation depends both on CO<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>O as the limits are different for distinct water contents. Note that the critical distance  $D_C = 0.86 \pm 0.3$  AU (red arrow in Figure 3.10, similar to the one calculated by Hamano et al., 2015) remains constant whatever the volatile content, and so does the associated equilibrium temperature. What changes is the CO<sub>2</sub> concentration threshold above which water does not condense at  $D_C$ , distance beyond which water condensation strongly depends on the volatile content. Increasing the water content extends the CO<sub>2</sub> concentration range for which condensation is possible, the pressure effect controlling water condensation at the surface (with higher  $P_{H_2O}$ , saturation vapor pressure at the surface can be reached for higher CO<sub>2</sub> concentrations).

#### 3.3.4 Scaling Laws

As all condensation limits have similar shapes (Figure 3.10), it shows that condensation might depend on a single parameter involving a combination of volatile contents. It is natural to introduce a dimensionless parameter such as

$$x^* = \frac{P_{CO_2}}{P_{CO_2} + P_{H_2O}},\tag{3.11}$$

with  $x^*$  representing the initial relative volatile content expressed in terms of equivalent atmospheric pressures  $P_{CO_2}$  and  $P_{H_2O}$ . Figure 3.11 shows that all the curves of Figure 3.10 now collapse on the same master curve when using this new scale for the CO<sub>2</sub> content.

As previously discussed, the condensation limit is a function of the absorbed solar flux and of the greenhouse gases budget in the atmosphere. Conversely, the location of the critical distance  $D_C$  (i.e., the "classical" inner edge of the habitable zone, Figure (3.10) only depends on the amount of energy received at the surface of the planet. For a given planetary system, it results in the combination of the solar constant  $\mathcal{F}_0$ , specific to the host star, and the bolometric albedo  $\alpha$ , depending on the characteristics of the surface and atmosphere, and also on the spectral energy distribution of the star. In order to extrapolate our predictions to other stellar systems, we conducted another set of calculations for different stellar and planetary conditions: planets with an albedo ranging from 0.1 to 0.7, and stellar constants varying from the young Sun to the present-day value. For this range of parameters, whatever the combination of  $\alpha$  and  $\mathcal{F}_0$ , the equilibrium temperature associated to  $D_C$  is constant and equal to  $261\pm 5$ K. These calculations are shown in Figure 3.12a. This value is similar to the value corresponding to the inner edge of habitable zone found in other studies with different models and approaches (Selsis et al., 2007; Kopparapu et al., 2013). The corresponding heat flux  $F_C = \sigma_{SB} T_{eaC}^4$  is close to the Nakajima's limit value (radiation limit of steam atmospheres (Hamano et al., 2015). This critical equilibrium temperature  $T_{eqC}$  can 72



FIGURE 3.10 – Regime diagram indicating the state of the water at ERCS on an Earth-like planet for different water contents. Above the condensation limits (lines), no water condensation occurs at the surface, while below those limits, a water ocean is present at ERCS time. The crosses and the squares are analyzed in Figure 3.9 using the same color code. Parameters used in the calculations are given in Table 3.2.

be used to define the critical distance  $D_C$  (in AU) at ERCS for a given planetary system:

$$D_C = \sqrt{\frac{\mathcal{F}_0'(1-\alpha)}{\sigma_{\rm SB}T_{eqC}^4}}.$$
(3.12)

The dimensionless stellar distance  $D^*$  of a planet of a given albedo, is then

$$D^* = \frac{D}{D_C}.\tag{3.13}$$

If  $D^*$  is greater than one, the planet is located farther than the critical distance and condensation may occur at the surface of the planet, at least for sufficiently low values of  $x^*$  (i.e., sufficiently wet planets).

Fitting all the data leads to an expression for the water condensation limit:

$$x_C^* = a \times (D^* - 1)^n, \tag{3.14}$$

with  $a = 0.82 \pm 0.03$ ,  $n = 0.05 \pm 0.035$  for the grey approximation. We also apply our



FIGURE 3.11 – Regime diagram indicating the state of the water at ERCS on an Earth-like planet using our dimensionless parameter  $x^*$  for the volatiles (equation 3.11). The different lines correspond to the condensation limits obtained for different water contents (Figure 3.10). The blue line is the fit representing those data with the associated uncertainties in the grey area.

approach to the non-grey k-correlated atmospheric model (Figure 3.12b). In this case,  $a = 0.902 \pm 0.4$ ,  $n = 0.128 \pm 0.02$ . The shape of these limits are similar in both cases (for a discussion about the differences between these two atmospheric treatments, see Section 3.4.1).

Using the variables  $D^*$  and  $x^*$ , it is possible to predict water condensation for different stellar radiations and different atmospheric compositions of different planets. Conversely, knowing if liquid water exists or not at a planetary surface allows to infer a plausible corresponding range of initial volatile content.

Obviously, limitations exist about these predictions: for example beyond a certain amount of volatiles in the atmosphere, the state of the matter, and more specifically the gas properties at very high pressures (supercritical fluids) remain poorly understood. However, the radiative layers are located in the uppermost atmosphere, where low-pressure conditions are well known. The main limitation of our simple model comes from the lack of feedbacks between atmospheric composition and albedo (see Section 3.4.3).

Despite these uncertainties, one can look at ERCS temperatures as a function of the volatile content for different distances to the Sun (Figure 3.13). As previously shown in Figure 3.7, two distinct trends arise from either side of the critical distance



FIGURE 3.12 – Condensation limits for different  $H_2O$  contents as a function of the critical distance ( $D^*$ , equation 3.13), for (a) a grey radiative-convective and (b) non-grey k-correlated atmosphere. The plus signs correspond to the condensation limits obtained for different water contents, and the cross markers stand for calculations made for different albedos and solar constants, ranging respectively from 0.1 to 0.7, and from the young Sun's solar constant to the present-day value. Cross markers are blue if water condensation occurs at ERCS and red if not. Parameters used for the calculations are given in Table 3.2.

separating type I and type II hot planets. As discussed in the previous sections, atmospheric composition controls surface temperatures through two parameters: the opacity of the radiative layer and the adiabatic lapse rates in the underlying convective layers. As opacity is a function of the humidity ratio  $H_2O/CO_2$ , it might be used to scale the volatile content. Rather than using the initial contents or the equivalent atmospheric pressures, we used the partial pressures given by the solubility laws (see Appendix C) that are more representative of degassing, and so of the atmospheric composition (note that using calculated partial pressures at ERCS would not be predictive). We then normalized surface temperatures by the critical equilibrium temperature of the system  $T_{eaC}$ . For H<sub>2</sub>O-dominated atmospheres (right side of the vertical dashed line in Figure 3.14), corresponding to  $x^* < 0.8$ , two distinct trends arise from either side of the critical distance separating type I and type II hot planets. Nearest planets from the Sun with water-enriched atmosphere reach ERCS with a molten surface  $(T_{surf} > T_{sol}, \text{ upper part of Figure 3.14})$ . For CO<sub>2</sub>-dominated atmospheres (left part of Figure 3.14), no water ocean is formed at ERCS and a strong greenhouse effect results in high surface temperatures but is not sufficient to sustain a molten surface (type III planets). For those atmospheres, the atmospheric composition determines water condensation, instead of the distance for  $H_2O$ -dominated atmospheres. Note that the green oscillating curve corresponds to a planet located at 0.83 AU, close to the critical distance, possibly being a source of numerical instabilities.



FIGURE 3.13 – Surface temperatures obtained at ERCS for solar distances varying from 0.63 to 1.30 AU, initial CO<sub>2</sub> contents from 0.1 to  $14 \times 10^{-2}$  wt%, and initial water contents equal to (a) 0.031 M<sub>EO</sub> and (b) 1.243 M<sub>EO</sub>. Parameters used for the calculations are given in Table 3.2.

### 3.4 Discussion

### 3.4.1 Grey Radiative-Convective Versus Non-Grey (k-correlated) Atmosphere

In our atmospheric model, longwave radiation (from wave number  $\sigma = 0 \text{ cm}^{-1}$  to  $\sigma = 10, 100 \text{ cm}^{-1}$ ) can be computed either using the grey approximation or using a k-correlated radiative transfer code. The grey approximation uses constant mass absorption coefficients for H<sub>2</sub>O and CO<sub>2</sub> over all this spectral range:  $k_{H_2O} = 10^{-2} \text{ m}^2 \text{ kg}^{-1}$  and  $k_{CO_2} = 10^{-4} \text{ m}^2 \text{ kg}^{-1}$  following Nakajima, Hayashi, and Abe (1992). H<sub>2</sub>O absorption is greater than CO<sub>2</sub> due to more absorption bands in the thermal spectrum. In contrast, mass absorption coefficients used in the k-correlated model depend on wavelength, H<sub>2</sub>O/CO<sub>2</sub> ratio, temperature, and total pressure for H<sub>2</sub>O and CO<sub>2</sub> and are based on high-resolution spectrum computed by KSPECTRUM (Eymet, Coustet, and Piaud, 2016) (see Marcq, 2012; Marcq et al., 2017). These higher-resolution spectra lead to lower absorption for H<sub>2</sub>O. However, using the grey radiative-convective model allows exploratory simulations that are helpful to precise conditions to implement in the k-correlated model.

At early times, a grey atmosphere underestimates the outgoing longwave radiation  $(F_{IR})$  compared to a non-grey atmosphere (Figure 3.15b). It results in a higher surface temperature. This surface temperature difference remains until water ocean formation at ERCS. Just after ERCS, humidity ratio decreases as well as atmospheric opacity. Condensation at the surface stores an important amount of water in the ocean, and condensed water contributes far less to the radiative transfer within the atmosphere. Heat transfer throughout the atmosphere is controlled by the convective adiabatic lapse rate which does not depend on absorption coefficients. Hence, the temperatures are similar in the grey or non-grey cases.

To summarize, closer to the star than  $D_C$ , atmospheric opacity is important (Figure 3.8) and surface temperatures depend on the mass absorption coefficients used. Conversely, when water ocean condensation is possible, i.e., beyond  $D_C$ , humidity ratio strongly decreases as well as atmosphere's opacity (Figure 3.8), which is then



FIGURE 3.14 - Surface temperatures obtained at ERCS for 7 different  $[H_2O]_{t_0}$ , 17 different  $[CO_2]_{t_0}$  and 8 different solar distances, using our dimensionless variables. The vertical dashed line separates waterdominated (right side) to  $CO_2$ -dominated (left side) atmospheres. The red dashed line corresponds to the solidus temperature: it separates planets with a molten surface (upper part) to planets with a solid surface at ERCS. Parameters used for the calculations are given in Table

3.2.

controlled by the low  $CO_2$  absorption coefficients (both in the grey and non-grey approximation).

If water condensation occurs  $(D > D_C)$ , surface temperatures predictions are similar when using either fixed mass absorption coefficients or k-correlated coefficients. But for  $D < D_C$ , using H<sub>2</sub>O k-correlated coefficients allows better surface temperatures estimates. Indeed, the grey approximation might overestimate surface temperatures, and may slightly shift the water condensation's limit to larger solar distances and lower CO<sub>2</sub> contents as shown in Figure 3.12 (for example at  $D^* = 1$ , a  $CO_2$  content corresponding to  $x^* = 0.6$  is sufficient to condense water, but not in the non-grey case).

#### Influence of the Clouds 3.4.2

The effect of clouds (present in the moist troposphere) on shortwave radiation are parameterized through a bolometric albedo (see Marcq et al., 2017), and computed with the four-steam DISORT radiative transfer code for longwave radiation (Stamnes



FIGURE 3.15 – Thermal evolution of the magma ocean when the atmosphere is treated as a radiative-convective grey atmosphere (blue lines, 234 m deep ocean at ERCS), and with our radiative convective *k*-correlated model (red lines, 159 m deep ocean at ERCS). D=1 AU,  $[H_2O]_{t_0}=0.621 M_{EO}, [CO_2]_{t_0}=5\times10^{-2} \text{ wt\%}$ , cloud-free. Parameters used for the calculations are given in Table 3.2.

et al., 1988). The user can choose to take into account, or not, the effect of clouds on thermal radiation.

Strong uncertainties are associated with this parameter in Earth's energy budget computations and in atmospheric studies in general (heating or cooling effect of the global cloud cover). Furthermore, to constrain the clouds effect on a global scale, 3–D climate models are required, taking into account both clouds global dynamic and spatial distribution. With our 1–D model, we are neither able to include partial cloud coverage nor to parameterize microphysical clouds properties (see Marcq et al. (2017) and Kopparapu et al. (2013) for a discussion about the 1–D simulations limits concerning the clouds). Our model can only provide two limits concerning two extreme cases: an atmosphere without clouds or with a 100% cloud coverage (see Figure 3.16 for a comparison between these two cases).

At early times, surface temperatures are high, and the moist troposphere, containing clouds, is not thick enough to significantly affect radiative transfer: there is no difference between the two simulations. As the moist troposphere is getting thicker, the thermal effect of the cloud cover increases surface temperature through its greenhouse effect, increasing atmospheric opacity and decreases the outgoing infrared flux  $F_{IR}$ . The stronger blanketing effect delays ERCS time and the resulting higher surface temperatures (around 100 K in that case) might prevent water condensation at



FIGURE 3.16 – Comparison of the thermal evolution of a magma ocean with a grey radiative-convective atmosphere, without (blue) and with water clouds (red). D=1 AU,  $[H_2O]_{t_0}=0.621 M_{EO}$ ,  $[CO_2]_{t_0}=10^{-3} \text{ wt\%}$ . With water-clouds, a 836 m deep ocean is formed, without clouds a 1042 m deep ocean is formed at ERCS. Parameters used for the calculations are given in Table 3.2.

the surface. Nevertheless, we do not take into account the reflectivity of the clouds that should decrease the absorbed solar flux and might balance their blanketing effect. Note that for H<sub>2</sub>O-dominated atmospheres presented here,  $F_{IR}$  exhibits a strong asymptotic limit as a function of  $T_{surf}$  (Figure 3.16c). As discussed in Marcq et al. (2017), such a cloud cover decreases the value of this Nakajima's limit.

#### 3.4.3 Limitations

Different limitations arise from the assumptions we made to build this coupled model. Concerning the atmosphere, while we have shown that the differences between the grey case and non-grey case are small, using constants absorption coefficients for  $H_2O$  and  $CO_2$  may overestimate the opacity and then the surface temperature. We have not considered the blanketing effect of dust particles injected in the atmosphere subsequent to giant impacts. It should affect the opacity and the resulting surface temperature likewise (Matsui and Abe, 1984; Abe and Matsui, 1985). However, for dense atmospheres, and especially  $H_2O$ -rich atmospheres, this effect should be negligible due to the already high opacity of these atmospheres.

We do not take into account the effect of shortwave radiation on the radiative budget which is parameterized only through a prescribed value of albedo (Marcq et al., 2017). It does not allow us to model properly absorption and scattering for other stellar spectral classes. Ongoing improvements are made to better compute feedbacks between atmospheric composition and incident stellar flux. We can mentioned for example the extension of our spectral range computations to shorter wavelengths in order to test our predictions for stars of different spectral classes, as well as a true computation of the bolometric albedo of the planet taking into account Rayleigh scattering for high  $CO_2$  contents among other things (Kopparapu et al., 2013).

The solar flux received at the surface of a planet is not uniform: the equator – closer to the Sun if the obliquity is small – is more heated than the poles, as well as the dayside compared to the nightside (depending on the rotation rate). We cannot model properly these differences in 1–D, and a reasonable approximation is to take an average value of the solar constant for the entire surface of the planet. However, this effect does not affect significantly our results because the Sun is not the main energy source before reaching ERCS, the convective flux from the mantle being then the major heating source of the atmosphere. Nevertheless, for different rotation rates, when the surface temperature is mainly controlled by the incident solar flux (post-ERCS evolution), it can strongly influence surface temperatures and the position of the inner edge of the HZ (Yang et al., 2014; Kopparapu et al., 2016).

Regarding the volatile content, no escape processes are modeled here but the accretion time and the time to reach ERCS are shorter than the characteristic time to lose a consequent amount of  $H_2O$  in the outer space (Abe and Matsui, 1985). Furthermore, this process, which desiccates the atmosphere, mostly affects planets located below the critical distance where water condensation do not occur (Hamano, Abe, and Genda, 2013), making them more uninhabitable than they already are at ERCS. Conversely, if a water ocean is formed at ERCS, escape processes may not affect significantly atmospheric composition (water being stored in the ocean is not affected by escape processes). Concerning  $CO_2$  atmospheric content, the dissolution of carbon dioxide in the water ocean, once condensed, traps an important amount of  $CO_2$  out of the atmosphere. Carbon dioxide then precipitates and might be reinjected in the mantle, as well as water, through subduction processes, before being degassed again by volcanism. Foley and Driscoll (2016)'s review shows the importance to couple all the reservoirs in order to study rocky planets evolution. Also, extending our solar distance range to higher values is limited by the fact that we do not compute neither  $CO_2$  condensation in the atmosphere at low temperatures (see Kasting (1991) for consequences of this phenomenon) nor water freezing, even within the clouds.

Considering the internal model, its 1–D nature required simplifications, such as the effect of segregation, rotation and existence of a distinct basal magma ocean, as discussed in Section 3.2.1 and Appendix B. Moreover, other heat sources are neglected here, such as the tidal heating by the new Moon (Zahnle et al., 2007) or reinjection of energy by impacts. Impacts might also affect the volatile content by eroding the atmosphere (e.g., Walker, 1986; Ahrens, 1993), as well as by supplying volatiles (e.g., Watkins, 1983; O'Brien et al., 2014). Further 2–D or 3–D models are necessary to characterize those processes and derive the necessary scalings to include in a 1–D model.

#### 3.5 The Earth and Venus

We now apply our first-order scaling laws to the cases of early Earth and Venus. Even if the sources and processes involved differ to explain water supply during terrestrial planets history (Marty, 2012; Morbidelli et al., 2012), one can make the reasonable
assumption that the initial water content of Venus and the Earth were not so different at early times (Raymond, Quinn, and Lunine, 2007), and that at least one Earth ocean mass  $[H_2O]_{t_0}=1 M_{EO}$  ( $[H_2O]_{t_0}\approx 270$  bar) and a Venus present-day CO<sub>2</sub> concentration ( $[CO_2]_{t_0}\approx 90$  bar) is a reasonable guess for the initial volatile content Holland ( $[CO_2]_{t_0}\approx 60$  bar for the early Earth following 1978). We also assume an initial MO planet without atmosphere (e.g., Cameron, 1983; Ahrens, 1993) and a planetary albedo of 0.2. From this initial state (stars in Figure 3.19a), we discuss how our first-order model can help to elucidate the evolutionary path of these planets (Figure 3.19b).

### 3.5.1 Early Earth

Our results show that the current Earth is indeed located inside the HZ (i.e.,  $D^* > 1$ , Figure 3.19) and that water condensation likely occurred for the early Earth orbiting a faint young Sun (Figures 3.17 and 3.19a), which supports the validity of the model. Recent accretionary models combined with geochemical evidences show that water was likely brought to Earth in a proportion that depends on the details of the accretion models (Morbidelli et al., 2000; O'Brien, Morbidelli, and Levison, 2006; Raymond, Quinn, and Lunine, 2007) (see also Morbidelli et al., 2012, for a review). Figure 3.17 shows the quantity of CO<sub>2</sub> required to prevent condensation on an Earth-sized planet, orbiting a solar-type star at the Sun-Earth distance. As an example, if H<sub>2</sub>O and CO<sub>2</sub> are initially in chondritic proportions, formation of an ocean certainly occurred (Figure 3.17). For 1 M<sub>EO</sub>, 670 bar of CO<sub>2</sub> is required in order to prevent the formation of a water ocean (blue cross in Figure 3.17). Conversely, for  $[CO_2]_{t_0}=60$  bar, corresponding to the CO<sub>2</sub> presently stored in terrestrial carbonates (e.g., Holland, 1978), at least [H<sub>2</sub>O]<sub>t\_0</sub>=0.09 M<sub>EO</sub> (24 bar) is required to condense water at the surface of the early Earth (red cross in Figure 3.17).

### 3.5.2 Venus

Our study reproduces well the surface conditions existing now on Venus. Despite the fact that Venus is located inside the habitable zone, its high  $CO_2/H_2O$  ratio prevents condensation at the surface  $(D^* > 1, \text{Figure 3.19})$ . As suggested by Abe and Matsui (1988), the tiny amount of water in its atmosphere (e.g., de Bergh et al., 1995; de Bergh et al., 2006) is not sufficient to allow present-day water condensation  $(x^* \approx 1)$ . However, evidences suggest that the early atmosphere of Venus was more enriched in water than it is today (e.g., Rasool and Bergh, 1970; Lewis, 1970; Donahue et al., 1982), and has lost H<sub>2</sub>O either due to a runaway greenhouse (Ingersoll, 1969; Rasool and Bergh, 1970) or a moist greenhouse (Kasting and Pollack, 1983; Kasting, 1988) and escape processes (Kulikov et al., 2006; Lammer et al., 2008), or even that the water has been reinjected within the mantle (Albarède, 2009).

We use our predictive scaling laws to redraw Venus history and propose below different evolution scenarios (Figures 3.18 and 3.19). From the initial conditions, the surface of the planet would be molten at ERCS (even for low  $[H_2O]_{t_0}$ : Figure 3.7). As MO degassing proceeds, water condensation might occur within the atmosphere and subsequent clouds formation should tend to increase planetary albedo to its current value. Assuming a  $x^*$  value allowing water condensation, Figure 3.18 presents Venus' relative position to the critical distance ( $D^* = 1$ ) as a function of planetary albedo and solar constant (which is time-dependent). On proto-Venus (young Sun), a water ocean can form with at least an albedo of 0.45 and 0.3 M<sub>EO</sub>. For the present-day solar constant, an albedo lower than 0.6 precludes water ocean formation. At this albedo



FIGURE 3.17 – Water condensation diagram for the early Earth ( $\alpha$ =0.2, D=1 AU, young Sun) as a function of H<sub>2</sub>O and CO<sub>2</sub>. Above the condensation limit (black line), CO<sub>2</sub> precludes the formation of a water ocean. The dashed line stands for a chondritic CO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>O ratio, the blue star represents the early Earth's position, and the crosses the critical volatile contents associated. Parameters used for the calculations are given in Table 3.2.

limit value of 0.6, at least 0.3 M<sub>EO</sub> is required to condense (Figures 3.18 and 3.19b). With time, solar constant increases, and higher albedos are required to sustain water oceans on longer timescale (Figures 3.18 and 3.19). However, the longer it takes to form a thick cloud cover (with a high albedo), the less probable it is to keep a sufficient amount of water in the atmosphere to form a water ocean because of the desiccation through escape processes. Using Venus' present-day albedo ( $\alpha = 0.7$ ) and CO<sub>2</sub> content (90 bar), only [H<sub>2</sub>O]<sub>t0</sub>=0.143 M<sub>EO</sub> (38 bar) is required to form a water ocean with the current solar constant ( $x^* < 0.7$  in Figure 3.19b); and only [H<sub>2</sub>O]<sub>t0</sub>=0.1 M<sub>EO</sub> (27 bar) for the faint young Sun ( $x^* < 0.77$  in Figure 3.19 a). Recent 3–D climate models, investigating the interplay between clouds, surface topography and rotation, suggest that a slower rotation would further favor early water ocean formation (Way et al., 2016). If a water ocean formed during Venus history, water might have been reinjected into the mantle (Albarède, 2009) to explain its current dry atmosphere.

The current high albedo of Venus is linked to the thickness and the composition of its cloud cover, reflecting 70% of the incoming sunlight ( $\alpha = 0.7$ ). Nevertheless, there is a competition between two phenomena: an important cloud cover leads to high planetary albedo, decreasing the incoming solar flux and so the temperature. On the other hand, it impedes escape of the radiative flux to space, increasing the blanketing



FIGURE 3.18 – Water condensation diagram for different albedo and solar constant (time-dependent) for Venus, using  $D^*$  (equation 3.13), the present-day CO<sub>2</sub> content, and assuming an initial water content  $[H_2O]_{t_0}=1$  M<sub>EO</sub>. Above the red dashed line ( $D^*=1$ ), the formation of an ocean occurs. Parameters used for the calculations are given in Table 3.2.

effect and thus surface temperatures (see Section 3.4.2). It is then important to understand the dynamic of clouds and their distribution in the atmosphere. Neglecting their blanketing effect underestimates surface temperatures by around 140 K (Titov et al., 2013). Thus, the time formation of such a cloud cover, leading to a strong albedo, combined with the remaining water content and solar constant, is critical to understand the past evolution of Venus and its ability to condense water. Note that the rotation rate might also play an important role as it controls atmospheric circulation and spatial distribution of clouds, and thus incident energy redistribution (Yang et al., 2014).

# 3.6 Conclusion

The early evolution of a rocky planet experiencing a magma ocean phase is characterized by two dynamic regimes. The first one is defined by rapid cooling through vigorous convective motions and strong degassing of the atmosphere, in opposition to the later quasi steady state, where surface temperature and heat fluxes evolve much more slowly. Surface conditions are then controlled by the balance between the absorbed solar flux (which evolves faintly compared to the convective flux from the mantle in the first stage) and the outgoing infrared flux. When the convective flux from the mantle becomes 1 order of magnitude lower than the absorbed solar flux,



FIGURE 3.19 – Venus' (red stars) possible evolution depending on albedo and solar constant. The condensation limit in black is based on  $x^*$  and  $D^*$  (equations 3.11 and 3.13). The red asterisks indicate the lowest albedo value that allows water condensation on Venus, for the solar constant (a) of the young Sun and (b) of the current Sun. The water content is indicated with the arrows on the right-hand side. The label "ppm" stands for low water concentration (on the order of 1 ppm or less). The vertical dashed lines indicate Venus possible locations, depending on the water content. The blue star (a) stands for the early Earth with  $[H_2O]_{t_0}=1 M_{EO}$  and  $[CO_2]_{t_0}=60$  bar. Parameters used for the calculations are given in Table 3.2.

the end of the first rapid cooling stage ("ERCS") is reached. That moment is used as a reference evolution time to compare the thermodynamical state of the planet. Simulating the cooling of a magma ocean in interaction with the atmosphere shows that water condensation at ERCS strongly depends on both  $H_2O$  and  $CO_2$  contents. The corresponding surface conditions at ERCS may imply three different types of planet as a function of the solar distance and the volatile content: (1) planets with a water ocean overlying a solid surface: type I (like the Earth); (2) planets with a molten surface and without water ocean: type II; and (3) planets with a solid surface without water ocean: type III. From our calculations, we provide scaling laws to predict water condensation on an Earth-like planet at ERCS from initial conditions, using either our grey radiative-convective model or our non-grey k-correlated radiative-convective model for the atmosphere. Those scaling laws are valid for a wide range of parameters such as different volatile contents, different solar distances, different planetary albedos and during all the lifetime of our solar system. Our predictions for water condensation are consistent with existing models that focus on the location of the habitable zone. However these models postulate rather than calculate surface conditions that our model determines taking into account early interactions between the interior and the atmosphere. Furthermore, surface temperatures follow two distinct trends from either side of the critical distance. We tested our predictions in the case of Venus and have shown that water ocean formation might have occurred during Venus history depending on the history of clouds formation and on the assumed initial water content.

# 3.7 Appendix

### 3.7.1 Appendix A: Magma Ocean Viscosity

As shown in Figure 3.20, the interpolated law presented here delays both the end of rapid cooling stage and the complete solidification time (time when  $R_S = R_p$ ). Indeed, the transition to a solid-state mantle is shifted to a lower liquid fraction than the classic  $\phi_c=0.4$ , which is reached later. Furthermore, it smoothes the rheology transition to a solid-state convection, which is more realistic and in agreement with experimental data (Takei and Holtzman, 2009). Note that it does not affect the surface conditions reached at ERCS.



FIGURE 3.20 – Thermal evolution of the magma ocean using the viscosity law from Lebrun et al. (2013) (red), and the analytical one presented in this study (blue). Corresponding ERCS times are indicated by the vertical dotted lines. The solid and the dashed lines stand for surface and potential temperatures, respectively. Earth-like planet,  $[H_2O]_{t_0}=0.621 M_{EO}, [CO_2]_{t_0}=4\times10^{-2} \text{ wt\%}, D=1 \text{ AU}, \text{ grey radiative-convective cloud-free atmosphere, } \alpha=0.2, \text{ young Sun.}$ 

### 3.7.2 Appendix B: Processes Occurring During Magma Ocean Solidification

Figure 3.1 shows that the solidus curve is steeper than the adiabats, and therefore, a superadiabatic temperature difference  $\Delta T_{sa}$  would develop in any growing solid layer of thickness  $h = R_S - R_{core}$  (note that in this case  $\Delta T_{sa}$  and h are proportional). This configuration is gravitationally unstable (Solomatov, 2015). Figure 3.21a shows that a small  $\Delta T_{sa} \approx 5$  K (corresponding to  $h \approx 50$  km) is sufficient for the solid layer

 $Ra(h, \Delta T_{sa})$  to exceed the critical value  $Ra_C \approx 650$  (Chandrasekhar, S., 1961) for a solid viscosity of  $\eta_s = 10^{18}$  Pa.s. The value of  $\eta_s$  in the lower mantle, which depends on creep mechanism and composition (Hustoft, Scott, and Kohlstedt, 2007; Boioli et al., 2017), is still debated, but a large range of values allows convection in the growing solid layer (Figure 3.21a). Its overturn time  $t_C = h/U$  can be estimated using the Stokes velocity  $U = 2\alpha_T \rho \Delta T_{sa} gh^2/9\eta_s$ . It is smaller than the MO solidification time obtained considering no convection within the underlying solid layer for a large range of solid viscosities (Figure 3.21b). Any overturn of the solid layer would reheat the bottom of the MO and therefore delay its complete solidification.



FIGURE 3.21 – (a) Rayleigh number of the growing solid layer at the bottom of the mantle, as a function of viscosity  $\eta_s$  and temperature difference  $\Delta T_{sa}$ . Above  $Ra_C$  (below the red curve), the configuration is unstable and solid-state mantle convection can occur. (b) Characteristic overturning time  $t_C$  of the gravitationally unstable solid layer. The red line represents the MO solidification time considering no convection within the underlying solid layer, for a grey atmosphere, without clouds,  $[H_2O]_{t_0}=0.371 \text{ M}_{\text{EO}}$ ,  $[CO_2]_{t_0}=2\times10^{-2} \text{ wt\%}$ , D=1 AU. All  $t_C$ shorter than this lower limit show that convection might indeed occur within the solidifying layer before MO complete crystallization.

In addition, incompatible elements going preferentially in the liquid phase, solidification results in a progressive enrichment of the liquid magma in iron (and other incompatible elements) compared to the underlying solid cumulates. This would tend to build an unstable density stratification in the growing solids and further diminish their gravitational stability. Recent 2–D numerical simulations taking into account the full thermochemical effects indeed confirm that solid-state convection would develop inside the growing solid cumulates before the MO complete solidification (Maurice et al., 2017).

Note that our model is built on two instantaneous and local balances for the heat fluxes and for the atmospheric volatile contents, which do not depend explicitly on time (since there is no escape of volatiles). So since the ERCS is based on a flux criterion ( $F_{conv} \leq 0.1 F_{\odot}$ ), the surface conditions at ERCS do not depend on the details of the MO cooling history. Indeed, the dashed lines on Figure 3.7, obtained by considering a secular cooling only occurring over the liquid-state mantle (i.e., between the solidification front  $R_S$  and the surface), are indistinguishable from the solid lines obtained with the secular cooling calculated over the whole mantle.

### 3.7.3 Appendix C: Fate of the Volatiles

For the mass transfer between the magma ocean and the atmosphere, which is based on the balance of partial pressures at the surface of the magma ocean, and thus, the degassing of the volatiles, we used the same parametrization as Lebrun et al. (2013) described hereafter.

As the magma crystallizes, the volatiles go preferentially into the residual liquid, which becomes enriched in volatiles. We assume that the degassing of these species occurs by exsolution, above the saturation limit. Then, bubbles rise up and finally burst at the surface. The upward velocity of the gas pocket (the percolation velocity) is higher than the velocity timescale of the liquid-state convection (Lebrun et al., 2013). It means that gas pieces will easily separate from the melt: volatiles reach the surface faster than the solidification front does ( $R_S$  in Figure 3.1b). Thus, there is a balance of the volatile content on both sides of the surface at each time step.

The volatile mass balance is given by

$$k_{vol}X_{vol}M_{solid} + X_{vol}M_{liquid} + \frac{4\pi R_p^2}{g}P(X_{vol}) = X_0M_0,$$
(3.15)

where  $X_0$  and  $M_0$  are respectively the initial mass fraction of volatiles and the initial mass of liquid,  $X_{vol}$  is the mass fraction of volatile dissolved in the magma,  $M_{solid}$  and  $M_{liquid}$  are the masses of solid and liquid phase and  $k_{vol}$  is the distribution coefficient for each volatile species between the solid and liquid phases. It scales as

$$k_{vol} = \frac{M_{s_{perov}}k_{vol_{perov}} + M_{s_{lherz}}k_{vol_{lherz}}}{M_{s_{perov}} + M_{s_{lherz}}},$$
(3.16)

where  $M_{s_{perov}}$  and  $M_{s_{lherz}}$  represent respectively the masses of the solid phases for perovskite and lherzolite,  $k_{vol_{perov}}$  and  $k_{vol_{lherz}}$  are respectively the partition coefficients of volatile (H<sub>2</sub>O or CO<sub>2</sub>) for perovskite and lherzolite (Elkins-Tanton (2008), for the values refer to Table 3.1).

It is often assumed that the MO and the atmosphere are in equilibrium, and their volatiles partial pressures  $P(X_{vol})$  are given by

$$P(X_{H_2O}) = \left(\frac{X_{H_2O}}{6.8 \times 10^{-8}}\right)^{1/0.7},$$
(3.17)

$$P(X_{CO_2}) = \frac{X_{CO_2}}{4.4 \times 10^{-12}}.$$
(3.18)

# Chapter 4

# Early Earth and Early Venus: From Magma Ocean to Temperate Surface Conditions

The content of this chapter has been submitted to Icarus on August 2018 for publication.

## Abstract

Despite their similar sizes and bulk densities, present-day surface conditions are very different on inhabited Earth and hellish Venus. It is still unclear if these conditions are directly inherited from the cooling and solidification of their magma ocean ("MO") stage, or if they result from their more recent evolution with a solid mantle and a brightening Sun. The question is difficult because it requires to consider the coupled evolution of the mantle-atmosphere-ocean system. The initial volatile content in the MO and the distance from the host star appear to play key-roles in the solidification of the magma ocean, the extraction of the atmosphere, the existence of clouds, and the formation (or not) of a primitive water ocean. However, the atmospheric properties strongly influence the planetary albedo, and therefore the amount of sunlight reaching the planet's surface. This, in turn, acts on the cooling rate of the planet and its atmosphere degassing. Here, we use a coupled 1–D MO-atmosphere model to systematically study how the feedback between albedo, atmospheric composition, planetary surface temperature, and clouds, influences water ocean formation at the end of the rapid cooling stage of the planet. The results suggest that if a thick cloud cover forms, its albedo strongly decreases the surface temperature. This would allow the formation of a water ocean on early Venus for initial water contents greater than 0.09 Earth ocean mass. Moreover, assuming one Earth ocean mass and the current  $CO_2$  content of Venus as initial volatile content, suitable surface conditions for extremophile organisms and thus for the emergence of life would develop on early Venus  $(T_{\rm surf} \approx 390 \,{\rm K})$ . Concerning the Earth, cloud-free simulations depict a hot primitive ocean while cloudy simulations picture a frozen early stage. Thus, depending on the cloud cover, the Earth and Venus might not be as different as previously thought at the end of the magma ocean stage.

## 4.1 Introduction

The current surface conditions on the Earth and Venus are very different despite their similar sizes and bulk densities. In contradiction with its closer proximity to the Sun, Venus' surface receives significantly less sunlight than the Earth due to the albedo of its thick cloud cover. Nevertheless, the dry  $CO_2$ -rich atmosphere (e.g., de Bergh et al., 1995; de Bergh et al., 2006) and the cloud layer produce a powerful greenhouse effect, generating a surface temperature as high as 735 K (e.g., Titov et al., 2013).

At early times, atmospheric volatile composition and surface conditions might have been different than today. The adjacent positions of the Earth and Venus in the solar system and recent late-stage accretion models suggest that early Venus was probably as wet as the Earth (e.g., Raymond, Quinn, and Lunine, 2007). Moreover, mass balance evidences suggest similar carbon, nitrogen and water abundances between the Earth and Venus (e.g., Lécuyer, Simon, and Guyot, 2000). Also, measurements of a significantly higher deuterium to hydrogen ratio (D/H) on Venus atmosphere compared to the Earth indicate a large deuterium enrichment relative to hydrogen, which suggests that early Venus was much more enriched in water than it is today (Donahue et al., 1982; Krasnopolsky et al., 2013).

Classical simulations taking into account hydrodynamic escape in  $H_2O$  atmospheres, propose that Venus would have lost its water during its slow solidification in the first 100 Myr (Gillmann, Chassefière, and Lognonné, 2009; Hamano, Abe, and Genda, 2013; Luger and Barnes, 2015). In these simulations of early evolution, no water condensation occurs at the surface. However, using 3–D global climate models (GCM) with sophisticated cloud scheme and modern Earth's atmosphere composition, Yang et al., 2014 showed that a slow rotation rate, by weakening the Coriolis force and extending daytime illumination, induces strong convergence and convection in the substellar region. This leads to concentrate optically thick clouds at the substellar and most illuminated part of the atmosphere, strongly increasing the reflected sunlight, and thus drastically decreasing surface temperature. Combined with the fainter flux emitted by the young Sun, it allows water condensation at the surface of Venus, bringing back the idea that Venus could have once been habitable in the past (e.g., Kasting, Pollack, and Ackerman, 1984; Kasting, 1988; Grinspoon and Bullock, 2003). Geological evidences might also support the idea of an earlier moderate climate with water ocean: possible granitic cratons of Venusian highlands (Mueller et al., 2008; Hashimoto et al., 2008) require subduction of water rich crust (Campbell and Taylor, 1983). Adding the effect of land distribution and land/ocean fraction on atmospheric dynamics (Abe et al., 2011; Charnay et al., 2013), Way et al. (2016) showed that liquid water can be maintained for approximately two billion years. The slow rotation rate might be the result of thermal atmospheric tides depending on the atmosphere thickness and insolation (Dobrovolskis and Ingersoll, 1980; Correia and Laskar, 2001; Leconte et al., 2015). However, during the MO stage, insolation is negligible compared to the MO convective flux, and the thickness of the atmosphere might evolve rapidly with time (Salvador et al., 2017), making the previous interpretation not straightforward at that time. On the other hand, including  $CO_2$  degassing during MO cooling allows the formation of a water ocean for Venus, if the albedo, taken as constant during the whole process, is sufficiently large (Salvador et al., 2017).

It is important to constrain the primordial surface conditions not only to determine water ocean formation, but also because the interplay between the convective regime of the planet and those surface conditions controls planetary evolution (Foley and Driscoll, 2016; O'Neill et al., 2016; Weller and Lenardic, 2018). For example, surface temperature controls the mechanical behavior of the lithosphere and strongly influences weak zone formation and inheritance (Crameri and Kaus, 2010; Bercovici and Ricard, 2014), or lithosphere rheology structure which is determinant for plate tectonics initiation (Gerya et al., 2015; Davaille, Smrekar, and Tomlinson, 2017). Because of such feedbacks, interior-atmosphere coupled models are needed to investigate rocky planets evolution and habitability (Hamano, Abe, and Genda, 2013; Lebrun et al., 2013; Gillmann and Tackley, 2014; Salvador et al., 2017). A comparison of different approaches with implications for early Venus is shown in Table 4.3.

Postulating that Venus experienced similar formation scenario in the same disk area, and so accreted similar amount of volatiles than the Earth, we recently discussed the possibility of water ocean formation on Venus from calculated surface conditions at the end of the magma ocean stage. Depending on the cloud cover formation time and resulting albedo *after* the magma ocean phase, we estimated that only 0.3 Earth ocean mass might have been sufficient to form an ocean (Salvador et al., 2017). However, our MO simulations were done without considering clouds, and by prescribing a constant albedo value during the whole cooling. In addition to reflect solar radiation, clouds' opacity acts as a thermal blanket. The balance between these two processes may thus enhances greenhouse effect. Using a major update of our atmospheric model to calculate the albedo during the cooling of the magma ocean (Pluriel, Marcq, and Turbet, 2018), this will be investigated here considering two end-member cases: a cloud-free sky and a full cloud cover (Section 4.2.2).

Here, we simulate Venus and Earth early thermal MO and atmospheric evolution, starting from the magma ocean stage, and including true computation for the albedo of the planet as a function of the evolving atmospheric composition and temperature. We first briefly describe the updates of our model in Section 4.2. Then, we present the influence of a variable albedo on the thermal evolution of the magma ocean, compare the thermal evolution of Venus without or with a thick cloud cover, and discuss the surface conditions reached at the end of the rapid cooling stage (Section 4.3). Scaling laws derived from our calculations allow for an estimation of the water content sufficient to form a primitive ocean on Venus. In Section 4.4, we compare our results to other studies and discuss the conditions inherited from the magma ocean cooling on the Earth and Venus.

### 4.2 Methods

### 4.2.1 Magma Ocean

The internal model used to simulate the cooling and solidification of the magma ocean is the 1–D spherical model described in Lebrun et al. (2013) and Salvador et al. (2017). All calculations conducted in this study simulate an Earth-like planet with the same mass, density, radius, gravity, solidus and liquidus depth profiles (taken after Andrault et al., 2011). Starting from an entirely molten mantle with a potential temperature  $T_{pot} = 4000$  K due to post-giant impact heating (e.g., Hostetler and Drake, 1980; Tonks and Melosh, 1993), the conservation of energy imposes that the secular cooling (SC) of the magma ocean follows (e.g., Abe, 1997; Solomatov, 2000; Lebrun et al., 2013; Salvador et al., 2017):

$$SC = \int_{R_b}^{R_p} \rho C_p \frac{dT(r)}{dt} r^2 dr = R_p^2 F_{conv} + R_b^2 F_b + H_{int} + H_{sol}, \qquad (4.1)$$

where  $\rho = 4100 \text{ kg.m}^{-3}$  is the averaged density of melt and solid,  $C_p = 1000 \text{ J.kg}^{-1} \text{.K}^{-1}$ the specific heat, T the temperature at the planetary radius r and time t.  $R_p = 6378 \text{ km}$  and  $R_b = 3493 \text{ km}$  stand respectively for the planetocentric altitude of the spherical planet surface and that of base of the magma ocean, from which the heat fluxes  $F_{conv}$  and  $F_b$  are respectively emitted (Figure 4.1). Note that initially,  $R_b$  corresponds to the radius of the core  $R_{core}$  as we assume that the mantle is totally molten at that time.  $H_{int}$  and  $H_{sol}$  are the internal heat fluxes coming from the radioactive



FIGURE 4.1 – (a) Temperature profile, solidus and liquidus (black, red and green curves respectively) of the (b) schematic cross section of the magma ocean surrounded by the atmosphere (light blue area).  $F_{conv}$ stands for the convective heat flux out of the magma ocean (red dotted arrows);  $F_{abs}$  (dashed black arrows going through the atmosphere) is the absorbed part of the total incident stellar flux  $F_{\downarrow}$  (black arrows), while the reflected part is equal to  $\alpha F_{\downarrow}$  (dashed black arrows). The outgloing longwave radiation at the top of the atmosphere  $F_{IR}$  controls the cooling of the planet (blue arrows). Clouds, when present are located in the moist troposphere.

decay and the latent heat of solidification respectively. We do not take into account  $F_b$  and  $H_{sol}$  which are negligible compared to  $F_{conv}$  during the vigorous cooling of the magma ocean. The interior model calculates the convective flux going out of the magma ocean  $F_{conv}$  at each time step following:

$$F_{conv} = C_0 k \frac{T_{pot} - T_{surf}}{H} Ra(H, T_{pot} - T_{surf})^n, \qquad (4.2)$$

where the Rayleigh number associated with temperature difference  $\Delta T$  over a mantle thickness H is:

$$Ra(H,\Delta T) = \frac{\alpha_T g \Delta T H^3}{\kappa \nu}, \qquad (4.3)$$

with  $\kappa = 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$  the thermal diffusivity,  $k = \kappa \rho C_p$  the thermal conductivity,  $\alpha_T$  the thermal expansion coefficient,  $\nu = \eta/\rho$  the kinematic viscosity and  $\eta$  the dynamic viscosity.  $C_0 = 0.089$  is a constant which depends on the pattern of convection (e.g., Siggia, 1994). The value of the exponent n is still debated for the very high Ra of a MO, but is usually taken as n = 1/3, which implies that the surface heat transfer  $(F_{conv})$  is a local process and independent of the MO depth (e.g., Solomatov, 2015).

### 4.2.2 Atmospheric Model and Incident Stellar Flux

The atmospheric model is an update of Marcq et al. (2017) and so the latest version of Marcq (2012) model: a 1–D radiative-convective model treating the atmosphere as non-grey emitter. It is designed to take into account in the thermal equilibrium a significant heat flux coming from the mantle, and now it includes a true computation for the albedo (Pluriel, Marcq, and Turbet, 2018). For that purpose, the spectral range has been extended below 1  $\mu$ m (starting from  $\lambda = 0.3 \mu$ m) in order to take into account Rayleigh scattering by H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub> and N<sub>2</sub>, gaseous line absorption in visible and near UV wavelengths for both H<sub>2</sub>O and CO<sub>2</sub>, as well as collision induced absorption (CIA). Spectral reflectance is calculated over the extended spectral range for each wavelength using DISORT (Stamnes et al., 1988). The Bond albedo  $\alpha$  is then computed by weighting the reflectivity of each band  $R(\sigma)$  with respect to the stellar radiation  $B_{\sigma}$ , assuming the star radiates as a black body of effective temperature  $T_{eff}$ :

$$\alpha(R, T_{eff}) = \frac{\int_0^\infty R(\sigma) B_\sigma(T_{eff}) d\sigma}{\int_0^\infty B_\sigma(T_{eff}) d\sigma} = \frac{\pi}{\sigma_{\rm SB} T_{eff}^4} \int_0^\infty R(\sigma) B_\sigma(T_{eff}) d\sigma, \qquad (4.4)$$

where  $\sigma$  is the wavenumber and  $\sigma_{\rm SB} = 5.67 \times 10^{-8} \, \mathrm{W.m^{-2}.K^{-4}}$  is the Stefan-Boltzmann constant (see Pluriel, Marcq, and Turbet (2018) for a detailed description of the atmospheric model updates and associated numerical procedure). So the albedo is now calculated at each time step as a function of the volatile content in the atmosphere, the temperature and the cloud coverage, rather than being imposed to a constant value.

We also modified the way we calculate the incident stellar flux  $F_{\downarrow}$  received by the planet at a distance  $D_{\odot}$  from the star following:

$$F_{\downarrow} = \left(\frac{\mathcal{R}_{\odot}}{D_{\odot}}\right)^2 \sigma_{\rm SB} \mathcal{T}_{eff\odot}^4, \tag{4.5}$$

where  $\mathcal{R}_{\odot} = 695.7 \times 10^3$  km (Mamajek et al., 2015) and  $\mathcal{T}_{eff\odot} = 5778$  K (Lodders, 1998) are the radius and effective temperature of the host star respectively, using the coefficients from Bahcall, Pinsonneault, and Basu (2001) standard stellar evolutionary model for the faint young Sun (their Tables 1 and 3). The resulting primitive solar constant at 1 AU, or total solar irradiance, is 0.679 times the present incident flux at Earth orbit  $\mathcal{S}_{\odot} = 1360.8$  W.m<sup>-2</sup> (Kopp and Lean, 2011; Mamajek et al., 2015), corresponding to an averaged irradiance over the surface of a planet ( $\mathcal{S}_{\odot}' = \mathcal{S}_{\odot}/4$ ) equal to 231 W.m<sup>-2</sup>. This constitutes a 0.5% difference with our previous parameterization (243 W.m<sup>-2</sup>, 0.714 $\mathcal{S}_{\odot}$  in Salvador et al., 2017), which remains smaller than the uncertainty of our model. However, the solar constant is determinant for the climate of terrestrial planets and thus the location of the inner edge of the temperate zone (e.g., Ishiwatari et al., 2007). In the following, we will always use  $\mathcal{S}'_{\odot,t_0} = 231$  W.m<sup>-2</sup> in our calculations and comparisons with Salvador et al. (2017) (Section 4.4.1).

The user can choose to take into account clouds or not in the simulations. Clouds are formed when the temperature/pressure conditions result in water condensation (saturation exceeded) in the convective region of the atmosphere (troposphere). The latent heat release from condensation changes the lapse rate from a dry to a moist adiabat, and distinguishes the moist troposphere, containing the clouds, from the underlying dry troposphere (Kasting, 1988; Marcq, 2012; Marcq et al., 2017) (Figures 4.1a and 4.4). Given the temperature profile in the atmosphere, water vapor starts to condense in the upper and colder part of the atmosphere, at the bottom of the radiative isothermal mesosphere. As the surface temperature decreases during the cooling of the MO, temperature/pressure conditions favor water condensation deeper in the atmosphere, extending the moist troposphere towards the surface (see Section 4.3.2 for detailed atmospheric profiles evolution). Note that if the moist troposphere extends to the surface, any water in excess of 100% saturation is assumed to condense and form a water ocean. Thermal and visible effect of water clouds can be taken into account separately in our model. Two end-member cases can then be addressed with our 1–D model: either the moist troposphere is fully saturated by clouds, extending throughout the whole layer, or no clouds are present in the moist convective zone corresponding to a clear-sky case. In the case of a 100% clouds vertical column, clouds' scattering and opacity are then taken into account in both shortwave/visible and longwave/thermal domains, affecting the absorbed stellar flux  $F_{abs}$  and the radiated infrared flux  $F_{IR}$  respectively. Conversely, when no clouds are present, neither their thermal opacity nor their reflecting effect is considered.

Modeling clouds in a 1–D atmospheric model is challenging and cannot account for the complex vertical nor for the spatial distribution of clouds in the atmosphere, that affect the albedo and the blanketing effect of clouds. 3–D climate modeling is thus required to realistically determine their effect and to explore intermediate cases between the two end-members presented here. However, during the magma ocean stage, the internal heat flux dominates the thermal equilibrium in the atmosphere, the absorbed stellar flux being negligible compared to the convective flux from the mantle at that time (Salvador et al., 2017). If the planet is entirely covered by a molten surface, as it is the case in our simulations, it seems reasonable to think that the heat flux is isotropic and does not depend on local time or latitude: the atmosphere is then uniformly heated from below. Thus, either clouds might be homogeneously distributed over the entire planet, being totally covered by clouds like Venus, or no clouds would be present at all.

The model does not take into account water freezing, nor  $CO_2$  condensation which precludes  $CO_2$  clouds formation. This assumption is relevant for the pressuretemperature range explored in this study.

### 4.2.3 Magma Ocean - Atmosphere Coupling

The coupling between the two reservoirs described above is based on energy conservation governed by the heat flux balance:

$$F_{IR} = F_{conv} + F_{abs} \tag{4.6}$$

where  $F_{IR}$  is the Outgoing Longwave/thermal Radiation (OLR) at the Top Of the Atmosphere (TOA) given by the atmospheric model that controls the cooling of the planet and its atmosphere.  $F_{abs} = F_{\downarrow}(1-\alpha)$  is the absorbed stellar flux (Figure 4.1).

There is also an exchange of volatiles between the magma and the atmosphere. Volatiles go preferentially into the liquid phase of the magma. Thus, during solidification, the liquid part becomes more and more enriched in volatiles and when the saturation limit is reached, volatiles exsolve into bubbles. If these rising bubbles reach the surface, volatiles will be expelled to the atmosphere. Then, given the convective velocity of the MO, it is reasonable to assume that all volatiles in excess of saturation are degassed at each time step (Elkins-Tanton, 2008), following the mass conservation between the different reservoirs for each volatile specie (Lebrun et al., 2013; Salvador

et al., 2017):

$$k_{vol}X_{vol}M_{solid} + X_{vol}M_{liquid} + \frac{4\pi R_p^2}{g}P(X_{vol}) = X_0M_0,$$
(4.7)

where the initial volatile mass fraction  $X_0$  relative to the MO initial mass  $M_0$  is distributed between the solid and liquid part of the mantle, as a fraction  $X_{vol}$  of masses  $M_{solid}$  and  $M_{liquid}$  respectively, and the atmosphere of partial pressure  $P(X_{vol})$ . The amount of volatiles that can be stored within the solid part of the MO is determined by the partition coefficient  $k_{vol}$  (Elkins-Tanton, 2008; Lebrun et al., 2013; Salvador et al., 2017).

Given the presented updates, we now consider feedbacks between the atmospheric composition, evolving with the degassing, the temperature, decreasing through the cooling of the MO, and the albedo which in turn affects the cooling.

### 4.3 Results

### 4.3.1 Effect of a Variable Albedo on the Thermal Evolution in the Clear-Sky Case

Figure 4.2 compares the typical evolution of the coupled MO-atmosphere system when the albedo is calculated at each time-step using equation 4.4, and when it is kept constant (Salvador et al., 2017). A constant albedo of 0.2 was adopted in Lebrun et al. (2013) and Salvador et al. (2017) for two reasons: using the current solar insolation, it predicts correctly the mean global temperature, thus accounting implicitly for the effect of Earth's clouds (Kasting, 1988). Secondly, it is in agreement with Bond albedo calculated in different 1–D or 3–D climate models (Leconte et al., 2013; Kopparapu et al., 2013; Goldblatt et al., 2013; Hamano et al., 2015). As described in Salvador et al. (2017), two regimes are identified during cooling. (i) A first regime, where the convective flux from the mantle  $F_{conv}$  is much higher than the absorbed stellar flux  $F_{abs}$ , and thus controls the cooling of the whole system, with  $F_{IR} \approx F_{conv}$  (Figures 4.2a and 4.2c). This regime is characterized by a strong and rapid cooling due to vigorous mantle convection, during which most of the atmosphere is degassed (Figure 4.2d). (ii) A second regime, where the magma ocean has cooled enough so that the convective flux from the mantle  $F_{conv}$  becomes much lower than the absorbed stellar flux  $F_{abs}$ . The latter then balances the outgoing infrared flux  $F_{IR}$  and from then on, the thermal transfer in the atmosphere only controls the surface conditions. The incident stellar flux  $F_{\downarrow}$ , and the resulting absorbed stellar flux  $F_{abs}$ , does not evolve significantly until the end of our simulations and it results in a quasi steady-state. We call the limit between these two stages the end of the rapid cooling stage ("ERCS"), and assume that it is reached when the flux coming from the magma ocean becomes an order of magnitude lower than the absorbed stellar flux:  $t_{ERCS} = t_{F_{conv} \leq 0.1 F_{abs}}$ . It allows us to compare planets' surface conditions at the same thermal and evolution stage (Salvador et al., 2017).

In this subsection and in the followings, we consider a representative minimum value of volatile content for early Venus, i.e., the current Venus' atmospheric content of CO<sub>2</sub> ( $[CO_2]_{t_0} = 90$  bar), and one Earth ocean mass of H<sub>2</sub>O ( $[H_2O]_{t_0} = 1 M_{EO}$ ), initially dissolved within the MO (refer to Table 4.1 for parameters used). Given this initial volatile content, the albedo calculated using equation 4.4 starts with a value around 0.4 (Figure 4.2b). CO<sub>2</sub> is rapidly and almost entirely degassed due to its low solubility in magma (Figure 4.2d). Correspondingly, Kopparapu et al. (2013) showed



FIGURE 4.2 – (a) Temperatures, (b) albedo, (c) heat fluxes, and (d) atmospheric pressures during magma ocean cooling with a constant albedo ( $\alpha = 0.2$ ) (blue curves), and with a variable albedo  $\alpha = f(t)$  (red curves). Vertical dashed lines indicate ERCS time. See Table 4.1 for parameters used.

TABLE 4.1 – Physical variables used in this chapter.

Figure	$\begin{array}{c} X^{\rm a}_{0_{H_2O}} \\ [10^{-2}{\rm wt}\%] \end{array}$	$X^{a}_{0_{H_2O}}$ [M <sub>EO</sub> ]	$P_{H_2O}$ [bar]	$\begin{array}{c} X^{\rm a}_{0_{CO_2}} \\ [10^{-2}{\rm wt}\%] \end{array}$	$P_{CO_2}$ [bar]	Distance from the Sun [AU]	Incident solar flux $F_\downarrow$ [W.m^{-2}]	Clouds
Figure 4.2	3.76	1	269	1.25	89.9	0.723	1770	cloud-free
Figure 4.3	3.76	1	269	1.25	89.9	0.723	1770	clouds & cloud-free
Figure 4.4	3.76	1	269	1.25	89.9	0.723	1770	clouds
Figure 4.5	0.75 - 3.76	0.2 - 1	53.86 - 269	0.1 - 14	7.16 - 1002.9	0.63 - 1.10	2330.7 - 764.5	clouds & cloud-free
Figure 4.6	3.76	1	269	0.1 - 14	7.16 - 1002.9	0.63 - 1.10	2330.7 - 764.5	clouds & cloud-free
Figure 4.7	3.76	1	269	5	357.3	0.63 - 1.10	2330.7 - 764.5	clouds & cloud-free
Figure 4.8	0.75 - 3.76	0.2 - 1	53.86 - 269	0.1 - 14	7.16 - 1002.9	0.63 - 1.10	2330.7 - 764.5	clouds & cloud-free
Figure 4.9	0.75 - 3.76	0.2 - 1	53.86 - 269	0.1 - 14	7.16 - 1002.9	0.63 - 1.10	2330.7 - 764.5	clouds & cloud-free
Figure 4.10	3.76	1	269	0.5 - 5	35 - 350	0.723 & 1.00	1770 & 924	clouds & cloud-free

<sup>a</sup> Fractions relative to the initial MO mass ( $\approx 3.72 \times 10^{24}$  kg).

that the albedo increases with the  $CO_2$  partial pressure due to enhanced Rayleigh scattering. This explains the significant albedo difference compared to a fixed value of 0.2. The absorbed stellar flux is thus significantly lower than with an albedo of 0.2, but still negligible compared to the convective flux from the MO which dominates the outgoing radiation and the surface conditions at early times (before ERCS) (Figure 4.2c): there is no difference on the early evolution between these two cases. In a clearsky, the cooling effect due to Rayleigh scattering competes the heating effect of gaseous absorption. As cooling proceeds, H<sub>2</sub>O degassing increases atmospheric opacity. Then, more photons absorbed results in less photons scattered and the heating effect prevails over Rayleigh scattering (Clough et al., 2005; Pluriel, Marcq, and Turbet, 2018) (see equation 4.4). Thus, the albedo decreases with time until a stable water vapor pressure is reached at ERCS, corresponding to an approximate albedo value of 0.25 (Figure 4.2b).

