



HAL
open science

Étude des variations saisonnières dans la moyenne atmosphère de Titan à partir des données Cassini/CIRS

Christophe Mathe

► **To cite this version:**

Christophe Mathe. Étude des variations saisonnières dans la moyenne atmosphère de Titan à partir des données Cassini/CIRS. Astrophysique [astro-ph]. Université Paris sciences et lettres, 2019. Français. NNT : 2019PSLEO015 . tel-02885352

HAL Id: tel-02885352

<https://theses.hal.science/tel-02885352>

Submitted on 30 Jun 2020

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.



THÈSE DE DOCTORAT
DE L'UNIVERSITÉ PSL

Préparée à l'Observatoire de Paris

**Étude des variations saisonnières dans la moyenne
atmosphère de Titan à partir des données Cassini/CIRS**

Soutenue par

Christophe MATHE

Le 6 septembre 2019

Ecole doctorale n° 127

**Astronomie et Astrophysique
d'Ile de France**

Spécialité

Astronomie et Astrophysique

Composition du jury :

Alain, VIENNE Professeur, OBSPM-IMCCE	<i>Président</i>
Véronique, VUITTON Chargée de recherche, IPAG	<i>Rapporteur</i>
Cyril, CREVOISIER Chargé de recherche, LMD	<i>Rapporteur</i>
Sébastien, LEBONNOIS Directeur de recherche, LMD	<i>Examineur</i>
Pascal, RANNOU Professeur, URCA-GSMA	<i>Examineur</i>
Bruno, BEZARD Directeur de recherche, OBSPM-LESIA	<i>Directeur de thèse</i>
Sandrine, VINATIER Chargée de recherche, OBSPM-LESIA	<i>Co-Directrice de thèse</i>



Résumé

Cette thèse présente mes travaux sur l'étude des changements saisonniers dans la moyenne atmosphère de Titan à partir des données du spectromètre infrarouge CIRS (Composite InfraRed Spectrometer) à bord de la sonde Cassini (fin de mission en septembre 2017). Pendant mes trois ans de thèse, je me suis concentré sur les changements saisonniers des profils verticaux de température et d'abondance des composés photochimiques présents dans l'atmosphère de Titan, à toutes les latitudes, pour des altitudes sondées entre 100 et 550 km, et allant du milieu de l'hiver nord jusqu'au début de l'été nord. L'étude de ces profils verticaux permet de contraindre la dynamique et la chimie atmosphérique.

Les données analysées durant la thèse proviennent du spectromètre infrarouge à transformée de Fourier CIRS, observant entre 590 et 1500 cm^{-1} . Dans cette plage spectrale, les spectres infrarouges présentent les bandes de ro-vibration des composés photochimiques : CH_4 , C_2H_2 , C_2H_4 , C_2H_6 , CH_3CCH , C_3H_8 , C_4H_2 , C_6H_6 , CO_2 , HCN et HC_3N . L'intensité des bandes de ro-vibration d'un composé photochimique dépend à la fois de la température de l'atmosphère et de l'abondance du composé photochimique. En supposant que le profil vertical du méthane est constant en latitude et égal à celui mesuré in situ par l'instrument GCMS de la sonde Huygens, nous déterminons dans un premier temps le profil de température à partir de la bande ν_4 du méthane centrée à 1305 cm^{-1} . Puis nous déterminons les profils d'abondance des composés photochimiques avec le profil de température déterminé précédemment. Les données analysées ont une géométrie dite au limbe : le spectre infrarouge sonde principalement une couche de l'atmosphère dont l'altitude est la distance minimale de la ligne de visée à la surface. Cette géométrie au limbe permet un échantillonnage vertical des profils d'environ 10 à 40 km (dépendant de la distance entre la sonde et Titan) entre 100 et 550 km d'altitude. J'ai aussi utilisé des données au nadir afin de sonder des altitudes plus basses vers 90 km. La détermination de ces différents profils est effectuée avec un code de transfert radiatif raie-par-raie, modélisant des spectres infrarouges à différentes altitudes, couplé à une méthode d'inversion linéaire contrainte, qui modifie itérativement soit le profil de température soit le profil d'abondance afin de réduire l'écart entre le spectre observé et le spectre modélisé.

Pour contraindre au mieux les changements saisonniers de la moyenne atmosphère de Titan, j'ai analysé 56 jeux de données sur les 127 survols effectués par la sonde Cassini. Sont tout d'abord présentés les résultats au niveau des pôles qui montrent d'importantes variations saisonnières en terme de températures et d'abondances. Ces variations sont dues à la présence du vortex polaire qui se forme durant l'hiver et qui se dissipe au printemps. Je montre ensuite les résultats au niveau de l'équateur et des moyennes latitudes qui présentent de faibles variations saisonnières. Ces profils verticaux sont peu impactés par la dynamique atmosphérique, et sont donc comparables aux modèles photochimiques à une dimension, qui ne prennent pas en compte la circulation atmosphérique.

Enfin, une dernière partie traite des variations des rapports isotopiques $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ et $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ dans HCN en utilisant les résultats précédents de température et d'abondance.

Abstract

This thesis presents my work on the study of seasonal changes in the middle atmosphere of Titan using data from the infrared spectrometer CIRS (Composite InfraRed Spectrometer) aboard the Cassini spacecraft (end of the mission in September 2017). During my three years of Ph.D., I focused my study on seasonal changes of the vertical profiles of temperature and abundance of photochemical compounds in Titan's middle atmosphere, at all latitudes, between 100 and 550 km, and from the middle of the northern winter to the early northern summer. The study of these vertical profiles allows us to constrain the atmospheric dynamics and chemistry.

I analyzed data from the Fourier-transform infrared spectrometer CIRS, and I focused my study on infrared spectra between 590 and 1500 cm^{-1} . In this spectral range, infrared spectra show ro-vibrational bands of photochemical compounds : CH_4 , C_2H_2 , C_2H_4 , C_2H_6 , CH_3CCH , C_3H_8 , C_4H_2 , C_6H_6 , CO_2 , HCN and HC_3N . The intensity of the ro-vibrational bands of a molecule depends both on temperature and abundance of the compound. This double dependency leads to some uncertainty on the thermal and abundance vertical profiles retrieved. Assuming that the methane (CH_4) abundance profile is constant with latitude and using the value measured in situ by the GCMS instrument aboard the Huygens probe, we determine the temperature vertical profile from the ν_4 band of methane centered at 1305 cm^{-1} . Then we determine the abundance profiles of photochemical compounds using the temperature vertical profile retrieved previously. The data we used were acquired with a limb geometry : the infrared spectrum mostly probes an atmospheric layer at an altitude equal to that of the line-of-sight above the surface. This limb geometry yields a vertical resolution around 10 to 40 km (depending on the distance between the spacecraft and Titan) between 100 and 550 km. I also used nadir data in order to probe the atmosphere at deeper levels, around 90 km. I used a line-by-line radiative transfer code, modeling infrared spectra at different altitudes, coupled to a constrained linear inversion method that adjusts either the temperature profile or abundance profile in order to reduce the discrepancy between the observed spectrum and the modeled spectrum.

To constrain the seasonal changes in the middle atmosphere of Titan, I have analyzed 56 datasets over the 127 flybys performed by the Cassini spacecraft. I first present and discuss results at the polar regions which present strong seasonal changes in temperature and abundances. These changes are due to the existence of a polar vortex that forms during the winter and vanishes during the spring. I then discuss results in equatorial and mid-latitude regions that present weak seasonal changes. These vertical profiles of temperature and abundances are less affected by the atmospheric dynamics, and they can be compared with one-dimensional photochemical models that do not account for the atmospheric circulation.

The last part deals with the seasonal changes of $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ and $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ isotopic ratios in HCN , using prior results of temperature and abundances.

Remerciements

Pour commencer, je tiens profondément à remercier mes deux directeurs de thèse Dr. Sandrine VINATIER et Dr. Bruno BEZARD, sans qui mon manuscrit et mes travaux n'auraient sûrement pas abouti à ce niveau de recherche. Vos nombreuses remarques et réflexions scientifiques m'ont beaucoup aidé et permis de progresser dans mon travail. Je profite encore de ces lignes pour vous remercier pour vos heures passées à me relire et me corriger. Votre infinie patience, vos encouragements, votre constante jovialité m'ont permis de travailler dans des conditions plus qu'idéale. Je vous remercie car vous êtes des modèles forts sur lesquels je me suis appuyé pour évoluer et prendre exemple, et je mesure la chance que j'ai eu de travailler avec vous. Merci à vous deux.

Je remercie également l'équipe de l'instrument CIRS qui m'a reçu lors des réunions, et m'a donné la chance de montrer mes travaux dès le début. Je tiens à remercier en particulier le groupe de calibration des données pour leur gigantesque effort sur les données et leur retour sur mes questionnements. Pour cela, je remercie Nicolas GORIUS, Dr. Donald E. JENNINGS, Andrei MAMOUTKINE et Ever GUANDIQUE.

Cris DUPONT, Claudine COLON, Patricia NIBERT, Jacqueline PLANCY, Géraldine GAILLANT et Ourdya ACHELHI, sans vous je serais encore le nez dans les documents administratifs. Je vous remercie chaleureusement de votre patience et de l'aide que vous m'avez apporté pendant ces trois ans de thèses (et pour certaines, depuis six ans!). Je tiens à remercier Goran GREBLO, Vassin "Souda" SUDAGAR et Florence HENRY du département informatique pour leur disponibilité à m'aider à résoudre mes problèmes informatiques. Merci aussi Florence de la discussion fort enrichissante sur le métier d'ingénieur de recherche. Puis, à l'accueil du bâtiment 18, il y a Marie MAUDON, qui m'a soutenu et qui m'a fait gardé le sourire tous les jours depuis mes premiers jours de thèse! Merci beaucoup Marie pour tous ces moments passés.

Je remercie chaleureusement l'équipe planétologie du laboratoire pour leur bonne ambiance, ainsi que les discussions passionnantes à la cantine, au bureau. J'ai été très heureux de partager mes années de thèse avec un super groupe de doctorants et post-doc : Doriann, Nicolas, Desh, Benjamin, Pedro, Clément, François, Batiste, Tatiana, Océane, Alice et Van. Les soirées de jeux de société autour de pizzas resteront de très bon souvenirs, merci à vous, vous êtes géniaux! Je tiens aussi à remercier : Béatrice, Isabelle, Marion, Daniel, J-B, Abdallah, mon groupe du tennis avec qui j'ai pu me vider la tête.

La thèse, c'est aussi des moments où l'on se ressource. Et pour ça, mes amis de longues dates ont été là pour moi. C'est une chance que de les avoir, car grâce à eux, ils m'ont permis de m'apaiser afin de repartir d'attaque. Quand je me rapelle des années d'internat avec Seb et Nono, on était bien loin de s'imaginer qu'un jour, l'un de nous trois passerait une thèse! Nous avons tous les trois pris des chemins différents, et pourtant, nous nous retrouvons avec

un plaisir intact. Je me répète, mais vous avez été des soutiens infaillibles tout au long de ces années d'études. Ces moments de ressources ont aussi été des moments musicaux avec le petit groupe de musique créé dans un fameux restaurant loatien, rue gambetta à Lille. Les week-ends de musique à Bourghelles, petit village à quelques kilomètres de Lille, en compagnie de Clément, Maxime (et Mélissa) ont été un défouloir et un plaisir immense. Un jour, nous arriverons à faire une maquette! Je n'oublie pas tous mes autres amis, qui malheureusement je vois moins souvent mais dont le plaisir de vous revoir est inchangé.

Je ne pouvais finir ces remerciements sans parler de ma famille, qui m'a soutenu dans des moments si difficiles. Vous avez cru en moi alors que je ne croyais pas en moi-même, vous ne m'avez jamais abandonné. Pour tout ça, je ne vous serais jamais assez redevable. Je ne vous le montre pas, mais je vous aime de tout mon coeur. Merci Cécile pour le mot que tu m'as écrit, à un moment où j'étais au bas de l'échelle, ce mot m'a beaucoup marqué, merci, merci beaucoup..

Comme vous pouvez le lire, de nombreuses personnes ont participé à leur manière au travail de recherche que je vais vous exposer dans la suite de ce manuscrit. Sans eux, il faut l'avouer, je n'aurais pas eu la force et le courage d'arriver jusqu'au bout. Pour vous tous (liste non-exhaustive), je vous remercie mille fois de ce que vous m'avez apporté. Merci!

Table des matières

Table des matières	v
Table des figures	vii
Liste des tableaux	ix
1 La découverte et l'exploration de Titan	1
1.1 Historique pre-Cassini	1
1.2 La mission Cassini-Huygens	3
1.3 Description de Titan	9
2 L'atmosphère de Titan	13
2.1 La chimie atmosphérique	13
2.2 Physique de l'atmosphère	22
2.3 Les objectifs scientifiques de la thèse	27
3 Analyse des spectres thermiques	29
3.1 Spectroscopie infrarouge	29
3.2 Transfert radiatif	36
4 Extraction et post-traitement des données	41
4.1 Le spectromètre infrarouge : CIRS	41
4.2 La base de données <i>cirsdata</i>	47
4.3 Amélioration du rapport signal-à-bruit des données	57
4.4 Correction du continuum négatif	60
5 Méthodologie d'analyse	67
5.1 Méthode d'inversion	67
5.2 Description du code informatique	70
5.3 Inversion de la température	70
5.4 Inversion des abondances des composés photochimiques	73
5.5 Validation des inversions	75
5.6 Détermination du profil solution	78
5.7 Limite supérieure : validation par le χ^2	79
6 Résultats des inversions	83
6.1 Profils de température	83
6.2 Influence de l'abondance du méthane	86
6.3 Profils d'abondance	89
7 Analyse des moyennes et basses latitudes	101

7.1	Evolution des profils de température et d'abondance	101
7.2	Comparaison avec les modèles photochimiques	101
8	Analyse du pôle Nord	107
8.1	Hiver nord	107
8.2	Autour de l'équinoxe de printemps nord	108
8.3	Printemps nord	108
8.4	Observation possible d'une onde d'inertie-gravité	109
9	Analyse du Pôle Sud	115
9.1	Autour de l'équinoxe d'automne sud	115
9.2	Automne sud	116
10	Rapports isotopiques	119
10.1	Rapport isotopique $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ dans HCN	120
10.2	Rapport isotopique $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ dans HCN	121
10.3	Spike à 706 cm^{-1}	122
11	Conclusions et perspectives	125
11.1	Conclusions	125
11.2	Perspectives	126
A	Annexes	129
A.1	Projection de la ligne de visée	129
A.2	Livres	131
A.3	Articles	132
A.4	Codes informatiques	192
	Bibliographie	202

Table des figures

1	Peinture de Christiaan Huygens	1
2	Plaque photographique de Titan de l'atmosphère de Titan, 1944	2
3	Schéma de l'orbiteur Cassini et de ses instruments scientifiques	5
4	Schéma du module de descente Huygens et de ses intruments scientifiques	6
5	Résumé des flybys effectués durant la mission Cassini-Huygens	8
6	Image de Titan en vraies couleurs	10
7	Image de la surface de Titan prise par l'instrument DISR	11
8	Chemins de formation des hydrocarbures	17
9	Chemins de formation des nitriles	19
10	Illustration d'une théorie de formation des aérosols	21
11	Image de Titan prise par la caméra narrow-angle de l'orbiter Cassini à 338 nm	21
12	Profil de température mesuré par HASI	23
13	Simulation numérique de la fonction de courant dans l'atmosphère	25
14	Vents zonaux dans la moyenne atmosphère entre 2005 et 2009	26
15	Schéma des différents processus dynamiques dans la région polaire d'hiver	26
16	Schéma des transitions permises pour une molécule polyatomique linéaire	31
17	Spectre théorique de la bande ν_5 de l'acétylène (C_2H_2)	31
18	Dépendance spectrale de la profondeur optique moyennée (Vinatier et al., 2012)	35
19	Modification du fichier spectral des aérosols	35
20	Illustration du chemin optique d'une observation au nadir	37
21	Illustration du chemin optique avec une géométrie dite au limbe	39
22	Diagramme conceptuel du spectromètre infrarouge CIRS	42
23	Plans focaux de l'instrument CIRS	43
24	Illustration des fonctions de fenêtrage utilisées par CIRS	45
25	Ecart-type d'une sélection de spectres FP3 entre 600 et 1100 cm^{-1} , pour T65	47
26	Similaire à la figure 25, pour le flyby T90	47
27	Fichier NESR modifié	48
28	Critères de sélection des spectres observés	49
29	Visualisation d'un spectre observé dans la base de donnée <i>cirsdata</i>	50
30	Visualisation de la moyenne des spectres sélectionnés	50
31	Diagramme de la géométrie d'observation du flyby T106	51
32	Projection des détecteurs sur l'atmosphère de Titan pendant une observation au limbe	52
33	Diagramme de la géométrie de l'observation lors du flyby T64	57
34	Radiance intégrée sur la plage spectrale 1250-1350 cm^{-1}	58
35	Similaire à la figure 34 après avoir ajouté un décalage en altitude	59
36	Continuums négatifs des spectres observés de T23	60
37	Diagramme de la géométrie d'observation pendant le flyby T71	61
38	Relation entre le spectre corrompu et la référence	62
39	Schéma du modèle de la correction à appliquer	64
40	Similaire à la figure 38 après avoir corrigé le spectre corrompu	64

41	Résultat de la correction sur les spectres observés de T23	65
42	Impacte de la correction sur l'inversion de la température	66
43	Schéma de l'algorithme du code informatique de transfert radiatif et d'inversion	71
44	Gamme spectrale du plan focal FP4 et les molécules observées	72
45	Gamme spectrale du plan focal FP3 et les molécules observées	74
46	Ajustement des spectres observés vers 729 cm^{-1} , pour T24	76
47	Evolution de la somme des rms des spectres en fonction de l'itération, pour T24	77
48	Kernel du C_2H_2 à la fréquence 729 cm^{-1} , pour T24	77
49	Kernel du HC_3N à la fréquence 663 cm^{-1} , pour T16	78
50	Ensemble des profils solutions de C_2H_2 , pour T24	80
51	Spectres synthétiques à haute altitude, pour C_2H_2 lors du flyby T24	81
52	Rms en fonction du rapport de mélange de C_6H_6	81
53	Profils de température extraits pendant ma thèse	87
54	Impacte de l'abondance de méthane sur les inversions	88
55	Profils d'abondance de C_2H_2 déduits pendant ma thèse	91
56	Profils d'abondance de C_2H_4 déduits pendant ma thèse	92
57	Profils d'abondance de C_2H_6 déduits pendant ma thèse	93
58	Profils d'abondance de C_3H_4 déduits pendant ma thèse	94
59	Profils d'abondance de C_3H_8 déduits pendant ma thèse	95
60	Profils d'abondance de C_4H_2 déduits pendant ma thèse	96
61	Profils d'abondance de C_6H_6 déduits pendant ma thèse	97
62	Profils d'abondance de HCN déduits pendant ma thèse	98
63	Profils d'abondance de HC_3N déduits pendant ma thèse	99
64	Profils d'abondance de CO_2 déduits pendant ma thèse	100
65	Comparaison des profils de C_2H_2 , C_2H_6 et C_3H_8 aux modèles photochimiques.	105
66	Comparaison des profils de HCN, C_6H_6 et C_3H_4 aux modèles photochimiques.	105
67	Comparaison des profils de HC_3N et C_4H_2 aux modèles photochimiques.	106
68	Comparaison des profils de CO_2 et C_2H_4 aux modèles photochimiques.	106
69	Evolution temporelle des profils d'abondance dans la région polaire nord	110
70	Simulation numérique montrant une cellule résiduelle	111
71	Oscillation sur le profil de température lors du flyby T64	113
72	Evolution temporelle des profils d'abondance dans la région polaire sud	118
73	Détection des raies spectrales des isotopologues H^{13}CN et HC^{15}N	120
74	Rapports isotopiques $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ dans HCN en fonction de la latitude	122
75	Rapports isotopiques $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ dans HCN en fonction de la latitude	123
76	Ecart-type moyen de la radiance pour les spectres au limbe pendant le flyby T96	124
77	Zoom de la figure 76 dans la gamme spectrale $702\text{-}714\text{ cm}^{-1}$	124
78	Latitudes traversées par la ligne de visée en fonction de l'altitude, pour T110	130
79	Similaire à la figure 78, pour le flyby T117	130

Liste des tableaux

1	Paramètres physiques et orbitaux de Titan	12
2	Composés photochimiques observés dans l'atmosphère de Titan	14
3	Liste des observations analysées pendant ma thèse	56
4	Liste des valeurs du rapport isotopique $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ dans HCN	121
5	Liste des valeurs du rapport isotopique $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ dans HCN	122

La découverte et l'exploration de Titan

1

Sommaire

1.1	Historique pre-Cassini	1
1.2	La mission Cassini-Huygens	3
1.2.1	L'orbiteur Cassini	3
1.2.2	Le module de descente Huygens	4
1.2.3	Détails de la mission	7
1.3	Description de Titan	9
1.3.1	Sa formation	9
1.3.2	Son orbite	9
1.3.3	Son atmosphère	9
1.3.4	Sa surface	11
1.3.5	Le cycle du méthane	11
1.3.6	Son intérieur	11

1.1 Historique pre-Cassini

Le 25 mars 1655, Christiaan Huygens, élève de Jean-Dominique Cassini, découvre le premier satellite de Saturne qu'il nomma *Luna Saturni*, *La Lune de Saturne*. En 1850, John Herschel, fils de William Herschel, proposa une nouvelle nomenclature pour les nombreuses lunes de Saturne découvertes depuis Huygens : attribuer les noms des frères et soeurs de Cronos¹, ou Saturne dans la mythologie romaine, appelés Titans. *Luna Saturni* fut ainsi nommé Titan. Ce satellite est le plus gros, avec un rayon de $2574 \pm 0,09$ km, du système saturnien.

Le 13 août 1907, un astronome espagnol du nom de José Comas y Solá observe une différence de luminosité sur Titan : les bords sont plus sombres que le centre, ce qui met en évidence la présence d'une atmosphère autour de Titan. Il publia son observation un an après dans la revue : *Astronomische Nachrichten*. Pourtant, cette découverte ne lui sera pas attribuée, cette observation n'ayant pas été reproduite par d'autres astronomes. Et pour cause, José Comas y Solá avait travaillé à la limite de sensibilité de son instrument de 38



FIGURE 1 – Peinture de Christiaan Huygens réalisée par Caspar Netscher en 1671 visible au musée d'Histoire de La Haye (Pays-Bas).

1. Fils d'Ouranos (le Ciel) et de Gaïa (la Terre) dans la mythologie grecque.

cm de diamètre. Même si l'astronome espagnol était connu pour son incroyable acuité visuelle, le fait qu'aucun autre astronome contemporain n'ait pu voir ce phénomène, ne peut valider la découverte de l'atmosphère sur Titan.

Cette question de l'existence d'une atmosphère autour d'un satellite va être suggérée tout d'abord par la théorie. L'astrophysicien anglais Sir James Jeans appliqua sa théorie dynamique des gaz (1904) sur le cas de Titan en 1925. Pour qu'une atmosphère persiste autour d'un corps céleste, il est nécessaire d'avoir : un corps hôte massif (force de gravité importante qui retient les molécules de l'atmosphère), des molécules atmosphériques lourdes (leur vitesse d'agitation thermique atteint plus difficilement la vitesse d'échappement²) et une atmosphère froide (vitesse thermique des molécules lente³). Par ses calculs, il avança que Titan pouvait posséder une atmosphère, composée de molécules lourdes comme l'argon, le néon, le diazote et le méthane (l'hydrogène et l'hélium, molécules plus légères, s'échapperaient de l'atmosphère).

La réponse à la question de la présence d'une atmosphère sur Titan arrivera le 21 août 1944 avec un article de Gérard Kuiper : "*Titan : A satellite with an atmosphere*" (Kuiper, 1944). Il a placé un spectrographe derrière son télescope de 2.08 m, et a acquis plusieurs plaques photographiques à différentes longueurs d'onde (spectroscopie). Dans cet article, nous pouvons observer une légère bande blanche vers 7260 Å sur la plaque photographique de Titan (fig.2), correspondant à une bande d'absorption du méthane. Cette observation spectroscopique fut la preuve scientifique de la présence d'une atmosphère sur Titan.

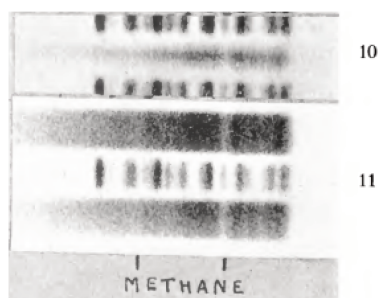


FIGURE 2 – Plaque photographique de Titan (n°10) et de Jupiter (N°11) dans la plage spectrale du méthane. Les traits noirs servent de repère, le spectre de Titan est la zone grisée au centre de la bande n°10. Les deux traits noirs au dessus de "METHANE" correspondent aux raies à 6190 et 7260 Å. Ces plaques sont des négatifs, les bandes d'absorptions sont les zones blanchies.

Au début de l'exploration spatiale, le premier objet s'approchant de Titan fut la sonde d'exploration spatiale Pioneer 11 (NASA) le 2 septembre 1979 (Smith, 1980), puis vinrent les sondes Voyager 1, le 12 Novembre 1980, et Voyager 2 en août 1981. La sonde Voyager 1 passa au plus près de Titan (~ 4000 km) après un léger détournement volontaire de son trajet initial. Titan révèle pour la première fois au monde scientifique son épaisse atmosphère orangée. Cependant, la surface resta cachée par l'atmosphère. Il faudra attendre la fin du xx^e siècle pour avoir une mission spatiale dédiée à l'étude du système kronien : la mission *Cassini-Huygens*.

2. La vitesse d'échappement atmosphérique est la vitesse limite où les molécules s'échappent de l'atmosphère. L'équation est la suivante : $v_{lib} = \sqrt{\frac{2GM}{R}}$ où G est la constante gravitationnelle universelle, M est la masse de Titan et R est le rayon de Titan.

3. L'agitation thermique est proportionnelle à $\sqrt{\frac{T}{m}}$, où T est la température et m la masse de la molécule.

1.2 La mission Cassini-Huygens

La mission Cassini-Huygens a été initiée par Daniel Gautier (ESA-Fr), Wing Ip (Ge) et Toby Owen (NASA-USA) en 1982, suite à l'engouement des résultats de Voyager 1 et 2 lors de leurs passages près de Titan au début des années 80. Cette mission spatiale avait pour objectifs scientifiques d'étudier le système kronien : Saturne, ses anneaux, ses satellites glacés. Concernant Titan, les objectifs scientifiques portaient sur la caractérisation de son atmosphère et de sa surface, résumés ci-dessous⁴ :

- mesurer la distribution des abondances des composés photochimiques de l'atmosphère, et déterminer leurs rapports isotopiques.
- rechercher de nouvelles molécules organiques complexes.
- étudier les sources d'énergie de la chimie organique.
- étudier la formation et la composition des aérosols.
- étudier la haute atmosphère, son ionisation, ainsi que son rôle en tant que source de matière neutre et ionisée pour la magnétosphère de Saturne.
- mesurer les vents et la température globale.
- étudier la physique des nuages, la circulation générale et les effets saisonniers dans l'atmosphère.
- rechercher la présence d'éclairs.
- déterminer l'état physique, la topographie et la composition de la surface, pour en déduire la structure interne.

Pour répondre à ces objectifs scientifiques, les agences spatiales américaine (NASA), européenne (ESA) et italienne (ASI) ont mis en oeuvre leurs moyens financiers et leurs expertises pour fabriquer deux sondes spatiales : un orbiteur nommé Cassini (en l'honneur du découvreur des divisions des anneaux de Saturne) et un module de descente nommé Huygens (en l'honneur du découvreur de Titan). L'orbiteur Cassini avait pour but d'analyser sur une longue période le système kronien, et donc en particulier Titan, tandis que le module de descente Huygens était destiné à atterrir sur Titan pour caractériser sa surface et son atmosphère lors de la descente.

1.2.1 L'orbiteur Cassini

L'orbiteur Cassini a été construit au Jet Propulsion Laboratory (JPL), financé principalement par la NASA et par l'Agence Spatiale Italienne (ASI). L'orbiteur mesurait 6,7 m de haut, plus de 4 m de large et pesant 5,712 tonnes, carburant compris. A son bord, la sonde spatiale Cassini était munie de 12 instruments scientifiques comprenant : des spectromètres de masse pour le plasma (CAPS : CAssini Plasma Spectrometer), ionique et neutre (INMS : Ion and Neutral Mass Spectro-meter); 3 ensembles d'antennes électriques, magnétiques et sonde de Langmuir (RPWS : Radio and Plasma Wave Science); un magnétomètre (MAG : Dual Technique Magnetometer); un imageur magnétosphérique (MIMI : Magnetospheric Imaging Instrument); un spectrographe UV (UVIS : Ultraviolet Imaging Spectrograph); un duo de caméras à filtres UV/Vis/IR (ISS : Imaging Science Subsystem); un spectro-imageur Vis et IR (VIMS : Visible and Infrared Mapping Spectrometer); un spectromètre thermique IR moyen et lointain (CIRS : Composite InfraRed Spectrometer); un altimètre et imageur radar (RADAR : Radio Detection and Ranging Instru-

4. Informations trouvées sur le site du CNES : https://cassini-huygens.cnes.fr/fr/CASSINI/Fr/GP_mission.htm

ment); une expérience radio (RSS : Radio Science Subsystem); un analyseur de poussières (CDA : Cosmic Dust Anal-yseur).

Sur la figure 3, nous pouvons constater que les instruments scientifiques entourent la sonde spatiale Cassini, entraînant ainsi l'ordre du temps alloué pour chaque instrument lors des flybys d'objets kroniens. La sonde devait alors se repositionner pour que chaque instrument puisse prendre ses mesures. Les opérations scientifiques étaient donc prises séquentiellement et non simultanément.

1.2.2 Le module de descente Huygens

Le module de descente Huygens a été construit et financé principalement par l'ESA. Le module de 350 kg était attaché sur l'orbiteur Cassini pendant toute la durée du voyage Terre-Saturne. Il était équipé d'un grand cône en céramique pour le protéger de la chaleur engendrée par sa descente sur Titan (pouvant atteindre 12 000°C), et de parachutes pour le freiner afin qu'il se pose en douceur sur le sol titanien. La sonde spatiale Huygens était munie de 6 instruments scientifiques (figure 4) comprenant : un collecteur d'aérosols (ACP : Aerosol Collector and Pyrolyser); un oscillateur ultra-stable (DWE : Doppler Wind Experiment); un polarimètre et imageur Vis/IR (DISR : Descente Imager/Spectral Radiometer); un spectromètre de masse couplé à un chromatographe en phase gazeuse (GCMS : Gas Chromatograph and Mass Spectrometer); un ensemble de capteurs de température, pression, densité et conductivité (HASI : Huygens Atmospheric Structure Instrument); un ensemble d'accéléromètre, pénétrromètre, capteur d'inclinaison, réfractomètre, capteur thermique/densité/permittivité électrique/acoustique (SSP : Surface Science Package).

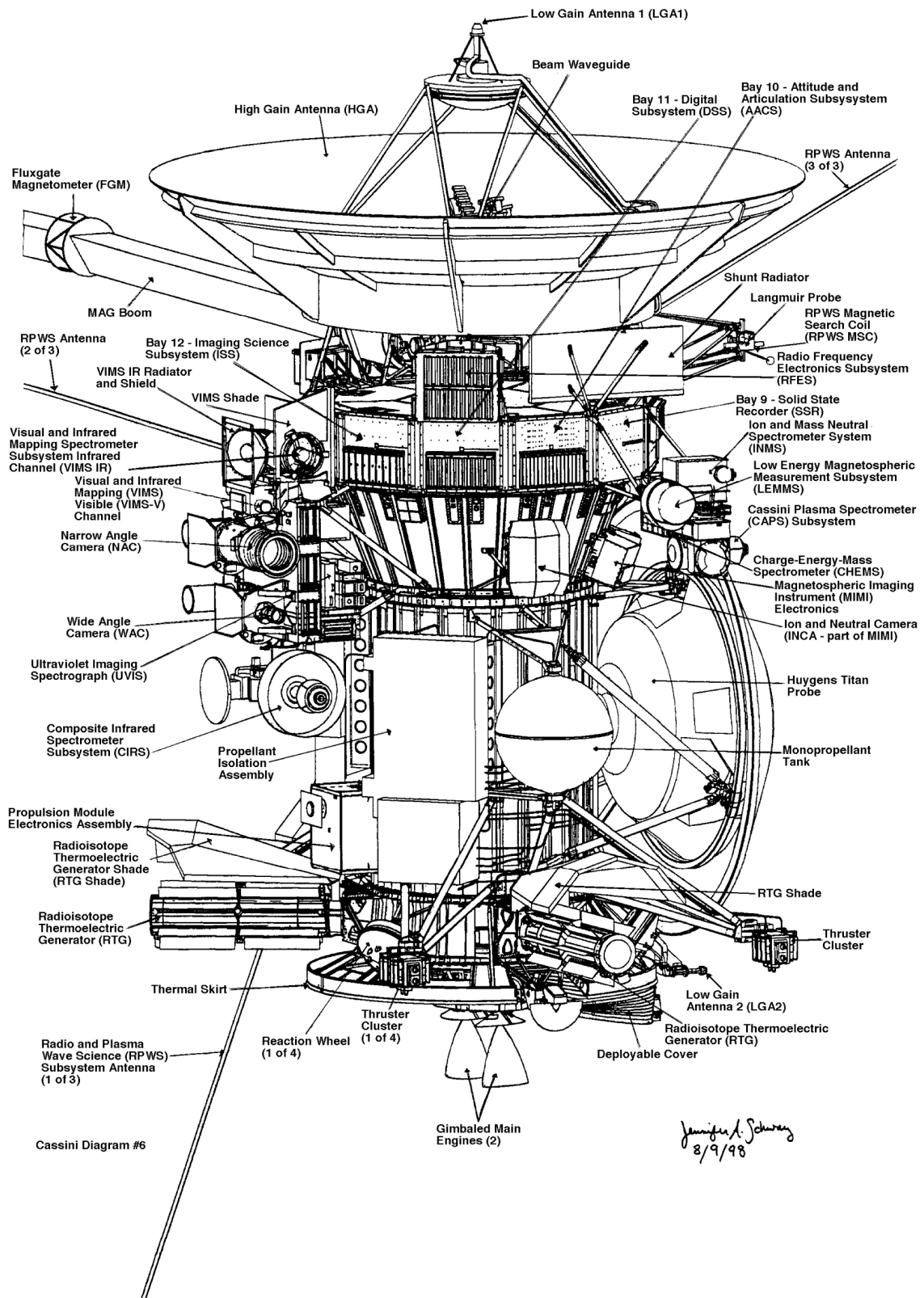


FIGURE 3 – Schéma de l'orbiteur Cassini et de ses instruments scientifiques. On peut observer le module de descente Huygens accroché à la sonde Cassini à droite. Crédit : NASA Jet Propulsion Laboratory.

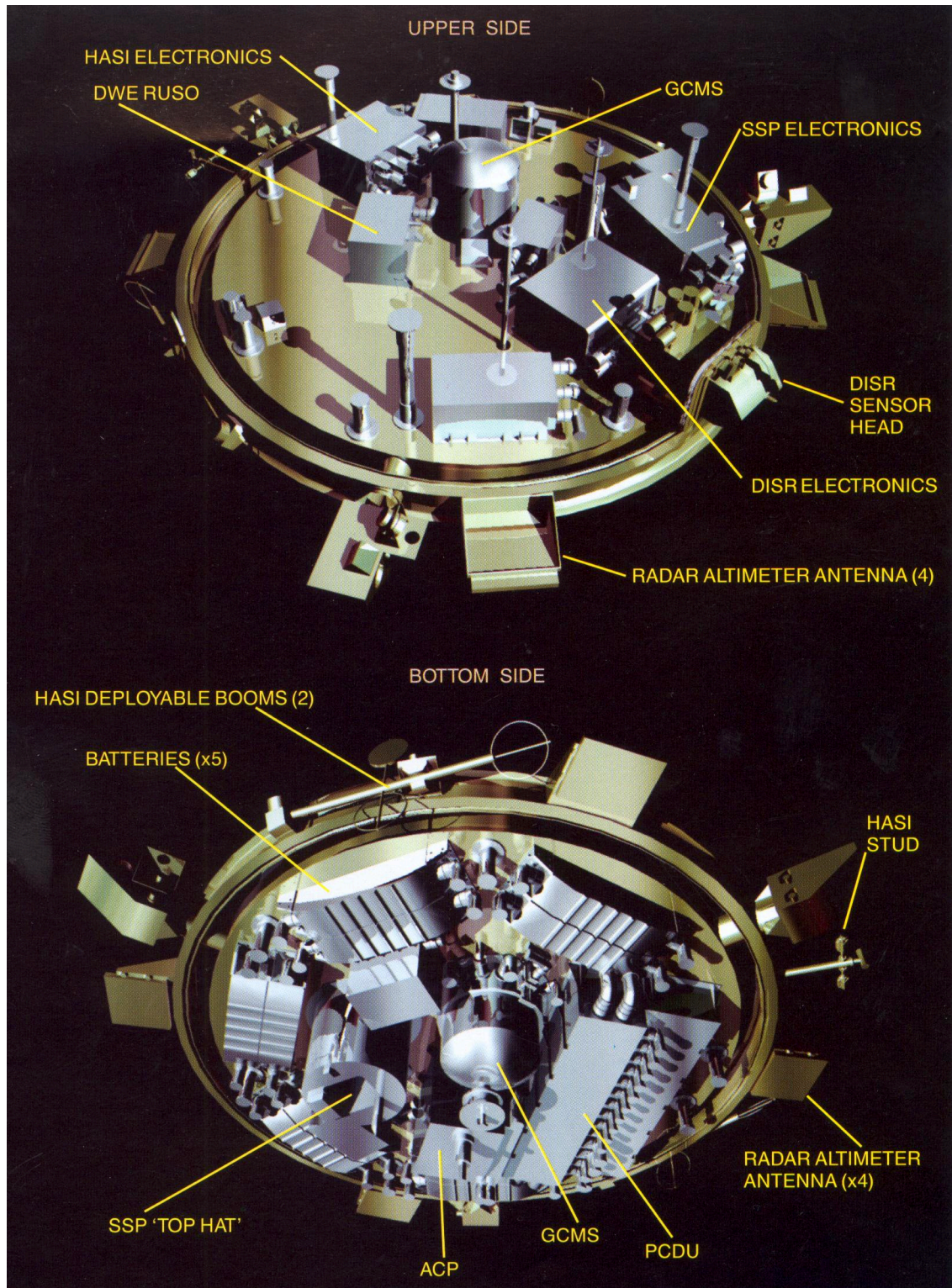


FIGURE 4 – Schéma du module de descente Huygens et de ses instruments scientifiques. Le bouclier thermique en céramique n'est pas représenté. Crédit : "The Huygens mission", ESA bulletin 77.

1.2.3 Détails de la mission

La mission Cassini-Huygens a été lancée depuis Cap Canaveral (Floride, USA) le 15 octobre 1997 par un lanceur Titan IV/B. Après un voyage de 7 ans avec plusieurs assistances gravitationnelles (Vénus, Terre, Vénus, Jupiter), la sonde Cassini-Huygens se met en orbite autour de Saturne le 1er juillet 2004. Le premier survol de Titan (T0) a été dédié à la calibration des instruments. Il faudra attendre le survol "TA", le 26 octobre 2004, pour obtenir les premières mesures scientifiques, dont le résultat surprenant fait par INMS qui observe des molécules plus lourdes que le benzène à 1174 km proche de l'homopause de Titan (Waite Jr. et al., 2005). Plus tard le 25 décembre 2004, le module de descente Huygens est séparé de la sonde Cassini et s'apprête à faire un voyage de vingt jours en direction de Titan. Le 14 janvier 2005, le module Huygens arrive à hauteur de l'atmosphère de Titan à ~ 1200 km d'altitude et entreprend une descente de deux heures et vingt-huit minutes avant d'atteindre la surface de Titan permettant l'étude *in-situ* de l'atmosphère. Le module Huygens atterrit sur la surface de Titan aux coordonnées 10°S et 163°E, dont l'aspect de la surface de Titan a été pris par les caméras de l'instrument DISR (voir figure 7). Il est resté en fonctionnement pendant plus de trois heures après son atterrissage, mais il n'a pu envoyer des données que pendant une heure et douze minutes avant que la sonde Cassini passe sous l'horizon de Titan. Parmi les principaux résultats de la sonde Huygens que nous utilisons dans notre code de transfert radiatif, nous pouvons citer : la mesure du profil d'abondance du méthane par l'instrument GCMS (Niemann et al., 2010) et le profil de température mesuré par l'instrument HASI (Fulchignoni et al. (2005), voir section 2.2.1). La sonde Cassini, délestée de son compagnon de route, a continué d'analyser le système kronien avec différentes orbites⁵ jusqu'au 15 septembre 2017 avant de plonger dans l'atmosphère de Saturne pour sa destruction, après deux extensions de mission : "Equinox mission" en 2008-2010, "Solstice mission" en 2010-2017. L'orbiteur Cassini a donc analysé Titan sur environ une demi-année titannienne, entre le milieu de l'hiver nord et le début de l'été nord. La figure 5 résume les différents flybys des objets kroniens effectués durant la mission Cassini-Huygens.