This value is similar to what Kopparapu et al. (2013) and Hamano et al. (2015) obtained, and to the value assumed in our previous model, and so does the absorbed stellar flux. Although there are some quantitative differences, it does not significantly affect the surface conditions obtained at ERCS in this example. Since the albedo is higher than 0.2 at ERCS (Figure 4.2b), more incident stellar flux is reflected and thus, the surface receives less flux from the host star (Figure 4.2c). ERCS is reached slightly later in that case (Figure 4.2a). Conversely, if the albedo at ERCS was lower than 0.2, more sunlight would be absorbed, resulting in an earlier ERCS. So in cases where the albedo is significantly different than 0.2, both ERCS time and surface temperature will be strongly impacted. Details of albedo evolution and resulting albedo at ERCS will be extensively discussed in Section 4.3.4.

# 4.3.2 Thermal Evolution With and Without Clouds for a Given Volatile Content at Venus' Distance

Figure 4.3 compares the results either considering a thick cloud cover or no clouds, obtained with the same initial volatile content than in the previous section. The effect is drastic: without clouds, the surface is still molten at ERCS ( $T_{surf}(ERCS) > T_{solidus}$ ), while with a thick cloud cover, a water ocean overlays the solid surface (Figure 4.3a). This difference comes from the albedo value at ERCS which is much higher with clouds than in a clear sky (Figure 4.3b). Indeed, without clouds, the albedo decreases as the cooling proceeds because water vapor is degassed so that atmospheric opacity increases (Section 4.3.1). In the fully cloudy atmosphere, this effect is quickly overcame by clouds formation as soon as enough water vapor is degassed, in about 20 kyr (Figures 4.3b, 4.3d, and 4.4). Then, enough sunlight is reflected and the outgoing infrared flux  $F_{IR}$  decreases below the radiation limit of a steam atmosphere, also called Nakajima's limit (e.g., Nakajima, Hayashi, and Abe, 1992; Hamano, Abe, and Genda, 2013). Thereafter, the moist (water saturated) troposphere extends to the surface and a water ocean is formed consuming all the water in excess of saturation (Figures 4.3a, 4.3d, and 4.4).

Such an important and sudden drop of surface temperature occurring simultaneously with the formation of a water ocean might be explained as follows. Thermal equilibrium in planetary atmospheres not heated from below imposes that the outgoing thermal emission balances the absorbed incoming sunlight. Thus, if more incoming sunlight is absorbed, due to an increase of the stellar flux or due to more absorbent species in the atmosphere, more thermal radiation is emitted to space. However, an increase of surface temperature results in water evaporation, which increases the



FIGURE 4.3 – (a) Temperatures, (b) albedo, (c) heat fluxes and (d) atmospheric pressures during magma ocean cooling with a thick cloud cover (blue curves) and without clouds (red curves) for a planet located at Venus' distance. Vertical dashed lines indicate ERCS time. Atmospheric profiles at the times indicated by the colored crosses are drawn in Figure 4.4. See Table 4.1 for parameters used.



FIGURE 4.4 – Atmospheric temperature profiles at different times of the cooling of a magma ocean planet at Venus' distance with clouds (corresponding to Figure 4.3). The different times represented here are indicated with corresponding colored crosses of Figures 4.3a and 4.3b. Circles and squares respectively point out the top of the moist and dry tropospheres if existing. The moist troposphere (clouds) arises after t = 7.6 kyr, its vertical extension is indicated by the arrows. See Table 4.1 for parameters used.

amount of greenhouse gases in the atmosphere. On Earth, most of the thermal radiation is emitted through the water vapor absorption window  $(8-13 \,\mu\text{m})$ . So if enough water vapor is vaporized, the atmosphere might become optically thick, blocking escape of thermal radiation to space (Goldblatt and Watson, 2012; Goldblatt et al., 2013). In that case, thermal flux is no longer emitted to space from the surface but from the upper troposphere, where optical depth equals unity. Sunlight heats the upper troposphere from below as it penetrates deeper than the level from which thermal radiation is emitted. This level is characterized by a fixed temperature and a maximum radiation limit around 280 W.m<sup>-2</sup> (e.g., Nakajima, Hayashi, and Abe, 1992; Goldblatt et al., 2013; Leconte et al., 2013; Hamano, Abe, and Genda, 2013; Kopparapu et al., 2014; Marcq et al., 2017). This limited outgoing thermal flux precludes the cooling of the planet even for higher surface temperatures. Thus, if the planet absorbs more solar flux than this limit, radiation in excess cannot be emitted and results in a runaway greenhouse effect, increasing surface temperatures and vaporizing all the water ocean. This is defined as the runaway greenhouse state (e.g., Ingersoll, 1969; Nakajima, Hayashi, and Abe, 1992) which is responsible for an abrupt climatic transition. If the surface temperature is high enough to melt the surface, it radiates in the visible and near-IR (where water vapor is optically transparent), and the planet can loose heat through this window and cool down: the outgoing longwave radiation then increases above the radiation limit (Kasting, 1988; Kopparapu et al., 2013; Goldblatt et al., 2013). Conversely, in the magma ocean stage, we start with hot surface temperatures, where thermal radiation exceeds the radiation limit, and approach this limit as the cooling proceeds. If this limit is reached and if condensation occurs, a part of the atmospheric powerful  $H_2O$  IR absorber is trapped in the ocean. It decreases the amount of atmospheric water vapor and results in a strong decrease of surface temperature which allows to condense more water and so on: a "runaway cooling" occurs. Atmospheric water vapor being trapped in the ocean, it results in a decrease of water vapor pressure in the atmosphere that reduces the thickness of the cloud cover, and thus decreases the resulting albedo at ERCS (Figure 4.3d and 4.3b). Note that if water is the main component of the atmosphere (steam atmosphere), the climatic transition will be more abrupt than for  $CO_2$ -dominated atmosphere, where another IR absorber do not condense and stays in the atmosphere (Salvador et al., 2017).

Finally, clouds' albedo and their cooling effect overcomes their greenhouse effect. This net planetary cooling by clouds has also been emphasized in detailed reconstruction of Earth's radiation budget, and estimated around  $24.2 \,\mathrm{W.m^{-2}}$  (Zhang et al., 2004). Furthermore, as mentioned in Kopparapu et al. (2013), this dominance of the cooling effect is not surprising in a dense H<sub>2</sub>O atmosphere that is already optically thick in the thermal IR region, where clouds' thermal effect is then limited.

# 4.3.3 Influence of $H_2O$ , $CO_2$ and Solar Distance on the Formation of an Ocean

We then varied the initial  $CO_2$  and  $H_2O$  contents as well as the distance from the star D, with and without clouds. Given the large uncertainties regarding both the initial  $CO_2$  and  $H_2O$  contents of terrestrial planets (e.g., Sarda and Graham, 1990; Marty, 2012), and the possibly volatile-rich bodies among exoplanets (Grimm et al., 2018), we conducted calculations over a large range of volatile content to search for characteristic and global trends. Figure 4.5 shows whether or not a water ocean is formed at ERCS. The critical distance  $D_C$ , or inner edge of the temperate zone for  $H_2O$ -dominated atmospheres, corresponds to the minimum distance from the star

beyond which water ocean formation is possible at ERCS. Above a certain amount of initial CO<sub>2</sub>, this critical distance increases because surface temperature increases and can prevent water ocean condensation (Salvador et al., 2017). Conversely, for  $D < D_C$ , more CO<sub>2</sub> decreases atmosphere humidity ratio H<sub>2</sub>O/CO<sub>2</sub> and opacity. The lower blanketing effect results in lower surface temperatures that can be lower than the solidus temperature (Salvador et al., 2017). Thus, for a certain range of parameters, planets may have a solid surface (right side of the orange dashed line in Figure 4.5) without a water ocean, adding a third type of planets to the two types pointed out by Hamano, Abe, and Genda (2013) (see Salvador et al. (2017) and Figure 4.5).

We call the limit separating planets where no ocean (type II and III) and where an ocean is formed (type I) the condensation limit. For low CO<sub>2</sub> contents, the corresponding smallest distance is constant and corresponds to the critical distance  $D_C$ . Above the CO<sub>2</sub> content for which the condensation limit departs from the critical distance, this condensation limit is shifted towards smaller CO<sub>2</sub> contents when the water content decreases. Indeed, lower initial water content reduces P<sub>H<sub>2</sub>O</sub> at ERCS. Thus, saturation vapor pressure can be reached only for smaller CO<sub>2</sub> concentrations (Salvador et al., 2017). Interestingly, with clouds, the condensation limit is shifted towards the Sun: the clouds cooling effect allows temperate conditions and water ocean formation closer to the star (Selsis et al., 2007) (Section 4.3.2). Moreover, the evolving albedo is higher at ERCS (Section 4.3.4) and also acts to decrease surface temperature and extends water ocean formation to higher CO<sub>2</sub> contents (see Section 4.4.1 for a comparison). Note that at large distances from the Sun, surface temperatures are below 273.15 K and water freezes (right side of the blue dashed line of Figure 4.5).



FIGURE 4.5 – Condensation limits (plain lines) at ERCS for an Earthlike planet orbiting a faint young Sun at different distances, as a function of H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>, and cloud coverage. Below those limits, a water ocean is formed at ERCS. The orange dashed line separates cloudfree planets with a molten (left side), and with a solid surface (right side) at ERCS, for an initial water content  $[H_2O]_{t_0} = 1 M_{EO}$ . The blue dashed line represents the distance beyond which water freezes when clouds are considered for  $[H_2O]_{t_0} = 1 M_{EO}$ . See Table 4.1 for parameters used.

### 4.3.4 Albedo Evolution and Albedo at ERCS

In both cloud schemes presented here, two opposite behaviors arise from either sides of the critical distance regarding the albedo due to water ocean formation (Figures 4.6c-4.6d, and 4.7). Without clouds and below  $D_C$ , going farther away from the Sun first results in a tiny decrease of the albedo. Then, beyond  $D_C$ , the albedo increases with the distance from the star (Figures 4.6c and 4.7). The opposite behavior is observed when considering clouds: as D increases, the albedo first increases until the critical distance; then beyond the critical distance, the albedo decreases (Figures 4.6d and 4.7). These different trends can be understood by looking at the processes controlling albedo evolution.

Figure 4.7a (cloud-free case) emphasizes different albedo evolutions depending on the distance from the star. At most, three subsequent regimes can be identified: a first one in which the albedo decreases with time, a second one where the albedo increases, and a third one where the albedo is constant. The two last regimes are only experienced by planets located far enough from the star, beyond  $D_C$ . As described



FIGURE 4.6 – (a-b) Surface temperature, and (c-d) albedo calculated at ERCS, as a function of the initial CO<sub>2</sub> content and solar distance, considering an Earth-like planet without (left column) and with clouds (right column), for  $[H_2O]_{t_0} = 1 M_{EO}$ . The black isotherm stands for the solidus temperature, beyond which the surface is molten at ERCS. The white isotherm indicates the location of the critical temperature of water  $T_C = 647$  K, beyond which water cannot condense at the surface. With clouds, and for large distances, the white area shows where surface temperatures are below 273.15 K so that water is frozen. Note that for the albedo, opposite behaviors appear both from either side of the critical distances, and between the clear and cloudy sky. See Table 4.1 for parameters used.



FIGURE 4.7 – Albedo evolution for different distances from the Sun, considering (a) a clear-sky or (b) clouds. Three different regimes are evidenced in both cases for D = 0.89 AU (blue areas). Note that water ocean formation results in an increase of the albedo without clouds (a), while it leads to a decrease of albedo with clouds (b).  $[H_2O]_{t_0} = 1 M_{EO}$  and  $[CO_2]_{t_0} = 5 \times 10^{-2}$  wt%. See Table 4.1 for parameters used.

in Section 4.3.2, without clouds, the albedo decreases with water vapor degassing as atmospheric opacity increases. Early in the first regime, the water vapor degassing is controlled by the cooling of the magma ocean which is independent of the orbital distance  $(F_{conv} \gg F_{abs})$ : the albedo decreases similarly for all distances. Then, approaching ERCS, the absorbed stellar flux becomes the main parameter controlling the surface temperature, the MO degassing and solidification: more water is degassed for lower surface temperatures (i.e., for larger distances). Concerning planets located below  $D_C$ , it induces slightly lower albedo values at ERCS for distances closer than  $D_C$ . As an example, for  $[CO_2]_{t_0} = 5 \times 10^{-2} \text{ wt\%}$  at D = 0.63 AU the molten mantle contains more dissolved water than the solidified mantle at D = 0.77 AU, so that the albedo is slightly higher at D = 0.63 AU (Figures 4.6c and 4.7a). Furthermore, increasing the  $CO_2$  content increases Rayleigh scattering, and thus, the albedo (Figure 4.6c). Far enough from the star, beyond the critical distance  $D_C$  only, this first regime is followed by an increase of the albedo due to water ocean formation. Indeed, atmospheric water vapor is trapped into the ocean, thus reducing the atmospheric humidity ratio  $(H_2O/CO_2)$  and IR opacity. Photons not absorbed are then scattered which is responsible for the albedo increase. Far from the star, more water is trapped in deeper oceans: atmospheres are then less opaque to IR radiation. Thus, the albedo at ERCS increases with the distance from the star.

With clouds (Figure 4.7b), three subsequent trends are also identified during the MO cooling: the albedo first decreases, then increases, and finally suddenly decreases. The first albedo-decrease stage can be explained as previously: with water vapor degassing, opacity/absorption increases which results in less photons scattered. Then, subsequent clouds formation increases the albedo (Section 4.3.2). Below the critical distance  $D < D_C$ , the end of the rapid cooling stage is reached during this second phase. Colder surface temperatures allow for thicker clouds: the albedo at ERCS increases as the planet gets closer to the critical distance. The last phase, characterized by a sudden albedo decrease is due to water ocean formation, that makes the clouds thinner and less reflective. The deeper the ocean, the thinner the clouds and the more important is the albedo decrease. Thus, beyond  $D_C$ , the albedo at ERCS is lower for

planets farther from the star (Figures 4.6d and 4.7b).

#### 4.3.5 Scaling Analysis

As introduced in Salvador et al. (2017), we can express the volatile content as a single dimensionless parameter  $x^*$  that takes into account both contribution of H<sub>2</sub>O and CO<sub>2</sub> on the surface conditions and formation of an ocean at ERCS:

$$x^* = \frac{P_{CO_2}}{P_{CO_2} + P_{H_2O}},\tag{4.8}$$

where  $P_{CO_2}$  and  $P_{H_2O}$  stand respectively for the equivalent atmospheric partial pressures of CO<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>O initially dissolved within the MO. Thus,  $x^* < 0.5$  for H<sub>2</sub>Odominated atmospheres, while  $x^* > 0.5$  for CO<sub>2</sub>-dominated atmospheres.

Figure 4.8 shows how all the condensation limits of Figure 4.5 collapse using  $x^*$ . The resulting fits delimit two domains, one in which a water ocean is present at ERCS, and another one where either the distance from the star or the volatile content prohibits water condensation at the surface. The critical volatile content  $x_C^*$  to condense a water ocean, for a planet located at a distance D from the host star, is given by (Salvador et al., 2017):

$$x_C^* = a \times (D - D_C)^n, \tag{4.9}$$

where the critical distance  $D_C$  and the coefficients *a* and *n* are defined in Table 4.2. Note that they differ from Salvador et al. (2017) in the cloud-free sky because the albedo is now calculated rather than imposed, and because of the different stellar constants used (see Section 4.4.1). Unsurprisingly, the net cooling effect of a cloud cover allows for colder surface temperature, both closer to the star and for richer  $CO_2$  atmospheres, respectively shifting the critical distance towards the Sun and the condensation limit to higher  $CO_2$  contents.

Assuming an initial  $CO_2$  content of 90 bar, we can use equations 4.8 and 4.9 to estimate the corresponding minimum amount of water needed to form a primitive ocean on Venus. Accretionary models combined with geochemical evidences support important and early water delivery for Venus (e.g., Raymond, Quinn, and Lunine, 2007; Morbidelli et al., 2012). Moreover, deuterium to hydrogen ratio measurements (D/H), showing a strong enrichment of deuterium, may indicate large primordial water endowment (Donahue et al., 1982). However, this has been suggested that it may not reflect the primordial water abundance (Grinspoon, 1987). Also, due to the similar bulk densities of the Earth and Venus, and their close proximity in the solar system, it seems reasonable to assume a similar water content for both planets (e.g., Titov et al., 2013). Here, we show that for 90 bar pressure of  $CO_2$ , only 25 bar ( $\approx$  $0.09 M_{EO}$ ) of water from accretionary material is sufficient to form a water ocean on Venus (see Figure 4.9). It suggests that Venus had most likely condensed a water ocean at ERCS, early in its history, starting its solid-state mantle convection with similar surface conditions than the Earth. Table 4.3 compares different studies and the corresponding location of the inner edge of the temperate zone. Note that studies considering a thick cloud cover find a critical distance compatible with this conclusion.



FIGURE 4.8 – Condensation limits (× markers) and corresponding fits (dashed lines, equation 4.8) to predict water ocean formation at ERCS, on an Earth-like planet orbiting a faint young Sun at different distances, as a function of  $x^*$ , with (blue) and without clouds (red). Condensation limits in green are drawn from Salvador et al. (2017), when considering no clouds, a constant albedo  $\alpha$  equal to 0.2, 0.44, or 0.8 during the cooling of the MO, and using the incident stellar flux as defined in equation 4.5. The greenhouse effect of clouds is responsible for shifting the critical distance obtained with  $\alpha = 0.8$  (green arrow) to the one obtained with clouds (blue arrow). See Tables 4.2 and 4.1 for parameters used.

TABLE 4.2 – Coefficients to be used in equation 4.9 to draw the condensation limits separating planets where water ocean formation occurs or not at ERCS.

Reference	Rad. transfer	Clouds	Albedo	Solar irradiance $[S_{\odot}]^{a}$	Critical incident flux $F_{\downarrow C}$ [W.m <sup>-</sup> 2]	$D_C$ [AU]	a	n
Salvador et al. (2017)	grey k-correlated	cloud-free cloud-free	0.2 0.2	$0.714 \\ 0.714$	328.4 328.4	$0.86 \pm 0.03$ $0.86 \pm 0.03$	$0.82 \\ 0.902$	$0.05 \\ 0.128$
This study	k-correlated	cloud-free cloud-free cloud-free cloud-free clouds	0.2 0.44 0.8 variable variable	0.679 0.679 0.679 0.679 0.679	327.4 471.4 1315.8 $347.7\pm4.3$ 469.4 $\pm6.7$	$\begin{array}{r} 0.84 \\ 0.70 \\ 0.419 \\ 0.815 {\pm} 0.005 \\ 0.7015 {\pm} 0.005 \end{array}$	0.902 0.902 0.902 0.90302 1.1467	0.128 0.128 0.128 0.11076 0.10008

<sup>a</sup>With  $S_{\odot} = 1360.8 \, \text{W.m}^{-2}$  (Kopp and Lean, 2011).



FIGURE 4.9 – Water ocean formation at ERCS, on an Earth-like planet orbiting a faint young Sun at different distances, as a function of  $x^*$ , with (blue) and without clouds (red). From bottom-up, stars indicate Venus' position for  $[H_2O]_{t_0}=1$  M<sub>EO</sub>, 0.09 M<sub>EO</sub> and for the current water vapor content. See Table 4.1 for parameters used.

# 4.4 Discussion

## 4.4.1 Influence of the Albedo on the Location of the Inner Edge of the Temperate Zone

### Clear-Sky

As can be seen in Figure 4.8, the water ocean formation area presented in Salvador et al. (2017), without clouds and using a constant albedo  $\alpha = 0.2$ , is restricted to lower CO<sub>2</sub> contents (lower  $x^*$ ) and to farther distances. Thus, the parameter space for water ocean formation at ERCS is enlarged in the present work compared to Salvador et al. (2017). Indeed, for CO<sub>2</sub>-dominated atmosphere ( $x^* > 0.5$ ), the albedo calculated at ERCS is higher than previously assumed (Section 4.3.4, Figure 4.6c), allowing for colder surface temperatures: more CO<sub>2</sub> and more incident flux is then required to prevent water ocean formation. It emphasizes the importance of the initial CO<sub>2</sub> content on the primitive surface conditions of terrestrial planets (Salvador et al., 2017).

### Cloudy-Sky

When clouds are present, the critical distance is shifted closer to the star and the water ocean formation is extended to higher  $CO_2$  contents than in a clear-sky. Indeed, the cooling effect of clouds' albedo overcomes their blanketing effect, providing temperate surface conditions for a wider parameter space.

Note that assuming a constant albedo value is equivalent to model the visible effect of clouds by assuming that the cloud layer is at the ground (Kasting, 1988). By doing so, any thermal blanketing of clouds is neglected. Condensation limits assuming higher albedo thus mimic the visible effect of clouds without thermal blanketing. Such limits are drawn for different albedo values in Figure 4.8. An albedo of  $\alpha =$ 0.44 matches the critical distance obtained with clouds (visible and thermal effects included), while the effective albedo calculated at that distance is around 0.8 (Figure 4.6d). However, assuming a constant albedo  $\alpha = 0.8$ , we obtain a critical distance  $D_{C\alpha=0.8} = 0.42$  AU, which is much closer to the star than the distance calculated in this work where  $D_{C clouds} = 0.7$  AU. This difference comes from the greenhouse effect of clouds: assuming an albedo of 0.8 without considering the thermal blanketing would lead to temperate surface conditions much closer to the star. However, the heating effect of clouds prevents water ocean formation and shifts the critical distance farther away from the star. Furthermore, compared to the condensation limit obtained with  $\alpha = 0.44$ , water ocean formation is extended to higher CO<sub>2</sub> contents: the cooling effect of clouds albedo in that case allows for water ocean formation, even for more opaque  $CO_2$ -dominated atmosphere.

### 4.4.2 Importance of Atmospheric Escape

Our model does not take into account atmospheric escape and it is worth examining this simplification in the light of previous modeling. Hamano, Abe, and Genda (2013) studied systematically the evolution of a coupled MO–H<sub>2</sub>O atmosphere without CO<sub>2</sub> and taking into account atmospheric escape. Their results show that hydrodynamic escape affects significantly the water budget only on a timescale of about  $\tau_{esc} \approx$ 100 Myr. Other studies of atmospheric escape provide similar (Gillmann, Chassefière, and Lognonné, 2009) or even larger (Kasting and Pollack, 1983) timescales. Indeed, Hamano, Abe, and Genda (2013) showed that for a type II planet, located too close to the star to condense a water ocean, a MO can be sustained for  $\tau_{esc} \approx$  100 Myr, until enough water is escaped for the greenhouse effect to be efficient. From then on, the planet loses heat which is the only way to (slowly) solidify the MO. The planet is thus dessicated mainly during the MO stage.

On the contrary, type I planets, located farther away from the star, solidify within a few million years. Hydrodynamic escape does not significantly affect the water inventory during such a short period, and the retained water forms the earliest oceans. Similarly, Salvador et al. (2017) and our present results show that water ocean formation and solidification can occur at ERCS within several million years, so that atmospheric escape should not have time to prevent water ocean formation. By the same token, the presence or not of atmospheric escape should not influence the limit of water ocean formation. And indeed, Table 4.3 shows that our studies find  $D_C$  values similar to Hamano, Abe, and Genda (2013) and Hamano et al. (2015) in the absence of clouds. Moreover, for a Venusian cloudy and wet case, we find that solidification occurs and ERCS is reached in less than 4 Myr (Figure 4.3), so again much faster than  $\tau_{esc} \approx 100 \,\mathrm{Myr} \gg t_{ERCS}$ . Thus, atmospheric escape, being effective over a larger timescale than ERCS timescale, would not affect the likelihood of early water ocean formation. Similarly, for type III planets (i.e., solid surface without water ocean at ERCS), ERCS is reached much faster than  $\tau_{esc}$  so that surface conditions calculated at ERCS should again not be sensitive to atmospheric escape. On the other hand, atmospheric escape will have to be considered for the long-term evolution of both molten planets at ERCS and solid-state planets, starting from ERCS conditions, but it is beyond the scope of this work.

### 4.4.3 Inheritance from the Magma Ocean Cooling

#### The Early Earth

To discuss surface conditions inherited from the MO cooling stage, we consider a minimal initial water endowment of one Earth ocean, and three different scenarios for initial CO<sub>2</sub> delivery. (i) If H<sub>2</sub>O and CO<sub>2</sub> are initially in chondritic proportions  $([H_2O] = 10 \text{ wt\%}$  and  $[CO_2] = 11 \text{ wt\%}$ ), then  $[CO_2]_{t_0} = 295 \text{ bar}$ , slightly higher than inventories of CO<sub>2</sub> in the crust and mantle estimated by Zhang and Zindler (1993):  $[CO_2]_{t_0} = 215 \text{ bar}$ . (ii) Another constraint is given by CO<sub>2</sub> currently tied up in carbonates; estimations suggest an initial content of  $[CO_2]_{t_0} = 60 \text{ bar}$  (Ronov and Yaroshevsky, 1969; Holland, 1978). (iii) As an intermediate case, the proximity of the Earth and Venus in the solar system suggests similar volatile endowment for both planets; in that case, we can use the current CO<sub>2</sub> content of Venus' atmosphere as the initial content:  $[CO_2]_{t_0} = 90 \text{ bar}$ .

In the three cases, a water ocean is formed at ERCS for clear-sky atmosphere. But surface conditions differ since water ocean depth, atmospheric pressures, and surface temperatures at ERCS depend on the initial CO<sub>2</sub> content (Figure 4.10). However, in a cloudy-atmosphere, surface temperature decreases below the freezing point of water and results in a frozen early stage. Without clouds, a hot water ocean is present at ERCS ( $T_{surf} \approx 230 \,^{\circ}$ C, depending on  $[CO_2]_{t_0}$ ), and favors a classically expected hot early environment triggered by CO<sub>2</sub> greenhouse effect (Kasting and Ackerman, 1986; Sleep and Zahnle, 2001; Sleep, Zahnle, and Neuhoff, 2001; Zahnle et al., 2007). From these hot surface temperatures, CO<sub>2</sub> dissolution within the ocean might help to reach suitable conditions for extremophile organisms (e.g., Sleep and Zahnle, 2001; Zahnle, Schaefer, and Fegley, 2010). Note that shallower oceans are found for higher CO<sub>2</sub> contents as discussed in Salvador et al. (2017). On the contrary, with clouds, the surface temperature at Earth's distance becomes lower than 273.15 K ( $T_{surf} < 0 \,^{\circ}$ C), and water freezes (Section 4.3.3, Figures 4.6b, 4.6d and 4.7b). Cool and clement Hadean surface conditions are in agreement with early (>4 Gyr) zircons analysis. Indeed, Boehnke et al. (2018) recently reported the formation of high-silica Hadean continental crust, which requires relatively cold and wet conditions, between 4.2 Gyr and 4.4 Gyr ago. Also, potentially biogenic carbon in detrital zircons supports temperate conditions for the emergence of life as early as 4.1 Gyr ago (Bell et al., 2015), and are consistent with early origins of life (Battistuzzi, Feijao, and Hedges, 2004). These recent studies support older measurements of heavy oxygen-rich zircons, produced by low-temperature interactions between rocks and liquid water (Wilde et al., 2001; Mojzsis, Harrison, and Pidgeon, 2001), and Hadean zircons' crystallization temperatures (Watson and Harrison, 2005), that both likely witness Hadean water ocean earlier than 4 Gyr ago. Sedimentary component of Hadean granitoids even suggest fluvial erosion under clement climate 4.4 Gyr ago (Valley et al., 2002; Ushikubo et al., 2008; Arndt and Nisbet, 2012, for a review). The increase of the solar constant combined with clouds dissipation might provide a way to reach such early temperate conditions from a frozen state.

To address the long-term evolution of the planet, other processes will have to be considered such as the brightening Sun and the  $CO_2$  dissolution within the ocean (see Zahnle, Schaefer, and Fegley, 2010, for a discussion). Determinant feedbacks between the different reservoirs will also need to be included. This is beyond the scope of this paper but the surface conditions obtained here can be used as starting points to simulate the long-term evolution of the solid-state planet (Gillmann and Tackley, 2014; Foley, Bercovici, and Elkins-Tanton, 2014; Foley and Driscoll, 2016).

### Early Venus

In the clear-sky case, Venus' proximity with the Sun does not allow the solidification of its surface at ERCS with  $T_{surf} \approx 1620 \text{ K} > T_{solidus}$  (assuming  $[\text{H}_2\text{O}]_{t_0} = 1 \text{ M}_{\text{EO}}$ and  $[\text{CO}_2]_{t_0} = 90 \text{ bar}$ ). The ERCS is reached in less than a million years. On a longer time-scale, Venus subsequent evolution and its eventual solidification will be controlled by atmospheric escape: as shown by Hamano, Abe, and Genda (2013), H escape will slowly dessicate the atmosphere, reducing its water content, and therefore its greenhouse effect. This will lead to a slow decrease of Venus surface temperature and its eventual solidification in about 100 Myr.

On the other hand, including the development of clouds in the calculation allows the formation of a water ocean on early Venus, as shown in Sections 4.3.2 and 4.3.5. For  $[H_2O]_{t_0} = 1 M_{EO}$  and  $[CO_2]_{t_0} = 90$  bar, the surface temperature at ERCS  $T_{surf} \approx$ 393 K and the presence of a 1850 meters deep water ocean (Figure 4.10) would then be suitable conditions for the extremophile organisms living on Earth (Kashefi and Lovley, 2003; Takai et al., 2008), and thus potentially favorable conditions for the emergence of life. This scenario is compatible with the high D/H ratio of Venus atmosphere, which suggests that early Venus was much more enriched in water than it is today (Donahue et al., 1982). This also reveals that the current surface conditions on Venus might not be inherited from the magma ocean stage, but are instead due to the subsequent evolution of the planet.

If Venus started with a water ocean, the current dry atmosphere requires an efficient loss of water. First, water could have been lost directly to space during small impacts (e.g., Schlichting and Mukhopadhyay, 2018). Second, water loss could have been controlled by hydrogen escape. This would require for the ocean first to be vaporized, then photo-dissociated in the upper atmosphere (e.g., Hoyle, 1955; Ingersoll, 1969; Watson, Donahue, and Walker, 1981) where the hydrogen would escape to space



FIGURE 4.10 – Surface temperature (upper panel) and water ocean depth (lower panel) at ERCS, as a function of the initial CO<sub>2</sub> content, at Earth's distance (blue curves) and Venus' distance (red curves), for both clear-sky (dashed lines) and cloudy (plain lines) atmospheres.  $[H_2O]_{t_0}=1$  M<sub>EO</sub>, crosses correspond to the three  $[CO_2]_{t_0}$  cases mentioned in the text:  $[CO_2]_{t_0} = 60$  bar,  $[CO_2]_{t_0} = 90$  bar or  $[CO_2]_{t_0} = 295$  bar. See Table 4.1 for parameters used.

TABLE 4.3 – Estimates of the inner edge of the temperate zone from different studies and corresponding parameters. Double horizontal line separates coupled MO-atmospheric model from atmospheric models.

Reference	Dimension	Rad. transfer	Clouds	Albedo	Stellar constant $S_{\odot}$ [W.m <sup>-2</sup> ]	$D_C$ [AU]	Radiation limit [W.m <sup>-2</sup> ]
Lebrun et al. (2013)		non-grey		$0.2^{*}$	957	0.66	200
Hamano, Abe, and Genda (2013)	1–D	grey	cloud-free	$0.3^{*}$	$0.7S_{\odot}$	0.76	294
Hamano et al. (2015)		non-grey		$0.2^{**}$	$0.7S_{\odot}$	0.83	280
Salvador et al. (2017)		non-grey		$0.2^{*}$	972	0.86	280
This study	1–D	non-grey	cloud-free	0.3**	924	0.815	280
1 ms study			clouds	$0.8^{**}$		0.7015	280
Kasting, Whitmire, and Reynolds (1993)	1–D	non-grey	cloud-free	0.35**	1360	$0.84 - 0.95^{\mathrm{a}}$	310
		non-grey	cloud-free	0.35**		$0.84 - 0.95^{a}$	
Selsis et al. (2007)	1–D		50% clouds	$0.6^{**}$	1360	$0.68 - 0.76^{\rm a}$	300
			100% clouds	$0.8^{**}$		$0.46 - 0.51^{a}$	
Kitzmann et al. (2010)	1–D		clouds	0.26**	1366	0.87	×
Abe et al. (2011)	3–D	non-grey	clouds	×	1360	0.77	×
Goldblatt et al. (2013)	1-D		cloud-free	$0.16^{**}$	1368 <sup>b</sup>	1.02	282
Kopparapu et al. (2013)	1-D		cloud-free	$0.193^{**}$	1360	$0.97 - 0.99^{\rm a}$	$280^{b}$
Leconte et al. (2013)	3–D		clouds	$0.19^{**}$	1364	0.95	282
Vladilo et al. (2013)	1–D	EBM	clouds	0.32	1361.6	0.82	×
Zsom et al. (2013)	1–D		cloud-free	$\alpha_{surf} = 0.8^*$	1360	0.38	×
Yang et al. (2014)	3–D	non-grey	clouds	$0.63^{**}$	1360	0.67	×
Wolf and Toon (2015)	3–D		cloud-free & clouds	$0.26^{**}$	1361.27	0.94	282
Way et al. (2016)	3–D		clouds	×	${<}1{\cal S}_{\odot}$	$<\!0.72$	×

<sup>a</sup>Moist-greenhouse/water loss limit. <sup>b</sup>From Ramirez et al. (2014). \*\*Calculated albedo.

<sup>\*</sup>Fixed albedo.

 $\times$  Not specified.

(Kasting, 1988), while the oxygen left would react with reduced gases in the atmosphere (Dayhoff et al., 1967) and reduced minerals (Walker, 1975) at the surface (e.g., Kasting and Pollack, 1983; Lammer et al., 2008; Luger and Barnes, 2015). A combination of crustal hydration and hydrogen escape has also been proposed by Lécuver. Simon, and Guyot (2000). Ocean vaporization can be achieved if the absorbed stellar flux exceeds the critical value, leading the planet to enter into a runaway greenhouse state (Simpson, 1927; Komabayasi, 1967; Ingersoll, 1969; Kasting, Pollack, and Ackerman, 1984; Kasting, 1988; Nakajima, Hayashi, and Abe, 1992). Several mechanisms might be involved to increase surface temperature and evaporation: giant impacts and subsequent heat release (e.g., Safronov, 1978; Tonks and Melosh, 1993), greenhouse gases supply (e.g., Morbidelli et al., 2012), the long term increase of Sun's luminosity (e.g., Gough, 1981; Bahcall, Pinsonneault, and Basu, 2001), or volcanic outgassing (e.g., Gillmann and Tackley, 2014). Note that a moderate outgassing in a stagnant lid regime might dissipate clouds in about 30 Myr (Bullock and Grinspoon, 2001) and would also warm the surface because of the albedo decrease. In addition, the absence of a magnetic field (e.g., Brain et al., 2016) or a strong extreme-ultraviolet (XUV) irradiation as expected for the early Sun (e.g., Lammer et al., 2003; Gillmann, Chassefière, and Lognonné, 2009) enhances atmospheric escape. On the other hand, Yang et al. (2014) showed that the inner edge of the temperate zone is shifted towards the Sun for slowly rotating planets (Table 4.3), implying that given its current slow rotation period, Venus would have keep its water and would still be habitable. This further suggests that Venus was rotating faster earlier during its history when it entered the runaway greenhouse and lost its water.

Finally, water could also have been re-injected into the solid-state mantle during subduction favored by water lubrication (Regenauer-Lieb, Yuen, and Branlund, 2001). Despite the fact that Venus interior is poorly constrained (e.g., Dumoulin et al., 2017), it has been proposed that this mechanism could be an alternative to atmospheric loss on Venus (Albarède and Blichert-Toft, 2007; Albarède, 2009).

### 4.5 Conclusion

If a thick cloud cover develops during magma ocean cooling and solidification, a primitive water ocean most likely forms on early Venus, for a volatile content compatible with water delivery estimations on terrestrial planets at the time of their formation. Assuming Venus' current  $CO_2$  content:

- 0.09 Earth ocean mass is sufficient to form a water ocean at Venus' distance;
- for an initial water content of one Earth ocean mass, the surface temperature at ERCS  $T_{surf} \approx 390$  K and the presence of a ~1850 meters deep ocean would produce suitable conditions for extremophile organisms, and thus potentially for the emergence of life.

The current surface conditions on Venus might not be inherited from the magma ocean stage, but would instead be due to the subsequent evolution of the planet. From early temperate conditions, water could have been lost through atmospheric escape, impact processes or even re-injected into the mantle. A more precise knowledge of the post-MO mantle convection regime as well as the initial and current volatile composition of Venus' atmosphere and mantle is needed to infer primitive surface conditions and the fate of water.

On early Earth, for cloud-free atmospheres, the CO<sub>2</sub> greenhouse effect leads to a classically depicted hot early Earth ocean ( $T_{surf} \approx 470$  K). However for fully cloudy atmospheres, heating mechanisms are required to leave a frozen stage, and match with early temperate conditions for the origins of life in agreement with recent Hadean zircon analysis.

Finally, depending on the cloud cover, the Earth and Venus might not be as different as previously thought at the end of the magma ocean stage. Primitive conditions predicted here can be used as initial conditions to further simulate the long-term evolution and investigate how these planets diverged.

# Chapter 5

# Primitive Evolution and Early Habitability of Rocky Exoplanets

The content of this chapter, excluding the perspectives section, has been presented as an oral presentation at the "Water during Planet Formation and Evolution" workshop, held at the University of Zurich in February 2018. It is to be submitted in the Astrophysical Journal Letters for publication after the ongoing update of the opacity database.

# Abstract

Recent discoveries of potentially temperate rocky planets stimulate a better characterization of their surface conditions in the search for extraterrestrial life in the universe. The inner edge of the habitable/temperate zone, which is the circumstellar area where liquid water can be found at a planet's surface, is shown to locate farther from host stars with low effective temperature. However, this result is based on atmospheric models that make strong assumptions regarding the planetary surface conditions. The cooling of the magma ocean (MO) in interaction with the outgassed atmosphere sets the primitive conditions of the subsequent evolution of the planet and influences water ocean formation. A better characterization of this early evolution stage is necessary to investigate the habitability of exoplanets. Using our 1–D thermal evolution model, we simulate the cooling of the magma ocean surrounded by  $H_2O-CO_2-N_2$  clear and cloudy atmospheres, for planets orbiting stars colder than the faint young Sun (G, K, and M stars). We investigate the relative influence of  $H_2O$  and  $CO_2$  on the surface conditions resulting from the cooling. The presence of a primitive liquid water ocean is strongly related to both the initial amount of volatiles and the stellar properties. A scaling law accounting for both contributions is derived to predict early water ocean formation. The primitive surface conditions can then be used as starting points to simulate further planetary interior and atmosphere evolution.

## 5.1 Introduction

As of 2018 August, and since the first detection of an exoplanet orbiting a mainsequence star in 1995 (Mayor and Queloz, 1995), 3778 planets beyond our solar system have been discovered and confirmed<sup>1</sup>. 2737 supplementary candidates are yet to be confirmed. Among these exoplanets, recent discoveries of potentially temperate rocky planets (e.g., Borucki et al., 2013; Anglada-Escudé et al., 2013; Torres et al.,

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>From NASA Exoplanet Archive.

2015; Anglada-Escudé et al., 2016; Gillon et al., 2017) motivate a better characterization of their habitability to select targets for further observations in the search for extraterrestrial life.

The habitable zone is classically defined as the circular region around a star where liquid water can be sustained at the surface of a rocky planet (e.g., Kasting, Whitmire, and Reynolds, 1993). This concept has been extensively used as a target selection tool, to define observing strategies, and to design missions for further observations (e.g., Chandler, McDonald, and Kane, 2016; Coughlin et al., 2016; Kane et al., 2016).  $H_2O-CO_2$  atmospheres have been mostly considered for several reasons. The most obvious is that life, as we know it on Earth, relies on the presence of liquid water that needs to be abundant to form oceans. Also, life is based on carbon organic chemistry and its property to become more and more complex to create the building blocks of life. Water and carbon dioxide also appear to be abundant in the atmosphere of terrestrial planets of our solar system (Venus and Mars atmospheres are made of ~96% of  $CO_2$ ). Finally, their ability of blocking the escape of thermal radiation to space makes them critical in controlling planetary surface temperature, a key parameter for the presence of liquid water.

The closest distance from the star where liquid water can be sustained at the surface of a planet represents the so-called inner edge of the habitable zone (IHZ). Two cases can be distinguished: the moist and the runaway greenhouse limit (Kasting, 1988). In the moist greenhouse state, water vapor is a major constituent of the troposphere and the stratosphere becomes wet. Water vapor in the upper atmosphere is prone to strong photo-dissociation, followed by hydrogen escape to space. It is a stable climate state as the radiative equilibrium between the incoming absorbed stellar flux and outgoing radiation can be achieved. However, the rapid water loss is able to dessicate a planet, ruling out its habitability (Kasting, Whitmire, and Reynolds, 1993; Kopparapu et al., 2013). The runaway greenhouse limit is a more optimistic inner edge: it is located closer to the star. An excess of absorbed stellar flux relative to the outgoing infrared flux at the top of the atmosphere triggers an increase of water evaporation. More water in the gas phase increases atmospheric opacity which increases surface temperature. Atmospheric water vapor can then become abundant enough to thermally/optically insulate the atmosphere, which is no longer able to radiate the excess of heat to space. This runaway greenhouse leads rapidly and inescapably to the complete vaporization of the ocean under high surface temperatures. This climate state can be stabilized only when the surface is able to radiate at visible wavelength, where the water vapor opacity is negligible. Then, the outgoing radiated flux can again balance the incoming absorbed stellar flux and radiative equilibrium can be achieved (e.g., Simpson, 1927; Komabayasi, 1967; Ingersoll, 1969; Nakajima, Hayashi, and Abe, 1992). Because  $H_2O$  is the condensable greenhouse gas responsible for this destabilizing feedback, most future of Earth's climate simulations (increasing the solar radiation from present Earth's conditions, e.g., Goldblatt et al., 2013; Leconte et al., 2013) and IHZ studies (e.g., Kasting, Whitmire, and Reynolds, 1993; Selsis et al., 2007; Kopparapu et al., 2013; Wolf et al., 2017) considered H<sub>2</sub>O-dominated atmospheres. Habitability of dry desert planets has also been investigated and shown to be possible much closer to the host stars (Abe et al., 2011; Zsom et al., 2013; Kodama et al., 2015). Note that planetary gravity (Pierrehumbert, 2010; Kopparapu et al., 2014) and background gas<sup>2</sup> concentration (Goldblatt et al., 2013; Ramirez, 2018) also influence the IHZ insolation threshold.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Such as  $N_2$  or  $NH_3$ .

Concerning the outer edge of the habitable zone (OHZ), its location is determined by a maximum greenhouse limit triggered by  $CO_2$  atmospheric concentration. Indeed, at large distances from the star, the carbonate-silicate cycle is responsible for an accumulation of volcanic outgassed  $CO_2$  in the atmosphere. This increases the runaway greenhouse and maintains surface temperatures above the freezing point of water (e.g., Kasting, Whitmire, and Reynolds, 1993). However, beyond a certain atmospheric pressure of  $CO_2$ , it starts to condense out of the atmosphere. In addition to this, the enhanced reflectivity at such  $CO_2$  concentrations reduces the greenhouse effect and surface temperatures become too cold to sustain liquid water at the surface.  $CO_2$  is thus determinant regarding the OHZ location and  $CO_2$ -rich atmospheres are then usually considered (e.g., Ramirez, 2018, for an extensive review of the different HZ limits and related processes).

Despite the importance of  $H_2O$  for the location of the inner edge of the habitable zone, it has been recently shown that the IHZ around the young Sun can be strongly shifted outward for CO<sub>2</sub>-dominated atmospheres (Salvador et al., 2017; Salvador et al., 2018 sub.). Thus, the relative amount of  $H_2O$  and  $CO_2$  has to be considered to address early water ocean formation and habitability. Furthermore, with the current uncertainties regarding the amount of volatiles initially delivered to the terrestrial planets of the solar system, and the lack of direct measurements from extrasolar systems, it is necessary to enlarge the range of initial volatile content usually considered for habitability studies. Note that the volatile content of the Trappist-1 planets (Gillon et al., 2017) has recently been estimated to be surprisingly high compared to what we observe in the solar system (Grimm et al., 2018). Thus, those indirect estimations support our approach.

Also, coupled interior-atmosphere studies emphasized that the interaction between the different reservoirs strongly influences both the primitive surface conditions and planetary evolution (Elkins-Tanton, 2008; Driscoll and Bercovici, 2013; Hamano, Abe, and Genda, 2013; Lebrun et al., 2013; Gillmann and Tackley, 2014; Foley and Driscoll, 2016; Salvador et al., 2017; Salvador et al., 2018 sub.). Instead of prescribing the surface conditions as generally done in static models of HZ studies, such coupled models are able to calculate them self-consistently as the result of these interactions. Notably, it affects early water ocean formation, and thus, the primitive habitability of planets (Hamano, Abe, and Genda, 2013; Salvador et al., 2017; Salvador et al., 2018 sub.). Then, if early water ocean formation does not occur at the surface of a recently solidified planet, it will unlikely be habitable later in its history (Hamano, Abe, and Genda, 2013; Salvador et al., 2018 sub.). Thus, simulating the early coupled evolution might eventually rule out observational targets, or at least, might help for selecting them.

Previous MO-atmosphere modeling focused on the early evolution of Earth-like planets orbiting the faint young Sun only (Hamano, Abe, and Genda, 2013; Salvador et al., 2017; Salvador et al., 2018 sub.). However, this contrasts with currently detected exoplanets. Kepler's Third Law of planetary motion states that the square of the orbital period of a planet is proportional to the cube of the semi-major axis of its orbit. Thus, short period planets are generally favored by the two leading techniques: transits and Doppler spectroscopy. Conversely, considerable observation time is required to spot several transits of a planet orbiting the star in one year (like the Earth), which decreases detection efficiency for such long-period planets. Furthermore, it is easier to detect large planets around low-mass stars with these two detection methods. The reason is twofold with the radial velocity method: first, low-stars are more affected by gravitational tug from larger planets. Second, the generally slower rotation rate of low-mass main-sequence stars facilitates spectral analysis. Indeed, for


FIGURE 5.1 – Approximate masses and orbital distances of discovered planets in October 2014. Most of the rocky planets yet discovered are massive planets located at short orbital distances. Figure based on the exoplanets.eu encyclopaedia (Schneider, J. et al., 2011) and adapted from Winn and Fabrycky (2015).

rapidly rotating stars, spectral-line data are less clear because half of the star quickly rotates away from the observer's viewpoint while the other half approaches (inducing spectral-line overlapping). In the transit method, planets occult a larger fraction of small stars and the transit probability is more important for larger planets. As a consequence of these observational biases, most of the rocky planets yet discovered are large planets (super-Earths), with short-period orbits (bottom-left part of Figure 5.1). To be habitable, short-period planets must necessarily orbit cold and small stars. Thus, to investigate the early evolution and resulting habitability of discovered exoplanets, we extended our approach to planets orbiting colder stars than the Sun. Further work will be dedicated to larger planets than the Earth (see Section 5.6).

Using our coupled MO-atmosphere model, we investigate how both the thermal evolution and the resulting habitability is affected by the type of star, for both  $H_2O$  and  $CO_2$ -dominated atmospheres.

After a brief description of what is specific to this chapter in our coupled model (Section 5.2), we show how the temperature of the star influences the cooling and solidification of the magma ocean and the resulting surface conditions reached at the end of the rapid cooling stage (Section 5.3.1). Then, we discuss the location of the inner edge of the temperate zone around different stars in Section 5.3.2. Section 5.3.3 presents how this location is affected by the initial volatile content and by the presence of clouds (Section 5.3.4). From this systematic study, we derive scaling laws predicting early water ocean formation in Section 5.4. Section 5.5 gives the main conclusions and Section 5.6 presents ongoing work regarding super-Earths.

## 5.2 Methods

To simulate the cooling of the magma ocean in interaction with the atmosphere, we used the numerical coupled model extensively described in the previous chapters and in Lebrun et al. (2013), Salvador et al. (2017), and Salvador et al. (2018 sub.). As described in Chapter 4, the latest update of our radiative-convective atmospheric model (Marcq, 2012; Marcq et al., 2017) includes true computation for the albedo, as a function of the atmospheric composition and temperature (Pluriel, Marcq, and Turbet, 2018), both evolving during the MO cooling (Salvador et al., 2018 sub.).

However, note that in this chapter,  $H_2O$  and  $CO_2$  absorption in the visible range has been computed more simply than in Pluriel, Marcq, and Turbet (2018) and Salvador et al. (2018 sub.). The older absorption database used here have been first implemented in the atmospheric model during its development. However, this database has then been updated prior to publication and a new database is used in the last version of the atmospheric model of Pluriel, Marcq, and Turbet (2018) (on which is based the atmospheric model of Salvador et al., 2018 sub.). Based on Turbet et al. (2017) and Tran et al. (2018), the latest version of Pluriel, Marcq, and Turbet (2018) consider a more accurate spectroscopy for  $CO_2+H_2O$  gas mixtures. Namely, they incorporated more realistic line broadening: (i) half-width at half maximum of  $H_2O$ lines broadened by  $CO_2$ , and  $CO_2$  lines broadened by  $H_2O$  with the corresponding temperature-dependent exponents; (ii) self-broadened far lines wings of CO<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>O; as well as  $CO_2$ - $CO_2$  collision induced absorption. Thus, gaseous line absorption and continuum absorption are more accurate in Pluriel, Marcq, and Turbet (2018). For a complete description of the spectroscopic processes considered, one can refer to Turbet et al. (2017), Tran et al. (2018), and Pluriel, Marcq, and Turbet (2018). Opacity resulting from gaseous absorption in the visible range is used to calculate the spectral reflectance. Such absorption differences induce differences in the computed albedo. Figure 5.2 compares the albedo obtained with the two versions of the atmospheric model, both with and without clouds.

For both clouds schemes, there is no difference between the two opacity data for high surface temperatures: gaseous absorption in the visible range only has only been updated, while opacity for high surface temperatures were already computed properly: the IR/longwave range was kept unchanged.

At lower temperatures, when clouds are present, both opacity data lead to similar behaviors while the albedo is only slightly higher when considering the updated version. This faint difference can be explained by the dominance of Mie scattering over gaseous absorption when clouds are considered, so that changing the gaseous absorption does not affect significantly the albedo.

Conversely, without clouds, gaseous absorption controls the albedo at low temperature so that the results differ much between the two atmospheric model versions. Gaseous absorption was overestimated in the old version of the model and the corresponding albedo was thus underestimated (Figure 5.2). At ERCS, the amount of absorbed stellar flux  $F_{abs} = (1 - \alpha)F_{\downarrow}$  controls the surface temperature, and an underestimation of the albedo leads to overestimate the surface temperature. It implies that with the latest version of the atmospheric model (Pluriel, Marcq, and Turbet, 2018; Salvador et al., 2018 sub.), the IHZ should be located closer to the star than with the old version presented here.

While this update mainly affects the cloud-free case, it does not qualitatively influences the results. For comparison, some calculations have been conducted with the latest version of the atmospheric model and are explicitly mentioned. Other calculations are in progress and all the data will be updated prior to any submission.



FIGURE 5.2 – Bond albedo calculated with the atmospheric model only, as a function of surface temperature, with (cyan) and without (blue) clouds, using the previous (plain lines) and the recently updated spectral database (dotted lines) as used in Pluriel, Marcq, and Turbet (2018) and Salvador et al. (2018 sub.). The planet is assumed to orbit the current Sun ( $\mathcal{T}_{\odot} = 5750 \,\mathrm{K}$ ) at 1 AU, with atmospheric pressures  $\mathrm{P}_{\mathrm{H_2O}} = 200 \,\mathrm{bar}$  and  $\mathrm{P}_{\mathrm{CO_2}} = 100 \,\mathrm{bar}$ .

The incident stellar flux  $F_{\downarrow}$  received at TOA is a function of the distance between the star and the planet  $D_{\odot}$ , the radius  $\mathcal{R}_{\odot}$ , and effective temperature  $\mathcal{T}_{\text{eff}_{\odot}}$  of the host star such as:

$$F_{\downarrow} = \left(\frac{\mathcal{R}_{\odot}}{D_{\odot}}\right)^2 \sigma_{\rm SB} \mathcal{T}_{\rm eff_{\odot}}^4,\tag{5.1}$$

where  $\sigma_{\rm SB}$  is the Stefan-Boltzmann constant. At Earth's distance, when considering the current Sun,  $F_{\downarrow} = 1360.8 \,\mathrm{W.m^{-2}}$  and corresponds to the so-called solar constant, or total solar irradiance  $S_{\odot}$  (Kopp and Lean, 2011; Mamajek et al., 2015). We assume that the star radiates as a black body<sup>3</sup> of effective temperature  $\mathcal{T}_{\rm eff\odot}$ . To investigate the effect of the star on the thermal evolution of the magma ocean, and on the resulting surface conditions, we treat  $\mathcal{T}_{\rm eff\odot}$  and  $\mathcal{R}_{\odot}$  as free parameters, accounting for different types of star, from G to M stars, using data from the exoplanets.org database (Han et al., 2014). We consider G, K and M stars, ranging respectively from  $\mathcal{T}_{\rm eff\odot} \approx 5630 \,\mathrm{K}$ for the young Sun (Bahcall, Pinsonneault, and Basu, 2001) to  $\mathcal{T}_{\rm eff\odot} \approx 2550 \,\mathrm{K}$  for Trappist-1. We vary the orbital distance so that the stellar irradiance ranges from  $1.7S_{\odot}$  to  $0.5S_{\odot}$ , corresponding to distances ranging from 0.63 to 1.1 AU for planets orbiting the young Sun.

Planck's radiation law describes the spectral energy distribution radiated by a blackbody. Figure 5.3 shows the corresponding normalized spectral radiance of blackbodies of temperature  $\mathcal{T}_{\text{eff}\odot} = 5622$  K and  $\mathcal{T}_{\text{eff}\odot} = 2559$  K, corresponding to the young Sun and Trappist-1, respectively. Most of the energy is radiated in the visible range for the young-Sun, while it is mostly emitted in the infrared domain of the electromagnetic spectrum for Trappist-1 (Wien's displacement law). Thus, even if a planet receives the same amount of incident stellar flux  $F_{\downarrow}$ , this spectral shift is accounted for in our atmospheric model.

As in the previous chapters, we simulate Earth-like planets, with the same mass, density, radius, gravity, solidus and liquidus depth profiles (from Andrault et al., 2011), and starting with a 2885 km deep magma ocean according to post giant impacts conditions (Hostetler and Drake, 1980; Tonks and Melosh, 1993), eroding any prior atmosphere en route.

We consider  $H_2O-CO_2-N_2$  atmospheres with variable proportions of  $H_2O$  and  $CO_2$  initially dissolved within the MO, represented by the dimensionless parameter  $x^*$  (Salvador et al., 2017; Salvador et al., 2018 sub.):

$$x^* = \frac{X_{0 \,\mathrm{CO}_2}}{X_{0 \,\mathrm{H}_2\mathrm{O}} + X_{0 \,\mathrm{CO}_2}},\tag{5.2}$$

ranging from  $x^* = 0$  for H<sub>2</sub>O-dominated (usually considered for IHZ investigations), to  $x^* = 1$  for CO<sub>2</sub>-dominated atmospheres. N<sub>2</sub> concentration is fixed to 5 bar (similar to Lebrun et al., 2013). For the temperature and pressure conditions explored around the IHZ, H<sub>2</sub>O is able to condense but cannot freeze, while CO<sub>2</sub> and N<sub>2</sub> stay in the gas phase, so that neither CO<sub>2</sub> condensation nor water freezing are included in the model.

 $<sup>^{3}</sup>$ A blackbody is a theoretical object that absorbs and re-emits all radiant energy falling on it. If the incident light is in the visible range, it will be absorbed rather than reflected, resulting in a "black body".



FIGURE 5.3 – Spectral reflectance of an Earth-like planet with a surface temperature of 500 K (black dashed line), and spectral energy distribution radiated by a blackbody of temperature the faint young Sun ( $\mathcal{T}_{eff_{\odot}} = 5622$  K, blue), and Trappist-1 ( $\mathcal{T}_{eff_{\odot}} = 2559$  K, red), normalized by the radiance peak of the star (vertical dashed lines). The maximum emission of the cold Trappist-1 star is centered around higher wavelengths, where the reflectance is much lower, than for the young Sun. See Table 5.1 for parameters used.

TABLE 5.1 – Physical variables used in this chapter.

Figure	$\frac{X_{0_{H_2O}}a}{[10^{-2}~wt\%]}$	$\begin{array}{c} X_{0_{H_2O}}{}^a \\ [M_{EO}] \end{array}$	$P_{H_2O}$ [bar]	$\frac{X_{0_{\rm CO_2}}{}^{\rm a}}{[10^{-2}~{\rm wt\%}]}$	P <sub>CO<sub>2</sub></sub> [bar]	Stellar distance [AU]	Star temperature $\mathcal{T}_{eff\odot}$ [K]	Stellar flux $F_{\downarrow}^{\rm b}$ $[S_{\odot}]$	Clouds
Figure 5.3	2.79	0.74	200	1.4	100	0.028 & 1	2559 & 5622	0.679	no
Figure 5.4	3.76	1	269	1.25	89.9	0.028 & 1	2559 & 5622	0.679	no
Figure 5.5	3.76	1	269	1.25	89.9	0.0215 - 1.1	2559 - 5622	0.38 - 1.7	yes & no
Figure 5.6	0.75 - 3.76	0.2 - 1	54 - 269	0.1 - 14	7 - 1003	0.0215 - 1.1	2559 - 5622	0.38 - 1.7	no
Figure 5.7	0.75 - 3.76	0.2 - 1	54 - 269	0.1 - 14	7 - 1003	0.0215 - 1.1	2559 - 5622	0.38 - 1.7	yes & no
Figure 5.8	3.76	1	269	1.25	89.9	$0.845^{c}$	2550 - 7500	0.947	no
Figure 5.9	0.75 - 3.76	0.2 - 1	54 - 269	0.1 - 14	7 - 1003	0.0215 - 1.1	2559 - 5622	0.38 - 1.7	no

<sup>a</sup> Fraction relative to the initial MO mass ( $\approx 3.72 \times 10^{24}$  kg). <sup>b</sup> Where the present-day total solar irradiance at Earth's distance is  $S_{\odot} = 1360.8$  W.m<sup>-2</sup> (Kopp and Lean, 2011; Mamajek et al., 2015).

<sup>c</sup> Corresponds to the critical distance  $D_C$ .

## 5.3 Results

### 5.3.1 Thermal Evolution of an Earth-Like Planet Orbiting Different Star-Types

Figure 5.4 compares the thermal evolution of a MO planet orbiting the faint young Sun ( $\mathcal{T}_{\text{eff}\odot} = 5622$  K, as seen in Chapter 4), to a planet orbiting Trappist-1 ( $\mathcal{T}_{\text{eff}\odot} = 2559$  K), located at different distances but receiving the same amount of stellar flux ( $F_{\downarrow} \approx 0.7S_{\odot}$ ). At early times, the convective flux from the magma ocean  $F_{conv}$ governs the cooling of the planet ( $F_{IR} \approx F_{conv}$ ): the type of star does not affect the thermal evolution nor the surface temperature (Figures 5.4a and 5.4c; Salvador et al., 2017; Salvador et al., 2018 sub.). However, when approaching ERCS, as soon as the convective flux becomes comparable to the absorbed stellar flux  $F_{abs}$ , the planet's surface temperature becomes higher for a colder star, but not high enough to prevent water ocean formation:  $T_{surf} \approx 510$  K for Trappist-1, against  $T_{surf} \approx 460$  K for the young Sun. Indeed, the planetary albedo at ERCS is much lower for a cold star:  $\alpha \approx 0.025$ , compared to  $\alpha \approx 0.35$  for the young Sun (Figure 5.4b). Then, more sunlight is absorbed and the surface temperature is higher (Figure 5.4). As a consequence, ERCS is slightly delayed and the surface temperature reached is higher around an ultracool dwarf star such as Trappist-1 than around the Sun.

This can be explained by the shift of the spectral energy distribution between the two stars. The radiance peak  $\lambda_{\max} \approx \frac{3000}{T_{\odot}}$  is shifted to higher wavelength for Trappist-1 compared to the young Sun. Radiation emitted from Trappist-1 is thus redder relative to that emitted from the Sun (Figure 5.3). The spectral reflectance is more important at shorter wavelengths (visible), where most of the sunlight is emitted (dashed line in Figure 5.3). Conversely, Trappist-1 radiates more in the infrared domain, where the reflectance is much lower and results in a smaller albedo (Figures 5.4b and 5.3). Furthermore, this long-wave emission is absorbed by H<sub>2</sub>O and CO<sub>2</sub>. Thus, radiation penetrates deeper in the atmosphere and is more absorbed which explains higher surface temperatures around colder stars. The type of star is thus determinant for the surface conditions reached at ERCS that govern the longterm evolution of the planet. Implications for the location of the inner edge of the temperate zone are discussed in the following section.



FIGURE 5.4 – (a) Temperatures, (b) albedo, and (c) heat fluxes during the cooling of a magma ocean planet surrounded with a cloud-free atmosphere, orbiting the faint young Sun ( $\mathcal{T}_{eff\odot} = 5622 \,\mathrm{K}$ , blue) or Trappist-1 ( $\mathcal{T}_{eff\odot} = 2559 \,\mathrm{K}$ , red). ERCS is indicated by the vertical dotted lines. See Table 5.1 for parameters used.



FIGURE 5.5 – Planets without (red) and with a water ocean formed at ERCS (blue). Instable simulations at the IHZ are depicted in cyan. Cloud-free and cloudy atmosphere simulations are depicted with dots and circles, respectively. The green curves are the resulting IHZ beyond which water ocean formation occurs at ERCS for H<sub>2</sub>O-dominated atmospheres. IHZ limits obtained by Kopparapu et al. (2013), Leconte et al. (2013), and Yang et al. (2014, for fast and slow planetary rotation) are shown for comparison. Black crosses depict actual planets' location. See Table 5.1 for parameters used. The plain red line is the predictive early IHZ obtained using equation 5.5. The dashed red line is the one built on the recently updated spectral database used in Pluriel, Marcq, and Turbet (2018) and Salvador et al. (2018 sub.). Stellar parameters for the different stars have been taken from the exoplanets.org database (Han et al., 2014).

## 5.3.2 Inner Edge of the Temperate Zone Around Different Star-Types

Due to a decrease of the albedo and an increase of thermal absorption for planets orbiting cold stars, the redder stellar radiation results in higher surface temperatures than around hotter stars (Section 5.3.1). Thus, when decreasing stellar temperature, temperate surface conditions can be reached for lower incident stellar fluxes only (i.e., farther away from the star in terms of distances relative to the incident flux). Figure 5.5 shows the corresponding shift of the inner edge of the temperate zone (green curve). This has been extensively demonstrated in previous habitable zone studies (e.g., Kasting, Whitmire, and Reynolds, 1993; Selsis et al., 2007; Kopparapu et al., 2013). However, classical estimations of the inner edge of the habitable zone relies on the runaway greenhouse limit, reached in massive  $H_2O$ -dominated atmospheres. Salvador et al. (2017) discussed the implications of  $CO_2$ -dominated atmospheres on the formation of a primitive water ocean at ERCS around the young Sun. This will be extended to colder stars in the next section. Note that the exact location of the inner edge of the temperate zone differs between the different studies presented in Figure 5.5. This can be explained by intermodel differences in water vapor radiative transfer, that can lead up to  $10\%S_{\odot}$  of uncertainty in estimating the insolation threshold of the IHZ (see Yang et al., 2016, for an extensive intercomparison between the different models). The slow planetary rotation limit obtained by Yang et al. (2014) includes a negative feedback stabilizing the climate and can be compared to fully cloudy atmospheres (Chapter 4). Apart from this case, the others IHZ limits shown in Figure 5.5, including ours, range within the uncertainties estimated by Yang et al. (2016) for clear-sky radiative transfer models. Also, note that compared to our study, these habitable zone studies are looking for stable climates, where  $S_{eff} = \frac{F_{IR}}{F_{abs}} = 1$ , while we are looking at water ocean formation at ERCS, where  $S_{eff} = \frac{F_{IR}}{F_{abs} + F_{conv}} = \frac{F_{IR}}{F_{abs} + 0.1F_{abs}} = \frac{F_{IR}}{F_{abs}} = 1.1$ . One can assume that the albedo of planets, decreasing with stellar effective tem-

One can assume that the albedo of planets, decreasing with stellar effective temperature, should theoretically tend to zero for cold stars. In those cases, the absorbed stellar flux  $F_{abs}$  is equal to the incident stellar flux  $F_{\downarrow}$ . Furthermore, given that the surface conditions are controlled by the absorbed stellar flux at ERCS, and that  $F_{IR} \approx F_{abs}$ , the radiative flux is then controlled by the incident stellar flux:  $F_{IR} \approx F_{\downarrow}$ . Thus, for cold stars, the inner edge of the temperate zone for H<sub>2</sub>O-dominated atmospheres is located where the flux received by the planet is equal to the radiation limit, responsible for the runaway greenhouse ( $F_{IR} \approx 280 \text{ W.m}^{-2}$ ). One can then write the corresponding critical distance for cold stars:

$$D_C = \mathcal{R}_{\odot} \mathcal{T}_{\text{eff}}^2 \sqrt{\frac{\sigma_{\text{SB}}}{280 \times 4}}.$$
(5.3)

Similar reasoning can be made to predict the location of the IHZ for hotter stars and will be further discussed in Section 5.4.

# 5.3.3 Inner Edge of the Temperate Zone: Influence of the Initial Volatile Content

As discussed in Salvador et al. (2017) and Salvador et al. (2018 sub.), beyond the inner edge of the temperate zone, early water ocean formation is strongly influenced by the initial volatile content. Thus, for CO<sub>2</sub>-dominated atmosphere  $(x^* > 0.5)$ , the critical distance is shifted outwards from the star due to an enhanced greenhouse effect (Salvador et al., 2017). Figures 5.6 and 5.7 show this very behavior which is also valid for colder stars simulated here, adding a third dimension in the parameters space to consider for water ocean formation. However, the colder the star, the smaller the parameters space allowing for water ocean formation at ERCS. Indeed, around Trappist-1, water ocean formation is limited to lower  $CO_2$  contents than for the young Sun (Figure 5.7). Thus, for the insolation flux received on early Earth  $F_{\downarrow} \approx 0.7 \mathcal{S}_{\odot}$ , the initial  $CO_2$  concentration threshold for water ocean formation around the young Sun is about twice the one around Trappist-1: from  $x_c^* (0.7 \mathcal{S}_{\odot}, \mathcal{T}_{\text{eff}_{\odot}} = 5622 \,\text{K}) \approx 0.82$ to  $x_c^*(0.7\mathcal{S}_{\odot}, \mathcal{T}_{\text{eff}_{\odot}} = 2559 \,\text{K}) \approx 0.69$ , corresponding to  $[\text{CO}_2]_{t0,c} \approx 1214 \,\text{bar}$  and  $[CO_2]_{t0,c} \approx 596$  bar for  $[H_2O]_{t0} = 1 M_{EO}$ , respectively (equation 5.2). This is due to the enhanced IR absorption and lower albedo of planets orbiting cold stars which results in higher surface temperatures (Section 5.3.1). Thus, the influence of the initial volatile content is amplified for redder stars and reduces the chance to find a habitable planet around cold stars for high  $x^*$  ratio.



FIGURE 5.6 – Inner edge of the temperate zone at ERCS for cloudfree planets orbiting different types of star for H<sub>2</sub>O-dominated atmospheres (green line, as shown on Figure 5.5). Red dots distinguish planets where no water ocean is formed at ERCS than planets with a water ocean at ERCS (blue dots). For CO<sub>2</sub>-dominated atmospheres ( $x^* > 0.5$ ), the critical distance is shifted away from the star. The corresponding condensation limits are shown for the young Sun (blue line), Proxima Centauri (pink line), and Trappist-1 (red line). See Table 5.1 for parameters used.



FIGURE 5.7 – Condensation limits separating planets with (right side) and without (left side) water ocean at ERCS, as a function of the incident stellar flux, initial volatile content, and cloud coverage for different stars. See Table 5.1 for parameters used.

### 5.3.4 Influence of the Clouds

When considering a thick cloud cover, Salvador et al. (2018 sub.) showed that the albedo increase overcomes the blanketing effect of clouds, and shifts the inner edge of the temperate zone towards the young Sun. This is also the case for planets orbiting colder stars (red and blue circles in Figure 5.5, and corresponding IHZ fit in green). However, this effect is strongly attenuated for very cold stars that emit less visible light so that the cooling effect of clouds is less efficient (e.g., Yang et al., 2014). As an example, the inner edge of the temperate zone for Trappist-1 when considering clouds is located at  $F_{\downarrow c}(\mathcal{T}_{\text{eff}\odot} = 2559 \,\text{K}, \text{clouds}) \approx 0.94 \mathcal{S}_{\odot}$ , much closer to the cloud-free limit  $F_{\downarrow c}(\mathcal{T}_{\text{eff}\odot} = 2559 \,\text{K}, \text{cloud} - \text{free}) \approx 0.825 \mathcal{S}_{\odot}$ , so that  $\frac{F_{\downarrow c}(\text{cloud}-\text{free})}{F_{\downarrow c}(\text{cloud}-\text{free})} \approx 0.69$  (Figure 5.5). Further calculations are in progress to include condensation limits for cloudy atmospheres around cold stars.

# 5.4 Attempt Towards a Predictive and Theoretical Early Inner Edge of the Temperate Zone

All water condensation limits obtained for different stars exhibit the same trend (Figure 5.7). This motivates the search for a single parameter expressing the water ocean formation critical distance by accounting for different star temperatures.

Based on a previous version of our atmospheric model (Marcq et al., 2017), we attempted to define a theoretical critical distance  $D_C$  valid over the solar system history in Salvador et al. (2017). It relies on a constant equilibrium temperature found at the critical distance at ERCS. Indeed, a critical outgoing infrared flux characterizes the transition from water vapor to water ocean when considering the cooling of the MO (and vice versa when considering the vaporization of the ocean in runaway greenhouse studies; e.g., Simpson, 1927; Komabayasi, 1967; Ingersoll, 1969; Nakajima, Hayashi, and Abe, 1992). This so-called Nakajima limit occurs at  $F_{IR} \approx 280 \,\mathrm{W.m^{-2}}$ . At ERCS, the atmosphere almost reaches the radiation balance as the internal convective flux  $F_{conv}$  becomes negligible compared to the absorbed stellar flux  $F_{abs}$ . Thus, one can reasonably assume that  $F_{IR} \approx F_{abs} = 280 \,\mathrm{W.m^{-2}}$ when approaching water ocean formation. This corresponds to a critical equilibrium temperature  $T_{eqC} = \sqrt[4]{F_{abs}/\sigma_{\rm SB}} \approx 265 \,\mathrm{K}$ . However,  $F_{abs}$  is a function of the albedo  $(F_{abs} = (1 - \alpha)F_{\downarrow})$  and no albedo-dependent calculations being conducted at that time, a constant albedo value was taken during the MO cooling. Then, to predict the location of the critical distance considering a relevant albedo, one has to account for its variation depending on the stellar spectrum. Using the amount of degassed volatiles at ERCS calculated with our coupled MO-atmosphere model for H<sub>2</sub>O-dominated atmospheres, we calculated the corresponding albedo for different stars (blue crosses in Figure 5.8). Fitting all the data leads to an expression for the critical albedo:

$$\alpha_c(\mathcal{T}_{\text{eff}\odot}) = a\mathcal{T}_{\text{eff}\odot}^4 + b\mathcal{T}_{\text{eff}\odot}^3 + c\mathcal{T}_{\text{eff}\odot}^2 + d\mathcal{T}_{\text{eff}\odot} + e, \qquad (5.4)$$

where  $T_{\text{eff}\odot}$  is the stellar effective temperature, and the coefficients are listed in Table 5.2 for both opacity databases. We are thus able to prescribe the critical albedo at ERCS and at  $D_C$ .

The absorbed stellar flux is  $F_{abs} = (1 - \alpha)F_{\downarrow}$ . Assuming that it is equal to 280 W.m<sup>-2</sup> at  $D_C$ , the critical incident stellar flux is given by (red curves in Figure 5.8):

$$F_{\downarrow c} = 280/(1 - \alpha_c).$$
 (5.5)



FIGURE 5.8 – Critical albedo  $\alpha_c$  at  $D_C$  calculated with our cloud-free atmospheric model, as a function of stellar temperature, and using the amount of volatiles degassed at ERCS (blue crosses, upper panel). The corresponding critical incident flux calculated using equation 5.5 is drawn in the lower panel (red). Plain lines are based on the spectral database used in the present chapter, while dotted lines have made use of the recently updated spectral database used in Pluriel, Marcq, and Turbet (2018) and Salvador et al. (2018 sub.). The analytical fit is given in equation 5.4, with the corresponding coefficients in Table 5.2. See Table 5.1 for parameters used.

TABLE 5.2 – Coefficients to be used in equation 5.4 to calculate the critical albedo  $\alpha_c$  at the critical distance  $D_C$  as a function of the stellar temperature. It can then be used to predict the critical incident stellar flux  $F_{\downarrow c}$  for H<sub>2</sub>O-dominated, cloud-free atmospheres (equations 5.5 and 5.6).

Constant	Current spectral database	Spectral database used in Pluriel, Marcq, and Turbet (2018) and Salvador et al. (2018 sub.)
a	$8.7991 \times 10^{-17}$	$1.3906 \times 10^{-16}$
b	$-3.3342 \times 10^{-12}$	$-6.0095 \times 10^{-12}$
c	$3.6957  imes 10^{-8}$	$7.1703  imes 10^{-8}$
d	$-1.2096  imes 10^{-4}$	$-2.3803  imes 10^{-4}$
e	0.12703	0.24897

This critical and theoretical insolation flux matches perfectly the IHZ limit obtained in Figure 5.7. Thus, it allows to predict early water ocean formation for H<sub>2</sub>O-dominated atmospheres within the range of stellar temperatures explored here. Note that both absorption databases lead to similar qualitative behaviors. However, the presently used database underestimates the albedo for hot stars compared to the newly updated one. Indeed, hot stars emit more visible light, where gaseous absorption differs between the two versions of the model. Consequently, the critical incident stellar flux  $F_{\downarrow c}$  is higher with the recently updated database (Figure 5.8), so that the corresponding IHZ is closer to the star (dashed red line in Figure 5.5). The parameterization of the albedo as a function of the star temperature was lacking and now allows to estimate *a priori* the critical distance (in km) at ERCS of any stellar system following:

$$D_C = \sqrt{\frac{(1 - \alpha_c)\sigma_{\rm SB}}{280 \times 4}} \mathcal{R}_{\odot} \mathcal{T}_{\rm eff_{\odot}}^2.$$
(5.6)

We can then normalize the distance of a given planet D by the critical distance of its system  $D_C$  to predict the formation of an early water ocean following:

$$D^* = \frac{D}{D_C}.\tag{5.7}$$

Similarly, we can use the theoretical critical incident flux to define a dimensionless incident flux predicting the formation of an ocean at ERCS:

$$F_{\downarrow}^* = \frac{F_{\downarrow}}{F_{\downarrow c}}.$$
(5.8)

Figure 5.9 shows that for  $F_{\downarrow}^* < 1$ , water ocean formation is possible and depends on the relative amount of H<sub>2</sub>O and CO<sub>2</sub> for CO<sub>2</sub>-dominated atmospheres ( $x^* > 0.5$ ), while it is most likely for H<sub>2</sub>O-dominated atmospheres ( $x^* < 0.5$ ). No early water ocean is formed for planets where  $F_{\downarrow}^* > 1$ . Using  $F_{\downarrow}^*$  and  $x^*$  (equation 5.2) to consider the influence of the initial volatile content (that might be constrained from observations, e.g., Dorn, Bower, and Rozel, 2017; Grimm et al., 2018) allows to reduce the number of variables needed to infer early water ocean formation. Thus, it might help to select targets of potentially habitable planets for further complex modeling and observations. This work is currently being extended to cloudy atmospheres with the recently updated spectral database used in Pluriel, Marcq, and Turbet (2018) and Salvador et al. (2018 sub.). In that case, we believe that the same type of scaling should be valid using a new abacus for the critical albedo of Figure 5.8.

# 5.5 Conclusion

The earliest thermal evolution of the magma ocean is not influenced by the host star: indeed, the convective flux from the mantle is initially much larger than the absorbed stellar flux and controls the cooling, solidification and degassing of the MO. However, approaching the end of the rapid cooling stage, the convective flux becomes negligible compared to the absorbed stellar flux so that the later becomes determinant for the surface conditions and water ocean formation.

For colder and redder stars than the Sun, the stellar radiation peak is shifted to higher wavelengths. The effect of this spectral shift is two fold: first, the planetary albedo is much lower; second, more infrared radiation is received, and then absorbed by the planet. Both effects increase the surface temperature reached at ERCS and slightly delay the cooling of the MO. As a consequence, for cold host stars, water





ocean formation is both restricted to farther distances from the star and to lower  $CO_2$  contents. Thus, the relative initial  $H_2O-CO_2$  content is determinant to understand water ocean formation.

The spectral shift to redder wavelengths of cold stars also precludes the cooling effect of clouds, whose albedo is then much lower and tends to cloud-free values for planets orbiting cold stars.

We provide two dimensionless parameters, concerning the initial volatile content and the stellar properties, to predict early water ocean formation on terrestrial planets. Therefore, both these dimensionless parameters  $(F_{\downarrow}^* \text{ and } x^*)$  could be helpful for selecting potentially habitable planets, for further complex modeling and observations. Conversely, one can use these parameters to infer the presence of a water ocean based on observational constraints.

# 5.6 Perspectives: Influence of Planetary Mass

As discussed in Section 5.1, current observational constraints word off the detection of small planets (< 1  $M_{\oplus}$ ) so that most of exoplanets yet discovered are super-Earths, heavier than the Earth. Planetary mass  $M_{\rm p}$  acts on surface gravity g following:

$$g = \frac{GM_{\rm p}}{R_{\rm p}^2},\tag{5.9}$$

where G and  $R_p$  represent the universal gravitational constant, and the radius of the planet, respectively. Surface gravity itself controls the vertical extension of the atmosphere, characterized by its scale height  $H_{atm}$ :

$$H_{atm} = \frac{RT}{mg},\tag{5.10}$$

with R being the specific gas constant, T the mean atmospheric temperature, and m the mean molecular mass of one atmospheric particle. Thus, a heavier planet than the Earth has a higher surface gravity and a thinner atmosphere. The atmospheric structure and the resulting blanketing effect will then be different for planets of different sizes, so does the location of the IHZ (Pierrehumbert, 2010; Kopparapu et al., 2014). Indeed, large planets have denser atmospheres and smaller H<sub>2</sub>O column depth, which result in lower greenhouse effect. Then, higher temperatures are needed to vaporize the ocean, shifting the IHZ towards the star. Large planets have thus wider habitable zones than smaller planets (Figure 5.10).

However, in the case of magma ocean studies, changing the size of the planet implies both different volatile delivery scenarios and different interior structures. Thus, a larger planet does not mean that a larger part of the mantle is initially molten. Furthermore, the amount of volatiles accreted by the planet and initially dissolved in the magma ocean, ultimately depends on accretion scenarios that can be constrained from planetary formation models. As an example, keeping the planetary to core radius constant while increasing the size of the planet ultimately implies that more volatiles can be accreted by the planet, but it does not mean that more volatiles are effectively accreted. Furthermore, changing the size of the planet affects the volatile distribution, and thus, the amount of degassed volatiles.

Then, we plan to investigate the thermal evolution of super-Earths in order to characterize their early habitability. This work is twofold: first, test different scenarii of volatiles delivery for exoplanets. Then, explore different interior structures to systematically study early water ocean formation at the end of the magma ocean cooling.



FIGURE 5.10 – Habitable zone limits as a function of planetary mass. For large planets, the habitable zone is shifted towards the star. Figure from Kopparapu's group based on Kopparapu et al. (2014).

The overriding goal is to extend our scaling analysis to super-Earths, and to account for the influence of the planetary mass in early water ocean formation.

### Supplementary Material

The following has been submitted as an abstract for the 2018 AGU Fall Meeting, that will be held on December 2018 in Washington, D.C., in the session entitled "Super-Earth Detection, Characterization and Modeling: How Habitable are They?"

### Evolution of Super-Earths: From Magma Ocean to Temperate Surface Conditions

Recent discoveries of potentially temperate rocky planets motivate the better characterization of their surface conditions to predict where life could be detected in the universe.

Early habitability of rocky planets is determined by the cooling and solidification of the magma ocean (MO) stage. Indeed, the initial volatile content in the MO and the distance from the host star appear to play key-roles in the solidification of the MO, the extraction of the atmosphere, the existence of clouds and the formation (or not) of a primitive water ocean. However, the atmospheric properties strongly influence the planetary albedo, and therefore the amount of sunlight reaching the planet surface. This in turn acts on the cooling rate of the planet and its atmosphere degassing.

Using a coupled 1–D MO-atmosphere model, we systematically studied how the feedback between albedo, atmospheric composition, planetary surface temperature and clouds, influences the formation of a water ocean at the end of the initial rapid cooling stage of the planet.

Here we extend this approach to different MO scenarios for super-Earths (ratio of planetary to core radius, volatile delivery) and discuss their potential habitability at the end of the rapid cooling stage.

# Chapter 6

# General Conclusions and Perspectives

The perpetual increasing number of discovered exoplanets rises the question of whether one of those planets might host life, such as the Earth does. The presence of liquid water at the surface of a rocky planet would be a first step towards its potential habitability. The setting of such temperate surface conditions is intimately linked to the early thermal evolution of terrestrial planets. The existence of a common early evolution stage on telluric planets at the end of their accretion, namely the magma ocean stage, is critical to model in order to (i) understand the current diversity of surface conditions among solar system rocky planets, and (ii) to characterize the habitability of extrasolar worlds. Indeed, the cooling and solidification of the magma ocean stage witnesses primordial processes regarding the setting of temperate conditions. Namely, the formation of the outgassed atmosphere, the earliest compositional differentiation, and the formation of the primitive solid crust. It thus represents the starting point for the onset of thermally driven mantle convection and plate tectonics. A clear picture of the system cannot be drawn without considering the interactions between the different reservoirs of the planet.

Using a coupled 1–D magma ocean-atmosphere model, accounting for both heat and volatile transfers between the solidifying magma ocean and outgassing atmosphere, I studied the early thermal evolution of the system and the formation of primitive water oceans on Earth-like planets. Two distinct regimes can be defined during the magma ocean cooling. The first regime is characterized by a strong and rapid cooling due to the vigorous convection of the magma ocean. A strong degassing takes place, producing most of the atmosphere. The convective flux going out of the magma ocean is much larger than the absorbed solar radiation at that time so that the cooling rate is controlled mainly by the MO convection. However, the amount of degassed greenhouse gases insulates the magma ocean, and combined with the distance from the star, it becomes determinant in controlling the surface conditions when the internal flux becomes negligible compared to the absorbed insolation. From that moment, the rapid cooling stage ends and primitive water oceans are potentially formed. The end of the rapid cooling stage (ERCS) is used as a reference evolution time to compare the thermodynamical state of the planet.

Apart from the distance from the star, it has been shown that the initial relative concentration of  $H_2O$  and  $CO_2$  strongly influences the surface conditions reached at the end of the rapid cooling stage. Three different types of planets arise at ERCS as a function of these two parameters: (1) planets with a water ocean overlying a solid surface; (2) planets with a molten surface and without water ocean; and (3) planets with a solid surface without water ocean.

The Earth would then be a type (1) planet while Venus might be either a type (2), (3) or a type (1) planet, depending on its initial volatile content and cloud cover evolution (Chapter 3).

From our calculations, we provide scaling laws to predict water ocean condensation at ERCS on an Earth-like planet as a function of the initial volatile content and solar distance for the solar system.

The atmospheric properties strongly influence the planetary albedo, and therefore the amount of sunlight reaching the planet's surface. This, in turn, acts on the insulating power of the atmosphere, and thus on the cooling rate of the planet, which influences atmospheric degassing. The presence of clouds also affect the radiative budget through their competing blanketing and reflecting effects. Both clouds and albedo computations have been implemented in our coupled model, thus accounting for the feedback between albedo, atmospheric composition, planetary surface temperature, and clouds during magma ocean solidification (Chapter 4).

If a thick cloud cover forms, its scattering and cooling effect overcomes its blanketing effect. As a result, a water ocean can be formed much closer to the star. Thus, early Venus might harbor temperate surface conditions and be a type (1) planet. Assuming Venus' current  $CO_2$  content, this would allow water ocean formation early Venus for initial water contents greater than 0.09 Earth ocean. Such an initial volatile budget is compatible with current volatile delivery estimations on terrestrial planets at the time of their formation. Assuming that 1 Earth ocean was brought to Venus during its accretion, a surface temperature of ~400 K and a ~2000 meters deep ocean would produce suitable conditions for extremophile organisms, and thus potentially for the emergence of life at ERCS. Furthermore, as surface temperature controls the mechanical behavior of the lithosphere, temperate conditions and liquid water at the surface of a planet is thought to have strong implications regarding the geodynamic regime and long-term evolution of the planet. The current surface conditions on Venus might not be inherited from the magma ocean stage but would instead be due to the subsequent evolution of the planet.

On early Earth, a classically depicted hot water ocean is found for cloud-free atmospheres. However, for fully cloudy atmospheres, heating mechanisms are required to leave a frozen stage, and match with early temperate conditions for the origins of life in agreement with Hadean zircon analysis.

Depending on the cloud cover, the Earth and Venus might not be as different as previously thought at the end of the magma ocean stage. Primitive conditions predicted with our model can be used as initial conditions to further simulate the long-term internal and/or atmospheric evolution, and investigate how these planets diverged.

Current observational technique biases favor the detection of rocky exoplanets larger than the Earth, so-called super-Earths, orbiting smaller and colder stars than our Sun. Habitability studies have shown that the presence of planetary surface water oceans is influenced by the star-type. Nevertheless, these models (i) prescribe the surface conditions, and (ii) usually consider H<sub>2</sub>O-dominated atmospheres for the inner edge of the habitable zone. Given that (i) our coupled model allows to calculate self consistently the surface conditions resulting from the MO cooling and solidification, and that (ii) we have shown that water ocean formation can be hampered in  $CO_2$ dominated atmospheres, we then investigated the thermal evolution and formation of water ocean on planets orbiting stars colder than the Sun, namely G, K, and M stars (Chapter 5). Compared to the Sun, cold stars emit less radiation in the visible range and more radiation in the thermal range. This spectral shift to redder wavelengths is two fold: first, it decreases the Bond albedo so that more insolation is received at the planetary surface around cold stars; second, more infrared radiation is received and then absorbed by the planet. This ultimately results in higher surface temperatures and shifts the critical insolation flux, beyond which water ocean formation occurs, farther away from the star. The clouds albedo is also reduced so that their cooling effect is hampered around cold stars.

For the same amount of incident flux, surface conditions are thus generally hotter around cold stars. Less  $CO_2$  is then required to preclude water ocean formation. Overall, the possibility for a planet to be habitable around cold stars is restricted to lower insolation fluxes and lower initial  $CO_2$  contents.

Using the amount of degassed volatiles at ERCS, we parameterized the albedo as a function of stellar temperature. It then allows to predict early water ocean formation for rocky cloud-free planets orbiting G, K, and M stars, using only two dimensionless parameters: one accounting for stellar properties, and the other for the initial volatile content. We plan to provide similar scaling laws for cloudy atmospheres. Such dimensionless parameters could be helpful for selecting potentially habitable planets, for further complex modeling and observations. Conversely, one can use these parameters to infer the presence of a water ocean based on observational constraints.

Climate models emphasized the influence of planetary mass on the location of the inner edge of the habitable zone. However, changing the size of a rocky planets implies strong assumptions regarding initial volatile delivery and interior structure that cannot be accounted for with climate models. Thus, in order to address this point and to account for the characteristics of already discovered exoplanets, we plan to extend our approach to super-Earths.

A future direction of research, to better characterize the habitability of exoplanets, would be to consider both contributions of star-type and planetary mass on the thermal evolution and early water ocean formation.

A clear understanding of the transition from a liquid magma ocean to a convective solid mantle is still lacking. Part of the problem is that there is still no clear view of all the physical phenomena at play during this crucial stage. The formation of a solid and therefore very viscous lithosphere has often been considered to trigger a new pattern of motion, where convection occurs below the lithosphere which remains stagnant. Such a regime drastically reduces the outgoing heat flux of the planet, and reduces its chance to transition towards a plate tectonic mode where the lithosphere can break and subduct in the mantle.

When we simulated the secular convective cooling of a 1–D magma ocean in interaction with its outgassed atmosphere, our coupled model indicated that a thick solid lithosphere (> 1 km) would only form both rapidly at the very end of the MO stage, and sufficiently far from the star depending on the volatile content. However, as a consequence of its rapid solidification and cooling, the lithosphere could undergo large stresses due to thermal contraction. If those stresses exceed the lithospheric strength, the lithosphere could break and subduct.

New laboratory experiments run in visco-elasto-plastic colloidal solutions show this very behaviour. We started to setup the acquisition system to monitor surface topography, in order to estimate the stress field of the brittle skin on top of these complex fluids, whose rheology varies with the water content. Scaling laws deduced from the experiments are expected to highlight in which conditions a smooth transition to a subduction-dominated regime prevails. These conditions could then be related to the cooling rate of the lithosphere at the end of the MO, which in turn depends on the initial volatile contents of the planet, its size and its distance to the star.

# Annexe A

# Résumé substantiel

La recherche de vie dans l'Univers, intimement liée à la question de nos origines, constitue une des grandes motivations qui oriente et désoriente la recherche actuelle dans le domaine des sciences planétaires. Les planètes rocheuses du système solaire, Mercure, Vénus, la Terre, et Mars, arborent des conditions de surface toutes très différentes, parmi lesquelles, seule la Terre semble avoir réuni les ingrédients nécessaires au développement et au maintien de la vie.

Mercure, planète la plus proche du Soleil, ne possède pas de véritable atmosphère autour de sa surface ancienne et cratérisée. Elle subit de ce fait des contrastes thermiques pouvant atteindre 600°C, entre des zones jamais exposées à la lumière du Soleil, au fond des cratères polaires où la température descend en dessous des  $-180^{\circ}$ C, et le point subsolaire au périhélie, lorsque la planète est au plus proche de l'étoile, où la température peut atteindre 427°C. Si l'on s'éloigne davantage du Soleil, on croise l'orbite de Vénus, la plus proche voisine de la Terre, non seulement par sa proximité orbitale, mais aussi du fait que sa masse et sa taille soient similaires à celles de notre planète, indiquant que les deux planètes sont constituées des mêmes matériaux. Malgré ces ressemblances, Vénus possède une atmosphère extrêmement dense, et écrasante puisque la pression en surface y est 90 fois supérieure à la pression atmosphérique terrestre. Constituée à plus de 95% de dioxide de carbone (CO<sub>2</sub>), l'atmosphère vénusienne possède une épaisse couche de nuages de dioxyde de soufre, où des gouttelettes d'acide sulfurique sont formées. Ce mélange compositionnel est responsable d'un effet de serre colossal qui engendre une température de surface moyenne d'environ 460°C. Mars, située au-delà de l'orbite terrestre et en deça de la ceinture d'astéroïdes séparant les planètes rocheuses des planètes géantes gazeuses, est entourée d'une atmosphère ténue (0.6%) de la pression atmosphérique terrestre en surface), où des traces d'écoulements à la surface semblent témoigner de la présence d'eau liquide dans le passé. La Terre est ainsi, à ce jour, la seule planète sur laquelle l'eau liquide, nécessaire à toute forme de vie connue, est présente en surface de façon stable, sur une échelle de temps suffisamment longue pour permettre le développement de la vie.

Malgré la diversité actuelle des conditions de surface des planètes telluriques, elles sont, semble-t-il, issues des mêmes mécanismes de formation. Afin de mieux comprendre l'origine de ces différences, et la mise en place des conditions favorables à l'émergence de la vie, cette thèse s'intéresse aux premiers stades évolutifs des planètes rocheuses, en considérant l'évolution thermique couplée de l'intérieur planétaire et de l'enveloppe externe atmosphérique. Les présents travaux s'attachent notamment à mieux contraindre l'influence de certains composés volatils,  $H_2O$  et  $CO_2$ , sur le refroidissement et la solidification des planètes telluriques, à partir d'un état initial partiellement fondu et commun auxdites planètes. Le chapitre introductif suivant décrit succinctement le concept d'habitabilité des planètes rocheuses, les mécanismes de formation de ces planètes et explique en quoi ces notions sont étroitement liées.

# A.1 Introduction

# A.1.1 La recherche de vie extra-terrestre : habitabilité des planètes rocheuses

La question de savoir si nous sommes seuls dans l'Univers n'est pas nouvelle. Aujourd'hui, l'astronomie moderne et les techniques associées repoussent constamment les limites de l'univers observable, dans le temps et dans l'espace, et cette question reste indéniablement sous-jacente à l'exploration spatiale. Ainsi, à la fin du siècle précédent, et sans doute en lien avec l'avènement de la conquête spatiale, de nombreuses études ont cherché à définir les critères nécessaires à l'apparition de la vie (e.g., HUANG, 1959; HUANG, 1960; DOLE, 1964; SHKLOVSKII et SAGAN, 1966; HART, 1978). A partir de l'observation des formes de vie existantes sur Terre, il semble qu'une condition a priori requise pour l'émergence et le développement de la vie soit la présence d'eau liquide en surface. La « zone habitable » (HUANG, 1959; HUANG, 1960; HART, 1978; KASTING, WHITMIRE et REYNOLDS, 1993) a ainsi été classiquement définie comme étant la région circumstellaire (autour de l'étoile) où l'eau liquide serait stable à la surface d'une planète, et régie principalement par la quantité d'énergie solaire incidente. Trop près de l'étoile, la température de surface est trop élevée pour que l'eau reste sous forme liquide, alors que trop loin, les températures trop froides sont responsables de la formation de glace. Il est notable que la vie pourrait également se développer sous la surface d'une planète rocheuse, en deçà ou au-delà de la zone habitable, en utilisant une source d'énergie autre que la lumière de l'étoile pour son métabolisme. Il est cependant peu probable que cela aboutirait à une modification de l'environnement de surface suffisamment importante pour pouvoir être détectée depuis l'espace (ROSING, 2005). Si l'on se restreint alors au cas classique de l'habitabilité des surfaces planétaires, des modèles climatiques, simulant numériquement la dynamique et le transfert d'énergie des atmosphères planétaires, sont généralement utilisés pour calculer les conditions de pression et température à la surface d'une planète donnée, et ainsi définir si l'eau liquide est stable en surface. En variant la distance qui sépare la planète de l'étoile, il est possible de déterminer les limites de la zone habitable.

La limite intérieure de la zone habitable est située au plus proche de l'étoile, à la distance à partir de laquelle la vapeur d'eau peut condenser à la surface. La bordure extérieure, quant à elle, est la distance la plus éloignée de l'étoile pour laquelle l'eau peut être maintenue sous forme liquide en surface; au-delà de cette limite, l'eau gèle. Les études classiques d'habitabilité suivent l'approche de modélisation climatique dite inverse. La température de surface et la composition atmosphérique sont prescrites, et le modèle numérique calcule le flux énergétique reçu de l'étoile (et la distance orbitale correspondante) requis pour maintenir la température à la valeur fixée, sous la condition d'un climat stable, i.e., à l'équilibre radiatif. Cet équilibre suppose que l'égalité du flux incident absorbé  $F_{abs}$  et du flux sortant rayonné au sommet de l'atmosphère soit respectée :  $F_{abs} = F_{\uparrow}$  (e.g., KASTING, WHITMIRE et REYNOLDS, 1993; KOPPARAPU et al., 2013).

Toute forme de vie terrestre nécessite la présence d'eau liquide et repose sur la chimie du carbone, ou chimie organique, qui permet d'en créer les briques. Avant de pouvoir être potentiellement liquide, l'eau doit nécessairement être suffisamment abondante à la surface d'une planète. Le carbone, lui, peut être trouvé sous forme oxydée et gazeuse dans l'atmosphère : le  $CO_2$ , constituant majoritaire des atmosphères des planètes telluriques du système solaire<sup>1</sup>. Par ailleurs, loin de l'étoile, le cycle

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>On suppose que le dioxyde de carbone, CO<sub>2</sub>, était un constituant majeur de l'atmosphère terrestre avant d'être dissous dans un océan d'eau, de réagir chimiquement avec les roches de surface, et plus

141

carbone-silicate peut permettre le maintien de la température de surface au dessus du point de congélation de l'eau (WALKER, HAYS et KASTING, 1981; KASTING, 1988). De plus, H<sub>2</sub>O et CO<sub>2</sub> sont des gaz à effet de serre : ils ont la propriété de laisser passer la lumière visible du Soleil, mais d'interagir avec le rayonnement thermique émis par la surface chauffée de la planète. Ils absorbent une partie de ce rayonnement, bloquant ainsi une partie de la chaleur, qui, au lieu de s'échapper vers l'espace, reste dans l'atmosphère et la réchauffe, agissant ainsi comme un couvercle thermique. Ils ont donc un rôle prépondérant sur le contrôle de la température de surface, un paramètre clé pour la présence d'eau liquide. Pour les raisons évoquées ici, des atmosphères de  $H_2O$  et CO<sub>2</sub> ont généralement été considérées dans les études d'habitabilité.

### La bordure interne de la zone habitable classique

Considérons ici une planète rocheuse théorique, arborant un océan d'eau liquide à sa surface, et supposons que cette planète se rapproche de son étoile. Plus la planète est proche de l'étoile, plus la température à la surface de la planète est importante, et plus la quantité d'eau évaporée est grande. La vapeur d'eau se retrouvant dans l'atmosphère va amplifier l'effet de serre, provoquer une nouvelle augmentation de la température et ainsi de suite, jusqu'à ce que le climat se stabilise, et que la planète soit de nouveau en mesure de réémettre le flux absorbé. En revanche, si la planète est trop proche de l'étoile, il existe un seuil d'insolation critique au-delà duquel ce processus s'emballe. La vapeur d'eau devient alors tellement abondante que l'atmosphère finit par être optiquement/thermiquement épais/opaque, empêchant complètement la chaleur d'être évacuée vers l'espace : le flux sortant au sommet de l'atmosphère  $F_{\uparrow}$  (ou  $F_{IR}$ ) n'augmente plus malgré l'augmentation du flux absorbé et conduit inévitablement à une augmentation très importante de la température de surface (GOLDBLATT et WAT-SON, 2012; GOLDBLATT et al., 2013; LECONTE et al., 2013). Cet emballement de la température de surface provoque l'évaporation complète des océans (SIMPSON, 1927; Komabayasi, 1967; Ingersoll, 1969; Kasting, Pollack et Ackerman, 1984; NAKAJIMA, HAYASHI et ABE, 1992), rendant la planète inhabitable. Le réchauffement ne peut s'arrêter que lorsque l'équilibre des flux est rétabli par une ré-augmentation du flux émis, possible uniquement à une température de surface où la basse atmosphère et la surface commencent à rayonner dans le visible et le proche infrarouge. En effet, à ces longueurs d'onde, l'opacité de la vapeur d'eau est faible, et la chaleur peut s'échapper par la fenêtre d'absorption atmosphérique correspondante. Ce phénomène est responsable d'une transition climatique abrupte entre un climat stable tempéré et un climat stable infernal, où les océans sont entièrement vaporisés. La distance à l'étoile à partir de laquelle l'emballement de l'effet de serre se produit, i.e., à partir de laquelle le flux absorbé critique est atteint, définit la bordure interne optimiste<sup>2</sup> de la zone habitable. Il s'agit de la plus petite distance à l'étoile pour laquelle l'eau liquide peut être stable à la surface de la planète. Cette limite est aujourd'hui la plus communément utilisée pour borner la zone habitable (Figure A.1). La distance critique  $D_C$  évoquée dans les chapitres suivants est la distance associée à ce mécanisme et pourrait être assimilée à la bordure interne de la zone d'habitabilité primitive. Nous montrerons notamment que cette distance dépend fortement de la composition atmosphérique. Il est intéressant de remarquer que, dû à l'effet de serre divergent, la zone habitable n'est pas située à une distance pour laquelle la température de surface serait

tardivement, d'être consommé par la photosynthèse d'origine biologique lors de la Grande Oxydation, il y a environ 2.4 milliards d'années (e.g., KASTING, 1993; ARNDT et NISBET, 2012).

 $<sup>^{2}</sup>$ La limite optimiste signifie ici la limite la plus proche de l'étoile, pour laquelle la zone habitable est la plus étendue.



FIGURE A.1 – Limites de la zone habitable pour des atmosphères de H<sub>2</sub>O et CO<sub>2</sub>, en fonction de la température de l'étoile. Les limites correspondant à l'effet de serre divergent (bordure interne) et à l'effet de serre maximum (bordure externe) sont calculées à partir des modèles climatiques. Elles sont plus pessimistes que les limites empiriques basées sur les observations de Vénus (bordure interne), et de Mars primitive (bordure externe). Quelques planètes du système solaire et exoplanètes confirmées sont représentées à titre de comparaison. Figure réalisée d'après les travaux de KOPPARAPU et al. (2013).

la température du point d'ébullition de l'eau (100°C pour la pression atmosphérique à la surface de la Terre actuelle), mais à une température de surface plus faible. Par ailleurs, au vu de l'importance de la vapeur d'eau dans l'effet de serre prenant place au niveau de la bordure interne de la zone habitable, des atmosphères riches en eau sont généralement considérées pour étudier sa localisation.

### La bordure externe de la zone habitable classique

Pour conserver une quantité substantielle d'eau liquide à la surface d'une planète située loin de son étoile, la température de surface doit être maintenue au-dessus du point de congélation de l'eau. Notons que si la température moyenne est proche de 273 K, une majeure partie des océans gelés réfléchit la lumière de l'étoile et amplifie le refroidissement, provoquant alors une glaciation globale de la planète (SELSIS et al., 2007). Afin d'éviter cette rétroaction entre la glace et l'albédo et de maintenir l'eau à l'état liquide, la température de surface moyenne doit être légèrement supérieure au point de congélation.

Maintenir des températures au-dessus du point de congélation à de grandes distances de l'étoile est possible grâce à un effet de serre maximal du  $CO_2$ , permis par le cycle carbonate-silicate. Ce cycle résulte de l'interaction entre le volcanisme, qui libère du  $CO_2$  dans l'atmosphère, et l'altération chimique des silicates calciques et magnésiens des roches de surface, suivi de la précipitation et de l'enfouissement des carbonates qui piègent ainsi le  $CO_2$  atmosphérique (SLEEP et ZAHNLE, 2001). Le volcanisme libère des gaz à effet de serre dans l'atmosphère, dont le  $CO_2$ , provoquant une augmentation de la température, de l'évaporation, et des précipitations. La production d'acide carbonique est alors intensifiée, ce qui accélère l'érosion des minéraux silicatés. L'érosion de surface diminue la concentration de CO<sub>2</sub> atmosphérique et compense ainsi l'effet de serre. Cette rétroaction négative aurait permis la stabilisation à long terme de la température à la surface de la Terre (WALKER, HAYS et KASTING, 1981; KASTING, 1989).

A travers ce cycle, une planète située loin de l'étoile, recevant moins de flux stellaire, pourrait accumuler le CO<sub>2</sub> atmosphérique dégazé par le volcanisme, grâce aux faibles températures de surface et aux faibles taux d'érosion associés. L'effet de serre du CO<sub>2</sub> maintient alors des conditions de surface tempérées malgré l'éloignement de la planète à l'étoile. Cependant, à une certaine distance, où la pression atmosphérique de CO<sub>2</sub> atteint 10 bar, l'atmosphère devient opaque à toutes les longueurs d'onde du domaine thermique : l'effet de serre ne peut augmenter davantage. Ce dernier n'est alors plus suffisant pour compenser la diminution de température liée à la forte diffusion Rayleigh de telles atmosphères de CO<sub>2</sub>, et la température de surface atteint le point de congélation de l'eau (KASTING, WHITMIRE et REYNOLDS, 1993; KOPPARAPU et al., 2013). La distance à l'étoile pour laquelle l'effet de serre du CO<sub>2</sub> est maximum correspond à la limite extérieure de la zone habitable (Figure A.1). Etant donné son importance capitale, les atmosphères riches en  $CO_2$  sont généralement considérées pour déterminer la position de la bordure externe de la zone habitable. En revanche, il est important de remarquer que le cycle carbonate-silicate sous-entend l'hypothèse forte qu'un mécanisme responsable d'un dégazage volcanique important, comme la tectonique des plaques, est à l'œuvre sur la planète considérée (SLEEP et ZAHNLE, 2001).

#### Limites empiriques de la zone habitable

A partir de contraintes observationnelles, des limites empiriques et plus optimistes que les précédentes ont été estimées. Elles reposent sur l'hypothèse qu'un océan d'eau était présent sur Vénus et Mars dans le passé.

La position de la bordure interne peut être déterminée à partir de l'observation de Vénus. La cartographie de la surface vénusienne, effectuée par la sonde Magellan dans les années 90, combinée avec des observations télescopiques depuis la surface de la Terre, indique une surface relativement jeune (e.g., SMREKAR, DAVAILLE et SOTIN, 2018). Ces données suggèrent un resurfaçage important, lors d'un évènement bref et catastrophique, ou au cours d'un processus de retour à l'équilibre (e.g., PHILLIPS et al., 1992; STROM, SCHABER et DAWSON, 1994), et ne montrent aucune preuve pouvant témoigner de la présence d'eau liquide au cours du dernier million d'années (SOLOMON et HEAD, 1991). Si l'on suppose que Vénus a accrété de l'eau lors de sa formation, une hypothèse optimiste consiste à penser que de l'eau liquide aurait été présente dans le passé, et ce, jusqu'au resurfaçage il y a environ un million d'années. Si l'on considère que la vaporisation de l'eau a eu lieu à l'époque du resurfaçage, on peut calculer le flux émis par le Soleil à cette époque (calculable d'après les modèles d'évolution solaire tel que GOUGH, 1981), et reçu à la distance de Vénus. Ce flux correspond alors au flux d'insolation critique au-delà duquel l'effet de serre divergent se serait déclenché, et permet de déduire la limite de la zone habitable correspondant à une « Vénus récente » (Figure A.1; KASTING, WHITMIRE et REYNOLDS, 1993; SELSIS et al., 2007; KOPPARAPU et al., 2013).

La même approche peut être suivie pour définir une limite extérieure empirique en se basant sur l'observation de la planète Mars. Un certain nombre d'arguments géomorphologiques, tel que la présence de réseaux de vallées, et minéralogiques, comme la présence de phyllosilicates formés par altération acqueuse, suggèrent que Mars était habitable dans le passé, jusqu'à environ 3.8 milliards d'années (Ga) avant notre ère (MASURSKY, 1973; POLLACK et al., 1987; POULET et al., 2005; BIBRING et al., 2006). En utilisant la luminosité solaire de cette époque reçue à la distance orbitale martienne, KASTING, WHITMIRE et REYNOLDS (1993) ont calculé la limite de la zone habitable correspondant à Mars primitive (Figure A.1).

#### Au-delà de la zone habitable classique

L'étude pionnière de la zone habitable de KASTING, WHITMIRE et REYNOLDS (1993) est contemporaine des premières détections de planètes extrasolaires de masse terrestre, en orbite autour du pulsar PSR B1257+12, situé à plus de 2300 années-lumière du Soleil (WOLSZCZAN et FRAIL, 1992). Trois ans plus tard, en 1995, survient la confirmation de la première exoplanète détectée autour d'une étoile de la séquence principale, 51 Pegasi, à l'aide du télescope de 193 cm de l'observatoire de Haute-Provence (MAYOR et QUELOZ, 1995). En ce jour du 14 septembre 2018, 3828 détections d'exoplanètes ont été confirmées dans 2860 systèmes stellaires, dont 632 systèmes multiplanétaires<sup>3</sup>. 4496 candidats supplémentaires, détectés par la mission Kepler, sont encore à confirmer. Certaines de ces découvertes sont particulièrement remarquables, comme la détection d'une planète rocheuse potentiellement habitable dans le système de Proxima Centauri (ANGLADA-ESCUDÉ et al., 2016), l'étoile la plus proche de notre système solaire, une naine rouge située à seulement 4.2 années-lumière de la Terre. On mentionnera également la détection d'au moins sept planètes rocheuses en orbite autour de Trappist-1 (GILLON et al., 2017), une naine rouge ultra-froide située à 39 années-lumière du Soleil. Une telle augmentation du nombre d'exoplanètes découvertes (Figure A.2), ainsi que l'amélioration des moyens de calculs ont suscité la réévaluation des limites classiques de la zone habitable définies par KASTING, WHIT-MIRE et REYNOLDS (1993), en incluant par exemple une mise à jour du transfert radiatif (KOPPARAPU et al., 2013), en prenant en compte la dynamique atmosphérique (LECONTE et al., 2013; GOLDBLATT et al., 2013; WOLF et TOON, 2015), ou encore l'influence de la masse de la planète (PIERREHUMBERT, 2010; KOPPARAPU et al., 2014). L'approche a également été étendue à des compositions atmosphériques différentes, pour des espèces gazeuses autres que l'eau et le dioxyde de carbone. La zone habitable apparaît alors plus étendue dans le cas de planètes sèches et désertiques (ABE et al., 2011; ZSOM et al., 2013; KODAMA et al., 2015), et plus étroite pour des « mondes océans » (GOLDBLATT, 2015). Par ailleurs, la zone habitable s'élargit lorsque l'on augmente la concentration d'autres gaz tel que le méthane (RAMIREZ et KALTENEGGER, 2018), ou l'hydrogène (PIERREHUMBERT et GAIDOS, 2011). L'effet des nuages a aussi été étudié, à l'aide de modèles 1–D (e.g., SELSIS et al., 2007; ZSOM, KALTENEGGER et GOLDBLATT, 2012; RAMIREZ et KASTING, 2017) et 3–D, où une rétroaction permettant de stabiliser le climat est à l'origine de conditions tempérées proche de l'étoile, rapprochant ainsi la bordure interne de la zone habitable vers l'étoile pour des planètes à rotation lente (YANG, COWAN et ABBOT, 2013; YANG et al., 2014). Toutes les études mentionnées ci-dessus s'intéressent à l'habitabilité autour d'étoiles de la séquence principale mais une extension temporelle de ces travaux, autour d'étoiles pré- (RAMIREZ et KALTENEGGER, 2014) et post-séquence principale (RAMIREZ et KALTENEGGER, 2016) a également été réalisée.

Un grand nombre d'études récentes ont été consacrées uniquement à l'étude de systèmes spécifiques présentant un intérêt particulier, comme ceux de Proxima Centauri ou Trappist-1, pour mieux contraindre l'habitabilité (e.g., RIBAS et al., 2016;

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>D'après L'Encyclopédie des Planètes Extrasolaires.





FIGURE A.2 – Effectif cumulé des détections d'exoplanètes par an et méthode de détection correspondante. Graphique généré en utilisant l'archive NASA Exoplanet Archive.

TURBET et al., 2016; MEADOWS et al., 2016; RIBAS et al., 2017; TURBET et al., 2018) ou tenter de prédire la structure interne de leurs planètes (BRUGGER et al., 2016; GRIMM et al., 2018).

Des modèles atmosphériques 1–D et 3–D de circulation générale ont été utilisés de façon complémetaire. Les modèles 1–D, rapides et nécessitant peu de ressources numériques, permettent l'étude d'une large gamme de paramètres stellaires et planétaires. Au contraire, les modèles 3-D requièrent des ressources calculatoires importantes mais peuvent simuler avec plus de précisions et de façon réaliste un nombre limité de processus physiques, permettant une meilleure quantification des phénomènes, comme l'influence du taux de rotation (YANG, COWAN et ABBOT, 2013; YANG et al., 2014; LECONTE et al., 2015; WORDSWORTH, 2015; KOPPARAPU et al., 2016; WAY et al., 2016), ou encore du transport de chaleur par les océans (BOSCHI, LUCARINI et PAS-CALE, 2013; SHIELDS et al., 2014; GODOLT et al., 2015). Les modèles 3–D ont également l'avantage considérable de traiter l'eau dans le système climatique de façon auto-cohérente, en incluant la vapeur d'eau et les processus d'évaporation, les nuages (leur dynamique ainsi que leur distribution spatiale), la glace de surface, les océans, et de résoudre la distribution spatiale et temporelle de ces paramètres au fil des simulations. Cependant, des incertitudes persistent concernant le transfert radiatif de la vapeur d'eau (YANG et al., 2016), le traitement de la convection humide (DEL GENIO, 2016), et des nuages (FLATO et al., 2013). Il est utile de préciser qu'en prescrivant l'albédo de surface et l'humidité relative dans les modèles 1–D à partir des résultats obtenus avec les modèles 3-D, des conclusions similaires concernant l'habitabilité d'une planète peuvent être faites avec les deux approches (GODOLT, M. et al., 2016).

Un désavantage majeur des modèles 3–D réside dans le nombre de conditions aux limites à prescrire. Parmi ces conditions, on pourra citer la nécessité de présupposer la distribution des continents (et de la glace s'il y a lieu), du relief, d'imposer le flux de chaleur interne à la surface, l'obliquité et la vitesse de rotation pour les paramètres orbitaux, et la redistribution de chaleur par les océans. Plus important encore, les modèles de climat, 1–D ou 3–D, présupposent une masse et une composition atmosphérique, paramètres très mal contraints pour les planètes extra-solaires. Les paramètres utilisés sont alors généralement issus de ce qui est observé actuellement sur Terre, une planète habitable et habitée, ou sur d'autres planètes du système solaire. Cela induit des hypothèses fortes sur l'évolution passée de ces planètes, évolution conduisant aux conditions observées aujourd'hui, et réutilisées pour simuler d'autres planètes dont l'évolution passée est potentiellement très différente. En d'autres termes, cette démarche peut être interprétée comme consistant à simuler un état hypothétique statique, en isolant les conditions de surface à un temps donné, indépendamment des processus antérieurs à partir desquels ces conditions seraient issues, ou des mécanismes futurs qui pourraient affecter lesdites conditions.

Une des hypothèses majeures est de supposer, à partir de l'état actuel de la Terre, que l'eau est déjà présente à la surface d'une planète, signifiant que le contenu en volatils de la planète simulée est indépendant du scénario de formation planétaire. La section suivante aborde les processus relatifs à l'apport d'eau dans les théories de formation des systèmes planétaires, afin de recontextualiser les hypothèses des modèles de climat ou d'évolution future. Dès lors, même si une planète acquiert une quantité d'eau importante lors de sa formation, rien ne garantit que des conditions tempérées seront atteintes à l'issue d'une évolution complexe, résultant de nombreuses interactions entre les différents réservoirs de la planète (FOLEY et DRISCOLL, 2016), et de la planète elle-même avec son environnement. Ainsi, une autre hypothèse majeure est de présupposer des conditions de surface statiques et pré-existantes de type terrestre, indépendamment de l'évolution thermique ou géodynamique de la planète, sans considérer une quelconque influence de l'intérieur planétaire. Pire encore, les conditions initiales considérées, et les hypothèses implicites qu'elles supposent, pourraient être en contradiction avec les scénarios d'évolution testés. L'importance des mécanismes prenant part à l'évolution précoce des planètes pour atteindre et maintenir des conditions de surface tempérées sera discutée dans la dernière section de la présente introduction.