5. Titan a servi de fronde gravitationnelle grâce à sa masse importante comparée aux autres satellites de Saturne pour modifier les orbites de la sonde Cassini.

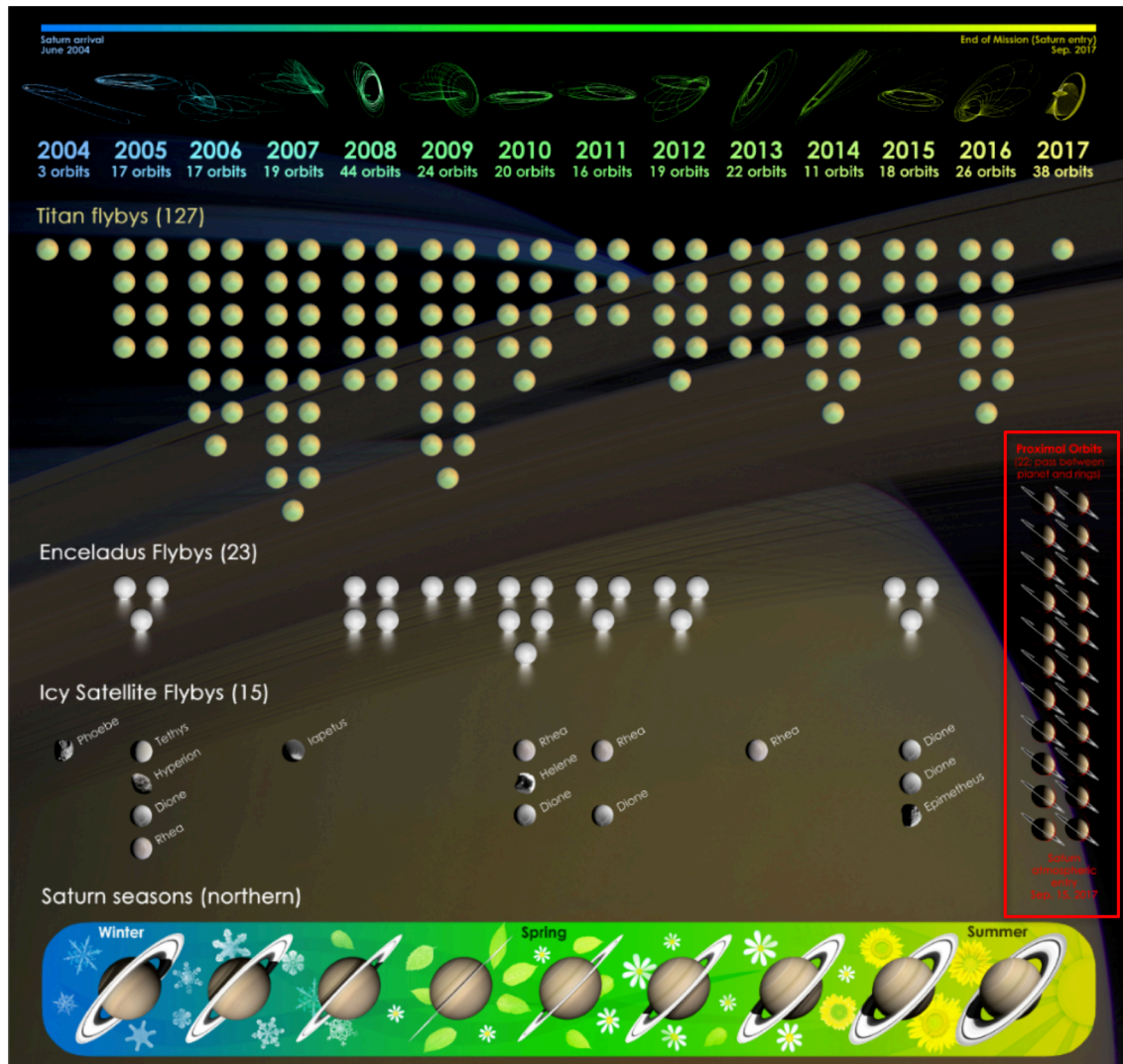


FIGURE 5 – Résumé des différents flybys de Saturne, Titan, Encelade et des autres satellites glacés de Saturne effectués durant la mission Cassini-Huygens. Crédit : NASA/JPL-Caltech.

1.3 Description de Titan

1.3.1 Sa formation

Titan se serait formé dans la nébuleuse circumplanétaire de Saturne. La matière accrétée a ainsi formé l'intérieur de Titan, dont la composition est supposée être un mélange de roche, de glace et de composés volatiles (NH_3 , CH_4 , CO_2 , H_2S). Concernant l'atmosphère de Titan, sa formation reste encore débattue à l'heure actuelle par deux grands scénarios. Soit cette atmosphère a été le résultat de l'accrétion de la nébuleuse circumplanétaire, comme pour l'intérieur de Titan (Lunine and Stevenson, 1987). Cette atmosphère serait alors riche en ammoniac qui serait ensuite photodissocié et converti en azote moléculaire N_2 . Soit cette atmosphère serait apparue à la suite du Grand Bombardement Tardif⁶ (GBT), dont les impacts des astéroïdes sur la couche de glace extérieure aurait convertit l'ammoniaque contenu dans cette couche en diazote (Sekine et al., 2011). Mais au vu de l'épaisse atmosphère de Titan, il semble peu probable que le GBT soit la seule explication de la formation de l'atmosphère de Titan, et qu'à cette époque, l'atmosphère devait déjà exister. Néanmoins, cet événement a dû affecter l'évolution de l'atmosphère, comme une érosion de l'atmosphère (Korycansky and Zahnle (2011), Ishimaru et al. (2011)).

1.3.2 Son orbite

Titan orbite autour de Saturne à une distance moyenne de 1,223 millions de kilomètres, soit environ 20 rayons de Saturne. Il effectue une révolution autour de Saturne en 15,945 jours, présentant toujours la même face à Saturne (rotation synchrone) comme la Lune avec la Terre. Ainsi, une journée sur Titan dure 15,945 jours. L'axe de rotation de Titan est quasi-parallèle à l'axe de rotation de Saturne. L'obliquité de Saturne de $26,73^\circ$ s'étend à tout le système de Saturne, dont Titan. Cette obliquité mène à des variations d'ensoleillement sur Titan pendant une révolution autour du Soleil, ce qui induit des saisons, comme sur Terre. Les effets saisonniers impactent les paramètres physiques de l'atmosphère, de la surface et de l'intérieur de Titan.

Du point de vue de Saturne, son orbite est située en moyenne à $9,539 \text{ UA}^7$ du Soleil. Saturne (et donc Titan) effectue une révolution autour du Soleil en 29,458 ans, une saison durant environ 7,4 ans. A cause de l'excentricité de cette orbite de 0,0539, Saturne (et donc Titan) se trouve plus éloignée pendant l'été nord à une distance de 10,05 UA (aphélie) que pendant l'été sud à une distance de 9,023 UA (périhélie), ce qui donne une différence d'ensoleillement d'environ 20% entre ces deux distances.

1.3.3 Son atmosphère

Visuellement, Titan est une énorme sphère recouverte d'une brume orangée (figure 6). C'est d'ailleurs, le seul satellite du Système Solaire possédant une atmosphère principalement compo-

6. Le Grand Bombardement Tardif est un événement théorique où le nombre d'impacts météoritiques aurait considérablement augmenté sur les objets célestes du Système Solaire, il y a environ 4 milliards d'années. D'après les récents travaux de Morbidelli et al. (2018), il n'y aurait pas eu de GBT.

7. unité astronomique, 1 U.A. = 149 597 870 700 m.

sée de diazote N_2 (~98%), de méthane CH_4 (~1.4%), et de traces d'hydrocarbures, de nitriles et de composés oxygénés. Ces composés photochimiques subissent des réactions chimiques provenant de deux sources distinctes. D'une part, les photons solaires vont donner lieu à des réactions de photodissociation. D'autre part, les électrons provenant de la magnétosphère de Saturne et du vent solaire vont impacter ces composés photochimiques, car Titan n'a pas de magnétosphère intrinsèque pour se protéger de ces électrons. Cette chimie complexe donne lieu à la formation de composés photochimiques de plus en plus complexes et plus massifs formant ainsi des macromolécules, les aérosols, la brume orangée entourant Titan (figure6). Je reviendrai plus en détails sur la chimie atmosphérique en section 2.1.

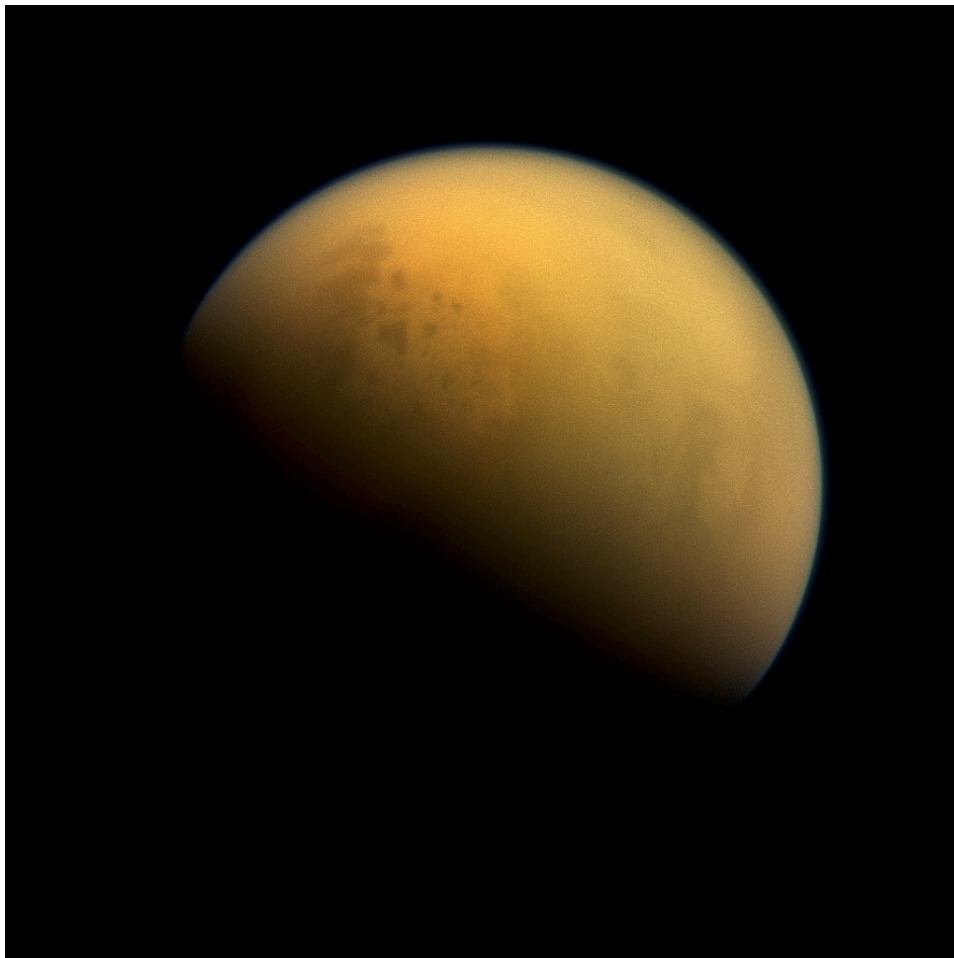


FIGURE 6 – Image de Titan en vraies couleurs, prise par une caméra haute résolution à bord de la sonde Cassini. Nous pouvons voir les lacs et mers dans la région polaire nord de Titan. Crédit : NASA/JPL-Caltech/Space Science Institute.

1.3.4 Sa surface

La sonde Huygens, lors de sa descente en 2005, a montré un paysage ressemblant fortement à ce que nous pouvons voir sur Terre : montagnes, réseaux de rivières, dunes. Lors de son atterrissage, l'instrument DISR a pris une image de la surface de Titan (fig.7) où l'on observe un sol couvert d'aérosols et de galets de glace d'eau. Dans la région équatoriale, les mesures de Cassini/RADAR et Cassini/VIMS ont montré des champs de dunes de 100 m de haut espacés de 3 km avec une orientation ouest-est. Alors qu'aux régions polaires, les mesures RADAR montrent la présence de lacs et de mers, plus importante au nord qu'au sud. Ces lacs sont composés principalement de méthane et d'éthane, et ont des profondeurs pouvant atteindre ~ 200 m. Une certaine activité a été mise en évidence par la "magic island" du lac Ligia Mare, où un bout de surface disparaissait et réapparaissait avec le temps (Hofgartner et al., 2014). Une explication proposée est l'effet de bulles de N₂ qui remonteraient à la surface des lacs (Cordier and Liger-Belair, 2018). Alors que les mers sont composées principalement de méthane, amené par les réseaux fluviaux. Les montagnes peuvent atteindre une hauteur de 2 km avec des pentes douces (Radebaugh et al., 2007), observées dans la région Xanadu à l'équateur ou dans la région Tsegihî dans l'hémisphère sud. La surface de Titan montre aussi la présence de cratères pouvant atteindre 80 km de diamètre avec une profondeur de 1,3 km comme le cratère Sinlap vers l'équateur, observé par RADAR et VIMS. La présence de cryovolcanisme reste cependant débattue.



FIGURE 7 – Image de la surface de Titan prise par l'instrument DISR après l'atterrissage du module de descente Huygens, le 14 janvier 2005 aux coordonnées 10°S, 163°E. Crédit : Tomasko et al. (2005).

1.3.5 Le cycle du méthane

Il existe un cycle du méthane sur Titan, comme le cycle de l'eau sur la Terre, car les conditions atmosphériques titanniennes encadrent le point triple du méthane. Le méthane à l'état de gaz peut se condenser pour former des nuages (liquide ou de glace) dans la troposphère, dont la première détection de nuage a été observée à une altitude comprise entre 10 et 30 km (Griffith et al., 1998). Ces nuages précipitent en pluie de méthane formant ainsi des rivières à la surface de Titan, qui sont ensuite déversées dans les mers localisées principalement aux régions polaires. Le méthane liquide des mers et lacs s'évapore de nouveau dans l'atmosphère complétant ainsi le cycle du méthane sur Titan.

1.3.6 Son intérieur

La surface de Titan est recouverte d'une couche (dite extérieure) de glace d'une épaisseur moyenne inférieure à 30-40 km mais qui serait inhomogène en épaisseur par endroits (Tobie

et al., 2005). Cette couche a été déduite à partir des données de champ de gravité par sondage radar (Iess et al., 2010), et par les mesures de conductivité de l'instrument Huygens/HASI-PWA (Permittivity, Wave and Altimetry) qui suggèrent une interface glace/océan à environ 30-60 km de profondeur (Béghin et al., 2010). Sous la croûte glacée, cet océan souterrain d'eau liquide serait légèrement enrichi en sel minéraux ou en ammoniac. En-dessous de cet océan souterrain, il existe deux principaux scénarios : (i) soit une couche de glace pure, puis une couche d'un mélange de glace et de roche pour finir sur un noyau de roche pur (principalement anhydre); (ii) soit une couche hydratée suivie d'un noyau de roche de densité moyenne, composé principalement de minéraux silicatés hydratés. Pour ces deux scénarios basés sur les mesures de champ de gravité (Iess et al., 2010), le moment d'inertie normalisé déduit est compris entre 0,33 et 0,34, ce qui indique que Titan n'est pas entièrement différencié et ne possède pas un important noyau de fer.

Paramètres physiques de la surface et du sous-sol	
Rayon	2574,73±0,09 km ^d
Masse	1,346×10 ²³ kg ^c
Densité	1,881 g.cm ^{-3 c}
T _{surf}	93,65±0,25 K ^a
P _{surf}	1,467 ± 0,001 bar ^a
g _{surf}	1,35 m.s ^{-2 c}
Paramètres physiques de l'atmosphère	
N ₂	~ 98%
CH ₄	~ 1,4%
Tropopause	~ 44 km ^a
Stratopause	~ 250 km ^a
Mésopause	~ 490 km ^a
Homopause	~ 1195 ± 65 km ^b
v _{echappement}	2,65 km.s ⁻¹
Paramètres orbitaux	
Orbite de Saturne	
Période de révolution	29,43 ans ^c
Distance moyenne au Soleil	9,546 UA ^c
Aphélie	10,05 UA
Périhélie	9,023 UA
Excentricité de l'orbite kronienne	0,0539
Obliquité	26,73° ^c
Orbite de Titan	
Période de rotation	15,945 j ^c
Distance moyenne à Saturne	1,226×10 ⁶ km (20 R _{Saturne}) ^c
Excentricité	0,0288
Obliquité	0,33°

TABLE 1 – Paramètres physiques et orbitaux de Titan. Références : (a) Fulchignoni et al. (2005), (b) Waite Jr. et al. (2005), (c) Hunten et al. (1984), (d) Zebker et al. (2009).

L'atmosphère de Titan

Sommaire

2.1	La chimie atmosphérique	13
2.1.1	La chimie des hydrocarbures	15
2.1.2	La chimie des nitriles	18
2.1.3	La chimie des composés oxygénés	18
2.1.4	La chimie des aérosols	20
2.2	Physique de l'atmosphère	22
2.2.1	Structure verticale de l'atmosphère	22
2.2.2	Dynamique atmosphérique	24
2.3	Les objectifs scientifiques de la thèse	27

2.1 La chimie atmosphérique

Nous avons vu dans le chapitre 1 que l'atmosphère de Titan est majoritairement constituée de diazote (N_2) à 98% et de méthane (CH_4) à 1,48% qui sont soit : (i) photodissociés par les photons solaire, (ii) dissociés par des impacts électroniques provenant de la magnétosphère de Saturne. Le résultat de ces réactions chimiques est la formation de radicaux moléculaires et d'ions (positifs ou négatifs). La chimie atmosphérique est étudiée à l'aide de modèles photochimiques numériques 1D prédisant les profils d'abondance des composés photochimiques dans l'atmosphère de Titan (Krasnopolsky (2014), Loison et al. (2015), Dobrijevic et al. (2016) et Vuitton et al. (2019)). Les radicaux neutres formés par les réactions de photodissociation de N_2 sont (Vuitton et al., 2019) :



Et les radicaux neutres formés par les réactions de photodissociation de CH_4 sont :

	$< 121,6 \text{ nm}^8$	$121,6 \text{ nm}$	$> 121,6 \text{ nm}$
$CH_4 + h\nu \longrightarrow CH_3 + H$	0,26	0,42	0,5
$\longrightarrow ^1CH_2 + H_2$	0,17	0,48	0,5
$\longrightarrow CH + H_2 + H$	0,09	0,07	0,0
$\longrightarrow ^3CH_2 + H + H$	0,48	0,03	0,0

Chapitre 2. L'ATMOSPHERE DE TITAN

Formule	Troposphère		Stratosphère		Mésosphère	Thermosphère	
	GCMS	Au sol	ISO/Herschel	GCMS	CIRS	UVIS	INMS
N ₂	0,942			0,984			0,966
H ₂	0,001			0,001	9,6±2,4×10 ⁻⁴		3,9±0,01×10 ⁻³
⁴⁰ Ar	3,4×10 ⁻⁵			3,4×10 ⁻⁵			1,1±0,03×10 ⁻⁵
³⁶ Ar				0,2±0,1×10 ⁻⁶			1,1±0,03×10 ⁻⁵
²² Ne				0,07- 0,5×10 ⁻⁶		1,1±0,03×10 ⁻⁵	
Hydrocarbures							
CH ₄	0.056			0,018			0,03
C ₂ H ₂			5,5±0,5×10 ⁻⁶		2,97×10 ⁻⁶	5,9±0,6×10 ⁻⁵	3,1±1,1×10 ⁻⁴
C ₂ H ₄			1,2±0,3×10 ⁻⁷		1,2×10 ⁻⁷	1,6±0,7×10 ⁻⁶	3,1±1,1×10 ⁻⁴
C ₂ H ₆			2,0±0,8×10 ⁻⁵		7,3×10 ⁻⁶		7,3±2,6×10 ⁻⁵
CH ₃ C ₂ H			1,2±0,4×10 ⁻⁸		4,8×10 ⁻⁹		1,4±0,9×10 ⁻⁴
C ₃ H ₆					2,6±1,6×10 ⁻⁹		2,3±0,2×10 ⁻⁶
C ₃ H ₈		6,2±1,2×10 ⁻⁷	2,0±1,0×10 ⁻⁷		4,5×10 ⁻⁷		<4,8×10 ⁻⁵
C ₄ H ₂			2,0±0,5×10 ⁻⁹		1,12×10 ⁻⁹	7,6±0,9×10 ⁻⁷	6,4±2,7×10 ⁻⁵
C ₆ H ₆			4,0±3,0×10 ⁻¹⁰		2,2×10 ⁻¹⁰	2,3±0,3×10 ⁻⁷	8,95±0,44×10 ⁻⁷
Nitriles							
HCN		5×10 ⁻⁷	3,0±0,5×10 ⁻⁷		6,7×10 ⁻⁸	1,6±0,7×10 ⁻⁵	
HNC		4,9±0,3×10 ⁻⁹	4,5±1,2×10 ⁻⁹				
HC ₃ N		3×10 ⁻¹¹	5,0±3,5×10 ⁻¹⁰		2,8×10 ⁻¹⁰	2,4±0,3×10 ⁻⁶	3,2±0,7×10 ⁻⁵
CH ₃ CN		8×10 ⁻⁹			<1,1×10 ⁻⁷		3,1±0,7×10 ⁻⁵
C ₂ H ₅ CN		2,8×10 ⁻¹⁰					
C ₂ N ₂					9×10 ⁻¹⁰		4,8±0,8×10 ⁻⁵
NH ₃			<1,9×10 ⁻¹⁰		<1,3×10 ⁻⁹		2,99±0,22×10 ⁻⁵
Composés oxygénés							
CO		5,1±0,4×10 ⁻⁵	4,0±5×10 ⁻⁵		4,7±0,8×10 ⁻⁵		
H ₂ O			8×10 ⁻⁹ /7×10 ⁻¹⁰		4,5±1,5×10 ⁻¹⁰		<3,42×10 ⁻⁶
CO ₂			2,0±0,2×10 ⁻⁸		1,1×10 ⁻⁸		<8,49×10 ⁻⁷

TABLE 2 – Composés photochimiques observés dans l'atmosphère de Titan. Crédit : Hörst (2017)

Les valeurs correspondent aux rapports de branchement par photolyse, qui sont utilisées dans le modèle de Vuitton et al. (2019).

Ces radicaux moléculaires vont former des liaisons chimiques avec les autres molécules ou radicaux présents, et ainsi former des composés photochimiques de plus en plus complexes. Les composés photochimiques observés dans l'atmosphère de Titan sont listés dans la table 2. Nous allons voir dans la suite les processus de perte et de formation pour les composés photochimiques observés dans ma thèse.

La majorité des composés photochimiques (sauf C₂H₄) est perdue par condensation entre 50 et 100 km d'altitude (Anderson and Samuelson, 2011).

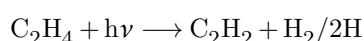
8. Cette longueur d'onde correspond à la raie Lyman α de l'hydrogène.

2.1.1 La chimie des hydrocarbures

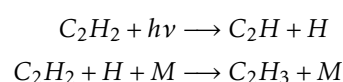
Les hydrocarbures étudiés au cours de ma thèse sont le méthane (CH_4), l'acétylène (C_2H_2), l'éthylène (C_2H_4), l'éthane (C_2H_6), le méthylacétylène (CH_3CCH), le propane (C_3H_8), le diacétylène (C_4H_2) et le benzène (C_6H_6). Ces hydrocarbures subissent différentes réactions chimiques qui les produisent ou les détruisent. L'équilibre entre les réactions de production et de perte varie en fonction de l'altitude. Hormis le méthane, je vais lister ici les principales réactions de production et de perte pour les hydrocarbures cités. Il existe d'autres réactions chimiques faisant intervenir des molécules neutres ou ioniques, dont la figure 8 schématise leur complexité. Pour la suite, les réactions chimiques énoncées proviennent des travaux de Vuitton et al. (2019).

L'acétylène (C_2H_2) :

Dans la majeure partie de l'atmosphère, l'acétylène est formé principalement par la photolyse de l'éthylène :

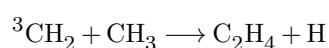
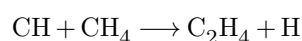


L'acétylène gazeux est principalement perdu par condensation. Il est aussi perdu par photodissociation, et en-dessous de 500 km d'altitude, l'acétylène est perdu par une réaction avec un atome d'hydrogène qui forme le radical C_2H_3 :

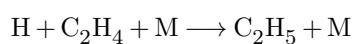


L'éthylène (C_2H_4) :

L'éthylène est formé à haute altitude, au-dessus de 800 km, par des réactions chimiques avec des radicaux provenant principalement du méthane :



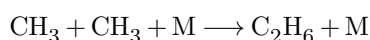
L'éthylène a la particularité de ne pas condenser dans les conditions de pression et de température de l'atmosphère de Titan. La principale perte chimique de l'éthylène en-dessous de 500 km est la réaction neutre-neutre avec un atome d'hydrogène pour former le radical éthyle :



L'éthane (C_2H_6) :

Les pics de productions de l'éthane se situent vers 200 et 800 km d'altitude, correspondant aux pics de perte par photodissociation du méthane et de l'acétylène respectivement, entraînant une production importante de radicaux CH_3 (Vuitton et al. (2019)). Deux radicaux CH_3 vont collisionner pour former une molécule transitoire avec un excès d'énergie. Cette énergie va être

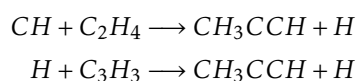
transmise à la suite d'une collision avec un autre corps M (probablement N₂ ou CH₄), et ainsi la molécule transitoire va pouvoir se stabiliser.



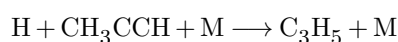
La principale perte de l'éthane est la condensation, proche de la tropopause.

Le méthylacétylène (CH₃CCH) :

Le méthylacétylène est la combinaison de l'éthylène (C₂H₄) et d'un radical méthylidyne (CH), dans la haute atmosphère vers 800 km d'altitude. Le méthylacétylène est aussi produit par la réaction d'un radical C₃H₃ avec un atome d'hydrogène (provenant de la photodissociation du butadiène).



Les principales pertes du méthylacétylène sont l'ajout d'un atome d'hydrogène sur le méthylacétylène qui va former C₃H₅.



Le propane (C₃H₈) :

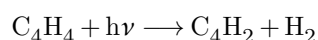
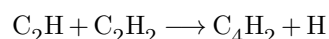
La production de propane est le résultat d'une réaction trimoléculaire, comme l'éthane, faisant intervenir des radicaux du méthane et d'éthane. Le propane a son pic de production vers 800 km d'altitude.



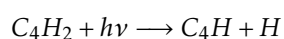
Le propane gazeux est perdu par condensation proche de la tropopause.

Le diacétylène (C₄H₂) :

Le diacétylène, ou buta-1,3-diyne, est une molécule possédant deux liaisons triples C≡C et une liaison simple C-C. Cette molécule est formée vers 1000 km d'altitude, via un schéma complexe de réactions impliquant les radicaux C₄H₃ (cf Vuitton et al. (2019), p. 152). Elle est aussi formée plus bas dans l'atmosphère entre 200 et 400 km, par une réaction avec un radical provenant de la photolyse de l'acétylène (C₂H) et de l'acétylène, et par une réaction de photodissociation du vinylacétylène formant le diacétylène, lui-même recyclé en vinylacétylène.



La perte principale du diacétylène est la photodissociation d'une liaison C-H qui va former un radical C₄H, entre environ 150 km (rayonnement FUV) et 1200 km. Le diacétylène est aussi perdu par condensation.

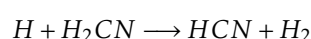


2.1.2 La chimie des nitriles

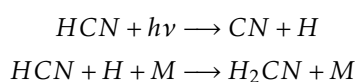
Les nitriles étudiés au cours de ma thèse sont l'acide cyanhydrique (HCN) et le cyanoacétylène (HC₃N). Comme pour les hydrocarbures, je présente les principales réactions chimiques produisant et consommant les nitriles observés. La complexité des réactions chimiques neutres ou ioniques est schématisée sur la figure 9. Pour la suite, les réactions chimiques énoncées proviennent des travaux de Vuitton et al. (2019).

L'acide cyanhydrique (HCN) :

L'acide cyanhydrique est très stable de part sa liaison triple C≡N (~ 9,2 eV, soit $\lambda < 135$ nm). Il est principalement formé vers 1000 km et en-dessous de 200 km par la réaction d'un radical aminé et d'un atome d'hydrogène :



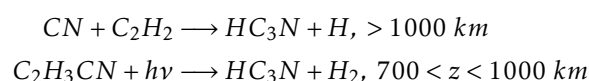
Cette molécule est en partie perdue par photodissociation et par réaction avec l'hydrogène :



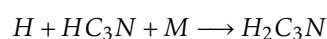
La réaction du radical CN avec d'autres molécules permet soit de recycler HCN, soit de former des nitriles plus complexes. Mais la principale perte de l'acide cyanhydrique est par condensation.

Le cyanoacétylène (HC₃N) :

Le cyanoacétylène est formé au-dessus de 1000 km par la réaction du radical cyano (CN) et de l'acétylène. Entre 700 et 1000 km, le cyanoacétylène est formé par la réaction de photodissociation de l'acrylonitrile C₂H₃CN :



Le cyanoacétylène est perdu par une réaction collisionnelle avec un atome d'hydrogène en-dessous de 800 km :



Selon le modèle de Vuitton et al. (2019), environ 10% du cyanoacétylène est perdu par condensation.

2.1.3 La chimie des composés oxygénés

Les composés oxygénés (CO, CO₂, H₂O) ont été découverts dans l'atmosphère de Titan dans les années 1980 par des observations au sol et par Voyager (Samuelson et al. (1983), Lutz et al. (1982), Coustenis et al. (1998)). La présence des composés oxygénés dans l'atmosphère de Titan reste

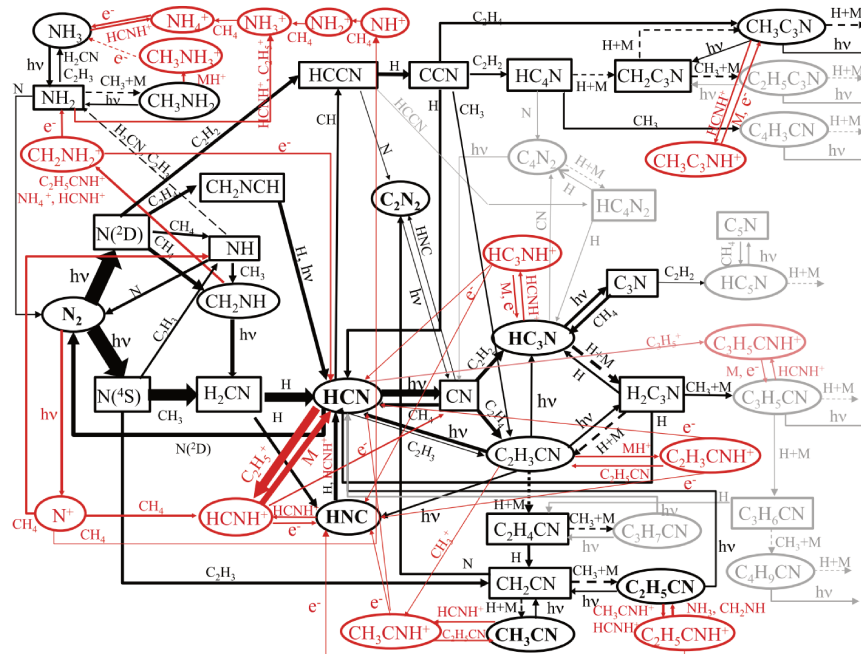
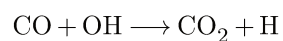


FIGURE 9 – Schéma synthétisant les différents chemins de formation des nitriles, amines et imines neutres (noir) et ioniques (rouge foncé) dans l'ionosphère (> 1000km) de Titan. Les flèches et espèces en gris ou en rouge clair ne sont pas prises en compte dans le modèle de Dobrijevic et al. (2016). Crédit : Dobrijevic et al. (2016).

inexpliquée. Pour CO, l'origine et la source sont théorisées à travers trois principaux scénarios : il provient (i) de la nébuleuse planétaire lors de la formation de l'atmosphère de Titan (cf. 1.3), (ii) d'une source oxygénée dans la surface de Titan qui se dégage dans l'atmosphère, (iii) d'une source oxygénée extérieure qui se déverse dans l'atmosphère. Les mesures de CAPS ont montré la présence d'ions O^+ dans la haute atmosphère, au-dessous de 1000 km (Hartle et al., 2006). Hörst et al. (2008) ont démontré que cette source d'ions O^+ peut expliquer la présence de CO dans l'atmosphère de Titan, et que cette source pourrait provenir des éruptions cryovolcaniques d'Encelade, une autre lune de Saturne. Pour expliquer la présence et l'abondance de H_2O et CO_2 , il serait nécessaire d'avoir une source externe d'oxygène pour produire les molécules OH requises pour former ces molécules (Vuitton et al. (2019), p.178).

Le dioxyde de carbone (CO_2) :

Le dioxyde de carbone est produit par la réaction entre le monoxyde de carbone (CO) et le radical OH. Selon le modèle de Vuitton et al. (2019), le dioxyde de carbone est formé entre 200 et 900 km, avec une production constante en altitude.



Le dioxyde de carbone est principalement perdu par condensation près de la tropopause.

2.1.4 La chimie des aérosols

Nous venons de voir que la chimie est très complexe dans l'atmosphère de Titan. Toutes ces molécules et radicaux vont s'agglomérer entre eux pour former des macromolécules, qui vont continuer de grossir formant ainsi des particules solides fines (aérosols) de l'ordre de quelques dizaines de nanomètres. Ces aérosols composés d'un riche mélange de diverses molécules complexes vont ainsi former la brume photochimique orangée qui entoure Titan. Cette brume absorbe le rayonnement solaire dans l'ultraviolet et le visible, et libère cette énergie dans l'infrarouge.

La brume photochimique de Titan est étudiée par des expériences de laboratoire qui simulent au mieux les conditions titaniennes. Dans un réservoir hermétique, un mélange de gaz titanien (N_2 , CH_4) est perturbé par une source d'énergie (ex : décharge électrique, lampe UV) qui donne lieu à la formation d'aérosols solides, appelés *tholins* (origine grecque pour "boue"). Ces tholins sont ensuite analysés par spectrométrie de masse (mise en évidence des motifs de polymérisation) ou par spectroscopie infrarouge (liaison chimique). Ces études tentent de comprendre les processus de formation des aérosols (Gautier et al. (2012), Trainer et al. (2013), Sciamma-O'Brien et al. (2014)). Notamment, la communauté scientifique débat sur l'existence de l'aromaticité des aérosols de Titan, en lien avec la présence de benzène dans l'atmosphère, qui peut induire une différence de réactivité dans la basse atmosphère (Gudipati et al., 2013), ainsi qu'une différence de solubilité dans les lacs et mers de Titan. Cependant, les tholins formés à partir de N_2 et de CH_4 ne sont pas aromatiques (Quirico et al., 2008). Une étude a montré qu'en ajoutant un composé aromatique en très faible quantité dans le mélange gazeux, les tholins ainsi formés sont aromatiques (Mathé et al. (2018)).

Les observations de Voyager 1 ont mis en évidence une couche principale d'aérosols entourant Titan jusqu'à 200 km d'altitude, puis de plusieurs couches stratifiées d'aérosols entre 200 et 300 km, une couche plus marquée observée entre 300 et 350 km d'altitude (nommée la couche détachée des aérosols, voir figure 11, Smith (1980)), et une dernière couche vers 450 km. L'altitude de la couche détachée varie en fonction de la saison : 350 km après l'équinoxe en 2011, 500 km pendant l'hiver nord entre 2004-2009. Ces aérosols vont aussi former une capuche polaire visible sur la figure 11.

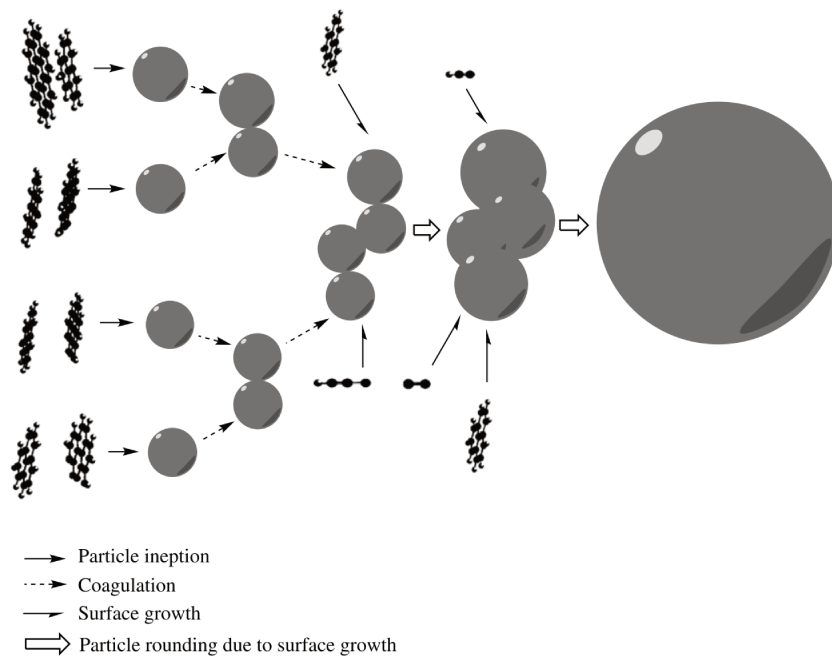


FIGURE 10 – Illustration d’une théorie de formation des aérosols. Crédit : Lavvas et al. (2011).

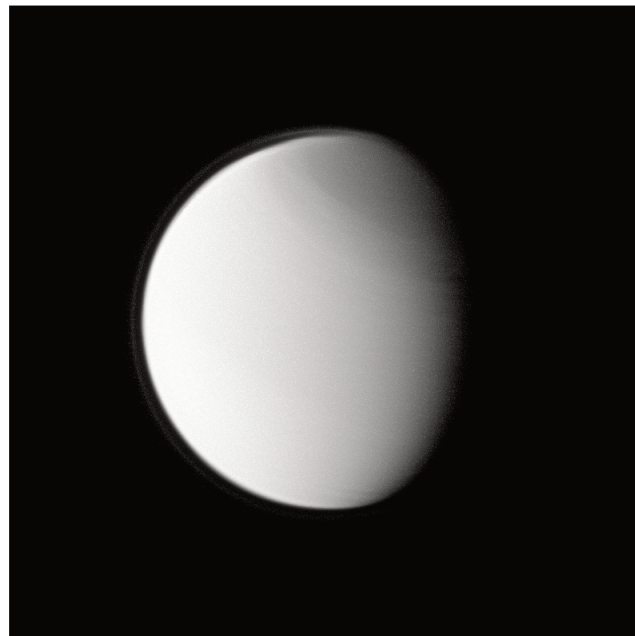


FIGURE 11 – Image de Titan prise par la caméra narrow-angle de l’orbiter Cassini à 338 nm. La couche détachée d’aérosols est visible autour de Titan, et la capuche polaire d’aérosols est observée dans la région polaire nord. Crédit : NASA/JPL-Caltech/Space Science Institute.

2.2 Physique de l'atmosphère

2.2.1 Structure verticale de l'atmosphère

La variation verticale de la pression dans une atmosphère planétaire est donnée par l'équilibre hydrostatique. Chaque tranche d'atmosphère est en équilibre entre la force de gravité et le gradient de pression :

$$\frac{dP}{dz} = -\rho g \quad (1)$$

La résolution de cette équation, en utilisant la loi des gaz parfaits, donne :

$$\frac{P}{P_0} = e^{-\int_{z_0}^z \frac{dz}{H(z)}} \quad (2)$$

Où H est l'échelle de hauteur, correspondant à la différence d'altitude où la pression varie d'un facteur $1/e$, définie par :

$$H_{(z)} = \frac{RT_{(z)}}{M_{(z)}g_{(z)}} \quad (3)$$

Où R est la constante universelle des gaz parfaits, $T_{(z)}$ la température de la tranche à l'altitude z , $M_{(z)}$ la masse molaire de la tranche, et $g_{(z)}$ la gravité au niveau de la tranche. De part cette dernière équation, nous pouvons observer que la notion d'échelle de hauteur traduit un compromis entre l'agitation thermique de la tranche d'atmosphère ($\propto \sqrt{T}$) qui tend à faire échapper les molécules, et le poids de ces molécules ($\propto g$) qui tend à les ramener vers la surface. Sur Titan, l'échelle de hauteur varie grandement en altitude : ~ 20 km dans la troposphère, et ~ 40 km dans la stratosphère.

Le profil vertical moyen de température peut-être séparé en différentes couches atmosphériques qui correspondent à différents processus dominants de chauffage et de refroidissement. Ces couches sont nommées, en partant de la surface : la troposphère, la stratosphère, la mésosphère et la thermosphère. La structure thermique de Titan a été mesurée *in-situ* lors de la descente de Huygens par l'instrument HASI, dont le résultat est montré en figure 12. Nous pouvons observer que la structure thermique de Titan est très similaire à celle de la Terre.

La troposphère

La troposphère est la première couche atmosphérique en partant de la surface dont la température diminue avec l'altitude due au fait que le rayonnement solaire est peu absorbé dans cette couche. Le chauffage de l'atmosphère se fait par le bas, la surface étant chauffée par le rayonnement solaire. Les masses d'air chaudes proches de la surface s'élèvent dans l'atmosphère, et se refroidissent par détente adiabatique à cause de la diminution de pression en fonction de l'altitude. Le transport vertical d'énergie se fait alors principalement par convection. Le gradient de température est alors compris entre le gradient adiabatique sec ($-1,3$ K/km, sur Titan) et le gradient adiabatique humide ($-0,5$ K/km). Ce processus d'échange thermique est valable pour les deux premiers kilomètres d'altitude dans l'atmosphère de Titan (Flasar et al., 2014). Au dessus du sommet de la zone convective, le gradient de température devient sub-adiabatique : la différence de température croît de plus en plus doucement jusqu'à devenir nulle à la tropopause, altitude limite où la température la plus froide est observée dans la troposphère. Les échanges de chaleurs se font par rayonnement.

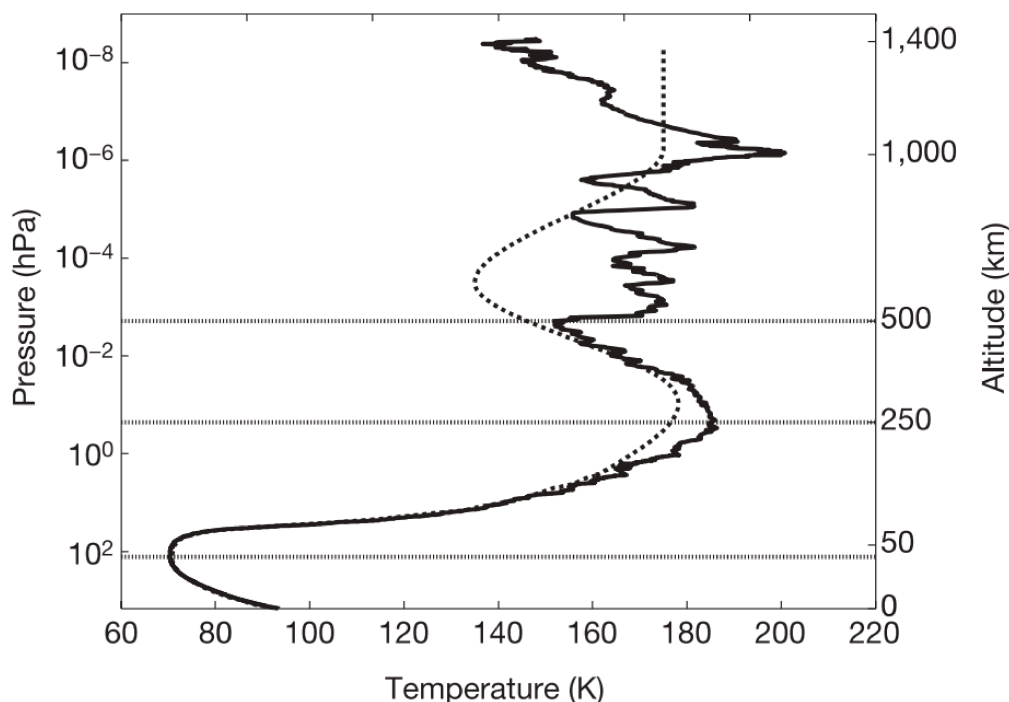


FIGURE 12 – Le profil de température de l'atmosphère de Titan mesuré par l'instrument HASI. Le profil en pointillé est le profil modélisé par Yelle et al. (1997) pour la conception de Huygens lors de sa descente dans l'atmosphère de Titan. Crédit : Fulchignoni et al. (2005).

La troposphère de Titan s'étend de la surface avec une température de $93,65 \pm 0,25$ K jusqu'à ~ 44 km d'altitude avec une température minimale atteignant 70,43 K, selon le profil de température de la figure 12. Ce profil de température dans la troposphère sera utilisé par la suite comme référence de température.

La stratosphère

La seconde couche atmosphérique est appelée la stratosphère, car les masses d'air sont stratifiées et se mélangent peu entre elles. Cette couche atmosphérique commence au dessus de la tropopause, où la température croît cette fois-ci avec l'altitude à cause d'une source de chaleur locale. Cette source de chaleur correspond à l'absorption du rayonnement solaire par l'atmosphère. Sur Titan, le méthane et les aérosols absorbent le rayonnement ultraviolet et visible du Soleil. En contre-partie du chauffage solaire, les composés photochimiques et les aérosols refroidissent la stratosphère en émettant du rayonnement infrarouge. La température s'équilibre entre le chauffage solaire et le refroidissement radiatif. La température continue de croître jusqu'à une altitude limite : la stratopause.

Sur Titan, la stratopause est localisée à environ 300 km d'altitude, et peut monter jusqu'à 400 km dans la région polaire d'hiver (chapitre 5). Aux limites de la stratosphère, un nuage de HCN a été observé par VIMS en mai 2012 à 300 km d'altitude dans la région polaire sud (De Kok et al., 2014).

La mésosphère

Malgré l'équilibre thermique entre le chauffage et le refroidissement radiatif, la température décroît avec l'altitude au dessus de la stratopause jusqu'à une altitude limite où la température atteint une valeur minimale, nommée la mésopause, localisée vers 500 km d'altitude sur Titan. Cette troisième couche atmosphérique est appelée la mésosphère. La mésosphère et la stratosphère forment communément la moyenne atmosphère. Dans la haute mésosphère de Titan, l'équilibre thermique n'est plus exact car l'équilibre thermodynamique local (ETL) n'est plus assuré.

La thermosphère

La quatrième couche atmosphérique est la thermosphère, où la température croît avec l'altitude, qui s'étend de la mésopause à la thermopause. Pour Titan, cette région est chauffée par différentes contributions : le rayonnement solaire ultraviolet extrême et X absorbés par N_2 , la libération d'énergie provenant d'ondes de gravités (observées sur la figure 12), la précipitation de particules de la magnétosphère de Saturne qui collisionne avec N_2 , et le chauffage par effet Joule résultant de l'interaction électromagnétique de l'ionosphère de Titan et la magnétosphère de Saturne (Yelle et al., 2014). Un refroidissement radiatif s'effectue par les raies de rotation de HCN qui émettent de l'énergie dans l'infrarouge lointain et sont encore à l'ETL (Yelle, 1991). Dans la thermosphère, la chaleur est échangée par conduction, lors des collisions entre molécules et ions, vers les niveaux inférieurs de l'atmosphère.

2.2.2 Dynamique atmosphérique

L'atmosphère de Titan est en super-rotation : c'est à dire que l'atmosphère se déplace plus vite zonalement que la vitesse de rotation de Titan. En négligeant la force de Coriolis, la circulation atmosphérique peut être approximée par un équilibre cyclostrophique : le déplacement horizontal d'une parcelle d'air est régi par l'équilibre entre la force centrifuge projetée sur le méridien et le gradient méridien de pression. Des modèles numériques de circulation globale 1D ou 3D (GCM, Global Circulation Model) simulent l'évolution temporelle de plusieurs aspects physiques et chimiques de l'atmosphère : la dynamique, la température, les abondances de composés photochimiques, etc. Pour ma thèse, je me suis basé sur les prédictions des GCMs de Titan de : Newman et al. (2011), Lebonnois et al. (2012) et Lora et al. (2015).

Les cellules atmosphériques

Selon les GCMs, la circulation méridienne de la moyenne atmosphère de Titan varie avec les saisons. Pendant le printemps et l'été nord, il existe une cellule de circulation atmosphérique globale pôle-à-pôle. Le pôle d'été (pôle nord) reçoit plus de flux solaire que le pôle d'hiver (pôle sud). L'air chauffé dans la région polaire d'été monte en altitude, puis se déplace vers la région polaire d'hiver où l'air est transporté vers de plus basses altitudes (figure 13 (b)). Pendant l'automne et l'hiver nord, la circulation de la cellule atmosphérique s'inverse. Mais aux alentours des équinoxes, les GCMs prédisent une circulation méridienne avec deux cellules

atmosphériques équateur-à-pôle où l'air monte à l'équateur et descend aux pôles (figure 13, (a)). Cela résulte du fait que c'est alors la région équatoriale qui est la plus chauffée par le soleil. Cette transition prédite dure environ 3 ans terrestres.

La branche descendante de ces différentes cellules atmosphériques impacte fortement la région polaire, où elle se tient, en : (i) ajoutant une contribution de chauffage adiabatique car l'air se comprime en descendant dans l'atmosphère, (ii) enrichissant la mésosphère en composés photochimiques qui se sont formés à très haute altitude (> 800 km, cf.2.1). Concernant la circulation méridionale de la troposphère, elle est semblable à la Terre avec des cellules de Hadley.

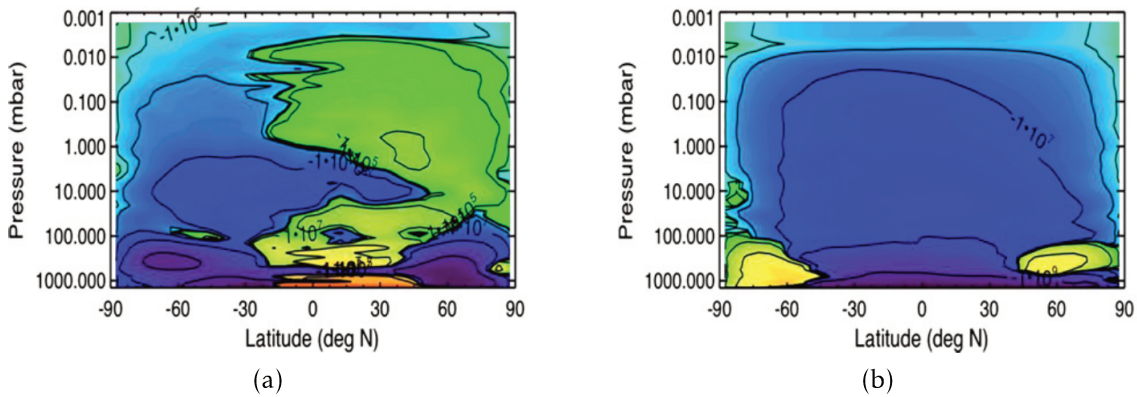


FIGURE 13 – Ces figures issues de simulations numériques montrent la fonction de courant de la moyenne atmosphère, indiquant le sens de circulation méridionale, pour : (a) $L_s=0^\circ$ (équinoxe de printemps nord), (b) $L_s=90^\circ$ (solstice d'été nord). En vert, le sens est horaire. En bleu, le sens est anti-horaire. Crédit : Newman et al. (2011).

Les vents zonaux

Les vents zonaux sont des vents circulant selon une même latitude, parallèle à l'équateur, thermalisant l'atmosphère longitudinalement. Pour une atmosphère, la vitesse du vent zonal u est gouvernée par :

$$\frac{\partial}{\partial z_{\parallel}} \left(2\Omega u + \frac{u^2}{R \cos \Phi} \right) = -\frac{g}{T} \frac{1}{R} \left(\frac{\partial T}{\partial \Phi} \right)_p \quad (4)$$

Où ∂z_{\parallel} est la dérivée verticale parallèle à l'axe de rotation, Ω est la fréquence de rotation de Titan, R le rayon de Titan, Φ la latitude, g la gravité et T la température. Achterberg et al. (2011) ont déduit les vitesses de vents zonaux à partir des températures retrouvées en analysant les données CIRS (figures 14 (a) et (b), l'échelle de pression couvre les pressions entre 10 et 10^{-3} mbar). Nous constatons la présence de vents zonaux dans la moyenne atmosphère, où leur vitesse peut atteindre 190 m.s^{-1} à 50°N entre $\sim 0,4$ mbar et 0,01 mbar pendant l'hiver nord. En comparant avec l'hémisphère sud, nous observons une vitesse de vent zonal bien plus faible, de l'ordre de 90 m.s^{-1} , qui atteint de plus faibles latitudes ($< 40^\circ\text{S}$ en 2009). Les forts vents zonaux dans l'hémisphère nord résultent du gradient thermique important entre le pôle d'hiver au nord et la région équatoriale. Les vents zonaux ont aussi été observés dans la thermosphère de Titan à des vitesses supersoniques (Lellouch et al., 2019).

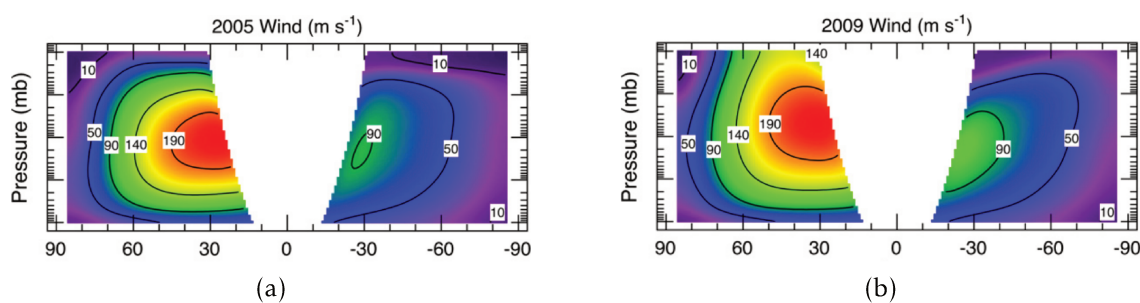


FIGURE 14 – Vents zonaux déterminés à partir de la structure thermique de la moyenne atmosphère de Titan en 2005 et 2009. L'échelle des abscisses représente la latitude (positive dans l'hémisphère nord). L'échelle des ordonnées représente l'altitude, avec une échelle logarithmique allant de 10 mbar à 10^{-3} mbar. Crédit : Achterberg et al. (2011).

Le vortex polaire

Un autre phénomène dynamique entre en jeu dans la moyenne atmosphère : la formation du vortex polaire d'hiver. Nous avons vu que l'air à haute altitude est amené vers le pôle d'hiver par la cellule atmosphérique, à cause du fort gradient de température aux latitudes moyennes de l'hémisphère nord. En se rapprochant de l'axe de rotation de la planète, l'air est accéléré longitudinalement par conservation du moment cinétique, ce qui crée de forts vents zonaux. Ces puissants vents zonaux vont isoler dynamiquement la moyenne atmosphère latitudinalement, et confiner le vortex polaire (figure 15). L'extension latitudinale du vortex polaire peut être déduite par des cartes de vitesse de vent zonal, où la limite du vortex correspond à un fort gradient de température latitudinale. Sur la figure 14, la limite du vortex polaire nord est vers la latitude 60°N entre 2005 et 2009. Les abondances des molécules se trouvent alors homogénéisées en altitude à l'intérieur du vortex polaire. Ce vortex polaire se forme durant l'hiver et s'évanouit au début du printemps.

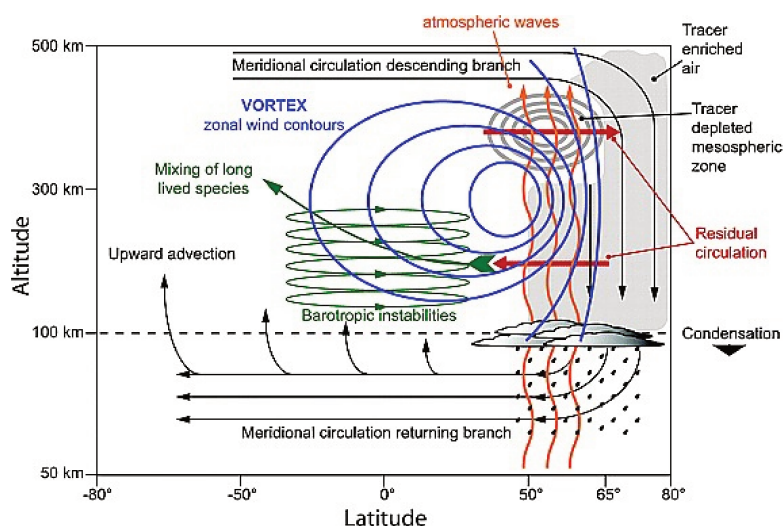


FIGURE 15 – Schéma des différents processus dynamiques dans la région polaire d'hiver de la moyenne atmosphère. Le vortex polaire est confiné au-delà de 50°N dans la stratosphère et au-delà de $\sim 65^{\circ}\text{N}$ plus haut, indiqué par la zone grisée. Crédit : Teanby et al. (2008).

2.3 Les objectifs scientifiques de la thèse

Nous venons de voir que l'atmosphère de Titan présente des aspects chimiques et dynamiques complexes, évoluant au fil des saisons. La mission Cassini-Huygens a permis d'acquérir diverses données scientifiques entre le milieu de l'hiver nord et le début de l'été nord, soit environ une demi-année titaniennne. De récentes études portant sur les mesures du spectromètre infrarouge CIRS ont mis en évidence des changements saisonniers sur les profils de température et d'abondance de composés photochimiques dans la moyenne atmosphère (Vinatier et al., 2015; Teanby et al., 2017; Sylvestre et al., 2018; Coustenis et al., 2018; Teanby et al., 2019). Ces études ont analysé différents jeux de données de CIRS permettant de mettre en avant les variations saisonnières de ces profils verticaux pour différentes gammes d'altitudes, et pour différents composés photochimiques. Pour autant, ces études n'ont pas analysé les derniers flybys de Titan, hormis, Teanby et al. (2019) qui ont étudié les variations saisonnières à 1 mbar (~ 190 km) pour toute la durée de la mission Cassini-Huygens.

Ma thèse s'inscrit dans la continuité de l'étude des variations saisonnières des profils de température et d'abondance des composés photochimiques dans la moyenne atmosphère à partir du spectromètre infrarouge CIRS. Pour compléter les études citées, j'ai analysé tous les spectres au limbe (et parfois avec des spectres au nadir) enregistrés à $0,5 \text{ cm}^{-1}$ de résolution spectrale disponible dans la base de données *cirsdata*. Ces données couvrent la globalité des latitudes (pôles, moyennes latitudes, équateur) sur toute la mission Cassini-Huygens de 2004 à 2017. Les résultats portés par ma thèse permettront de comprendre l'évolution saisonnière de la moyenne atmosphère, et apporteront des contraintes pour les différents modèles numériques de photochimie et de dynamique atmosphérique.

Pour répondre à mes objectifs de thèse, je développe dans le chapitre 3 le contenu scientifique des spectres thermiques provenant de l'atmosphère : la spectroscopie infrarouge et le transfert radiatif. Le chapitre 4 décrit l'instrument CIRS et le post-traitement appliqué aux données afin d'améliorer le rapport signal-à-bruit. La méthodologie appliquée à l'analyse des données CIRS est détaillée au chapitre 5. Le chapitre 6 présente les résultats obtenus sur les profils de température et d'abondance de C_2H_2 , C_2H_4 , C_2H_6 , CH_3CCH , C_3H_8 , C_4H_2 , C_6H_6 , HCN , HC_3N , CO_2 . Je discute des variations saisonnières aux basses et moyennes latitudes, en les comparant aux modèles photochimiques dans le chapitre 7. Les résultats des variations saisonnières dans les régions polaires nord et sud sont discutés et comparés aux GCM dans les chapitres 8 et 9, respectivement. Un dernier chapitre 10 traite de mon étude et des résultats sur les variations saisonnières des rapports isotopiques $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ et $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ dans HCN .

Analyse des spectres thermiques



Sommaire

3.1	Spectroscopie infrarouge	29
3.1.1	Spectroscopie en phase gazeuse	29
3.1.2	Spectroscopie en phase solide	34
3.2	Transfert radiatif	36
3.2.1	Equation au nadir	37
3.2.2	Equation au limbe	38
3.2.3	Raie en émission/absorption	39

3.1 Spectroscopie infrarouge

Dans ce chapitre, je vais décrire les principes de base de la théorie quantique utiles à la compréhension de la spectroscopie infrarouge (pour plus de détails voir : Hanel et al. (2003)). Les atmosphères des planètes du système solaire, relativement froides, émettent principalement dans le domaine infrarouge au-delà de $5 \mu\text{m}$ ($< 2000 \text{ cm}^{-1}$).

3.1.1 Spectroscopie en phase gazeuse

Lorsqu'une molécule en phase gazeuse absorbe de l'énergie, elle peut la redistribuer à travers ses différents modes de vibration et de rotation. Nous allons voir dans les prochains paragraphes comment sont déterminées la fréquence des raies, ainsi que leur intensité et leur forme.

Transitions de vibration

Les transitions vibrationnelles sont associées à un photon émis à la suite d'une vibration d'une liaison chimique d'une molécule, qui peut être modélisée par la loi des ressorts ($F = -k\Delta x$). La fréquence de vibration dépend de la masse des atomes et de la "raideur" de la liaison chimique. La liaison chimique peut vibrer selon différents modes : élongation de la liaison ou déformation angulaire de différents types. Le nombre de modes de vibration est déterminé à partir du nombre de degrés de liberté de la molécule : N atomes libres de se déplacer dans un espace à 3 dimensions. Sur les $3N$ degrés de liberté, 6 correspondent au mouvement global de la molécule : 3 liés à la translation de son centre de masse suivant les 3 axes et 3 liés à la rotation de la molécule autour de ces axes. Au total, une molécule polyatomique non-linéaire possède $3N-6$ degrés de liberté, et une molécule polyatomique linéaire $3N-5$.

Les niveaux d'énergie des modes de vibration possibles pour une molécule sont les solutions de l'équation de Schrödinger pour l'oscillateur harmonique, et sont données par l'équation :

$$E_v = \frac{h}{2\pi} \omega \left(v + \frac{1}{2} \right) \quad (5)$$

Où ω est la fréquence de la vibration, v est le nombre quantique de vibration.

Les transitions entre deux niveaux de vibration permises suivent la règle de sélection : $\Delta v = \pm 1$. Les transitions $\Delta v = \pm 2$, etc ne sont permises qu'à cause de l'anharmonicité du potentiel.

Transitions de rotation

Lorsque la molécule vibre ou est dans son état fondamental, elle se meut toujours dans l'espace par des mouvements de rotation autour de son centre de masse. Pour le cas simple d'une molécule polyatomique linéaire (comme C_2H_2), l'axe de rotation de la molécule est perpendiculaire à la liaison chimique entre les deux atomes. Le moment cinétique de la molécule est donc :

$$I = \sum_i m_i r_i^2 \quad (6)$$

Où m_i est la masse de l'atome i et r_i la distance entre l'atome i et le centre de masse de la molécule.

Les niveaux de rotation sont discrétisés et leur énergie s'obtient par la résolution de l'équation de Schrödinger :

$$E_J = hcBJ(J+1), B = \frac{h}{8\pi^2cI} \quad (7)$$

Où J est le niveau de rotation (nombre quantique du moment cinétique total), B est la constante rotationnelle. La règle de sélection pour une transition rotationnelle est : $\Delta J = 0, \pm 1$.

Les raies rotationnelles correspondant soit à $\Delta J = -1$, soit à $\Delta J = 1$ sont espacées de $2B$. Cependant, les raies rotationnelles à J élevé sont légèrement plus espacées dans la branche P que dans la branche R. Ceci est dû à la non-rigidité de la molécule qui s'étire à cause de la force centrifuge. Il est donc nécessaire de prendre en compte cet effet et de l'appliquer à l'équation 7 en ajoutant un terme correctif :

$$E_J = hc(BJ(J+1) - DJ^2(J+1)^2) \quad (8)$$

Où D est appelé la constante de distorsion centrifuge.

Transitions ro-vibrationnelles

Nous venons de traiter les transitions vibrationnelles et rotationnelles indépendamment l'une de l'autre. Dans la réalité, ces transitions se combinent entre elles donnant lieu à des bandes ro-vibrationnelles. Ces bandes complexes sont le résultat du couplage entre une transition vibrationnelle et la structure fine des transitions rotationnelles. Lors d'une transition ro-vibrationnelle, la molécule passe d'un état vibrationnel v_1 et rotationnel $J=X$ à un état vibrationnel v_0 et rotationnel $J=X, X\pm 1$ (en gardant J toujours positif) (voir figure 16). Ces raies forment une bande dont

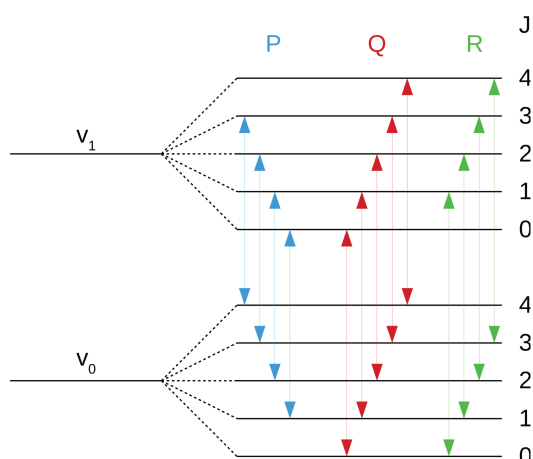


FIGURE 16 – Schéma des transitions permises pour une molécule polyatomique linéaire (comme C_2H_2).

le centre est proche de la fréquence de la transition vibrationnelle (figure 17). L'énergie des raies ro-vibrationnelles est définie par :

$$E_{(v,J)} = E_v + E_J \quad (9)$$

Les raies ro-vibrationnelles se distinguent généralement par trois branches (selon le cas di-polyatomique), classées par ordre croissant en nombre d'ondes, suivant les règles de sélections :

- la branche P : $\Delta v = \pm 1, \Delta J = -1$
- la branche Q : $\Delta v = \pm 1, \Delta J = 0$
- la branche R : $\Delta v = \pm 1, \Delta J = +1$

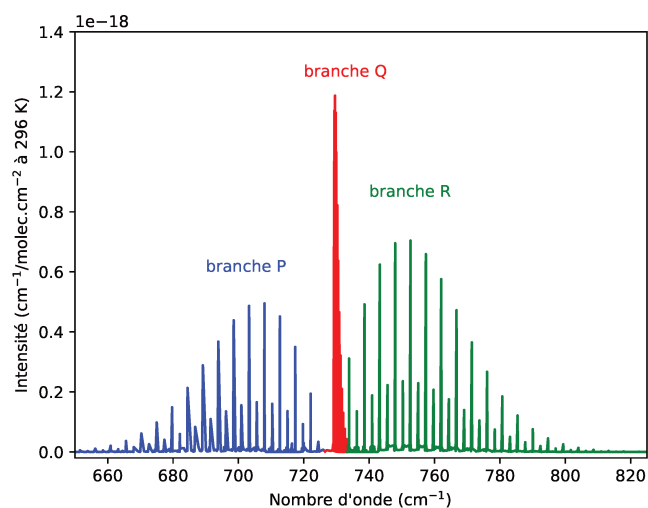


FIGURE 17 – Spectre théorique de la bande ν_5 de l'acétylène (C_2H_2) à partir des données provenant de GEISA 2015. L'intensité entre deux raies successives des branches P et R varie selon le spin nucléaire (ex : $g_N = 3$ pour J pair, et $g_N = 1$ pour J impair).

Intensité des raies

L'intensité des raies moléculaires est proportionnelle au nombre de photons émis à la fréquence donnée sur la ligne de visée. Cette intensité est donc liée au nombre de molécules présentes sur la ligne de visée. Dans le cas de l'émission, chaque molécule excitée a une probabilité non-nulle d'effectuer une transition d'un niveau d'énergie haut E_n à un niveau d'énergie bas E_m , défini par les termes au carré de la matrice du dipôle électrostatique, nommé coefficients d'Einstein. L'intensité émise est donc :

$$I_{emis} = N_{v,J} A_{nm} h c \nu \quad (10)$$

Où N_v est le nombre de molécules se trouvant dans l'état excité du mode de vibration v et de rotation J , et A_{nm} le coefficient d'Einstein de l'émission spontanée.

A l'équilibre, le nombre de molécules dans l'état $N_{v,j}$ est défini par l'équation :

$$N_{v,j} = \frac{N(2j+1)g_N}{Q_{vib}(T)Q_{rot}(T)} e^{-\frac{E(v,J)}{kT}} \quad (11)$$

Où N est le nombre total de molécules, g_N est le poids statistique de l'état de spin nucléaire, $E(v,J)$ le niveau d'énergie de l'état excité, $Q_{vib}(T)$ est la fonction de partition des niveaux vibrationnels, et $Q_{rot}(T)$ la fonction de partition des niveaux rotationnels. Ces deux derniers représentent la répartition des probabilités de chaque état, et assurent la normalisation de l'équation 11 car la somme de l'ensemble des probabilités vaut 1. Ils sont définis par les équations suivantes :

$$Q_{vib}(T) = \sum_{v=0}^{\infty} e^{-(h/2\pi)(wv/kT)} = \left[1 - e^{-(h/2\pi)(w/kT)}\right]^{-1} \quad (12)$$

$$Q_{rot}(T) = \sum_{j=0}^{\infty} (2J+1)g_N e^{-hcBJ(J+1)/kT} \quad (13)$$

Cette dernière équation peut s'écrire sous forme intégrale à haute température ($kT \gg hcB$) :

$$Q_{rot}(T) = \int_0^{\infty} (2J+1)g_N e^{-hcBJ(J+1)/kT} dJ = \frac{kT}{hcB} \langle g_N \rangle \quad (14)$$

En combinant ces dernières équations à l'équation 11, nous obtenons :

$$N_{v,j} \simeq \left[\frac{1}{Q_{vib}(T)} e^{-(h/2\pi)(wv/kT)} \right] N \frac{hcB}{kT} (2J+1) \frac{g_N}{\langle g_N \rangle} e^{-hcBJ(J+1)/kT} \quad (15)$$

Le terme entre crochets indique la fraction de population de molécules dans le mode de vibration v , et le terme en dehors des crochets indique la distribution sur les niveaux rotationnels dans cet état de vibration. Pour un même mode de vibration v , les niveaux rotationnels J sont de plus en plus peuplés lorsque J croît, jusqu'à une limite de population atteinte au niveau rotationnel J_{max} ¹⁰, car le facteur de Boltzmann domine et fait tendre la population vers zéro. En d'autres termes, les branches P, Q et R croissent en intensité jusqu'à J_{max} puis décroissent.

10. $J_{max} \simeq \left(\frac{kT}{2hcB}\right)^{\frac{1}{2}}$

Forme des raies

Les raies ro-vibrationnelles ont une certaine largeur spectrale qui dépend à la fois de la nature quantique des transitions (élargissement naturel), de la pression du milieu où est émis le photon (élargissement par collisions) et de la distribution des vitesses des molécules (élargissement Doppler).

Les transitions ro-vibrationnelles ont une durée de vie Δt qui, par le principe d'incertitude d'Heisenberg, induisent une incertitude sur l'énergie ΔE des photons émis lors des transitions qui se traduit par une incertitude sur la fréquence de transition. L'élargissement naturel de la raie est :

$$w_n = \frac{\Delta\nu}{2} \sim \frac{1}{c\Delta t} \quad (16)$$

L'élargissement naturel donne un profil Lorentzien aux raies moléculaires. Ces raies ne peuvent pas être plus étroites que l'élargissement naturel de la transition à laquelle elles sont associées. Dans le cas des atmosphères planétaires, l'élargissement naturel joue un rôle mineur.

A haute pression, le taux de collisions entre molécules est très important. Le temps moyen de collision est plus court que le temps de vie naturelle des niveaux d'énergie excités, ce qui dans une atmosphère dense réduit leur temps de vie. Puisque le temps de vie Δt est plus court, l'élargissement naturel de l'équation 16 est plus grand : $\Delta\nu = w_c$. Le profil résultant de cet élargissement est lorentzien, défini par l'équation :

$$f_{Lor}(\nu) = \frac{1}{2\pi} \frac{w_c}{(\nu - \nu_0)^2 + \frac{w_c^2}{4}} \quad (17)$$

Où w_c est la largeur à mi-hauteur du profil de Lorentz (proportionnel à la pression), ν_0 est la fréquence du centre de la raie.

Dans l'atmosphère, les molécules se meuvent aléatoirement dans toutes les directions de l'espace, en émettant leurs photons. Du point de vue d'un observateur extérieur, certaines molécules semblent venir vers lui tandis que d'autres semblent s'en éloigner. Ceci va induire un décalage Doppler de la fréquence des photons émis, qui va élargir les raies moléculaires. L'élargissement Doppler suit un profil Doppler, défini par l'équation :

$$f_{Dop}(\nu) = \frac{2(\ln 2)^{\frac{1}{2}}}{\pi w_D} e^{-4\ln 2(\nu - \nu_0)^2/w_D^2} \quad (18)$$

Où w_D est la largeur à mi-hauteur du profil Doppler et est proportionnel à l'écart-type de la distribution maxwellienne des vitesses, qui dépend de la température T du gaz et de la masse moléculaire M :

$$w_D = \frac{\nu}{c} \left(8 \ln 2 k N_0 \frac{T}{M} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (19)$$

Avec k la constante de Boltzmann et N_0 le nombre d'Avogadro. L'équation 19 montre que l'élargissement Doppler est proportionnel au nombre d'onde ν de la raie moléculaire. Alors que l'élargissement collisionnel est indépendant du nombre d'onde mais est proportionnel à la pression environnante. A un nombre d'onde donné, l'élargissement Doppler peut être plus petit que l'élargissement collisionnel à haute pression, et plus grand à basse pression.

De manière générale dans les atmosphères planétaires, les élargissements par collisions et par effet Doppler contribuent mutuellement aux profils des raies moléculaires. Le résultat de ces

deux contributions aboutit à la convolution du profil Lorentzien et du profil Doppler qui donne le profil de Voigt :

$$f_{Voigt} = f_{Lor} * f_{Dop} \quad (20)$$

Le calcul du profil de Voigt est complexe, et peut prendre beaucoup de temps de calcul. Dans notre code informatique, nous avons utilisé la méthode de Drummond and Steckner (1985) qui utilise une table pré-calculée du profil de Voigt sur une grille x, y : où x est la distance au centre de raie divisée par la largeur de Lorentz et y le rapport de la largeur Lorentz à la largeur Doppler.

Transitions induites par collisions

Lorsque la densité des molécules est importante, les collisions moléculaires peuvent induire un moment dipolaire transitoire car la distribution des électrons est déformée par les forces de longue portée ou par la superposition des densités de charge. Sur les spectres infrarouge, les absorptions induites par collisions sont de larges bandes spectrales, centrées aux fréquences des transitions vibrationnelles/rotationnelles de la molécule, dont la largeur varie en raison inverse de la durée de collision ($\sim 10^{-12}$ s ou moins). L'absorption induite par collisions d'un couple de molécules est proportionnelle aux produits des densités des molécules. Comme la densité de l'atmosphère décroît avec l'altitude, les absorptions induites par collisions sont relativement faibles dans la haute stratosphère et quasi-nulles dans la mésosphère, zones d'altitudes sondées par l'instrument CIRS.

Dans l'atmosphère de Titan, les principaux couples de molécules induisant des absorptions induites par collisions sont : N_2-N_2 , N_2-H_2 , N_2-CH_4 et CH_4-CH_4 . Sur les spectres infrarouges provenant de CIRS, l'absorption induite par collision de N_2-N_2 domine aux fréquences inférieures à 100 cm^{-1} , N_2-CH_4 entre 150 et 500 cm^{-1} et N_2-H_2 de 550 à 700 cm^{-1} environ.

3.1.2 Spectroscopie en phase solide

Les aérosols, fines particules solides, absorbent le rayonnement UV qui induit un terme de chauffage dans la stratosphère, et émettent du rayonnement infrarouge qui induit un terme de refroidissement. Leur contribution spectrale est non-négligeable sur les spectres thermiques de l'atmosphère de Titan. Vinatier et al. (2012) ont déduit la dépendance spectrale de la profondeur optique des aérosols à partir du continuum des spectres CIRS entre 600 et 1420 cm^{-1} pour une pression de $0,5$ et $1,7 \text{ mbar}$ (figure 18). Cette dépendance spectrale de la profondeur optique des aérosols varie en fonction de la densité d'aérosols présents dans l'atmosphère. Par contre, ces spectres sont uniformes à moyenne latitude (Vinatier et al., 2012).

Au cours de ma thèse, nous avons modifié légèrement la dépendance spectrale des aérosols de Vinatier et al. (2012) à $1,7 \text{ mbar}$ pour mieux reproduire le continuum dans la région entre 590 et 620 cm^{-1} . Nous pouvons voir sur la figure 19 que le spectre synthétique en rouge reproduit mieux la pente spectrale entre 610 et 620 cm^{-1} , ainsi que le continuum entre 590 et 610 cm^{-1} .

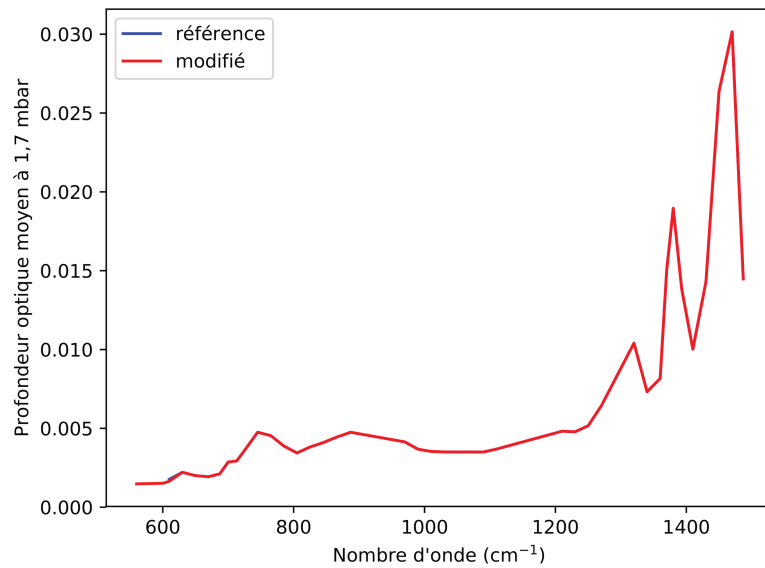


FIGURE 18 – Dépendance spectrale de la profondeur optique moyennée des aérosols à 1,7 mbar, pour plusieurs observations près de l'équateur. La courbe bleue correspond au résultat de Vinatier et al. (2012), elle est quasiment confondue avec la courbe en rouge où nous avons légèrement étendu la gamme spectrale jusqu'à 590 cm^{-1} .

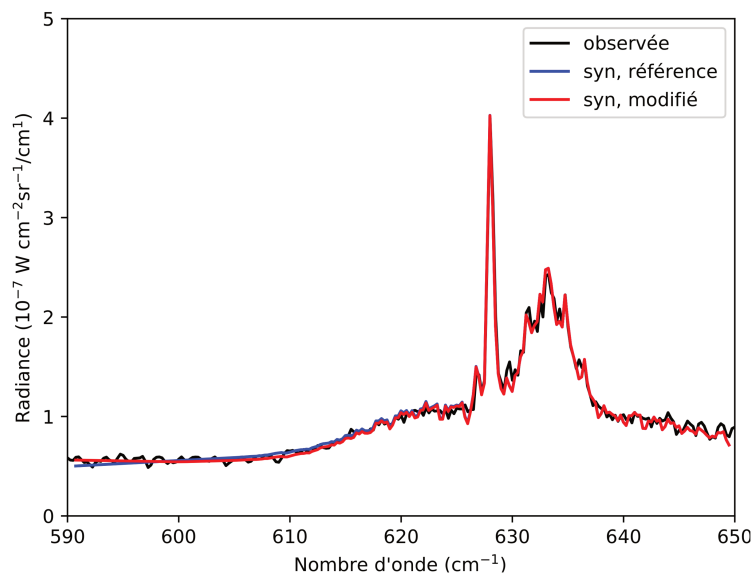


FIGURE 19 – Résultat de la modification du fichier spectral des aérosols après ajustement du spectre par la procédure d'inversion. Le spectre observé est en noir, le spectre synthétique avec le fichier spectral des aérosols de Vinatier et al. (2012) est en bleu, et le spectre synthétique avec le fichier spectral des aérosols modifié dans la figure 18 est en rouge.