### A.1.2 Formation des planètes telluriques et apport de volatils

Les théories actuelles de formation des systèmes planétaires suggèrent, à partir d'observations et de données issues des météorites, que ces systèmes sont issus de l'effondrement gravitationnel<sup>4</sup> d'un volume froid et vaste constitué de gaz et de poussières, communément qualifié de « nuage moléculaire » (e.g., MONTMERLE et al., 2006, et Figure A.3). Les étoiles sont les premières à se former en accrétant la matière d'un disque circumstellaire. Les planètes commencent ensuite à se former à travers des processus collisionnels, alors que le disque de gaz et de poussières se dissipe progressivement. Le berceau des planètes est ainsi appelé le disque protoplanétaire. Quelques exemples spectaculaires d'observations de tels objets ont été réalisées et sont montrées dans les Figures A.4, A.5, et A.6. Les éléments chimiques constitutifs du disque déterminent nécessairement la composition de tous les corps du système planétaire. Au cours de la formation des planètes, trois actes successifs peuvent être distingués (e.g., MORBIDELLI et al., 2012; O'BRIEN et al., 2018).

#### Acte I : des grains de poussière aux planétésimaux

La première étape de la formation planétaire est caractérisée par la présence de grains de poussière micrométriques, qui vont croître jusqu'à former des corps compacts kilométriques : les planétésimaux. Au niveau du plan médian de la nébuleuse protoplanétaire, ces grains de poussière grossissent en s'accrétant les uns aux autres à la suite de collisions à faibles vitesses (WEIDENSCHILLING, 1997). Les mécanismes de croissance à l'origine de la transition entre les deux tailles caractéristiques évoquées restent mal compris à l'heure actuelle. En effet, les particules de taille centimétrique sont trop légères pour que leurs collisions soient contrôlées par la gravité, et trop massives pour que les forces électrostatiques soient effectives (e.g., KALLENBACH, BENZ et LUGMAIR, 2000; MORBIDELLI et al., 2012). Cependant, le mécanisme de « pebble accretion<sup>5</sup> », particulièrement efficace pour accréter des objets centimétriques à métriques en augmentant leur résistance aérodynamique<sup>6</sup>, a récemment été proposé et semble prometteur pour combler cette lacune et expliquer la croissance des planétésimaux et des noyaux de planètes géantes (e.g., ORMEL, C. W. et KLAHR, H. H., 2010; JOHANSEN et LAMBRECHTS, 2017).

Du fait d'une diminution de température relative à l'éloignement de l'étoile (e.g., DODSON-ROBINSON et al., 2009), les éléments volatils peuvent condenser uniquement loin de l'étoile. Il est donc généralement admis que cette phase de croissance est responsable d'un gradient chimique radial. De plus, la dissipation du gaz constituant la

 $<sup>^4 \</sup>rm Contraction$  d'un corps massif sous l'effet de sa propre attraction gravitationnelle, de son propre poids.

 $<sup>{}^{5}</sup>$ Traduit littéralement par « accrétion de cailloux », ce mécanisme concerne divers objets allant des chondres, aux fragments de corps plus massifs en passant par de gros blocs rocheux.

<sup>&</sup>lt;sup>6</sup>Les objets ainsi freinés par la friction du gaz environnant échappent plus difficilement à la gravité des corps plus massifs.



FIGURE A.3 – Illustration schématique de la formation des systèmes planétaires par effondrement gravitationnel selon l'hypothèse de la nébuleuse. Le nuage moléculaire, ou nébuleuse solaire (gaz principalement), se contracte sous l'effet de sa propre gravité, se refroidit et des particules de poussières sont formées par condensation du gaz. Les particules de poussières s'accrètent et forment des corps de plus en plus massifs, qui deviendront astéroïdes, comètes et planètes. Le corps le plus massif étant la proto-étoile, centre de gravité du système en rotation où les forces centrifuge et de gravité sont responsables de la formation des autres proto-planètes au fil du temps. La conservation du moment cinétique (ou moment angulaire) est responsable de l'aplatissement et de la formation d'un disque en rotation. La nébuleuse d'Orion M42 est un exemple de nuage moléculaire facilement obser-

vable avec un simple télescope. Crédits : Pearson Prentice Hall.



FIGURE A.4 – Observations de disques de débris autour d'étoiles jeunes (en haut) et illustrations correspondantes (en bas) indiquant l'orientation du disque. Dans les observations, la lumière propre de l'étoile est masquée afin de povoir observer la lumière diffusée par le disque. Crédits : NASA/ESA, R. Soummer, Ann Feild (STScI).



FIGURE A.5 – Disques protoplanétaires capturés par le radiotélescope géant ALMA (projet DSHARP). Les disques sont à des états d'évolution différents comme en témoigne la densité et la répartition de matière variables autour des étoiles centrales. La formation de corps plus ou moins massifs en orbite autour de l'étoile centrale, qui deviendront plus tard astéroïdes, comètes ou encore planètes, concentre les éléments du disque de poussière en leur sein, « nettoyant » ainsi le disque de poussières par endroit et créant des bandes sombres. Des heures d'observations réparties sur plusieurs mois ont été nécessaires à la réalisation de telles images. Crédits : ALMA (ESO/NAOJ/NRAO), S. Andrews et al.; NRAO/AUI/NSF, S. Dagnello.



FIGURE A.6 – Cette image, prise avec le télescope spatial Hubble (NASA/ESA), montre la nébuleuse du Serpent, une région de naissance d'étoiles située à environ 1300 années-lumières. Au sein de la nébuleuse, dans la partie supérieure droite de l'image, une ombre est créée par le disque protoplanétaire entourant l'étoile HBC 672. Alors que le disque de débris est trop mince pour pouvoir être vu par Hubble, son ombre est projetée sur le nuage dans lequel il est né. Sur cette photographie, la structure s'étend sur environ 200 fois le diamètre de notre propre système solaire. Un phénomène similaire peut être observé autour d'une autre étoile jeune dans le coin supérieur gauche de l'image.

Crédits texte et image : NASA/ESA Hubble Space Telescope.
nébuleuse solaire aurait été plus rapide que la diminution de température permettant la condensation des volatils dans le système solaire interne<sup>7</sup> (ALBARÈDE, 2009). Cela laisse penser que les planétésimaux de la partie interne du disque auraient été constitués de matériaux secs et pauvres en volatils, expliquant l'absence de corps primitifs proche de l'étoile *et* riches en volatils. Les analyses de laboratoire sont en accord avec cette hypothèse : le contenu en eau des météorites est en corrélation directe avec la distance héliocentrique de leurs corps parents (Figure A.7). Les corps parents des chondrites à enstatite auraient ainsi été formés proche de l'étoile, dans un milieu chaud, hautement réducteur, et pauvre en eau (HUTSON et RUZICKA, 2000). Les chondrites ordinaires, plus riches en eau que les précédentes, seraient originaires de corps formés dans un environnement plus froid, plus éloigné de l'étoile alors que les chondrites carbonnées, riches en eau, seraient issues de corps formés encore plus loin, expliquant leur forte concentration en eau et en éléments volatils (ROBERT, 2003). Remarquons ici que l'âge estimé des chondres indique un temps d'accrétion similaire pour les corps parents des chondrites ordinaires et carbonées, soit environ 3.5 millions d'années (Ma) après la formation des CAI<sup>8</sup> (VILLENEUVE, CHAUSSIDON et LIBOU-REL, 2009). Les comètes proviendraient de planétésimaux glacés du système solaire externe<sup>9</sup> (WEIDENSCHILLING, 1997). Ce sont les corps les plus riches en eau du système solaire et témoignent de la formation de glace au-delà de la ceinture d'astéroïdes, entre et au-delà des orbites des géantes gazeuses (Figure A.7).

Alors que la Terre est située à une unité astronomique<sup>10</sup> (1 UA), elle est bien plus enrichie en eau que les corps parents issus de son voisinage. La masse moyenne des océans à la surface de la Terre (M<sub>EO</sub> pour Mass<sub>EarthOcean</sub>) est estimée à  $1.4 \times 10^{21}$  kg. La quantité d'eau stockée à l'intérieur de notre planète reste cependant indéterminée. Les estimations de l'eau contenue dans le manteau varient de  $\approx 0.3 M_{EO}$  (LÉCUYER, GILLET et ROBERT, 1998) à  $\approx 8 M_{EO}$  (MARTY, 2012) et atteignent même 50 M<sub>EO</sub> pour le manteau primitif (DREIBUS et WAENKE, 1989; RIGHTER et DRAKE, 1999; ABE et al., 2000). De plus, NOMURA et al. (2014) estiment que l'équivalent de 80 océans d'eau terrestres seraient piégés dans le noyau sous forme d'hydrogène, alors que BADRO, CÔTÉ et BRODHOLT (2014) suggèrent un noyau pauvre en hydrogène. Ces désaccords résultent de la difficulté à extrapoler le contenu en eau des échantillons qui nous parviennent en surface à l'ensemble de la planète, ces échantillons n'étant pas forcément représentatifs d'une concentration globale, mais également du fait que même une infime proportion des réservoirs internes et massifs représente une quantité importante d'eau. A titre d'exemple, la masse totale des océans terrestres,  $1 M_{EO}$ , ne représente que

$$\frac{1\,\mathrm{M_{EO}}}{\mathrm{M_{manteau}}} = \frac{1.4 \times 10^{21}\,\mathrm{kg}}{4.01 \times 10^{24}\,\mathrm{kg}} \approx 3.5 \times 10^{-2}\,\%\,\mathrm{poids}$$

de la masse du manteau terrestre  $M_{manteau}$ .

Malgré leur proximité au Soleil, les autres planètes rocheuses du système solaire interne semblent également avoir reçu une quantité d'eau substantielle lors de leur

<sup>&</sup>lt;sup>7</sup>Le système solaire interne est généralement défini comme étant la région qui s'étend de l'étoile à la ceinture d'astéroïdes, incluant donc les planètes telluriques.

<sup>&</sup>lt;sup>8</sup>Les Inclusions minérales riches en Calcium et en Aluminium sont des enclaves réfractaires, de taille submillimétrique à centrimétrique, supposées être les premiers éléments formés du système solaire, définissant ainsi son âge : 4.568 Ga (BOUVIER et al., 2007; BURKHARDT et al., 2008).

<sup>&</sup>lt;sup>9</sup>Au-delà de la ceinture d'astéroïdes.

<sup>&</sup>lt;sup>10</sup>L'unité astronomique est l'unité de distance de référence lorsque l'on s'intéresse à des phénomènes à l'échelle des systèmes planétaires. Elle est fondée sur la distance moyenne entre la Terre et le Soleil qui est d'environ 150 millions de kilomètres.



FIGURE A.7 – Emplacement des corps parents supposés de différents objets, et contenu en eau au moment de la croissance de la Terre. Les chondrites carbonées, que l'on pense être issues des astéroïdes de type C majoritaires dans la ceinture d'astéroïdes, sont les plus riches en eau. Les chondrites ordinaires sont spectralement liées aux astéroïdes de type S qui sont prédominant entre 2 et 2.5 UA. Les chondrites à enstatite sont très sèches et probablement issues des astéroïdes de type E qui sont majoritaires dans la famille de Hungaria, située dans la partie interne de la ceinture principale aux alentours de 1.8 UA. MB signifie ceinture principale (« Main Belt » en anglais). D'après MORBIDELLI et al. (2012).

formation. Le rapport deutérium<sup>11</sup>/hydrogène (D/H) de l'atmosphère vénusienne actuellement élevé indique un enrichissement important en deutérium par rapport à l'hydrogène, vraisemblablement lié à une perte d'eau importante (DONAHUE et al., 1982; KRASNOPOLSKY et al., 2013). Les bilans de masse confortent également l'idée que les concentrations initiales de carbone, d'azote, et d'eau étaient similaires entre la Terre et Vénus (e.g., LÉCUYER, SIMON et GUYOT, 2000). Sur Mars, des structures morphologiques (e.g., CARR, 1996; BAKER, 2006), la minéralogie de surface (e.g., GENDRIN et al., 2005; LANGEVIN et al., 2005; POULET et al., 2005; BIBRING et al., 2006), et même des traces potentiellement laissées par le passage de tsunamis (Ro-DRIGUEZ et al., 2016; COSTARD et al., 2017) dans un hypothétique ancien océan de l'hémisphère Nord (HEAD et al., 1999) constituent les témoins d'un passé riche en eau sur la planète rouge.

A l'heure actuelle, étant donné la diversité de sources potentielles et des mécanismes en jeu, il n'existe pas de consensus permettant d'expliquer l'apport de volatils lors de la formation des planètes du système solaire interne. En revanche, les hypothèses de l'apport d'eau par la nébuleuse ou par les comètes ont été écartées, suggérant un apport plus tardif, probablement par les chondrites carbonées. L'étape ultérieure de formation planétaire est alors d'importance capitale pour façonner les caractéristiques finales et expliquer la composition des planètes telluriques, avec des implications majeures concernant l'apport de volatils.

#### Acte II : la phase d'accrétion accélérée et oligarchique

La deuxième phase de la formation planétaire est caractérisée par la présence d'objets kilométriques dans le disque protoplanétaire : les planétésimaux, qui s'accrètent les uns aux autres sous l'effet de la gravité pour former des corps plus larges et massifs qualifiés d'embryons planétaires. La grande taille des planétésimaux implique à la fois une section efficace importante et une attraction gravitationnelle forte. Ces caractéristiques sont renforcées à chaque collision, rendant l'accrétion de plus en plus efficace pour les corps massifs et favorisant ainsi leur croissance accélérée (e.g., GREENBERG et al., 1978; WETHERILL et STEWART, 1989; KOKUBO et IDA, 1996; WEIDENSCHIL-LING et al., 1997). A partir d'une certaine masse, les corps les plus larges du système, qualifiés d'oligarques, vont dominer la dynamique d'accrétion qui va alors ralentir (IDA et MAKINO, 1993). En effet, la croissance accélérée ne peut être auto-entretenue étant donné que le disque se « vide » localement, au fil de la formation d'un nombre relativement faible d'oligarques accrétant toute la masse contenue dans leur proche voisinage (Kokubo et Ida, 1998; Kokubo et Ida, 2000; Thommes, Duncan et LEVISON, 2003). Dans le même temps, la vitesse relative des petits corps aux alentours est accélérée, et conduit à des chocs mutuels plus énergétiques et destructifs. Les petits planétésimaux ne grossissent plus davantage mais participent à la croissance oligarchique des embryons planétaires (KOKUBO et IDA, 1998; KOKUBO et IDA, 2000; CHAMBERS, 2006). Il est important de remarquer ici que ces processus locaux n'aboutissent qu'à un faible mélange radial : le gradient chimique radial du disque de planétésimaux, s'il existe, est conservé lors de la formation des embryons planétaires.

Contrairement aux embryons de la partie interne du disque, les noyaux des géantes gazeuses deviennent rapidement suffisamment massifs pour attirer une quantité considérable de gaz, principalement de l'hydrogène et de l'hélium, avant que le disque protoplanétaire ne se dissipe. L'origine de ce phénomène n'est pas encore bien comprise mais pourrait résulter de la combinaison des éléments suivants. Au-delà de la

<sup>&</sup>lt;sup>11</sup>Le deutérium, symbolisé D ou <sup>2</sup>H, est un isotope naturel stable de l'hydrogène, son noyau est composé d'un proton et d'un neutron, alors que l'atome d'hydrogène n'est constitué que d'un proton.

ligne des glaces<sup>12</sup>, la glace d'eau augmente la densité de surface des matériaux solides et amplifie l'accélération de l'accrétion (e.g., DODSON-ROBINSON et al., 2009). Il a été proposé que la migration convergente des embryons déclenche leur accrétion mutuelle rapide (MORBIDELLI et al., 2008; LYRA, PAARDEKOOPER et LOW, 2010; SÁNDOR, LYRA et DULLEMOND, 2011). De plus, pour accréter des matériaux entre eux, les collisions entre de la glace et un corps rocheux (glace-roche), se produisant au-delà de la ligne des glaces, sont plus efficaces que les collisions entre deux corps rocheux, qui vont avoir tendance à se briser lors de l'impact ou à rebondir l'un contre l'autre. Cette idée peut être illustrée de façon simpliste en comparant l'impact d'une roche dans de la neige et l'impact de deux roches entre elles. Dans le premier cas, la roche va rester collée à la neige en raison de liaisons chimiques permises par la molécule d'eau, dans le deuxième cas, les roches vont simplement rebondir l'une contre l'autre. La formation rapide<sup>13</sup> des planètes massives, les géantes, à la fin de cette seconde phase d'accrétion accélérée puis oligarchique, affecte considérablement la dynamique ultérieure du système planétaire. Inversement, dans le système solaire interne, les embryons planétaires ne sont pas encore représentatifs de la configuration actuelle : ils sont trop nombreux et ne sont ni suffisamment dispersés, ni suffisamment massifs : une troisième étape est nécessaire pour achever la formation des planètes de type terrestre.

#### Acte III : des embryons planétaires aux planètes telluriques

La troisième et dernière phase de formation planétaire est dominée par des collisions géantes entre des embryons de taille allant de plusieurs centaines à plusieurs milliers de kilomètres. C'est lors de cette dernière étape qu'a lieu la formation des planètes rocheuses du système solaire interne et la mise en place de leur configuration orbitale, alors que les géantes gazeuses sont déjà formées. Au commencement de cette troisième étape, les orbites des géantes sont la résultante de leurs interactions gravitationnelles et d'échanges de moment cinétique avec le disque pendant la phase d'accrétion accélérée, et diffèrent vraisemblablement de leur position orbitale actuelle. En effet, la densité du gaz nébulaire tend à contenir le mouvement des planétésimaux et des embryons pré-isolés dans le disque. Quand le gaz du disque se dissipe, la friction dynamique devient suffisamment faible pour permettre aux corps de se déplacer librement et subir les perturbations gravitationnelles qui vont rendre leurs orbites plus excentriques. Les orbites peuvent alors se croiser ce qui augmente fortement le nombre de collisions (CHAMBERS et WETHERILL, 1998). On distingue alors la région des planètes rocheuses de celle de la ceinture d'astéroïdes, qui est beaucoup plus sujette aux perturbations induites par Jupiter (CHAMBERS et WETHERILL, 2001; RAYMOND, QUINN et Lunine, 2004; RAYMOND, QUINN et LUNINE, 2005; O'BRIEN, MORBIDELLI et LEVISON, 2006). Ainsi, dans la partie interne où les excentricités des corps restent faibles et stables, l'accrétion s'effectue à travers des collisions à faibles vitesses. Les embryons et planétésimaux de la ceinture d'astéroïdes sont quant à eux soumis aux aléas des résonnances avec Jupiter : leur excentricité augmente rapidement et favorise les collisions mutuelles et l'éjection de certains hors de la ceinture. La majeure partie des corps peuplant initialement la ceinture d'astéroïdes est alors éjectée, y compris la plupart des embryons. Certains de ces objets finiront leur course dans le Soleil,

 $<sup>^{12}</sup>$ La ligne des glaces est la distance théorique à l'étoile au-delà de laquelle la température est suffisamment froide pour permettre à un composé volatil, la plupart du temps l'eau, de condenser sous sa forme solide (glace). Dans notre système solaire, on estime qu'elle serait localisée entre 2 et 4 UA (e.g., SASSELOV et LECAR, 2000; MARTIN et LIVIO, 2012).

<sup>&</sup>lt;sup>13</sup>Les planètes géantes gazeuses se seraient formées en quelques millions d'années environ, alors que les planètes rocheuses auraient acquis leur configuration actuelle en une centaine de millions d'années.



FIGURE A.8 – Croissance des planètes rocheuses à partir d'un disque d'embryons planétaires et de planétésimaux. La position des corps (demi-grand axe et excentricité) est représentée à différents temps de la séquence d'accrétion (indiqué en haut à gauche de chaque sous-figure) La taille des marqueurs est fonction de la masse des objets. Jupiter n'est pas représentée à l'échelle. Trois planètes rocheuses, la plus massive ayant une masse proche de celle de la Terre, sont formées à la fin de la séquence d'accrétion à une distance inférieure à 2 UA. Seulement une faible fraction de la population initiale de planétésimaux reste au sein de la ceinture d'astéroïdes. D'après MORBIDELLI et al. (2012).

d'autres seront éjectés sur des orbites hyperboliques, et une autre partie sera accrétée par les planètes telluriques en pleine croissance (Figure A.8). A l'issue de cet épisode dont la durée est estimée entre 30 et 100 Ma, un petit nombre de planètes rocheuses sont formées sur des orbites stables et distinctes entre 0.5 et 2 UA (CHAMBERS, 2001; RAYMOND, QUINN et LUNINE, 2004; RAYMOND, QUINN et LUNINE, 2005; O'BRIEN, MORBIDELLI et LEVISON, 2006).

Afin d'expliquer la faible taille de Mars et pour rendre compte de la configuration orbitale actuelle et d'autres contraintes observationnelles (masse de la ceinture d'astéroïdes par exemple), d'autres paramètres sont à prendre en compte dans ces modèles de formation planétaire, comme par exemple la migration des planètes géantes et les résonances associées (e.g., MASSET et SNELLGROVE, 2001; GOMES et al., 2005; TSI-GANIS et al., 2005; MORBIDELLI et al., 2005; MORBIDELLI et CRIDA, 2007; WALSH et al., 2011, donnant lieu au scénario du Grand-Tack). L'hypothèse de la migration de planètes géantes gazeuses a été proposée pour expliquer la détection d'exoplanètes de masse comparable ou supérieure à celle de Jupiter, situées très proche de leur étoile, en deçà de l'orbite de Mercure.

Ces scénarios suggèrent un apport d'eau par les planétésimaux primitifs et/ou par les embryons planétaires de la partie externe de la ceinture d'astéroïdes (MORBIDELLI et al., 2000; RAYMOND, QUINN et LUNINE, 2004; RAYMOND, QUINN et LUNINE, 2005; RAYMOND, QUINN et LUNINE, 2006; RAYMOND, QUINN et LUNINE, 2007; O'BRIEN, MORBIDELLI et LEVISON, 2006; LUNINE et al., 2007). Les similitudes des rapports D/H des chondrites carbonées et des planètes telluriques sont en accord avec cette hypothèse (DAUPHAS, ROBERT et MARTY, 2000; ALEXANDER et al., 2012) et favorisent actuellement ces scénarios de formation planétaire. Il est tout de même important de garder à l'esprit que la mesure des rapports D/H reste sujette à débats (e.g., STEPHANT, 2014; STEPHANT, REMUSAT et ROBERT, 2016; STEPHANT et al., 2018).

Malgré leurs incertitudes respectives, les différents scénarios de formation planétaire concordent à dire que la majeure partie de l'eau des planètes telluriques a été accrétée lors de leur formation et non pas plus tardivement. Il semblerait également que l'apport d'eau n'est pas constant et s'accélère vers la fin de la phase d'accrétion. Quelque soit le scénario considéré, il est essentiel de réaliser que les planètes rocheuses terminent leur formation en ayant accrété une quantité d'eau importante, proche de leur contenu en eau maximum, avant de poursuivre leur évolution future.

Par ailleurs, cette dernière étape de formation planétaire est marquée par une fréquence élevée de collisions quasi-tangentielles entre des embryons de la taille de Mars et les protoplanètes internes (AGNOR, CANUP et LEVISON, 1999; ELSER et al., 2011; MORISHIMA, STADEL et MOORE, 2010). De telles collisions engendrent la fragmentation des impacteurs (CANUP et ASPHAUG, 2001), dont les débris, en se ré-accrétant peuvent vraisemblablement former un satellite (Figure A.9; CANUP et ESPOSITO, 1996). Ce scénario est généralement proposé pour expliquer la formation du système Terre-Lune (BENZ, SLATTERY et CAMERON, 1986; BENZ, SLATTERY et CAMERON, 1987; IDA, CANUP et STEWART, 1997; CANUP, 2008). Une des conséquences de ces impacts majeurs est que l'énergie apportée lors de la collision peut être responsable de la fonte d'une partie plus ou moins importante de la planète. Cet aspect et les implications relatives à l'état initial des planètes rocheuses sont discutés en détail dans la section suivante.

## A.1.3 Evolution primitive des planètes telluriques : la phase océan de magma

#### L'hypothèse de l'océan de magma

En observant la Lune, de nuit, et dès lors que les yeux ne sont plus éblouis par la lumière réfléchie par notre astre, on peut aisément distinguer deux couleurs différentes : la majeure partie de notre satellite nous apparaît blanche, alors que de petites portions de la surface, plus ou moins circulaires, semblent plus sombres et grisâtres (Figure A.10). Les échantillons lunaires, ramenés sur Terre à la suite des missions du programme Apollo au début des années 70 pour la plupart (d'Apollo 11 en juillet 1969, à Apollo 17 en décembre 1972), ont révélé de fortes similitudes compositionnelles avec les matériaux constitutifs de la Terre, et ont permis de caractériser la minéralogie de surface. Malgré que les sites d'alunissage des missions Apollo étaient localisés principalement dans les étendues sombres, appelées mers lunaires (mis à part Apollo 16 qui s'est posée sur les hauts plateaux de Descartes en avril 1972), que l'on supposait être d'anciennes mers où la vie aurait pu se développer et laisser des traces, des fragments des hautes terres ont également été échantillonnés depuis Apollo 11 en 1969. Les terrains clairs, constitutifs des hautes terres, ont ainsi pu être identifiés comme étant des anorthosites, dont les cristaux de plagioclases sont responsables de la couleur blanche. A l'opposé, les terrains sombres constitutifs des basses terres sont basaltiques et issus d'un volcanisme plus tardif.



FIGURE A.9 – Simulation numérique de l'impact géant qui aurait formé la Lune, au cours duquel un corps de 0.13 fois la masse terrestre entre en collision avec un corps dont la masse est de 0.89 fois la masse de la Terre. Les deux objets sont initialement chimiquement différenciés, et contiennent 70% de forstérite et 30% de fer (en pourcentage poids). (a - e) Vues en plongée verticale du système post-impact (le temps post-impact est indiqué pour chaque sous-figure). La distance est indiquée en 10<sup>3</sup> km (notez le changement d'échelle entre les différentes vue). L'échelle de couleur indique la température en kelvin. Le disque de débris formé à la suite de l'impact et en orbite autour de la Terre finit par se rassembler pour former la Lune. (f) Vue rapprochée montrant l'état thermique de la planète à la fin de la séquence. D'après CANUP (2008).



FIGURE A.10 – Photographie de la Lune prise avec un télescope Newton 150/750 cm Skywatcher<sup>®</sup> depuis Arpajon sur Cère, France, en décembre 2015. On y distingue aisément le contraste de couleur entre la croûte anorthositique, blanche et brillante, et les mers basaltiques, sombres et grisâtres.

Étant donné l'absence d'atmosphère, empêchant toute érosion éolienne ou aquatique, et l'absence de tectonique des plaques, la surface de la Lune est restée presque intacte, affectée uniquement par les processus de cratérisation (micro et macro-météoritiques). Les échantillons lunaires sont donc les témoins de la formation de sa surface, il y a 4.4–4.53 milliards d'années. Pour expliquer la présence des minéraux anorthositiques, légers, riches en Ca et Al, constitutifs de la croûte, SMITH et al. (1970) et WOOD et al. (1970) ont proposé que les hautes terres, plus anciennes que les mers, se seraient formées par flottaison de ces minéraux légers au sein d'un magma<sup>14</sup> plus dense, s'accumulant ainsi à la surface pour former la croûte riche en feldspaths (Figure A.11). Cela implique la fusion d'une grande partie de la Lune au début de son histoire. Cette épaisse couche de roche fondue et liquide entourant le satellite a donné naissance au concept d' « océan de magma » (OM). Un tel état initial a été interprété comme étant le résultat de la formation de la Lune elle-même, à la suite d'une collision très énergétique entre la proto-Terre et Theia, un corps de la taille de Mars (CANUP, 2008), suivie par l'accrétion des débris chauds générés par la fragmentation de l'impacteur (Figure A.9). Ce scénario permet également d'expliquer les similitudes de composition entre la Terre et la Lune et le moment cinétique du système Terre-Lune. Cet évènement, supposé avoir été le dernier évènement majeur de l'accrétion terrestre (CANUP, 2004), serait aussi responsable de la fusion d'une partie importante de la Terre. Etant donné la fréquence élevée d'impacts majeurs au cours des derniers stades d'accrétion des planètes rocheuses, il paraît raisonnable de penser qu'elles font également l'expérience d'une phase de fusion partielle au début de leur histoire.

En plus de l'énergie libérée lors des impacts, d'autres sources de chaleur viennent conforter l'idée que les planètes rocheuses expérimentent une phase océan de magma durant leur évolution précoce. La désintégration des éléments radioactifs à courte période, comme l'aluminium 26 (<sup>26</sup>Al, de demi-vie  $t_{1/2} \approx 0.717$  Ma, e.g., UREY, 1955; CARLSON et LUGMAIR, 2000), le chauffage par effet de marée (SEARS, 1992; ZAHNLE et al., 2007; SLEEP, ZAHNLE et LUPU, 2014), ou encore la chaleur libérée lors de la différenciation métal-silicate (e.g., BIRCH, 1965; FLASAR et BIRCH, 1973; RICARD, ŠRÁMEK et DUBUFFET, 2009), sont autant de mécanismes qui viennent renforcer cette hypothèse. Les différents processus évoqués, combinés avec des arguments géochimiques, font que la phase océan de magma est communément acceptée aujourd'hui en tant qu'étape précoce de l'évolution des planètes rocheuses.

#### Evolution thermique de l'océan de magma

La différence de température entre la surface de la planète et l'intérieur fondu implique nécessairement l'évacuation de la chaleur interne, et le refroidissement de l'océan de magma. Avec la diminution de température, l'océan de magma se solidifie par cristallisation. La solidification de l'océan de magma influence fortement la différenciation compositionnelle précoce et la structure interne de la planète, ou encore son contenu en volatils, et représente le point de départ de l'évolution future de la planète, pouvant aboutir à des conditions de surface tempérées et habitables. Cette étape commune aux planètes rocheuses constitue donc un point d'intérêt majeur pour la compréhension de l'évolution planétaire, et de la mise en place des conditions permettant le développement de la vie, et a ainsi fait l'objet de nombreuses études au cours des dernières décennies.

Un certain nombre de processus à l'œuvre durant l'évolution thermique de l'océan de magma sont détaillés dans l'introduction du présent manuscrit et sont brièvement

<sup>&</sup>lt;sup>14</sup>On qualifie de magma un matériau chaud constitué d'un mélange de liquide, de gaz et de cristaux en proportions variables, qui, en se refroidissant, forme une roche.



FIGURE A.11 – Cristallisation schématique de l'océan de magma lunaire. Les plagioclases, plus légers que le fluide environnant, seraient remontés à la surface par flottaison formant ainsi la croûte anorthositique. Crédits : Lunar and Planetary Institute.

évoqués ici. Parmi les travaux réalisés, on peut distinguer à première vue deux grands ensembles : les études consacrées à l'intérieur de la planète, et celles, beaucoup moins nombreuses, consacrées à l'évolution conjointe de l'intérieur planétaire et de l'atmosphère.

**Cristallisation et différenciation chimique** Les études pionnières de Yutaka Abe et Takafumi Matsui ont commencé à s'intéresser à la cristallisation de l'océan de magma et à la différenciation chimique<sup>15</sup> du manteau silicaté (ABE, 1993a; ABE, 1993b; ABE, 1997). ABE (1997) distinguait le cas d'un océan de magma dit transitoire, formé par un seul impact géant et se refroidissant rapidement, d'un océan de magma maintenu tout au long de la phase d'accrétion grâce à la présence d'une atmosphère épaisse. Il cherchait ainsi à identifier des signatures chimiques permettant de déterminer un scénario pour la Terre primitive. Pour modéliser de façon plus réaliste le fractionnement chimique de l'océan de magma, Abe a complexifié ses modèles au fil du temps en considérant par exemple une viscosité du solide variable en fonction de la température, des coefficients de partition dépendants de la pression, ou encore en utilisant des traceurs pour évaluer le transport d'éléments compatibles (e.g., Mg, Cr) et incompatibles (e.g., Al, Na, Fe). Ainsi, ses modèles prennent en compte la différenciation liquide-solide, le transfert de chaleur par convection, le transport de matière, les changements de phase, et la variation de viscosité avec la fraction de liquide.

Au même moment, SOLOMATOV et STEVENSON (1993b) et SOLOMATOV et STE-VENSON (1993a) s'intéressèrent plus spécifiquement à la cristallisation de l'océan de magma, et à l'influence de la convection dans les processus de suspension/entraînement dans l'écoulement, et de sédimentation des cristaux de différentes tailles.

Plus tardivement, SOLOMATOV (2000) et SOLOMATOV (2007) développa une approche paramétrée de l'évolution thermique de l'océan de magma. La séquence de

 $<sup>^{15}</sup>$ La différenciation chimique/compositionnelle est le processus responsable de la structure en enveloppes concentriques des planètes rocheuses. La différence de densité est le mécanisme moteur de la différenciation : les éléments les plus lourds tel que le fer ou le nickel précipitent et se rassemblent au centre de la planète pour former le noyau, alors que les silicates, moins denses forment le manteau, et les éléments les moins denses forment les couches les plus superficielles comme la croûte.

cristallisation considérée dans ces études est schématisée dans la Figure A.12. C'est cette approche qui est suivie dans le modèle utilisé pour les présents travaux.

La faible viscosité du liquide magmatique et la différence de température entre la base et le sommet font de l'océan de magma le siège d'une convection vigoureuse. Dans un tel système, le profil de température est supposé adiabatique et isentropique. La cristallisation de l'océan de magma commence en profondeur, là où la température adiabatique intersecte en premier lieu le liquidus (ou température de cristallisation). Deux scénarios sont alors envisageables d'après les incertitudes expérimentales pour déterminer la température de fusion/cristallisation du solide/magma à haute pression : la cristallisation d'un manteau entièrement fondu pourrait avoir commencé à la limite noyau-manteau (ANDRAULT et al., 2011), ou bien au sein du manteau (FIQUET et al., 2010), et ainsi isoler un réservoir fondu à la base du manteau. Il est important de noter que cette température dépend fortement de la composition considérée, expliquant notamment la variabilité des résultats entre différentes études (FIQUET et al., 2010; ANDRAULT et al., 2011; NOMURA et al., 2014; TATENO, HIROSE et OHISHI, 2014; ANDRAULT et al., 2014). La présence d'un réservoir de roches fondues à la base du manteau, qualifié d'océan de magma basal, a été proposé par LABROSSE, HERNLUND et COLTICE (2007) et pourrait permettre d'expliquer, entre autres, les faibles vitesses de propagation des ondes sismiques à la limite noyau-manteau (Ultra Low Velocity Zone). Au vue des incertitudes associées à la composition primordiale du manteau et aux techniques expérimentales, nous avons choisi de considérer le cas classique d'une solidification de bas en haut, d'après les courbes de liquidus et solidus obtenues expérimentalement pour un manteau de composition chondritique (ANDRAULT et al., 2011).

Le type de cristallisation considérée (cristallisation fractionnée ou à l'équilibre) et la stratification chimique résultante vont influencer la dynamique de l'océan de magma, la structure compositionnelle, et le degré de mélange du manteau solidifié. Il a été proposé que la cristallisation fractionnée<sup>16</sup> de l'océan de magma, à l'origine d'un enrichissement progressif en fer des cumulats, soit responsable d'une stratification gravitationnellement instable, où des matériaux plus riches en fer et donc plus denses s'accumulent au-dessus de matériaux plus légers (ELKINS-TANTON, PARMENTIER et HESS, 2003; ELKINS-TANTON, HESS et PARMENTIER, 2005; ELKINS-TANTON et al., 2005). Afin de rétablir une stratification stable, l'ensemble du manteau cristallisé se soumettrait à un retournement global (overturn). Dans le cas de la planète Mars, ce scénario permettrait notamment d'expliquer la présence d'un champ magnétique précoce ou encore un épisode de formation crustale primitif (ELKINS-TANTON, PAR-MENTIER et HESS, 2003). Ce scénario semble en revanche difficile à réconcilier avec la dynamique actuelle du manteau terrestre. Des études plus récentes suggèrent que la convection solide dans le cumulat démarre avant la cristallisation complète d'un océan de magma se solidifiant lentement sous l'effet d'une atmosphère isolante, mélangeant ainsi progressivement le manteau (MAURICE et al., 2017; BALLMER et al., 2017; BOUKARÉ, PARMENTIER et PARMAN, 2018).

La dynamique de l'océan de magma étant relativement complexe, sujette à une transition rhéologique où la viscosité du fluide augmente de plusieurs ordres de grandeur, et à cause du manque d'observables, les processus décrits ci-dessus restent mal

<sup>&</sup>lt;sup>16</sup>Lors de la cristallisation fractionnée d'un magma, les cristaux formés au cours du refroidissement ne restent pas en contact avec le liquide magmatique environnant. Cette séparation du liquide et du solide provoque un enrichissement du liquide résiduel en éléments incompatibles qui ont une affinité chimique préférentielle avec la phase liquide. Le fer étant un élément incompatible, au fur et à mesure de la cristallisation, le liquide résiduel et la phase solide seront de plus en plus enrichis en fer (plus dense), créant ainsi une stratification gravitationnellement instable.



FIGURE A.12 – Cristallisation schématique de l'océan de magma où le profil de température adiabatique (ligne noire) intersecte d'abord le liquidus (ligne rouge) à la base du manteau, caractéristique d'une cristallisation de la base de l'océan magmatique vers la surface. (a) La température à la base de l'océan de magma est inférieure au liquidus et des cristaux sont formés (rectangles gris). Au dessus, la convection est vigoureuse (flèches noires au trait fin), et contrôlée par la faible viscosité du liquide magmatique (en jaune). La couche limite en surface et les panaches froids descendants sont représentés en bleu. (b) Une région à viscosité élevée, où la fraction de liquide correspond à la transition rhéologique, et graviationnellement instable se forme proche de la base de l'océan de magma (la température pour laquelle  $\phi = \phi_c$  est indiquée en ligne tiretée verte). Dans cette zone partiellement cristallisée, une convection moins vigoureuse est à l'œuvre (flèches blanches épaisses). (c) Lorsque la fraction de liquide critique correspondant à la transition rhéologique est atteinte ( $\phi = \phi_c$ ), le refroidissement s'effectue par convection à l'état solide. Là où la température est inférieure au solidus (ligne bleue), la viscosité est très élevée et la température peut être super-adiabatique. Proche de la surface, la convection n'est plus turbulente mais devient similaire à un régime de type tectonique des plaques. La base du manteau reste partiellement fondue (océan de magma basal) à cause de la température élevée du noyau. (d) La fraction de liquide critique est atteinte dans tout le manteau ( $\phi < \phi_c$ ), le taux de refroidissement et la cristallisation du magma restant sont contrôlés par la convection solide et la percolation du liquide magmatique. La croûte primitive commence à se former (marron). Les cristaux gris et noirs illustrent schématiquement différentes phases minérales. D'après Solomatov (2015).

contraints à l'heure actuelle. Les études mentionnées précédemment se concentrent sur les processus affectant la dynamique interne uniquement, et ne considèrent pas explicitement une quelconque interaction avec l'atmosphère au cours de l'évolution thermique. Ils ne traitent pas non plus des conditions de surface atteintes à la fin de la solidification ou de la formation des océans d'eau primitifs. En revanche, les processus évoqués ont des implications majeures pour l'habitabilité des planètes rocheuses. Par exemple, la structure interne, résultant de la différenciation chimique, contrôle la distribution des volatils entre les différents réservoirs de la planète : la présence d'un réservoir fondu et isolé à la base du manteau pourrait piéger une fraction substantielle de volatils, qui, s'ils étaient dégazés dans l'atmosphère, contribueraient grandement à l'effet de serre et influenceraient la formation des océans. De même, un renversement gravitationnel global du manteau libèrerait soudainement une quantité considérable de chaleur qui pourrait être à l'origine d'un dérèglement climatique majeur. Plus généralement, la structure interne héritée de la phase OM détermine le régime géodynamique postérieur et l'évolution à long terme de la planète. En effet, le régime de convection mantellique contrôle le flux de chaleur provenant de l'intérieur planétaire et le dégazage des volatils, à travers le volcanisme par exemple. Pour le cas terrestre, la tectonique des plaques permet une régulation du cycle carbonate-silicate, lui même impliqué dans la stabilisation du climat et le maintien de conditions de surface tempérées (e.g., FOLEY et DRISCOLL, 2016).

Par ailleurs, la différenciation chimique contrôle le refroidissement à long terme du manteau ainsi que son degré d'hétérogénéité, en le mélangeant plus ou moins. Les conditions résultantes à la limite noyau-manteau vont, elles, influencer le refroidissement du noyau, un paramètre clé dans l'histoire du champ magnétique terrestre (MONTEUX, ANDRAULT et SAMUEL, 2016). Le champ magnétique constitue un bouclier face à certaines particules énergétiques émises par le Soleil qui réduit l'efficacité de l'échappement atmosphérique, et semblerait, par ce biais, permettre le maintien de conditions favorables au développement de la vie (e.g., FOLEY et DRISCOLL, 2016; BRAIN et al., 2016).

**Dégazage de l'atmosphère et évolution** Au cours de la solidification de l'océan de magma, les espèces volatiles se concentrent préférentiellement dans la phase liquide et sont progressivement expulsées dans l'atmosphère.

Lors de la phase océan de magma, la planète est bien plus chaude que l'espace environnant : le flux de chaleur provenant de l'intérieur planétaire est bien supérieur au flux stellaire incident. Pour atteindre l'équilibre thermodynamique avec son environnement, la planète se refroidit en émettant de la chaleur. Néanmoins, si une atmosphère entoure la planète, la surface n'est pas en contact direct avec l'espace et le taux de refroidissement peut être limité en fonction de la quantité de gaz à effet de serre en présence, qui absorbent le rayonnement thermique et isolent thermiquement la planète.

Avant de se consacrer à l'évolution chimique de l'OM, Yutaka Abe et Takafumi Matsui ont initié l'étude de la formation d'une atmosphère de vapeur d'eau et de son effet de serre (MATSUI et ABE, 1984). En considérant tout d'abord une atmosphère grise<sup>17</sup> formée par dégazage/déshydratation des planétésimaux impactants la protoplanète, ils montrèrent que l'absorption du rayonnement infrarouge par l'atmosphère de H<sub>2</sub>O empêche le refroidissement de la planète et maintient la température de surface au-dessus de la température du solidus. Un océan de magma est ainsi créé (ABE et MATSUI, 1985; MATSUI et ABE, 1986; MATSUI et ABE, 1986). A la fin de la phase d'accrétion, une telle atmosphère pourrait condenser et former un océan d'eau chaude primitif sur Terre (en accord avec les températures estimées d'un océan à l'Archéen, OSKVAREK et PERRY, 1976), alors que la condensation n'aurait pas lieu sur Vénus (MATSUI et ABE, 1986). Par la suite, ils complexifièrent leur modèle afin de traiter de façon plus réaliste l'effet de l'atmosphère, en incluant par exemple le CO<sub>2</sub>, et des coefficients d'absorption dépendants de la longueur d'onde (ABE et MATSUI, 1986; ABE et MATSUI, 1988; ABE, 1993a). En prescrivant différentes valeurs de flux de chaleur interne, ils purent considérer différentes étapes de l'accrétion et calculer la structure atmosphérique correspondante ainsi que la température de surface. Ils confirmèrent la formation d'un océan d'eau à la fin de la phase d'accrétion sur Terre, en accord avec les conditions de surface estimées à l'Archéen. Etonnamment, en considérant la convection humide dans l'atmosphère, ils montrèrent qu'un océan primitif aurait également pu se former à la surface de Vénus sous certaines conditions. Des conclusions similaires ont été rapportées indépendamment à partir de modèles climatiques unidimensionnels (ZAHNLE, KASTING et POLLACK, 1988; KASTING, 1988).

Une limite importante de ces études avant-gardistes est la prescription de la composition atmosphérique ainsi que du flux de chaleur interne, sans considérer de façon auto-cohérente les interactions entre le manteau et l'atmosphère.

ELKINS-TANTON (2008) a été la première à inclure le  $CO_2$  dans le transfert de volatils lors de la solidification d'un océan de magma en interaction avec l'atmosphère. Elle présuppose initialement que les espèces volatiles, à savoir H<sub>2</sub>O et CO<sub>2</sub>, sont dissoutes dans le liquide magmatique suivant les lois de solubilité de PAPALE (1997). Au fur et à mesure de la cristallisation du magma, les éléments incompatibles vont préférentiellement dans le liquide résiduel qui s'enrichit en volatils. Lorsque le liquide magmatique atteint la saturation, les volatils sont exsolvés sous la forme de bulles de gaz. Le CO<sub>2</sub> étant moins soluble que l'eau dans les magmas, il reste moins longtemps en solution, et il est dégazé davantage et plus rapidement. Quant à l'eau, elle est répartie entre le cumulat solide, le liquide résiduel et l'atmosphère. Le transfert de volatils modélisé dans les travaux du présent manuscrit suit la même approche.

A l'aide d'un modèle couplé océan de magma-atmosphère, HAMANO, ABE et GENDA (2013) ont étudié le refroidissement et la solidification des planètes océan de magma, en considérant le dégazage de H<sub>2</sub>O, une atmosphère radiative-convective grise sans nuage, et la perte d'eau par échappement hydrodynamique. En fonction de la distance qui sépare la planète de l'étoile, ils ont mis en évidence l'existence de deux types distincts de planètes résultants de la solidification de l'OM (Figure A.13). Les planètes de type I, formées au-delà d'une certaine distance critique se refroidissent rapidement (i.e., environ 1 Ma en fonction du contenu initial en eau), et la solidification de la surface s'accompagne de la formation d'un océan d'eau. A l'opposé, les planètes de type II, situées plus proche de l'étoile, en deçà de la distance critique, sont maintenues à des températures supérieures à la température de solidification, du fait de

 $<sup>^{17}</sup>$ Un corps noir est un corps théorique absorbant parfaitement le rayonnement incident dans toutes les longueurs d'onde, y compris dans le visible, d'où l'appellation de corps noir. Le corps gris n'absorbe (et n'émet) pas parfaitement tout le rayonnement mais seulement une fraction, qui est définie par un coefficient appelé émissivité  $\varepsilon$  compris entre 0 et 1 (un corps noir a une émissivité égale à 1). Ici, l'approximation du corps gris suppose que l'absorption du rayonnement est invariable quelque soit la longueur d'onde considérée.



FIGURE A.13 – Emergence de deux types de planètes rocheuses au cours de la solidification de l'océan magmatique, de part et d'autre d'une distance critique (trait tireté rouge), tel que proposé par HA-MANO, ABE et GENDA (2013). Adapté à partir de ELKINS-TANTON (2013).

l'effet de serre divergent. Elles se refroidissent lentement et restent fondue jusqu'à ce qu'elles perdent une quantité substantielle d'eau par échappement hydrodynamique, diminuant ainsi l'effet de serre. Elles finissent par se solidifier au bout d'une centaine de millions d'années. La distance critique calculée étant située au-delà de la distance orbitale de Vénus, HAMANO, ABE et GENDA (2013) proposent que les différences entre la Terre et Vénus soient la conséquence de leur distance respective au Soleil et soient héritées du refroidissement de l'océan de magma.

La même année, LEBRUN et al. (2013) ont également développé un modèle couplé simulant l'évolution thermique de l'océan magmatique en interaction avec l'atmosphère, en utilisant le modèle atmosphérique de MARCQ (2012). Par rapport au groupe d'Hamano, ils ne considèrent pas l'échappement atmosphérique, mais incluent le dégazage du CO<sub>2</sub> et son effet radiatif dans l'atmosphère. Ils prennent aussi en compte le chauffage interne radiogénique des éléments à courte (<sup>26</sup>Al) et longue période (U, Th, K). Dans ces modèles, le flux de chaleur provenant de l'océan de magma est bien supérieur au rayonnement reçu de l'étoile : les atmosphères sont chauffées par la base. La température de surface s'établit alors non pas par équilibre radiatif entre le flux stellaire incident et le flux rayonné par la planète, mais par équilibre entre le flux de chaleur issu de la convection dans l'océan de magma à la surface, et le flux que peut rayonner la planète à travers l'atmosphère. Le refroidissement est alors temporisé par l'effet de serre atmosphérique. LEBRUN et al. (2013) ont montré que le dégazage d'une atmosphère thermiquement opaque ralentit le refroidissement et la solidification de l'OM d'environ 1 Ma.

LUPU et al. (2014) ont ensuite étudié plus précisément la chimie atmosphérique post-impact en considérant de nombreuses espèces chimiques, et deux compositions de surface différentes. Ils suggèrent qu'à la suite d'un impact géant,  $H_2O$  et  $CO_2$  sont les constituants majeurs de l'atmosphère pour les deux compositions de surface évaluées, et calculent des temps de solidification de l'OM du même ordre de grandeur que les autres études de ce type (HAMANO, ABE et GENDA, 2013; LEBRUN et al., 2013). Il est important de remarquer qu'ils présupposent les pressions atmosphériques et ne modélisent pas explicitement le dégazage. Bien que leur modèle atmosphérique soit le plus exhaustif parmi les études discutées ici, prenant en compte à la fois le transfert radiatif-convectif et les processus chimiques, en calculant de façon auto-cohérente la chimie de l'atmosphère et sa structure, ils limitèrent leur analyse au cas d'une planète de type terrestre, située à 1 UA, sans nuage, et en orbite autour du Soleil actuel. Le cas de planètes plus ou moins proches du Soleil jeune, dont la température était plus faible qu'à l'actuel et correspondant aux conditions post-impacts, n'est pas discuté dans leur article.

HAMANO et al. (2015) ont récemment amélioré leur modèle atmosphérique, considérant la dépendance de l'absorption en fonction de la longueur d'onde, et en calculant l'albédo, et discutent la détectabilité associée à l'évolution thermique du sytème couplé pour les planètes de type I et II.

#### Plan de la thèse

L'habitabilité d'une planète rocheuse est classiquement définie par la présence d'eau liquide à sa surface. Ainsi, pour être habitable, une planète doit d'abord nécessairement acquérir une quantité substantielle d'eau au cours de son histoire.

Les théories actuelles de formation planétaire suggèrent que l'eau est apportée tôt, à la fin de la phase d'accrétion, et que les planètes atteignent ainsi leur masse finale en ayant acquis la majeure partie des volatils. Cependant, la quantité de volatils accrétée reste très incertaine, et le contenu initial en volatils est, de ce fait, assez mal contraint.

A la fin de la phase d'accrétion, l'énergie libérée lors des collisions successives est responsable de la fusion partielle des planètes telluriques, dont le noyau métallique est alors entouré par un océan de magma.

Le refroidissement et la solidification de cet état primordial fondu s'accompagne du dégazage de l'atmosphère, de la différenciation compositionnelle qui structure l'intérieur planétaire, et de la formation d'une surface solide. Les espèces chimiques volatiles, incluant l'eau, sont alors réparties entre les différents réservoirs de la planète. La phase océan de magma constitue ainsi le point de départ du refroidissement de la planète, pouvant aboutir à des conditions de surface tempérées, où l'eau liquide est stable, et met en place les conditions préalables à la convection thermique du manteau, et plus généralement à l'évolution future de la planète.

L'évolution de cette phase précoce est donc d'une importance capitale pour déterminer (i) comment l'eau se répartit entre les différents réservoirs, et (ii) si les conditions de surface primordiales (pression et température) sont favorables à l'apparition et au maintien de l'eau liquide. Son étude est donc nécessaire pour caractériser l'habitabilité d'une planète au début de son histoire.

En utilisant un modèle couplé décrit dans le Chapitre A.2, nous avons simulé le refroidissement de l'océan magmatique en interaction avec l'atmosphère. Le Chapitre A.3 s'intéresse ensuite à l'influence du contenu initial en volatils, à savoir  $H_2O$  et  $CO_2$ , sur l'évolution thermique du système couplé, et les conditions de surface résultantes, pour des planètes situées à différentes distances du Soleil jeune. Une mise à jour du modèle atmosphérique, incluant le calcul d'albédo et les nuages, permet d'étudier de façon plus réaliste le cas de la Terre et Vénus dans le Chapitre A.4. Enfin, nous étendons cette approche aux exoplanètes en orbites rapprochées autour d'étoiles froides dans le Chapitre A.5.

Au cours des différents chapitres, les questions suivantes seront abordées :

• Comment le contenu initial en volatils influence l'évolution thermique et les conditions de surface primitives des planètes rocheuses? (Chapitre A.3)

- Comment la formation d'un océan d'eau primitif est sensible au contenu initial en  $H_2O$  et  $CO_2$ ? (Chapitre A.3)
- Est-il possible de prédire la formation d'un océan d'eau à la fin de la phase océan de magma? (Chapitre A.3)
- Comment les nuages influencent-ils le refroidissement de l'océan de magma et l'habitabilité précoce ? (Chapitre A.4)
- Vénus a-t-elle été habitable dans le passé? (Chapitre A.4)
- Quelle est l'influence de l'étoile sur l'évolution primitive et les conditions de surface ? (Chapitre A.5)
- Comment la bordure interne de la zone habitable est-elle influencée par le contenu initial en  $H_2O-CO_2$ ? (Chapitre A.5)
- Existe-t-il un paramètre adimensionné rendant compte de l'influence de l'étoile pour prédire la position de la bordure interne de la zone habitable? (Chapitre A.5)

## A.2 Méthode numérique : le modèle couplé océan de magma – atmosphère

Afin d'étudier l'évolution thermique aux premiers âges de la planète, nous avons simulé numériquement le refroidissement d'un océan de magma en interaction avec l'atmosphère. Pour ce faire, nous avons utilisé le modèle 1–D précédemment développé par LEBRUN et al. (2013). Je m'attache ici à décrire la modélisation des deux composantes du modèle couplé : l'océan de magma et l'atmosphère, ainsi que les principaux mécanismes physiques à l'œuvre lors du refroidissement.

## A.2.1 Modèle interne : l'océan de magma

#### **Conditions initiales**

Initialement, nous supposons une température potentielle du manteau de  $T_{not} = 4000$ K, du fait du chauffage produit par un impact géant (HOSTETLER et DRAKE, 1980; TONKS et MELOSH, 1993). La courbe de cristallisation, obtenue expérimentalement pour un manteau chondritique (ANDRAULT et al., 2011, Figure A.14), suggère que le manteau terrestre serait alors entièrement fondu (Figure A.15). Nous supposons que la différenciation chimique du novau a déjà eu lieu et que ce dernier est déjà formé. A la suite de l'impact géant, nous considérons que les espèces gazeuses et volatiles formant toute atmosphère pré-existante ont été balayées lors de la collision. Ainsi, au premier pas de temps, la planète rayonne tel un corps noir  $F_{bb}$  de température égale à la température d'équilibre<sup>18</sup>  $T_{eq} = \left(\frac{(1-\alpha)F_{\downarrow}}{4\sigma_{\rm SB}}\right)^{1/4}$ , où  $\alpha$  représente l'albédo défini comme le rapport du flux réfléchi sur le flux reçu  $F_{\downarrow}$ , et  $\sigma_{\rm SB}$  est la constante de Stefan-Boltzmann. Cette condition permet de déterminer la température de surface initiale d'après  $F_{bb} = \sigma_{\rm SB}(T_{surf,t=0}^4 - T_{eq}^4)$ . Le manteau fondu contient quant à lui des volatils dissous dans le magma, dont une part aurait été apportée par l'impacteur. Une large gamme de contenus initiaux en volatils a été explorée afin de prendre en compte les différentes estimations des contenus en volatils initialement accrétés par les planètes rocheuses du système solaire. La fraction massique initiale d'eau et de dioxide de carbone a ainsi été variée entre  $X_{0H_2O} = 0.12 \times 10^{-2} \text{ wt\%}$  et  $X_{0H_2O} = 4.67 \times 10^{-2} \text{ wt\%}$  pour l'eau, et entre  $X_{0CO_2} = 0.1 \times 10^{-2} \text{ wt\%}$  et  $X_{0CO_2} = 14 \times 10^{-2} \text{ wt\%}$  pour le dioxyde de carbone, correspondant à 0.03 et 1.25 océans d'eau terrestre<sup>19</sup>, et à des pressions partielles équivalentes variant de  $P_{CO_2} = 7$  bar à  $P_{CO_2} = 1000$  bar. La Figure A.15 illustre schématiquement l'état initial considéré et les processus associés à l'évolution thermique pour atteindre l'état final.

#### Le refroidissement de l'océan de magma

Le refroidissement séculaire SC de l'océan de magma suit l'équation de conservation de l'énergie et s'écrit (e.g., ABE, 1997; SOLOMATOV, 2000; LEBRUN et al., 2013) :

$$SC = \int_{R_b}^{R_p} \rho C_p \frac{dT(r)}{dt} r^2 dr = R_p^2 F_{conv} + R_b^2 F_b + H_{int} + H_{sol},$$
(A.1)

<sup>&</sup>lt;sup>18</sup>La température d'équilibre d'une planète est la température théorique qu'aurait sa surface en l'absence d'atmosphère. On suppose alors que le flux reçu de l'étoile  $(F_{\downarrow})$  est en équilibre avec la somme du flux réfléchi par la planète  $(F_{\uparrow} = F_{\downarrow}\alpha)$  et du flux rayonné thermiquement  $(F_{IR})$ , qui dépend de la température de la planète.

<sup>&</sup>lt;sup>19</sup>La masse actuelle des océans d'eau sur Terre est estimée à  $M_{EO} = 1.4 \times 10^{21}$  kg.



FIGURE A.14 – Température de fusion (solidus - rouge) et de cristallisation (liquidus - vert) en fonction de la profondeur pour un manteau chondritique, adapté d'après ANDRAULT et al. (2011). Des profils de température adiabatique (noir) à différentes étapes du refroidissement sont également représentés. Les profils de température intersectent d'abord la courbe de fusion à la base du manteau, engendrant sa solidification des profondeurs vers la surface.