3.2 Transfert radiatif

Au sein d'une couche atmosphérique de masse volumique ρ , la variation d'intensité le long du chemin optique est égal à la différence entre la production de photons (l'émission), et les pertes de photons par absorption et diffusion. Les couches atmosphériques sont caractérisées par ces processus via des coefficients : d'émission j_ν ($\text{W.kg}^{-1}.\text{sr}^{-1}/\text{cm}^{-1}$), d'absorption k_ν ($\text{cm}^2.\text{kg}^{-1}$) et de diffusion σ_ν ($\text{cm}^2.\text{kg}^{-1}$). L'équation du transfert radiatif s'écrit donc :

$$\frac{dI_\nu}{dl} = j_\nu \rho - I_\nu(k_\nu + \sigma_\nu)\rho \quad (21)$$

Cependant, la propagation des photons vers le haut de l'atmosphère ne peut plus se faire lorsque tous les photons sont perdus par absorption ou diffusion. On introduit l'épaisseur optique τ_ν qui est définie, à un point du parcours l , par :

$$\tau_\nu(l) = \int_l^\infty (k_\nu(l) + \sigma_\nu(l))\rho(l)dl \quad (22)$$

Le chemin optique au-dessus de l au nombre d'onde ν est dit optiquement mince si $\tau \ll 1$, ou optiquement épais si $\tau \geq 1$. Dans le premier cas, les photons arrivent à atteindre le haut de l'atmosphère avec très peu de perte, sinon une fraction des photons est perdue (ex : $\tau = 1$, perte d'un facteur $1/e$ des photons). En utilisant l'équation 22, l'équation 21 devient :

$$\frac{dI_\nu}{d\tau_\nu(z)} = I_\nu - \frac{j_\nu}{k_\nu + \sigma_\nu} \quad (23)$$

Le deuxième terme de droite définit la fonction source S_ν . Pour une atmosphère en équilibre thermodynamique, la loi de Kirchoff nous dit que le corps émet autant qu'il absorbe à un nombre d'onde ν et une température T donnés, soit la définition du corps noir. Dans ces conditions et en l'absence de diffusion ($\sigma_\nu = 0$), la production des photons par émission est égale au coefficient d'absorption multiplié par la distribution spectrale d'énergie d'un corps noir :

$$j_\nu = k_\nu B(\nu, T) \quad (24)$$

La loi de Planck $B(\nu, T)$ est définie par l'équation :

$$B(\nu, T)d\nu = \frac{2hc^2\nu^3}{e^{\frac{hc\nu}{kT}} - 1} d\nu \quad (25)$$

La fonction source S_ν devient alors égale au rayonnement de corps noir $B(\nu, T)$, et l'équation 23 s'écrit :

$$\frac{dI_\nu}{d\tau_\nu} = I_\nu - B(\nu, T) \quad (26)$$

Sur Titan, l'équilibre thermodynamique local, qui assure l'égalité des fonction source et fonctions de Planck, est valide jusqu'à quelques μbar , soit une altitude limite de 500 à 600 km.

Nous allons voir maintenant que la résolution de l'équation 26 du transfert radiatif dépend de la géométrie de l'observation : au nadir (ligne de visée interceptant la surface), ou au limbe (traversant l'atmosphère jusqu'à l'observateur sans intercepter la surface).

3.2.1 Equation au nadir

La figure 20 schématise le chemin optique d'une géométrie au nadir. Les couches atmosphériques sont supposées être planes et parallèles à la surface, cette approximation se nomme plan-parallèle. Le chemin optique dl projeté sur l'axe z est égal à $dl = dz/\cos\theta$, où θ est l'angle d'émission (propre au nadir). L'équation 26 devient :

$$\cos\theta \frac{dI_\nu}{d\tau_\nu} = I_\nu - B(\nu, T) \quad (27)$$

Généralement, on utilise plutôt $1/\mu = 1/\cos\theta$ qui fait référence à la masse d'air traversée par le chemin optique. L'intégration de l'équation 27 entre le haut de l'atmosphère où l'épaisseur optique est nulle et la surface d'épaisseur optique τ_s , donne l'équation :

$$I(\nu, \mu, 0) = I(\nu, \mu, \tau_s)e^{-\tau_s/\mu} + \int_0^{\tau_s} B(\tau, \nu, T)e^{-\tau/\mu} \frac{d\tau}{\mu} \quad (28)$$

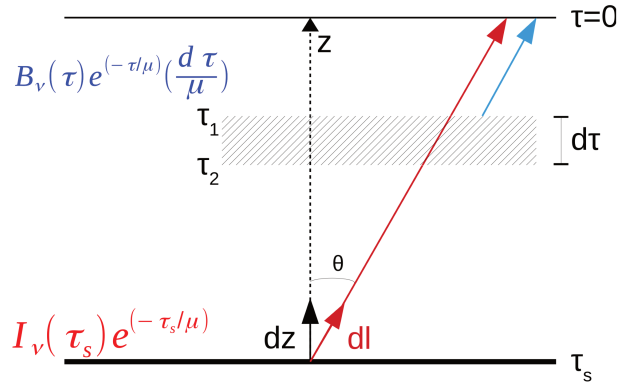


FIGURE 20 – Illustration du chemin optique d'une observation au nadir. θ est appelée angle d'émission, et $\mu = \cos\theta$. Le terme en rouge correspond à l'émission de la surface atténuée par toute l'atmosphère. Le terme en bleu correspond à l'émission de la couche $d\tau$ atténuée par l'atmosphère au-dessus de la couche.

L'équation 27 décrit l'évolution de l'intensité lumineuse le long des couches atmosphériques traversées, en partant de la surface jusqu'au sommet de l'atmosphère où $\tau = 0$. Pour connaître la localisation de la zone d'altitude où l'émission thermique contribue le plus, il faut introduire un nouvel outil : la fonction poids $WF(z, \mu)$. Cette fonction donne le gradient de la transmittance à travers l'atmosphère dans la direction μ , et pondère donc la contribution de chaque couche à l'émission observée $I = \int_0^\infty WF(z)B(\nu, T, z)dz$. Elle est définie par l'équation :

$$WF(z, \mu) = \frac{d}{dz} e^{-\tau_\nu/\mu} = -\frac{e^{-\tau_\nu/\mu}}{\mu} \frac{d\tau_\nu}{dz} \quad (29)$$

Sachant que $d\tau_\nu = -\sigma_\nu n(z)dz$, où σ_ν correspond à la section efficace d'absorption à la fréquence ν et $n(z)$ la densité moléculaire. Et en se plaçant dans le cas d'une atmosphère en équilibre hydrostatique avec la loi des gaz parfaits, nous obtenons :

$$d\tau_\nu = \frac{\sigma_\nu H}{kT} dp \quad (30)$$

En combinant les équations 29 et 30, nous obtenons :

$$WF(p, \mu) = \frac{\sigma_v P}{\mu k T} e^{-\frac{\sigma_v}{\mu}} = \frac{\tau_v}{\mu H} e^{-\tau_v/\mu} \quad (31)$$

L'altitude correspondant au maximum d'émission thermique est atteinte lorsque la dérivée de l'équation 31 par rapport à z est nulle. Elle est atteinte pour une altitude où $\tau = \mu$, si H est constant avec l'altitude.

Le code que nous utilisons prend en fait en compte la variation de Θ avec l'altitude, l'approximation plan-parallèle n'étant pas entièrement valide pour Titan. A l'altitude z , l'angle Θ est calculé en utilisant la loi des sinus, par l'équation :

$$\sin \Theta = \sin \Theta_0 \frac{R}{R+z} \quad (32)$$

Où Θ_0 est l'angle d'émission à la surface, z l'altitude et R le rayon de Titan.

3.2.2 Equation au limbe

La figure 21 schématise le chemin optique d'une géométrie au limbe. Dans ce cas, la solution de l'équation de transfert radiatif est donnée par l'équation :

$$I(\nu) = \int_{-\infty}^{+\infty} B(\nu, T) e^{-\tau_s(\nu)} d\tau_s \quad (33)$$

Où la variation de l'épaisseur optique $d\tau_s$ sur le chemin optique est définie par :

$$\tau_s(\nu) = \int_s^{\infty} k_\nu ds \quad (34)$$

En utilisant les propriétés géométriques de l'observation, nous pouvons définir ds comme :

$$ds = \sqrt{(R+z+dz)^2 - (R+z_0)^2} - \sqrt{(R+z)^2 - (R+z_0)^2} = d\left(\sqrt{(R+z)^2 - (R+z_0)^2}\right) \quad (35)$$

En injectant l'équation 35 dans l'équation 34, et en multipliant par un facteur 2 le chemin optique traversé ds (car il y a avant et après le point tangent), nous obtenons :

$$\tau_{s,tot} = 2 \int_{z_0}^{\infty} k_\nu \frac{R+z}{\sqrt{(R+z)^2 - (R+z_0)^2}} dz \quad (36)$$

La fonction poids est définie par :

$$WF(z) = \frac{k(R+z)}{\sqrt{(R+z)^2 - (R+z_0)^2}} \left[e^{-\tau_s(z)} + e^{-(2\tau_s(z_0) - \tau_s(z))} \right] \quad (37)$$

Le maximum d'émission thermique est alors atteint pour $z = z_0$, l'altitude du point tangent, si τ_s n'est pas infini.

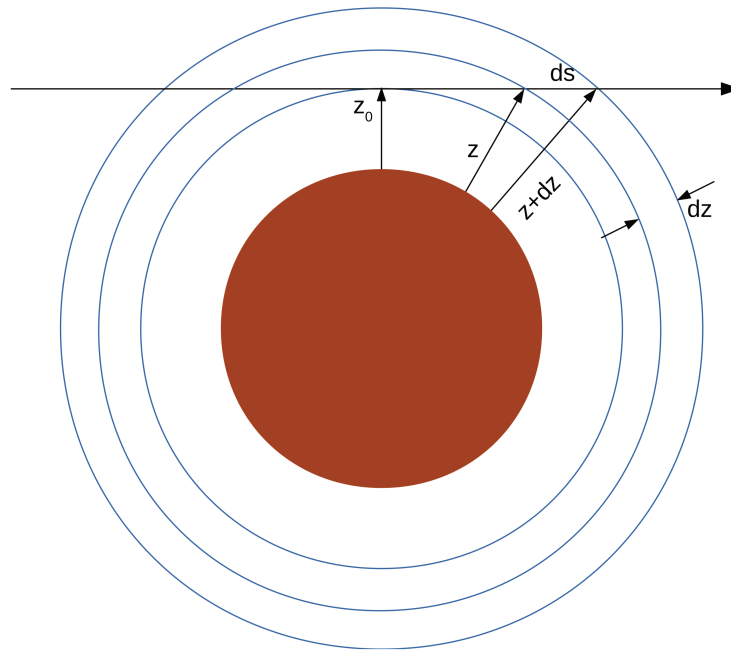


FIGURE 21 – Illustration du chemin optique avec une géométrie dite au limbe. z_0 correspond à la distance minimale entre la ligne de visée et la surface.

L'avantage des observations au limbe par rapport au nadir est d'avoir une plus grande épaisseur optique le long du chemin optique, ce qui permet d'observer des molécules très peu abondantes.

$$\frac{\tau_{limbe}(z_0)}{\tau_{nadir}(z_0)} = \sqrt{2\pi \frac{R}{H}} \quad (38)$$

Où R est le rayon de la planète, et H est l'échelle de hauteur. Pour Titan, ce facteur vaut environ 20. L'autre intérêt est d'avoir une fonction poids très piquée à l'altitude z_0 (si l'épaisseur optique à cette altitude n'est pas trop grande). En combinant des visées au limbe à différentes altitudes, il est alors possible d'obtenir un profil vertical d'abondance.

L'objectif de ma thèse est de déterminer les profils verticaux des composés photochimiques peu abondants dans l'atmosphère de Titan, et ce sur une large gamme d'altitude. C'est pour cette raison que j'utilise des séquences d'observations au limbe effectuées par Cassini.

3.2.3 Raie en émission/absorption

Les spectres observés par CIRS ne permettent pas de sonder une altitude plus basse que 90 km. La couche atmosphérique la plus basse observée est toujours plus froide que les couches atmosphériques plus élevées, du fait que la température croît avec l'altitude dans la stratosphère. Donc le continuum formé dans la basse stratosphère est plus "froid" (radiance faible), et les raies provenant d'altitudes plus hautes et donc plus chaudes sont vues en émission.

Extraction et post-traitement des données

4

Sommaire

4.1	Le spectromètre infrarouge : CIRS	41
4.1.1	Description de l'instrument	41
4.1.2	Etalonnage des données	44
4.1.3	Interférences électriques : spike	45
4.2	La base de données <i>cirsdata</i>	47
4.2.1	Extraction des données	47
4.2.2	Géométrie des observations	52
4.2.3	Liste des observations	53
4.3	Amélioration du rapport signal-à-bruit des données	57
4.4	Correction du continuum négatif	60
4.4.1	Cas d'étude : T71	61
4.4.2	Application	65
4.4.3	Conclusion	66

Dans ce chapitre, je traite tout ce qui concerne les observations analysées durant ma thèse. Je commence par une description de l'instrument CIRS, de son mode de fonctionnement, du type d'observations utilisées et des erreurs instrumentales liées aux données. Puis, je détaille brièvement la méthodologie que j'ai appliquée pour trouver un bon jeu de données et comment l'extraire à partir de la base de données. Au milieu de la thèse, j'ai appliqué une nouvelle procédure sur les spectres observés que je détaille par la suite. Et enfin, je décris une autre procédure qui nous a permis de "corriger" les spectres observés présentant un continuum négatif.

4.1 Le spectromètre infrarouge : CIRS

4.1.1 Description de l'instrument

CIRS (Composite InfraRed Spectrometer) est un spectromètre infrarouge à transformée de Fourier opérant dans l'infrarouge moyen et lointain. L'avantage de ce type de spectromètre est de pouvoir analyser l'atmosphère sur une grande gamme spectrale. La figure 22 présente le schéma optique de l'instrument CIRS. Les photons entrant dans le télescope Cassegrain sont réfléchis par le miroir primaire de 50,8 cm de diamètre vers un miroir secondaire de 7,6 cm de diamètre. Après réflexion sur le miroir secondaire, les photons sont séparés en deux faisceaux par un miroir en forme de dièdre et dirigés vers deux interféromètres différents. A droite sur le schéma, les photons sont amenés à un interféromètre de type Martin-Puplett qui permet d'analyser les photons reçus dans l'infrarouge lointain de 10 à 600 cm^{-1} . Ces photons sont collectés par deux détecteurs thermocouples au niveau du plan focal nommé FP1 (focal plan).

A gauche sur le schéma, les photons sont amenés à un interféromètre de type Michelson dans l'infrarouge moyen : de 580 à 1100 cm^{-1} sur le FP3, et de 1050 à 1500 cm^{-1} sur le FP4¹¹. Ces photons sont collectés par une barette 1x10 de détecteurs en tellurure de mercure-cadmium (HgCdTe) de type photoconducteur au niveau du plan focal FP3, et de type photovoltaïque au FP4 (figure 23). Chaque détecteur des plans focaux FP3 et FP4 a un champ de vue de 0,27x0,27 mrad², ce qui donne, après projection sur l'atmosphère de Titan, une résolution verticale variant de 10 à 40 km en fonction de la distance entre la sonde Cassini et Titan. CIRS peut enregistrer des spectres avec différentes résolutions spectrales (0.5, 1, 3 et 15.5 cm^{-1}), qui ont un objectif scientifique différent. Pour plus de détails sur l'instrument CIRS, j'invite les lecteurs à voir les articles de Kunde et al. (1996), Flasar et al. (2004), et Jennings et al. (2017).

Au cours de ma thèse, j'ai analysé les spectres infrarouges des plans focaux FP3 et FP4 avec une résolution spectrale de 0,5 cm^{-1} qui permettent d'observer le méthane (utilisé pour contraindre la température) et une dizaine de composés photochimiques listés au chapitre 2 comprenant des hydrocarbures, des nitriles et le CO₂. De par la géométrie linéaire des détecteurs des plans focaux FP3 et FP4, il est possible d'analyser l'atmosphère de Titan au limbe pour différentes altitudes (plus de détails en section 4.2.2) et ainsi de déduire les profils verticaux de température et d'abondances de composés photochimiques. J'ai choisi d'analyser les spectres enregistrés avec une résolution spectrale de 0,5 cm^{-1} car les bandes spectrales des composés photochimiques listés sont bien séparées et peuvent être analysées indépendamment.

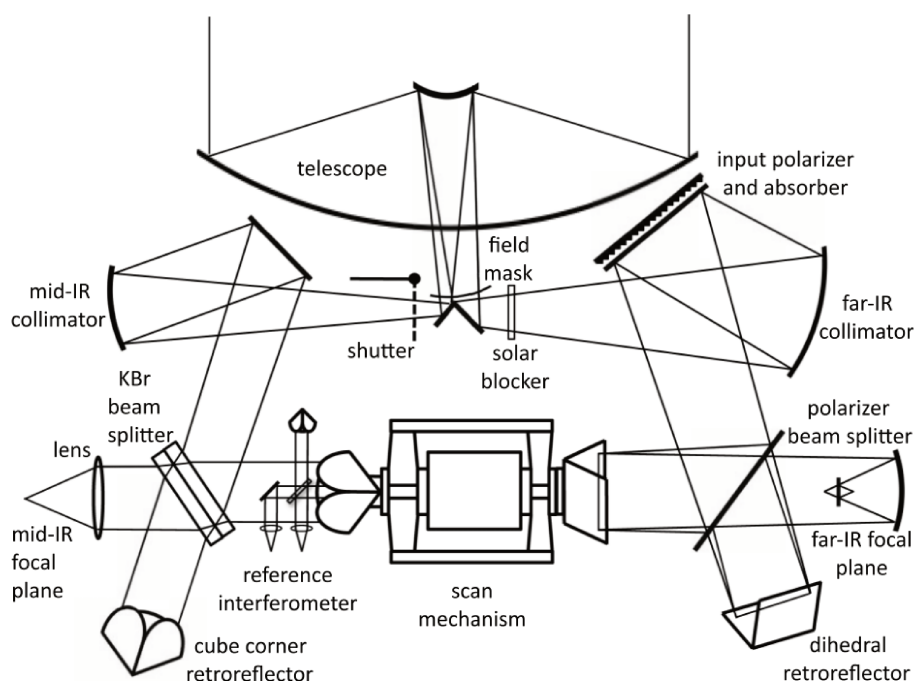


FIGURE 22 – Diagramme conceptuel du spectromètre infrarouge CIRS. Crédit : Jennings et al. (2017).

11. Le FP2 a été supprimé en cours de réalisation en 1992. Il devait couvrir les grands nombre d'onde de l'actuel FP1 (~400 - 600 cm^{-1}). Maintenant, cette gamme spectrale est plus bruitée (Jennings et al., 2017)

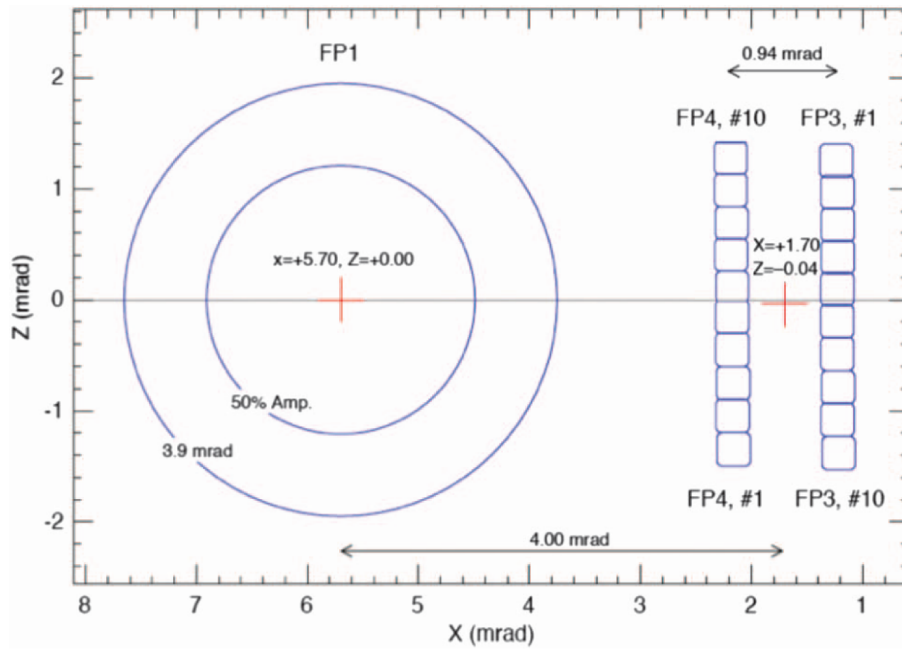


FIGURE 23 – Plans focaux de l'instrument CIRS. Crédit : Jennings et al. (2017).

L'interféromètre de type Michelson

A l'arrivée du rayonnement dans l'interféromètre de Michelson, celui-ci est séparé en deux faisceaux d'intensité comparable par une lame en bromure de potassium KBr semi-réfléchissante ("Beam splitter", fig. 22), appelée la séparatrice. Un faisceau se dirige vers un miroir fixe ("Cube corner retroreflector"), se réfléchit vers la séparatrice et réfléchi par celle-ci vers les détecteurs. Tandis que l'autre faisceau est dirigé vers un miroir mobile, qui est actionné par un moteur, puis est réfléchi vers la séparatrice qu'il traverse pour aller vers les détecteurs. La différence de chemin optique entre ces deux chemins est appelée la différence de marche δ . Les détecteurs enregistrent donc la modulation du signal $i(\delta)$ reçu en fonction de la différence de marche δ , appelé interférogramme, décrit par l'équation :

$$i(\delta) = \int_0^{\infty} r_{\nu} [I_{\nu} - B_{\nu}(T_{instru})] \cos(2\pi\nu\delta) d\nu \quad (39)$$

Où I_{ν} est la radiance de Titan au nombre d'onde ν , $B_{\nu}(T_{instru})$ est la radiance de corps noir de l'instrument à la température T_{instru} et r_{ν} est la sensibilité de l'instrument. Avec l'équation 39, nous pouvons voir que lorsque les deux faisceaux sont en phase ($\delta = 0$), l'amplitude est maximale (frange centrale), et cela quel que soit le nombre d'onde ν . Par contre, s'ils arrivent avec un certain déphasage ($\delta \neq 0$), chaque photon de nombre d'onde ν contribue au signal avec un facteur qui lui est propre.

Pour ne pas rater la frange centrale, le miroir mobile de l'interféromètre est placé à une petite distance ϵ avant la distance où $\delta = 0$ et avance à une vitesse constante de 0,0208 cm/s. La distance maximale δ_{max} du miroir mobile détermine la résolution spectrale $\Delta\nu$ des spectres observés, jusqu'à 2 cm ou moins, par la relation :

$$\Delta\nu = \frac{1}{2\delta_{max}} \quad (40)$$

Le miroir mobile se déplace donc pendant un certain temps, correspondant à la résolution spec-

trale recherchée. Le mécanisme d'enregistrement s'effectue tous les 1/8 de secondes (rti : real time interrupt). Pour une résolution spectrale de $0,5 \text{ cm}^{-1}$, le miroir s'est déplacé pendant ~ 50 secondes pendant lesquelles 400 points de mesures ont été enregistrés pour l'intéférogramme.

Le spectre en fréquence C_ν est obtenu en effectuant la transformée de Fourier de l'intéférogramme multiplié par une fonction d'apodisation $A(\delta)$:

$$C_\nu = r_\nu (I_\nu - B_\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} i(\delta) A(\delta) \cos(2\pi\nu\delta) d\delta \quad (41)$$

Dans le cas théorique idéal, $A(\delta)$ vaut 1 pour une valeur de δ inférieure ou égale à δ_{max} , et est nulle au-delà, cette fonction $A(\delta)$ est appelée la fonction porte (fig.24, *boxcar-spatial*). La transformée de Fourier de la fonction porte est la fonction sinus cardinale qui possède des lobes secondaires marqués autour du nombre d'onde de la raie spectrale (fig.24, *boxcar-freq*). Pour être plus précis sur la contribution spectrale de chaque molécule à un nombre d'onde donnée, il faut réduire ces lobes secondaires. La transformée de Fourier de la fonction de Hamming (fig.24, *Hamming-freq*) permet de réduire la contribution des lobes secondaires. C'est pour cette raison que j'ai utilisé pendant ma thèse les spectres apodisés par la fonction de Hamming. Mais en contrepartie, la transformée de Fourier de la fonction de Hamming est environ 50% plus large qu'en l'absence d'apodisation.

La fonction de Hamming dans le domaine spatial est définie par l'équation :

$$A(\delta) = 0,54 + 0,46 \cos\left(\pi \frac{\delta}{\delta_{max}}\right) \quad (42)$$

Concernant l'incertitude liée aux mesures, nous utilisons le Noise Equivalent Spectral Radiance (NESR) qui est défini comme la moyenne quadratique du bruit en unité de radiance. Le NESR pour CIRS est donné par l'équation :

$$NESR(\nu) = \frac{NEP(\nu)}{\eta_{sys}\eta_{opt}\eta_{diff}A\Omega\Delta\nu\sqrt{t}} \quad (43)$$

Où $NEP(\nu)$ est le Noise-Equivalent-Power du détecteur ($\text{W}/\text{Hz}^{0,5}$), η_{sys} est l'efficacité du système électrique, η_{opt} est l'efficacité du système optique, η_{diff} est la quantité de photons non perdue par diffraction, A l'aire du miroir principal (cm^2), Ω l'angle solide du champ de vue du télescope (sr), $\Delta\nu$ la résolution spectrale (cm^{-1}), et t le temps d'intégration lors de la mesure. Le NESR a été déterminé par CIRS pour les différentes résolutions spectrales lors du flyby de Jupiter en 2000. Nous utilisons ces mesures de NESR comme référence.

4.1.2 Etalonnage des données

Les interférogrammes bruts acquis par l'instrument CIRS sont étalonnés par l'équipe de calibration CIRS, localisée à la NASA-GSFC (Greenbelt), et transférés au LESIA sur le serveur lesia08. Au cours de la mission, plusieurs versions de calibrations ont été effectuées avec une méthodologie de traitement différente, dont leur nom commence par vX. A chaque étape de la chaîne de calibration, une version des données est sauvegardée dans différents dossiers auxquels on ajoute une suite de chiffres pour différencier les étapes de calibration (i.e : vX.Y.Z). Pendant ma thèse, j'ai utilisé la dernière version de calibration nommée *calib_v4.3.5*, qui est disponible

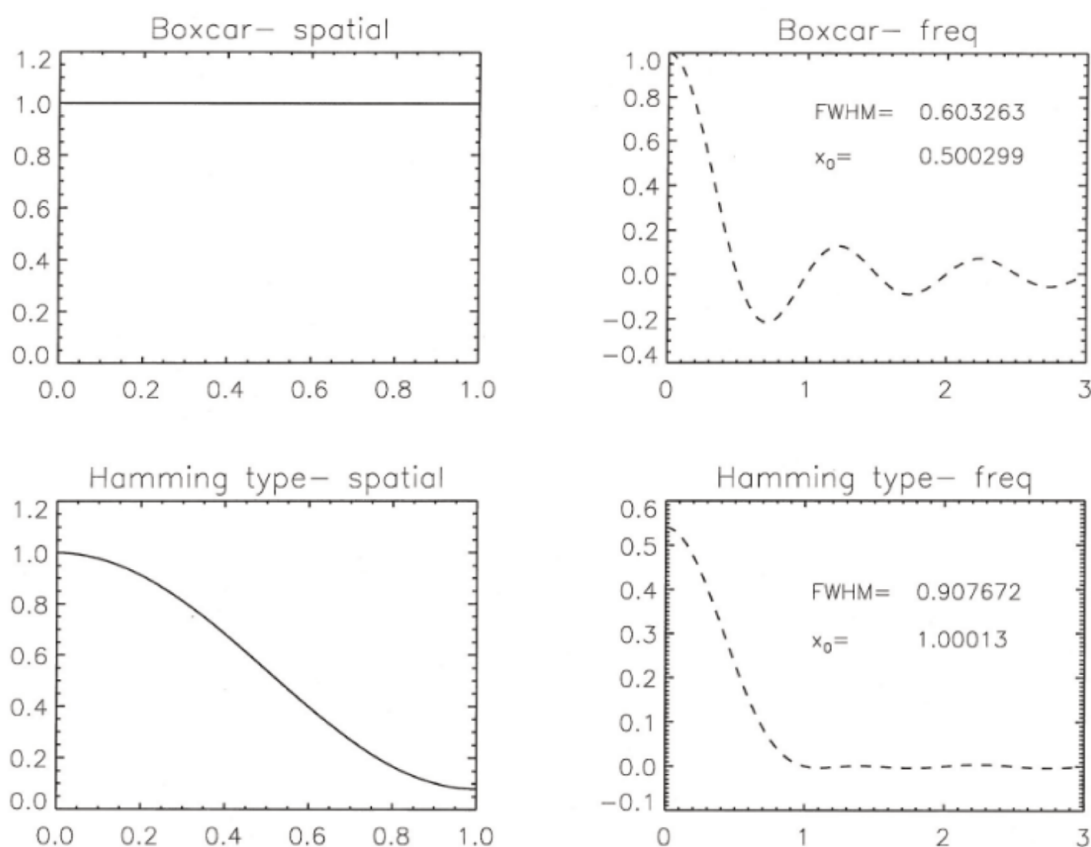


FIGURE 24 – Illustration des fonctions de fenêtrage utilisées par CIRS : la fonction porte (boxcar) et la fonction de Hamming. Ces fonctions sont représentées à gauche et leurs transformées de Fourier, dans le domaine des fréquences, sont présentées à droite. Crédit : Nixon et al. (2012a), p.59.

publiquement sur le "Planetary Data System" (PDS). Cette version de calibration utilise un millier d'interférogrammes de fond de ciel, appelé *Deep Space interferogram*¹², et une centaine d'interférogrammes du courant d'obscurité, appelé *Shutter interferogram*¹³, soit une quantité d'interférogrammes bien plus importante que la précédente version de calibration v3. Ces interférogrammes permettent d'étalonner les interférogrammes enregistrés sur les sources et d'augmenter le rapport signal à bruit des spectres. La version de calibration v4 a donc les spectres les moins bruités de la base de données.

4.1.3 Interférences électriques : spike

Malgré les processus de calibration des données, les spectres observés peuvent montrer des courtes gammes spectrales très bruitées qui sont le résultat d'interférences électriques, nommées

12. Pour connaître le nombre de Deep Space utilisés pour calibrer les spectres, il faut utiliser le champ "DS_NAVÉ" pris à la date "DS_SCET".

13. Pour connaître le nombre de shutter, il faut utiliser le champ : "SH_NAVÉ" pris à la date "DS_SH_SCET".

spikes, au moment de l'acquisition de l'interférogramme. Ces spikes ont différentes origines liées à leur fréquence :

- 0,5 Hz : se produisent lorsque CIRS envoie les données à Cassini (12 cm^{-1})
- 8 Hz : synchronisé avec l'horloge de Cassini (191 cm^{-1})
- 8,33 Hz : semble lié au spike à 8 Hz mais la source reste inconnue

J'ai tracé sur les figures 25 et 26 l'écart type d'une sélection de spectres à une altitude donnée, où nous pouvons observer les spikes sur toute la plage spectrale du FP3 (le FP4 présente peu de spikes). Les pics d'intensité indiquent la position des spikes, où nous pouvons voir le motif régulier des spikes à 0,5 Hz tous les 12 cm^{-1} . Les flèches bleues et rouges indiquent l'emplacement théorique des spikes à 8 et 8,33 Hz, respectivement. J'ai tracé le fichier NESR en cyan, où nous pouvons constater que pour certains flybys (i.e : figure 26) le bruit NESR est sous-estimé par rapport à la dispersions des mesures. Nous reviendrons sur l'impact de cette sous-estimation au chapitre 5.

J'ai remarqué que certains spikes avaient disparu après le flyby T71 (6 juillet 2010) comme observé sur la figure 26. Après cette date, l'équipe de calibration CIRS a procédé à un changement du logiciel à bord de Cassini qui a permis de fortement diminuer l'amplitude de ces spikes.

J'ai donc mis au point un algorithme permettant de modifier le fichier NESR afin qu'il prenne en compte la contribution des spikes (code python en annexe A.4.1). Pour cela, j'ai recherché tous les points spectraux de l'écart-type dont la radiance dépassait un certain seuil de radiance. Ce seuil est tracé en vert pointillé et correspond à la moyenne de la radiance de l'écart-type par paquets de 42 points spectraux (tracé en vert sur la figure 27), multiplié par un facteur 1,10 à 1,30 (en fonction des spikes observés). A chaque groupe de points spectraux dépassant ce seuil (points orange), j'ai recherché la position du maximum de radiance correspondant à la localisation du spike ν_s (points rouges). J'ai ajouté les contributions de radiance liées aux spikes quadratiquement au fichier NESR, par l'équation :

$$I_{new} = \sqrt{I_{NESR}^2 + \sum_s G(\nu_s, I_s, FWHM)^2} \quad (44)$$

Où G est une gaussienne, centrée à la fréquence du spike ν_s , d'amplitude I_s correspondant à l'écart quadratique entre la radiance du spike et la radiance du NESR à la fréquence ν_s , et de largeur à mi-hauteur FWHM équivalente à celle des observations. Les contributions individuelles de chaque gaussienne sont tracées en pointillés de couleur orange. Le résultat du fichier NESR modifié est tracé en rouge. Ce travail a été fait suite à une investigation plus approfondie dans la recherche des sources d'erreur pour les rapports isotopiques du HCN, décrits au chapitre 10. Je n'ai pas pris en compte la modification des fichiers NESR dans mes inversions des profils de température et d'abondances des composés photochimiques.

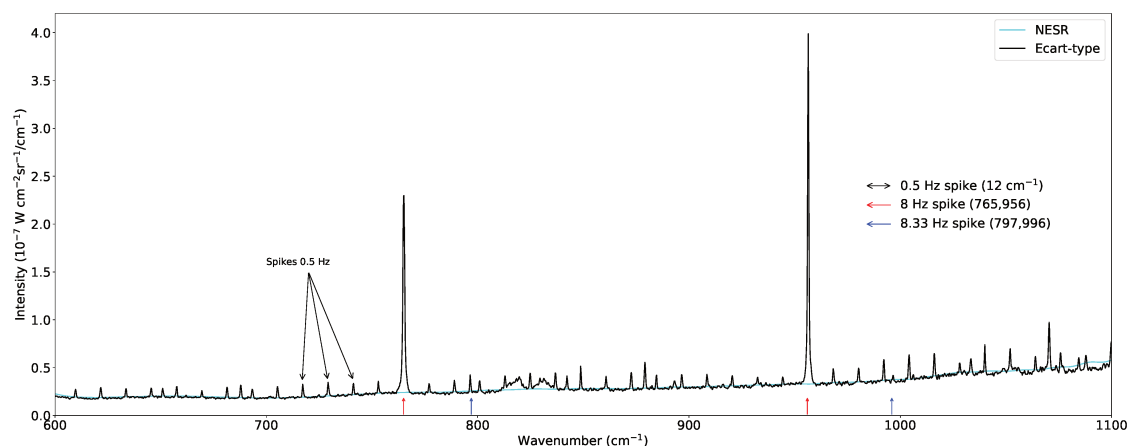


FIGURE 25 – Ecart-type d'une sélection de spectres FP3 entre 600 et 1100 cm^{-1} enregistrés lors du flyby T65 (courbe noire, 12 janvier 2010). Le tracé cyan correspond au fichier NESR. Les flèches rouges et bleues correspondent à l'emplacement théorique des spikes 8 et 8,33 Hz, respectivement. La distance entre deux spikes à 0,5 Hz consécutifs est indiquée par la double flèche en noire (elle correspond à 12 cm^{-1}).

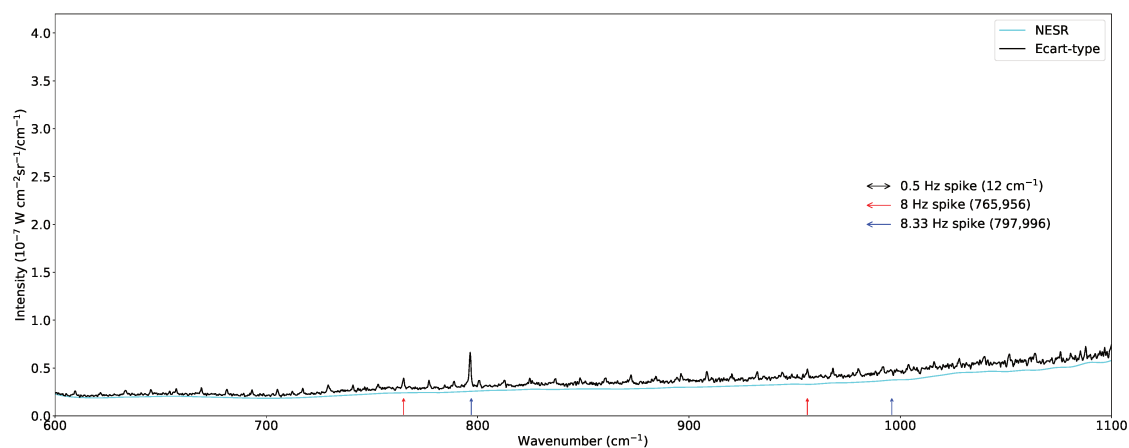


FIGURE 26 – Similaire à la figure 25, pour un échantillon de spectres FP3 enregistrés lors du flyby T90 (5 avril 2013).

4.2 La base de données *cirsddata*

4.2.1 Extraction des données

Dans la base de données *cirsddata*, les données sont classées en fonction de la version de calibration utilisée. Puis pour chaque version de calibration, les données sont classées en fonction de l'apodisation appliquée. Et enfin, les données sont classées par mois.

J'ai choisi d'extraire les données correspondant à la dernière version de calibration (*calib_v4.3.5*) dont les spectres ont été apodisés par la fonction de Hamming avec une résolution spectrale de 0,5 cm^{-1} . A chaque mois de mission, je recherche les observations potentielles à l'aide du code informatique générant une widget (figure 28) *read_vanilla_titan_new.pro* écrit en

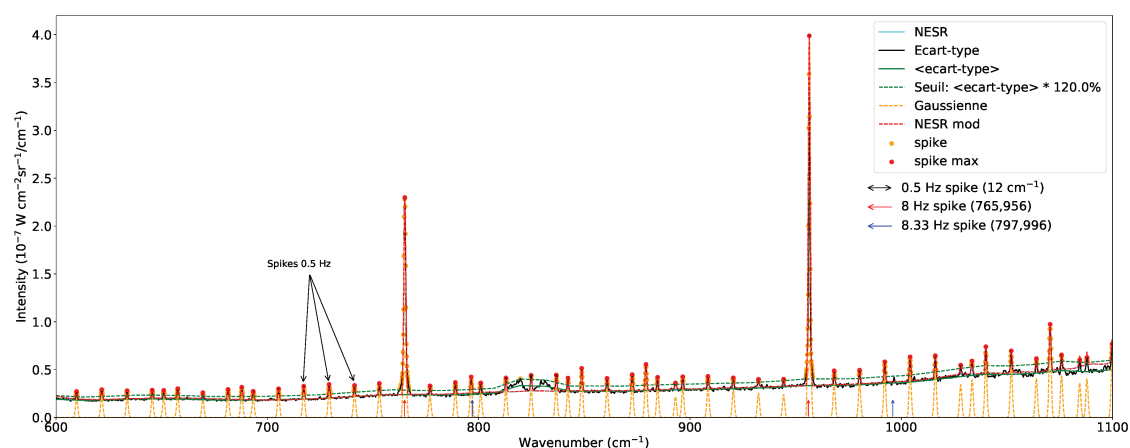


FIGURE 27 – Similaire à la figure 25 et pour le même échantillon de spectres. La courbe verte correspond à la moyenne spectrale de l'écart-type des spectres sélectionnés par paquets de 42 points spectraux. Le tracé vert pointillé correspond au seuil où j'estime détecter un spike ($\langle \text{ecart-type} \rangle * 1,20$). Les tracés pointillés jaunes correspondent aux gaussiennes modélisées à l'emplacement des spikes détectés. Le tracé rouge pointillé correspond au fichier NESR modifié.

IDL, développé par Thierry Fouchet. Dans ce programme, j'utilise des critères spatio-temporels pour contraindre ma recherche de spectres. Les critères de sélection sont les suivants, de haut en bas :

- la plage horaire recherchée pour déterminer la plage en SCET¹⁴
- sélectionner Système III (les coordonnées géographiques)
- sélectionner limbe (pour la géométrie d'observation)
- la distance entre Cassini et Titan ($< 200\,000$ km)
- les détecteurs (11 à 20 pour le FP3, et 21 à 30 pour le FP4)
- la gamme de latitude de la zone observée
- la gamme de longitude de la zone observée
- la gamme de l'angle d'émission est utilisée pour le mode all_q_on¹⁵
- la gamme d'altitudes de la zone observée
- rti 401 (indiquant la résolution spectrale, voir section 4.1.1)

Chaque spectre CIRS est précédé de plusieurs informations sur la géométrie d'observation lors du flyby de Titan, comme la latitude/longitude/altitude de la zone observée par le détecteur. Le programme va rechercher dans la base de données *cirsdata* tous les spectres CIRS dont la géométrie d'observation satisfait tous les critères de sélection choisis. Une fois la recherche terminée, le programme ouvre deux nouvelles fenêtres dont la première (figure 29) affiche un spectre infrarouge parmi la totalité trouvée. Avec cette fenêtre, je peux regarder en direct l'aspect des spectres CIRS trouvés et retirer les spectres qui présenteraient des défauts (comme des continus négatifs, voir section 4.4). Après avoir retiré ces spectres, je peux moyenner les spectres restants pour augmenter le rapport signal à bruit qui est augmenté par un facteur \sqrt{N} , où N est le nombre de spectres moyennés, et le résultat est affiché dans une nouvelle fenêtre (figure 30).

Pour extraire les données d'une observation, j'ai appliqué la méthodologie ci-après. Dans un

14. SCET est un acronyme pour SpaceCraft Event Time, ce nombre est exprimé en secondes. Il correspond au temps écoulé depuis le 1er janvier 1970 à 00h00 UTC (le temps Unix).

15. Cet angle correspond à l'angle entre la ligne de visée et la normale à la surface.

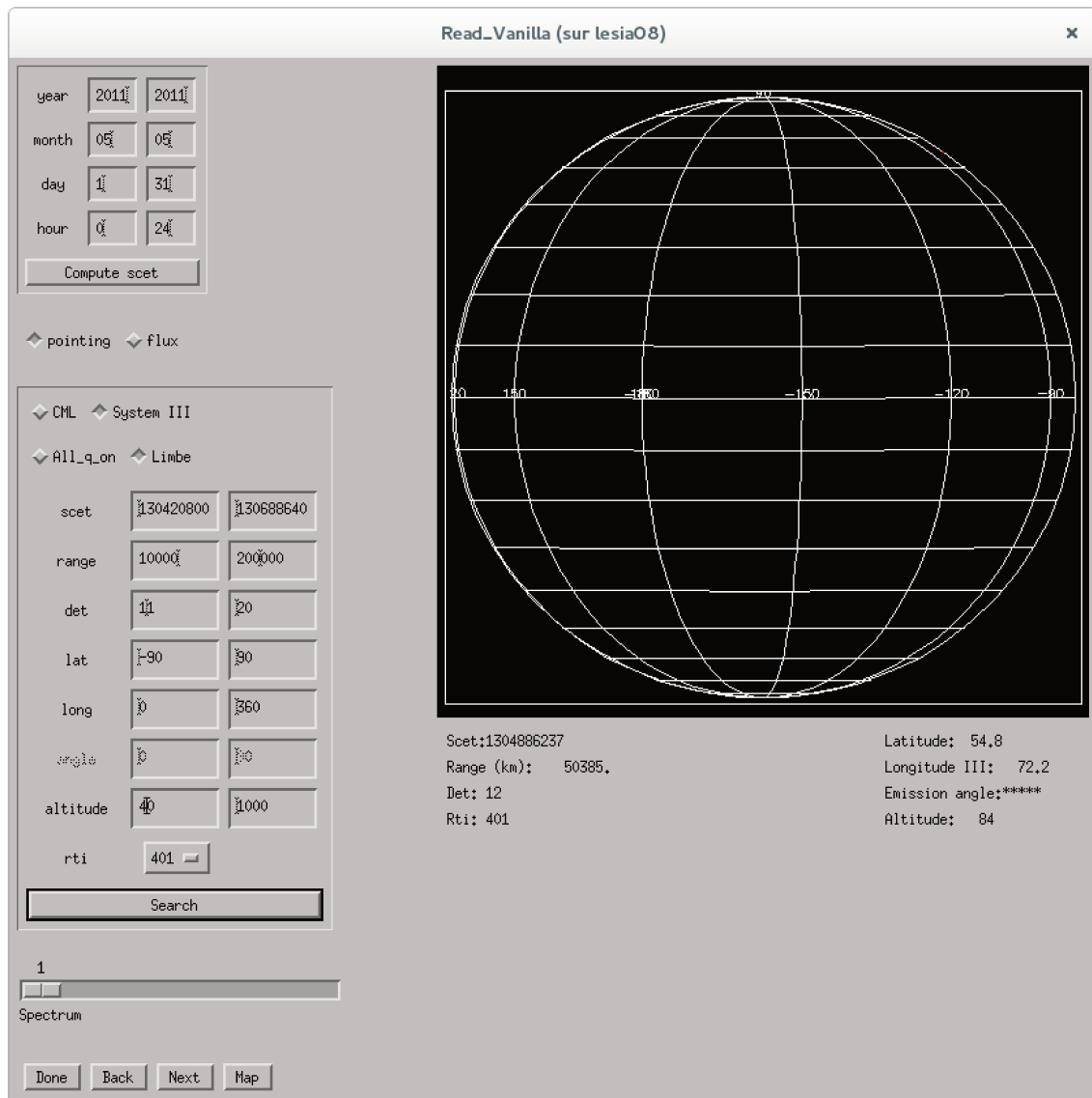


FIGURE 28 – Fenêtre principale du programme IDL *read_vanilla_titan_new.pro*. A partir de cette fenêtre, je rentre les différents critères de sélection pour rechercher les données souhaitées.

premier temps, j'extraie tous les spectres au limbe présents afin d'avoir une vue d'ensemble de la géométrie d'observation. Pour cela, je trace les paramètres géographiques de tous les spectres (figure 31). De haut en bas, je trace la latitude_zpd[5], la longitude_zpd[5], la distance entre la sonde Cassini et Titan en fonction du temps (SCET). Le terme [5] correspond au milieu du détecteur, et le zpd signifie "zero path difference". Je fais attention à ce que la latitude ne varie pas fortement au cours de l'observation, car les variations latitudinales peuvent être importantes dans les atmosphères planétaires, en particulier à haute latitude dans le cas de Titan. Puis je m'intéresse à la répartition des altitudes sondées. Généralement, nous avons un premier ensemble de mesures sondant la moyenne atmosphère suivit d'un second ensemble de mesures sondant la basse atmosphère, ces deux ensembles sont répétés chacun une seconde fois (figure 31). En m'aidant de cette figure, je retourne sur le programme IDL *read_vanilla_titan_new.pro* pour extraire cette fois-ci le spectre moyenné de chaque détecteur (répartis sur une gamme d'altitude res-

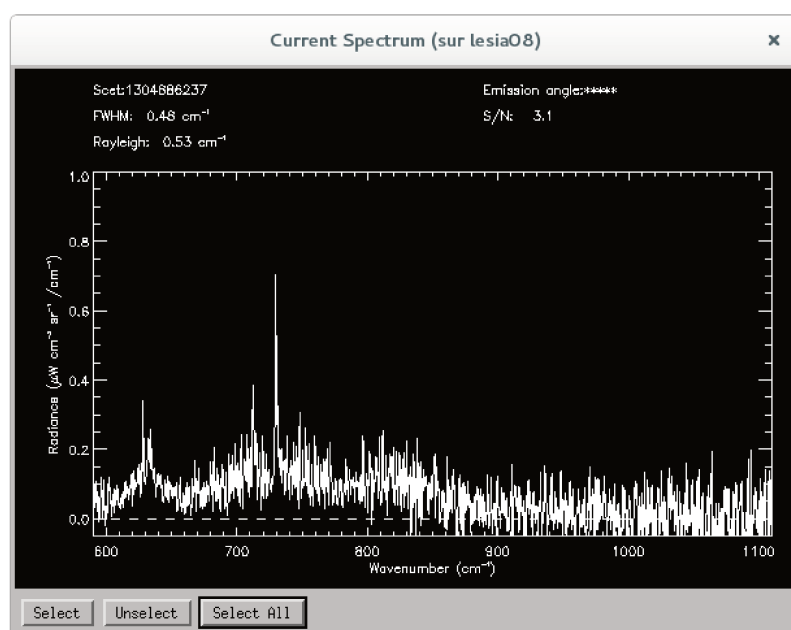


FIGURE 29 – Cette fenêtre affiche le spectre sélectionné parmi l'ensemble des spectres.

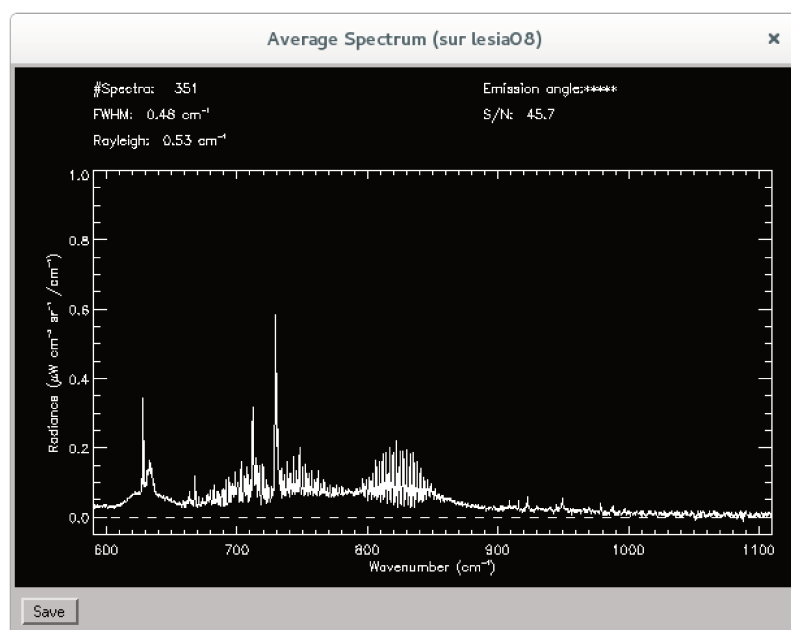


FIGURE 30 – Cette fenêtre affiche la moyenne de tous les spectres sélectionnés.

treinte) et de chaque ensemble de mesures, en vérifiant l'allure de chaque spectre individuel. Comme dernière étape, je regarde si des spectres au nadir ont été enregistrés dans la même gamme spatio-temporelle que les spectres au limbe. Si il y en a, je sélectionne les spectres au nadir ayant une allure correcte, et surtout le plus faible angle d'émission possible, puis je les moyenne.

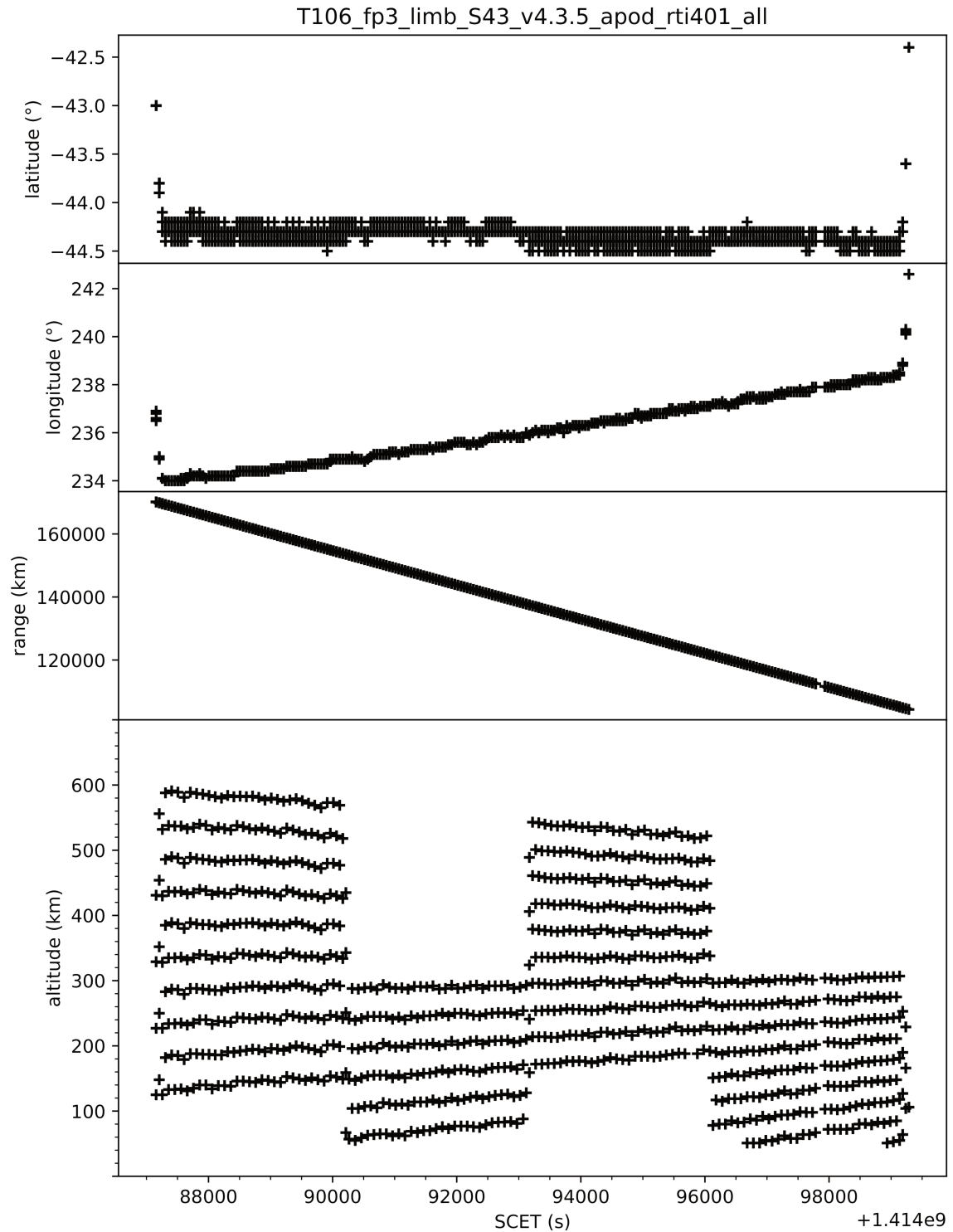


FIGURE 31 – Diagramme de la géométrie d'observation du flyby T106. De haut en bas : latitude_zpd[5], longitude_zpd[5], distance Cassini-Titan en fonction du temps (SCET). Chaque croix de chaque graphe correspond à un spectre individuel.

4.2.2 Géométrie des observations

Au limbe

Les spectres au limbe visent les bords de Titan. De part la forme linéaire de l'ensemble des détecteurs des plans focaux FP3 et FP4 explicités dans la section 4.1.1, CIRS est capable de mesurer simultanément plusieurs niveaux d'altitude pendant un flyby de Titan. Le schéma de la figure 32 représente la projection des détecteurs d'un des plan focaux FP3 ou FP4 sur l'atmosphère de Titan. L'altitude sondée est généralement comprise entre 100 et 600 km, avec une résolution verticale variant entre 10 et 40 km (dépendant de la distance entre l'orbiteur Cassini et Titan lors du flyby).

Pour certains flybys, notamment pendant l'automne sud dans la région polaire sud, les spectres au limbe les plus profonds montraient une radiance anormale comparée aux spectres les plus hauts dans l'atmosphère. J'ai développé un code Python pour tracer la ligne de visée des détecteurs afin de déterminer les latitudes traversées par la ligne de visée (voir annexe A.1 et A.4.2). Si la ligne de visée traverse des plus grandes latitudes avant l'altitude minimale sondée, alors la zone sondée se trouve de l'autre côté de la région polaire et est contaminée par l'émission thermique émise par les couches atmosphériques de la région polaire qui se trouvent en avant. Et à cette période de l'année (automne sud), les variations en latitude de la température et des abondances des composés photochimiques sont très importantes. Nous ne pouvons donc pas déterminer avec certitude les profils de température et d'abondances à ces altitudes sondées (cas pour T78, T110, T113, T115, T117).

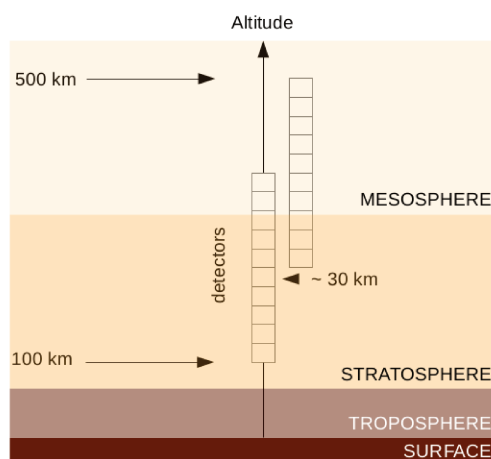


FIGURE 32 – Projection des détecteurs d'un des plan focaux FP3 ou FP4 sur l'atmosphère de Titan pendant une séquence d'observation au limbe.

Au nadir

Les spectres au nadir visent la surface de Titan avec un certain angle d'émission θ (voir figure 20). L'altitude sondée par ces spectres, indiquée par les fonctions-poids, peut atteindre 80-90 km. Ces spectres sont parfois complémentaires des spectres au limbe car nous pouvons extraire de l'information sur la température et les abondances à plus basse altitude. Cependant, les spectres

au nadir doivent avoir un angle d'émission le plus petit possible afin que l'altitude correspondant au maximum d'émission, soit localisée plus bas que les altitudes sondées par les spectres au limbe.

4.2.3 Liste des observations

Pour répondre aux problématiques énoncées dans la section 2.3, j'ai recherché dans la base de données *cirsddata*, toutes les observations analysables entre 2004 et 2017, et à toutes les latitudes. J'ai listé toutes les observations que j'ai analysées pendant ma thèse dans la table 3. Dans cette table, j'ai référencé le nom du flyby, la date du flyby, la longitude solaire, l'angle solaire zénithal, l'heure locale, la latitude (correspondant au FP3¹⁶), la résolution verticale moyenne, le décalage en altitude total appliqué à chaque ensemble de mesures (décrit dans la section 4.3 et 5.3) et le décalage en nombre d'onde appliqué aux spectres enregistrés par le FP3 et le FP4 (décrit dans la section 5.3).

J'ai utilisé des spectres au nadir pour les flybys : Tb, T06, T16, T28, T59, T84, T103, T120.

16. Une variation de 1-3° existe avec les latitudes sondées par le FP4.

Flyby	Date	L _s (°)	Angle solaire zénithal (°)	Heure locale (hh :mm)	Lat(°N) (FP3)	Lon(°O) (FP3)	Res (km)	Δkm appliquée pour chaque block (km)	Δν (cm ⁻¹)	
									FP4	FP3
90°N : 60°N										
T3	14 Feb 2005	301	108	15 :40	79	83	40	-10/-10/-10/-10/-10/-10/- 10/-10	+0.012	-0,033
T4	31 Mar 2005	303	107	08 :10	82	137	10	30/4	+0.053	-0.017
T19	09 Oct 2006	324	117	19 :50	62	270	40	67/50/53/45	+0.010	-0.011
T35	30 Aug 2007	335	92	16 :10	69	102	40	-9/-9/-9/-9	+0.006	-0.026
T59	24 Jul 2009	359	68	13 :12	66	307	40	23/23	+0.050	-0.014
T64	28 Dec 2009	5	73	12 :00	74	262	40	-3/-10/-8/-12	+0.048	-0.013
T67	05 Apr 2010	8	87	1 :00	88	204	40	9/2/4/0	+0.005	-0.017
T79	13 Dec 2011	28	77	17 :35	79	100	40	-9/-11/-9/-9	-0.015	-0.017
T108	12 Jan 2015	64	47	12 :45	70	338	40	13/5/13/13	+0.028	-0.012
60°N : 20°N										
T14	20 May 2006	318	148	23 :33	51	262	40	-19/-26/-19/-26	+0.048	+0.002
T16	21 Jul 2006	321	143	22 :00	47	235	40	8/1	+0.004	-0.011
T24	29 Jan 2007	328	69	15 :45	30	341	40	10/0/0/-5	+0,055	-0,016
T43	12 May 2008	344	60	14 :38	39	141	40	11/11/1	+0.043	-0.017
T54	05 May 2009	357	95	18 :20	22	231	10	-12/-12/-12/-12	+0.005	-0.058
T76	08 May 2011	21	110	2 :20	54	75	10	18/18/13/13	+0.015	-0.033
T84	06 Jun 2012	34	77	6 :17	46	281	40	10/5/10/5	+0.001	-0.017
T90	05 Apr 2013	44	100	4 :40	26	271	40	-6/-9/-8/-9	+0.022	-0.017
T103	20 Jul 2014	58	67	7 :00	30	91	40	-3/-13/-13/-13	+0.046	-0.015
T123	27 Sep 2016	83	45	8 :33	51	80	10	-3	+0.024	-0.017
T125	30 Nov 2016	85	74	5 :32	51	138	40	13/13/16/16	+0.046	-0.012

Flyby	Date	L _s (°)	Angle solaire zénithal (°)	Heure locale (hh :mm)	Lat(°N) (FP3)	Lon(°O) (FP3)	Res (km)	Δkm appliquée pour chaque block (km)	Δν (cm ⁻¹)	
									FP4	FP3
20°N : 20°S										
Tb	13 Dec 2004	299	91	5 :33	-15	260	40	28/33/33/33	+0.053	-0.015
T18	07 Sep 2006	322	32	9 :48	-12	68	20	0/0/0/0	-0.025	-0.002
T21	12 Dec 2006	326	150	21 :59	17	237	40	-3/-8/2/-6	+0,071	-0,012
T23	12 Jan 2007	327	21	11 :21	4	33	40	7/2/7/2	0.000	-0.059
T27	25 Mar 2007	330	55	15 :48	-21	142	40	20/16/23/18	+0.002	-0.017
T47	19 Nov 2008	351	20	10 :43	-9	179	40	8/2/2/-2	+0.055	-0.013
T49	21 Dec 2008	352	142	21 :31	16	19	40	25/25/15	+0.075	-0.014
T51	21 Mar 2009	355	156	22 :26	0	12	40	20/15/25/15	+0.055	-0.016
T57	22 Jun 2009	358	110	19 :20	-8	213	20	7/7/7/12	+0.006	-0.018
T83	21 May 2012	34	89	17 :55	1	115	40	36/33/35/30	+0.026	-0.018
T92	10 Jul 2013	47	172	00 :34	-19	348	40	12/8/12/8	-0.016	-0.033
T95	14 Oct 2013	50	23	12 :19	-2	188	40	6/3/6/-2	+0.047	-0.015
T96	01 Dec 2013	51	140	1 :30	11	342	40	31/28/31/31	+0.048	-0.013
T102	18 Jun 2014	57	99	5 :04	11	95	40	-13/-15/-22/-22	+0.001	-0.017
T121	25 Jul 2016	81	89	6 :04	1	110	40	-19/-22/-14/-15	0.000	-0.017
S98	17 Feb 2017	87	161	23 :00	-10	213	115	11/16/21/31	+0.053	-0,017

Flyby	Date	L _s (°)	Angle solaire zénithal (°)	Heure locale (hh :mm)	Lat(°N) (FP3)	Lon(°O) (FP3)	Res (km)	Δkm appliquée pour chaque block (km)	Δν (cm ⁻¹)	
									FP4	FP3
20°S : 60°S										
T6	22 Aug 2005	308	89	20 :07	-57	308	10	-1	+0.031	-0.017
T15	02 Jul 2006	320	45	13 :50	-54	281	40	5/2/5/2	+0.005	-0.011
T28	11 Apr 2007	330	74	6 :45	-31	284	30	4	+0,030	-0,013
T39	21 Dec 2007	339	99	4 :30	-46	286	40	13/7/12/4	+0.050	-0.013
T42	25 Mar 2008	343	92	4 :55	-57	262	40	1/-9	+0.001	-0.018
T58	24 Jul 2009	359	108	20 :25	-58	192	20	0/6/6/6	+0.043	-0.016
T82	18 Feb 2012	31	141	1 :54	-46	56	40	1/-9/1/1	+0.011	-0.017
T101	17 May 2014	56	124	19 :47	-34	253	40	23/18/23/21	+0.053	-0.012
T106	23 Oct 2014	61	124	19 :40	-44	236	40	-27/-33/-24	-0.027	-0.016
T120	07 Jun 2016	79	137	3 :07	-49	142	40	2/-5/-3/-4	-0.002	-0.017
T126	23 May 2017	90	128	20 :00	-49	225	40	10/-10	-0,024	-0,017
60°S : 90°S										
T61	25 Aug 2009	1	102	3 :42	-70	84	40	33/23	+0.007	-0.018
T62	12 Oct 2009	2	88	17 :28	-72	242	20	5/5/10/5	+0.054	-0.016
T65	12 Jan 2010	5	108	23 :34	-76	61	40	-5/-7/-5/-7	+0.011	-0.017
T71	06 Jul 2010	11	103	2 :15	-80	356	40	-19	-0,002	-0,018
T78	11 Sep 2011	25	98	14 :40	-84	219	40	-1/-8/-4/-8	+0.009	-0.017
T110	16 Mar 2015	66	122	2 :37	-81	137	40	108/108/108/82	+0.033	-0.010
T113	29 Sep 2015	72	113	15 :40	-84	53	40	71/74/89	+0,055	-0,016
T115	31 Jan 2016	76	118	4 :00	-84	135	40	-48/-18/-48/12	+0.008	-0.016
T117	16 Feb 2016	76	126	0 :00	-80	196	40	-29/-39	+0,002	-0,016

TABLE 3 – Liste des flybys de Titan dont les acquisitions CIRS ont été analysées pour ma thèse.

4.3 Amélioration du rapport signal-à-bruit des données

Nous avons mis au point une nouvelle méthodologie pour augmenter le rapport signal à bruit (SNR : signal noise ratio, en anglais). L'altitude des lignes de visées de chaque spectre sont représentées sur la figure 33 lors d'un flyby. Une séquence d'observation correspond à l'acquisition d'une vingtaine voire d'une trentaine de spectres par les dix détecteurs simultanément. Pendant la séquence, l'altitude du point tangent de la ligne de visée de chaque spectre reste relativement constante. Pour la suite, l'ensemble des mesures effectuées par les détecteurs pendant la séquence est appelé "bloc". Chaque bloc sonde une gamme d'altitude différente. Dans un même bloc, j'extrais le spectre moyen de chaque ensemble de spectres pris par le même détecteur comme décrit dans la section 4.2.1. J'obtiens donc un spectre moyenné pour chaque altitude dans la gamme d'altitude du bloc. Lorsque je trace les radiances intégrées de 1250 à 1350 cm^{-1} pour les spectres moyennés du FP4 (fig.34), et de 725 à 755 cm^{-1} pour les spectres moyennés du FP3, je remarque que certains blocs semblent avoir besoin d'un décalage en altitude pour que les radiances intégrées de chaque bloc se superposent. Il est très peu probable que la radiance varie en 2-3 heures car le temps caractéristique radiatif dans l'atmosphère de Titan est bien plus grand que la durée du flyby. L'origine serait due à l'incertitude de $\sim 0,04$ mrad de la roue inertielle de Cassini lorsqu'elle bouge, ce qui donne une erreur sur l'altitude des lignes de visée d'environ 6-7 km à 150 000 km de distance entre chaque bloc d'un flyby (détails sur la détermination du décalage en section 5.3).

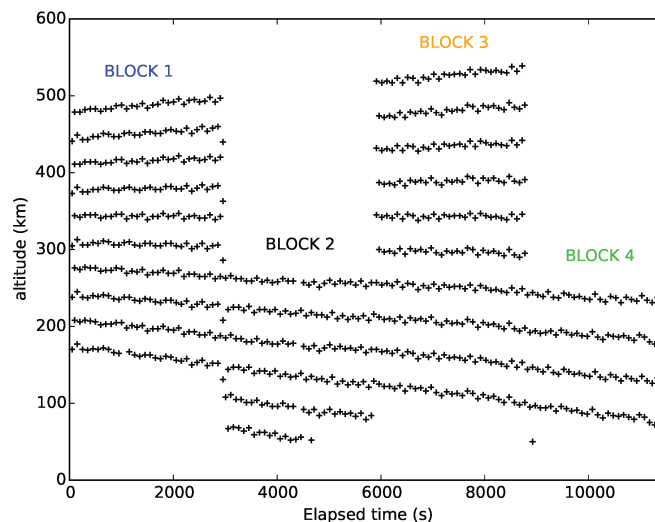


FIGURE 33 – Diagramme de la géométrie de l'observation lors du flyby T64 (décembre 2009, 74°N). Chaque croix correspond à un spectre pour une altitude donnée (ordonnée) et à un temps donné (abscisse).

Pour corriger cet écart, je choisis un bloc de référence qui me permettra d'appliquer ensuite un décalage en altitude relatif pour les autres blocs. Ce bloc de référence est choisi selon deux critères. Le premier est d'avoir les spectres moyennés localisés principalement à basse altitude, là où le signal-à-bruit est meilleur. Le deuxième critère est d'avoir une résolution verticale entre les spectres moyennés du bloc comprise entre les extrema des résolutions des autres blocs. Le décalage relatif en altitude pour chaque bloc est déterminé en superposant les profils de radiance

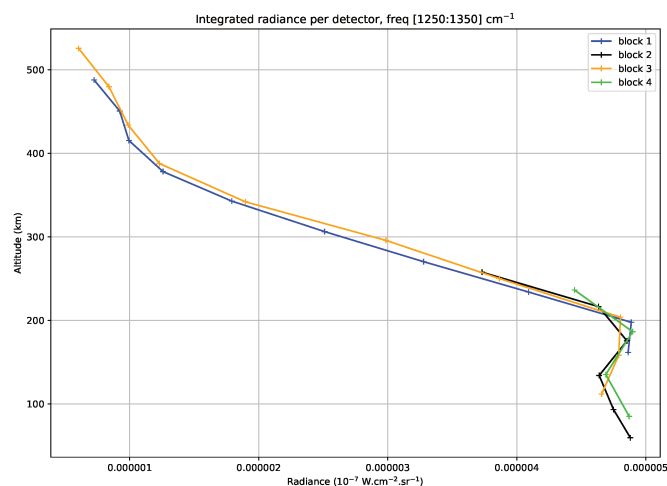


FIGURE 34 – Radiance intégrée sur la plage spectrale $1250\text{-}1350\text{ cm}^{-1}$. Chaque point correspond à un spectre moyenné pour un détecteur donné. Les couleurs représentent les différents blocs utilisés.

intégrée des différents blocs (figure 35). Une fois que les décalages sont appliqués, je crée numériquement une grille d'altitude commençant par l'altitude de la ligne de visée du spectre moyenné le plus bas dans le bloc de référence et ne dépassant pas l'altitude du spectre moyenné dans le plus haut des blocs. Cette grille d'altitude a la même résolution verticale que celle du bloc de référence. Pour chaque bloc, j'interpole linéairement les radiances des spectres moyennés adjacents à chaque point de la grille d'altitude, d'où l'intérêt du deuxième critère pour avoir une résolution verticale cohérente (qui ne soit pas sur-échantillonnée ou sous-échantillonnée). Puis pour chaque point de la grille d'altitude, je moyenne tous les spectres interpolés des blocs. Sur la figure 35, la courbe rouge représente le profil vertical de radiance final.

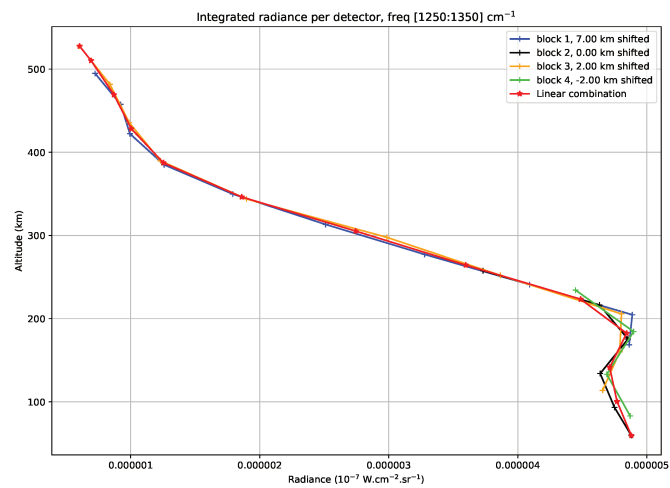


FIGURE 35 – Radiance intégrée sur la plage spectrale 1250-1350 cm⁻¹ après avoir ajouté un décalage en altitude sur les blocs 1, 3, 4 relativement au bloc 2. La courbe rouge correspond au résultat de la combinaison linéaire de tous les blocs.

4.4 Correction du continuum négatif

Certains spectres au limbe à haute altitude montrent un continuum négatif entre 1075 et 1200 cm^{-1} malgré les processus de calibration des données CIRS, que l'on appellera dans la suite "spectres corrompus". Lors de la sélection, pour les spectres à hautes altitudes, où le rapport signal à bruit est très faible ($\text{SNR} < 1$), il est quasiment impossible de distinguer à l'oeil nu les spectres corrompus des spectres normaux. J'ai donc dans un premier temps décidé d'appliquer un critère arbitraire où je garde tous les spectres ayant un SNR strictement positif.

Malgré ce critère, les spectres qui sont ensuite moyennés montrent toujours un continuum négatif à haute altitude (fig.36 : T23, 12 janvier 2007, SCET = [1.168646E+09 : 1.16866E+09]s, latitude $\sim 5^\circ\text{N}$). Ces continums négatifs empêchent toute contrainte sur le profil vertical d'aérosols qui est déduit de la plage spectrale 1080-1120 cm^{-1} . Ils peuvent aussi impacter le continuum des branches P et Q de la bande ν_4 du méthane, et donc entraîner une sous-estimation de la température à haute altitude.

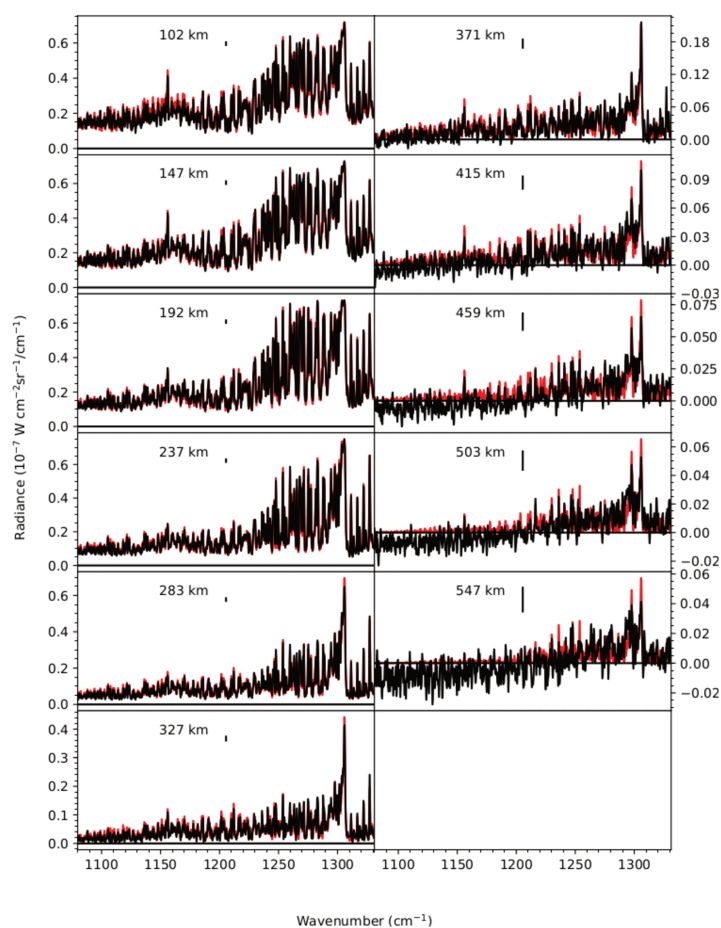


FIGURE 36 – Les courbes en noir correspondent aux spectres observés, et les courbes en rouge représentent les spectres synthétiques. Les continums négatifs sont observables sur cette figure pour les spectres à haute altitude. Cas pour l'observation T23.

4.4.1 Cas d'étude : T71

J'ai tenté une approche empirique afin de corriger le continuum négatif des spectres corrompus. Pour cela, j'ai étudié le flyby T71 (6 juillet 2010, SCET = [1.278431E+09 : 1.278434E+09], latitude $\sim 80^\circ\text{S}$), dont la géométrie d'observation est montrée sur la figure 37. Sur le panneau bas, chaque croix représente un spectre à une altitude donnée (axe y) et à un temps donné (axe x). Lorsque je vérifie l'allure des spectres pour un même détecteur, c'est à dire tous les spectres ayant des altitudes de ligne de visée similaires, j'ai remarqué que les détecteurs pairs du FP4 (22, 24, 26, 28, 30) contenaient un seul spectre corrompu. Tous les autres spectres du même détecteur peuvent servir de spectre de référence. C'est pour cette raison que j'ai choisi cette observation comme cas d'étude pour tenter une correction du continuum négatif.

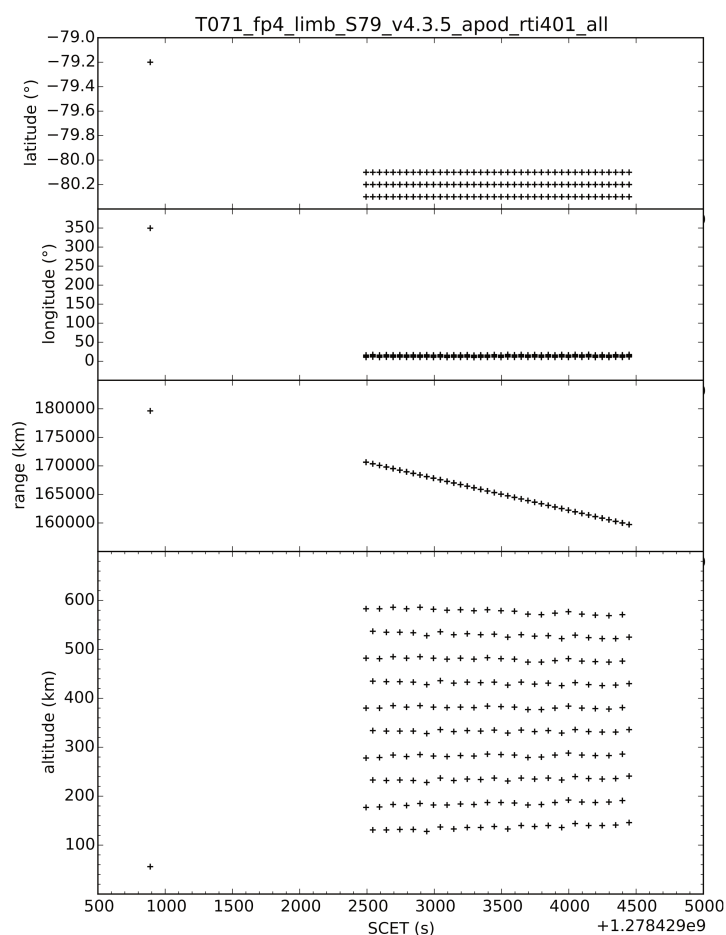


FIGURE 37 – Diagramme de la géométrie d'observation au limbe pendant le flyby T71. Chaque croix représente à un spectre. Les informations des spectres sont représentées de haut en bas : la latitude (`latitude_zpd[5]`), la longitude (`longitude_zpd[5]`), la distance entre la sonde Cassini et la surface de Titan (`body_spacecraft_range`) et l'altitude (`altitude_zpd[5]`) en fonction du temps d'acquisition pendant le flyby.

Relation entre le spectre corrompu et le spectre de référence

Une première étape a été d'extraire individuellement le spectre corrompu et le spectre précédent (utilisé comme référence)¹⁷ pour un même détecteur. Le panneau du haut de la figure 38 montre en rouge le spectre corrompu, et en noir le spectre de référence pour le détecteur 30 lors du flyby T71.

Je calcule ensuite la radiance résiduelle entre les deux spectres :

$$I_{residu} = I_{reference} - I_{corrompu}$$

La radiance résiduelle est montrée par la courbe rouge du panneau bas de la figure 38. Cette courbe semble avoir un comportement linéaire et a une valeur proche de 0 à 1500 cm^{-1} . J'ai donc appliqué une régression linéaire de la courbe rouge, et le résultat est affiché par la droite noire sur le panneau bas de la figure 38.