FIGURE A.16 – (a) Profil de température simplifié, solidus et liquidus (courbe noire, rouge, et verte, respectivement) associés à la (b) coupe schématique de l'océan de magma entouré de l'atmosphère (bleu clair).  $F_{conv}$  représente le flux convectif issu de l'océan de magma (flèches rouges pointillées);  $F_{abs}$  (flèches noires tiretées dirigées vers la surface) est la fraction absorbée du flux stellaire incident total  $F_{\downarrow}$  (flèches noires) dont l'autre partie égale à  $\alpha F_{\downarrow}$  est réfléchie (flèches noires tiretées dirigées vers l'espace). Le flux thermique qui s'échappe au sommet de l'atmosphère  $F_{IR}$  (flèches bleues) contrôle le refroidissement de la planète. Les nuages, lorsqu'ils sont présents, sont situés dans la troposphère humide.

où  $\rho$  est la densité moyenne du mélange liquide-solide,  $C_p$  est la capacité calorifique, T est la température radiale, et r la variable rayon planétaire. t est le temps,  $R_p$  et  $R_b$ représentent respectivement le rayon total de la planète et le rayon de la base de l'océan de magma, desquels les flux  $F_{conv}$  et  $F_b$  sont respectivement émis (Figure A.16b).  $H_{int}$ est le flux de chaleur (interne) émis par désintégration des éléments radioactifs, et  $H_{sol}$ représente la chaleur latente de solidification, qui n'est pas considérée dans ce modèle, tout comme  $F_b$  qui sont négligeables devant  $F_{conv}$ . Le chauffage par désintégration des éléments radioactifs est calculé à partir des concentrations actuelles d'uranium, de thorium, et de potassium du manteau (SCHUBERT, TURCOTTE et OLSON, 2001; JAUPART et MARESCHAL, 2011). Il est admis que l'isotope de courte-période <sup>26</sup>Al contribuerait considérablement au chauffage interne précoce (UREY, 1955), il semblait donc pertinent de l'inclure dans notre bilan thermique. L'océan de magma perd sa chaleur à la surface de la planète qui s'évacue vers l'espace à travers l'atmosphère dégazé.

Le transfert de chaleur au sein de l'océan magmatique est caractérisé par un nombre sans dimension, le nombre de Rayleigh Ra, qui compare les forces thermiques motrices à la résistance au mouvement, dûe à la diffusion thermique et à la dissipation visqueuse :

$$Ra = \frac{\alpha_T g \Delta T H^3}{\kappa \nu},\tag{A.2}$$

où  $\alpha_T$  est le coefficient d'expansion thermique, g est la gravité,  $\Delta T$  est la différence de température au sein de l'océan magmatique d'épaisseur H,  $\kappa = k/\rho C_p$  est la diffusivité thermique, qui dépend de k, la conductivité thermique.  $\nu = \eta/\rho$  est la viscosité cinématique (ou encore diffusivité de la quantité de mouvement, en m<sup>2</sup>.s<sup>-1</sup>), avec  $\eta$  la viscosité dynamique (en Pa.s).

Lorsque le nombre de Rayleigh dépasse une valeur critique, i.e., lorsque les forces motrices dominent la résistance diffusive et visqueuse, l'advection l'emporte sur la diffusion et le fluide se meut : la chaleur est alors advectée (convection), et non plus transmise uniquement de proche en proche<sup>20</sup> (conduction). Le flux de chaleur convectif à la surface  $F_{conv}$  s'écrit (SOLOMATOV, 2000; SOLOMATOV, 2007) :

$$F_{conv} = C_0 k \frac{T_{pot} - T_{surf}}{H} Ra^n, \tag{A.3}$$

où  $T_{pot}$  est la température potentielle et  $T_{surf}$  la température de surface.  $C_0 = 0.089$ et n = 1/3 sont des constantes qui dépendent du régime et du motif de convection (MALKUS, 1954; SIGGIA, 1994; GROSSMANN et LOHSE, 2000; SOLOMATOV, 2007; DAVAILLE et LIMARE, 2015). Bien que ces valeurs soient encore débattues dans le cas de l'océan magmatique à haut nombre de Rayleigh, il est généralement admis que n = 1/3 dans ce cas, impliquant que la perte de chaleur est gouvernée uniquement par des instabilités locales de la couche limite thermique supérieure, et ne dépend pas de l'épaisseur de l'OM (SOLOMATOV, 2007; LEBRUN et al., 2013; DAVAILLE et LIMARE, 2015).

Nous faisons l'hypothèse que la cristallisation de l'océan magmatique s'effectue de la base du manteau vers la surface de la planète, d'après les courbes de liquidus et solidus obtenues pour un manteau chondritique (ANDRAULT et al., 2011, Figures A.14 et A.16), et nous supposons une cristallisation à l'équilibre. L'hypothèse débattue d'un océan de magma basal n'est pas prise en compte.

Dans ce modèle, nous ne considérons ni processus pétrologiques ni géochimiques, bien qu'ils puissent affecter la structure interne des planètes (ELKINS-TANTON, 2008; MAURICE et al., 2017). En effet, à moins qu'ils soient responsables de la formation d'un couvercle stagnant à la surface de l'OM, ils ne devraient pas affecter significativement le flux de chaleur en surface (SOLOMATOV, 2007; JAUPART et MARESCHAL, 2011), qui est un paramètre clé dans le contrôle des conditions de surface qui nous intéressent ici.

#### La viscosité de l'océan magmatique

La viscosité, pouvant être définie comme la résistance au mouvement, est un paramètre fondamental du transfert de chaleur par transport de matière (convection). La viscosité du magma est contrôlée par la proportion relative de cristaux et de roche fondue, qui dépend elle-même de la température. Cette fraction de liquide  $\phi$  est définie par (ABE, 1997) :

$$\phi = \frac{T - T_{sol}}{T_{liq} - T_{sol}}$$

 $<sup>^{20}</sup>$ Il est fondamental de remarquer ici qu'à l'échelle des temps géologiques, le manteau terrestre se comporte comme un fluide convectif ( $Ra \approx 10^6 - 10^8$ ) qui évacue la chaleur résiduelle acquise lors de l'accrétion et la chaleur provenant de la désintégration des éléments radioactifs. Ce phénomène de convection mantellique est à l'origine de la tectonique des plaques sur Terre, elle-même responsable du volcanisme et de l'activité sismique. Il est bon de rappeler également que la convection est un mode de transfert thermique plus efficace que la conduction.

où  $T_{liq}$  et  $T_{sol}$  sont les températures de cristalisation (liquidus) et de fusion (solidus) respectivement. Ainsi,  $\phi = 1$  pour la phase liquide, lorsque le magma ne contient pas de cristaux (100% de liquide), et  $\phi = 0$  lorsque le magma est entièrement cristallisé (0% de liquide).

Bien que la viscosité d'un mélange liquide/cristaux varie peu pour des fractions de liquide importantes (EINSTEIN, 1906), elle augmente rapidement lorsque la fraction de liquide approche une valeur critique  $\phi_c$ . Ainsi, au cours de sa cristallisation, l'océan de magma voit sa viscosité augmenter. Au-delà d'un certain pourcentage de cristaux (environ 60% de cristaux, correspondant à une fraction de liquide  $\phi_c \approx 0.4$ ), la viscosité augmente brutalement du fait de la connectivité des particules solides qui freine le mouvement du fluide. La rhéologie<sup>21</sup> change alors drastiquement, passant d'une rhéologie de type fluide à une rhéologie de type solide (ABE, 1997; SOLOMATOV, 2000).

Pour pallier cette transition rhéologique, SOLOMATOV (2000) a paramétré la dépendance de la viscosité à l'état solide en fonction de la fraction de liquide. Ainsi, lorsque  $\phi > \phi_c$ , la viscosité du magma correspond à celle d'un liquide magmatique contenant des cristaux (ROSCOE, 1952) :

$$\eta = \frac{\eta_l}{\left(1 - \frac{(1-\phi)}{(1-\phi_c)}\right)^{2.5}},\tag{A.4}$$

où

$$\eta_l = A_a \exp\left(\frac{B_a}{T_{pot} - 1000}\right) \tag{A.5}$$

est la viscosité du liquide magmatique dérivée de l'équation de Vogel-Fulcher-Tammann, avec  $A_a = 0.00024$  Pa.s et  $B_a = 4600$  K (KARKI et STIXRUDE, 2010).

Pour  $\phi < \phi_c$ , la viscosité du magma est contrôlée par la viscosité des particules solides (KELEMEN et al., 1997; MEI et al., 2002; SOLOMATOV, 2007) :

$$\eta = \eta_s \exp(-\alpha_\eta \phi), \tag{A.6}$$

avec (d'après KARATO et WU, 1993)

$$\eta_s = \frac{\mu}{2A} \left(\frac{h}{b}\right)^{2.5} \exp\left(\frac{E + PV}{RT_{pot}}\right),\tag{A.7}$$

où P, V sont la pression et le volume, R est la constante des gaz parfaits,  $E = 240 \,\text{kJ.mol}^{-1}$  est l'énergie d'activation,  $h = 10^{-3} \,\text{m}$  est la taille de grains,  $b = 0.5 \,\text{nm}$  est la longueur du vecteur de Burger,  $\mu = 80 \,\text{GPa}$  est le module de cisaillement, et  $A = 5.3 \times 10^{15}$  est le facteur pré-exponentiel.

L'équation A.4 conduit à une viscosité infinie à l'approche de la transition rhéologique, lorsque la fraction de cristaux atteint  $1 - \phi_c \approx 60\%$  (Figure A.17).

Cependant, des données expérimentales récentes (TAKEI et HOLTZMAN, 2009) suggèrent que pour de faibles fractions de liquide ( $\phi < 0.01$ ), la viscosité est plus faible que prévu à cause de la contiguïté du liquide résiduel, et que la transition rhéologique classique, prédite par le passage de l'équation A.4 à l'équation A.6, est trop abrupte pour être réaliste. Afin de mieux modéliser cette transition en prenant en compte ces résultats récents, nous avons interpolé la viscosité de l'état liquide (équation A.4) et de l'état solide (équation A.6) par un polynome de degré trois (Figure A.17). La borne supérieure (comportement liquide) de cette interpolation doit (*i*) correspondre à un

<sup>&</sup>lt;sup>21</sup>La rhéologie est le comportement mécanique des matériaux.



FIGURE A.17 – Lois de viscosité en fonction de la température pour différentes rhéologies rencontrées lors de la solidification de l'océan magmatique. Initialement, la température élevée induit une viscosité faible, comparable à celle d'un liquide :  $\phi = 1$  et  $T \ge T_{liq}$  (équation A.5 d'après KARKI et STIXRUDE (2010), ligne tiretée rouge). La viscosité augmente avec la diminution de température et la formation de cristaux :  $\phi_c < \phi < 1$  et  $T_{\phi_c} < T < T_{liq}$  (équation A.4 d'après ROSCOE (1952), courbe rouge), jusqu'à atteindre la vicosité d'un solide, lorsque  $\phi = 0$  et  $T \le T_{sol}$  (équation A.6 d'après KELEMEN et al. (1997), ligne verte). Nous avons utilisé une expression analytique pour la transition rhéologique, entre  $T_{\phi_c}$  et  $T_{sol}$  ( $0 < \phi < \phi_c$ ) :  $\eta_{\text{analytic}} = \eta_s \times \exp\left(a_{mush} \times \phi_{int}^3 + b_{mush} \times \phi_{int}^2\right)$ .

comportement de type liquide, étant donné que nous interpolons entre une viscosité de type liquide, où  $\phi_0$ , et une viscosité solide; (*ii*) être supérieure à la fraction de liquide critique  $\phi_c$ ; (*iii*) être suffisamment faible pour rendre compte de la rhéologie du mélange dont la viscosité est dominée par les cristaux.

Cette interpolation permet d'avoir une loi de viscosité continue sur la gamme de température explorée et adoucit la transition rhéologique entre un liquide magmatique, où la convection est vigoureuse, et un matériaux dont le comportement mécanique est plus proche d'un solide. De plus, cela permet de raffiner le pas de temps à l'approche de cette période critique, et ainsi de mieux contraindre l'évolution temporelle des pressions et des températures.

#### A.2.2 Le modèle atmosphérique

Le modèle atmosphérique utilisé ici est un modèle 1–D, plan-parallèle, radiatif-convectif, initialement développé par MARCQ (2012) et mis à jour récemment par MARCQ et al. (2017) et PLURIEL, MARCQ et TURBET (2018). L'atmosphère est constituée d'eau  $H_2O$ , en phase gaz (vapeur) ou liquide, de dioxide de carbone  $CO_2$ , et de diazote  $N_2$ . L'eau est la seule espèce condensable, alors que  $CO_2$  est non condensable et traité comme un gaz parfait. Ces deux espèces, contrairement au diazote, sont des gaz à effet de serre qui absorbent et émettent du rayonnement infrarouge (thermique). Ils ont pour principal effet de bloquer l'échappement du rayonnement thermique (chaleur) de la planète vers l'espace, et constituent ainsi un isolant/couvercle thermique. L'approximation plan-parallèle reste valide tant que la hauteur de l'atmosphère est inférieure au tiers du rayon de la planète  $(H_{\rm atm}/R_{\rm planete} \approx 0.3)$ , ce qui est toujours le cas dans nos simulations. La chaleur provenant de l'océan magmatique s'évacue vers l'espace à travers l'atmosphère, par convection et radiation. L'atmosphère peut être traité comme un émetteur gris, pour lequel l'absorption de chaque espèce est constante pour toute la gamme spectrale considérée, ou comme une atmosphère non-grise, en utilisant des coefficients d'absorption qui dépendent de la longueur d'onde pour H<sub>2</sub>O et CO<sub>2</sub>. Mis à part dans la majeure partie des simulations du Chapitre A.3, nous avons fait usage de la version non-grise du modèle atmosphérique.

Trois différentes versions de ce modèle d'atmosphère ont été implémentées au modèle couplé au cours de la thèse. La première, utilisée dans le Chapitre A.3, est la mise à jour du modèle initialement développé dans MARCQ (2012), et publiée dans MARCQ et al. (2017). Par rapport à la première version, MARCQ et al. (2017) ont résolu un problème d'implémentation des coefficients k-corrélés qui sous-estimait le flux sortant infrarouge. A partir de cette version, la hauteur de l'atmosphère n'est plus fixée à 600 km, mais dépend d'une échelle de pression et s'étend jusqu'à une altitude correspondant à une pression de 0.1 Pa au sommet de l'atmosphère. Davantage de détails peuvent être trouvés dans les références données. La deuxième version, utilisée dans le Chapitre A.4, inclut le calcul d'albédo, avec et sans nuages. Cette deuxième version n'a pas été publiée jusqu'à ce qu'une mise à jour des tables d'opacité soit faite. La mise à jour de cette base de données est la seule différence entre la deuxième et la troisième version du modèle (PLURIEL, MARCQ et TURBET, 2018), qui a été utilisée dans le Chapitre A.5.

#### Structure verticale

L'atmosphère peut être divisée en trois couches verticales, à savoir, de la surface de la planète au sommet de l'atmosphère : (1) la troposphère sèche, (2) la troposphère humide, saturée en eau et où les nuages sont localisés lorsqu'ils sont considérés, (3) la mésosphère (Figure A.16a). Les structures possibles sont : (1 + 2 + 3), (1 + 3) et (2 + 3). La mésosphère est isotherme, sa température est fixée à 200 K et contrairement aux troposphères où la convection se produit, elle est purement radiative. La chaleur latente libérée par la condensation de l'eau est prise en compte dans le gradient adiabatique humide de la troposphère correspondante, et diffère ainsi du gradient adiabatique sec de la troposphère sèche (KASTING, 1988; MARCQ, 2012; MARCQ et al., 2017).

Au début des simulations, les températures de surface élevées et la faible quantité d'eau dans l'atmosphère empêchent la condensation d'eau, et la troposphère humide est absente (1+3). Inversement, à la fin de certaines simulations, la pression partielle d'eau excède la pression vapeur saturante dans toute la troposphère, et la troposphère sèche est inexistante (2+3). Dans ce cas,  $P_{surf}(H_2O)$  est fixée à la pression vapeur saturante et toute l'eau en excès condense pour former un océan d'eau à la surface de la planète. Dans les cas intermédiaires, les trois couches verticales sont présentes (1+2+3).

#### Nuages et calculs d'albédo

Dans le cas d'une planète en phase océan de magma, l'atmosphère est fortement chauffée par la base et la température diminue avec l'altitude<sup>22</sup>, de la surface de la planète, où la température est maximale, au sommet, où elle est minimale. Dans cette configuration, la condensation d'eau a d'abord lieu dans les couches froides, au sommet de la troposphère, dès lors que la pression vapeur saturante est atteinte. L'utilisateur peut faire le choix d'inclure ou non les nuages dans le modèle. Si les nuages sont inclus, ils sont considérés comme étant présents partout où la condensation d'eau a lieu, i.e., dans la troposphère humide. Leur effet réfléchissant dans le domaine spectral visible, et absorbant dans le domaine thermique sont tous deux considérés.

Le calcul d'albédo, pris en compte à partir de la deuxième version du modèle atmosphérique utilisé ici (Chapitres A.4 et A.5), permet de traiter de façon plus réaliste l'interaction entre le rayonnement reçu par l'étoile, et la composition atmosphérique, en fonction de la température et de la pression. Pour ce faire, il a fallu inclure dans le modèle la diffusion Rayleigh et l'absorption du rayonnement visible par le continuum gazeux, et donc étendre la gamme spectrale aux domaines visible et proche UV. En combinant cela avec la diffusion de Mie par les nuages, il est possible de calculer la réflectance spectrale puis l'albédo de Bond  $\alpha$ , en pondérant la réflectance de chaque bande spectrale par le rayonnement de l'étoile, sous l'approximation du corps noir. Pour une description détaillée des mises à jour, le lecteur peut se référer à PLURIEL, MARCQ et TURBET (2018). Dans le modèle couplé, l'albédo est recalculé à chaque pas de temps en accord avec les contenus en volatils dégazés et la température de surface au pas de temps considéré.

Il faut remarquer ici que la modélisation des nuages dans un modèle unidimensionnel ne peut rendre compte de leur dynamique ou de leur distribution spatiale et verticale. C'est pourquoi nous considèrerons ici seulement les deux cas limites d'un ciel complètement dégagé, lorsque l'atmosphère ne présente pas de nuage ou le cas d'un ciel complètement couvert par les nuages (Figure A.18). En revanche, dans le cas d'une planète recouverte par un océan magmatique, où la totalité de la surface

 $<sup>^{22}</sup>$ Le cas des atmosphères planétaires plus évoluées et/ou plus réalistes est plus complexe : l'atmosphère est également chauffée par la base, étant donné que le rayonnement solaire incident pénètre l'atmosphère et chauffe la surface, mais d'autres composés atmosphériques peuvent absorber du rayonnement et ainsi augmenter la température plus haut dans l'atmosphère. C'est le cas sur Terre de la couche d'ozone par exemple, qui est responsable d'une augmentation de la température entre 15 et 35 kilomètres d'altitude.



FIGURE A.18 – Représentation schématique de la colonne atmosphérique unidimensionnelle lorsque les nuages sont pris en compte. L'effet réchauffant dans le domaine infrarouge (bouclier thermique) ainsi que l'effet refroidissant (réflexion de la lumière visible) des nuages sont tous deux calculés par le modèle.

est fondue, l'atmosphère est uniformément chauffée par le bas et le flux de chaleur provenant du manteau est présumé isotrope et indépendant du temps local ou de la latitude. Cela conforte l'idée qu'une couche nuageuse puisse être présente de façon homogène tout autour de la planète, correspondant au cas 100% nuageux, ou alors que les nuages sont complètement absents.

## A.2.3 Le couplage océan de magma – atmosphère

#### Le transfert de chaleur

L'évolution thermique de l'océan magmatique est fortement influencée par la formation d'une atmosphère thermiquement opaque (Figure A.19). Les modèles atmosphériques utilisés jusqu'à maintenant pour étudier les rétroactions entre les deux réservoirs sont uniquement unidimensionnels (e.g., ELKINS-TANTON, 2008; HAMANO, ABE et GENDA, 2013; LEBRUN et al., 2013; LUPU et al., 2014). Une colonne atmosphérique (selon un axe vertical z, normal à la surface de la planète) est vraisemblablement suffisant pour contraindre l'influence de l'atmosphère lors de l'évolution précoce de l'OM, étant donné que le flux de chaleur dominant est invariable spatialement, car issu d'un océan magmatique global. Ces modèles 1–D ont par ailleurs l'avantage d'être peu couteux en ressources numériques, ce qui facilite leur intégration dans des modèles couplés.

Du fait de compositions (atmosphères de  $H_2O-CO_2$ ) et d'inventaires de volatils similaires (de quelques dizaines à plusieurs centaines de bars), notre modèle atmosphérique s'inspire de modèles dédiés à l'étude de l'effet de serre divergent (INGERSOLL, 1969; RASOOL et BERGH, 1970; KASTING, 1988; NAKAJIMA, HAYASHI et ABE, 1992). De telles études considèrent initialement des conditions de surface tempérées, et, amorcés par une insolation plus importante, atteignent des climats chauds et instables (hors équilibre radiatif) où les océans sont vaporisés. A l'inverse, nos simulations commencent à des températures de surface très importantes et le système se refroidit, atteignant potentiellement des conditions de surface tempérées où peut se former un océan d'eau primitif. Ainsi, la différence majeure entre les deux approches réside dans le calcul de l'équilibre des flux (équilibre radiatif). L'équilibre radiatif global de l'atmosphère est défini par l'égalité entre la somme des flux entrants et la somme des flux sortants :  $\sum F_{\downarrow} = \sum F_{\uparrow}$ . Dans les modèles d'effet de serre divergent, le flux rayonné par la planète au sommet de l'atmosphère  $F_{IR}$  doit être égal à la partie absorbée  $(F_{abs})$  du flux provenant de l'étoile. Dans le cas d'une planète en phase océan de magma, en plus du flux absorbé de l'étoile, le flux de chaleur interne provenant du manteau  $F_{conv}$  est non négligeable et doit également être rayonné. Le refroidissement du système couplé océan magmatique – atmosphère est ainsi contrôlé par l'équilibre des flux suivant :

$$F_{IR} = F_{abs} + F_{conv},\tag{A.8}$$

où  $F_{IR}$  représente le flux net sortant et considérant l'isolation thermique de l'atmosphère. C'est ce flux qui mesure la quantité de chaleur émise par le système océan magmatique – atmosphère, et donc le refroidissement global de la planète.

 $F_{abs} = (1 - \alpha)F_{\downarrow}$  est le flux incident net, ou flux stellaire absorbé, qui est une fraction du flux stellaire incident total au sommet de l'atmosphère  $F_{\downarrow}$ , dépendant de l'albédo  $\alpha$  qui est la fraction du flux réfléchi par rapport au flux incident total (Figure A.16b). Dès lors que le flux convectif provenant de l'OM  $F_{conv}$  devient négligeable devant le flux stellaire absorbé  $F_{abs}$ , ce dernier prend le contrôle des conditions de surface, rendant ainsi les paramètres  $\alpha$  et  $F_{\downarrow}$  déterminants pour la formation des océans d'eau primitifs.

Le rayonnement infrarouge sortant  $F_{IR}$  calculé par le modèle atmosphérique dépend de la température de surface et de l'opacité atmosphérique, qui est elle-même contrôlée par la structure verticale de l'atmosphère et la quantité de gaz à effet de serre. La température de surface ainsi que les pressions gazeuses sont prescrites à chaque pas de temps par le modèle interne, et dépendent du taux de refroidissement et de la quantité de volatils dégazés. Une procédure itérative permet l'équilibre des flux et la convergence entre la température imposée par l'interne et la quantité de rayonnement que la planète peut émettre.

L'insolation incidente totale  $F_{\downarrow}$  dépend de la distance entre l'étoile et la planète, et du type d'étoile considéré. Pour la distance Terre-Soleil et pour le Soleil actuel, ce paramètre correspond à la constante solaire, ou irradiation solaire totale notée  $S_{\odot}$ . Dans les simulations réalisées ici, nous considérons la luminosité du Soleil jeune, luminosité stellaire plus faible qu'à l'actuel, en accord avec les modèles d'évolution stellaire standards (e.g., GOUGH, 1981; BAHCALL, PINSONNEAULT et BASU, 2001). A cette époque, la luminosité du Soleil était environ égale à ~ 70% de la luminosité actuelle.

### Répartition des volatils et dégazage

Un magma peut contenir des volatils dissous jusqu'à sa limite de saturation. Celleci dépend des espèces chimiques considérées (H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>), de la température, de la pression, de la composition du magma, et de la phase en présence (liquide ou solide). Les courbes de solubilité prédisent la quantité de volatils qui peut être dissoute. Au-delà de la saturation du magma, les volatils en excès sortent de la solution (ils sont exsolvés) et forment des bulles de gaz. Deux mécanismes sont responsables de l'exsolution des volatils lors du refroidissement de l'OM. (*i*) Au fur et à mesure de la cristallisation de l'océan magmatique, les volatils dissous vont préférentiellement





FIGURE A.20 – Schéma simplifié du dégazage de l'océan magmatique et vitesses associées.  $v_{sol}$  correspond à la vitesse de remontée du front de solidification de l'océan magmatique,  $v_{perc}$  est la vitesse de percolation/remontée des bulles de gaz, et  $v_{conv}$  est la vitesse caractéristique de convection au sein de l'océan de magma.

dans le liquide résiduel qui s'enrichit ainsi en volatils et peut atteindre la saturation. La vitesse de solidification  $v_{sol}$  de l'OM va alors contrôler le taux d'enrichissement en volatils et a posteriori le taux d'exsolution (Figure A.20). (*ii*) La solubilité de l'eau et du CO<sub>2</sub> dans un magma augmente avec la pression, i.e., davantage de volatils peuvent être dissous/stockés en profondeur de l'océan de magma (CARROLL et HOLLOWAY, 1994). La convection qui prend place au sein de l'océan magmatique est responsable de mouvements ascendants du magma. Avec la remontée du magma vers la surface et la diminution de pression associée, la solubilité diminue et des volatils sont donc exsolvés<sup>23</sup>. Dans ce cas, le taux de volatils exsolvés dépend de la vitesse de convection  $v_{conv}$  (Figure A.20). A partir du moment où les bulles de gaz sont formées, elles doivent atteindre la surface pour que le dégazage soit effectif. La vitesse de remontée à la vitesse de convection  $v_{conv}$  pour que les bulles atteignent la surface avant d'être réentraînées en profondeur dans les mouvements convectifs (ELKINS-TANTON, 2008).

<sup>&</sup>lt;sup>23</sup>Ce phénomène s'illustre dans la vie courante lors de l'ouverture d'un récipient contenant une boisson gazeuse. La boisson est conditionnée sous pression de sorte que la pression à l'intérieur du récipient soit supérieure à la pression ambiante et que les bulles restent dissoutes dans la phase liquide. Lors de l'ouverture du récipient, la pression diminue soudainement, la solubilité est alors plus faible, le gaz initialement dissous est exsolvé et des bulles de gaz se forment dans le liquide.

La vitesse de convection donnée par (PRIESTLEY, 1957; PRIESTLEY, 1959; SO-LOMATOV, 2007; ELKINS-TANTON, 2008) :

$$v_{conv} = 0.6 \left(\frac{\alpha_T g H F_{conv}}{\rho C_p}\right)^{1/3},\tag{A.9}$$

est d'environ  $0.5 \text{ m.s}^{-1}$  au début de la solidification de l'OM. Pour les profondeurs d'océan magmatique modélisées ici, la circulation complète de l'OM s'effectue en quelques semaines. Ce temps est bien inférieur au temps de solidification de l'OM mais aussi et surtout, bien inférieur au pas de temps utilisé. De même, la vitesse de percolation à travers le magma qui s'écrit (SOLOMATOV, 2007) :

$$v_{perc} = \frac{g\Delta\rho d^2\phi_l^2}{150\eta_l(1-\phi_l)},\tag{A.10}$$

est supérieure à la vitesse de remontée du front de solidification  $v_{sol}$  et à la vitesse de convection  $v_{conv}$  qui diminue au fil de la solidification. On peut donc raisonnablement supposer qu'à chaque pas de temps, l'OM est bien mélangé et que tous les volatils en excès par rapport à la saturation sont dégazés dans l'atmosphère. Pour ce faire, nous considérons que la pression atmosphérique et la quantité de volatils exsolvés sont à l'équilibre à chaque pas de temps. Cette approximation n'est plus valide lorsque l'océan magmatique est surmonté d'un couvercle stagnant suffisamment épais pour isoler les deux réservoirs. La flottaison de cristaux moins denses que le liquide environnant (responsable de la formation de la croûte anorthositique sur la Lune par exemple) ou encore l'épaississement de la couche limite thermique en surface à la fin de la phase OM pourraient aboutir à la formation d'une telle couche isolante à son sommet, mais ces cas ne sont pas considérés dans notre modèle. Les volatils, initialement dissous dans l'océan magmatique, sont alors dégazés dans l'atmosphère ou répartis entre le liquide résiduel et le manteau cristallisé :

$$k_{vol}X_{vol}M_{solid} + X_{vol}M_{liquid} + \frac{4\pi R_p^2}{g}P(X_{vol}) = X_0M_0,$$
 (A.11)

où la fraction massique initiale  $X_0$  de volatils, relative à la masse initiale de l'OM  $M_0$ , est distribuée selon une fraction  $X_{vol}$  entre la partie solide de masse  $M_{solid}$  et liquide de masse  $M_{liquid}$  du manteau, et selon la pression partielle  $P(X_{vol})$  dans l'atmosphère (Figure A.21) (ELKINS-TANTON, 2008; LEBRUN et al., 2013). La quantité de volatils pouvant être stockée dans la partie solide du manteau est déterminée par des coefficients de partage  $k_{vol}$  pour chaque espèce gazeuse (ELKINS-TANTON, 2008). En supposant que l'océan de magma et l'atmosphère sont à l'équilibre, les pressions partielles de volatils  $P(X_{vol})$  sont données par (PAN, HOLLOWAY et HERVIG, 1991; CARROLL et HOLLOWAY, 1994; JENDRZEJEWSKI et al., 1997) :

$$P(X_{\rm H_2O}) = \left(\frac{X_{\rm H_2O}}{6.8 \times 10^{-8}}\right)^{1/0.7},$$
 (A.12)

 $\operatorname{et}$ 

$$P(X_{\rm CO_2}) = \frac{X_{\rm CO_2}}{4.4 \times 10^{-12}}.$$
 (A.13)

La quantité de volatils dégazée est alors utilisée comme paramètre d'entrée du modèle atmosphérique.



$$\label{eq:FIGURE A.21} \begin{split} & \mbox{FIGURE A.21} - \mbox{Séquence typique de dégazage de l'océan magmatique considérée dans notre modèle. L'eau est initialement entièrement dissoute dans le manteau fondu et se répartit entre les différents réservoirs au fil de la solidification. \end{split}$$

#### Méthode numérique

L'océan magmatique et l'atmosphère échangent de la chaleur et des volatils à la surface de la planète. A partir des conditions initiales, les lois de solubilité permettent de calculer les pressions partielles de chaque espèce gazeuse dans l'atmosphère (équations A.12 et A.13). Les pressions partielles et la température de surface sont données comme paramètres d'entrée du modèle atmosphérique, afin de calculer le flux de chaleur au sommet de l'atmosphère  $F_{IR}$  et l'albédo  $\alpha$ . Ce flux de chaleur sortant doit être en équilibre avec le flux de chaleur calculé à la surface de l'OM. Ces deux flux dépendent de la température de surface et une boucle itérative permet d'atteindre l'équilibre des flux. Quand le modèle a convergé, la température potentielle du pas de temps suivant est calculée en utilisant l'équation du refroidissement séculaire (équation A.1) et est utilisée pour déterminer les pressions partielles correspondantes. La température de surface pour laquelle l'équilibre des flux est atteint devient alors la température initiale du nouveau pas de temps.

La boucle itérative utilisée pour l'équilibre des flux  $F_{IR}$  et  $F_{conv}$  est basée sur un ajustement de la température de surface. Tant que la différence absolue entre les deux flux est supérieure au seuil de convergence  $\epsilon = 10^{-1}$ , une variation  $\Delta T_s$  est appliquée à la température de surface, et les flux sont recalculés en conservant la même température potentielle et les mêmes pressions partielles.

Afin d'optimiser le temps de calcul, le pas de temps est adapté en fonction du taux de refroidissement (équation A.1). J'ai également implémenté un critère relatif à la fraction de liquide pour mieux contraindre les conditions à l'approche de la formation d'un océan d'eau primitif.

#### Améliorations du modèle

Pour résumer, depuis le précédent travail de LEBRUN et al. (2013), les améliorations suivantes ont été apportées au modèle.

- Une loi de viscosité continue sur la gamme de température explorée et en accord avec des données expérimentales (TAKEI et HOLTZMAN, 2009) a été implémentée afin de mieux traiter la transition rhéologique. Une optimisation appropriée du pas de temps a suivi, permettant de mieux contraindre l'évolution des variables principales.
- Les courbes liquidus-solidus de ABE (1997) ont été remplacées par celles de ANDRAULT et al. (2011), obtenues expérimentalement pour un manteau chondritique.
- Trois versions différentes du modèle atmosphérique ont été incorporées au modèle couplé, comprenant des processus différents avec des variables d'entrée et sortie spécifiques. L'inclusion des calculs d'albédo, avec et sans nuages, a permis de traiter l'évolution thermique de façon plus réaliste et a élargi le cadre du modèle couplé aux planètes avec nuages. La prise en considération des paramètres de l'étoile a permis d'étendre notre approche à d'autres systèmes stellaires, rendant possible des études d'habitabilité primitive pour des exoplanètes récemment découvertes.
- La structure du modèle couplé a été largement réorganisée afin de rendre son utilisation plus intuitive, avec la création de modules de constantes planétaires et de variables d'entrée à définir par l'utilisateur. Cette optimisation a notamment permis le lancement d'un grand nombre de simulations, grâce à l'utilisation

des super-calculateurs de l'Institut d'Astrophysique Spatiale (ERM/Univ. Paris-Sud), et les variables de sortie ont également été réorganisées afin de faciliter le traitement et l'analyse de données.

# A.3 L'influence relative de l'eau et du dioxyde de carbone sur les conditions de surface précoces et sur l'évolution des planètes telluriques

Tous les calculs dans ce chapitre considèrent une planète de type terrestre, ayant la même masse, densité, gravité, et le même rayon que la Terre, où le manteau est supposé entièrement fondu initialement. Ces planètes sont en orbite autour d'un Soleil jeune, plus froid que le Soleil actuel.

## A.3.1 Evolution thermique en fonction de la distance à l'étoile

La Figure A.22 présente une séquence de refroidissement typique d'une planète arborant un océan de magma, pour un contenu initial en volatils donné, et orbitant l'étoile à deux distances différentes (0.77 et 1.30 UA). Au début des simulations, lorsque le manteau est entièrement liquide (absence de cristaux,  $\phi = 1, T_{pot} \ge T_{liq}$ ), la chaleur est évacuée efficacement à travers la convection vigoureuse de l'océan de magma. Les mouvements convectifs permettent un dégazage important visible par l'augmentation des pressions atmosphériques (partie gauche des Figures A.22e et A.22f). Il est notable que dans cette première phase évolutive, la diminution importante des températures de surface et potentielle est indépendante de la distance à l'étoile (Figures A.22a et A.22b). Lors du refroidissement, l'océan de magma se solidifie progressivement de la base du manteau vers la surface. Avec la cristallisation du manteau, le pourcentage de roche fondue  $\phi$  diminue et la viscosité augmente, rendant la convection moins efficace/vigoureuse et diminuant ainsi le flux de chaleur pouvant être évacué par le manteau  $F_{conv}$  (Figures A.22c et A.22d). Le flux infrarouge émis au sommet de l'atmosphère vers l'espace  $F_{IR}$  (ou OLR), qui caractérise le refroidissement global du système OM-atmosphère, est contrôlé par  $F_{conv}$  lors de l'évolution précoce. Lorsque ce flux provenant du manteau fondu devient négligeable devant le flux stellaire reçu et absorbé  $F_{abs}$ , i.e., lorsque la planète a évacué suffisamment de chaleur, le refroidissement de la planète devient alors contrôlé par le rayonnement solaire incident absorbé (partie à droite des Figures A.22c et A.22d). L'absence de variation importante du flux de l'étoile  $F_{\downarrow}$  durant l'intervalle de temps considéré sous-entend que la planète évolue alors dans un état quasi-stationnaire, où les variables principales  $(P, T, F_{IR})$ restent constantes au fil du temps.

Un critère basé sur l'équilibre des flux de chaleur permet de définir la limite entre ces deux phases évolutives : quand le flux convectif provenant de l'océan de magma devient un ordre de grandeur inférieur au flux stellaire absorbé ( $F_{conv} \leq 0.1 \times F_{abs}$ ), on suppose que la fin du refroidissement dit « rapide » (ERCS, pour End of Rapid Cooling Stage) est atteinte. Ce temps est représenté par une ligne verticale en pointillés sur nos figures. Le système a alors évacué sa chaleur interne dans la limite du possible, imposée par le flux stellaire absorbé. Le flux IR rayonné au sommet de l'atmosphère  $F_{IR}$  et la température de surface  $T_{surf}$  se retrouvent alors contrôlés principalement par le flux stellaire absorbé  $F_{abs}$ . Ainsi, le refroidissement de l'océan de magma en interaction avec l'atmosphère est caractérisé par deux phases évolutives distinctes :

1. Avant l'ERCS, une phase comparable au « soft magma ocean » de Abe (ABE, 1993a) est marquée par une convection vigoureuse de l'OM, la formation de l'atmosphère, la forte diminution des températures de surface et potentielle, la solidification de la base du manteau vers la surface, et la diminution rapide des flux de chaleur. Les conditions à la surface de la planète et l'évolution thermique sont contrôlées par le refroidissement du manteau. Ce premier régime prend fin



FIGURE A.22 – Evolution thermique d'une planète en phase océan de magma pour deux distances à l'étoile : 0.77 UA (a, c, et e, en rouge) et 1.30 UA (b, d, et f, en bleu), en considérant une atmosphère grise, sans nuages, avec  $[H_2O]_{t_0}=0.621 M_{EO}$  et  $[CO_2]_{t_0}=5\times10^{-2}$  wt%. L'ERCS est indiquée par les lignes pointillées verticales, et les profils de température atmosphérique correspondants sont représentés sur la Figure A.23.  $P_{H_2O}atm$  correspond à la pression partielle d'eau non condensée restante dans l'atmosphère si un océan d'eau se forme en surface et piège une partie de l'eau (ici, un océan de 480 mètres de pronfondeur est formé à 1.30 UA.

à l'ERCS et initialise les conditions de surface pour l'évolution géodynamique future.

2. Après l'ERCS, la température de surface  $T_{surf}$  et le flux thermique sortant  $F_{IR}$ sont contrôlés principalement par le flux solaire absorbé  $F_{abs}$  ( $F_{IR} \approx F_{abs} \gg F_{conv}$ ) et par le contenu atmosphérique de volatils. Les variables principales étant liées à  $F_{abs}$ , qui, comme la composition atmosphérique, varie peu au fil du temps, le second régime peut être considéré comme quasi-stationnaire, y compris si la surface est encore fondue (partie droite des figures). Le flux sortant atmosphérique OLR est quasiement égal au flux solaire absorbé : l'équilibre radiatif global est atteint et le climat est stable. La présence d'un océan d'eau à l'ERCS est donc favorable à l'habitabilité future de la planète.

En fonction de la distance au Soleil, traduite en terme de flux absorbé  $F_{abs}$ , différentes conditions de surface peuvent émerger à l'ERCS (Figures A.22 et A.23) :

- Pour de grandes distances à l'étoile, la surface de la planète est solide :  $T_{surf} < T_{sol}$  (courbes bleues des Figures A.22 et A.23, correspondant à une planète située à 1.30 UA de l'étoile). La température potentielle peut être tout de même supérieure au solidus, impliquant la présence résiduelle de roche fondue. En fonction des conditions P–T en surface (ou de la composition atmosphérique), la troposphère humide peut s'étendre jusqu'à la surface (Figure A.23b) où un océan d'eau peut condenser (planètes dites de type I suivant HAMANO, ABE et GENDA, 2013; LEBRUN et al., 2013).
- Si la planète est suffisamment proche de l'étoile, sa surface est partiellement fondue :  $T_{sol} < T_{surf} < T_{liq}$  (courbes rouges des Figures A.22 et A.23, correspondant à une planète située à 0.77 UA de l'étoile). La phase océan de magma est prolongée et la convection continue jusqu'à ce que  $T_{pot}$  atteigne  $T_{surf}$ . L'état quasi-stationnaire à la suite de l'ERCS implique que la surface de la planète peut rester fondue plusieurs centaines de millions d'années, aussi longtemps que nécessaire pour que les processus de photo-dissociation et d'échappement atmosphérique de la haute atmosphère enlèvent une partie substantielle des gaz à effet de serre (planètes de type II selon la classification proposée par HAMANO, ABE et GENDA, 2013).
- Un autre cas hypothétique peut être envisagé si la planète est très proche de son étoile : la surface de la planète pourrait être entièrement liquide  $(T_{surf} > T_{liq})$ . La planète resterait alors fondue quand bien même l'excès de chaleur interne aurait été évacué et que la convection aurait cessé, à  $T_{pot} = T_{surf}$  et Ra < 650.

Il est important de remarquer ici que la définition de l'ERCS, basée sur l'équilibre des flux, donne un temps de référence qui permet la comparaison des conditions de surface pour des planètes au même stade évolutif, indépendamment de la distance à l'étoile. L'introduction de ce nouveau temps caractéristique semble plus approprié que la fin de la phase océan de magma, qui n'est vraisemblablement pas toujours atteinte, notamment lorsque les planètes sont proches de leur étoile, et où des processus différents peuvent contrôler l'évolution jusqu'à la solidification totale.

## A.3.2 Influence du contenu initial en CO<sub>2</sub>

Les contenus initiaux en volatils apportés lors de l'accrétion des planètes rocheuses étant très incertains, nous avons simulé des planètes en explorant une large gamme


FIGURE A.23 – Profils de température atmosphérique à l'ERCS pour des planètes situées à (a) 0.77 (rouge) et (b) 1.30 UA (bleu) de l'étoile. A 1.30 UA, la troposphère humide atteint la surface et un océan de 480 mètres de profondeur est formé.

de contenus initiaux en CO<sub>2</sub> et H<sub>2</sub>O, qui sont les principaux constituants des atmosphères primitives desdites planètes. Commençons ici par discuter l'influence du contenu initial en  $CO_2$  pour un contenu en  $H_2O$  fixé à environ la moitié de la quantité d'eau présente à la surface de la Terre actuellement (0.6 océans d'eau terrestre plus exactement, noté  $0.6 M_{\rm EO}$ ). Il est essentiel de préciser que davantage d'eau peut être dissoute dans un magma par rapport au CO<sub>2</sub>, i.e., la solubilité de H<sub>2</sub>O dans le magma est plus grande que celle du  $CO_2$ . Ainsi, dès les premiers pas de temps, la majeure partie du  $CO_2$  (environ 75%) est dégazée alors que le dégazage de l'eau s'effectue plus tardivement, lorsqu'un pourcentage plus important de l'océan de magma est cristallisé (Figures A.24e et A.24f). Au commencement, le dioxide de carbone est alors le composant principal de l'atmosphère et contrôle son opacité. Si l'océan de magma contient plus de CO<sub>2</sub> initialement, davantage de CO<sub>2</sub> est dégazé et l'effet de serre plus important (Figures A.24c et A.24d) explique les températures de surface plus importantes (Figures A.24a et A.24b), et ce, quelque soit la distance à l'étoile. Au fur et à mesure de la solidification, la pression atmosphérique d'eau  $P_{\rm H_2O}$  augmente, alors que  $P_{\rm CO_2}$ varie relativement peu (Figures A.24e et A.24f). L'humidité relative  $H_2O/CO_2$ , tout comme le rapport de mélange  $\frac{P_{H_2O}}{P_{CO_2}+P_{N_2}}$ , augmente rendant l'atmosphère plus opaque. L'opacité (et donc la température), contrôlée par l'humidité relative, est d'autant plus grande que le contenu relatif en  $CO_2$  par rapport au contenu en  $H_2O$  est faible.

#### Conditions à l'ERCS

A 0.77 UA de l'étoile, où la vapeur d'eau ne condense pas en surface, toute l'eau exsolvée reste en phase gazeuse et à l'ERCS, l'effet de serre est plus important pour les faibles contenus en  $CO_2$ , où l'atmosphère est davantage « concentrée » en eau (Figures A.24a et A.24c). Dans ce cas, la mésosphère est plus fine, localisée à plus haute altitude dans l'atmosphère, et le profil thermique adiabatique sous-jacent induit une température de surface plus élevée (Figure A.24g). Ce résultat s'explique par la différence d'absorption du rayonnement thermique entre les molécules d'eau et de dioxide de carbone :  $H_2O$  étant un gaz à effet de serre plus important que le  $CO_2$ , l'ajout de  $CO_2$  ne fait que « diluer » la vapeur d'eau et ainsi diminuer l'opacité

A.3. L'influence relative de l'eau et du dioxyde de carbone sur les conditions de 189 surface précoces et sur l'évolution des planètes telluriques



FIGURE A.24 – Evolution thermique de l'océan magmatique pour deux contenus initiaux en CO<sub>2</sub> différents :  $10^{-2}$  (courbes bleues) et  $10^{-1}$  wt% (courbes rouges), sur des planètes situées à 0.77 UA (a, c, e, et g, croix sur la Figure A.25) et 1 UA (b, d, f, et h, carrés sur la Figure A.25), entourées d'une atmosphère grise sans nuages et avec  $[H_2O]_{t_0}=0.621 M_{EO}$ . A 1 UA du Soleil, pour  $[H_2O]_{t_0}=0.621 M_{EO}$  et  $[CO_2]_{t_0}=10^{-2}$  wt%, un océan de 910 mètres de profondeur est formé.



FIGURE A.25 – Isothermes de la température de surface à l'ERCS (lignes noires), et température du solidus (ligne rouge), en fonction du contenu initial en  $CO_2$  et de la distance au Soleil. Sous la limite de condensation (ligne bleue), un océan d'eau condense à la surface de la planète. Les croix et les carrés correspondent aux simulations présentées dans la Figure A.24. Les zones colorées distinguent les trois différents types de planète issues du refroidissement de l'océan magmatique.

atmosphérique (i.e., le flux de chaleur s'échappe plus facilement vers l'espace et la planète se refroidit davantage).

A 1 UA, pour une concentration initiale de  $[CO_2]_{t_0} = 10^{-2}$  wt%, la troposphère humide s'étend jusqu'à la surface où la pression vapeur saturante est atteinte, permettant la formation d'un océan d'eau (Figure A.24h, courbe bleue). L'eau condensée est piégée dans la phase liquide, diminuant fortement la pression vapeur atmosphérique  $P_{H_2O \text{ atm}}$  et l'opacité thermique de l'atmosphère. Au contraire, lorsque le contenu en  $CO_2$  est plus important, la pression vapeur saturante n'est pas atteinte à la surface et toute l'eau reste en phase vapeur dans l'atmosphère, contribuant à un effet de serre plus important (Figure A.24b et A.24f).

La Figure A.25 résume les conditions de surface obtenues à l'ERCS en fonction du contenu en CO<sub>2</sub> et de la distance au Soleil. Deux tendances opposées apparaissent alors de part et d'autre de la distance critique  $D_C$  au-delà de laquelle un océan d'eau peut se former. En deçà de  $D_C$  ( $D < D_C$ ), l'augmentation du contenu initial en CO<sub>2</sub> diminue la température de surface atteinte à l'ERCS du fait de la diminution de l'opacité thermique de l'atmosphère. En revanche, au-delà de  $D_C$  ( $D > D_C$ ), un contenu initial en CO<sub>2</sub> plus important est défavorable à la condensation de l'eau en surface, ce qui augmente l'opacité atmosphérique et engendre des températures de surface plus importantes à l'ERCS. Au-delà d'une concentration critique de CO<sub>2</sub>  $([CO_2]_{t_0} \approx 5 \times 10^{-2} \text{ wt\%}$ , correspondant à une pression  $P_{CO_2} \approx 357$  bar), la formation d'un océan n'est plus seulement régie par la distance à l'étoile (planètes de type I et II définies par HAMANO, ABE et GENDA, 2013) mais devient fortement dépendante du contenu en CO<sub>2</sub>. Loin de l'étoile et pour des contenus en CO<sub>2</sub> importants, un troisième type de planète est possible à l'ERCS où la surface solide n'est pas recouverte d'un océan d'eau (région orange de la Figure A.25). Nous pouvons alors tracer une limite de condensation séparant les planètes où un océan d'eau est formé à l'ERCS, des planètes où la condensation n'a pas lieu en surface (limite bleue sur la Figure A.25).

### A.3.3 Influence du contenu initial en $H_2O$

Tout comme pour le dioxide de carbone, nous avons mené une étude de sensibilité des conditions de surface au contenu en eau apporté lors de l'accrétion et initialement dissous dans l'océan de magma. La Figure A.26 compare l'évolution temporelle des variables principales du modèle couplé, pour deux contenus en eau différents et pour un même contenu en CO<sub>2</sub>. L'humidité relative H<sub>2</sub>O/CO<sub>2</sub> contrôle l'opacité thermique de l'atmosphère dont dépend la température de surface. Une augmentation du contenu en H<sub>2</sub>O a alors le même effet sur l'opacité atmosphérique qu'une diminution du contenu en CO<sub>2</sub>. Ainsi, en faisant varier le contenu en eau, nous obtenons le comportement inverse de ce qui a été décrit précédemment. Au début de l'évolution thermique, quelque soit la distance à l'étoile, un contenu en H<sub>2</sub>O plus important augmente l'opacité atmosphérique et diminue ainsi le flux de chaleur rayonné par la planète  $F_{IR}$  (Figures A.26c et A.26d). La température de surface résultante est donc légèrement supérieure pour des contenus en eau plus élevés (Figures A.26a et A.26b).

Proche de l'étoile (Figure A.26, colonne de gauche), où la condensation en surface n'a pas lieu, et au fil du dégazage, l'humidité relative et l'opacité résultante sont toujours supérieures pour le contenu en eau le plus élevé.

A l'opposé, au-delà de la distance critique à 1 UA, la pression vapeur saturante est atteinte plus facilement pour un contenu en eau plus important et la pression partielle d'eau  $P_{H_{2O}}$  s'en retrouve diminuée (Figure A.26f). L'opacité et donc la température de surface sont alors plus faible lorsque le contenu en eau est plus important (Figures A.26b, A.26d, et A.26h).

Les limites de condensation obtenues pour différents contenus initiaux en H<sub>2</sub>O sont représentées sur la Figure A.27. Elles illustrent la dépendance de la formation des océans d'eau en fonction des différentes variables testées. Il est intéressant de noter que la distance critique  $D_C = 0.86\pm0.3$  UA (indiquée par une flèche rouge sur la Figure A.27, et similaire à celle calculée par HAMANO et al., 2015) reste constante quelque soit le contenu en volatils, de même que la température d'équilibre correspondante. En revanche, le contenu en CO<sub>2</sub> critique, au-delà duquel l'océan n'est pas formé à  $D_C$ , dépend du contenu en eau. L'augmentation de la concentration initiale en H<sub>2</sub>O favorise la formation d'un océan est possible : lorsque la pression en eau est supérieure, la pression vapeur saturante peut être atteinte en surface pour des concentrations en CO<sub>2</sub> plus importantes.



FIGURE A.26 – Evolution thermique de l'océan magmatique pour deux contenus initiaux en eau différents : 0.186 (courbes bleues) et 0.621 M<sub>EO</sub> (courbes rouges), pour des planètes situées à 0.77 UA (a, c, e, et g, croix sur la Figure A.27) et à 1 UA du Soleil (b, d, f, et h, carrés sur la Figure A.27). L'atmosphère est supposée grise, sans nuages, et le contenu initial en CO<sub>2</sub> est fixé à  $[CO_2]_{t_0}=5\times10^{-2}$  wt%. A 1 UA du Soleil, pour [H<sub>2</sub>O]<sub>t\_0</sub>= 0.621 M<sub>EO</sub>, un océan de 243 mètres de profondeur est formé à l'ERCS.



FIGURE A.27 – Limites de condensation séparant les planètes pour les quelles un océan d'eau se forme à l'ERCS (en dessous des limites) des planètes pour les quelles la condensation n'a pas lieu en surface (audessus et à gauche des limites). Différentes limites sont obtenues en fonction du contenu initial d'eau considéré (indiqué en masse d'océans terrestres  $M_{EO}$ ). Le code couleur est le même que celui utilisé dans la figure précédente dont les cas décrits sont localisés ici par les croix et les carrés.



FIGURE A.28 – Diagramme de régime présentant la condensation d'un océan d'eau à la surface d'une planète à l'ERCS en fonction du contenu en volatils adimensionné  $x^*$  (équation A.14) et de la distance au Soleil. Les lignes colorées correspondent aux limites de condensation obtenues pour différents contenus en eau présentées en Figure A.27. La courbe bleue la plus épaisse est la courbe maîtresse résultante. La zone grisée représente l'incertitude associée.

# A.3.4 Influence combinée des contenus initiaux en $CO_2$ et $H_2O$ : lois d'échelle

Les limites de condensation pour différents contenus en eau, tracées sur la Figure A.27, présentent des formes similaires. Cela indique que la condensation en surface peut être exprimée à un seul paramètre qui résumerait la contribution relative des contenus en  $CO_2$  et  $H_2O$ . Nous pouvons ainsi introduire le paramètre sans dimension  $x^*$  tel que :

$$x^* = \frac{P_{CO_2}}{P_{CO_2} + P_{H_2O}},\tag{A.14}$$

où  $x^*$  représente le contenu initial en volatils, exprimé en terme de pressions atmosphériques équivalentes  $P_{CO_2}$  et  $P_{H_2O}$ . Lorsque  $x^* > 0.5$ , H<sub>2</sub>O domine la composition atmosphérique, alors que  $x^* < 0.5$  pour les atmosphères riches en CO<sub>2</sub>. En utilisant ce paramètre adimensionné, les limites de condensation précédemment obtenues s'alignent autour d'une seule courbe maîtresse qui exprime la dépendance de la condensation en surface au contenu relatif en CO<sub>2</sub> et H<sub>2</sub>O (Figure A.28).

La formation d'un océan d'eau est donc désormais exprimée en fonction du contenu en volatils, représenté par le paramètre  $x^*$ , et de la distance à l'étoile. Nous pouvons intuiter ici que la distance critique à l'étoile va dépendre de l'étoile considérée : autour d'une étoile plus chaude, la formation d'un océan sera repoussée à des distances plus importantes et la distance critique sera ainsi plus éloignée de l'étoile. Plus généralement, la position de la distance critique  $D_C$  va dépendre de la quantité d'énergie reçue à la surface de la planète. Pour un système planétaire donné, cette quantité résulte de la combinaison du flux émis par l'étoile, et donc spécifique à celle-ci, mais aussi de l'albédo  $\alpha$ , qui varie en fonction des propriétés de la surface, de l'atmosphère, et de la distribution d'énergie spectrale de l'étoile. Afin d'étendre nos prédictions à d'autres systèmes stellaires, il est nécessaire de définir un paramètre prenant en compte ces différentes contributions. Revenons au mécanisme physique responsable de la transition qui se produit à  $D_C$  entre les planètes de type II, fondues à l'ERCS, et les planètes de type I, où la surface solide est surmontée d'un océan d'eau. Cette transition est le siège d'une variation très importante de la température de surface : environ 1000 K de différence entre les planètes de type I et de type II (Figure A.29). Ce changement abrupt est dicté par l'emballement de l'effet de serre. Pour expliquer ce mécanisme, mis en évidence dans des études consacrées à l'évolution du climat (e.g., INGERSOLL, 1969; RASOOL et BERGH, 1970; NAKAJIMA, HAYASHI et ABE, 1992), considérons le cas d'une planète solidifiée et possédant un océan d'eau en surface, comme la Terre actuelle. Pour une température de surface donnée, la planète émet un flux de chaleur en haut de l'atmosphère  $F_{IR}$ . Ce flux sortant dépend du flux reçu de l'étoile et absorbé, et de la composition atmosphérique qui va plus ou moins limiter l'échappement de chaleur (effet de serre). Les atmosphères planétaires sont supposées être à l'équilibre radiatif sur le long terme : une absorption plus importante de l'énergie solaire réchauffe la surface et la troposphère, conduisant à une augmentation de l'énergie thermique réémise  $(F_{IR})$ , pour équilibrer l'excès de chaleur. Pour une planète arborant un océan d'eau, une augmentation de la température va provoquer une évaporation de l'eau des océans, qui, dans l'atmosphère sous forme de vapeur, va empêcher le rayonnement thermique de s'échapper vers l'espace (effet de serre), engendrant un chauffage plus important, qui lui même augmentera l'évaporation et ainsi de suite. L'atmosphère deviendra ainsi riche en eau et optiquement épaisse de telle sorte que seul le rayonnement thermique émis depuis la haute atmosphère pourra s'échapper vers l'espace. Pour ce type d'atmosphère, l'émission thermique  $F_{IR}$  est donc plafonnée à une certaine valeur qui ne dépend pas de la température de surface. Si le flux solaire absorbé dépasse cette limite, la planète se réchauffera de façon incontrôlable et l'océan sera vaporisé. On parle alors d'effet de serre divergent, ou d'emballement de l'effet de serre, lié au fait que l'eau soit un gaz à effet de serre condensable. Le climat redeviendra stable, i.e., l'équilibre des flux entrants et sortants sera rétabli, uniquement lorsque l'atmosphère pourra émettre l'excès de chaleur en émettant du rayonnement dans le visible, à des températures supérieures à 1500 K. La valeur limite du flux thermique sortant  $F_{IR}$ pour laquelle le saut de température se produit, dite limite de Nakajima, est environ égale à 280 W.m<sup>-2</sup> (GOLDBLATT et al., 2013; LECONTE et al., 2013; KOPPARAPU et al., 2013). La température d'équilibre critique  $T_{eqC}$  associée à la limite de Nakajima et correspondant à  $D_C$  est donnée par :

$$T_{eqC} = \left(\frac{280}{\sigma_{\rm SB}}\right)^{1/4}$$

où  $\sigma_{\rm SB}$  est la constante de Stefan-Boltzmann. Dans notre cas,  $T_{eqC} = 261 \pm 5$  K.



FIGURE A.29 – Evolution schématique du flux infrarouge sortant  $F_{IR}$  en fonction de la température de surface. L'existence d'une limite asymptotique du flux à environ  $F_{IR} \approx 280 \,\mathrm{W.m^{-2}}$ , dite limite de Nakajima, est responsable d'une variation abrupte de la température de surface à l'approche de cette limite et explique la différence entre les planètes de type I et II.

A.3. L'influence relative de l'eau et du dioxyde de carbone sur les conditions de 197 surface précoces et sur l'évolution des planètes telluriques



FIGURE A.30 – Limites de condensation à l'ERCS en fonction des paramètres adimensionnés  $x^*$  et  $D^*$ , pour la contribution du contenu initial en volatils et de la distance à l'étoile respectivement (équations A.14 et A.16), et dans le cas (a) d'une atmosphère grise et (b) nongrise. Les croix droites indiquent les limites obtenues pour différents contenus en eau, les croix obliques représentent des simulations où l'albédo et la constante solaire ont été variés : de 0.1 à 0.7 pour l'albédo, et de la constante solaire du Soleil jeune à celle de l'actuel. Ces croix obliques sont bleues si un océan d'eau est formé à l'ERCS et rouge dans le cas contraire. Cela indique que la distance critique est invariante pour la gamme de paramètres explorés.

La température d'équilibre critique ainsi calculée peut être utilisée pour prédire la distance critique  $D_C$  à l'ERCS dans un système planétaire donné :

$$D_C = \sqrt{\frac{F_{\downarrow}(1-\alpha)}{\sigma_{\rm SB}T_{eqC}^4}}.$$
(A.15)

La distance stellaire a dimensionnée  $D^\ast$  d'une planète ayant un albé do donné est donc :

$$D^* = \frac{D}{D_C}.\tag{A.16}$$

Si  $D^*$  est supérieure à un, la planète est située au-delà de la distance critique et peut arborer un océan d'eau à l'ERCS en fonction du contenu en volatils, notamment pour de faibles valeurs de  $x^*$  (i.e., pour des planètes suffisamment riches en eau).

A partir de l'ensemble des données, la limite de condensation peut être exprimée de la façon suivante :

$$x_C^* = a \times (D^* - 1)^n,$$

où les coefficients  $a = 0.82 \pm 0.03$  et  $n = 0.05 \pm 0.035$  correspondent à une atmosphère où l'absorption est indépendante de la longeur d'onde (atmosphère grise, Figure A.30a). Pour une atmosphère non-grise (coefficients k-corrélés), nous obtenons  $a = 0.902 \pm 0.4$  et  $n = 0.128 \pm 0.02$  (Figure A.30b). Deux paramètres,  $D^*$  et  $x^*$ , permettent désormais de prédire la formation d'un océan d'eau à l'ERCS, pour des planètes aux environnements stellaires variés et pour différentes compositions atmosphériques. Inversement, connaissant les conditions à la surface d'une planète, il est possible de contraindre la gamme de volatils compatible avec ces conditions.



FIGURE A.31 – Scénarios d'évolution possibles de Vénus (étoiles rouges) en fonction de l'albédo et de la constante solaire. La limite de condensation en rouge est basée sur  $x^*$  et  $D^*$  (équations A.14 et A.16 respectivement). L'astérisque bleue indique la valeur d'albédo minimum permettant la formation d'un océan d'eau sur Vénus. Le contenu initial en eau est noté sur le bord droit de la figure.

## A.3.5 Scénarios d'évolution possibles de Vénus

Appliquons désormais les lois d'échelle décrites précédemment au cas de Vénus. Il est d'abord nécessaire de supposer un contenu initial en volatils. En l'absence de consensus sur les sources et les processus impliqués dans l'apport d'eau lors de l'accrétion des planètes rocheuses (MARTY, 2012; MORBIDELLI et al., 2012), et en vue de la proximité des deux planètes, il semble raisonnable de supposer que les contenus initiaux en volatils de Vénus et de la Terre étaient assez similaires (RAYMOND, QUINN et LUNINE, 2007). Nous considérons ainsi que l'équivalent d'un océan d'eau a été apporté à Vénus lors de l'accrétion ( $[H_2O]_{t_0} = 1 M_{EO} \approx 270 \text{ bar}$ ), et que la concentration initiale en CO<sub>2</sub> de Vénus était la même qu'actuellement ( $[CO_2]_{t_0} \approx 90 \text{ bar}$ ).

Si l'on suppose un albédo  $\alpha = 0.2$ , la planète ne présente pas d'océan d'eau à l'ERCS (étoile rouge à gauche de la Figure A.31). En revanche, si l'albédo est fixé à la valeur actuelle de  $\alpha = 0.7$ , un océan d'eau est formé à l'ERCS (étoile rouge à droite de la Figure A.31). En plus de considérer un albédo de 0.7 et le flux solaire actuel ( $F_{\downarrow t=4.56 \text{ Gyr}}$ ), si l'on suppose une faible concentration en eau (de l'ordre du ppm), notre étude reproduit bien les conditions actuelles à la surface de Vénus (étoile rouge en haut de la Figure A.31) : malgré le fait que Vénus soit située dans la zone habitable (au-delà de la distance critique,  $D^* > 1$ ) où un océan peut se former, son rapport  $\text{CO}_2/\text{H}_2\text{O}$  trop élevé, ne permet pas la condensation d'eau en surface ( $x^* \approx 1$ ).

Discutons l'évolution post-ERCS de Vénus à partir des conditions de surface calculées avec notre modèle pour  $\alpha = 0.2$ . Parmi les processus prenant part à l'évolution future de Vénus, les trois suivants vont conditionner la formation d'un océan d'eau :

- la formation des nuages, et l'augmentation de l'albédo associée, va favoriser la formation d'un océan d'eau en diminuant la temperature et déplacera la planète vers la droite du diagramme (augmentation de D\*);
- l'augmentation de l'intensité du flux émis par le Soleil au fil du temps va déplacer la planète vers la gauche du graphique et sera ainsi défavorable à la formation de l'océan;
- l'échappement atmosphérique est responsable d'une perte d'eau, rendant la formation d'un océan d'eau moins probable en déplaçant la planète vers le haut du diagramme.

Ainsi, si une couche nuageuse assez réfléchissante se développe rapidement, et qu'il reste suffisamment d'eau dans l'atmosphère, un océan d'eau pourra se former au cours de l'évolution de Vénus. Inversement, si l'échappement atmosphérique est trop rapide devant la formation des nuages, on ne croisera jamais la limite de condensation durant l'évolution post-ERCS.

Toutes les simulations présentées jusqu'alors présupposent un albédo constant, et ne prennent pas en compte les nuages au cours du refroidissement de l'océan de magma. Il apparaît clairement que ces deux paramètres sont essentiels à prendre en compte pour mieux contraindre l'évolution thermique et l'apparition d'un océan à la fin de la phase de refroidissement rapide. Les rétroactions entre la composition atmosphérique, la température, l'albédo, et la couverture nuageuse font l'objet du chapitre suivant.

# A.4 Terre jeune et Vénus primitive : de l'océan de magma à des conditions de surface tempérées

## A.4.1 L'évolution thermique de Vénus avec et sans nuages

Lorsque l'effet des nuages est pris en compte, l'albédo suit d'abord la même tendance que dans le cas sans nuages : il diminue en lien avec le dégazage de l'eau qui augmente l'opacité atmosphérique. Le rayonnement ainsi absorbé diminue la part de rayonnement réfléchi (partie gauche de la Figure A.32b). Puis, à partir du moment où suffisamment d'eau est dégazée de l'océan de magma, en 20000 ans environ, des nuages commencent à se former dans la haute atmosphère (Figure A.33), et leur réflexion du rayonnement solaire vers l'espace (effet « mirroir » des nuages) vient contrebalancer leur absorption, expliquant ainsi l'albédo plus important dans le cas avec nuages. Au fur et à mesure que l'eau est dégazée et que la couche nuageuse s'épaissit, l'albédo augmente, de moins en moins de rayonnement solaire pénètre à travers l'atmosphère, et la température de surface diminue (Figures A.32 et A.33). Le flux absorbé devient alors suffisamment faible pour que le flux réémis  $(F_{IR})$  passe en dessous de la limite de Nakajima. Ainsi, pour une planète située à la distance de Vénus (0.72 UA), on atteint une température permettant la condensation d'eau en surface et donc la formation d'un océan d'eau primitif, en 3.5 Ma environ. La condensation piège de la vapeur d'eau en phase liquide (la vapeur d'eau condensée pour former l'océan n'est plus sous forme gazeuse dans l'atmosphère) diminuant ainsi l'épaisseur de la couche nuageuse, et expliquant la diminution d'albédo au moment où l'océan est formé (Figures A.32b et A.32d). Mis à part la formation d'un océan rendue possible par l'albédo de la couverture nuageuse, à l'ERCS, la surface de la planète est encore fondue si les nuages ne sont pas considérés  $(T_{surf}(\text{ERCS}) > T_{solidus})$ , alors que la surface est solidifiée si les nuages sont présents.

Finalement, l'albédo des nuages et leur effet refroidissant l'emporte sur leur effet de serre. Ceci n'est pas surprenant dans le cas d'une atmosphère dense et riche en  $H_2O$ , qui est déjà optiquement épaisse dans le domaine infrarouge, où l'effet thermique des nuages est donc limité (KOPPARAPU et al., 2013).

# A.4.2 Influence de l'eau, du $CO_2$ , et de la distance au Soleil sur la formation d'un océan primitif, avec et sans nuages

Pour les raisons énoncées dans le chapitre précédent, nous avons fait varier le contenu initial en  $H_2O$  et  $CO_2$  d'une planète en phase océan de magma, située à une distance variable de son étoile, en considérant ou non la présence de nuages afin d'évaluer leur influence sur la formation d'un océan primitif à l'ERCS.

Avec nuages, la limite de condensation se rapproche du Soleil quelque soit le contenu en volatils : l'effet refroidissant des nuages permet de maintenir des conditions de surface tempérées, avec la formation d'un océan d'eau, à des flux stellaires incidents  $F_{\downarrow}$  plus importants (SELSIS et al., 2007, et Figure A.34). Par ailleurs, l'albédo obtenu à l'ERCS dans le cas avec nuages, est toujours supérieur à celui obtenu sans nuages, ce qui a pour effet de diminuer la température de surface et ainsi d'étendre la formation d'un océan à des contenus initiaux en CO<sub>2</sub> plus importants. Il est utile de remarquer également que pour les planètes nuageuses les plus éloignées de l'étoile, la température de surface atteint 273.15 K, et l'eau se met à geler (à droite de la ligne bleue tiretée de la Figure A.34).



FIGURE A.32 – (a) Températures, (b) albédo, (c) flux de chaleur, et (d) pressions atmosphériques pendant le refroidissement de l'océan magmatique, en considérant une épaisse couche nuageuse (courbes bleues) ou un ciel dégagé (courbes rouges), pour une planète située à la distance de Vénus. Les lignes verticales tiretées indiquent la fin de la phase de refroidissement rapide. Les profils de température atmosphérique correspondants à certains temps caractéristiques (croix colorées) sont représentés sur la Figure A.33.



FIGURE A.33 – Profil de température atmosphérique à différents moments du refroidissement d'une planète océan de magma nuageuse et située à la distance de Vénus (correspondant au cas présenté en Figure A.32). Les différents temps de refroidissement représentés ici sont reportés sur les Figures A.32a – A.32e en utilisant le même code couleur. Les cercles et carrés indiquent respectivement le sommet des troposphères humides et sèches lorsqu'elles existent. La troposphère humide contenant les nuages apparaît après t = 7.6 kyr, son extension verticale est signalée par les flèches.



FIGURE A.34 – Limites de condensation (lignes pleines) à l'ERCS pour une planète de type terrestre, orbitant le Soleil jeune à différentes distances, en fonction du contenu initial en H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>, et de la couverture nuageuse. Sous ces limites, un océan d'eau est formé à l'ERCS. La ligne tiretée orange sépare les planètes sans nuages où la surface à l'ERCS est fondue (à gauche de la ligne), de celles où la surface est solide (à droite de la ligne), pour un contenu initial en eau  $[H_2O]_{t_0} = 1 M_{EO}$ . La ligne tiretée bleue représente la distance au-delà de laquelle l'eau gèle à la surface de la planète lorsque les nuages sont inclus pour  $[H_2O]_{t_0} = 1 M_{EO}$ .

### A.4.3 Lois d'échelle et habitabilité de Vénus

L'influence relative du contenu initial en  $H_2O$  et  $CO_2$  peut être exprimée à l'aide du paramètre sans dimension  $x^*$  défini dans le Chapitre A.3 précédent :

$$x^* = \frac{P_{\rm CO_2}}{P_{\rm CO_2} + P_{\rm H_2O}},\tag{A.17}$$

où  $P_{\rm CO_2}$  et  $P_{\rm H_2O}$  correspondent aux pressions atmosphériques équivalentes aux contenus initiaux dissous dans l'océan magmatique, pour CO<sub>2</sub> et H<sub>2</sub>O respectivement. Ainsi,  $x^* < 0.5$  pour les atmosphères dont la composition est dominée par H<sub>2</sub>O, et  $x^* > 0.5$  pour les atmosphères dont la composition est dominée par le CO<sub>2</sub>. Nous rappelons également que le contenu initial critique en volatils,  $x_C^*$ , pour la formation d'un océan sur une planète située à une distance D de l'étoile est donné par :

$$x_C^* = a \times (D - D_C)^n, \tag{A.18}$$

où les coefficients a et n diffèrent de ceux calculés précédemment pour le cas sans nuages du fait de la variation d'albédo. Les coefficients sont également différents lorsque les nuages sont inclus dans les simulations. Dans le diagramme de régime où la contribution respective des volatils est représentée par le paramètre adimensionné  $x^*$ , les limites de condensation présentées dans la Figure A.34 sont réduites à deux courbes maîtresses, pour les cas avec et sans nuages (Figure A.35). L'effet refroidissant des nuages est bien visible par le décalage de la limite de condensation vers l'étoile, et par l'extension de la zone de formation des océans à des contenus en volatils plus riches en CO<sub>2</sub> relativement à H<sub>2</sub>O, i.e., pour des valeurs de  $x^*$  plus importantes (Figure A.35).

Si l'on suppose un contenu initial en  $CO_2$  de 90 bar, nous pouvons utiliser les équations A.17 et A.18 pour estimer le contenu initial en eau minimum qui permettrait la formation d'un océan d'eau à l'ERCS à la distance de Vénus. Un contenu initial de 25 bar d'eau seulement, soit moins de 10% du volume océanique terrestre actuel ( $\approx 0.09$  $M_{\rm EO}$ , est suffisant pour former un océan d'eau primitif sur Vénus (Figure A.35, étoile noire). Les modèles d'accrétion planétaire combinés avec des arguments géochimiques suggèrent un apport d'eau précoce et important pour Vénus (e.g., RAYMOND, QUINN et LUNINE, 2007; MORBIDELLI et al., 2012). Les mesures du rapport deutérium sur hydrogène (D/H), montrent un enrichissement relatif en deutérium qui semble également indiquer un apport d'eau primitif important (DONAHUE et al., 1982), bien qu'il ait été proposé qu'un excès en eau dans le passé ne soit pas nécessaire pour expliquer ces données isotopiques (GRINSPOON, 1987). Par ailleurs, les densités élémentaires similaires de la Terre et Vénus, ainsi que leur proximité dans le système solaire sont favorables à l'hypothèse d'un contenu en eau initial similaire pour les deux planètes (e.g., TITOV et al., 2013). D'après nos estimations, il semble donc vraisemblable que Vénus ait pu former un océan d'eau primitif, et que la convection du manteau solide ait commencé sous des conditions de surface proches de celles de la Terre primitive. Certaines études d'habitabilité considérant une couverture nuageuse épaisse sont également en accord avec cette conclusion (SELSIS et al., 2007; ZSOM et al., 2013; YANG et al., 2014; WAY et al., 2016).

### A.4.4 Discussion

Il est bon de remarquer que dans le cas sans nuages, lorsque l'albédo est calculé au cours de l'évolution thermique, la formation d'un océan d'eau à l'ERCS est facilitée, et légèrement étendue à des distances plus proches de l'étoile ainsi qu'à des contenus



 $\begin{array}{l} \mbox{Figure A.35-Formation d'un océan d'eau à l'ERCS sur une planète de type terrestre, en orbite à différentes distances autour du Soleil jeune, en fonction de <math display="inline">x^*$ , avec (bleu) et sans nuages (rouge). De bas en haut, les étoiles indiquent la position de Vénus pour  $[{\rm H_2O}]_{\rm t_0}{=}1~{\rm M_{EO}}, \\ 0.09~{\rm M_{EO}}$  et pour le contenu actuel en vapeur d'eau.

relatifs en  $CO_2$  plus importants. En effet, l'albédo calculé à l'ERCS est légèrement supérieur à la valeur précédemment utilisée, diminuant ainsi la température de surface. Davantage de  $CO_2$  et des flux stellaires plus importants sont requis pour compenser la diminution de température et empêcher la formation d'un océan d'eau.

Pour le cas de Vénus, les nuages influencent drastiquement l'évolution de la planète. Sans nuages, la proximité de Vénus au Soleil ne permet pas la solidification de sa surface à l'ERCS où la température de surface est environ égale à 1620 K, et ainsi supérieure à la température du solidus (en prenant  $[H_2O]_{t_0} = 1 M_{EO}$  et  $[CO_2]_{t_0} = 90$  bar). L'ERCS est atteint en moins d'un million d'années. L'évolution postérieure de Vénus et la solidification éventuelle de sa surface seraient alors contrôlées par l'échappement atmosphérique : HAMANO, ABE et GENDA (2013) ont montré que l'échappement d'hydrogène dessècherait progressivement la planète, réduisant ainsi le contenu en eau, l'effet de serre, et la température. La vitesse de cette diminution de température serait contrôlée par le taux d'échappement, et environ 100 Ma seraient nécessaires pour que la surface se solidifie.

A l'inverse, si l'on considère le développement des nuages au cours du refroidissement, la formation primitive d'un océan d'eau est possible sur Vénus. Pour  $[H_2O]_{t_0} =$  $1 M_{EO}$  et  $[CO_2]_{t_0} = 90$  bar, la température de surface à l'ERCS  $T_{surf} \approx 393$  K, et la présence d'un océan d'eau d'environ 1850 mètres de profondeur constitueraient des conditions propices au développement de certains organismes extrémophiles vivants actuellement sur Terre (KASHEFI et LOVLEY, 2003; TAKAI et al., 2008), et ainsi des conditions potentiellement favorables à l'émergence de la vie. De plus, ce scénario est compatible avec le rapport D/H de l'atmosphère vénusienne qui suggère que Vénus était bien plus enrichie en eau dans le passé (DONAHUE et al., 1982). Cela indique également que les conditions actuelles à la surface de Vénus pourraient ne pas être héritées de la phase océan de magma, mais résulteraient plutôt de l'évolution postérieure de la planète.

Si la surface de Vénus était à l'époque surmontée d'un océan, une perte d'eau importante est nécessaire pour expliquer l'atmosphère sèche actuelle. L'eau pourrait avoir été perdue directement dans l'espace à la suite d'impacts météoritiques (e.g., SCHLICHTING et MUKHOPADHYAY, 2018). Comme mentionné précédemment, la perte d'eau aurait pu également être contrôlée par l'échappement de l'hydrogène. En revanche, ce mécanisme nécessite d'abord la vaporisation de l'océan puis la photodissociation des molécules d'eau dans la haute atmosphère (e.g., HOYLE, 1955; INGERSOLL, 1969; WATSON, DONAHUE et WALKER, 1981), où l'hydrogène pourrait s'échapper vers l'espace (KASTING, 1988). Cela laisserait une quantité considérable d'oxygène résiduel dans l'atmosphère, oxygène aujourd'hui absent. Il a donc été proposé que l'oxygène restant pourrait réagir avec des espèces réduites de l'atmosphère (DAYHOFF et al., 1967), et des minéraux réduits (WALKER, 1975) à la surface (e.g., KASTING et POLLACK, 1983; LAMMER et al., 2008; LUGER et BARNES, 2015). Un processus d'hydratation crustale combiné à l'échappement d'hydrogène a également été proposé par LÉCUYER, SIMON et GUYOT (2000). Quant à la vaporisation de l'océan, elle pourrait être effective si le flux stellaire absorbé venait à dépasser la valeur critique, et ainsi engendrer un effet de serre divergent (SIMPSON, 1927; KOMABAYASI, 1967; INGERSOLL, 1969; KASTING, POLLACK et ACKERMAN, 1984; KASTING, 1988; NAKAJIMA, HAYASHI et ABE, 1992). Différents processus peuvent aboutir à ce résultat, ou simplement contribuer à l'augmentation de température : la libération de chaleur à la suite d'impacts géants (e.g., SAFRONOV, 1978; TONKS et MELOSH, 1993), l'apport extra-planétaire de gaz à effet de serre (e.g., MORBIDELLI et al., 2012), l'augmentation à long terme de la température du Soleil (e.g., GOUGH, 1981; BAHCALL, PINSONNEAULT et BASU, 2001), ou encore le dégazage volcanique (e.g., GILLMANN et TACKLEY, 2014). Un dégazage modéré dans un régime de couvercle stagnant pourrait aboutir à la dissipation des nuages en 30 Ma (BULLOCK et GRINSPOON, 2001), provoquant ainsi une augmentation de la température à travers la diminution d'albédo. Par ailleurs, l'absence de champ magnétique (e.g., BRAIN et al., 2016), combinée avec une forte exposition aux rayons extrême-UV émis par le Soleil jeune (e.g., LAMMER et al., 2003; GILLMANN, CHASSEFIÈRE et LOGNONNÉ, 2009), augmenterait l'efficacité de l'échappement atmosphérique.

Par ailleurs, YANG et al. (2014) ont montré que la bordure interne de la zone habitable est décalée vers l'étoile pour les planètes à rotation lente comme Vénus<sup>24</sup>. Cela implique que Vénus aurait pu conserver son eau et être encore habitable actuellement. Vénus n'étant pas habitable, cette étude suggère que sa période de rotation était plus importante dans le passé, où elle aurait perdu son eau à cause d'un effet de serre divergent.

Finalement, l'eau aurait également pu être réinjectée dans le manteau solide par la subduction, facilitée par la présence d'eau (REGENAUER-LIEB, YUEN et BRANLUND, 2001). En dépit du peu de contraintes disponibles concernant l'intérieur de Vénus (e.g., DUMOULIN et al., 2017), ce mécanisme a été proposé comme alternative au scénario d'échappement atmosphérique (ALBARÈDE et BLICHERT-TOFT, 2007; ALBARÈDE, 2009).

En conclusion, alors que la Terre primitive, en l'absence de nuages et grâce à l'effet de serre du  $CO_2$ , aurait été surmontée d'un océan d'eau à des températures supérieures à l'actuel, conformément à la description classique de la Terre à l'Archéen, un océan d'eau aurait vraisemblablement pu se former à la surface de Vénus si la couverture nuageuse était suffisamment épaisse et réfléchissante. La Terre et Vénus auraient ainsi pu ne pas être si différentes à la fin du refroidissement de l'océan magmatique. Les conditions primitives prédites ici peuvent être utilisées comme conditions initiales afin de simuler l'évolution ultérieure de ces planètes, et potentiellement comprendre l'origine de leur divergence.

 $<sup>^{24}</sup>$ La période de rotation de Vénus, correspondant au temps nécessaire pour que la planète fasse un tour sur elle-même, est de 243 jours terrestres. C'est la seule planète du système solaire dont la période de rotation est supérieure à la période de révolution autour du Soleil (environ 224 jours) : la durée d'une journée est donc supérieure à la longueur d'une année vénusienne.

# A.5 Evolution primitive et habitabilité des exoplanètes

### A.5.1 Contexte

En ce jour d'août 2018, et depuis la première détection d'une exoplanète en orbite autour d'une étoile de la séquence principale<sup>25</sup> (MAYOR et QUELOZ, 1995), 3778 planètes en dehors de notre système solaire ont été découvertes et confirmées<sup>26</sup>. 2737 candidats supplémentaires restent à confirmer. Parmi ces corps extrasolaires, des planètes rocheuses, où les conditions seraient potentiellement favorables au maintien de l'eau liquide en surface (e.g., BORUCKI et al., 2013; ANGLADA-ESCUDÉ et al., 2013; TORRES et al., 2015; ANGLADA-ESCUDÉ et al., 2016; GILLON et al., 2017), suscitent un intérêt particulier et un effort de caractérisation important, afin de cibler de futures observations pour la recherche de vie extraterrestre.

La troisième loi de Kepler, dite loi des périodes, énonce que le carré de la période orbitale d'une planète, notée  $P_{orbite}$ , est directement proportionnel au cube du demigrand axe a de la trajectoire elliptique de la planète :

$$\left(\frac{2\pi}{P_{orbite}}\right)^2 \times a^3 = G(M_{\odot} + M_p),$$

où G est la constante universelle de gravitation,  $M_{\odot}$  est la masse du Soleil, et  $M_p$  la masse de la planète. En d'autres termes, plus une planète est éloignée de l'étoile, et plus sa période orbitale est grande. Dès lors, la détection de planètes à courte période est favorisée par les deux techniques dominantes (méthode des transits et mesures des vitesses radiales) pour la simple raison qu'un temps d'observation considérable est requis pour observer plusieurs transits d'une planète qui met plusieurs mois ou plusieurs années pour faire le tour de son étoile. Par ailleurs, il est plus facile de détecter des planètes massives autour d'étoiles de faible masse pour plusieurs raisons :

- les étoiles légères sont plus sensibles à l'attraction gravitationnelle d'une planète de masse importante;
- la rotation généralement plus lente des étoiles de faible masse facilite l'analyse spectrale;
- les planètes plus larges occultent une fraction plus importante d'une petite étoile lors d'une éclipse.

Ces biais observationnels rendent les planètes de masse importante (qualifiées de super-Terres) et situées proches de leur étoile plus facilement détectables. Ainsi, la majeure partie des exoplanètes découvertes sont de masse supérieure à celle de la Terre ou Vénus et sont situées plus proches de leur étoile que ces dernières (Figure A.36). Il advient que ces planètes plus proches de leur étoile, pour être habitables, doivent être en orbite autour d'étoile plus froides (Figure A.37).

Afin de mieux caractériser l'habitabilité des exoplanètes actuellement découvertes, nous avons étendu notre approche à des paramètres stellaires en accord avec les données observationnelles. Nous avons donc simulé l'évolution thermique de l'océan de magma en interaction avec l'atmosphère pour des planètes en orbite autour d'étoiles froides, de type G, K, et M.

<sup>&</sup>lt;sup>25</sup>51 Pegasi b a été découverte en 1995 sur le télescope de 193 cm à l'observatoire de Haute-Provence.
<sup>26</sup>Source : NASA Exoplanet Archive. Entre le mois d'août 2018, date de rédaction de ce document, et sa version finale envoyée après le mois de novembre, près de 150 planètes ont été confirmées.



FIGURE A.36 – Masse et distance orbitale estimées des exoplanètes découvertes avant le mois d'octobre 2014, d'après L'Encyclopédie des Planètes Extrasolaires (SCHNEIDER, J. et al., 2011). La majeure partie des planètes rocheuses découvertes jusqu'alors sont en orbite rapprochée autour de leur étoile. Figure adaptée d'après WINN et FABRYCKY (2015).



FIGURE A.37 – Localisation et extension de la zone habitable (vert) autour d'étoiles plus ou moins chaudes. Au-delà de la zone habitable (bleu), la température est trop froide pour permettre le maintien de l'eau liquide à la surface de la planète, alors que l'eau ne peut pas condenser en surface si la planète est située trop proche de l'étoile (rouge). Plus la température de l'étoile est froide, plus la zone habitable est rapprochée de l'étoile.

#### A.5.2 Méthode

Afin de simuler différentes étoiles, il faut inclure dans le calcul du flux stellaire incident les paramètres correspondants à l'étoile voulue. Le flux stellaire reçu par une planète au sommet de l'atmosphère  $F_{\downarrow}$  s'écrit :

$$F_{\downarrow} = \left(\frac{\mathcal{R}_{\odot}}{D_{\odot}}\right)^2 \sigma_{\rm SB} \mathcal{T}_{\rm eff_{\odot}}^4,\tag{A.19}$$

où  $D_{\odot}$  est la distance séparant la planète et l'étoile, de rayon  $\mathcal{R}_{\odot}$ , et de température effective  $\mathcal{T}_{\text{eff}\odot}$ .  $\sigma_{\text{SB}}$  est la constante de Stefan-Boltzmann. A la distance Terre-Soleil, si l'on considère le Soleil actuel,  $F_{\downarrow} = 1360.8 \text{ W.m}^{-2}$ , et correspond à la constante solaire, ou irradiation solaire totale notée  $\mathcal{S}_{\odot}$  (KOPP et LEAN, 2011; MAMAJEK et al., 2015). Nous faisons l'hypothèse que les étoiles rayonnent à la manière d'un corps noir<sup>27</sup> de température effective  $\mathcal{T}_{\text{eff}\odot}$ . Pour étudier l'influence de l'étoile sur l'évolution thermique et les conditions de surface résultantes, nous varions  $\mathcal{T}_{\text{eff}\odot}$  et  $\mathcal{R}_{\odot}$  pour simuler différents types d'étoiles en utilisant les valeurs issues de la base de données exoplanets.org (HAN et al., 2014). Nous considérons des étoiles de type G, K, et M, dont la température varie respectivement de  $\mathcal{T}_{\text{eff}\odot} \approx 5630 \text{ K}$  pour le Soleil jeune (BAHCALL, PINSONNEAULT et BASU, 2001), à  $\mathcal{T}_{\text{eff}\odot} \approx 2550 \text{ K}$  pour Trappist-1. La distance orbitale  $D_{\odot}$  est variée relativement à la température de l'étoile afin que

 $<sup>^{27}</sup>$ Un corps noir est un objet théorique qui absorbe et réémet parfaitement tout rayonnement incident. Si le rayonnement incident est dans le domaine visible, alors la lumière sera absorbée plutôt que réfléchie, résultant en un « corps noir ».



FIGURE A.38 – Réflectance spectrale d'une planète analogue à la Terre pour une température de surface de 500 K (tireté noir), et émission énergétique d'un corps noir à la température du Soleil jeune ( $\mathcal{T}_{eff\odot} =$ 5622 K, bleu), et de Trappist-1 ( $\mathcal{T}_{eff\odot} = 2559$  K, rouge), normalisée par la radiance au pic d'émission de l'étoile (traits tiretés verticaux). L'énergie émise est fonction de la température du corps : les étoiles froides émettent un rayonnement moins énergétique, responsable d'une émission décallée vers des longeurs d'onde moins énergétiques. Le pic d'émission de l'étoile froide Trappist-1 correspond ainsi à des longeurs d'onde plus importantes, dans le proche infrarouge, où la réflectance de l'atmosphère est bien plus faible que dans le visible, où le Soleil jeune émet le maximum d'énergie.

l'irradiation stellaire reste comprise entre  $1.7S_{\odot}$  et  $0.5S_{\odot}$ , correspondant à une gamme de distance allant de 0.63 à 1.1 UA pour des planètes en orbite autour du Soleil jeune.

La loi de Planck décrit la distribution de luminance énergétique spectrale du rayonnement thermique émis par un corps noir. Plus un corps est chaud, plus le rayonnement qu'il émet est énergétique, et donc émis à de faibles longueurs d'onde  $\lambda$ . La Figure A.38 décrit la radiance spectrale normalisée par le maximum d'émission pour des corps noirs de température  $\mathcal{T}_{\text{eff}\odot} = 5622$  K et  $\mathcal{T}_{\text{eff}\odot} = 2559$  K, correspondant au Soleil jeune et à Trappist-1, respectivement. Le Soleil rayonne la majeure partie de son énergie dans le domaine visible, alors que la majorité du rayonnement de Trappist-1 est émis dans le domaine infrarouge du spectre électromagnétique (selon la loi de déplacement de Wien, qui relie le maximum d'émission à la température du corps noir). Même si la valeur du flux stellaire incident  $F_{\downarrow}$  est la même pour les deux étoiles, le déplacement de la distribution spectrale est pris en compte dans notre modèle atmosphérique.

Comme dans les chapitres précédents, nous simulons ici des planètes de type terrestre, ayant la même masse, densité, gravité, et le même rayon que la Terre, en utilisant les courbes de solidus et liquidus correspondant à un manteau chondritique (ANDRAULT et al., 2011), supposé initialement entièrement fondu (l'océan magmatique a une profondeur initiale de 2885 km) à la suite d'un impact géant (HOSTETLER et DRAKE, 1980; TONKS et MELOSH, 1993), qui aurait érodé toute atmosphère antérieure.

Nous considérons des atmosphères de  $H_2O-CO_2-N_2$ , avec des proportions variables de  $H_2O$  et  $CO_2$  initialement dissous dans l'océan magmatique, et représentées par le paramètre sans dimension  $x^*$ :

$$x^* = \frac{X_{0 \,\mathrm{CO}_2}}{X_{0 \,\mathrm{H}_2\mathrm{O}} + X_{0 \,\mathrm{CO}_2}},\tag{A.20}$$

varié de  $x^* = 0$  pour les atmosphères dont la composition est dominée par l'eau, généralement considérées dans les études de la bordure interne de la zone habitable, à  $x^* = 1$  pour les atmosphères dominées par le CO<sub>2</sub>. La concentration en N<sub>2</sub> est fixée à 5 bar (similaire à LEBRUN et al., 2013).

## A.5.3 Influence de l'étoile sur l'évolution thermique de l'océan magmatique

La Figure A.39 compare l'évolution thermique d'une planète océan de magma en orbite autour du Soleil jeune ( $\mathcal{T}_{eff.}$  = 5622 K), comme dans le Chapitre A.4, à celle d'une planète en orbite autour de Trappist-1 ( $\mathcal{T}_{eff\odot} = 2559$  K), à des distances différentes afin que le flux stellaire incident soit le même dans les deux cas  $(F_{\downarrow} \approx 0.7 \mathcal{S}_{\odot})$ . Au début de l'évolution, le flux convectif provenant de l'océan magmatique  $F_{conv}$  gouverne le refroidissement de la planète  $(F_{IR} \approx F_{conv})$  : le type d'étoile n'a pas d'incidence sur les premiers stades de l'évolution thermique, et la température de surface reste la même dans les deux cas (Figures A.39a et A.39c). A l'approche de l'ERCS, lorsque le flux convectif devient comparable au flux absorbé  $F_{abs}$ , la température de surface, jusqu'alors dictée par l'équilibre des flux  $F_{conv}$  et  $F_{IR}$ , devient contrôlée par l'équilibre des flux  $F_{abs}$  et  $F_{IR}$ , et devient plus importante autour de l'étoile froide, mais pas suffisamment pour empêcher la formation d'un océan à l'ERCS :  $T_{surf} \approx 510$  K pour Trappist-1 contre  $T_{surf} \approx 460$  K pour le Soleil jeune. Cela vient du fait que l'albédo calculé à l'ERCS est bien plus faible autour d'une étoile froide :  $\alpha \approx 0.025$  comparé à  $\alpha \approx 0.35$  pour le Soleil jeune (Figure A.39b). Ainsi, pour une étoile froide, davantage de lumière stellaire est absorbée et la température de surface est plus importante (Figure A.39). En conséquence, l'ERCS est légèrement retardé et la température de surface associée est supérieure dans le cas d'une planète en orbite autour d'une naine ultra-froide comme Trappist-1.

Cette différence s'explique par le décalage de la distribution énergétique spectrale entre les deux étoiles. Le pic d'émission lumineuse  $\lambda_{\text{max}}$  de Trappist-1 est situé à des longueurs d'onde plus grandes (moins énergétiques) que le maximum d'émission du Soleil jeune :  $\lambda_{\text{max}} \approx \frac{3000}{T_{\odot}}$ . Le rayonnement émis par Trappist-1 est donc « plus rouge » que celui du Soleil (Figure A.38). La réflectance spectrale des atmosphères simulées est plus importante à des longueurs d'onde plus courtes, dans le visible, là où est situé le maximum d'émission du Soleil jeune, et quasiment inexistante dans l'infrarouge, au pic d'émission de Trappist-1 (ligne noire tiretée de la Figure A.38). Il en va de même pour l'albédo, qui est très faible pour les planètes en orbite autour d'étoiles froides (Figures A.39b et A.38). De plus, les étoiles froides émettent davantage de rayonnement infrarouge qui est absorbé par H<sub>2</sub>O et CO<sub>2</sub>, ce qui augmente la température de surface. Les conditions de surface atteintes à l'ERCS, qui vont ensuite déterminer l'évolution postérieure de la planète, sont donc fortement sensibles au type



FIGURE A.39 – (a) Températures, (b) albédo, et (c) flux de chaleur au cours du refroidissement d'une planète océan de magma entourée d'une atmosphère sans nuages, en orbite autour du Soleil jeune ( $\mathcal{T}_{eff\odot} = 5622 \text{ K}$ , bleu) et de Trappist-1 ( $\mathcal{T}_{eff\odot} = 2559 \text{ K}$ , rouge). L'ERCS est indiqué par les lignes pointillées verticales.

d'étoile. Les conséquences sur la localisation de la bordure interne de la zone habitable sont discutées dans la section suivante.

## A.5.4 Bordure interne de la zone tempérée autour d'étoiles de différents types spectral

Le décalage spectral entre des étoiles de température différente discuté précédemment induit des températures de surface à l'ERCS plus importantes autour d'étoiles froides. Ainsi, des conditions de surface tempérées ne peuvent être atteintes que pour des flux stellaires inférieurs lorsque la température de l'étoile est plus faible (i.e., plus loin de l'étoile en terme de distances relatives au flux incident). La courbe verte de la Figure A.40, correspondant à la limite de condensation, illustre cette tendance, qui a d'ailleurs été mise en évidence précédemment par les études de la zone habitable, dont certaines limites sont également représentées (e.g., KASTING, WHITMIRE et REYNOLDS, 1993; SELSIS et al., 2007; KOPPARAPU et al., 2013). En revanche, les estimations classiques de la bordure interne de la zone habitable repose sur la limite de l'éffet de serre divergent, phénomène caractéristique des atmosphères dominées par l'eau. Dans les chapitres précédents, nous avons discuté l'implication non négligeable du  $CO_2$  dans la formation des océans d'eau primitifs à l'ERCS autour du Soleil jeune. Nous étendons cette discussion aux étoiles froides dans la section suivante.

Il est important de remarquer que la position exacte de la bordure interne de la zone d'habitabilité diffère entre les différentes études présentées dans la Figure A.40. Ceci peut être expliqué par des différences de traitement du transfert radiatif de la vapeur d'eau entre les modèles, pouvant induire jusqu'à 10% $S_{\odot}$  d'incertitude pour l'estimation de l'insolation critique (voir YANG et al., 2016, pour une comparaison détaillée entre les différents modèles). La limite obtenue par YANG et al. (2014) pour des planètes à rotation lente considère une rétroaction négative qui stabilise le climat et peut être comparée à nos résultats obtenus avec nuages (Chapitre A.4). Mis à part ces cas particuliers, les autres limites d'habitabilité de la Figure A.40, y compris celle calculée ici, sont incluses dans la gamme d'incertitudes estimée par YANG et al. (2016) pour les modèles de transfert radiatif sans nuages. Par ailleurs, il est bon de remarquer que la zone habitable des études précédentes est associée à des climats stables, où  $S_{eff} = \frac{F_{IR}}{F_{abs} + F_{conv}} = \frac{F_{IR}}{F_{abs} + 0.1F_{abs}} = \frac{F_{IR}}{F_{abs}} = 1.1$ . Enfin, lorsque les nuages sont inclus dans les simulations, on constate que leur

Enfin, lorsque les nuages sont inclus dans les simulations, on constate que leur effet est fortement atténué autour d'étoiles froides qui émettent moins de rayonnement visible, rendant l'effet refroidissant des nuages bien moins important (e.g., YANG et al., 2014, et Figure A.40).

## A.5.5 Bordure interne de la zone tempérée : influence du contenu initial en volatils

Tel que discuté dans les chapitres précédents, au-delà du bord intérieur de la zone tempérée, la formation d'un océan d'eau primitif est fortement influencée par le contenu initial en volatils. Ainsi, pour les atmosphères dominées par le  $CO_2$  ( $x^* > 0.5$ ), la distance critique s'éloigne de l'étoile à cause d'un effet de serre plus important. La Figure A.41 illustre cette tendance qui est également valable pour les étoiles froides simulées ici. Cela permet l'ajout d'une troisième dimension à l'espace des paramètres à considérer pour la formation d'un océan d'eau primitif. En règle générale, pour les étoiles froides, l'espace des paramètres permettant la formation d'un océan est réduit, ce qui diminue la probabilité qu'une planète en orbite autour d'une étoile froide soit



FIGURE A.40 – Planètes pour lesquelles la formation d'un océan d'eau a lieu à l'ERCS (marqueurs bleus), et planètes où elle n'a pas lieu (marqueurs rouges). Les simulations instables au niveau de la limite sont indiquées en cyan. Les calculs avec et sans nuages sont respectivement représentés par des cercles vides et des points. Les courbes vertes sont les bordures internes des zones habitables correspondantes, au-delà desquelles un océan d'eau est formé à l'ERCS pour les atmosphères riches en H<sub>2</sub>O. Les bordures internes obtenues par KOPPARAPU et al. (2013), LECONTE et al. (2013) et YANG et al. (2014, rotation lente et rapide) sont montrées à titre de comparaison. Les croix noires indiquent la position de planètes existantes. Les paramètres stellaires utilisés pour les différentes étoiles ont été tirés de la base de données exoplanets.org (HAN et al., 2014).



FIGURE A.41 – Formation d'un océan d'eau à l'ERCS en fonction du flux stellaire  $F_{\downarrow}$ , de la température de l'étoile  $\mathcal{T}_{\text{eff}\odot}$ , et du contenu initial en volatils  $x^*$  pour des planètes sans nuages. La ligne verte indique la bordure interne de la zone tempérée, pour des planètes sans nuages, à l'ERCS, pour des atmosphères riches en H<sub>2</sub>O (également représentée sur la Figure A.40). Les points bleus distinguent les planètes où un océan d'eau est formé à l'ERCS, des planètes sans océan (points rouges). Pour les atmosphères dont la composition est dominée par le CO<sub>2</sub> ( $x^* > 0.5$ ), la distance critique s'éloigne de l'étoile. Les limites de condensation correspondantes sont indiquées pour le cas du Soleil jeune (ligne bleue), de Proxima Centauri (ligne magenta), et de Trappist-1 (ligne rouge).

habitable par rapport à une planète en orbite autour d'une étoile chaude. Finalement, plus l'étoile est froide et plus l'influence du contenu initial en volatils est importante, réduisant la probabilité de trouver une planète habitable autour de ces étoiles pour des valeurs de  $x^*$  importantes. Ce diagramme permet donc de contraindre l'habitabilité d'une planète donnée dans un système stellaire donné, et peut ainsi être utilisé afin de sélectionner des exoplanètes potentiellement habitables, à modéliser de façon plus précise et à observer davantage dans le futur. Inversement, à partir de contraintes observationnelles, l'utilisation de ces paramètres adimensionnés pourrait aider à déterminer la présence d'un océan d'eau à la surface de planètes extrasolaires.

## A.6 Conclusion générale et perspectives

Depuis la détection de la première planète extrasolaire en 1995, le nombre d'exoplanètes découvertes ne cesse d'augmenter et suscite des questionnements relatifs à l'existence d'une forme de vie extraterrestre dans l'Univers. Des conditions climatiques favorables, permettant la présence d'eau liquide à la surface d'une planète rocheuse, seraient la première étape vers une habitabilité potentielle. La mise en place de conditions de surface tempérées est intimement liée à l'évolution thermique des premiers âges des planètes telluriques. A la fin de l'accrétion, l'existence d'une étape commune dans l'évolution planétaire, la phase océan de magma, et son étude, constitue un enjeu majeur pour (i) comprendre la diversité actuelle des conditions de surface parmi les planètes rocheuses du système solaire, et (ii) caractériser l'habitabilité des mondes extrasolaires. En effet, les processus physiques à l'œuvre lors du refroidissement et de la solidification de l'océan magmatique mettent en place les conditions qui vont déterminer l'évolution future de la planète. Parmi ces processus, la phase océan de magma est le siège du dégazage de l'atmosphère, de la différenciation chimique primordiale de l'intérieur planétaire, ou encore de la formation d'une croûte solide primitive. L'issue de cette étape constitue le point de départ potentiel pour le démarrage de la convection thermique du manteau et de la tectonique des plaques. La compréhension de ce système complexe passe nécessairement par la prise en compte des interactions entre les différents réservoirs de la planète.

A l'aide d'un modèle numérique unidimensionnel couplant l'océan magmatique et l'atmosphère, rendant compte à la fois des transferts de chaleur et de volatils entre les deux réservoirs, je me suis attaché à étudier l'évolution thermique de ce système couplé, et la formation des océans d'eau primitifs à la fin du refroidissement. Deux phases évolutives distinctes ont pu être mises en évidence au cours du refroidissement de l'océan magmatique. La première est caractérisée par un refroidissement intense et rapide, en raison de la convection vigoureuse de l'océan de magma. La majeure partie de l'atmosphère y est alors formée par dégazage. Le flux de chaleur convectif issu de l'océan magmatique est bien supérieur à la quantité d'énergie provenant de l'étoile, de sorte que le taux de refroidissement est contrôlé principalement par la convection de l'OM. Cependant, la quantité de gaz à effet de serre expulsés dans l'atmosphère constitue un bouclier thermique empêchant à la chaleur de s'échapper directement vers l'espace. Combiné avec la distance à l'étoile, ce paramètre va prendre le contrôle des conditions de surface dès lors que le flux interne devient négligeable devant la quantité d'énergie solaire absorbée. A partir de ce moment, le refroidissement rapide prend fin et un océan d'eau primitif est potentiellement formé à la surface de la planète. La fin de la phase de refroidissement rapide (ERCS pour End of Rapid Cooling Stage) est utilisée comme temps de référence pour comparer l'état thermodynamique des planètes.

En plus de sa distance orbitale, nous avons montré que le contenu initial relatif de  $H_2O$  et  $CO_2$  de la planète est un paramètre crucial concernant les conditions de surface atteintes à la fin du refroidissement rapide. En fonction de ces deux paramètres, trois types de planètes émergent à l'ERCS : (1) des planètes où la surface solide est surmontée d'un océan d'eau; (2) des planètes où la surface est fondue et où un océan d'eau n'est pas formé; (3) des planètes où la surface est solide mais n'est pas surmontée d'un océan d'eau. La Terre serait alors une planète de type (1) alors que Vénus pourrait être une planète de type (1), (2), ou (3) en fonction de son contenu initial en volatils et de l'évolution de sa couverture nuageuse (Chapitre A.3). A partir des résultats présentés, nous proposons des lois d'échelle pour prédire la formation d'un

océan d'eau à l'ERCS sur une planète rocheuse du système solaire, en fonction du contenu initial en volatils et de la distance orbitale.

Les propriétés de l'atmosphère influencent fortement l'albédo de la planète, et par conséquent, la quantité d'énergie lumineuse stellaire atteignant la surface de la planète. Le pouvoir isolant de l'atmosphère s'en retrouve également altéré, et c'est finalement le taux de refroidissement de la planète, contrôlant lui-même le dégazage de l'atmosphère, qui est affecté. Le budget radiatif dépend également de la présence de nuages, dont l'effet réchauffant est en compétition avec leur pouvoir réflechissant. Les nuages et le calcul d'albédo ont tous deux été implémentés dans le modèle couplé, permettant de considérer les rétroactions entre l'albédo, la composition atmosphérique, la température de surface, et les nuages au cours de la solidification de l'océan magmatique (Chapitre A.4).

Si une épaisse couche nuageuse se développe, l'effet refroidissant lié à l'augmentation d'albédo l'emporte sur le réchauffement induit par l'opacité thermique des nuages. Par conséquent, un océan d'eau peut être formé bien plus proche de l'étoile, y compris à la distance de Vénus qui pourrait alors arborer des conditions de surface tempérées, et être une planète de type (1). Si l'on suppose un contenu initial correspondant à la contentration actuelle de CO<sub>2</sub> dans l'atmosphère de Vénus, un océan d'eau peut se former à la surface de Vénus primitive dès lors que la teneur initiale en eau est supérieure à 0.09 océans d'eau terrestres. Un tel contenu initial est bien inférieur aux estimations actuelles d'apport de volatils sur les planètes rocheuses au moment de leur formation, et donc parfaitement plausible. Si l'on considère qu'un océan d'eau terrestre a été accrété lors de la formation de Vénus, la température de surface d'environ 400 K à l'ERCS, et la présence d'un océan d'environ  $\sim$ 2000 mètres de profondeur constitueraient des conditions de surface propices au développement de certains organismes extrémophiles terrestres, et plus généralement propices à l'émergence de la vie sur Vénus. De plus, la présence d'eau liquide à la surface d'une planète est susceptible d'avoir des implications majeures concernant le régime géodynamique et l'évolution à long terme de la planète, étant donné que la température de surface contrôle le comportement mécanique de la lithosphère. Cette étude suggère que les conditions actuelles à la surface de Vénus ne sont pas héritées du refroidissement de l'océan magmatique, mais d'autres processus prenant place lors de l'évolution ultérieure de la planète.

Pour une planète sans nuages située à 1 UA, on retrouve le cas classique d'une Terre primitive chaude dont la surface solide est surmontée d'un océan d'eau. En fonction de la couverture nuageuse, la Terre et Vénus pourraient ainsi ne pas être si différentes à la fin du refroidissement de l'OM contrairement à ce qui était précédemment admis. Les conditions primitives calculées avec notre modèle peuvent être utilisées en tant que conditions initiales pour simuler l'évolution à long terme du manteau et/ou de l'atmosphère, et ainsi chercher à expliquer la divergence entre ces deux planètes.

Les biais observationnels des techniques de détection actuelles favorisent la détection d'exoplanètes plus massives que la Terre, communément désignées sous le nom de super-Terres, en orbite autour d'étoiles plus froides et petites que notre Soleil. Les études précédentes de la zone habitable ont démontré l'influence du type d'étoile sur le maintien d'un océan d'eau liquide à la surface d'une planète. Néanmoins, ces modèles (i) prescrivent les conditions de surface, et (ii) considèrent généralement des atmosphères de composition dominée par l'eau. Etant donné que (i) notre modèle couplé permet de calculer les conditions à l'issue de l'évolution thermique, et (ii) que nous avions montré la dépendance de la formation d'un océan d'eau au contenu en  $CO_2$ , nous avons alors étudié l'évolution thermique et la formation d'un océan d'eau sur des planètes rocheuses en orbite autour d'étoiles de type G, K, et M (Chapitre A.5).

Par rapport au Soleil, les étoiles froides rayonnent peu dans le visible mais davantage dans le domaine thermique. Ce décalage spectral de l'émission des étoiles froides vers les grandes longueurs d'onde a pour conséquences la diminution de l'albédo de Bond des planètes en orbite autour de ces étoiles, ce qui augmente la quantité de rayonnement absorbé, mais aussi une augmentation du flux infrarouge émis par l'étoile et donc reçu par la planète. En définitive, la température de surface est plus importante pour une même valeur de flux incident autour des étoiles froides, et le bord interne de la zone habitable est plus éloigné de l'étoile. De plus, à cause des températures plus importantes, une quantité plus faible de  $CO_2$  est suffisante pour empêcher la formation d'un océan d'eau primitif. Par ailleurs, l'effet refroidissant des nuages est atténué autour d'étoiles froides. En règle générale, il est moins probable qu'une planète rocheuse en orbite autour d'une étoile froide soit habitable.

A partir de modèles climatiques, il a été montré que la masse de la planète, du fait de son effet sur l'extension verticale de l'atmosphère, influence la localisation du bord interne de la zone habitable. En revanche, changer la masse d'une planète rocheuse n'est pas sans conséquences sur sa structure interne, ou sur la quantité de volatils qu'elle peut accréter et leur distribution entre les différents réservoirs. Ces paramètres ne peuvent être pris en compte directement dans des modèles atmosphériques mais pourraient influencer l'évolution thermique et l'habitabilité desdites planètes. Nous prévoyons donc d'étendre l'approche proposée ici à des planètes de masse plus importante, afin de contraindre l'habitabilité des super-Terres, qui constituent la majeure partie des planètes rocheuses actuellement détectées. Cela permettrait par la suite de caractériser l'habitabilité de planètes déjà découvertes en considérant à la fois l'influence de la masse planétaire, et l'influence des paramètres stellaires.

La transition d'un océan de magma liquide vers un manteau solide convectif reste à l'heure actuelle mal comprise. Le démarrage de la tectonique des plaques, probablement associé à cette transition, fait l'objet de nombreuses recherches aujourd'hui. La formation d'une lithosphère solide, épaisse et visqueuse, a souvent été proposée comme étant le mécanisme à l'origine de la convection sous un couvercle stagnant. Dans un tel régime, le manteau est isolé thermiquement et le flux de chaleur qui s'en dégage est drastiquement réduit. En revanche, la présence d'un couvercle stagnant est difficile à réconcilier avec la tectonique des plaques, qui nécessiterait la fracturation puis la subduction de la lithosphère.

La simulation numérique du refroidissement convectif de l'océan de magma en interaction avec l'atmosphère indique qu'une lithosphère épaisse (> 1 km) ne se formerait qu'à la toute fin de la phase océan de magma, et rapidement, si la planète est suffisamment loin de l'étoile, et en fonction du contenu en volatils. Cependant, à cause de son refroidissement rapide, la lithosphère formée pourrait subir des contraintes importantes dues à la contraction thermique. Si les contraintes accumulées dépassent la contrainte seuil, la lithosphère pourrait se fracturer et subducter.

De nouvelles expériences de laboratoire, utilisant des solutions colloïdales viscoelasto-plastiques, illustrent ce phénomène. Nous avons mis en place un système d'acquisition permettant d'évaluer la déformation de surface au cours des expériences, et ainsi mesurer les contraintes subies par la surface du fluide, dont la rhéologie dépend du contenu en eau. Des lois d'échelles dérivées des expériences devraient permettre de mettre en évidence les conditions favorisant la transition vers un régime dominé par la subduction. Ces conditions pourraient alors être mises en lien avec le refroidissement de l'océan magmatique, afin de déterminer les paramètres les plus favorables au démarrage de la tectonique des plaques.

# Bibliography

- Abe, Yutaka (1993a). "Physical state of the very early Earth". In: *Lithos* 30.3–4, pp. 223–235. DOI: 10.1016/0024-4937(93)90037-D (cit. on pp. 21, 26, 64, 161, 165, 185).
- (1993b). "Thermal evolution and chemical differentiation of the terrestrial magma ocean". In: Washington DC American Geophysical Union Geophysical Monograph Series 74, pp. 41–54 (cit. on pp. 21, 26, 161).
- (1995). "Basic equations for the evolution of partially molten mantle and core".
   In: *The Earth's Central Part: Its Structure and Dynamics*. Ed. by T. Yukutake.
   Terra Scientific (TERRAPUB), Tokyo, pp. 215–230 (cit. on p. 26).
- (1997). "Thermal and chemical evolution of the terrestrial magma ocean". In: *Physics of the Earth and Planetary Interiors* 100.1–4, pp. 27–39. DOI: 10.1016/ S0031-9201(96)03229-3 (cit. on pp. 21, 26, 33, 37, 39, 53, 54, 89, 161, 169, 172, 173, 183).
- Abe, Yutaka and Takafumi Matsui (1985). "The formation of an impact-generated H<sub>2</sub>O atmosphere and its implications for the early thermal history of the Earth". In: Journal of Geophysical Research: Solid Earth 90.S02, pp. 545–559. DOI: 10. 1029/JB090iS02p0C545. URL: http://dx.doi.org/10.1029/JB090iS02p0C545 (cit. on pp. 26, 27, 78, 79, 165).
- (1986). "Early evolution of the earth: Accretion, atmosphere formation, and thermal history". In: Journal of Geophysical Research 91.B13, E291–E302. DOI: 10. 1029/JB091iB13p0E291 (cit. on pp. 26, 27, 165).
- (1988). "Evolution of an Impact-Generated  $H_2O-CO_2$  Atmosphere and Formation of a Hot Proto-Ocean on Earth". In: Journal of the Atmospheric Sciences 45.21, pp. 3081–3101. DOI: 10.1175/1520-0469(1988)045<3081: EOAIGH>2.0.CO; 2 (cit. on pp. 26, 27, 80, 165).
- Abe, Yutaka et al. (2000). "Water in the Early Earth". In: Origin of the Earth and Moon. Ed. by R. M. Canup, K. Righter, and 69 collaborating authors. University of Arizona Press, Tucson, pp. 413–433 (cit. on pp. 8, 152).
- Abe, Yutaka et al. (2011). "Habitable Zone Limits for Dry Planets". In: Astrobiology 11.5, pp. 443–460. DOI: 10.1089/ast.2010.0545 (cit. on pp. 5, 52, 88, 110, 114, 144).
- Agnor, Craig B., Robin M. Canup, and Harold F. Levison (1999). "On the Character and Consequences of Large Impacts in the Late Stage of Terrestrial Planet Formation". In: *Icarus* 142.1, pp. 219–237. DOI: 10.1006/icar.1999.6201. URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0019103599962012 (cit. on pp. 14, 157).
- Ahrens, T. J. (1993). "Impact erosion of terrestrial planetary atmospheres". In: Annual Review of Earth and Planetary Sciences 21, pp. 525–55 (cit. on pp. 60, 79, 80).
- Albarède, Francis (2009). "Volatile accretion history of the terrestrial planets and dynamic implications". In: *Nature* 461.7268, pp. 1227–1233 (cit. on pp. 8, 80, 81, 110, 152, 207).