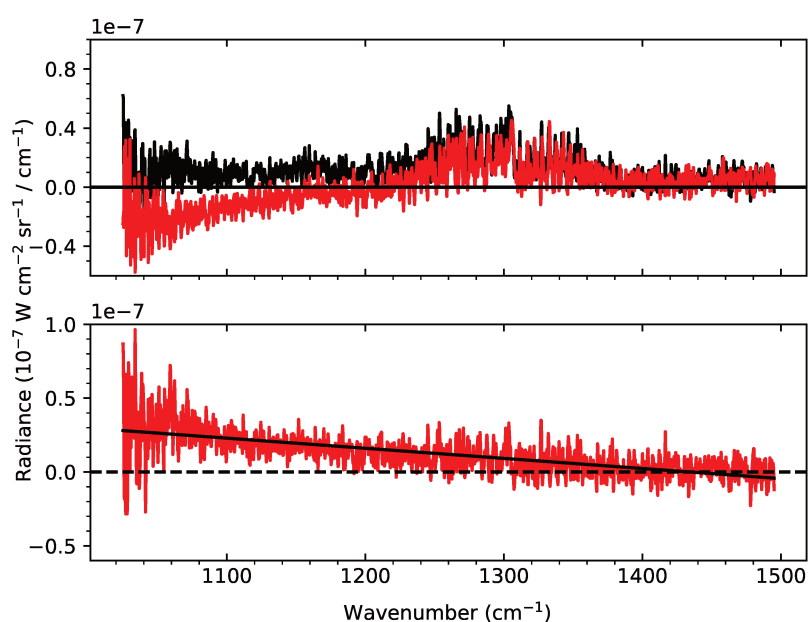


FIGURE 38 – Panneau haut : la courbe en noire représente le spectre de référence, en rouge le spectre corrompu, pour le détecteur 30 sondant l'altitude 133 km. Panneau bas : la courbe en rouge représente la radiance résiduelle (référence - corrompu), la droite noire correspond à la régression linéaire de la courbe rouge. Spectres observés par le détecteur 30 sondant l'altitude 133 km pendant le flyby T71.

17. Le spectre de référence est choisi arbitrairement parmi les spectres non corrompus du même détecteur.

Modèle

Comme le continuum des spectres présentant une radiance négative semble présenter une dépendance spectrale linéaire, j'ai décidé d'ajouter une radiance fictive au spectre corrompu afin de corriger le continuum négatif entre 1075 et 1200 cm^{-1} . Sur la figure 39, j'ai défini plusieurs points :

- Point A : ($x_A = 1100$, $y_A = \text{moyenne}(I[1080 : 1120])$)
- Point B : ($x_B = 1415$, $y_B = \text{moyenne}(I[1406 : 1424])$)
- Point C : ($x_C = 1487$, $y_B = \text{moyenne}(I[1480 : 1495])$)

Le point A est localisé à 1100 cm^{-1} avec une radiance correspondant à la radiance moyennée entre 1080 et 1120 cm^{-1} , région spectrale que j'utilise pour extraire l'épaisseur optique des aérosols à partir de l'ajustement du continuum. Le point B est localisé à 1415 cm^{-1} entre la branche R de la bande ν_4 du méthane et la bande ν_7 de l'éthane avec une radiance correspondant à la radiance moyennée entre 1406 et 1424 cm^{-1} . Le point C est localisé à 1487 cm^{-1} avec une radiance correspondant à la radiance moyennée entre 1480 et 1495 cm^{-1} , proche de la limite à haute fréquence du spectre.

Les points A' et B' représentent les emplacements des points A et B après la correction, respectivement. Je suppose que la radiance au point A' est la même que la radiance au point B'. Cette hypothèse est confortée par le fait qu'à basse altitude on observe bien que la radiance du continuum est sensiblement égale à ces deux fréquences : 1100 cm^{-1} et 1415 cm^{-1} (voir figure 38).

Le modèle est défini par l'équation :

$$\delta y = \frac{y_A - y_B}{x_B - x_A} * (x - x_C)$$

J'applique ce modèle de radiance fictive au spectre corrompu :

$$I_{\text{nouveau}} = I_{\text{corrompu}} + \delta y$$

Le spectre corrompu est affiché par la courbe en bleue sur la figure 40. La branche Q de la bande ν_4 du méthane est un peu plus intense après la correction.

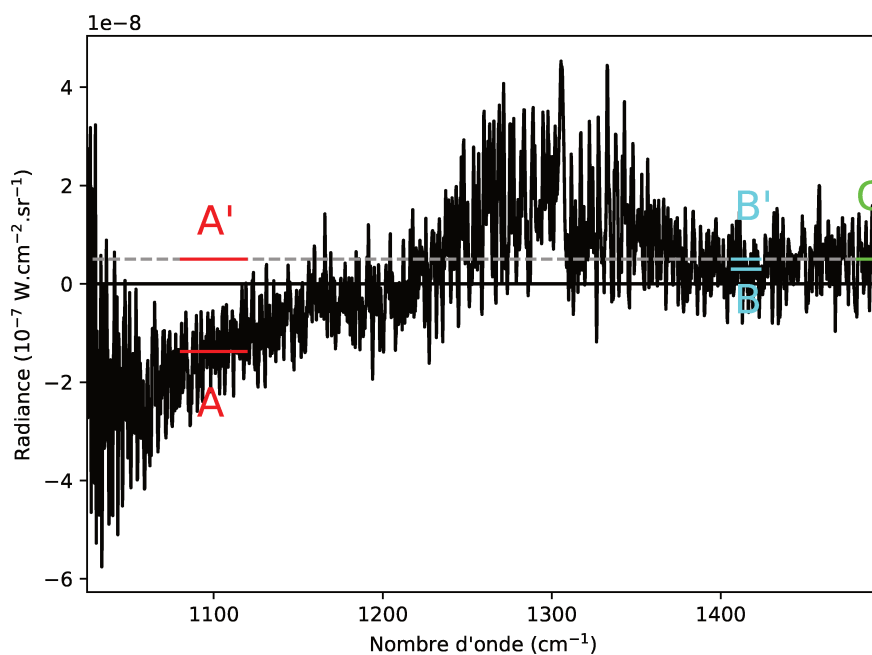


FIGURE 39 – Les points A, B et C sont localisés à 1100, 1415 et 1487 cm^{-1} , respectivement. J'ai moyenné la radiance entre : [1080 :1120] cm^{-1} pour le point A, [1406 :1424] cm^{-1} pour le point B et [1480 :1495] cm^{-1} pour le point C. Après correction, je souhaite que les radiances dans les régions spectrales du point A et B soient équivalentes (points A' et B', respectivement).

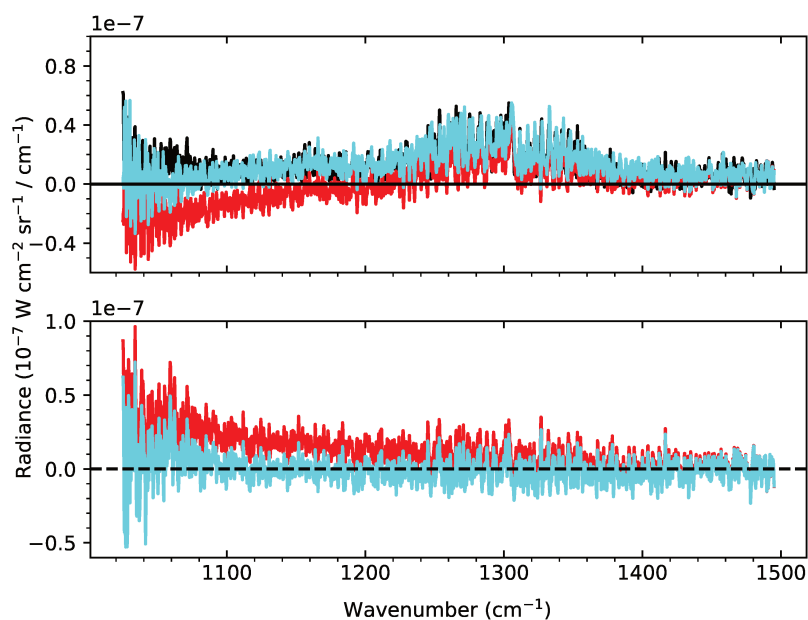


FIGURE 40 – Similaire à la figure 38. Les deux courbes en cyan correspondent au résultat de la correction du continuum sur les spectres.

4.4.2 Application

Suivant cette étude d'un cas simple, j'ai décidé d'appliquer cette procédure de correction sur les spectres moyennés à haute altitude du flyby T23 qui présentaient des continums négatifs (fig.36). J'ai alors obtenu des spectres moyennés positifs dans la région spectrale 1075-1200 cm^{-1} (fig.41), mais je n'arrive pas à reproduire correctement, via le code de transfert radiatif, le continuum vers 1100 cm^{-1} et le continuum dans la bande ν_4 du méthane; ce qui est présenté sur la figure 41 est un compromis. De plus, je ne peux pas extraire d'information pertinente sur le profil d'épaisseur optique des aérosols suite à cette procédure. Le profil de température déduit à partir des spectres corrigés montre une mésosphère (au dessus de 0.02 mbar) plus chaude d'environ 4 K que dans le profil de température déduit à partir des spectres corrompus (fig.42). On peut considérer que la différence entre les deux profils donne une estimation conservatrice de l'erreur dûe à l'incertitude sur le continuum.

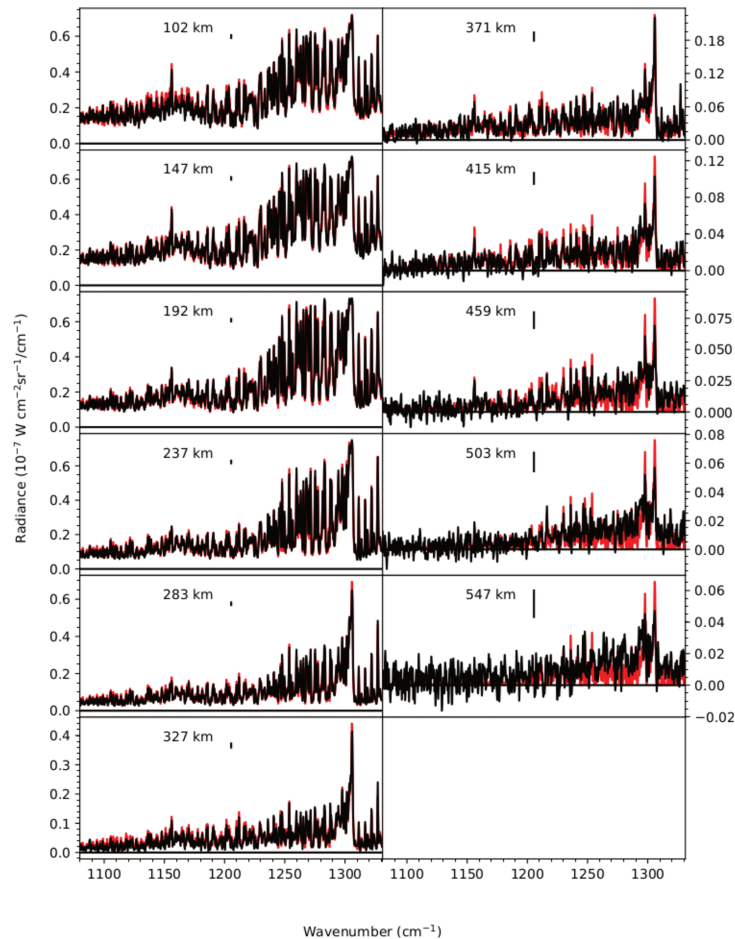


FIGURE 41 – Similaire à la figure 36, après correction des continums négatifs. Les courbes noires représentent les spectres observés, tandis que les spectres synthétiques sont tracés en rouge. Cas pour l'observation T23.

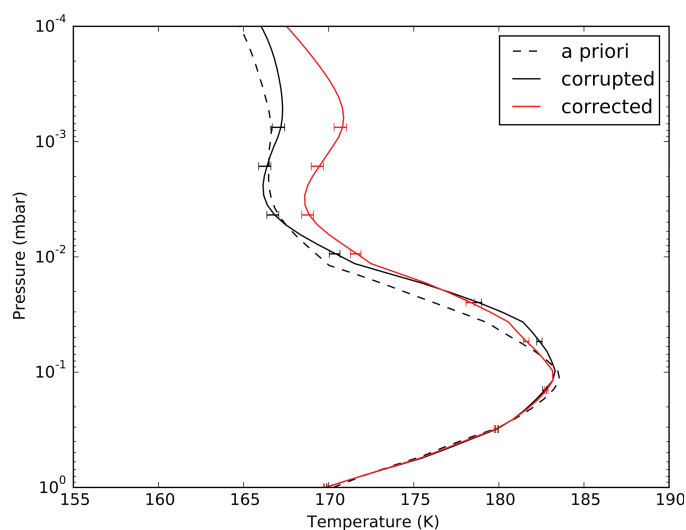


FIGURE 42 – La courbe noire représente le profil de température déduit des spectres corrompus, et la courbe rouge le profil de température déduit des spectres corrigés.

4.4.3 Conclusion

En appliquant cette procédure, j'ai pu évaluer l'impact du continuum négatif des spectres observés sur le profil température extrait des inversions. Les barres d'erreurs sont donc plus grandes (~ 4 K) que ce qui est attendu de l'erreur liée au bruit seul. Notre procédure n'est pas exactement représentative de l'effet qui a corrompu les spectres observés. Un modèle plus complexe pourrait être développé, mais il serait plus difficile de contraindre les paramètres libres : est-ce dû à une erreur liée à la température de l'instrument lors des processus de calibration ? L'équipe de calibration de l'instrument CIRS n'a pu nous fournir de réponses à cette question.

Nous avons appliqué cette procédure pour les flybys T21 et T23.

Méthodologie d'analyse

5

Sommaire

5.1	Méthode d'inversion	67
5.2	Description du code informatique	70
5.3	Inversion de la température	70
5.4	Inversion des abondances des composés photochimiques	73
5.5	Validation des inversions	75
5.5.1	Ajustement des spectres observés	75
5.5.2	Convergence de l'inversion	75
5.5.3	Kernel	75
5.5.4	Critère appliqué aux poids α_T et α_q	77
5.6	Détermination du profil solution	78
5.7	Limite supérieure : validation par le χ^2	79

Dans ce chapitre 5, je décris la méthodologie appliquée pour extraire les informations contenues dans les spectres infrarouges enregistrés par CIRS : les profils verticaux de température et d'abondance des composés photochimiques. Pour cela, j'introduis brièvement la méthode inverse utilisée, puis j'explique l'algorithme du code informatique utilisé. Je décris ensuite la méthodologie appliquée pour inverser les profils verticaux de température et d'abondance des composés photochimiques. Puis, je détaille mes critères de validation des profils verticaux inversés. Et enfin, j'énonce une autre méthode pour déterminer les limites supérieures des profils verticaux d'abondance, là où les bandes moléculaires ne sont pas détectées.

5.1 Méthode d'inversion

Les équations de transfert radiatif vues à la fin du chapitre 3 montrent que la radiance observée de l'atmosphère $I_{obs}(\nu)$ à un nombre d'onde ν , dépend à la fois de la température T et des abondances des composés photochimiques via l'épaisseur optique $\tau(\nu)$ (où $\tau(\nu) = \sum_k \tau_k(\nu)$, avec k un composé photochimique) à ce niveau atmosphérique. Cette double dépendance implique un ensemble de solutions de température et d'abondance pouvant donner la même radiance. Pour retrouver correctement les profils verticaux, j'ai donc utilisé une approche où je déduis dans un premier temps le profil vertical de température à partir de la bande ν_4 du méthane à 1306 cm^{-1} . En effet, le profil vertical d'abondance du méthane mesuré *in-situ* par l'instrument GCMS (Niemann et al., 2010) lors de la descente du module Huygens montre une valeur constante avec l'altitude égale à 1,48% dans la basse stratosphère. Je suppose aussi que l'abondance du méthane ne varie pas en longitude dans la moyenne atmosphère, comme suggéré par Flasar et al. (2005), ni en latitude. Cependant, Lellouch et al. (2014) ont montré que l'abondance du méthane dans la moyenne atmosphère pouvait varier en latitude entre 1% et 1,5%. Je n'ai pas pris en

compte ces variations car les résultats proviennent de mesures faites pendant l'hiver nord, et il n'est pas impossible que ces résultats changent au cours des saisons. J'ai évalué l'impact de la variation de méthane sur les profils verticaux de température et d'abondance des composés photochimiques déduits au chapitre 7. Une fois le profil de température déduit, je peux l'utiliser afin de déterminer les profils verticaux des abondances des composés photochimiques.

Pour reproduire les spectres observés, il existe deux méthodes : le calcul direct et les méthodes inverses. La première façon est simple à utiliser car il suffit de résoudre l'équation de transfert radiatif en "testant" différents profils verticaux d'entrée (de température ou d'abondance), ces profils sont ajustés "à la main" afin de reproduire la radiance observée. Cependant, cette méthode est fastidieuse. Les méthodes inverses permettent de remonter aux profils solutions à partir des mesures de la radiance observée. J'ai particulièrement utilisé une méthode inverse dite linéaire avec contrainte *a priori*. Cette méthode détermine le profil solution en partant d'un profil *a priori*, puis s'en écarte plus ou moins en fonction du poids donné aux données et de la confiance accordée au profil *a priori*.

Plus précisément, j'ai utilisé la méthode d'inversion par contrainte linéaire, décrite par Conrath et al. (1998) et adaptée par Vinatier et al. (2015), pour extraire les profils de température et d'abondance des composés photochimiques à partir des spectres CIRS. En repartant des équations de transfert radiatif 27 et 36, je peux discrétiser le profil de température T sur un nombre discret n de niveaux atmosphériques (pour le modèle $n = 96$). Supposons localement que la variation d'intensité ΔI varie linéairement avec une variation de température ΔT dans un niveau atmosphérique j . L'équation de transfert peut être linéarisée en utilisant un profil initial $T_{apriori}$ et s'écrit alors sous la forme :

$$\Delta I(\nu_i) = \sum_{j=1}^n K_{ij} \Delta T(P_j) \quad (45)$$

Où :

$$\Delta I(\nu_i) = I_{obs}(\nu_i) - I_{syn}(\nu_i) \quad (46)$$

$$\Delta T(P_j) = T_{solution}(P_j) - T_{apriori}(P_j) \quad (47)$$

$$K_{ij} = \frac{\Delta I(\nu_i)}{\Delta T(P_j)} \quad (48)$$

Avec ν_i le nombre d'onde, P_j la pression du niveau j , $I_{obs}(\nu_i)$ la radiance observée qui est reproduite par le profil thermique $T_{solution}(P_j)$ que je cherche à retrouver, $I_{syn}(\nu_i)$ la radiance du spectre modélisé (nommé synthétique) à la température de l'*a priori* pour l'itération 0 seulement. K est une matrice jacobienne dont les éléments K_{ij} sont les dérivés (ou kernel) de la radiance au nombre d'onde ν_i par rapport à la température au niveau j , cette matrice correspond à la quantité d'information contenue dans les spectres infrarouge. Le profil de température $T_{solution}(P_j)$ que je recherche doit minimiser les écarts entre le spectre observé I_{obs} et le spectre synthétique I_{syn} . En posant $\Delta T = Fa$, où F est une matrice dont chaque colonne est un vecteur de base et a un vecteur contenant les coefficients d'expansion, la solution de l'équation 45 doit minimiser la fonction coût :

$$Q = (\Delta I - KFa)^T E^{-1} (\Delta I - KFa) + \gamma a^T a \quad (49)$$

Où E est la matrice de covariance des erreurs de mesures $E(\nu_i) = NESR(\nu_i)^2/N$ (où N est le nombre de points spectraux que l'on inverse). Le premier terme de droite correspond à la fonction coût qui est minimisée par la méthode des moindres carrés. Le second terme de droite mesure

l'écart entre le profil *a priori* et le profil solution. Sa contribution est contrôlée par le poids γ que je lui autorise. En effet, si j'utilise l'équation 45 telle quelle pour déterminer ΔT , comme on pourrait le faire avec la méthode des moindres carrés, les résultats obtenus seraient instables et pourraient correspondre à des profils non physiques. En effet, une petite variation de I_{obs} due au bruit pourrait induire des variations $\Delta T(j)$ très grandes, nous parlons alors de problèmes mal posés. Pour y remédier, la méthode inverse ajoute une contrainte physique permettant de régulariser le profil solution.

La minimisation de l'équation 49 est donnée en détails dans Conrath et al. (1998), et l'équation 45 devient alors :

$$\Delta T = \alpha_T \mathbf{S}_T \mathbf{K}^T (\alpha_T \mathbf{K} \mathbf{S}_T \mathbf{K}^T + \mathbf{E})^{-1} \Delta \mathbf{I} \quad (50)$$

Où $\alpha_T = 1/\gamma_T$ est le poids associé à l'inversion de la température T .

Et pour inverser le profil d'abondance $\Delta \ln(q(k))$ de la molécule k parmi n_k molécules inversées :

$$\Delta \ln(q(k=1)) = \alpha_{q(k=1)} \mathbf{S}_{q(k=1)} \mathbf{M}_{(k=1)}^T \left(\sum_k^{n_k} \alpha_{q(k)} \mathbf{M}_{(k)} \mathbf{S}_{q(k)} \mathbf{M}_{(k)}^T + \mathbf{E} \right)^{-1} \Delta \mathbf{I} \quad (51)$$

Où $\alpha_q = 1/\gamma_q$ est le poids associé à l'inversion de l'abondance du composé photochimique q . M est la matrice jacobienne pour l'inversion de l'abondance du composé photochimique q dont les éléments sont donnés par :

$$M_{ij} = \frac{\partial I(v_i)}{\partial \ln(q(P_j))} \quad (52)$$

Et $S(P_j)$ est la matrice de lissage vertical, dont les éléments sont définis par l'équation :

$$S_{ij} = e^{-\frac{1}{2}(\ln(P_{j+1})/P_j)/(L))^2} \quad (53)$$

Où L est la longueur de corrélation (exprimée en échelle de hauteur) qui permet de lisser et filtrer verticalement les profils solutions. Plus L est grand ($\sim 10-100$) et plus le lissage est important. Par exemple, la température de la couche j est corrélée avec les températures des couches adjacentes, sur une hauteur $L \times H$. J'ai utilisé $L = 1$ pour les observations où les spectres au limbe ont une résolution verticale de 40 km (\sim une échelle de hauteur), et $L = 0,5$ pour ceux avec une résolution verticale de 20 km.

Nous venons de voir que cette méthode inverse détermine un profil solution qui s'écarte du profil *a priori* d'une quantité dépendant du poids α que nous avons choisi. J'itère p fois afin d'être sûr que le profil solution a bien convergé. J'utilise alors le profil solution comme profil *a priori* de la nouvelle itération et, je redétermine les nouveaux spectres synthétiques avec ce nouveau profil et effectue de nouveau l'inversion dont la fonction coût a été modifiée car le profil *a priori* a changé, ce qui permet de s'écarter plus du profil *a priori* initial. L'autre raison pour laquelle il est nécessaire d'itérer est que la variation d'intensité ΔI n'est pas linéaire dans la réalité.

Le profil solution final de la température pour chaque niveau de pression à l'itération $p + 1$ s'écrit :

$$T_{p+1}(P_j) = T_p(P_j) + \Delta T(P_j) \quad (54)$$

Et pour le profil d'abondance :

$$\ln(q_{p+1}(P_j)) = \ln(q_p(P_j)) + \Delta \ln(q(P_j)) \quad (55)$$

Les barres d'erreurs liées au bruit pour le profil solution de la température sont calculées à partir de l'équation :

$$\sigma_{T_j} = \sqrt{\sum_i V_{ij}^2 E_{jj}} \quad (56)$$

Avec V_{ij} :

$$V = \alpha_T \mathbf{S}_T \mathbf{K}^T (\alpha_T \mathbf{K} \mathbf{S}_T \mathbf{K}^T + \mathbf{E})^{-1} \quad (57)$$

On obtient une équation équivalente pour les barres d'erreurs du profil solution de l'abondance, en utilisant les matrices correspondantes.

5.2 Description du code informatique

Durant ma thèse, j'ai utilisé un code de transfert radiatif couplé à la méthode d'inversion décrite précédemment, écrit par mon directeur de thèse Bruno Bézard en Fortran77. J'ai mis à profit mes compétences en programmation pour : ré-écrire le programme en Fortran90, mettre en place un namelist pour faciliter la lecture du fichier d'entrée lu par le programme, le rendre dynamique afin de ne plus être limité par le nombre de profils de molécules pouvant être extrait simultanément et le nombre de spectres observés à inverser simultanément. J'ai aussi ajouté et écrit une routine pour inverser une matrice plus rapidement, basé sur la méthode par décomposition de Cholesky. L'utilisation de cette méthode est valable si et seulement si la matrice à inverser est définie positive, et c'est le cas pour notre problème. Toutes ces améliorations ont eu pour but de réduire le temps de calcul et de permettre d'utiliser le code de transfert radiatif dans des scripts d'automatisation que j'ai écrits en Python.

L'algorithme du code informatique est détaillé sur la figure 43. Dans un premier temps, le code lit le fichier d'entrée où sont stockées toutes les informations relatives sur notre modèle atmosphérique, ainsi que les données des spectres observés. Puis sur une grille atmosphérique discrétisée en n niveaux, le code détermine l'altitude minimale et la masse d'air associée à chaque spectre au limbe. Pour les spectres au nadir, l'altitude minimale est la surface. A partir de ces informations, le code calcule les spectres synthétiques avec les mêmes caractéristiques que les spectres observés. Ces spectres synthétiques sont convolués par la transformée de Fourier de la fonction de Hamming. Le code calcule ensuite l'écart de radiance $\Delta I(\nu_i)$ entre les spectres observés et les spectres synthétiques. Puis, le code applique la méthode inverse pour déterminer le nouveau profil vertical de température (ou d'abondance du composé photochimique) qui minimise la fonction coût. Le code ré-itére le transfert radiatif et l'inversion avec le nouveau profil vertical autant de fois qu'indiqué dans le fichier d'entrée.

5.3 Inversion de la température

L'émission thermique de l'atmosphère de Titan comprend la contribution des bandes de rotation et de ro-vibration des molécules présentes dans l'atmosphère. Le continuum de l'émission thermique comprend la contribution de l'opacité des aérosols ainsi que l'absorption induite par collisions des molécules $\text{N}_2\text{-N}_2$, $\text{N}_2\text{-H}_2$, $\text{N}_2\text{-CH}_4$ et $\text{CH}_4\text{-CH}_4$. Les fichiers spectroscopiques

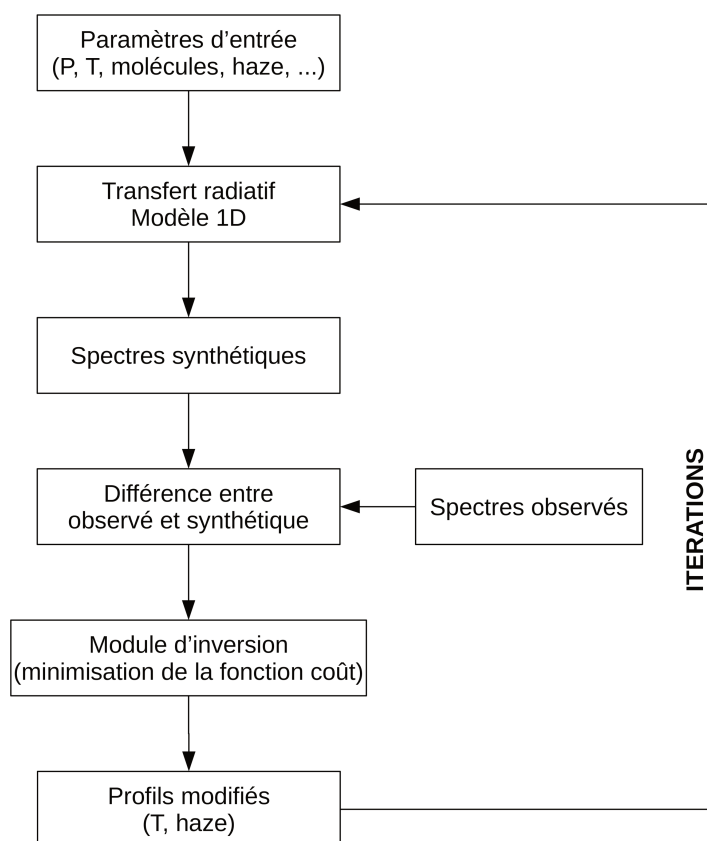


FIGURE 43 – Schéma du fonctionnement du code informatique utilisé pour extraire les profils verticaux de température et d'abondance des composés photochimiques à partir des spectres infrarouge CIRS.

concernant l'absorption induite par collisions proviennent des travaux de Borysow and Frommhold (1986a,b, 1987) et de Borysow and Tang (1993)¹⁸.

Le profil vertical de température est déduit de la bande ν_4 du méthane entre 1200 et 1330,25 cm^{-1} des spectres provenant de FP4 (figure 44). J'utilise un profil vertical d'abondance du méthane provenant des mesures *in-situ* du GCMS à bord du module de descente Huygens (Niemann et al., 2010). La bande ν_4 du méthane est modélisée à l'aide du fichier spectroscopique provenant de la base de données GEISA 2003 (Jacquinet-Husson et al., 2005). Simultanément, je déduis le profil d'opacité des aérosols à partir du continuum entre 1080 et 1120,25 cm^{-1} , dont le fichier spectroscopique a été détaillé en section 3.1.2. Dans la gamme spectrale du FP4, j'observe aussi la contribution de la bande ν_6 du CH_3D entre 1120-1200 cm^{-1} , dont le fichier spectroscopique provient aussi de GEISA 2003. Les isotopologues $^{13}\text{CH}_4$ et $^{13}\text{CH}_3\text{D}$ ont des rapports de mélange égaux à ceux de $^{12}\text{CH}_4$ et $^{12}\text{CH}_3\text{D}$ divisés par un facteur 89, respectivement, correspondant au rapport isotopique $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ mesuré dans Titan et égal à la valeur terrestre (Bézar et al., 2007; Niemann et al., 2010; Mandt et al., 2012; Nixon et al., 2012b). Les fichiers spectroscopiques de ces deux molécules proviennent de la base de données GEISA 2003. D'autres espèces sont également prises en compte dans ce domaine spectral : C_2H_2 (bandes ν_4 et ν_5 , GEISA 2003), C_3H_8 (bande ν_7 , GEISA 2003), C_2H_6 (bandes ν_6 et ν_8 , Di Lauro et al. (2012)) et enfin C_4H_2 (bandes ν_6 et ν_8 ,

18. Les routines Fortran sont disponibles sur : <http://www.astro.ku.dk/~aborysow/programs/>.

Jolly et al. (2010)).

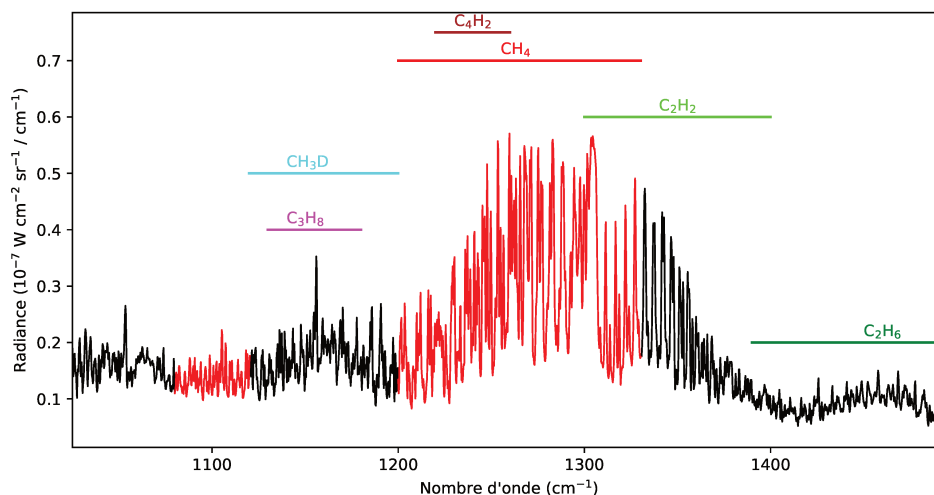


FIGURE 44 – Spectre observé du FP4 tracé en noir, ainsi que les gammes spectrales utilisées pour l'inversion en rouge. Les contributions spectrales des composés photochimiques sont : $\text{CH}_4/^{13}\text{CH}_4$ à $1200\text{-}1330,25\text{ cm}^{-1}$; $\text{CH}_3\text{D}/^{13}\text{CH}_3\text{D}$ à $1120\text{-}1200\text{ cm}^{-1}$; C_2H_2 à $1300\text{-}1400\text{ cm}^{-1}$; C_3H_8 à $1130\text{-}1180\text{ cm}^{-1}$; C_2H_6 à $1390\text{-}1500\text{ cm}^{-1}$; C_4H_2 à $1220\text{-}1260\text{ cm}^{-1}$.

Avant de commencer à déterminer le profil vertical de température, il est nécessaire d'appliquer une correction sur l'altitude sondée par les spectres au limbe et une correction en nombre d'onde sur nos spectres synthétiques.

La première correction sur l'altitude est la plus importante car : (i) l'altitude nominale indiquée dans la base de données CIRS peut différer de l'altitude réelle, (ii) la grille pression/altitude de notre modèle est basée sur le profil thermique mesuré *in situ* par HASI à basse altitude, en dehors des régions sondées par CIRS. Cette correction permet d'ajuster simultanément les branches Q et P de la bande ν_4 du CH_4 à 1306 cm^{-1} , dont l'abondance est censée rester constante dans cette gamme d'altitude (Vinatier et al., 2007b). J'ai implémenté un code Python qui détermine par dichotomie le décalage en altitude minimisant l'écart entre les spectres observés et les spectres synthétiques des inversions (*rms* : root mean square¹⁹) avec les 5 spectres aux limbes les plus profonds et dans la gamme de nombre d'onde $1200\text{-}1330,25\text{ cm}^{-1}$, car ils ont un meilleur rapport signal-à-bruit. Ce décalage en altitude est ensuite appliqué à tous les spectres au limbe de l'observation (voir table 3). Le décalage en altitude est en général inférieur à une échelle de hauteur de Titan, hormis en mars 2015 à 81°S (T110) où il atteint une valeur de $+108\text{ km}$.

Une fois le décalage en altitude déterminé, je dois appliquer une seconde correction portant sur le décalage en nombre d'onde du spectre synthétique pour mieux recaler au spectre observé. Cette correction est due aux variations de températures minimales de l'instrument CIRS qui modifie la fréquence de référence de la diode laser lors de l'acquisition des interférogrammes. John

19.

$$rms = \sqrt{\frac{\sum_i^N (I_{obs}(\nu_i) - I_{syn}(\nu_i))^2}{N}} \quad (58)$$

Où, i est le point spectral, et N est le nombre de points spectraux du spectre synthétique.

C. Brasunas, de l'équipe de calibration, m'a indiqué une estimation de la variation de température de l'ordre de $\sim 0,1$ K (ou moins) sur 24 heures, ce qui se traduit par un décalage en nombre d'onde d'environ $0,014 \text{ cm}^{-1}$ à 1400 cm^{-1} . Comme pour le décalage en altitude, le même code Python détermine par dichotomie le décalage en nombre d'onde à appliquer aux spectres synthétiques.

Après avoir déterminé ces deux corrections, je les applique pour pouvoir correctement déterminer le profil vertical de température lié aux observations, en suivant les critères de validation du profil déduit de l'inversion (détaillés dans la section 5.5).

Les barres d'erreurs à $1-\sigma$ des profils de température et d'opacité des aérosols retrouvés prennent en compte la propagation du bruit instrumental δT_{bruit} (calculée à partir de la matrice de covariance) et de l'incertitude sur le décalage en altitude appliquée $\delta T_{\Delta km}$. La contribution du bruit instrumental est multipliée par un facteur $\max(rms)/\max(NESR)$, où $\max(rms)$ correspond à la valeur maximale du résidu (rms) calculés à toutes les altitudes utilisées pour l'inversion, et $\max(NESR)$ est la valeur maximale du fichier NESR (\equiv à la valeur du dernier point spectral de la gamme d'inversion). J'applique ce facteur car le NESR est en général inférieur à l'écart-type moyen de la sélection des spectres (voir figures 25, 26, 27), soit parce que le bruit réel est plus grand que le NESR précédemment estimé, soit parce que le modèle ne reproduit pas les données du niveau du bruit. Pour calculer la contribution $\delta T_{\Delta km}$, je détermine dans un premier temps le décalage en altitude pour lequel le rms dépasse la valeur du rms_{min} de $1-\sigma$, du décalage en altitude optimal. Généralement, ce décalage atteint ± 2 km par rapport au décalage en altitude optimal. Puis, j'applique ce nouveau décalage relatif pour inverser une nouvelle fois la température. La différence entre ce nouveau profil de température et le profil de température solution détermine l'incertitude sur le décalage en altitude. Pour résumer, le calcul des barres d'erreurs à $1-\sigma$ sur les profils de température et d'opacité des aérosols du FP4 est donné par l'équation :

$$\delta T = \sqrt{(\delta T_{\text{bruit}})^2 * \left(\frac{\max(rms)}{\max(NESR)} \right)^2 + (\delta T_{\Delta km})^2} \quad (59)$$

5.4 Inversion des abondances des composés photochimiques

Une fois le profil vertical de température déterminé, je l'incorpore dans mon modèle atmosphérique pour inverser les profils d'abondance des composés photochimiques observés dans la gamme spectrale du FP3 (figure 45), avec la référence des fichiers spectroscopiques :

- C_2H_2 : bande ν_5 à 729 cm^{-1} (GEISA 2003, Jacquinet-Husson et al. (2005))
- C_2H_4 : bande ν_7 à 949 cm^{-1} (GEISA 2003)
- C_2H_6 : bande ν_9 à 822 cm^{-1} (Vander Auwera et al., 2007)
- CH_3CCH : bande ν_9 à 633 cm^{-1} (Pekkala et al., 1991; Blanquet et al., 1992)²⁰
- C_3H_8 : bande ν_{26} à 748 cm^{-1} (GEISA 2003)
- C_4H_2 : bande ν_8 à 628 cm^{-1} (Jolly et al., 2010)
- C_6H_6 : bande ν_4 à 673 cm^{-1} (Dang-Nhu and Pliva, 1989)
- HCN : bande ν_2 à 712 cm^{-1} (GEISA 2011, Jacquinet-Husson et al. (2011))
- H^{13}CN , HC^{15}N : bande ν_2 à $706, 711 \text{ cm}^{-1}$ (GEISA 2011 scaled)
- HC_3N : bande ν_5 à 663 cm^{-1} (Jolly et al., 2007)

20. Le calcul des positions des raies a été fait par Pekkala et al. (1991), et l'intensité de la bande provient des mesures de Blanquet et al. (1992).

— CO_2 : bande ν_2 à 667 cm^{-1} (GEISA 2003)

Pour cela, j'utilise les profils de température et d'opacité des aérosols déterminés comme nouveaux profils d'entrée pour modéliser l'atmosphère de Titan. Je dois aussi corriger les altitudes des spectres au limbe du FP3, auxquelles j'applique le décalage décrit dans la section 5.3. Puis, je corrige le décalage en nombre d'onde en utilisant la gamme spectrale entre 700 et 720 cm^{-1} . Ce décalage varie en fonction de la plage étudiée et du nombre d'onde.

Après avoir appliqué ces corrections, j'inverse les profils d'abondance, simultanément avec le profil d'opacité des aérosols (car il varie en nombre d'onde), en commençant avec l'acétylène car l'intensité de la bande ν_5 est la plus forte observée dans la gamme spectrale du FP3. Voici l'ordre des gammes spectrales que j'analyse pour inverser les profils d'abondance :

- $700\text{-}740,25 \text{ cm}^{-1}$: aérosols, C_2H_2 , HCN , H^{13}CN , HC^{15}N
- $740\text{-}755,25$; $803\text{-}840,25 \text{ cm}^{-1}$: aérosols, C_2H_6 , C_3H_8
- $610\text{-}645,25 \text{ cm}^{-1}$: aérosols, C_3H_4 , C_4H_2
- $660\text{-}678,25 \text{ cm}^{-1}$: aérosols, HC_3N , CO_2 , C_6H_6
- $900\text{-}950,25$; $963\text{-}986,25 \text{ cm}^{-1}$: aérosols, C_2H_4

A chaque gamme spectrale, je détermine les profils d'abondance en suivant les critères de validation détaillés en section 5.5. Puis je passe à la gamme spectrale suivante en utilisant les profils d'abondance retrouvés pour modéliser l'atmosphère de Titan.