- Albarède, Francis and Janne Blichert-Toft (2007). "The split fate of the early Earth, Mars, Venus, and Moon". In: *Comptes Rendus Geoscience* 339.14, pp. 917–927. DOI: 10.1016/j.crte.2007.09.006 (cit. on pp. 110, 207).
- Alexander, C. M. O'D. et al. (2012). "The Provenances of Asteroids, and Their Contributions to the Volatile Inventories of the Terrestrial Planets". In: Science 337.6095, pp. 721–723. DOI: 10.1126/science.1223474. URL: http://science. sciencemag.org/content/337/6095/721 (cit. on pp. 14, 157).
- Allègre, Claude J. et al. (1995). "The chemical composition of the Earth". In: Earth and Planetary Science Letters 134.3, pp. 515–526. DOI: 10.1016/0012-821X(95) 00123-T (cit. on p. 41).
- ALMA partnership et al. (2015). "The 2014 ALMA Long Baseline Campaign: First Results from High Angular Resolution Observations toward the HL Tau Region". In: *The Astrophysical Journal Letters* 808.1, p. L3. DOI: 10.1088/2041-8205/808/1/L3. URL: http://stacks.iop.org/2041-8205/808/i=1/a=L3 (cit. on p. 7).
- Altwegg, K. et al. (2015). "67P/Churyumov-Gerasimenko, a Jupiter family comet with a high D/H ratio". In: *Science* 347.6220. DOI: 10.1126/science.1261952 (cit. on pp. 10, 11).
- Andrault, Denis et al. (2011). "Solidus and liquidus profiles of chondritic mantle: Implication for melting of the Earth across its history". In: *Earth and Planetary Science Letters* 304.1–2, pp. 251–259. DOI: 10.1016/j.epsl.2011.02.006 (cit. on pp. 21, 23, 25, 33, 37, 38, 48, 54, 56, 89, 119, 162, 169, 170, 172, 183, 212).
- Andrault, Denis et al. (2012). "Solid-liquid iron partitioning in Earth's deep mantle". In: Nature 487.7407, pp. 354–357. URL: http://dx.doi.org/10.1038/ nature11294 (cit. on pp. 37, 54).
- Andrault, Denis et al. (2014). "Melting of subducted basalt at the core-mantle boundary". In: *Science* 344.6186, pp. 892–895. DOI: 10.1126/science.1250466 (cit. on pp. 21, 23, 37, 54, 162).
- Andrault, Denis et al. (2016). "The deep Earth may not be cooling down". In: *Earth* and Planetary Science Letters. DOI: 10.1016/j.epsl.2016.03.020 (cit. on p. 23).
- Anglada-Escudé, Guillem et al. (2013). "A dynamically-packed planetary system around GJ 667C with three super-Earths in its habitable zone". In: Astronomy & Astrophysics 556, A126. DOI: 10.1051/0004-6361/201321331. URL: https://doi. org/10.1051/0004-6361/201321331 (cit. on pp. 113, 208).
- Anglada-Escudé, Guillem et al. (2016). "A terrestrial planet candidate in a temperate orbit around Proxima Centauri". In: *Nature* 536.7617, pp. 437–440. URL: http://dx.doi.org/10.1038/nature19106 (cit. on pp. 5, 114, 144, 208).
- Arndt, Nicholas T. and Euan G. Nisbet (2012). "Processes on the Young Earth and the Habitats of Early Life". In: Annual Review of Earth and Planetary Sciences 40.1, pp. 521–549. DOI: 10.1146/annurev-earth-042711-105316. URL: https: //doi.org/10.1146/annurev-earth-042711-105316 (cit. on pp. 2, 108, 141).
- Asaduzzaman, Abu, Krishna Muralidharan, and Jibamitra Ganguly (2015). "Incorporation of water into olivine during nebular condensation: Insights from density functional theory and thermodynamics, and implications for phyllosilicate formation and terrestrial water inventory". In: *Meteoritics & Planetary Science* 50.4, pp. 578–589. DOI: 10.1111/maps.12409. URL: https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1111/maps.12409 (cit. on p. 10).
- Badro, James, Alexander S. Côté, and John P. Brodholt (2014). "A seismologically consistent compositional model of Earth's core". In: *Proceedings of the National Academy of Sciences* 111.21, pp. 7542–7545. DOI: 10.1073/pnas.1316708111. URL: http://www.pnas.org/content/111/21/7542 (cit. on pp. 8, 152).

- Bahcall, John N., M. H. Pinsonneault, and Sarbani Basu (2001). "Solar Models: Current Epoch and Time Dependences, Neutrinos, and Helioseismological Properties".
  In: *The Astrophysical Journal* 555.2, p. 990. URL: http://stacks.iop.org/0004-637X/555/i=2/a=990 (cit. on pp. 46, 61, 91, 110, 119, 178, 206, 210).
- Baker, Victor R. (2006). "Geomorphological Evidence for Water on Mars". In: *Elements* 2.3, p. 139. DOI: 10.2113/gselements.2.3.139. URL: http://dx.doi.org/10.2113/gselements.2.3.139 (cit. on pp. 9, 154).
- Ballmer, Maxim D. et al. (2017). "Reconciling magma-ocean crystallization models with the present-day structure of the Earth's mantle". In: *Geochemistry, Geo*physics, Geosystems 18.7, pp. 2785–2806. DOI: 10.1002/2017GC006917 (cit. on pp. 24, 162).
- Balsiger, H., K. Altwegg, and J. Geiss (1995). "D/H and <sup>18</sup>O/<sup>16</sup>O ratio in the hydronium ion and in neutral water from in situ ion measurements in comet Halley". In: Journal of Geophysical Research: Space Physics 100.A4, pp. 5827–5834. DOI: 10.1029/94JA02936. URL: https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/94JA02936 (cit. on p. 10).
- Battistuzzi, Fabia U., Andreia Feijao, and S. Blair Hedges (2004). "A genomic timescale of prokaryote evolution: insights into the origin of methanogenesis, phototrophy, and the colonization of land". In: *BMC Evolutionary Biology* 4.1, p. 44. DOI: 10.1186/1471-2148-4-44. URL: https://doi.org/10.1186/1471-2148-4-44 (cit. on p. 108).
- Bell, Elizabeth A. et al. (2015). "Potentially biogenic carbon preserved in a 4.1 billionyear-old zircon". In: Proceedings of the National Academy of Sciences 112.47, pp. 14518-14521. DOI: 10.1073/pnas.1517557112. URL: http://www.pnas. org/content/112/47/14518 (cit. on p. 108).
- Benz, W., W.L. Slattery, and A.G.W. Cameron (1986). "The origin of the moon and the single-impact hypothesis I". In: *Icarus* 66.3, pp. 515–535 (cit. on pp. 14, 157).
- (1987). "The origin of the Moon and the single-impact hypothesis, II". In: *Icarus* 71.1, pp. 30 -45. DOI: 10.1016/0019-1035(87)90160-6. URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0019103587901606 (cit. on pp. 14, 157).
- Bercovici, David and Yanick Ricard (2014). "Plate tectonics, damage and inheritance". In: Nature 508, p. 513. URL: http://dx.doi.org/10.1038/nature13072 (cit. on p. 88).
- Bibring, Jean-Pierre et al. (2006). "Global Mineralogical and Aqueous Mars History Derived from OMEGA/Mars Express Data". In: Science 312.5772, pp. 400-404. DOI: 10.1126/science.1122659. URL: http://science.sciencemag.org/ content/312/5772/400 (cit. on pp. 4, 9, 144, 154).
- Birch, Francis (1965). "Energetics of core formation". In: Journal of Geophysical Research 70.24, pp. 6217-6221. DOI: 10.1029/JZ070i024p06217. URL: https:// agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/JZ070i024p06217 (cit. on pp. 19, 160).
- Bockelée-Morvan, D. et al. (1998). "Deuterated Water in Comet C/1996 B2 (Hyakutake) and Its Implications for the Origin of Comets". In: *Icarus* 133.1, pp. 147– 162. DOI: 10.1006/icar.1998.5916. URL: http://www.sciencedirect.com/ science/article/pii/S0019103598959164 (cit. on p. 10).
- Boehnke, Patrick et al. (2018). "Potassic, high-silica Hadean crust". In: Proceedings of the National Academy of Sciences. DOI: 10.1073/pnas.1720880115. URL: http://www.pnas.org/content/early/2018/05/30/1720880115 (cit. on p. 108).
- Boioli, Francesca et al. (2017). "Pure climb creep mechanism drives flow in Earth's lower mantle". In: Science Advances 3.3. DOI: 10.1126/sciadv.1601958 (cit. on p. 85).
- Borucki, William J. et al. (2013). "Kepler-62: A Five-Planet System with Planets of 1.4 and 1.6 Earth Radii in the Habitable Zone". In: Science 340.6132, pp. 587– 590. DOI: 10.1126/science.1234702. URL: http://science.sciencemag.org/ content/340/6132/587 (cit. on pp. 113, 208).
- Boschi, Robert, Valerio Lucarini, and Salvatore Pascale (2013). "Bistability of the climate around the habitable zone: A thermodynamic investigation". In: *Icarus* 226.2, pp. 1724–1742. DOI: 10.1016/j.icarus.2013.03.017. URL: http://www. sciencedirect.com/science/article/pii/S0019103513001309 (cit. on pp. 5, 146).
- Boukaré, C. E., E. M. Parmentier, and S.W. Parman (2018). "Timing of mantle overturn during magma ocean solidification". In: *Earth and Planetary Science Letters* 491, pp. 216-225. DOI: 10.1016/j.epsl.2018.03.037. URL: http://www. sciencedirect.com/science/article/pii/S0012821X18301614 (cit. on pp. 24, 162).
- Boukaré, C. E. and Y. Ricard (2017). "Modeling phase separation and phase change for magma ocean solidification dynamics". In: *Geochemistry, Geophysics, Geosystems*. DOI: 10.1002/2017GC006902 (cit. on p. 25).
- Boukaré, C. E., Y. Ricard, and G. Fiquet (2015). "Thermodynamics of the MgO-FeO-SiO<sub>2</sub> system up to 140GPa: Application to the crystallization of Earth's magma ocean". In: *Journal of Geophysical Research: Solid Earth* 120.9, 6085–6101. DOI: 10.1002/2015JB011929 (cit. on pp. 25, 37, 54).
- Bouvier, Audrey et al. (2007). "Pb-Pb dating constraints on the accretion and cooling history of chondrites". In: *Geochimica et Cosmochimica Acta* 71.6, pp. 1583-1604. DOI: 10.1016/j.gca.2006.12.005. URL: http://www.sciencedirect.com/ science/article/pii/S0016703706022393 (cit. on pp. 8, 152).
- Boyet, Maud and R. W. Carlson (2005). "<sup>142</sup>Nd Evidence for Early (>4.53 Ga) Global Differentiation of the Silicate Earth". In: *Science* 309.5734, 576–581 (cit. on p. 19).
- Boyet, Maud et al. (2003). "<sup>142</sup>Nd evidence for early Earth differentiation". In: Earth and Planetary Science Letters 214.3, pp. 427-442. DOI: 10.1016/S0012-821X(03) 00423 - 0. URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/ S0012821X03004230 (cit. on p. 19).
- Brain, D. A. et al. (2016). "Atmospheric escape from unmagnetized bodies". In: *Journal of Geophysical Research: Planets* 121.12, pp. 2364–2385. DOI: 10.1002/ 2016JE005162 (cit. on pp. 26, 110, 164, 207).
- Brown, J. M. and T. J. Shankland (1981). "Thermodynamic parameters in the Earth as determined from seismic profiles". In: *Geophysical Journal International* 66.3, pp. 579–596. DOI: 10.1111/j.1365-246X.1981.tb04891.x. URL: http://dx. doi.org/10.1111/j.1365-246X.1981.tb04891.x (cit. on p. 23).
- Brugger, B. et al. (2016). "Possible Internal Structures and Compositions of Proxima Centauri b". In: *The Astrophysical Journal Letters* (cit. on pp. 5, 146).
- Bullock, Mark A. and David H. Grinspoon (2001). "The Recent Evolution of Climate on Venus". In: *Icarus* 150.1, pp. 19–37. DOI: 10.1006/icar.2000.6570 (cit. on pp. 110, 207).
- Bunge, Hans-Peter, Yanick Ricard, and Jan Matas (2001). "Non-adiabaticity in mantle convection". In: *Geophysical Research Letters* 28.5, pp. 879–882. DOI: 10.1029/ 2000GL011864. URL: https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/ 10.1029/2000GL011864 (cit. on p. 23).

- Burgisser, Alain, Marina Alletti, and Bruno Scaillet (2015). "Simulating the behavior of volatiles belonging to the C-O-H-S system in silicate melts under magmatic conditions with the software D-Compress". In: Computers & Geosciences 79.0, pp. 1-14. DOI: 10.1016/j.cageo.2015.03.002. URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0098300415000503 (cit. on p. 47).
- Burkhardt, Christoph et al. (2008). "Hf-W mineral isochron for Ca,Al-rich inclusions: Age of the solar system and the timing of core formation in planetesimals". In: *Geochimica et Cosmochimica Acta* 72.24, pp. 6177-6197. DOI: 10.1016/j.gca. 2008.10.023. URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/ S0016703708006352 (cit. on pp. 8, 152).
- Cameron, A. G. W. (1983). "Origin of the atmospheres of the terrestrial planets". In: *Icarus* 56.2, pp. 195–201. DOI: 10.1016/0019-1035(83)90032-5 (cit. on pp. 60, 80).
- Campbell, I. H. and S. R. Taylor (1983). "No water, no granites No oceans, no continents". In: *Geophysical Research Letters* 10.11, pp. 1061–1064. DOI: 10.1029/ GL010i011p01061 (cit. on p. 88).
- Canup, Robin M. (2004). "Simulations of a late lunar-forming impact". In: Icarus 168.2, pp. 433-456. DOI: 10.1016/j.icarus.2003.09.028. URL: http://www. sciencedirect.com/science/article/pii/S0019103503002999 (cit. on pp. 16, 160).
- (2008). "Accretion of the Earth". In: Philosophical Transactions: Mathematical, Physical and Engineering Sciences 366.1883, pp. 4061–4075 (cit. on pp. 14–16, 54, 157, 158, 160).
- Canup, Robin M. and Erik Asphaug (2001). "Origin of the Moon in a giant impact near the end of the Earth's formation". In: *Nature* 412, pp. 708–712. URL: http: //dx.doi.org/10.1038/35089010 (cit. on pp. 14, 157).
- Canup, Robin M. and Larry W. Esposito (1996). "Accretion of the Moon from an Impact-Generated Disk". In: *Icarus* 119.2, pp. 427-446. DOI: 10.1006/icar. 1996.0028. URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/ S0019103596900287 (cit. on pp. 14, 157).
- Carlson, R. W. and G. W. Lugmair (2000). "Timescales of Planetesimal Formation and Differentiation Based on Extinct and Extant Radioisotopes". In: ed. by R. M. Canup, K. Righter, and collaborating authors. University of Arizona Press, Tucson, pp. 25–44 (cit. on pp. 17, 160).
- Carr, Michael H. (1996). Water on Mars. Oxford University Press, New York (cit. on pp. 9, 154).
- Carroll, Michael R and John R Holloway, eds. (1994). Volatiles in magmas. Vol. 30. Mineralogical Society of America Washington, DC, United States (cit. on pp. 47, 180, 181).
- Cartigny, Pierre et al. (2008). "Towards a consistent mantle carbon flux estimate: Insights from volatile systematics (H<sub>2</sub>O/Ce, δD, CO<sub>2</sub>/Nb) in the North Atlantic mantle (14° N and 34° N)". In: *Earth and Planetary Science Letters* 265.3–4, pp. 672–685. DOI: 10.1016/j.epsl.2007.11.011 (cit. on p. 52).
- Chambers, J. E. (2001). "Making More Terrestrial Planets". In: *Icarus* 152.2, pp. 205–224. DOI: 10.1006/icar.2001.6639. URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0019103501966394 (cit. on pp. 12, 156).
- Chambers, J. E. and G. W. Wetherill (1998). "Making the Terrestrial Planets: N-Body Integrations of Planetary Embryos in Three Dimensions". In: *Icarus* 136.2, pp. 304-327. DOI: 10.1006/icar.1998.6007. URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0019103598960079 (cit. on pp. 12, 155).

- Chambers, J. E. and G. W. Wetherill (2001). "Planets in the asteroid belt". In: *Meteoritics & Planetary Science* 36.3, pp. 381-399. DOI: 10.1111/j.1945-5100.2001. tb01881.x. URL: https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1111/j. 1945-5100.2001.tb01881.x (cit. on pp. 12, 155).
- Chambers, John (2006). "A semi-analytic model for oligarchic growth". In: *Icarus* 180.2, pp. 496-513. DOI: 10.1016/j.icarus.2005.10.017. URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0019103505004215 (cit. on pp. 11, 154).
- Chandler, Colin Orion, Iain McDonald, and Stephen R. Kane (2016). "The Catalog of Earth-Like Exoplanet Survey Targets (CELESTA): A Database of Habitable Zones Around Nearby Stars". In: *The Astronomical Journal* 151.3, p. 59. DOI: 10.3847/0004-6256/151/3/59. URL: http://stacks.iop.org/1538-3881/151/i=3/a=59 (cit. on p. 114).
- Chandrasekhar, S. (1961). *Hydrodynamic and hydromagnetic stability*. International Series of Monographs on Physics, Oxford: Clarendon, 1961 (cit. on p. 85).
- Charnay, B. et al. (2013). "Exploring the faint young Sun problem and the possible climates of the Archean Earth with a 3-D GCM". In: *Journal of Geophysical Research: Atmospheres* 118.18, pp. 10,414–10,431. DOI: 10.1002/jgrd.50808 (cit. on p. 88).
- Chyba, Christopher F. (1987). "The cometary contribution to the oceans of primitive Earth". In: *Nature* 330, pp. 632–635. DOI: 10.1038/330632a0. URL: http://dx. doi.org/10.1038/330632a0 (cit. on p. 10).
- Clough, S.A. et al. (2005). "Atmospheric radiative transfer modeling: a summary of the AER codes". In: Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer 91.2, pp. 233-244. DOI: 10.1016/j.jgsrt.2004.05.058 (cit. on p. 95).
- Correia, Alexandre C. M. and Jacques Laskar (2001). "The four final rotation states of Venus". In: *Nature* 411, pp. 767–770. URL: http://dx.doi.org/10.1038/ 35081000 (cit. on p. 88).
- Costard, Francois et al. (2017). "Modeling tsunami propagation and the emplacement of thumbprint terrain in an early Mars ocean". In: *Journal of Geophysical Research: Planets* 122.3, pp. 633–649. DOI: 10.1002/2016JE005230. URL: https://agupubs. onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/2016JE005230 (cit. on pp. 9, 154).
- Coughlin, Jeffrey L. et al. (2016). "Planetary Candidates Observed by Kepler. VII. The First Fully Uniform Catalog Based on the Entire 48-month Data Set (Q1–Q17 DR24)". In: The Astrophysical Journal Supplement Series 224.1, p. 12. DOI: 10.3847/0067-0049/224/1/12. URL: http://stacks.iop.org/0067-0049/224/ i=1/a=12 (cit. on p. 114).
- Crameri, Fabio and Boris J. P. Kaus (2010). "Parameters that control lithosphericscale thermal localization on terrestrial planets". In: *Geophysical Research Letters* 37.9. DOI: 10.1029/2010GL042921. URL: https://agupubs.onlinelibrary. wiley.com/doi/abs/10.1029/2010GL042921 (cit. on p. 88).
- Dauphas, Nicolas, François Robert, and Bernard Marty (2000). "The Late Asteroidal and Cometary Bombardment of Earth as Recorded in Water Deuterium to Protium Ratio". In: *Icarus* 148.2, pp. 508–512. DOI: 10.1006/icar.2000.6489. URL: http: //www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0019103500964893 (cit. on pp. 14, 157).
- Davaille, A. and A. Limare (2015). "7.03 Laboratory Studies of Mantle Convection". In: Treatise on Geophysics (Second Edition). Ed. by Gerald Schubert. Second Edition. Oxford: Elsevier, pp. 73–144. DOI: 10.1016/B978-0-444-53802-4.00128-7 (cit. on pp. 37, 172).

- Davaille, A., S. E. Smrekar, and S. Tomlinson (2017). "Experimental and observational evidence for plume-induced subduction on Venus". In: *Nature Geoscience* (cit. on p. 88).
- Dayhoff, Margaret O. et al. (1967). "Venus: Atmospheric Evolution". In: Science 155.3762, pp. 556-558. DOI: 10.1126/science.155.3762.556. URL: http: //science.sciencemag.org/content/155/3762/556 (cit. on pp. 110, 206).
- de Bergh, C. et al. (1995). "Water in the deep atmosphere of Venus from high-resolution spectra of the night side". In: Advances in Space Research 15.4, pp. 79–88. DOI: 10.1016/0273-1177(94)00067-B (cit. on pp. 80, 88).
- de Bergh, C. et al. (2006). "The composition of the atmosphere of Venus below 100 km altitude: An overview". In: *Planetary and Space Science* 54.13–14, pp. 1389–1397. DOI: 10.1016/j.pss.2006.04.020 (cit. on pp. 80, 88).
- Del Genio, A. D. (2016). "Cumulus Parameterization: Those Who Can Remember the Past Are Condemned to Repeat It". In: ArXiv e-prints. arXiv: 1603.07424 [astro-ph.EP] (cit. on pp. 5, 146).
- Delsemme, Armand H. (1992). "Cometary origin of carbon and water on the terrestrial planets". In: Advances in Space Research 12.4, pp. 5–12. DOI: 10.1016/0273-1177(92)90147-P. URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/ pii/027311779290147P (cit. on p. 10).
- (1998). "The deuterium enrichment observed in recent comets is consistent with the cometary origin of seawater". In: *Planetary and Space Science* 47.1, pp. 125–131. DOI: 10.1016/S0032-0633(98)00093-2. URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0032063398000932 (cit. on p. 10).
- Dobrovolskis, Anthony R. and Andrew P. Ingersoll (1980). "Atmospheric tides and the rotation of Venus I. Tidal theory and the balance of torques". In: *Icarus* 41.1, pp. 1–17. DOI: 10.1016/0019-1035(80)90156-6 (cit. on p. 88).
- Dodson-Robinson, Sarah E. et al. (2009). "Ice lines, planetesimal composition and solid surface density in the solar nebula". In: *Icarus* 200.2, pp. 672–693. DOI: 10. 1016/j.icarus.2008.11.023. URL: http://www.sciencedirect.com/science/ article/pii/S0019103508004259 (cit. on pp. 8, 11, 147, 155).
- Dole, S. H. (1964). *Habitable Planets for Man.* New York: Blaisdell (cit. on pp. 1, 140).
- Donahue, T. M. et al. (1982). "Venus Was Wet: A Measurement of the Ratio of Deuterium to Hydrogen". In: Science 216.4546, pp. 630–633. DOI: 10.1126/science. 216.4546.630 (cit. on pp. 9, 80, 88, 103, 108, 154, 204, 206).
- Dorn, Caroline, Dan J. Bower, and Antoine Rozel (2017). "Assessing the Interior Structure of Terrestrial Exoplanets with Implications for Habitability". In: *Handbook of Exoplanets*. Ed. by Hans J. Deeg and Juan Antonio Belmonte. Cham: Springer International Publishing, pp. 1–25. DOI: 10.1007/978-3-319-30648-3\_66-1 (cit. on p. 129).
- Drake, Michael J. and Kevin Righter (2002). "Determining the composition of the Earth". In: *Nature* 416, pp. 39–44. URL: http://dx.doi.org/10.1038/416039a (cit. on p. 10).
- Dreibus, G. and H. Waenke (1989). "Supply and loss of volatile constituents during the accretion of terrestrial planets". In: Origin and Evolution of Planetary and Satellite Atmospheres. Ed. by S. K. Atreya, J. B. Pollack, and M. S. Matthews. University of Arizona Press, Tucson, pp. 268–288 (cit. on pp. 8, 152).
- Driscoll, P. and D. Bercovici (2013). "Divergent evolution of Earth and Venus: Influence of degassing, tectonics, and magnetic fields". In: *Icarus* 226.2, pp. 1447 –1464. DOI: http://dx.doi.org/10.1016/j.icarus.2013.07.025. URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0019103513003266 (cit. on p. 115).

- Dumoulin, C. et al. (2017). "Tidal constraints on the interior of Venus". In: Journal of Geophysical Research: Planets 122.6, pp. 1338-1352. DOI: 10.1002/2016JE005249. URL: https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/ 2016JE005249 (cit. on pp. 110, 207).
- Eberhardt, P. et al. (1995). "The D/H and <sup>18</sup>O/<sup>16</sup>O ratios in water from comet P/Halley". In: Astronomy & Astrophysics 302, p. 301 (cit. on p. 10).
- Einstein, A. (1906). "Eine neue Bestimmung der Moleküldimensionen". In: Annalen der Physik 324.2, pp. 289-306. DOI: 10.1002/andp.19063240204. URL: https: //onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/andp.19063240204 (cit. on pp. 39, 173).
- Elkins-Tanton, Linda T. (2008). "Linked magma ocean solidification and atmospheric growth for Earth and Mars". In: *Earth and Planetary Science Letters* 271.1-4, pp. 181–191. DOI: 10.1016/j.epsl.2008.03.062 (cit. on pp. 27, 37, 44, 46, 47, 54, 60, 86, 92, 93, 115, 165, 172, 177, 180, 181).
- (2011). "Formation of early water oceans on rocky planets". In: Astrophysics and Space Science 332.2, pp. 359–364. DOI: 10.1007/s10509-010-0535-3 (cit. on p. 52).
- (2012). "Magma Oceans in the Inner Solar System". In: Annual review of Earth and Planetary Sciences. Ed. by Jeanloz, R. Vol. 40, 113–139. DOI: 10.1146/annurevearth-042711-105503 (cit. on pp. 18, 19, 52).
- (2013). "Planetary science: Evolutionary dichotomy for rocky planets". In: Nature 497.7451, pp. 570–572 (cit. on pp. 28, 166).
- Elkins-Tanton, Linda T., P. C. Hess, and E. M. Parmentier (2005). "Possible formation of ancient crust on Mars through magma ocean processes". In: *Journal* of Geophysical Research: Planets 110.E12. DOI: 10.1029/2005JE002480 (cit. on pp. 24, 162).
- Elkins-Tanton, Linda T., E. M. Parmentier, and P. C. Hess (2003). "Magma ocean fractional crystallization and cumulate overturn in terrestrial planets: Implications for Mars". In: *Meteoritics & Planetary Science* 38.12, 1753–1771 (cit. on pp. 24, 162).
- Elkins-Tanton, Linda T. et al. (2005). "Early magnetic field and magmatic activity on Mars from magma ocean cumulate overturn". In: *Earth and Planetary Science Letters* 236.1–2, pp. 1–12. DOI: 10.1016/j.epsl.2005.04.044 (cit. on pp. 24, 162).
- Elser, S. et al. (2011). "How common are Earth-Moon planetary systems?" In: *Icarus* 214.2, pp. 357-365. DOI: 10.1016/j.icarus.2011.05.025. URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0019103511001989 (cit. on pp. 14, 157).
- Eymet, V., C. Coustet, and B. Piaud (2016). "kspectrum : an open-source code for high-resolution molecular absorption spectra production". In: *Journal of Physics: Conference Series* 676.1, p. 012005 (cit. on pp. 60, 75).
- Ezer, D. and A. G. W. Cameron (1965). "A Study of Solar Evolution". In: Canadian Journal of Physics 43.8, pp. 1497–1517. DOI: 10.1139/p65-140 (cit. on p. 61).
- Fanale, Fraser P. (1971). "A case for catastrophic early degassing of the earth". In: *Chemical Geology* 8.2, pp. 79–105. DOI: 10.1016/0009-2541(71)90051-9. URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0009254171900519 (cit. on p. 19).
- Fiquet, G. et al. (2010). "Melting of Peridotite to 140 Gigapascals". In: Science 329.5998, pp. 1516–1518. DOI: 10.1126/science.1192448. URL: http://science.sciencemag. org/content/329/5998/1516 (cit. on pp. 21, 23, 37, 54, 162).

- Flasar, F. Michael and Francis Birch (1973). "Energetics of core formation: A correction". In: Journal of Geophysical Research 78.26, pp. 6101-6103. DOI: 10.1029/JB078i026p06101. URL: https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/JB078i026p06101 (cit. on pp. 19, 160).
- Flato, G. et al. (2013). "Evaluation of Climate Models". In: Climate Change 2013: The Physical Science Basis. Cambridge University Press, pp. 741–866. DOI: 10.1017/ CB09781107415324.020 (cit. on pp. 5, 146).
- Foley, Bradford J., David Bercovici, and Linda T. Elkins-Tanton (2014). "Initiation of plate tectonics from post-magma ocean thermochemical convection". In: *Journal of Geophysical Research: Solid Earth* 119.11, 8538–8561. DOI: 10.1002/ 2014JB011121 (cit. on pp. 52, 108).
- Foley, Bradford J. and Peter E. Driscoll (2016). "Whole planet coupling between climate, mantle, and core: Implications for rocky planet evolution". In: Geochemistry, Geophysics, Geosystems 17.5, pp. 1885–1914. DOI: 10.1002/2015GC006210. URL: http://dx.doi.org/10.1002/2015GC006210 (cit. on pp. 6, 26, 52, 79, 88, 108, 115, 146, 164).
- Foley, C. Nicole et al. (2005). "The early differentiation history of Mars from <sup>182</sup>W-<sup>142</sup>Nd isotope systematics in the SNC meteorites". In: *Geochimica et Cosmochimica Acta* 69.18, pp. 4557-4571. DOI: 10.1016/j.gca.2005.05.009. URL: http: //www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0016703705004321 (cit. on p. 24).
- Genda, Hidenori and Masahiro Ikoma (2008). "Origin of the ocean on the Earth: Early evolution of water D/H in a hydrogen-rich atmosphere". In: *Icarus* 194.1, pp. 42– 52. DOI: 10.1016/j.icarus.2007.09.007. URL: http://www.sciencedirect. com/science/article/pii/S0019103507004496 (cit. on pp. 9, 10).
- Gendrin, Aline et al. (2005). "Sulfates in Martian Layered Terrains: The OMEGA/Mars Express View". In: Science 307.5715, pp. 1587–1591. DOI: 10.1126/science. 1109087. URL: http://science.sciencemag.org/content/307/5715/1587 (cit. on pp. 9, 154).
- Gerya, T. V. et al. (2015). "Plate tectonics on the Earth triggered by plume-induced subduction initiation". In: *Nature* 527.7577, pp. 221–225 (cit. on p. 88).
- Gillmann, Cédric, Eric Chassefière, and Philippe Lognonné (2009). "A consistent picture of early hydrodynamic escape of Venus atmosphere explaining present Ne and Ar isotopic ratios and low oxygen atmospheric content". In: *Earth and Planetary Science Letters* 286.3, pp. 503–513. DOI: 10.1016/j.epsl.2009.07.016 (cit. on pp. 88, 106, 110, 207).
- Gillmann, Cédric, Gregor J. Golabek, and Paul J. Tackley (2016). "Effect of a single large impact on the coupled atmosphere-interior evolution of Venus". In: *Icarus* 268, pp. 295–312. DOI: 10.1016/j.icarus.2015.12.024 (cit. on p. 52).
- Gillmann, Cédric and Paul J. Tackley (2014). "Atmosphere/mantle coupling and feedbacks on Venus". English. In: Journal of Geophysical Research: Planets 119.6, pp. 1189–1217. DOI: 10.1002/2013JE004505 (cit. on pp. 52, 89, 108, 110, 115, 207).
- Gillon, Michaël et al. (2017). "Seven temperate terrestrial planets around the nearby ultracool dwarf star TRAPPIST-1". In: *Nature* 542.7642, pp. 456–460 (cit. on pp. 5, 114, 115, 144, 208).
- Godolt, M. et al. (2015). "3D climate modeling of Earth-like extrasolar planets orbiting different types of host stars". In: *Planetary and Space Science* 111, pp. 62–76. DOI: 10.1016/j.pss.2015.03.010 (cit. on pp. 5, 146).

- Godolt, M. et al. (2016). "Assessing the habitability of planets with Earth-like atmospheres with 1D and 3D climate modeling". In: Astronomy & Astrophysics 592, A36. DOI: 10.1051/0004-6361/201628413 (cit. on pp. 5, 146).
- Goldblatt, Colin (2015). "Habitability of Waterworlds: Runaway Greenhouses, Atmospheric Expansion, and Multiple Climate States of Pure Water Atmospheres".
  In: Astrobiology 15.5, pp. 362–370. DOI: 10.1089/ast.2014.1268. URL: http://dx.doi.org/10.1089/ast.2014.1268 (cit. on pp. 5, 144).
- Goldblatt, Colin and Andrew J. Watson (2012). "The runaway greenhouse: implications for future climate change, geoengineering and planetary atmospheres". In: *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 370.1974, pp. 4197–4216. DOI: 10.1098/rsta.2012.0004 (cit. on pp. 2, 98, 141).
- Goldblatt, Colin et al. (2013). "Low simulated radiation limit for runaway greenhouse climates". In: *Nature Geoscience* 6.8, pp. 661–667. DOI: 10.1038/NGE01892 (cit. on pp. 2, 5, 43, 93, 98, 110, 114, 141, 144, 195).
- Gomes, R. et al. (2005). "Origin of the cataclysmic Late Heavy Bombardment period of the terrestrial planets". In: *Nature* 435, pp. 466–469. URL: http://dx.doi.org/ 10.1038/nature03676 (cit. on p. 156).
- Gough, D. O. (1981). "Solar interior structure and luminosity variations". In: Solar Physics 74.1, pp. 21–34. DOI: 10.1007/BF00151270. URL: http://dx.doi.org/ 10.1007/BF00151270 (cit. on pp. 4, 46, 61, 110, 143, 178, 206).
- Greenberg, Richard et al. (1978). "Planetesimals to planets: Numerical simulation of collisional evolution". In: *Icarus* 35.1, pp. 1–26. DOI: 10.1016/0019-1035(78) 90057 - X. URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/ 001910357890057X (cit. on pp. 11, 154).
- Grimm, Simon L. et al. (2018). "The nature of the TRAPPIST-1 exoplanets". In: *Astronomy & Astrophysics* 613, A68. DOI: 10.1051/0004-6361/201732233. URL: https://doi.org/10.1051/0004-6361/201732233 (cit. on pp. 5, 98, 115, 129, 146).
- Grinspoon, D. H. and M. A. Bullock (2003). "Did Venus Experience One Great Transition or Two?" In: AAS/Division for Planetary Sciences Meeting Abstracts #35. Vol. 35. Bulletin of the American Astronomical Society, p. 1007 (cit. on p. 88).
- Grinspoon, David H. (1987). "Was Venus Wet? Deuterium Reconsidered". In: *Science* 238.4834, pp. 1702–1704. DOI: 10.1126/science.238.4834.1702 (cit. on pp. 103, 204).
- Grossmann, S. and D. Lohse (2000). "Scaling in thermal convection: a unifying theory". In: *Journal of Fluid Mechanics* 407, pp. 27–56 (cit. on pp. 37, 172).
- Grott, M. and D. Breuer (2010). "On the spatial variability of the Martian elastic lithosphere thickness: Evidence for mantle plumes?" In: Journal of Geophysical Research: Planets 115.E3. DOI: 10.1029/2009JE003456. URL: https://agupubs. onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2009JE003456 (cit. on p. 24).
- Haisch, Karl E. Jr., Elizabeth A. Lada, and Charles J. Lada (2001). "Disk Frequencies and Lifetimes in Young Clusters". In: *The Astrophysical Journal Letters* 553.2, p. L153. DOI: 10.1086/320685. URL: http://stacks.iop.org/1538-4357/553/i=2/a=L153 (cit. on p. 9).
- Hamano, Keiko, Yutaka Abe, and Hidenori Genda (2013). "Emergence of two types of terrestrial planet on solidification of magma ocean". In: *Nature* 497.7451, pp. 607–610. URL: http://dx.doi.org/10.1038/nature12163 (cit. on pp. 27–29, 44, 60, 64, 66, 79, 88, 95, 98, 99, 106–108, 110, 115, 165, 166, 177, 187, 191, 206).
- Hamano, Keiko et al. (2015). "Lifetime and spectral evolution of a magma ocean with a steam atmosphere: its detectability by future direct imaging". In: *The Astrophysical*

Journal 806.2. DOI: 10.1088/0004-637X/806/2/216 (cit. on pp. 29, 43, 71, 93, 95, 107, 110, 167, 191).

- Han, Eunkyu et al. (2014). "Exoplanet Orbit Database. II. Updates to Exoplanets.org".
  In: Publications of the Astronomical Society of the Pacific 126.943, p. 827. DOI: 10.1086/678447. URL: http://stacks.iop.org/1538-3873/126/i=943/a=827 (cit. on pp. 119, 123, 210, 215).
- Hansen, Brad M. S. (2009). "Formation of the Terrestrial Planets from a Narrow Annulus". In: *The Astrophysical Journal* 703.1, pp. 1131–1140. DOI: 10.1088/ 0004-637X/703/1/1131. URL: http://stacks.iop.org/0004-637X/703/i=1/a= 1131 (cit. on p. 12).
- Hart, Michael H. (1978). "The evolution of the atmosphere of the earth". In: *Icarus* 33.1, pp. 23–39. DOI: http://dx.doi.org/10.1016/0019-1035(78)90021-0 (cit. on pp. 1, 140).
- (1979). "Habitable zones about main sequence stars". In: *Icarus* 37.1, pp. 351–357.
   DOI: 10.1016/0019-1035(79)90141-6. URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0019103579901416 (cit. on pp. 1, 52).
- Hartogh, Paul et al. (2011). "Ocean-like water in the Jupiter-family comet 103P/Hartley 2". In: *Nature* 478, pp. 218–220. URL: http://dx.doi.org/10.1038/nature10519 (cit. on p. 10).
- Hashimoto, George L., Yutaka Abe, and Seiji Sugita (2007). "The chemical composition of the early terrestrial atmosphere: Formation of a reducing atmosphere from CI-like material". In: *Journal of Geophysical Research: Planets* 112.E5. DOI: 10.1029/2006JE002844. URL: http://dx.doi.org/10.1029/2006JE002844 (cit. on p. 53).
- Hashimoto, George L. et al. (2008). "Felsic highland crust on Venus suggested by Galileo Near-Infrared Mapping Spectrometer data". In: Journal of Geophysical Research: Planets 113.E5. DOI: 10.1029/2008JE003134. URL: https://agupubs. onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2008JE003134 (cit. on p. 88).
- Head, James W. et al. (1999). "Possible Ancient Oceans on Mars: Evidence from Mars Orbiter Laser Altimeter Data". In: Science 286.5447, pp. 2134–2137. DOI: 10.1126/science.286.5447.2134. URL: http://science.sciencemag.org/ content/286/5447/2134 (cit. on pp. 9, 154).
- Helo, Christoph et al. (2011). "Explosive eruptions at mid-ocean ridges driven by CO<sub>2</sub>-rich magmas". In: *Nature Geoscience* 4.4, pp. 260–263 (cit. on p. 52).
- Hernlund, John W., Christine Thomas, and Paul J. Tackley (2005). "A doubling of the post-perovskite phase boundary and structure of the Earth's lowermost mantle". In: *Nature* 434.7035, pp. 882–886. URL: http://dx.doi.org/10.1038/ nature03472 (cit. on p. 23).
- Hevey, Phonsie J. and Ian S. Sanders (2006). "A model for planetesimal meltdown by 26Al and its implications for meteorite parent bodies". In: *Meteoritics & Planetary Science* 41.1, pp. 95–106. DOI: 10.1111/j.1945-5100.2006.tb00195.x. URL: https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1111/j.1945-5100.2006. tb00195.x (cit. on p. 19).
- Holland, H. D. (1978). "The Chemistry of the Atmosphere and Oceans". In: Wiley, New York (cit. on pp. 52, 80, 107).
- Holland, Heinrich D. (1962). "Model for the evolution of the Earth's atmosphere". In: *Petrologic Studies: A Volume in Honor of A. F. Buddington.* Ed. by A. E. J. Engel, Harold L. James, and B. F. Leonard. New York: Geological Society of America, pp. 447–477 (cit. on p. 60).

- Hostetler, C. J. and M. J. Drake (1980). "On the early global melting of the terrestrial planets". In: Lunar and Planetary Science Conference Proceedings 11, pp. 1915– 1929 (cit. on pp. 33, 51, 89, 119, 169, 212).
- Hoyle, F. (1955). Frontiers in Astronomy. William Heinemann, London, pp. 68–72 (cit. on pp. 108, 206).
- Huang, S.-S. (1959). "Occurrence of life in the universe". In: 47.3, pp. 397-402. URL: http://www.jstor.org/stable/27827376 (cit. on pp. 1, 140).
- (1960). "Life outside the solar system". In: Scientific American 202, pp. 55-63.
   DOI: 10.1038/scientificamerican0460-55 (cit. on pp. 1, 140).
- Hustoft, Justin, Ted Scott, and David L. Kohlstedt (2007). "Effect of metallic melt on the viscosity of peridotite". In: *Earth and Planetary Science Letters* 260.1–2, pp. 355–360. DOI: 10.1016/j.epsl.2007.06.011 (cit. on p. 85).
- Hutson, Melinda and Alex Ruzicka (2000). "A multi-step model for the origin of E3 (enstatite) chondrites". In: *Meteoritics & Planetary Science* 35.3, pp. 601-608. DOI: 10.1111/j.1945-5100.2000.tb01440.x. URL: https://onlinelibrary.wiley. com/doi/abs/10.1111/j.1945-5100.2000.tb01440.x (cit. on pp. 8, 152).
- Ida, Shigeru, Robin M. Canup, and Glen R. Stewart (1997). "Lunar accretion from an impact-generated disk". In: *Nature* 389, pp. 353–357. URL: http://dx.doi.org/ 10.1038/38669 (cit. on pp. 14, 157).
- Ida, Shigeru and Junichiro Makino (1993). "Scattering of Planetesimals by a Protoplanet: Slowing Down of Runaway Growth". In: *Icarus* 106.1, pp. 210-227. DOI: 10.1006/icar.1993.1167. URL: http://www.sciencedirect.com/science/ article/pii/S001910358371167X (cit. on pp. 11, 154).
- Ikoma, Masahiro and Hidenori Genda (2006). "Constraints on the mass of a habitable planet with water of nebular origin". In: *The Astrophysical Journal* 648.1, 1, pp. 696–706. DOI: 10.1086/505780 (cit. on pp. 9, 52).
- Ingersoll, Andrew P. (1969). "The Runaway Greenhouse: A History of Water on Venus". In: *Journal of the Atmospheric Sciences* 26.6, pp. 1191–1198 (cit. on pp. 2, 44, 80, 98, 108, 110, 114, 127, 141, 177, 195, 206).
- Ishiwatari, M. et al. (2007). "Dependence of climate states of gray atmosphere on solar constant: From the runaway greenhouse to the snowball states". In: Journal of Geophysical Research: Atmospheres 112.D13. DOI: 10.1029/2006JD007368. URL: https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2006JD007368 (cit. on p. 91).
- Jaupart, Claude and Jean-Claude Mareschal (2011). *Heat Generation and Transport* in the Earth. Cambridge University Press (cit. on pp. 37, 41, 54, 171, 172).
- Javoy, Marc (1999). "Chemical earth models". In: Comptes Rendus de l'Académie des Sciences - Earth and Planetary Sciences 329.8, pp. 537–555. DOI: http://dx. doi.org/10.1016/S1251-8050(00)87210-9 (cit. on p. 41).
- Jendrzejewski, Nathalie et al. (1997). "Carbon solubility in Mid-Ocean Ridge basaltic melt at low pressures (250-1950 bar)". In: *Chemical Geology* 138.1, pp. 81-92. DOI: 10.1016/S0009-2541(96)00176-3. URL: http://www.sciencedirect.com/ science/article/pii/S0009254196001763 (cit. on pp. 47, 181).
- Johansen, Anders and Michiel Lambrechts (2017). "Forming Planets via Pebble Accretion". In: Annual Review of Earth and Planetary Sciences 45.1, pp. 359-387.
  DOI: 10.1146/annurev-earth-063016-020226. URL: https://doi.org/10.1146/annurev-earth-063016-020226 (cit. on pp. 8, 147).
- Kallenbach, Reinald, Willy Benz, and Günter W. Lugmair (2000). "From Dust to Terrestrial Planets – Introduction". In: Space Science Reviews 92.1, pp. 1–10. DOI: 10.1023/A:1005295830920. URL: https://doi.org/10.1023/A:1005295830920 (cit. on pp. 8, 147).

- Kane, Stephen R. et al. (2016). "A Catalog of Kepler Habitable Zone Exoplanet Candidates". In: *The Astrophysical Journal* 830.1, p. 1. URL: http://stacks.iop. org/0004-637X/830/i=1/a=1 (cit. on p. 114).
- Karato, Shun-Ichiro and Patrick Wu (1993). "Rheology of the Upper Mantle: A Synthesis". In: *Science* 260.5109, pp. 771–778. DOI: 10.1126/science.260.5109.771 (cit. on pp. 39, 57, 173).
- Karki, Bijaya B. and Lars P. Stixrude (2010). "Viscosity of MgSiO<sub>3</sub> Liquid at Earth's Mantle Conditions: Implications for an Early Magma Ocean". In: *Science* 328.5979, pp. 740–742. DOI: 10.1126/science.1188327 (cit. on pp. 39, 40, 57, 59, 173, 174).
- Kashefi, Kazem and Derek R. Lovley (2003). "Extending the Upper Temperature Limit for Life". In: Science 301.5635, pp. 934–934. DOI: 10.1126/science.1086823. URL: http://science.sciencemag.org/content/301/5635/934 (cit. on pp. 108, 206).
- Kasting, James F. (1988). "Runaway and moist greenhouse atmospheres and the evolution of Earth and Venus". In: *Icarus* 74.3, pp. 472–494. DOI: 10.1016/0019-1035(88)90116-9 (cit. on pp. 2, 27, 42–44, 61, 80, 88, 91, 93, 98, 106, 110, 114, 141, 165, 176, 177, 206).
- (1989). "Long-term stability of the Earth's climate". In: *Palaeogeography, Palaeo-climatology, Palaeoecology* 75.1, pp. 83–95. DOI: 10.1016/0031-0182(89)90185-5.
   URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0031018289901855 (cit. on pp. 4, 143).
- (1991). "CO<sub>2</sub> condensation and the climate of early Mars". In: *Icarus* 94.1, pp. 1–13. DOI: 10.1016/0019-1035(91)90137-I (cit. on p. 79).
- (1993). "Earth's early atmosphere". In: Science 259.5097, pp. 920–926 (cit. on pp. 2, 141).
- Kasting, James F. and Thomas P. Ackerman (1986). "Climatic consequences of very high carbon dioxide levels in the Earth's early atmosphere". In: *Science* 234.4782, pp. 1383–1385. DOI: 10.1126/science.11539665. URL: http://science. sciencemag.org/content/234/4782/1383 (cit. on p. 107).
- Kasting, James F. and James B. Pollack (1983). "Loss of water from Venus. I. Hydrodynamic escape of hydrogen". In: *Icarus* 53.3, pp. 479–508. DOI: 10.1016/0019-1035(83)90212-9 (cit. on pp. 80, 106, 110, 206).
- Kasting, James F., James B. Pollack, and Thomas P. Ackerman (1984). "Response of Earth's atmosphere to increases in solar flux and implications for loss of water from Venus". In: *Icarus* 57.3, pp. 335–355. DOI: http://dx.doi.org/10.1016/0019-1035(84)90122-2. URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/ pii/0019103584901222 (cit. on pp. 2, 88, 110, 141, 206).
- Kasting, James F., Daniel P. Whitmire, and Ray T. Reynolds (1993). "Habitable Zones around Main Sequence Stars". In: *Icarus* 101.1, pp. 108–128. DOI: 10.1006/ icar.1993.1010. URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/ pii/S0019103583710109 (cit. on pp. 1, 2, 4, 5, 52, 110, 114, 115, 123, 140, 143, 144, 214).
- Katsura, Tomoo et al. (2010). "Adiabatic temperature profile in the mantle". In: *Physics of the Earth and Planetary Interiors* 183.1. Special Issue on Deep Slab and Mantle Dynamics, pp. 212–218. DOI: 10.1016/j.pepi.2010.07.001. URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0031920110001366 (cit. on p. 23).
- Kelemen, P. B. et al. (1997). "A review of melt migration processes in the adiabatically upwelling mantle beneath oceanic spreading ridges". In: *Philosophical Transactions* of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences 355.1723, pp. 283–318. DOI: 10.1098/rsta.1997.0010 (cit. on pp. 39, 40, 57, 59, 173, 174).

- King, H.E. et al. (2010). "Computer simulations of water interactions with low-coordinated forsterite surface sites: Implications for the origin of water in the inner solar system". In: *Earth and Planetary Science Letters* 300.1, pp. 11–18. DOI: 10.1016/j. epsl.2010.10.019. URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/ pii/S0012821X10006539 (cit. on p. 10).
- Kita, N. T. et al. (2005). "Constraints on the Origin of Chondrules and CAIs from Short-lived and Long-Lived Radionuclides". In: *Chondrites and the Protoplanetary Disk.* Ed. by A. N. Krot, E. R. D. Scott, and B. Reipurth. Vol. 341. Astronomical Society of the Pacific Conference Series, pp. 558–587 (cit. on p. 9).
- Kitzmann, D. et al. (2010). "Clouds in the atmospheres of extrasolar planets I. Climatic effects of multi-layered clouds for Earth-like planets and implications for habitable zones". In: Astronomy & Astrophysics 511, A66. DOI: 10.1051/0004-6361/200913491. URL: https://doi.org/10.1051/0004-6361/200913491 (cit. on p. 110).
- Kleine, Thorsten et al. (2009). "Hf-W chronology of the accretion and early evolution of asteroids and terrestrial planets". In: *Geochimica et Cosmochimica Acta* 73.17, pp. 5150-5188. DOI: 10.1016/j.gca.2008.11.047. URL: http://www. sciencedirect.com/science/article/pii/S0016703709003287 (cit. on p. 9).
- Kodama, Takanori et al. (2015). "Rapid Water Loss Can Extend the Lifetime of Planetary Habitability". In: *The Astrophysical Journal* 812.2, p. 165 (cit. on pp. 5, 114, 144).
- Kokubo, Eiichiro and Shigeru Ida (1996). "On Runaway Growth of Planetesimals". In: *Icarus* 123.1, pp. 180–191. DOI: 10.1006/icar.1996.0148. URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0019103596901487 (cit. on pp. 11, 154).
- (1998). "Oligarchic Growth of Protoplanets". In: *Icarus* 131.1, pp. 171–178. DOI: 10.1006/icar.1997.5840 (cit. on pp. 11, 154).
- (2000). "Formation of Protoplanets from Planetesimals in the Solar Nebula". In: *Icarus* 143.1, pp. 15–27. DOI: 10.1006/icar.1999.6237. URL: http://www. sciencedirect.com/science/article/pii/S0019103599962371 (cit. on pp. 11, 154).
- Komabayasi, M. (1967). "Discrete Equilibrium Temperatures of a Hypothetical Planet with the Atmosphere and the Hydrosphere of One Component-Two Phase System under Constant Solar Radiation". In: Journal of the Meteorological Society of Japan. Ser. II 45.1, pp. 137–139. DOI: 10.2151/jmsj1965.45.1\_137 (cit. on pp. 2, 110, 114, 127, 141, 206).
- Kopp, Greg and Judith L. Lean (2011). "A new, lower value of total solar irradiance: Evidence and climate significance". In: *Geophysical Research Letters* 38.1 (cit. on pp. 91, 104, 119, 120, 210).
- Kopparapu, Ravi Kumar (2013). "A Revised Estimate of the Occurrence Rate of Terrestrial Planets in the Habitable Zones around Kepler M-dwarfs". In: *The Astrophysical Journal Letters* 767.1, p. L8 (cit. on p. 52).
- Kopparapu, Ravi Kumar et al. (2013). "Habitable zones around main-sequence stars: new estimates". In: *The Astrophysical Journal* 770.1. DOI: 10.1088/0004-637X/770/1/82 (cit. on pp. 1–5, 52, 71, 77, 79, 93, 95, 98, 110, 114, 123, 140, 142–144, 195, 200, 214, 215).
- Kopparapu, Ravi Kumar et al. (2014). "Habitable zones around main-sequence stars: dependence on planetary mass". In: *The Astrophysical Journal Letters* 787.2. DOI: 10.1088/2041-8205/787/2/L29 (cit. on pp. 5, 52, 98, 114, 131, 132, 144).
- Kopparapu, Ravi Kumar et al. (2016). "The Inner Edge of the Habitable Zone for Synchronously Rotating Planets around Low-mass Stars Using General Circulation

Models". In: *The Astrophysical Journal* 819.1, p. 84. URL: http://stacks.iop. org/0004-637X/819/i=1/a=84 (cit. on pp. 5, 79, 146).

- Krasnopolsky, V.A. et al. (2013). "Observations of D/H ratios in H<sub>2</sub>O, HCl, and HF on Venus and new DCl and DF line strengths". In: *Icarus* 224.1, pp. 57–65. DOI: 10.1016/j.icarus.2013.02.010 (cit. on pp. 9, 88, 154).
- Kulikov, Yu.N. et al. (2006). "Atmospheric and water loss from early Venus". In: Planetary and Space Science 54.13-14, pp. 1425-1444. DOI: 10.1016/j.pss. 2006.04.021. URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/ S0032063306001693 (cit. on p. 80).
- Küppers, Michael et al. (2005). "A large dust/ice ratio in the nucleus of comet 9P/Tempel 1". In: Nature 437, pp. 987–990. URL: http://dx.doi.org/10. 1038/nature04236 (cit. on p. 11).
- Labrosse, S., J. W. Hernlund, and N. Coltice (2007). "A crystallizing dense magma ocean at the base of the Earth's mantle". In: *Nature* 450.7171, pp. 866–869. URL: http://dx.doi.org/10.1038/nature06355 (cit. on pp. 24, 25, 37, 54, 162).
- Lammer, Helmut et al. (2003). "Atmospheric Loss of Exoplanets Resulting from Stellar X-Ray and Extreme-Ultraviolet Heating". In: *The Astrophysical Journal Letters* 598.2, p. L121 (cit. on pp. 110, 207).
- Lammer, Helmut et al. (2008). "Atmospheric Escape and Evolution of Terrestrial Planets and Satellites". In: *Space Science Reviews* 139.1, pp. 399–436. DOI: 10. 1007/s11214-008-9413-5. URL: http://dx.doi.org/10.1007/s11214-008-9413-5 (cit. on pp. 80, 110, 206).
- Lammer, Helmut et al. (2009). "What makes a planet habitable?" In: *The Astronomy* and Astrophysics Review 17.2, pp. 181–249. DOI: 10.1007/s00159-009-0019-z. URL: http://dx.doi.org/10.1007/s00159-009-0019-z (cit. on p. 52).
- Lammer, Helmut et al. (2014). "Origin and loss of nebula-captured hydrogen envelopes from 'sub'- to 'super-Earths' in the habitable zone of Sun-like stars". In: Monthly Notices of the Royal Astronomical Society 439.4, 3225–3238. DOI: 10.1093/mnras/ stu085 (cit. on p. 52).
- Langevin, Yves et al. (2005). "Sulfates in the North Polar Region of Mars Detected by OMEGA/Mars Express". In: Science 307.5715, pp. 1584–1586. DOI: 10.1126/ science.1109091. URL: http://science.sciencemag.org/content/307/5715/ 1584 (cit. on pp. 9, 154).
- Lebrun, T. et al. (2013). "Thermal evolution of an early magma ocean in interaction with the atmosphere". In: *Journal of Geophysical Research: Planets* 118.6, pp. 1155–1176 (cit. on pp. 28, 29, 33, 37, 43, 44, 47, 48, 53, 57, 60, 61, 64, 84, 86, 88, 89, 92, 93, 110, 115, 117, 119, 166, 169, 172, 177, 181, 183, 187, 212).
- Leconte, Jérémy et al. (2013). "Increased insolation threshold for runaway greenhouse processes on Earth-like planets". In: *Nature* 504.7479, 268. DOI: {10.1038/nature12827} (cit. on pp. 2, 5, 43, 93, 98, 110, 114, 123, 141, 144, 195, 215).
- Leconte, Jérémy et al. (2015). "Asynchronous rotation of Earth-mass planets in the habitable zone of lower-mass stars". In: *Science* 347.6222, pp. 632–635. DOI: 10. 1126/science.1258686 (cit. on pp. 5, 88, 146).
- Lécuyer, Christophe, Philippe Gillet, and François Robert (1998). "The hydrogen isotope composition of seawater and the global water cycle". In: *Chemical Geology* 145.3, pp. 249–261. DOI: 10.1016/S0009-2541(97)00146-0. URL: http://www. sciencedirect.com/science/article/pii/S0009254197001460 (cit. on pp. 8, 152).
- Lécuyer, Christophe, Laurent Simon, and François Guyot (2000). "Comparison of carbon, nitrogen and water budgets on Venus and the Earth". In: *Earth and Planetary*

*Science Letters* 181.1, pp. 33–40. DOI: 10.1016/S0012-821X(00)00195-3 (cit. on pp. 9, 88, 110, 154, 206).

- Lewis, John S. (1970). "Venus: Atmospheric and lithospheric composition". In: *Earth and Planetary Science Letters* 10.1, pp. 73–80. DOI: 10.1016/0012-821X(70) 90066-X (cit. on p. 80).
- Li, Qingsong and Walter S. Kiefer (2007). "Mantle convection and magma production on present-day Mars: Effects of temperature-dependent rheology". In: *Geophysical Research Letters* 34.16. DOI: 10.1029/2007GL030544. URL: https://agupubs. onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2007GL030544 (cit. on p. 24).
- Lin, D. N. C. and J. Papaloizou (1986). "On the tidal interaction between protoplanets and the protoplanetary disk. III - Orbital migration of protoplanets". In: *Astrophysical Journal* 309, pp. 846–857. DOI: 10.1086/164653 (cit. on p. 12).
- Lis, D. C. et al. (2013). "A Herschel Study of D/H in Water in the Jupiter-family Comet 45P/Honda-Mrkos-Pajdušáková and Prospects for D/H Measurements with CCAT". In: *The Astrophysical Journal Letters* 774.1, p. L3. DOI: 10.1088/2041-8205/774/1/L3. URL: http://stacks.iop.org/2041-8205/774/i=1/a=L3 (cit. on p. 10).
- Liu, Yang, Youxue Zhang, and Harald Behrens (2005). "Solubility of H<sub>2</sub>O in rhyolitic melts at low pressures and a new empirical model for mixed H<sub>2</sub>O-CO<sub>2</sub> solubility in rhyolitic melts". In: *Journal of Volcanology and Geothermal Research* 143.1–3, pp. 219–235. DOI: 10.1016/j.jvolgeores.2004.09.019 (cit. on p. 47).
- Lodders K.; Fegley, B. (1998). The Planetary Scientist's Companion. Oxford University Press, New York (cit. on pp. 41, 91).
- Luger, R. and R. Barnes (2015). "Extreme Water Loss and Abiotic O<sub>2</sub> Buildup on Planets Throughout the Habitable Zones of M Dwarfs". In: Astrobiology 15.2, pp. 119–143. DOI: 10.1089/ast.2014.1231 (cit. on pp. 88, 110, 206).
- Lunine, J. et al. (2007). "Asteroidal Sources of Earth's Water Based on Dynamical Simulations". In: Lunar and Planetary Science Conference. Vol. 38. Lunar and Planetary Inst. Technical Report, p. 1616 (cit. on pp. 14, 157).
- Lupu, R. E. et al. (2014). "The Atmospheres of Earthlike Planets after Giant Impact Events". In: The Astrophysical Journal 784.1, p. 27 (cit. on pp. 29, 44, 166, 177).
- Lyra, Wladimir, Sijme-Jan Paardekooper, and Mordecai-Mark Mac Low (2010). "Orbital Migration of Low-mass Planets in Evolutionary Radiative Models: Avoiding Catastrophic Infall". In: *The Astrophysical Journal Letters* 715.2, p. L68. DOI: 10.1088/2041-8205/715/2/L68. URL: http://stacks.iop.org/2041-8205/715/i=2/a=L68 (cit. on pp. 11, 155).
- Maas, Christian and Ulrich Hansen (2015). "Effects of Earth's rotation on the early differentiation of a terrestrial magma ocean". In: *Journal of Geophysical Research:* Solid Earth 120.11, pp. 7508–7525. DOI: 10.1002/2015JB012053. URL: http://dx.doi.org/10.1002/2015JB012053 (cit. on pp. 25, 39, 60).
- Mahaffy, P. R. et al. (1998). "Galileo Probe Measurements of D/H and <sub>3</sub>He/<sub>4</sub>He in Jupiter's Atmosphere". In: *Space Science Reviews* 84.1, pp. 251-263. DOI: 10.1023/A:1005091806594. URL: https://doi.org/10.1023/A:1005091806594 (cit. on p. 9).
- Malkus, W. V. R. (1954). "Discrete Transitions in Turbulent Convection". In: Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences 225.1161, pp. 185–195. DOI: 10.1098/rspa.1954.0196 (cit. on pp. 37, 172).
- Mamajek, E. E. et al. (2015). "IAU 2015 Resolution B3 on Recommended Nominal Conversion Constants for Selected Solar and Planetary Properties". In: ArXiv eprints. arXiv: 1510.07674 [astro-ph.SR] (cit. on pp. 91, 119, 120, 210).