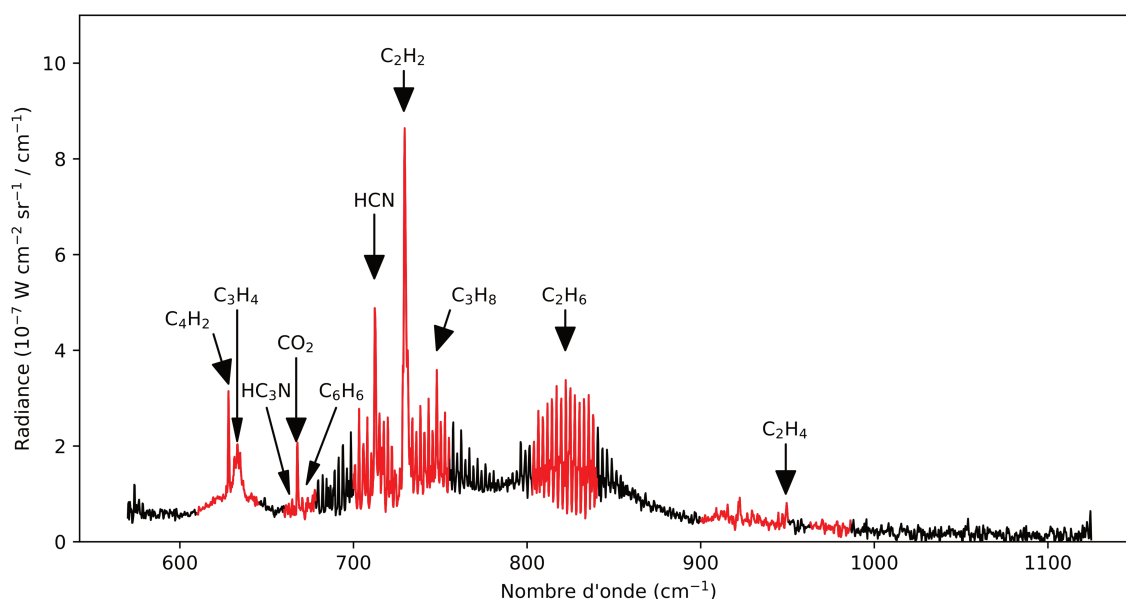


FIGURE 45 – Spectre observé du FP3 tracé en noir, ainsi que les gammes spectrales utilisées pour les inversions en rouge. Les contributions spectrales des composés photochimiques sont : C_2H_2 (bande ν_5 à 729 cm^{-1}), C_2H_4 (bande ν_7 à 949 cm^{-1}), C_2H_6 (bande ν_9 à 822 cm^{-1}), CH_3CCH (bande ν_9 à 633 cm^{-1}), C_3H_8 (bande ν_{21} à 748 cm^{-1}), C_4H_2 (bande ν_8 à 628 cm^{-1}), C_6H_6 (bande ν_4 à 673 cm^{-1}), HCN (bande ν_2 à 712 cm^{-1}), HC_3N (bande ν_5 à 663 cm^{-1}) et CO_2 (bande ν_2 à 667 cm^{-1}).

Le calcul de la barre d'erreur à $1\text{-}\sigma$ du profil d'abondance $\delta \ln(q)$ suit le même raisonnement que pour l'erreur sur la température (cf section 5.3), en ajoutant la contribution de l'erreur sur le

profil de température $\delta \ln(q_T)$:

$$\delta \ln(q) = \sqrt{(\delta \ln(q_{bruit}))^2 * \left(\frac{\max(rms)}{\max(NESR)}\right)^2 + (\delta \ln(q_{\Delta km}))^2 + (\delta \ln(q_T))^2} \quad (60)$$

5.5 Validation des inversions

Après avoir lancé une inversion pour retrouver le profil de température ou d'abondance, je vérifie plusieurs critères, que je vais détailler, afin de déterminer le sens physique du résultat et ainsi déduire les zones où il y a de l'information.

5.5.1 Ajustement des spectres observés

Un premier point à vérifier est la qualité de l'ajustement du spectre observé. Sur la figure 46, j'ai tracé pour tous les spectres observés (en noir) le spectre synthétique correspondant dans la gamme spectrale 700-740,25 cm^{-1} pour déduire les profils d'abondance de C_2H_2 et de HCN. Le cas présenté représente le meilleur ajustement obtenu, le spectre synthétique se superpose au spectre observé au bruit près (la barre d'erreur est affichée en haut à droite de chaque sous-figure). Cette première vérification indique si le profil retrouvé est solution de l'inversion, pour autant il n'indique pas si ce profil a un sens physique.

5.5.2 Convergence de l'inversion

Un autre critère est d'étudier la convergence de l'inversion. Pour cela, j'affiche l'évolution de la somme des rms pour chaque altitude observé après chaque itération. Si la somme des rms continue de décroître, alors l'inversion n'a pas convergé vers le profil solution : soit le poids α doit être augmenté, soit un plus grand nombre d'itérations est nécessaire. Si la somme des rms a diminué après quelques itérations puis est resté relativement constant (exemple figure 47), alors l'inversion a convergé vers le profil solution. D'autres itérations n'amélioreraient pas significativement l'ajustement des spectres observés, et pourraient dégrader le profil vertical solution avec des oscillations non-physiques.

5.5.3 Kernel

Les kernels renseignent sur la quantité d'information contenue dans chaque spectre en fonction de l'altitude. A la fréquence du centre de la bande spectrale du corps inversé, les kernels de chaque spectre au limbe doivent être distincts les uns des autres, comme sur la figure 48. Autrement dit, leur maximum de contribution pique aux altitudes des lignes de visée lorsque la couche traversée est optiquement mince. Généralement, les kernels se superposent à basse altitude car le chemin optique de la ligne de visée devient optiquement épais, l'information n'est plus accessible. L'émission thermique ne provient plus du point tangent, mais d'une région en avant de celui-ci sur la ligne de visée.

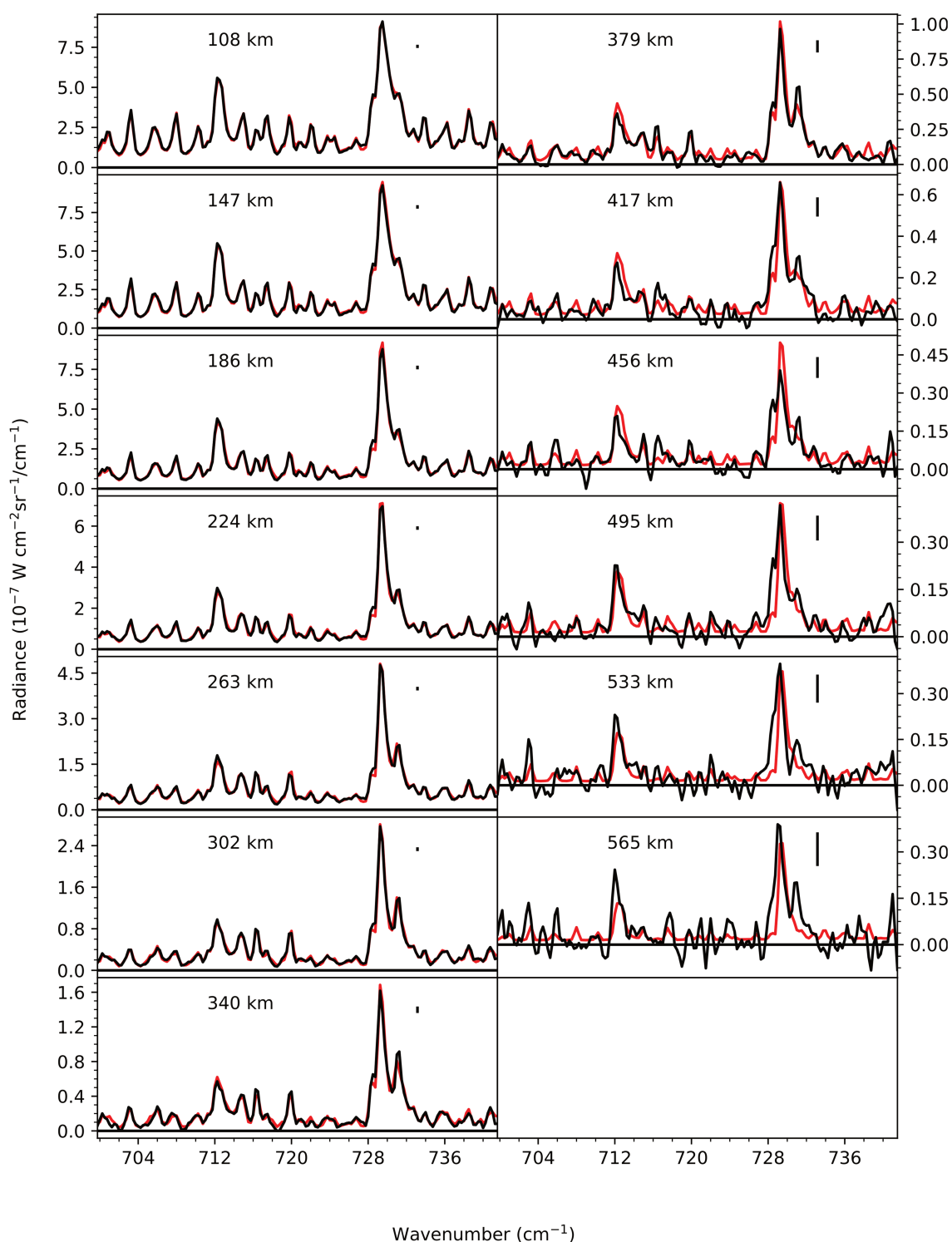


FIGURE 46 – Spectres observés (noir) et synthétiques (rouge) dans la gamme spectrale d'inversion 700-740,25 cm⁻¹. L'altitude du spectre observé incluant la correction en altitude est affichée en haut de chaque sous-figure, ainsi que la barre d'erreur liée au bruit affichée en haut à droite. Le spectre le plus haut est à 565 km d'altitude. Cas pour l'inversion de C₂H₂ pour l'observation T24.

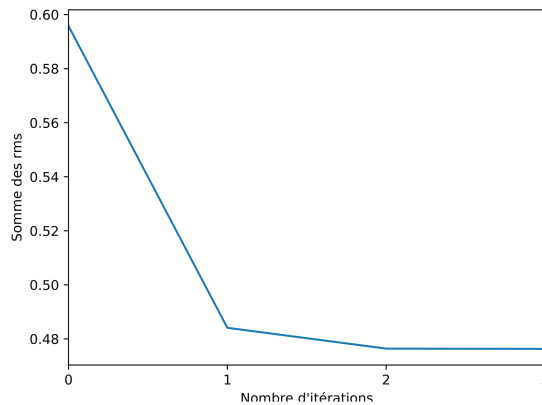


FIGURE 47 – Evolution de la somme des rms des spectres en fonction de l'itération. Au bout de deux itérations, l'inversion a convergé vers un profil solution. Cas pour l'inversion de C_2H_2 pour l'observation T24.

Intéressons nous à un autre exemple avec HC_3N sur la figure 49, ces kernels sont issus d'une inversion du flyby T16. A haute altitude, nous observons que les deux kernels en partant du haut (marron et rouge) sont optiquement minces jusqu'à 8×10^{-4} mbar. Mais plus bas vers 4×10^{-2} mbar, nous pouvons voir que les 4 spectres les plus profonds (d'un dégradé de bleu) sont piqués à basses altitudes au niveau du point tangent de leur ligne de visées respectives, mais ils montrent également une contribution des couches supérieures à 8×10^{-4} mbar. J'ai étudié en détails cette gamme d'altitude en utilisant différents *a priori*, et les profils solutions convergeaient tous vers un même profil solution.

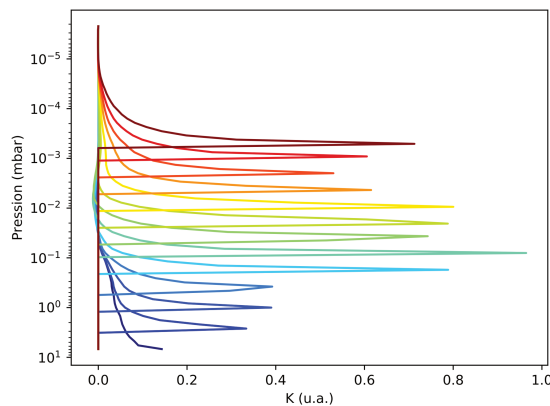
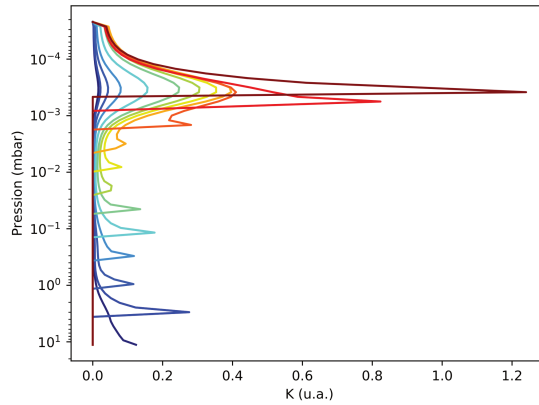


FIGURE 48 – La dérivée de l'intensité par rapport à l'abondance du C_2H_2 en fonction de l'altitude. Chaque courbe représente la contribution d'intensité de chaque spectre à la fréquence à 729 cm^{-1} . Cas de l'inversion pour l'observation T24.

5.5.4 Critère appliqué aux poids α_T et α_q

D'après Conrath et al. (1998), le poids α donné au profil solution afin qu'il s'écarte plus ou moins du profil *a priori*, doit être suffisamment grand pour que la trace de la matrice $\alpha_T K S K^T$ (ou $\alpha_q M S M^T$ pour l'extraction des profils d'abondance) soit sensiblement égale à la trace de la


 FIGURE 49 – Similaire à la figure 48, cas de l'inversion de HC_3N pour l'observation T16.

matrice de covariance du bruit, soit :

$$\text{Tr}(E) \frac{N_{\text{utile}}}{N_{\text{total}}} \sim \text{Tr}(\alpha K S K^T) \quad (61)$$

Où N_{utile} correspond au nombre de points spectraux utiles où le corps/température à une contribution, et N_{total} est le nombre de points spectraux total de(s) la gamme(s) d'inversion.

Dans la littérature, je n'ai pas trouvé d'information ou de raison mathématique justifiant cette égalité. Il faut le voir comme un compromis entre l'erreur due au bruit et l'erreur due au modèle. Le poids agit comme un filtre passe-bas des solutions retrouvées par l'inversion (Conrath et al., 1998).

Par expérience, un poids sur les données de l'ordre de 0,01 à 0,05 suffit à égaler la trace de la matrice liée au bruit. Une valeur plus importante induit des oscillations non-physiques sur les profils retrouvés.

5.6 Détermination du profil solution

Une fois les précédents critères validés pour une inversion, j'utilise différents types de profils *a priori*, constants avec l'altitude/à partir d'un niveau atmosphérique ou encore continûment croissants avec l'altitude. Le but est de voir dans quelle gamme d'altitudes nous sommes confiants sur la quantité d'information extraite des spectres observés.

Pour cela j'ai appliqué une méthodologie : je commence par faire quelques tests avec des profils *a priori* (de température ou d'abondance d'un corps) constants avec l'altitude, et dont les valeurs englobent ce que je m'attends à trouver. Par exemple sur la figure 50, les premiers tests étaient des profils constants avec l'altitude avec comme valeur : 10^{-6} (tirets rouge), 5×10^{-6} (tirets cyan) et 10^{-5} (tirets noir). En regardant les résultats de ces trois inversions, nous pourrions conclure qu'il n'y a pas d'information au-dessus de 6×10^{-3} mbar, car les profils solutions convergent tous aux barres d'erreurs à $1-\sigma$ près²¹. Cependant au-dessus de 6×10^{-3} mbar, le profil solution rouge n'est pas suffisamment abondant pour permettre aux spectres synthétiques à hautes

21. Le facteur $\max(\text{rms})/\max(\text{NESR})$ est appliqué sur la figure 50.

altitudes de reproduire les spectres observés (figure 51). Contrairement au profil solution en noir qui est soit trop abondant (figure 51, altitude 495 km), soit les spectres synthétiques ne reproduisent pas correctement la bande centrée vers 729 cm^{-1} (figure 51, altitudes 534 et 565 km). J'ai donc lancé un autre test ("test beta") avec un profil *a priori* correspondant à la sortie du test cyan et j'ai mis la valeur du profil *a priori* constant avec l'altitude au-dessus de $\sim 0,01$ mbar là où se trouve le minimum local (profil pointillé magenta). L'idée est d'observer si le profil solution de cette inversion s'éloigne du profil *a priori* au-dessus de 0,01 mbar, et si oui, jusqu'à quelle altitude. Le résultat de cette inversion donne le profil solution magenta, et nous constatons que ce profil se superpose au bruit près aux profils solutions cyan et noir jusqu'à 2×10^{-3} mbar. J'effectue un dernier test avec un profil d'abondance *a priori* croissant avec l'altitude (test gamma) afin de m'assurer que les oscillations sur les précédents profils solutions sont physiques, et c'est le cas sur la figure 50. Les spectres synthétiques à hautes altitudes de cette inversion sont présentés sur les figures 51 par les spectres en vert. Nous observons que ces spectres synthétiques reproduisent correctement ces spectres observés aux niveaux de pression 2×10^{-3} mbar et 9×10^{-4} mbar, et le dernier spectre au limbe à 5×10^{-4} mbar reproduit le spectre observé au bruit près. A l'aide de l'allure des kernels (figure 48), nous étendons légèrement l'altitude maximale en prenant l'altitude maximale atteinte au niveau de la largeur à mi-hauteur du kernel correspondant au spectre le plus haut. De plus, nous voyons que les barres d'erreurs sont très proches de se superposer (profils cyan et vert), sachant que les erreurs dues au décalage en altitude et au profil de température ne sont pas ici pris en compte. Ces deux profils sont donc relativement satisfaisants au bruit près. A basse altitude, le raisonnement est le même, et sur la figure 50, nous observons que les profils solutions des différents tests donnent tous une bonne reproduction des spectres synthétiques sur les spectres observés (figure 46). Nous limitons l'altitude minimale de la zone de confiance avant que les profils solutions de la figure 50 ne divergent. Nous sommes donc confiants sur la quantité d'information contenue dans les spectres entre 5 mbar et 3×10^{-4} mbar, pour le cas du profil d'abondance de C_2H_2 au flyby T24.

Pour tous ces tests, le poids donné aux données a été le même (0,01) et la trace de la matrice associée à l'inversion de C_2H_2 excède légèrement la trace de la matrice associée au bruit. Les profils solutions auraient donc dû tous converger vers un même profil dans la région de confiance que nous avons décrit ci-dessus, et nous savons que ce n'était pas le cas à haute altitude pour le profil solution rouge (figure 50). Le poids relatif pour les spectres observés à haute altitude est peut-être trop faible et il serait intéressant d'étudier l'impact d'un poids variant avec l'altitude.

5.7 Limite supérieure : validation par le χ^2

Lorsque j'atteins la limite de détection des bandes spectrales des corps, la méthode inverse utilisée échoue à déterminer un profil solution vraisemblable. Par expérience au cours de la thèse, l'abondance minimale pour observer une convergence des profils solutions est de l'ordre de 10^{-10} quelque soit le corps.

Lorsque les bandes spectrales ne sont pas détectées (comme pour C_6H_6 à basse latitude), j'ai déterminé les limites supérieures d'abondance à $2\text{-}\sigma$ ²², j'ai donc appliqué une autre méthode d'analyse des spectres infrarouge : la méthode par le calcul direct. L'approche est de déterminer l'impact de l'augmentation de l'abondance d'une molécule dans le modèle, c'est à dire pour quelle valeur q_{sup} la radiance synthétique s'écarterait de $2\text{-}\sigma$ de la radiance du spectre observé.

22. Soit un intervalle de confiance de 95%.

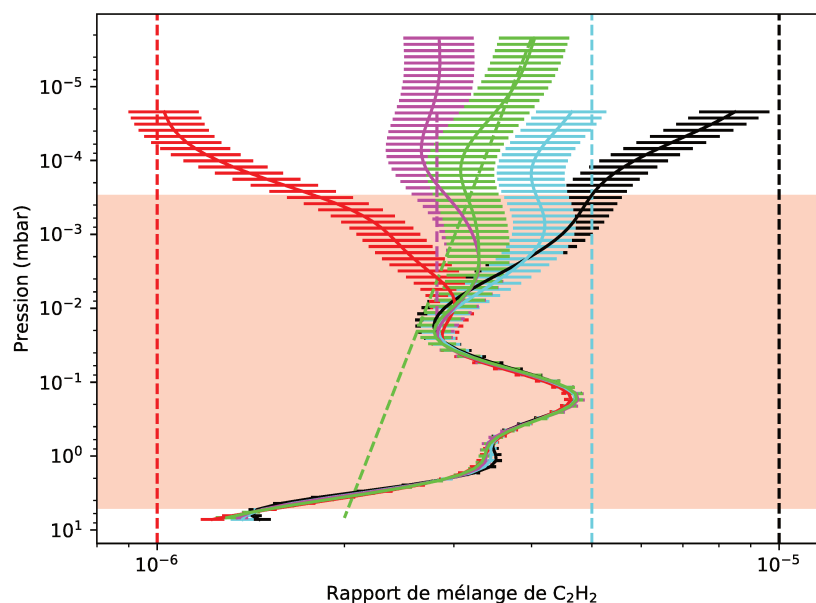


FIGURE 50 – Ensemble des profils solutions (traits pleins) avec différents profils *a priori* (pointillés) d'abondance de C_2H_2 pour l'observation T24 : test avec $x=10^{-5}$ (noir), test avec $x=10^{-6}$ (rouge), test avec $x=5 \times 10^{-6}$ (cyan), test "beta" avec un profil modifié (magenta), test "gamma" avec un profil pentu (vert). La zone rouge correspond à la gamme d'altitude de confiance.

J'ai donc appliqué une méthodologie, en me basant sur les travaux de Nixon et al. (2010), où je commence par fixer tous les paramètres libres du modèle : les profils d'abondance des composés photochimiques ainsi que le profil d'aérosol déterminé dans la gamme spectrale utilisée. Il me reste maintenant un seul paramètre libre : l'abondance du corps dont je cherche à déterminer la limite supérieure. Je fais alors varier le rapport de mélange du corps en supposant que son profil vertical est constant avec l'altitude, puis je calcule les spectres synthétiques. En comparant les spectres synthétiques aux spectres observés, je peux déterminer pour quelle valeur de rapport de mélange la rms est minimisée (figure 52). La limite supérieure du rapport de mélange à $2\text{-}\sigma$ est la valeur qui atteint la valeur de rms :

$$rms_{2-\sigma} = rms_{min} * \sqrt{1 + \frac{4}{N}} \quad (62)$$

Avec N le nombre de points spectraux total de la gamme d'inversion. Le point faible de cette méthode est la non-unicité de la solution. En effet, un profil *a priori* pentu pourrait donner un résultat similaire. Cependant, cette méthode permet de donner une estimation de la limite supérieure du rapport de mélange d'un corps.

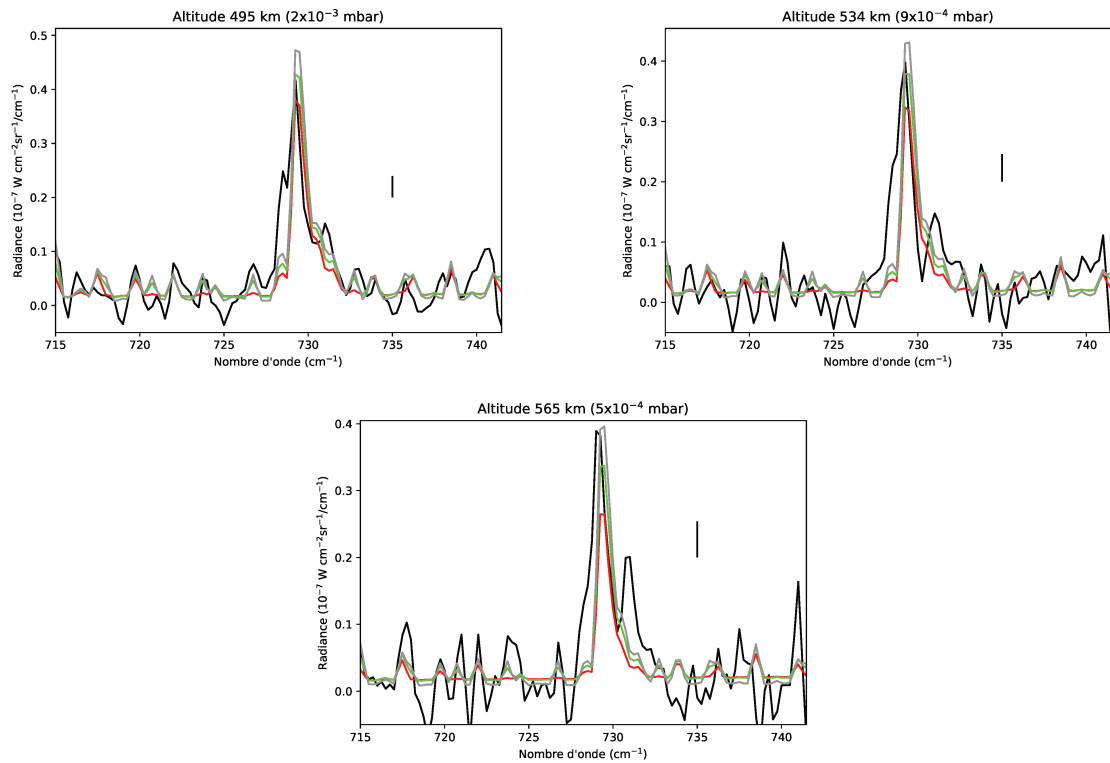


FIGURE 51 – Spectres synthétiques des limbes les plus hauts, après inversion avec un profil d'abondance de C_2H_2 retrouvé correspondant à la figure 50 (le spectre synthétique gris correspond au profil d'abondance en noir). Le spectre observé est affiché en noir. La rms est affichée par le trait noir vertical.

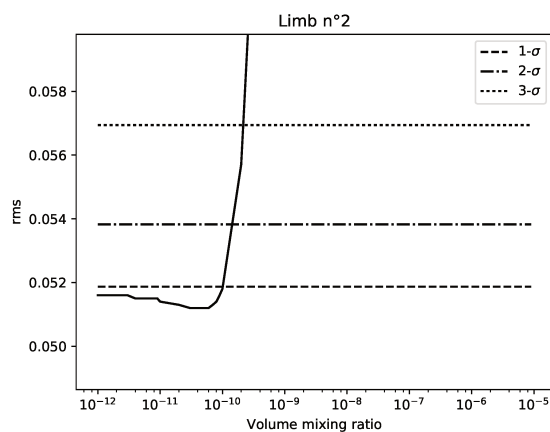


FIGURE 52 – Rms en fonction du rapport de mélange de C_6H_6 pour le deuxième spectre au limbe le plus profond (altitude du point tangent : 159 km). Les tirets horizontaux représentent les valeurs des rms à 1- σ , 2- σ et 3- σ de rms_{min} .

Résultats des inversions

6

Sommaire

6.1	Profils de température	83
6.1.1	Région polaire nord	83
6.1.2	Moyennes latitudes nord	84
6.1.3	Région équatoriale	84
6.1.4	Moyennes latitudes sud	85
6.1.5	Région polaire sud	85
6.2	Influence de l'abondance du méthane	86
6.3	Profils d'abondance	89
6.3.1	Région polaire nord	89
6.3.2	Latitudes moyennes et région équatoriale	89
6.3.3	Région polaire sud	90

Les figures 53 et 55-64 présentent les profils de température et d'abondance des composés photochimiques déduits à partir des observations listées dans la table 3. Ces profils verticaux sont présentés par gamme de latitude, de haut en bas : la région polaire nord (90°N à 60°N), les latitudes moyennes nord (60°N à 20°N), la région équatoriale (20°N à 20°S), les latitudes moyennes sud (20°S à 60°S) et la région polaire sud (60°S à 90°S). Ces profils verticaux sont également regroupés en fonction de la saison, de gauche à droite : l'hiver nord (de décembre 2004 à décembre 2008), aux alentours de l'équinoxe de printemps nord (mars 2009 à avril 2010) et le printemps nord (juillet 2010 à mai 2017). Sur ces figures, les barres d'erreurs sont positionnées aux niveaux des altitudes sondées par les spectres aux limbes. Je discute aussi de l'impact de la variation de l'abondance du méthane, que j'ai supposée constante avec l'altitude à toutes les latitudes et tout au long de la mission.

La discussion des variations saisonnières est détaillée au chapitre 7 pour les moyennes et basses latitudes, aux chapitres 8 et 9 pour la région polaire nord et sud, respectivement.

6.1 Profils de température

6.1.1 Région polaire nord

Pendant l'hiver nord, la région polaire nord au-dessus de 0,1 mbar (~270 km) est plus chaude que la région équatoriale, avec un maximum de température d'environ ~205 K à ~10⁻² mbar (~400 km) en février 2005 à 82°N, qui se trouve être la température la plus chaude jamais observée sur Titan. Par contre, la région polaire nord est plus froide que la région équatoriale en-dessous de 0,1 mbar (~270 km), avec 150 K à 1 mbar (~175 km) en 2005 à 82°N vs ~170 K

dans la région équatoriale. Proche de 4 mbar, la température des 4 profils de la région polaire nord est inférieure à 140 K, soit environ 15 K de moins que dans la région équatoriale.

De août 2007 à juin 2009, peu avant l'équinoxe de printemps nord, la région polaire nord s'est refroidie entre $0,3 \times 10^{-3}$ et 3×10^{-3} mbar (~ 310 à ~ 430 km), d'environ 23 K à 10^{-2} mbar (~ 360 km). En décembre 2009 à 74°N , le profil de température présente une oscillation entre 4×10^{-2} mbar (~ 310 km) et 10^{-3} mbar (~ 490 km) que je discute dans la section 8.4.

Pendant le printemps nord, de décembre 2011 à janvier 2015, la région polaire nord s'est réchauffée d'environ 7 K entre 10 mbar (~ 90 km) et 1 mbar (~ 170 km), et d'environ ~ 15 K entre 1 mbar et 0,1 mbar (~ 280 km). Au-dessus de 0,02 mbar (~ 370 km), la température n'a pas significativement varié pendant cette période. En janvier 2015, le maximum de température dans la région polaire nord est localisé vers 0,1 mbar, environ deux échelles de hauteur plus basses qu'en 2005, mais similaire à la position de la stratopause dans la région équatoriale.

6.1.2 Moyennes latitudes nord

Pendant l'hiver nord, entre mai 2006 et mai 2008, les profils de température au-dessus de 40°N étaient environ 5 K plus froid que celui à 31°N entre 7 mbar (~ 105 km) et 0,1 mbar (~ 280 km). Le profil de température à 31°N était similaire aux profils de température dans la région équatoriale à la même saison. Par contre, les profils de température au-dessus de 40°N étaient ~ 10 K plus chaud au-dessus de 0,02 mbar (~ 370 km) que celui à 31°N . A ces latitudes, la température vers 0,02 mbar décroît de ~ 190 K en mai 2006 à ~ 177 K en mai 2008.

Aux alentours de l'équinoxe de printemps nord, le profil de température à 22°N en mai 2009 était proche du profil de température à 31°N en janvier 2007 entre 9 mbar (~ 100 km) et 0,5 mbar (~ 210 km), mais plus froid dans la région 0,2-0,5 mbar. Les données issues de ces profils sont à haute résolution verticale (~ 10 km) et n'atteignent pas des altitudes plus élevées que le niveau 0,1 mbar (~ 285 km).

Pendant le printemps nord, la stratosphère s'est réchauffée d'environ 3 K entre 5 mbar (~ 120 km) et 0,3 mbar (~ 235 km) de mai 2011 (53°N) à juin 2012 (44°N). De juin 2012 à juillet 2014, les profils de température étaient à peu près isothermes entre 0,3 mbar et 0,04 mbar (~ 330 km) avec une température d'environ 175 K. En novembre 2016, la température a augmenté entre 0,3 et 0,04 mbar, atteignant un maximum de ~ 183 K à 0,08 mbar (~ 295 km).

6.1.3 Région équatoriale

Durant toute la mission Cassini, la basse stratosphère, en-dessous de 0,5 mbar, n'a pas montré de variations de température excédant 5 K dans la région équatoriale. Vers 0,1 mbar, je n'observe pas de fortes variations entre décembre 2004 et juin 2009 ($T \sim 175$ K), tandis qu'entre 2012 et 2017, la température s'est refroidie d'environ 7 K. A plus haute altitude, vers 0,01 mbar, la situation est moins évidente mais la température globale de la moyenne atmosphère décroît d'environ 10 K entre 2012 et 2017. Au niveau de pression de l'ordre du μbar , les profils de température montrent des variations au cours de la mission qui ne sont corrélées ni avec la latitude, ni avec l'heure locale.

6.1.4 Moyennes latitudes sud

Pendant l'été sud (2004-2008), les profils de température aux latitudes moyennes sud ne présentaient pas de fortes variations et étaient très similaires aux profils de température de la région équatoriale durant cette saison.

Près de l'équinoxe d'automne sud, en juillet 2009 à 58°S, la stratosphère s'est légèrement refroidie d'environ 2 K entre 8 mbar (~110 km) et 0,07 mbar (~310 km), par rapport à l'été sud.

Pendant l'automne sud, l'atmosphère en février 2012 (44°S) était ~ 2 K plus chaude entre 10 mbar (~100 km) et 1 mbar (~185 km) qu'en juillet 2009 (58°S), tandis qu'au-dessus de 1 mbar, la température a diminué. Le minimum de température observé vers 0,05 mbar (~320 km) sur le profil de température à 44°S pourrait être dû à une oscillation car ce minimum n'est pas présent sur le profil de température en mai 2014 (35°S). Cette oscillation est similaire à l'oscillation observée en décembre 2009 à 74°N qui est discutée dans la section 8.4. Entre mai 2014 (35°S) et octobre 2014 (46°S), la température a diminué entre 1 mbar (~180 km) et 2×10^{-4} mbar (~575 km), d'environ 8 K à 0,1 mbar (~275 km). D'octobre 2014 (46°S) à juin 2016 (51°S), l'atmosphère au-dessus de 0,05 mbar (~300 km) s'est réchauffée, d'environ 11 K à 0,01 mbar (~ 375 km), position du maximum local, alors qu'elle s'est refroidie en-dessous de 0,05 mbar d'environ 6-7 K. Entre juin 2016 et mai 2017 (51°S), la température a fortement augmenté entre 0,3 mbar (~225 km) et 0,01 mbar (~390 km), jusqu'à ~20 K à 0,04 mbar (~320 km), position du maximum local de température. Dans la basse stratosphère (0,5-5 mbar), l'atmosphère s'est refroidie d'environ 15 K entre 2012 et 2017.

6.1.5 Région polaire sud

Pendant l'été sud, CIRS n'a pas enregistré de spectre au limbe avec une résolution spectrale de $0,5 \text{ cm}^{-1}$ dans la région polaire sud.

Aux alentours de l'équinoxe d'automne sud, les profils de température à haute latitude sud ne présentaient pas de fortes variations entre août 2009 et janvier 2010, mais ces profils sont similaires aux profils de température dans la région équatoriale en mars 2009 en-dessous de 0,05 mbar. Cependant, j'ai observé un léger refroidissement entre 0,7 mbar (~195 km) et 0,03 mbar (~350 km) pendant cette période, atteignant ~5 K à 0,1 mbar (~290 km), tandis qu'entre 0,03 mbar et 0,001 mbar (~520 km) la température a augmenté d'environ 3 K.

Les variations des profils de température sont bien plus spectaculaires pendant l'automne sud entre 2010 et 2016. Premièrement, j'ai observé une légère diminution de température entre janvier 2010 (74°N) et juillet 2010 (80°S) dans la gamme de pression 0,4-0,05 mbar (~220-320 km), atteignant ~3 K à 0,2 mbar (~255 km), et une légère augmentation de température entre 0,01 mbar et 0,001 mbar (~395-510 km). Quatorze mois plus tard en septembre 2011 (86°S), la température a augmenté entre 0,08 mbar et 4×10^{-3} mbar (~280-430 km), d'environ ~7 K à 0,01 mbar (~380 km), tandis qu'en-dessous de 0,08 mbar, l'atmosphère s'est fortement refroidie, d'environ ~16 K à 1 mbar (~175 km). En mars 2015 (78°S), l'atmosphère s'est fortement refroidie en-dessous de 4×10^{-4} mbar (~500 km), comparée aux températures de septembre 2011, d'environ 26 K à 0,01 mbar (~ 350 km). Seulement six mois plus tard en septembre 2015 (86°S), j'ai observé une forte augmentation de la température en-dessous de 10^{-4} mbar (~595 km),

atteignant ~ 31 K à 0,04 mbar (~ 285 K). Quelques mois plus tard en janvier (86°S) et février (80°S) 2016, la température a fortement décliné en-dessous de 0,01 mbar (~ 325 km), d'environ 30 K à 0,2 mbar (~ 210 km), tandis qu'au-dessus, les températures n'ont pas fortement varié.

6.2 Influence de l'abondance du méthane

Pour déduire les profils de température et d'abondances, j'ai émis l'hypothèse que le rapport de mélange du méthane était constant avec l'altitude dans la stratosphère à toutes les latitudes et à toute saison. Cette hypothèse peut-être remise en question compte-tenu des travaux de Lellouch et al. (2014). En analysant les bandes de rotation et la bande ν_4 du méthane des spectres CIRS, les auteurs ont obtenu des variations latitudinales du rapport de mélange de méthane stratosphérique pendant l'hiver nord, allant de 1% vers l'équateur et 50-55°N et S à 1,5% à 30-35°N et S et aux pôles. J'ai alors déterminé l'impact de 1% de méthane (au lieu de 1,48%) sur les inversions des profils de température et d'abondance des composés photochimiques. Pour cela, j'ai choisi les observations du survol T49 (décembre 2008, 16°N) et j'ai appliqué la même méthodologie mais avec un rapport de mélange de méthane de 1% au lieu de 1,48%.

Le profil de température déduit est au plus 4 K plus chaud avec 1% de méthane dans la stratosphère sous un niveau de pression de 0,1 mbar (~ 290 km) (figure 54). Ces températures plus élevées impactent les profils d'abondance, qui sont environ 20% plus faibles que ceux déduits avec 1,48%. Je n'ai pas pris en compte l'impact lié à l'incertitude sur le rapport de mélange du méthane sur les profils de température et d'abondance obtenus pendant ma thèse, car l'étude de Lellouch et al. (2014) se limite à l'hiver nord et les résultats pourraient être différents pendant le printemps nord. J'ai également choisi d'être cohérent tout au long de mon étude où toutes les inversions ont été effectuées avec un rapport de mélange uniforme de méthane de 1,48%. Ce résultat souligne néanmoins l'importance de contraindre le profil d'abondance du méthane en fonction de la latitude et de la saison.