- Marcq, E. (2012). "A simple 1-D radiative-convective atmospheric model designed for integration into coupled models of magma ocean planets". In: Journal of Geophysical Research: Planets 117, E01001. DOI: 10.1029/2011JE003912 (cit. on pp. 28, 41-43, 53, 60, 75, 91, 117, 166, 175, 176).
- Marcq, E. et al. (2017). "Thermal radiation of magma ocean planets using a 1-D radiative-convective model of H<sub>2</sub>O-CO<sub>2</sub> atmospheres". In: *Journal of Geophysical Research: Planets* 122.7, pp. 1539–1553. DOI: 10.1002/2016JE005224. URL: http://dx.doi.org/10.1002/2016JE005224 (cit. on pp. 41–43, 53, 60, 61, 75–78, 91, 98, 117, 127, 175, 176).
- Martin, Rebecca G. and Mario Livio (2012). "On the evolution of the snow line in protoplanetary discs". In: Monthly Notices of the Royal Astronomical Society: Letters 425.1, pp. L6–L9. DOI: 10.1111/j.1745-3933.2012.01290.x. URL: http://dx.doi.org/10.1111/j.1745-3933.2012.01290.x (cit. on pp. 11, 155).
- Marty, Bernard (2012). "The origins and concentrations of water, carbon, nitrogen and noble gases on Earth". In: *Earth and Planetary Science Letters* 313–314, pp. 56–66. DOI: 10.1016/j.epsl.2011.10.040 (cit. on pp. 8, 52, 79, 98, 152, 198).
- Masset, F. and M. Snellgrove (2001). "Reversing type II migration: resonance trapping of a lighter giant protoplanet". In: *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 320.4, pp. L55–L59. DOI: 10.1046/j.1365-8711.2001.04159.x. URL: http://dx.doi.org/10.1046/j.1365-8711.2001.04159.x (cit. on pp. 12, 156).
- Massol, H. et al. (2016). "Formation and Evolution of Protoatmospheres". In: Space Science Reviews, pp. 1–59. DOI: 10.1007/s11214-016-0280-1. URL: http: //dx.doi.org/10.1007/s11214-016-0280-1 (cit. on pp. 45, 52, 60, 179).
- Masursky, Harold (1973). "An overview of geological results from Mariner 9". In: Journal of Geophysical Research 78.20, pp. 4009–4030. DOI: 10.1029/JB078i020p04009. URL: https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/ JB078i020p04009 (cit. on pp. 4, 144).
- Matas, J. et al. (2007). "On the bulk composition of the lower mantle: predictions and limitations from generalized inversion of radial seismic profiles". In: *Geophysical Journal International* 170.2, pp. 764–780. DOI: 10.1111/j.1365-246X.2007.03454.x. URL: http://dx.doi.org/10.1111/j.1365-246X.2007.03454.x (cit. on p. 23).
- Matsui, Takafumi and Yutaka Abe (1984). "The formation of an impact-generated H<sub>2</sub>O atmosphere and its implications for the early thermal history of the Earth". In: Lunar and Planetary Science XV, pp. 517–518 (cit. on pp. 26, 78, 164).
- (1986). "Evolution of an impact-induced atmosphere and magma ocean on the accreting Earth". In: *Nature* 319.6051, 303–305. DOI: 10.1038/319303a0 (cit. on pp. 26, 27, 165).
- (1986). "Formation of a 'magma ocean' on the terrestrial planets due to the blanketing effect of an impact-induced atmosphere". In: *Earth, Moon, and Planets* 34.3, pp. 223–230. DOI: 10.1007/BF00145081 (cit. on pp. 26, 27, 52, 165).
- (1986). "Impact-induced Atmospheres and Oceans on Earth and Venus". In: Nature 322.6079, 526–528. DOI: 10.1038/322526a0 (cit. on pp. 26, 27, 165).
- Maurice, Maxime et al. (2017). "Onset of solid-state mantle convection and mixing during magma ocean solidification". In: *Journal of Geophysical Research: Planets.* DOI: 10.1002/2016JE005250 (cit. on pp. 24, 37, 39, 54, 60, 85, 162, 172).
- Mayor, Michel and Didier Queloz (1995). "A Jupiter-mass companion to a solar-type star". In: Nature 378, pp. 355–359. URL: http://dx.doi.org/10.1038/378355a0 (cit. on pp. 4, 113, 144, 208).
- McDonough, W.F. and S. s. Sun (1995). "The composition of the Earth". In: *Chemical Geology* 120.3, pp. 223–253. DOI: 10.1016/0009-2541(94)00140-4 (cit. on p. 41).

- Meadows, V. S. et al. (2016). "The Habitability of Proxima Centauri b: II: Environmental States and Observational Discriminants". In: Astrobiology (cit. on pp. 5, 146).
- Mei, S. et al. (2002). "Influence of melt on the creep behavior of olivine-basalt aggregates under hydrous conditions". In: *Earth and Planetary Science Letters* 201.3-4, pp. 491–507. DOI: 10.1016/S0012-821X(02)00745-8 (cit. on pp. 39, 57, 173).
- Meier, Roland et al. (1998). "A Determination of the HDO/H<sub>2</sub>O Ratio in Comet C/1995 O1 (Hale-Bopp)". In: Science 279.5352, pp. 842-844. DOI: 10.1126/ science.279.5352.842. URL: http://science.sciencemag.org/content/ 279/5352/842 (cit. on p. 10).
- Moeller, A. and U. Hansen (2013). "Influence of rotation on the metal rain in a Hadean magma ocean". In: *Geochemistry, Geophysics, Geosystems* 14.4, pp. 1226–1244. DOI: 10.1002/ggge.20087 (cit. on pp. 39, 60).
- Mojzsis, Stephen J., T. Mark Harrison, and Robert T. Pidgeon (2001). "Oxygenisotope evidence from ancient zircons for liquid water at the Earth's surface 4,300 Myr ago". In: *Nature* 409, pp. 178–181. URL: http://dx.doi.org/10.1038/ 35051557 (cit. on p. 108).
- Monteux, J., D. Andrault, and H. Samuel (2016). "On the cooling of a deep terrestrial magma ocean". In: *Earth and Planetary Science Letters* 448, pp. 140–149. DOI: http://dx.doi.org/10.1016/j.epsl.2016.05.010. URL: http://www. sciencedirect.com/science/article/pii/S0012821X16302199 (cit. on pp. 26, 164).
- Monteux, J. et al. (2009). "A model of metal-silicate separation on growing planets". In: Earth and Planetary Science Letters 287.3, pp. 353-362. DOI: 10.1016/j. epsl.2009.08.020. URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/ pii/S0012821X09004890 (cit. on p. 19).
- Montmerle, Thierry et al. (2006). "3. Solar System Formation and Early Evolution: the First 100 Million Years". In: *Earth, Moon, and Planets* 98.1, pp. 39–95. DOI: 10.1007/s11038-006-9087-5. URL: https://doi.org/10.1007/s11038-006-9087-5 (cit. on pp. 7, 147).
- Morbidelli, Alessandro and A. Crida (2007). "The dynamics of Jupiter and Saturn in the gaseous protoplanetary disk". In: *Icarus* 191.1, pp. 158–171. DOI: 10.1016/j.icarus.2007.04.001. URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0019103507001480 (cit. on pp. 12, 156).
- Morbidelli, Alessandro et al. (2000). "Source regions and timescales for the delivery of water to the Earth". In: *Meteoritics & Planetary Science* 35.6, pp. 1309–1320. DOI: 10.1111/j.1945-5100.2000.tb01518.x. URL: http://dx.doi.org/10. 1111/j.1945-5100.2000.tb01518.x (cit. on pp. 11, 14, 80, 156).
- Morbidelli, Alessandro et al. (2005). "Chaotic capture of Jupiter's Trojan asteroids in the early Solar System". In: *Nature* 435.7041, pp. 462–465. DOI: 10.1038/ nature03540. URL: https://doi.org/10.1038/nature03540 (cit. on p. 156).
- Morbidelli, Alessandro et al. (2008). "Building giant-planet cores at a planet trap". In: Astronomy & Astrophysics 478.3, pp. 929–937. DOI: 10.1051/0004-6361: 20078546. URL: https://doi.org/10.1051/0004-6361:20078546 (cit. on pp. 11, 155).
- Morbidelli, Alessandro et al. (2012). "Building Terrestrial Planets". In: Annual review of Earth and Planetary Sciences. Ed. by Jeanloz, R. Vol. 40, 251–275. DOI: 10. 1146/annurev-earth-042711-105319 (cit. on pp. 7–10, 13, 52, 79, 80, 103, 110, 147, 153, 156, 198, 204, 206).

- Moreira, Manuel (2013). "Noble Gas Constraints on the Origin and Evolution of Earth's Volatiles". In: *Geochemical Perspectives* 2.2, p. 229. DOI: 10.7185/geochempersp. 2.2 (cit. on p. 19).
- Morishima, Ryuji, Joachim Stadel, and Ben Moore (2010). "From planetesimals to terrestrial planets: N-body simulations including the effects of nebular gas and giant planets". In: *Icarus* 207.2, pp. 517-535. DOI: 10.1016/j.icarus.2009.11.038. URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0019103509004886 (cit. on pp. 14, 157).
- Mueller, N. et al. (2008). "Venus surface thermal emission at 1  $\mu$ m in VIRTIS imaging observations: Evidence for variation of crust and mantle differentiation conditions". In: *Journal of Geophysical Research: Planets* 113.E5. DOI: 10.1029/2008JE003118 (cit. on p. 88).
- Muralidharan, Krishna et al. (2008). "Origin of water in the inner Solar System: A kinetic Monte Carlo study of water adsorption on forsterite". In: *Icarus* 198.2, pp. 400–407. DOI: 10.1016/j.icarus.2008.07.017 (cit. on p. 10).
- Nakajima, Shinichi, Yoshi-Yuki Hayashi, and Yutaka Abe (1992). "A Study on the "Runaway Greenhouse Effect" with a One-Dimensional Radiative-Convective Equilibrium Model". In: Journal of the Atmospheric Sciences 49.23, pp. 2256–2266. DOI: 10.1175/1520-0469(1992)049<2256:ASOTGE>2.0.CO;2 (cit. on pp. 2, 44, 75, 95, 98, 110, 114, 127, 141, 177, 195, 206).
- Nomura, Ryuichi et al. (2011). "Spin crossover and iron-rich silicate melt in the Earth's deep mantle". In: *Nature* 473.7346, pp. 199–202. URL: http://dx.doi.org/10. 1038/nature09940 (cit. on pp. 25, 37, 54).
- Nomura, Ryuichi et al. (2014). "Low Core-Mantle Boundary Temperature Inferred from the Solidus of Pyrolite". In: Science 343.6170, pp. 522-525. DOI: 10.1126/ science.1248186. URL: http://science.sciencemag.org/content/343/6170/ 522 (cit. on pp. 8, 21, 23, 152, 162).
- O'Brien, David P., Alessandro Morbidelli, and Harold F. Levison (2006). "Terrestrial planet formation with strong dynamical friction". In: *Icarus* 184.1, pp. 39–58. DOI: 10.1016/j.icarus.2006.04.005. URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0019103506001278 (cit. on pp. 12, 14, 80, 155–157).
- O'Brien, David P. et al. (2014). "Water delivery and giant impacts in the 'Grand Tack' scenario". In: *Icarus* 239, pp. 74–84 (cit. on p. 79).
- O'Brien, David P. et al. (2018). "The Delivery of Water During Terrestrial Planet Formation". In: Space Science Reviews 214.1, p. 47. DOI: 10.1007/s11214-018-0475-8. URL: https://doi.org/10.1007/s11214-018-0475-8 (cit. on pp. 7, 147).
- O'Neill, Craig et al. (2007). "Melt propagation and volcanism in mantle convection simulations, with applications for Martian volcanic and atmospheric evolution". In: *Journal of Geophysical Research: Planets* 112.E7. DOI: 10.1029/2006JE002799. URL: https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2006JE002799 (cit. on p. 24).
- O'Neill, Craig et al. (2016). "A window for plate tectonics in terrestrial planet evolution?" In: *Physics of the Earth and Planetary Interiors* 255, pp. 80–92 (cit. on p. 88).
- Ormel, C. W. and Klahr, H. H. (2010). "The effect of gas drag on the growth of protoplanets Analytical expressions for the accretion of small bodies in laminar disks". In: Astronomy & Astrophysics 520, A43. DOI: 10.1051/0004-6361/201014903. URL: https://doi.org/10.1051/0004-6361/201014903 (cit. on pp. 8, 147).
- Oskvarek, Jerome D. and Eugene C. JR Perry (1976). "Temperature limits on the early Archaean ocean from oxygen isotope variations in the Isua supracrustal sequence,

West Greenland". In: *Nature* 259, pp. 192–194. URL: http://dx.doi.org/10. 1038/259192a0 (cit. on pp. 27, 165).

- Owen, Tobias and Akiva Bar-Nun (1995). "Comets, Impacts, and Atmospheres". In: Icarus 116.2, pp. 215-226. DOI: 10.1006/icar.1995.1122. URL: http://www. sciencedirect.com/science/article/pii/S0019103585711220 (cit. on p. 10).
- Pan, Vivian, John R. Holloway, and Richard L. Hervig (1991). "The pressure and temperature dependence of carbon dioxide solubility in tholeiitic basalt melts". In: *Geochimica et Cosmochimica Acta* 55.6, pp. 1587–1595. DOI: 10.1016/0016-7037(91)90130-W. URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/001670379190130W (cit. on pp. 47, 181).
- Papale, Paolo (1997). "Modeling of the solubility of a one-component H<sub>2</sub>O or CO<sub>2</sub> fluid in silicate liquids". In: *Contributions to Mineralogy and Petrology* 126.3, pp. 237– 251. DOI: 10.1007/s004100050247 (cit. on pp. 27, 165).
- (1999). "Modeling of the solubility of a two-component H<sub>2</sub>O+CO<sub>2</sub> fluid in silicate liquids". In: American Mineralogist 84.4, pp. 477–492 (cit. on p. 47).
- Phillips, Roger J. et al. (1992). "Impact craters and Venus resurfacing history". In: Journal of Geophysical Research: Planets 97.E10, pp. 15923-15948. DOI: 10.1029/ 92JE01696. URL: https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10. 1029/92JE01696 (cit. on pp. 4, 143).
- Pierrehumbert, Raymond T. (2010). Principles of Planetary Climate. Cambridge: Cambridge Univ. Press (cit. on pp. 5, 114, 131, 144).
- Pierrehumbert, Raymond T. and Eric Gaidos (2011). "Hydrogen Greenhouse Planets Beyond the Habitable Zone". In: *The Astrophysical Journal Letters* 734.1, p. L13. DOI: 10.1088/2041-8205/734/1/L13. URL: http://stacks.iop.org/2041-8205/734/i=1/a=L13 (cit. on pp. 5, 144).
- Pineau, F. and M. Javoy (1994). "Strong degassing at ridge crests: The behaviour of dissolved carbon and water in basalt glasses at 14 °N, Mid-Atlantic Ridge". In: *Earth and Planetary Science Letters* 123.1, pp. 179–198. DOI: 10.1016/0012-821X(94)90266-6 (cit. on p. 52).
- Plesa, A.-C., N. Tosi, and D. Breuer (2014). "Can a fractionally crystallized magma ocean explain the thermo-chemical evolution of Mars?" In: *Earth and Planetary Science Letters* 403.0, pp. 225–235. DOI: http://dx.doi.org/10.1016/j.epsl. 2014.06.034. URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/ S0012821X14004191 (cit. on p. 24).
- Pluriel, W., E. Marcq, and M. Turbet (2018). "Modeling the albedo of Earth-like magma ocean planets with H<sub>2</sub>O-CO<sub>2</sub> atmospheres". In: *Icarus*. DOI: 10.1016/j. icarus.2018.08.023. URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/ pii/S0019103518301763 (cit. on pp. 41-43, 89, 91, 95, 117, 118, 123, 128, 129, 175, 176).
- Poldervaart, Arie (1955). "Chemistry of the Earth's Crust". In: Geological Society of America Special Papers 62, 119–144 (cit. on p. 52).
- Pollack, J. B. et al. (1987). "The case for a wet, warm climate on early Mars". In: *Icarus* 71.2, pp. 203-224. DOI: 10.1016/0019-1035(87)90147-3. URL: http: //www.sciencedirect.com/science/article/pii/0019103587901473 (cit. on pp. 4, 144).
- Poulet, F. et al. (2005). "Phyllosilicates on Mars and implications for early martian climate". In: Nature 438, p. 623. URL: http://dx.doi.org/10.1038/nature04274 (cit. on pp. 4, 9, 144, 154).
- Priestley, C. H. B. (1957). "Convection from the Earth's surface". In: Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences

238.1214, pp. 287-304. DOI: 10.1098/rspa.1957.0001. URL: http://rspa.royalsocietypublishing.org/content/238/1214/287 (cit. on pp. 46, 181).

- (1959). "Turbulent transfer in the lower atmosphere". In: Univ. Chicago Press, Chicago (cit. on pp. 46, 181).
- Ramirez, Ramses M. (2018). "A More Comprehensive Habitable Zone for Finding Life on Other Planets". In: *Geosciences* 8.280. DOI: 10.3390/geosciences8080280 (cit. on pp. 2, 3, 114, 115).
- Ramirez, Ramses M. and Lisa Kaltenegger (2014). "The Habitable Zones of Premain-sequence Stars". In: *The Astrophysical Journal Letters* 797.2, p. L25. DOI: 10.1088/2041-8205/797/2/L25. URL: http://stacks.iop.org/2041-8205/ 797/i=2/a=L25 (cit. on pp. 5, 144).
- (2016). "Habitable Zones of Post-Main Sequence Stars". In: *The Astrophysical Journal* 823.1, p. 6. DOI: 10.3847/0004-637X/823/1/6 (cit. on pp. 5, 144).
- (2018). "A Methane Extension to the Classical Habitable Zone". In: The Astrophysical Journal 858.2, p. 72. DOI: 10.3847/1538-4357/aab8fa. URL: http: //stacks.iop.org/0004-637X/858/i=2/a=72 (cit. on pp. 5, 144).
- Ramirez, Ramses M. and James F. Kasting (2017). "Could cirrus clouds have warmed early Mars?" In: *Icarus* 281, pp. 248–261. DOI: 10.1016/j.icarus.2016.08.016 (cit. on pp. 5, 144).
- Ramirez, Ramses M. et al. (2014). "Can Increased Atmospheric CO<sub>2</sub> Levels Trigger a Runaway Greenhouse?" In: Astrobiology 14.8, pp. 714–731. DOI: 10.1089/ast. 2014.1153. URL: http://dx.doi.org/10.1089/ast.2014.1153 (cit. on p. 110).
- Ramirez, Ramses M. et al. (2018). "The continued importance of habitability studies". In: *arXiv e-prints*. arXiv: 1803.00215 [astro-ph.EP] (cit. on p. 5).
- Rasool, S. I. and C. de Bergh (1970). "The Runaway Greenhouse and the Accumulation of CO<sub>2</sub> in the Venus Atmosphere". In: *Nature* 226.5250, pp. 1037–1039. URL: http: //dx.doi.org/10.1038/2261037a0 (cit. on pp. 44, 80, 177, 195).
- Raymond, Sean N., T. Quinn, and J. I. Lunine (2004). "Making other earths: dynamical simulations of terrestrial planet formation and water delivery". In: *Icarus* 168.1, pp. 1–17. DOI: 10.1016/j.icarus.2003.11.019. URL: http://www. sciencedirect.com/science/article/pii/S0019103503003981 (cit. on pp. 12, 14, 155–157).
- (2005). "Terrestrial Planet Formation in Disks with Varying Surface Density Profiles". In: *The Astrophysical Journal* 632.1, p. 670. DOI: 10.1086/433179. URL: http://stacks.iop.org/0004-637X/632/i=1/a=670 (cit. on pp. 12, 14, 155-157).
- (2006). "High-resolution simulations of the final assembly of Earth-like planets 1: terrestrial accretion and dynamics". In: *Icarus* 183.265-282 (cit. on pp. 14, 157).
- (2007). "High-Resolution Simulations of The Final Assembly of Earth-Like Planets. 2. Water Delivery And Planetary Habitability". In: Astrobiology 7.1, pp. 66–84. DOI: 10.1089/ast.2006.06-0126. URL: http://dx.doi.org/10.1089/ast.2006.06-0126 (cit. on pp. 2, 14, 52, 80, 88, 103, 157, 198, 204).
- Regenauer-Lieb, Klaus, Dave A. Yuen, and Joy Branlund (2001). "The Initiation of Subduction: Criticality by Addition of Water?" In: Science 294.5542, pp. 578– 580. DOI: 10.1126/science.1063891. URL: http://science.sciencemag.org/ content/294/5542/578 (cit. on pp. 110, 207).
- Ribas, I. et al. (2016). "The habitability of Proxima Centauri b. I. Irradiation, rotation and volatile inventory from formation to the present". In: Astronomy & Astrophysics (cit. on pp. 5, 144).

- Ribas, I. et al. (2017). "The full spectral radiative properties of Proxima Centauri". In: Astronomy & Astrophysics 603, A58. DOI: 10.1051/0004-6361/201730582 (cit. on pp. 5, 146).
- Ricard, Yanick, Ondřej Šrámek, and Fabien Dubuffet (2009). "A multi-phase model of runaway core-mantle segregation in planetary embryos". In: *Earth and Planetary Science Letters* 284.1, pp. 144–150. DOI: 10.1016/j.epsl.2009.04.021. URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0012821X09002404 (cit. on pp. 19, 160).
- Righter, Kevin and Michael J. Drake (1999). "Effect of water on metal-silicate partitioning of siderophile elements: a high pressure and temperature terrestrial magma ocean and core formation". In: *Earth and Planetary Science Letters* 171.3, pp. 383–399. DOI: 10.1016/S0012-821X(99)00156-9. URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0012821X99001569 (cit. on pp. 8, 152).
- Ringwood, A. E. (1986). "Terrestrial origin of the Moon". In: *Nature* 322, pp. 323–328. URL: http://dx.doi.org/10.1038/322323a0 (cit. on p. 16).
- Robert, François (2003). "The D/H Ratio in Chondrites". In: *Space Science Reviews* 106.1, pp. 87–101. DOI: 10.1023/A:1024629402715 (cit. on pp. 8, 152).
- Rodriguez, J. Alexis P. et al. (2016). "Tsunami waves extensively resurfaced the shore-lines of an early Martian ocean". In: *Nature Scientific Reports* 6, p. 25106. DOI: 10.1038/srep25106. URL: http://dx.doi.org/10.1038/srep25106 (cit. on pp. 9, 154).
- Ronov, A. B. and A. A. Yaroshevsky (1969). "Chemical Composition of the Earth's Crust". In: American Geophysical Union, 37–57 (cit. on pp. 52, 107).
- Roscoe, R (1952). "The viscosity of suspensions of rigid spheres". In: British Journal of Applied Physics 3.8, p. 267. URL: http://stacks.iop.org/0508-3443/3/i= 8/a=306 (cit. on pp. 39, 40, 57, 59, 173, 174).
- Rosing, Minik T. (2005). "Thermodynamics of life on the planetary scale". In: International Journal of Astrobiology 4.1, pp. 9–11. DOI: 10.1017/S147355040500248X (cit. on pp. 1, 140).
- Rubey, William W. (1951). "Geologic history of sea water: an attempt to state the problem". In: *Geological Society of America Bulletin* 62.9, pp. 1111–1148 (cit. on p. 60).
- Rubie, David C. et al. (2011). "Heterogeneous accretion, composition and core-mantle differentiation of the Earth". In: *Earth and Planetary Science Letters* 301.1, pp. 31– 42. DOI: 10.1016/j.epsl.2010.11.030. URL: http://www.sciencedirect.com/ science/article/pii/S0012821X10007375 (cit. on p. 10).
- Rufu, Raluca, Oded Aharonson, and Hagai B. Perets (2017). "A multiple-impact origin for the Moon". In: *Nature Geoscience* 10. URL: http://dx.doi.org/10.1038/ ngeo2866 (cit. on p. 16).
- Rybach, L (1988). "Determination of heat production rate". In: Handbook of Terrestrial Heat-Flow Density Determination. Ed. by R. Haenel and collaborating authors. Kluwer Academic Publishers, The Netherlands, pp. 125–142 (cit. on p. 41).
- Safronov, V.S. (1978). "The heating of the Earth during its formation". In: *Icarus* 33.1, pp. 3–12. DOI: 10.1016/0019-1035(78)90019-2 (cit. on pp. 51, 110, 206).
- Salvador, A. et al. (2017). "The relative influence of H<sub>2</sub>O and CO<sub>2</sub> on the primitive surface conditions and evolution of rocky planets". In: *Journal of Geophysical Research: Planets* 122.7, pp. 1458–1486. DOI: 10.1002/2017JE005286. URL: http://dx.doi.org/10.1002/2017JE005286 (cit. on pp. 43, 51, 88, 89, 91–93, 98, 99, 103, 104, 106, 107, 110, 115, 117, 119, 121, 123, 124, 127).

- Salvador, A. et al. (2018 sub.). "Early Earth and early Venus: from magma ocean to temperate surface conditions". In: *Icarus* (cit. on pp. 115, 117–119, 121, 123, 124, 127–129).
- Sándor, Zsolt, Wladimir Lyra, and Cornelis P. Dullemond (2011). "Formation of Planetary Cores at Type I Migration Traps". In: *The Astrophysical Journal Letters* 728.1, p. L9. DOI: 10.1088/2041-8205/728/1/L9. URL: http://stacks.iop.org/2041-8205/728/i=1/a=L9 (cit. on pp. 11, 155).
- Sarda, Philippe and David Graham (1990). "Mid-ocean ridge popping rocks: implications for degassing at ridge crests". In: *Earth and Planetary Science Letters* 97.3, pp. 268–289. DOI: 10.1016/0012-821X(90)90047-2 (cit. on pp. 52, 98).
- Sarda, Philippe, Thomas Staudacher, and Claude J. Allègre (1985). "40Ar<sup>36</sup>Ar in MORB glasses: constraints on atmosphere and mantle evolution". In: *Earth and Planetary Science Letters* 72.4, pp. 357-375. DOI: 10.1016/0012-821X(85)90058-5. URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0012821X85900585 (cit. on p. 19).
- Sasaki, Sho and Kiyoshi Nakazawa (1986). "Metal-silicate fractionation in the growing Earth: Energy source for the terrestrial magma ocean". In: Journal of Geophysical Research: Solid Earth 91.B9, pp. 9231-9238. DOI: 10.1029/JB091iB09p09231. URL: https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/ JB091iB09p09231 (cit. on p. 19).
- Sasselov, D. D. and M. Lecar (2000). "On the Snow Line in Dusty Protoplanetary Disks". In: *The Astrophysical Journal* 528.2, p. 995. DOI: 10.1086/308209. URL: http://stacks.iop.org/0004-637X/528/i=2/a=995 (cit. on pp. 11, 155).
- Schaefer, Laura and Bruce Jr. Fegley (2010). "Chemistry of atmospheres formed during accretion of the Earth and other terrestrial planets". In: *Icarus* 208.1, pp. 438–448. DOI: 10.1016/j.icarus.2010.01.026. URL: http://www.sciencedirect.com/ science/article/pii/S001910351000045X (cit. on p. 53).
- Schlichting, Hilke E. and Sujoy Mukhopadhyay (2018). "Atmosphere Impact Losses". In: *Space Science Reviews* 214.1, p. 34. DOI: 10.1007/s11214-018-0471-z. URL: https://doi.org/10.1007/s11214-018-0471-z (cit. on pp. 108, 206).
- Schneider, J. et al. (2011). "Defining and cataloging exoplanets: the exoplanet.eu database". In: Astronomy & Astrophysics 532, A79. DOI: 10.1051/0004-6361/201116713. URL: https://doi.org/10.1051/0004-6361/201116713 (cit. on pp. 116, 209).
- Schubert, Gerald, Donald L. Turcotte, and Peter Olson (2001). Mantle Convection in the Earth and Planets. Cambridge University Press. DOI: 10.1017/CB09780511612879 (cit. on pp. 41, 171).
- Sears, W. D. (1992). "Tidal Dissipation and the Giant Impact Origin for the Moon". In: Lunar and Planetary Science Conference. Vol. 23. Lunar and Planetary Science Conference (cit. on pp. 19, 160).
- Sekhar, Pavithra and Scott D. King (2014). "3D spherical models of Martian mantle convection constrained by melting history". In: *Earth and Planetary Science Letters* 388, pp. 27–37. DOI: 10.1016/j.epsl.2013.11.047. URL: http://www. sciencedirect.com/science/article/pii/S0012821X13006870 (cit. on p. 24).
- Selsis, F. et al. (2007). "Habitable planets around the star Gliese 581?" In: Astronomy & Astrophysics 476.3, pp. 1373–1387. DOI: 10.1051/0004-6361:20078091. URL: http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361:20078091 (cit. on pp. 2–5, 52, 71, 99, 110, 114, 123, 142–144, 200, 204, 214).
- Shields, Aomawa L. et al. (2014). "Spectrum-driven Planetary Deglaciation due to Increases in Stellar Luminosity". In: *The Astrophysical Journal Letters* 785.1, p. L9.

DOI: 10.1088/2041-8205/785/1/L9. URL: http://stacks.iop.org/2041-8205/785/i=1/a=L9 (cit. on pp. 5, 146).

- Shklovskii, I. S. and C. Sagan (1966). *Intelligent life in the universe*. San Francisco: Holden-Day (cit. on pp. 1, 140).
- Siggia, E. D. (1994). "High Rayleigh number convection". In: Annual review of Fluid Mechanics 26, pp. 137–168 (cit. on pp. 37, 57, 90, 172).
- Simpson, G. C. (1927). "Some studies in terrestrial radiation". In: Mem. R. Meteorol. Soc. 11.16, pp. 69–95 (cit. on pp. 2, 110, 114, 127, 141, 206).
- Sleep, N. H., K. Zahnle, and P. S. Neuhoff (2001). "Initiation of clement surface conditions on the earliest Earth". In: *Proceedings of the National Academy of Sciences* 98.7, pp. 3666–3672. DOI: 10.1073/pnas.071045698. URL: http://www.pnas. org/content/98/7/3666 (cit. on p. 107).
- Sleep, Norman H. and Kevin J. Zahnle (2001). "Carbon dioxide cycling and implications for climate on ancient Earth". In: Journal of Geophysical Research: Planets 106.E1, pp. 1373–1399. DOI: 10.1029/2000JE001247. URL: https://agupubs. onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2000JE001247 (cit. on pp. 3, 4, 107, 142, 143).
- Sleep, Norman H., Kevin J. Zahnle, and Roxana E. Lupu (2014). "Terrestrial aftermath of the Moon-forming impact". In: *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 372.2024. DOI: 10.1098/rsta.2013.0172 (cit. on pp. 19, 160).
- Smith, J. V. et al. (1970). "Petrologic history of the moon inferred from petrography, mineralogy and petrogenesis of Apollo 11 rocks". In: Geochimica et Cosmochimica Acta Supplement, Proceedings of the Apollo 11 Lunar Science Conference, 897–925 (cit. on pp. 16, 160).
- Smrekar, Suzanne E., Anne Davaille, and Christophe Sotin (2018). "Venus Interior Structure and Dynamics". In: *Space Science Reviews* 214.5, p. 88. DOI: 10.1007/ s11214-018-0518-1. URL: https://doi.org/10.1007/s11214-018-0518-1 (cit. on pp. 4, 143).
- Solomatov, V. S. (2000). "Fluid Dynamics of a Terrestrial Magma Ocean". In: Origin of the Earth and Moon. Ed. by Canup, R. M. and Righter, K. and collaborating authors, pp. 323–338 (cit. on pp. 21, 33, 36, 39, 53, 89, 161, 169, 172, 173).
- (2007). "9.04 Magma Oceans and Primordial Mantle Differentiation". In: Treatise on Geophysics. Ed. by Gerald Schubert. Elsevier, pp. 91–119 (cit. on pp. 21, 25, 36, 37, 39, 46, 54, 57, 161, 172, 173, 181).
- (2015). "9.04 Magma Oceans and Primordial Mantle Differentiation". In: Treatise on Geophysics (Second Edition). Ed. by Gerald Schubert. Second Edition. Oxford: Elsevier, pp. 81–104 (cit. on pp. 22, 52, 60, 84, 90, 163).
- Solomatov, V. S. and D. J. Stevenson (1993a). "Nonfractional crystallization of a terrestrial magma ocean". In: *Journal of Geophysical Research: Planets* 98.E3, pp. 5391–5406. DOI: 10.1029/92JE02579 (cit. on pp. 21, 161).
- (1993b). "Suspension in convective layers and style of differentiation of a terrestrial magma ocean". In: *Journal of Geophysical Research* 98, pp. 5375–5390. DOI: 10. 1029/92JE02948 (cit. on pp. 21, 161).
- Solomon, Sean C. and James W. Head (1991). "Fundamental Issues in the Geology and Geophysics of Venus". In: Science 252.5003, pp. 252-260. DOI: 10.1126/science. 252.5003.252. URL: http://science.sciencemag.org/content/252/5003/252 (cit. on pp. 4, 143).
- Šrámek, Ondřej et al. (2011). "Thermal evolution and differentiation of planetesimals and planetary embryos". In: *Icarus* 217.1, pp. 339–354. DOI: http://dx.doi.org/ 10.1016/j.icarus.2011.11.021 (cit. on p. 41).

- Stamnes, Knut et al. (1988). "Numerically stable algorithm for discrete-ordinatemethod radiative transfer in multiple scattering and emitting layered media". In: *Appl. Opt.* 27.12, pp. 2502–2509. DOI: 10.1364/AO.27.002502. URL: http: //ao.osa.org/abstract.cfm?URI=ao-27-12-2502 (cit. on pp. 43, 76, 91).
- Stephant, Alice (2014). "Hydrogen isotopic ratio in the inner Solar System: Searching for physical and chemical sources of the planetary water." PhD thesis. Muséum National d'Histoire Naturelle. URL: https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-01118065 (cit. on pp. 14, 157).
- Stephant, Alice, Laurent Remusat, and François Robert (2016). "Water in type I chondrules of Paris CM chondrite". In: *Geochimica et Cosmochimica Acta* 199, pp. 75–90. DOI: 10.1016/j.gca.2016.11.031. URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0016703716306731 (cit. on pp. 14, 157).
- Stephant, Alice et al. (2018). "Terrestrial exposure of a fresh Martian meteorite causes rapid changes in hydrogen isotopes and water concentrations". In: Scientific Reports 8.1, p. 12385. DOI: 10.1038/s41598-018-30807-w. URL: https://doi.org/ 10.1038/s41598-018-30807-w (cit. on pp. 14, 157).
- Stevenson, D. J. (1990). "Fluid dynamics of core formation". In: ed. by H. E. Newsom and J. H. Jones. Oxford Un. Press, pp. 231–249 (cit. on p. 19).
- Stimpfl, M. et al. (2006). "An ångström-sized window on the origin of water in the inner solar system: Atomistic simulation of adsorption of water on olivine". In: *Journal of Crystal Growth* 294.1, pp. 83–95. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2006.05.057. URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022024806005318 (cit. on p. 10).
- Stixrude, Lars et al. (2009). "Thermodynamics of silicate liquids in the deep Earth". In: Earth and Planetary Science Letters 278.3-4, pp. 226-232. DOI: 10.1016/j. epsl.2008.12.006. URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/ pii/S0012821X08007565 (cit. on pp. 24, 54).
- Strom, Robert G., Gerald G. Schaber, and Douglas D. Dawson (1994). "The global resurfacing of Venus". In: *Journal of Geophysical Research: Planets* 99.E5, pp. 10899– 10926. DOI: 10.1029/94JE00388. URL: https://agupubs.onlinelibrary.wiley. com/doi/abs/10.1029/94JE00388 (cit. on pp. 4, 143).
- Takai, Ken et al. (2008). "Cell proliferation at 122°C and isotopically heavy CH<sub>4</sub> production by a hyperthermophilic methanogen under high-pressure cultivation". In: *Proceedings of the National Academy of Sciences* 105.31, pp. 10949–10954. DOI: 10.1073/pnas.0712334105. URL: http://www.pnas.org/content/105/31/10949 (cit. on pp. 108, 206).
- Takei, Yasuko and Benjamin K. Holtzman (2009). "Viscous constitutive relations of solid-liquid composites in terms of grain boundary contiguity: 1. Grain boundary diffusion control model". In: Journal of Geophysical Research: Solid Earth 114.B6 (cit. on pp. 40, 48, 57, 84, 173, 183).
- Tateno, Shigehiko, Kei Hirose, and Yasuo Ohishi (2014). "Melting experiments on peridotite to lowermost mantle conditions". In: Journal of Geophysical Research: Solid Earth 119.6, pp. 4684–4694. DOI: 10.1002/2013JB010616. URL: http://dx. doi.org/10.1002/2013JB010616 (cit. on pp. 21, 25, 37, 54, 162).
- Taylor, Stuart Ross and Scott M. McLennan (1995). "The geochemical evolution of the continental crust". In: *Reviews of Geophysics* 33.2, pp. 241–265. DOI: 10.1029/ 95RG00262. URL: https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10. 1029/95RG00262 (cit. on p. 41).
- Thommes, E.W., M.J. Duncan, and H.F. Levison (2003). "Oligarchic growth of giant planets". In: *Icarus* 161.2, pp. 431–455. DOI: 10.1016/S0019-1035(02)

00043 - X. URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/ S001910350200043X (cit. on pp. 11, 154).

- Titov, Dmitrij V. et al. (2013). "Radiative Energy Balance in the Venus Atmosphere". In: Towards Understanding the Climate of Venus: Applications of Terrestrial Models to Our Sister Planet. Ed. by Bengtsson, Lennart and Bonnet, Roger-Maurice and Grinspoon, David and Koumoutsaris, Symeon and Lebonnois, Sebastien and Titov, Dmitri. Springer New York, 23–53 (cit. on pp. 82, 88, 103, 204).
- Tonks, W. Brian and H. Jay Melosh (1993). "Magma ocean formation due to giant impacts". In: *Journal of Geophysical Research: Planets* 98.E3, pp. 5319–5333. DOI: 10.1029/92JE02726. URL: http://dx.doi.org/10.1029/92JE02726 (cit. on pp. 33, 54, 89, 110, 119, 169, 206, 212).
- Torres, Guillermo et al. (2015). "Validation of 12 Small Kepler Transiting Planets in the Habitable Zone". In: *The Astrophysical Journal* 800.2, p. 99. DOI: 10.1088/ 0004-637X/800/2/99. URL: http://stacks.iop.org/0004-637X/800/i=2/a=99 (cit. on pp. 113, 208).
- Tosi, N., A. C. Plesa, and D. Breuer (2013). "Overturn and evolution of a crystallized magma ocean: A numerical parameter study for Mars". In: *Journal of Geophysical Research: Planets* 118.7, 1512–1528. DOI: 10.1002/jgre.20109 (cit. on p. 24).
- Touboul, Mathieu, Igor S. Puchtel, and Richard J. Walker (2015). "Tungsten isotopic evidence for disproportional late accretion to the Earth and Moon". In: *Nature* 520, p. 530. URL: http://dx.doi.org/10.1038/nature14355 (cit. on p. 16).
- Touboul, Mathieu et al. (2007). "Late formation and prolonged differentiation of the Moon inferred from W isotopes in lunar metals". In: *Nature* 450.7173, pp. 1206– 1209 (cit. on p. 16).
- Tran, H. et al. (2018). "Measurements and modeling of absorption by  $CO_2 + H_2O$  mixtures in the spectral region beyond the CO2  $\nu$ 3-band head". In: *Icarus* 306, pp. 116–121. DOI: 10.1016/j.icarus.2018.02.009 (cit. on pp. 43, 117).
- Tsiganis, K. et al. (2005). "Origin of the orbital architecture of the giant planets of the Solar System". In: Nature 435.7041, pp. 459-461. DOI: 10.1038/nature03539. URL: https://doi.org/10.1038/nature03539 (cit. on p. 156).
- Turbet, M. et al. (2016). "The habitability of Proxima Centauri b II. Possible climates and Observability". In: Astronomy & Astrophysics (cit. on pp. 5, 146).
- Turbet, M. et al. (2017). "Toward a more Accurate Spectroscopy of CO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>O-Rich Atmospheres: Implications for the Early Martian Atmosphere". In: Fourth International Conference on Early Mars: Geologic, Hydrologic, and Climatic Evolution and the Implications for Life. Vol. 2014. LPI Contributions, p. 3063 (cit. on pp. 43, 117).
- Turbet, M. et al. (2018). "Modeling climate diversity, tidal dynamics and the fate of volatiles on TRAPPIST-1 planets". In: Astronomy & Astrophysics. DOI: 10.1051/0004-6361/201731620. URL: https://doi.org/10.1051/0004-6361/201731620 (cit. on pp. 5, 146).
- Urey, Harold C (1955). "The cosmic abundances of potassium, uranium, and thorium and the heat balances of the Earth, the Moon, and Mars". In: Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America 41.3, pp. 127–144. URL: http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC528039/ (cit. on pp. 17, 41, 160, 171).
- Ushikubo, Takayuki et al. (2008). "Lithium in Jack Hills zircons: Evidence for extensive weathering of Earth's earliest crust". In: *Earth and Planetary Science Letters* 272.3, pp. 666–676. DOI: 10.1016/j.epsl.2008.05.032 (cit. on p. 108).
- Valley, John W. et al. (2002). "A cool early Earth". In: *Geology* 30.4, pp. 351–354. DOI: 10.1130/0091-7613(2002)030<0351:ACEE>2.0.CD;2 (cit. on p. 108).

- Villeneuve, Johan, Marc Chaussidon, and Guy Libourel (2009). "Homogeneous Distribution of <sup>26</sup>Al in the Solar System from the Mg Isotopic Composition of Chondrules". In: Science 325.5943, pp. 985–988. DOI: 10.1126/science.1173907. URL: http://science.sciencemag.org/content/325/5943/985 (cit. on pp. 8, 152).
- Vladilo, Giovanni et al. (2013). "The Habitable Zone of Earth-like Planets with Different Levels of Atmospheric Pressure". In: *The Astrophysical Journal* 767.1, p. 65. DOI: 10.1088/0004-637X/767/1/65. URL: http://stacks.iop.org/0004-637X/767/i=1/a=65 (cit. on p. 110).
- Walker, James C. G. (1975). "Evolution of the Atmosphere of Venus". In: Journal of the Atmospheric Sciences 32.6, pp. 1248–1256. DOI: 10.1175/1520-0469(1975) 032<1248:E0TA0V>2.0.C0;2 (cit. on pp. 110, 206).
- (1986). "Impact erosion of planetary atmospheres". In: *Icarus* 68.1, pp. 87–98.
   DOI: 10.1016/0019-1035(86)90076-X. URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/001910358690076X (cit. on p. 79).
- Walker, James C. G., P. B. Hays, and J. F. Kasting (1981). "A negative feedback mechanism for the long-term stabilization of Earth's surface temperature". In: *Journal of Geophysical Research: Oceans* 86.C10, pp. 9776–9782. DOI: 10.1029/ JC086iC10p09776. URL: http://dx.doi.org/10.1029/JC086iC10p09776 (cit. on pp. 2, 4, 141, 143).
- Walsh, Kevin J. et al. (2011). "A low mass for Mars from Jupiter's early gas-driven migration". In: Nature 475, pp. 206–209. URL: http://dx.doi.org/10.1038/ nature10201 (cit. on pp. 12, 156).
- Watkins, Jr. G. H. (1983). "The Consequences of Cometary and Asteroidal Impacts on the Volatile Inventories of the Terrestrial Planets." PhD thesis. Massachusetts Institute of Technology (cit. on p. 79).
- Watson, Andrew J., Thomas M. Donahue, and James C.G. Walker (1981). "The dynamics of a rapidly escaping atmosphere: Applications to the evolution of Earth and Venus". In: *Icarus* 48.2, pp. 150–166. DOI: 10.1016/0019-1035(81)90101-9 (cit. on pp. 108, 206).
- Watson, E. B. and T. M. Harrison (2005). "Zircon Thermometer Reveals Minimum Melting Conditions on Earliest Earth". In: Science 308.5723, pp. 841-844. DOI: 10.1126/science.1110873. URL: http://science.sciencemag.org/content/ 308/5723/841 (cit. on p. 108).
- Way, M. J. et al. (2016). "Was Venus the First Habitable World of our Solar System?" In: *Geophysical Research Letters* 43.16, pp. 8376–8383. DOI: 10.1002/2016GL069790 (cit. on pp. 5, 81, 88, 110, 146, 204).
- Weidenschilling, S. J. (1997). "The Origin of Comets in the Solar Nebula: A Unified Model". In: *Icarus* 127.2, pp. 290-306. DOI: 10.1006/icar.1997.5712. URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0019103597957122 (cit. on pp. 8, 147, 152).
- Weidenschilling, S. J. et al. (1997). "Accretional Evolution of a Planetesimal Swarm". In: *Icarus* 128.2, pp. 429-455. DOI: 10.1006/icar.1997.5747. URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S001910359795747X (cit. on pp. 11, 154).
- Weller, Matthew B. and Adrian Lenardic (2018). "On the evolution of terrestrial planets: Bi-stability, stochastic effects, and the non-uniqueness of tectonic states". In: *Geoscience Frontiers* 9.1, pp. 91–102. DOI: 10.1016/j.gsf.2017.03.001 (cit. on p. 88).
- Wetherill, G. W. (1975). "Radiometric Chronology of the Early Solar System". In: Annual Review of Nuclear Science 25.1, pp. 283–328. DOI: 10.1146/annurev.ns.

25.120175.001435. URL: https://doi.org/10.1146/annurev.ns.25.120175. 001435 (cit. on p. 10).

- Wetherill, G. W. and Glen R. Stewart (1989). "Accumulation of a swarm of small planetesimals". In: *Icarus* 77.2, pp. 330-357. DOI: 10.1016/0019-1035(89) 90093-6. URL: http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/ 0019103589900936 (cit. on pp. 11, 154).
- Wiechert, U. et al. (2001). "Oxygen Isotopes and the Moon-Forming Giant Impact". In: Science 294.5541, pp. 345–348. DOI: 10.1126/science.1063037. URL: http: //science.sciencemag.org/content/294/5541/345 (cit. on p. 16).
- Wilde, Simon A. et al. (2001). "Evidence from detrital zircons for the existence of continental crust and oceans on the Earth 4.4 Gyr ago". In: *Nature* 409, pp. 175–178. DOI: 10.1038/35051550. URL: http://dx.doi.org/10.1038/35051550 (cit. on p. 108).
- Winn, Joshua N. and Daniel C. Fabrycky (2015). "The Occurrence and Architecture of Exoplanetary Systems". In: Annual Review of Astronomy and Astrophysics 53.1, pp. 409–447. DOI: 10.1146/annurev-astro-082214-122246. URL: https://doi. org/10.1146/annurev-astro-082214-122246 (cit. on pp. 116, 209).
- Witham, Fred et al. (2012). "SolEx: A model for mixed COHSCl-volatile solubilities and exsolved gas compositions in basalt". In: Computers & Geosciences 45.0, pp. 87–97. DOI: 10.1016/j.cageo.2011.09.021. URL: http://www.sciencedirect. com/science/article/pii/S0098300411003554 (cit. on p. 47).
- Wolf, Eric T. and O. B. Toon (2015). "The evolution of habitable climates under the brightening Sun". In: Journal of Geophysical Research: Atmospheres 120.12, pp. 5775-5794. DOI: 10.1002/2015JD023302. URL: https://agupubs.onlinelibrary. wiley.com/doi/abs/10.1002/2015JD023302 (cit. on pp. 5, 110, 144).
- Wolf, Eric T. et al. (2017). "Constraints on Climate and Habitability for Earth-like Exoplanets Determined from a General Circulation Model". In: *The Astrophysical Journal* 837.2, p. 107 (cit. on p. 114).
- Wolszczan, A. and D. A. Frail (1992). "A planetary system around the millisecond pulsar PSR1257 + 12". In: Nature 355, pp. 145–147. URL: http://dx.doi.org/ 10.1038/355145a0 (cit. on pp. 4, 144).
- Wood, Bernard J., Jon Wade, and Matthew R. Kilburn (2008). "Core formation and the oxidation state of the Earth: Additional constraints from Nb, V and Cr partitioning". In: *Geochimica et Cosmochimica Acta* 72.5, pp. 1415–1426. DOI: 10. 1016/j.gca.2007.11.036. URL: http://www.sciencedirect.com/science/ article/pii/S0016703708000173 (cit. on p. 10).
- Wood, J. A. et al. (1970). "Lunar anorthosites and a geophysical model of the moon".
  In: Geochimica et Cosmochimica Acta Supplement, Proceeding of the Apollo 11 Lunar Science Conference 1, 965–988 (cit. on pp. 16, 51, 160).
- Wordsworth, Robin (2015). "Atmospheric Heat Redistribution and Collapse on Tidally Locked Rocky Planets". In: *The Astrophysical Journal* 806.2, p. 180. DOI: 10.1088/ 0004-637X/806/2/180 (cit. on pp. 5, 146).
- Wordsworth, Robin and Raymond Pierrehumbert (2014). "Abiotic Oxygen-dominated Atmospheres on Terrestrial Habitable Zone Planets". In: *The Astrophysical Journal Letters* 785.2, p. L20. DOI: 10.1088/2041-8205/785/2/L20. URL: http://stacks. iop.org/2041-8205/785/i=2/a=L20 (cit. on p. 2).
- Yang, Jun, Nicolas B. Cowan, and Dorian S. Abbot (2013). "Stabilizing Cloud Feedback Dramatically Expands the Habitable Zone of Tidally Locked Planets". In: *The Astrophysical Journal Letters* 771.2, p. L45 (cit. on pp. 5, 144, 146).
- Yang, Jun et al. (2014). "Strong Dependence of the Inner Edge of the Habitable Zone on Planetary Rotation Rate". In: The Astrophysical Journal Letters 787.1, p. L2.

DOI: 10.1088/2041-8205/787/1/L2 (cit. on pp. 5, 79, 82, 88, 110, 123, 124, 127, 144, 146, 204, 207, 214, 215).

- Yang, Jun et al. (2016). "Differences in Water Vapor Radiative Transfer among 1D Models Can Significantly Affect the Inner Edge of the Habitable Zone". In: *The Astrophysical Journal* 826.2, p. 222 (cit. on pp. 5, 124, 146, 214).
- Zahnle, Kevin J., J. F. Kasting, and J. B. Pollack (1988). "Evolution of a Steam Atmosphere during Earth's Accretion". In: *Icarus* 74.1, pp. 62–97 (cit. on pp. 27, 165).
- Zahnle, Kevin J., Laura Schaefer, and Bruce Fegley (2010). "Earth's Earliest Atmospheres". In: Cold Spring Harbor Perspectives in Biology 2.10. DOI: 10.1101/ cshperspect.a004895 (cit. on pp. 107, 108).
- Zahnle, Kevin J. et al. (2007). "Emergence of a Habitable Planet". In: Geology and Habitability of Terrestrial Planets. Ed. by E. Kathryn Fishbaugh et al. New York, NY: Springer, pp. 35–78. DOI: 10.1007/978-0-387-74288-5\_3. URL: http://dx.doi.org/10.1007/978-0-387-74288-5\_3 (cit. on pp. 19, 79, 107, 160).
- Zhang, Youxue and Alan Zindler (1993). "Distribution and evolution of carbon and nitrogen in Earth". In: *Earth and Planetary Science Letters* 117.3, pp. 331–345. DOI: 10.1016/0012-821X(93)90088-Q (cit. on p. 107).
- Zhang, Yuanchong et al. (2004). "Calculation of radiative fluxes from the surface to top of atmosphere based on ISCCP and other global data sets: Refinements of the radiative transfer model and the input data". In: Journal of Geophysical Research: Atmospheres 109.D19. DOI: 10.1029/2003JD004457 (cit. on p. 98).
- Zsom, Andras, Lisa Kaltenegger, and Colin Goldblatt (2012). "A 1D microphysical cloud model for Earth, and Earth-like exoplanets: Liquid water and water ice clouds in the convective troposphere". In: *Icarus* 221.2, pp. 603–616. DOI: 10. 1016/j.icarus.2012.08.028 (cit. on pp. 5, 144).
- Zsom, Andras et al. (2013). "Toward the Minimum Inner Edge Distance of the Habitable Zone". In: *The Astrophysical Journal* 778.2, p. 109 (cit. on pp. 5, 110, 114, 144, 204).



## ÉCOLE DOCTORALE

## Sciences mécaniques et énergétiques, matériaux et géosciences (SMEMAG)

Titre : Evolution primitive et habitabilité des planètes rocheuses

Mots clés : Convection, Océan de magma, Habitabilité, Atmosphère, Planètes telluriques, Evolution thermique

Résumé : Les planètes rocheuses achèvent leur formation dans des processus collisionnels très énergétiques. L'énergie libérée lors des impacts majeurs a vraisemblablement fondu la surface des planètes, formant ainsi un océan de roches en fusion. Le refroidissement et la solidification de cet « océan de magma » conditionnent la différenciation chimique du manteau et la distribution des éléments volatils entre les différents réservoirs de la planète. C'est lors de cette phase évolutive, commune aux planètes rocheuses, que l'atmosphère est formée par dégazage des volatils et que les conditions initiales de l'évolution future des planètes se mettent en place. C'est donc une phase évolutive de première importance pour comprendre l'apparition des océans d'eau primitifs, le démarrage de la convection thermique du manteau et l'actuelle diversité des planètes telluriques.

Un modèle numérique couplant l'évolution thermique de l'océan de magma en interaction avec l'atmosphère a été utilisé pour étudier le refroidissement de la planète et les conditions de surface résultantes. Nous avons examiné l'influence du contenu initial en volatil combiné avec la distance orbitale de la planète sur la formation des premiers

océans d'eau à la fin du refroidissement, pour des atmosphères avec et sans nuages. Cette approche a ensuite été étendue aux planètes rocheuses extrasolaires orbitant des étoiles froides.

Le contenu relatif en H<sub>2</sub>O et CO<sub>2</sub> de l'atmosphère peut empêcher la formation d'océans, menant à des planètes ayant une surface solide sans océans d'eau. Des lois d'échelle prédisent la formation d'océans en fonction du contenu initial en volatil. Une épaisse couche nuageuse diminue la température de surface et maintient des conditions clémentes plus proches de l'étoile, rendant ainsi possible la formation d'un océan sur Vénus. Ces conditions de surface tempérées pourraient alors être favorables à l'émergence de la vie et suggèrent qu'en fonction de la couverture nuageuse, la Terre et Vénus pourraient être dans un état relativement similaire à la fin de la phase océan de magma, contrairement à ce qui est généralement admis. Plus la température de l'étoile est froide, et plus la formation d'un océan est restreinte à des flux stellaires faibles. L'effet refroidissant des nuages est atténué pour les étoiles froides autour desquelles la position du bord interne de la zone habitable tend à être indépendante de la couverture nuageuse.

## Title : Early evolution and habitability of rocky planets

Keywords : Convection, Magma Ocean, Habitability, Atmosphere, Rocky Planets, Thermal Evolution

**Abstract :** At the end of the accretion phase, rocky planets grow through high energetic impact processes. Combined with other heat sources, they most likely melt the surface of the planets, forming an ocean of molten rocks. The cooling and solidification of this early so-called magma ocean strongly influences the earliest compositional differentiation and volatile distribution of the planet. Indeed, this common early evolution stage of rocky planets witnesses the degassing of the atmosphere, and sets the initial conditions for the long-term evolution of the planets. It is thus of major importance in understanding the formation of the primitive water ocean, the onset of thermally driven mantle convection, and the diversity of observed terrestrial planets.

Using a coupled magma ocean-atmosphere thermal evolution model, we investigated the cooling of the planet and the surface conditions reached at the end of this early stage. We studied how the initial volatile content and the distance from the star influence the formation of a water ocean at the end of the cooling,

for both cloud-free and cloudy atmospheres. We then extended this approach to planets orbiting colder stars than the Sun.

The relative amount of H<sub>2</sub>O and CO<sub>2</sub> in the atmosphere can preclude water ocean formation, leading to solid surface planets without water ocean. Scaling laws are derived to predict the formation of a water ocean as a function of the initial volatile content. The presence of a thick cloud cover extends clement surface conditions close to the star, and allows for water ocean formation on early Venus. Such temperate conditions might be suitable for the emergence of life and suggest that, depending on the cloud cover, the Earth and Venus might not be as different as previously thought at the end of the magma ocean stage. For stars colder than the Sun, water ocean formation is shifted to lower stellar fluxes. The cooling effect of clouds becomes less efficient for cold stars, where the location of the temperate zone's inner edge tends to be independent of the cloud cover.