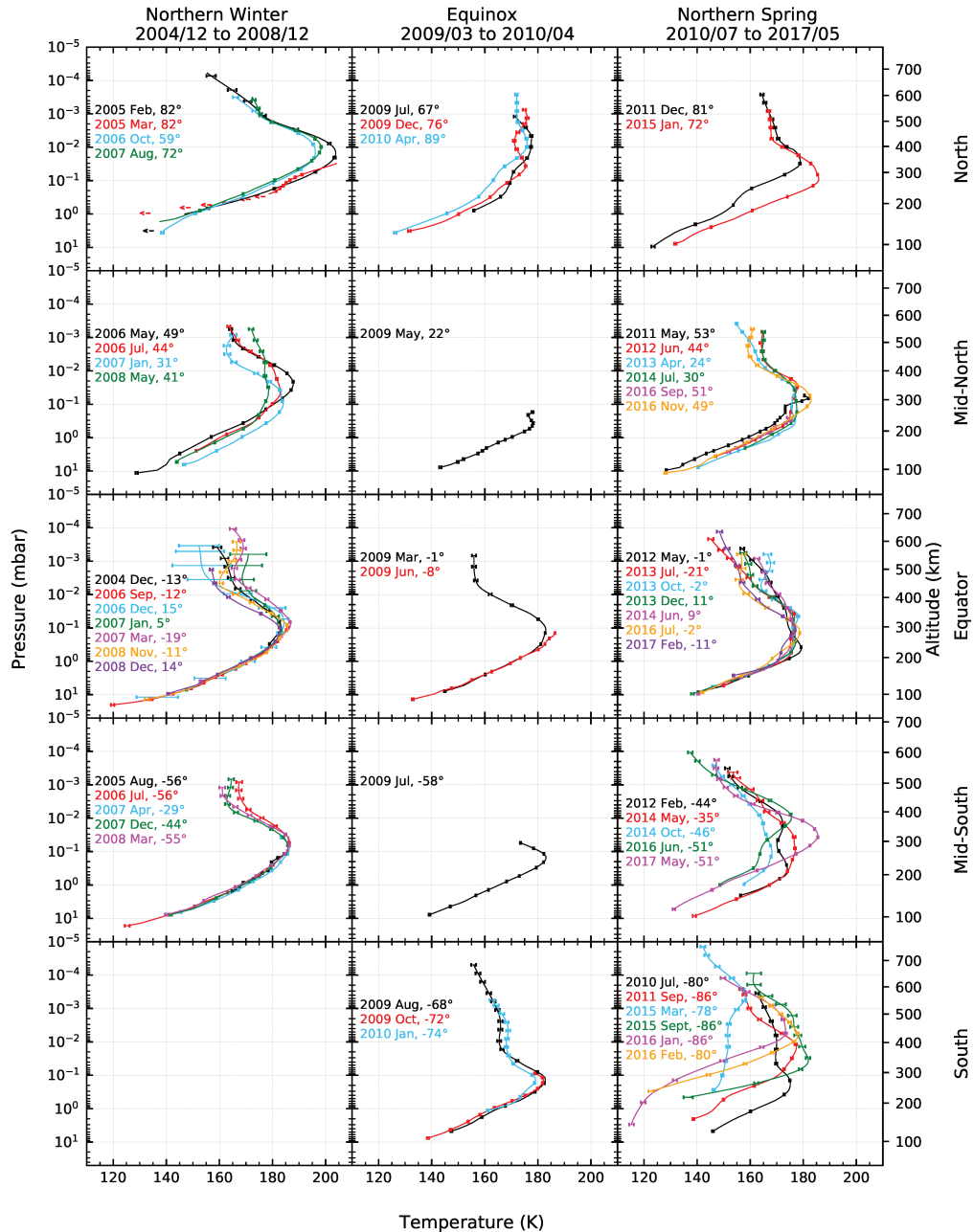


FIGURE 53 – Profils de température suivant la gamme de latitude, de haut en bas : région polaire nord (90°N:60°N), latitudes moyennes nord (60°N:20°N), région équatoriale (20°N:20°S), latitudes moyennes sud (20°S:60°S) et région polaire sud (60°S:90°S). La latitude affichée des profils thermiques correspond à la latitude du FP4. Les profils de température sont aussi ordonnés par saison, de gauche à droite : l'hiver nord (12/04 : 12/08), la transition à l'équinoxe de printemps nord (01/09 : 04/10) et le printemps nord (07/10 : 05/17).

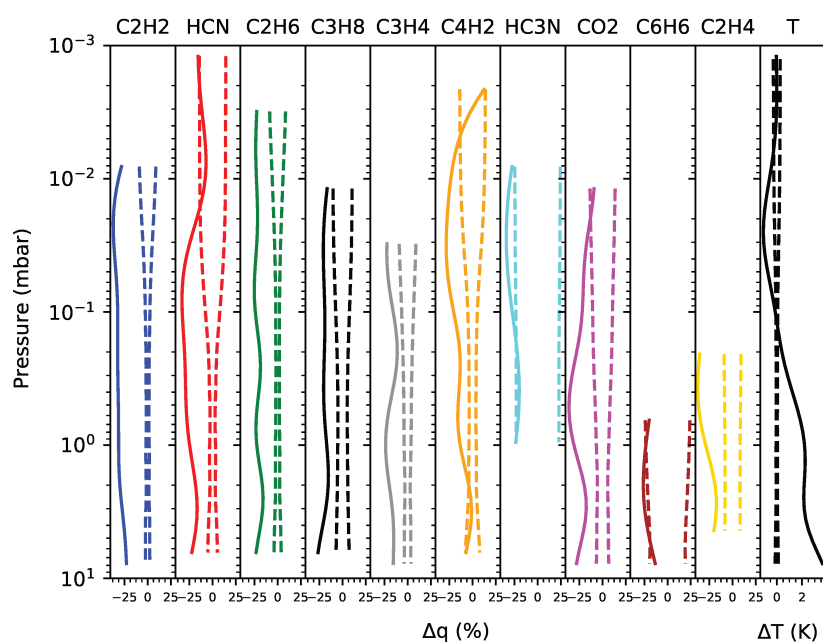


FIGURE 54 – Différences relatives des profils d'abondances des composés photochimiques et de température déduits après inversion utilisant 1% et 1,48% d'abondance de méthane mis en paramètre d'entrée. Les tirets correspondent à l'erreur à $1-\sigma$ liée au bruit pour les inversions faites avec 1%.

6.3 Profils d'abondance

Les profils de dioxyde de carbone (CO_2) (figure 64) ne présentent pas de fortes variations saisonnières quelle que soit la latitude. Les profils montrent un maximum local de rapport de mélange vers 1 mbar (~ 190 km) à toutes les latitudes, exceptés pendant l'hiver nord dans la région polaire nord (fig.64). L'amplitude de la variation est d'au plus un facteur deux. Dans la suite de cette section, je ne discuterai pas des profils d'abondance de CO_2 .

6.3.1 Région polaire nord

Les variations saisonnières des profils d'abondance des composés photochimiques dans la région polaire nord sont montrées sur la figure 69. Durant l'hiver nord, de février 2005 à août 2007, les abondances de la majorité des composés photochimiques entre 10 mbar (~ 100 km) et 10^{-4} bar (~ 690 km) étaient plus importantes dans la région polaire nord qu'à l'équateur à la même saison. La différence de rapport de mélange atteint un facteur 3-5 pour C_3H_4 , C_4H_2 , C_2H_4 , C_6H_6 et un facteur 50 pour HC_3N à 1 mbar (~ 175 km). D'un autre côté, les profils de C_2H_6 et C_3H_8 ne présentaient pas de différences significatives entre la région polaire nord et la région équatoriale. Pendant cette saison, j'ai aussi détecté le benzène en-dessous de 0,01 mbar (~ 400 km) avec un rapport de mélange d'environ $\sim 4 \times 10^{-9}$ à 80°N , 10^{-9} à 70°N , et $3-5 \times 10^{-10}$ à 50°N .

En décembre 2009 et avril 2010, après l'équinoxe de printemps nord, j'ai observé un enrichissement des composés photochimiques au-dessus de 0,1 mbar (~ 260 km), comparé à juillet 2009. En particulier, le benzène a été détecté jusqu'à 10^{-4} mbar (~ 630 km). J'ai aussi remarqué que le C_2H_2 était plus abondant que le C_2H_6 à des niveaux de pression inférieurs à quelques 10^{-2} mbar (~ 375 km) (figure 69).

Au début du printemps nord en décembre 2011, j'ai observé un appauvrissement global des composés photochimiques (figure 69), excepté C_2H_6 , au-dessus de 0,1 mbar (~ 260 km) comparé aux profils d'abondance d'avril 2010. J'ai aussi observé que le profil d'abondance de C_2H_2 était similaire au profil de C_2H_6 , et que le benzène était seulement observé en-dessous de 0,01 mbar (~ 375 km) avec un rapport de mélange de quelques 10^{-10} à 79°N . Puis en janvier 2015, l'appauvrissement en composés photochimiques au-dessus de 0,1 mbar (~ 280 km) était encore plus important qu'en décembre 2011, d'un facteur ~ 12 , ~ 8 et ~ 3 pour C_2H_2 , C_4H_2 et HCN respectivement à 0,001 mbar (~ 480 km).

6.3.2 Latitudes moyennes et région équatoriale

Entre 60°N et 60°S dans la stratosphère en-dessous de 0,01 mbar (~ 410 km), les composés photochimiques sont légèrement plus abondants pendant l'hiver nord que pendant le printemps nord. Au-dessus de 0,01 mbar, les profils d'abondance de C_2H_2 et HCN présentent des variations qui ne semblent pas être corrélées avec l'année ou l'heure locale (voir table 3).

Toutefois, j'ai observé pour certains cas des variations d'abondances sur des profils proches du vortex polaire d'hiver. En mai 2006 (51°N), j'ai observé un maximum local sur le profil d'abondance de HC_3N vers 0,1 mbar (~ 290 km), comparable au profil de HC_3N à 62°N en

octobre 2006. Et vers 45°S, j'ai observé un enrichissement de tous les composés photochimiques en-dessous de 0,1 mbar (~290 km) entre octobre 2014 et juin 2016, comme observé dans la région polaire sud à la même saison.

6.3.3 Région polaire sud

Les variations saisonnières des profils d'abondance dans la région polaire sud sont présentées sur la figure 72. D'août 2009 (70°S) à au moins juillet 2010 (80°S), je n'ai pas observé de fortes variations saisonnières sur les profils d'abondance entre 10 mbar (~95 km) et 0,001 mbar (~520 km). En septembre 2011 pendant l'automne sud, j'ai observé un fort et global enrichissement des composés photochimiques par rapport aux profils observés en juin 2010 entre 0,01 mbar (~380 km) et 10^{-4} mbar (~620 km). Cet enrichissement atteint un facteur 100-1000 pour les composés photochimiques tels que C_3H_4 , C_4H_2 , HC_3N , C_2H_4 et un facteur 10 pour C_2H_2 et HCN. A cette date, j'ai aussi détecté le benzène dans la région polaire sud au-dessus de 2×10^{-3} mbar (~465 km) avec un rapport de mélange d'environ 10^{-7} - 10^{-6} . Puis en mars 2015, les profils d'abondances ont continué de s'enrichir, dépassant l'enrichissement vu en septembre 2011 d'un facteur 10 au-dessus de 10^{-3} mbar (~455 km). Entre 0,1 mbar (~255 km) et 0,001 mbar (~455 km), les rapports de mélange de C_2H_2 et HCN étaient plus importants d'un facteur 3 et 10, respectivement. En septembre 2015, seulement six mois plus tard, les profils d'abondance des composés photochimiques ont drastiquement diminué vers et en-dessous de 0,001 mbar (~475 km) mais restent plus abondants que les profils déduits aux alentours de l'équinoxe d'automne sud. Cette diminution d'abondance a continué à un rythme plus faible vers 0,001 mbar jusqu'en janvier 2016. Un mois plus tard en février, les profils d'abondances étaient relativement constants avec l'altitude entre 0,1 mbar (~230 km) et 10^{-3} mbar (~450 km), excepté pour le profil d'abondance de HCN qui a montré une variation d'abondance d'un facteur 3 dans cette gamme d'altitude.

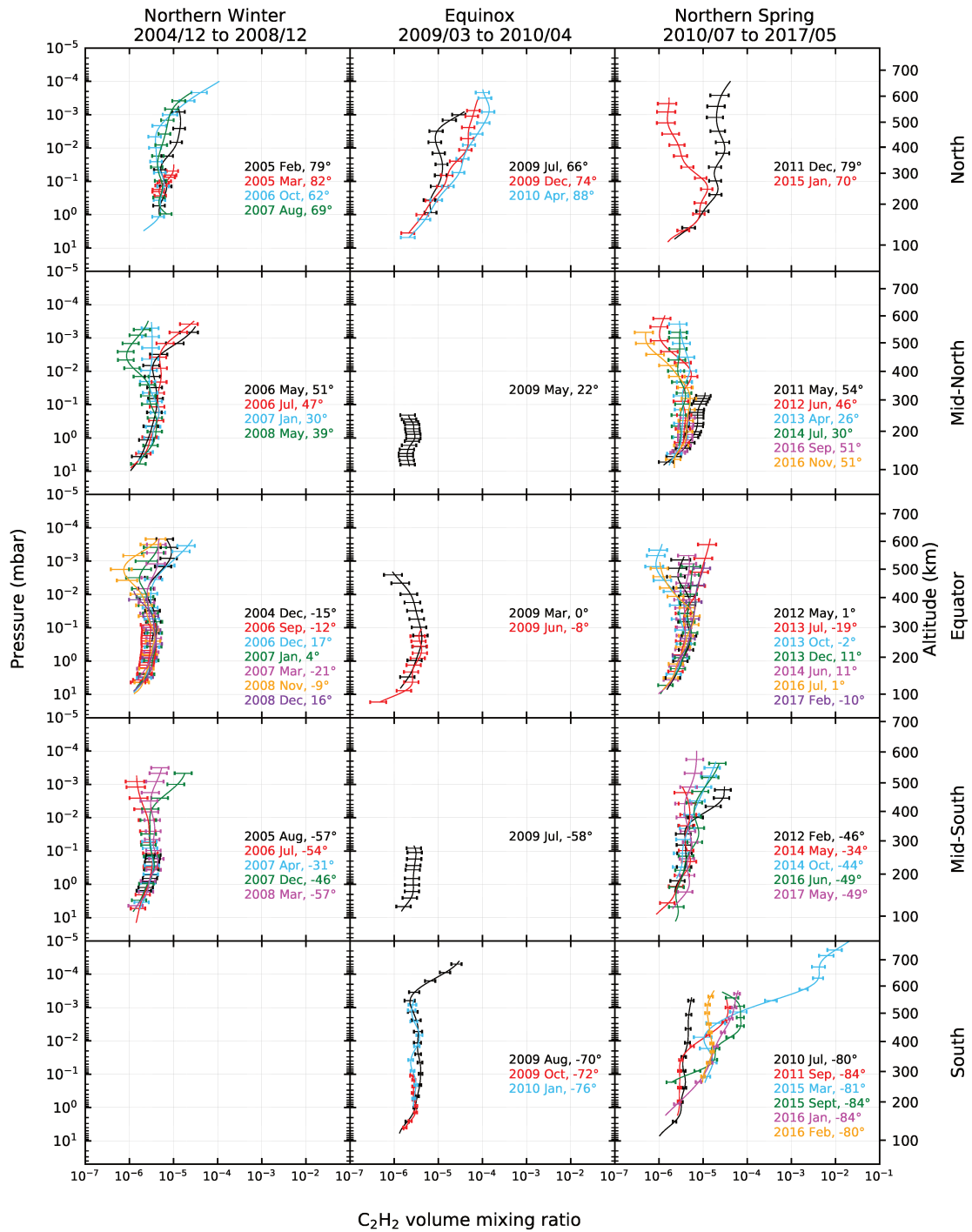


FIGURE 55 – Profils d'abondance de C_2H_2 déduits des observations de la table 3. Similaire à la figure 53. La latitude affichée des profils d'abondances correspond à la latitude visée par le FP3.

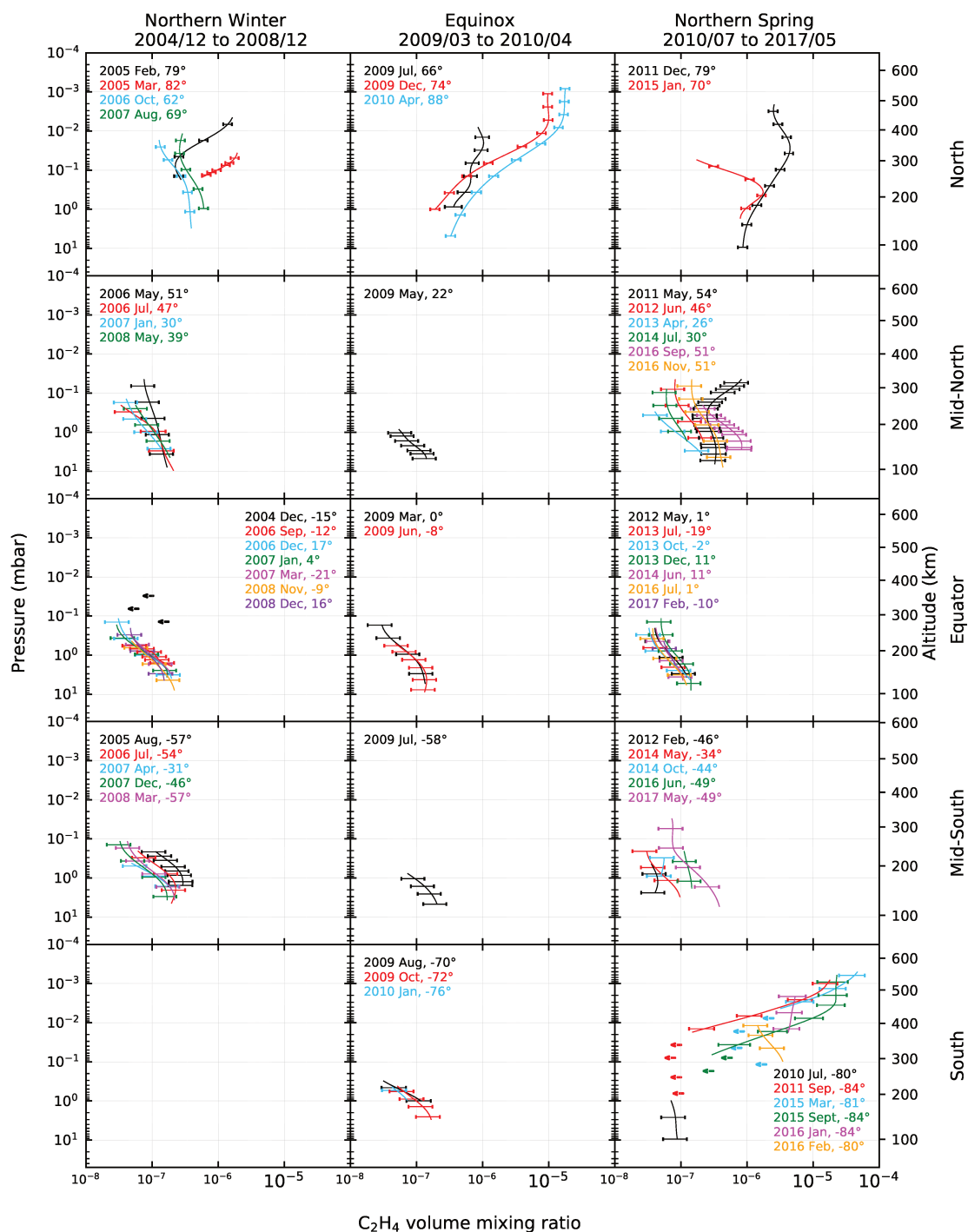


FIGURE 56 – Profils d'abondance de C₂H₄, similaire à la figure 55.

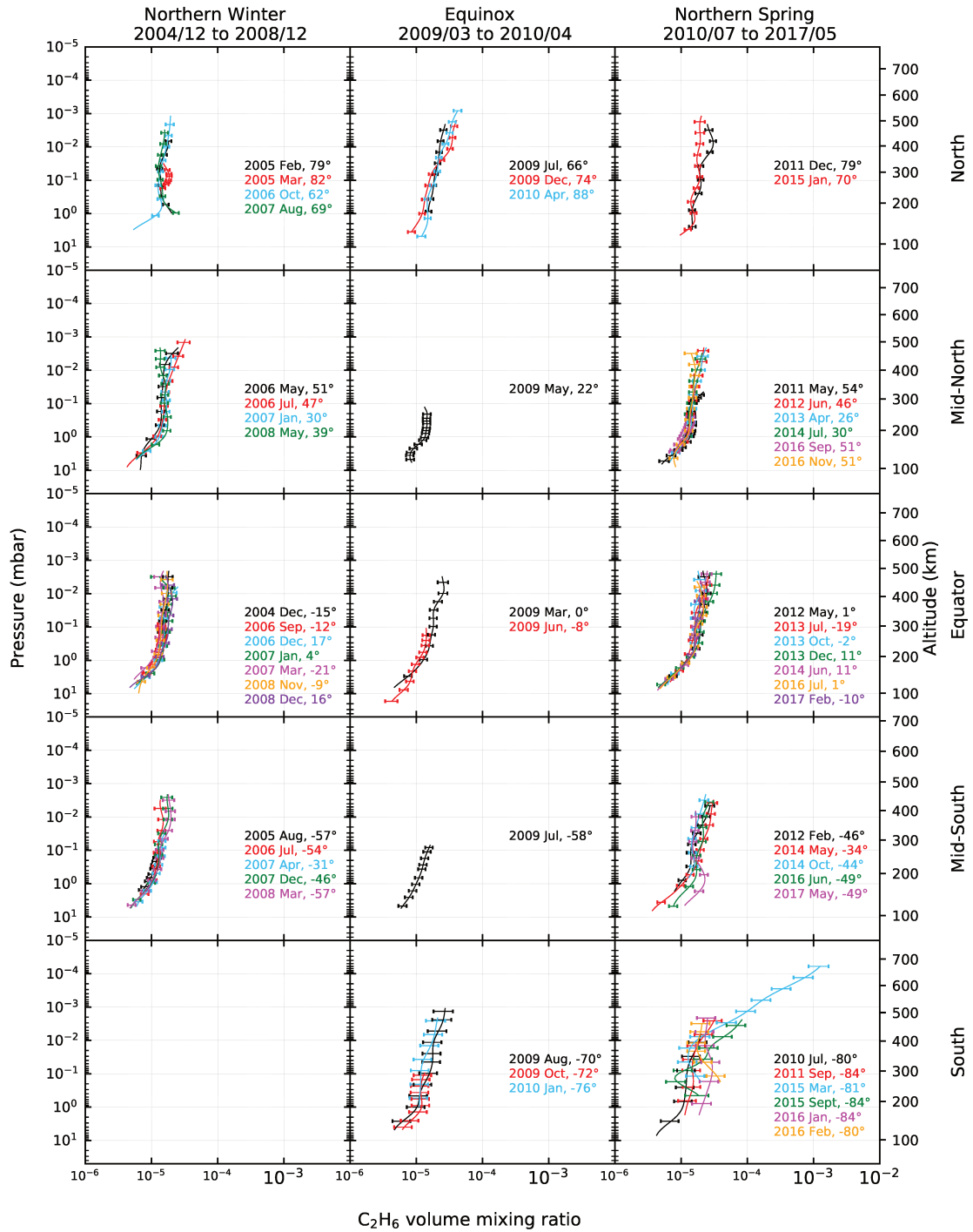


FIGURE 57 – Profils d'abondance de C_2H_6 , similaire à la figure 55.

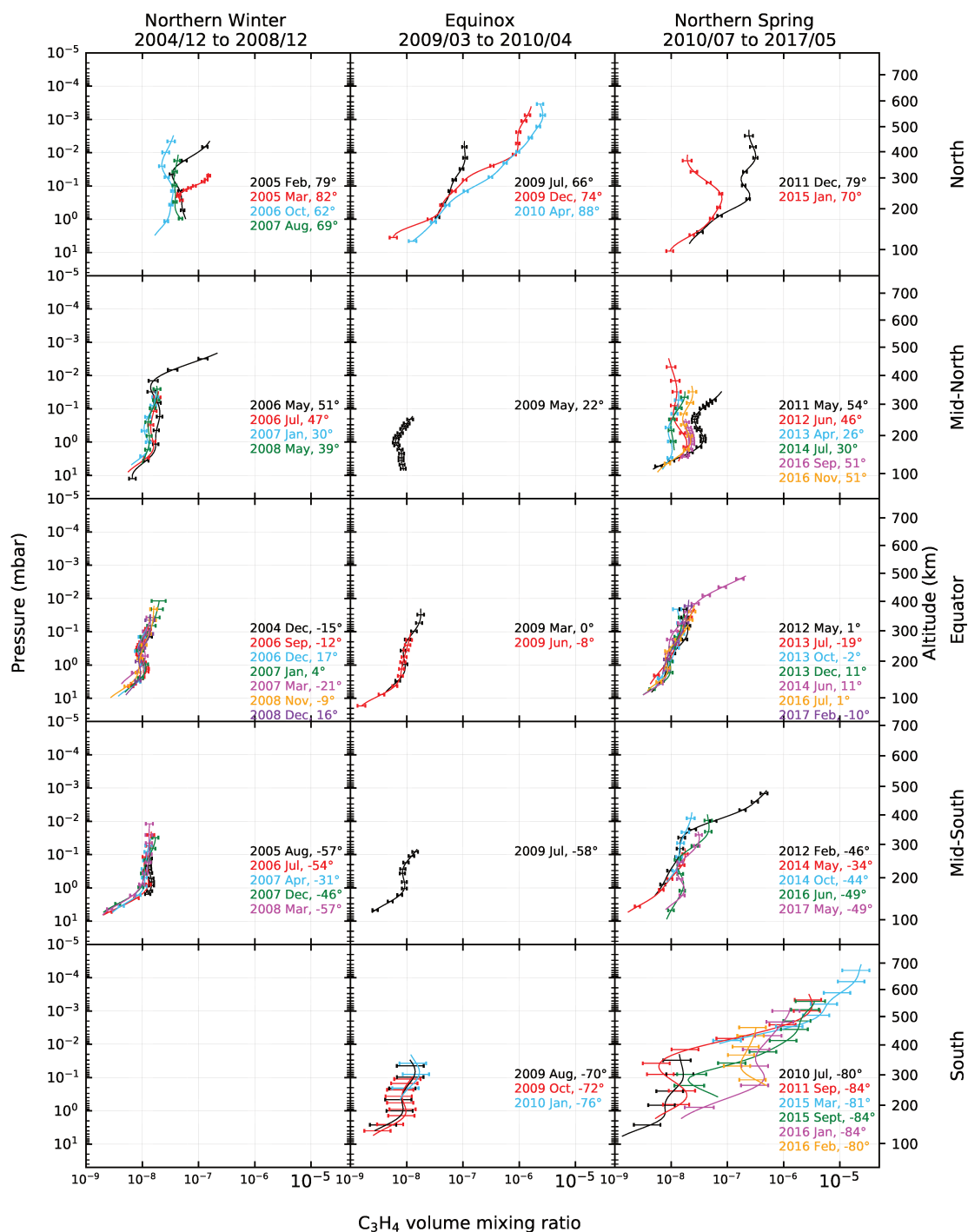


FIGURE 58 – Profils d'abondance de C_3H_4 , similaire à la figure 55.

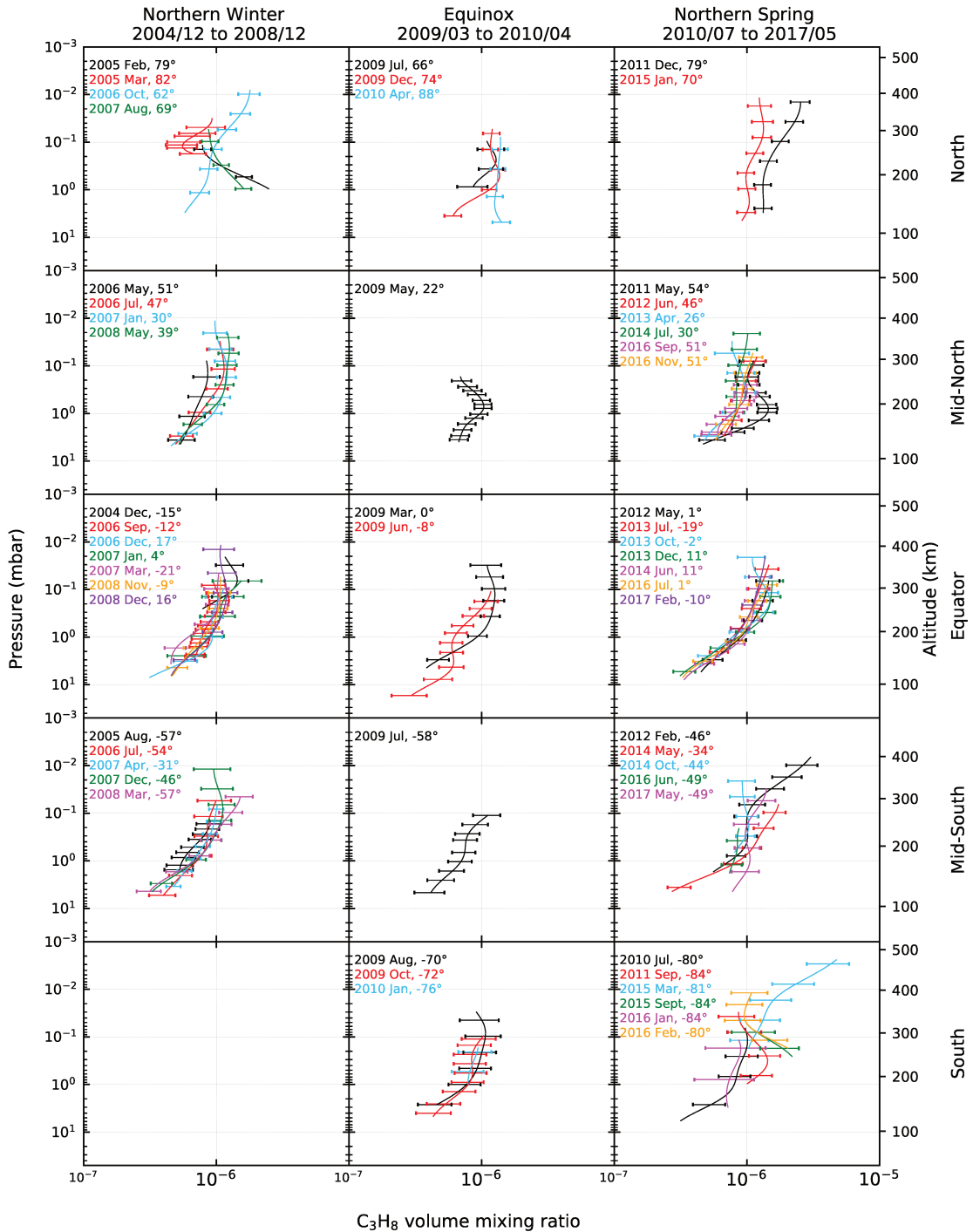


FIGURE 59 – Profils d'abondance de C₃H₈, similaire à la figure 55.

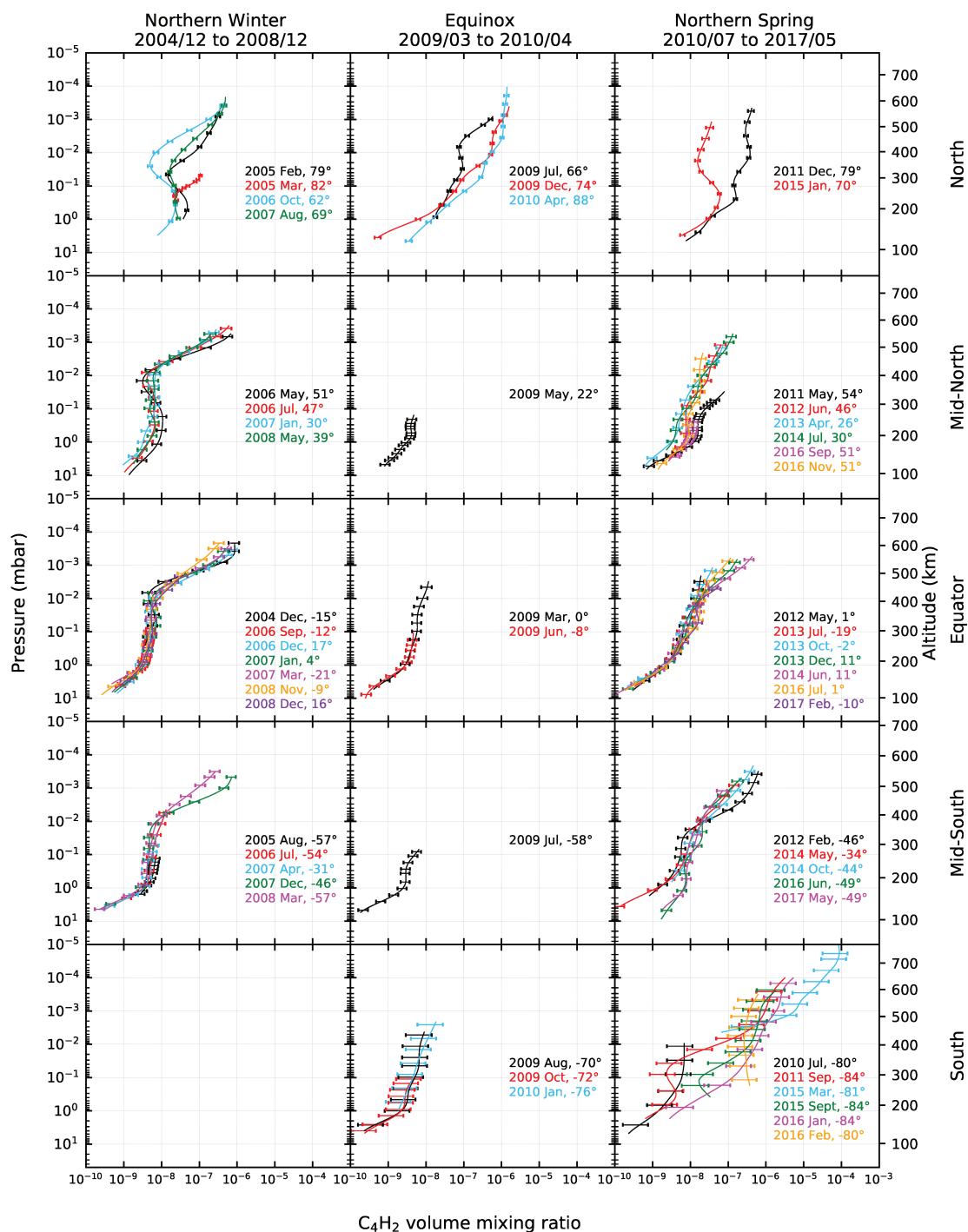


FIGURE 60 – Profils d'abondance de C_4H_2 , similaire à la figure 55.

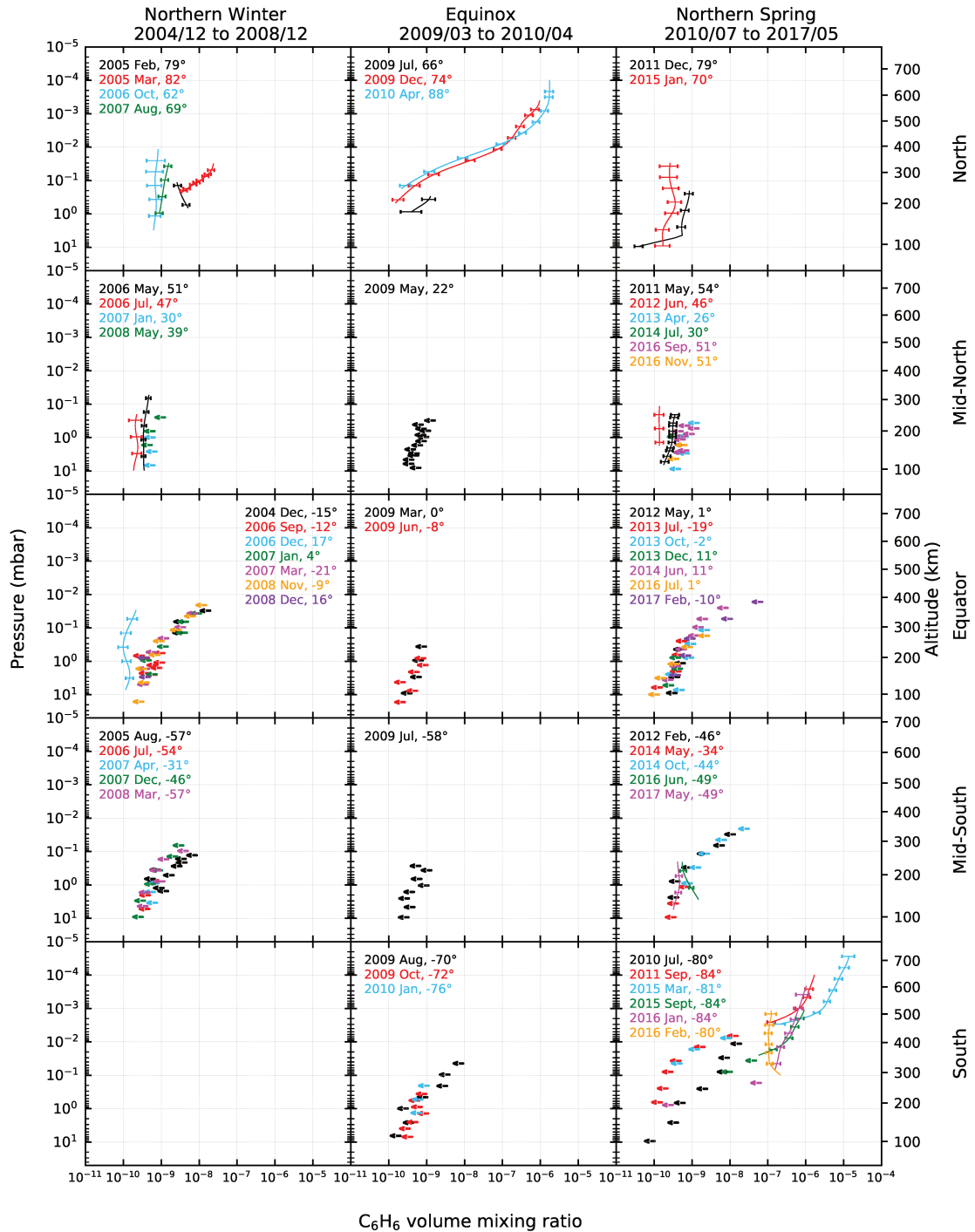


FIGURE 61 – Profils d'abondance de C₆H₆, similaire à la figure 55.

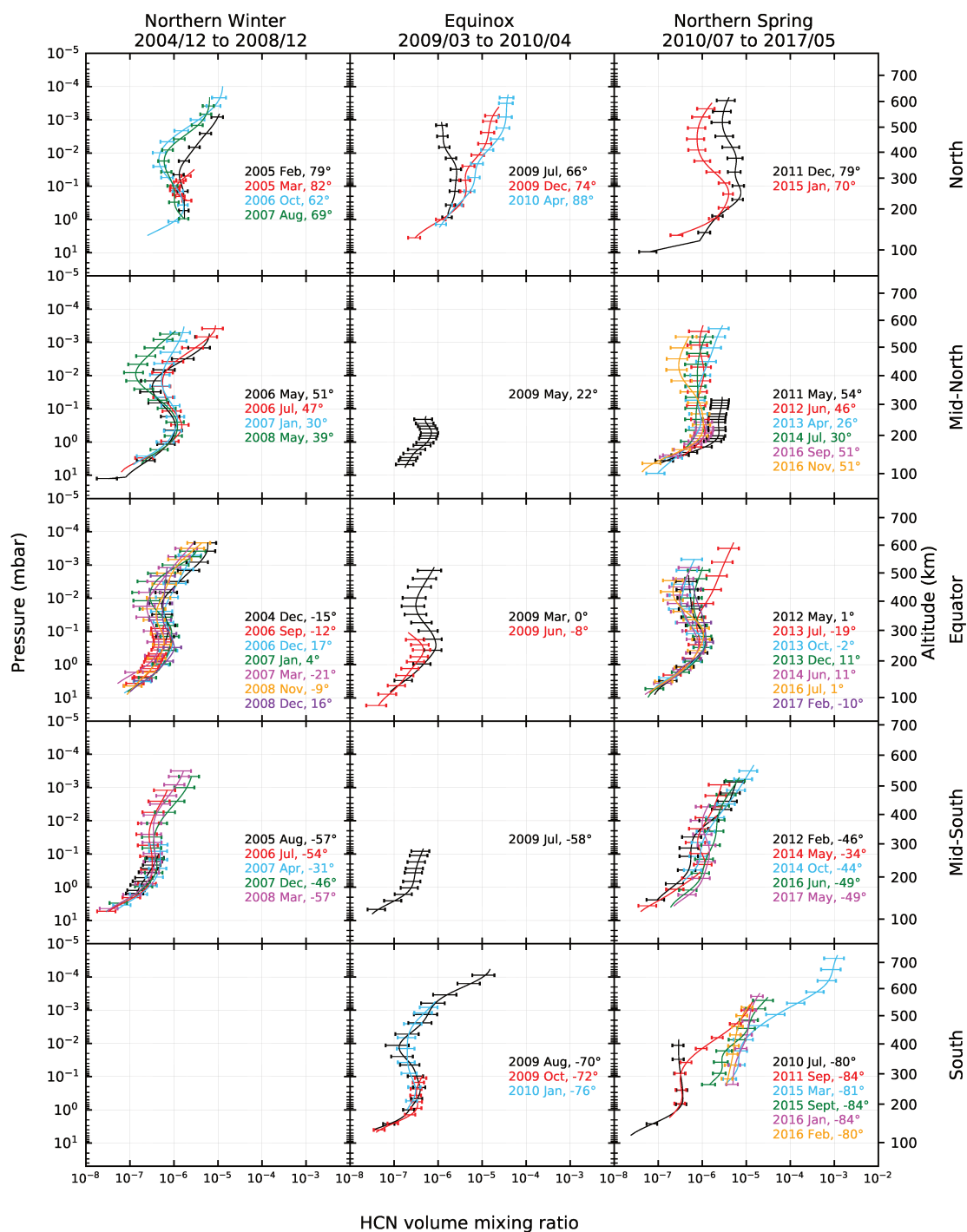


FIGURE 62 – Profils d'abondance de HCN, similaire à la figure 55.

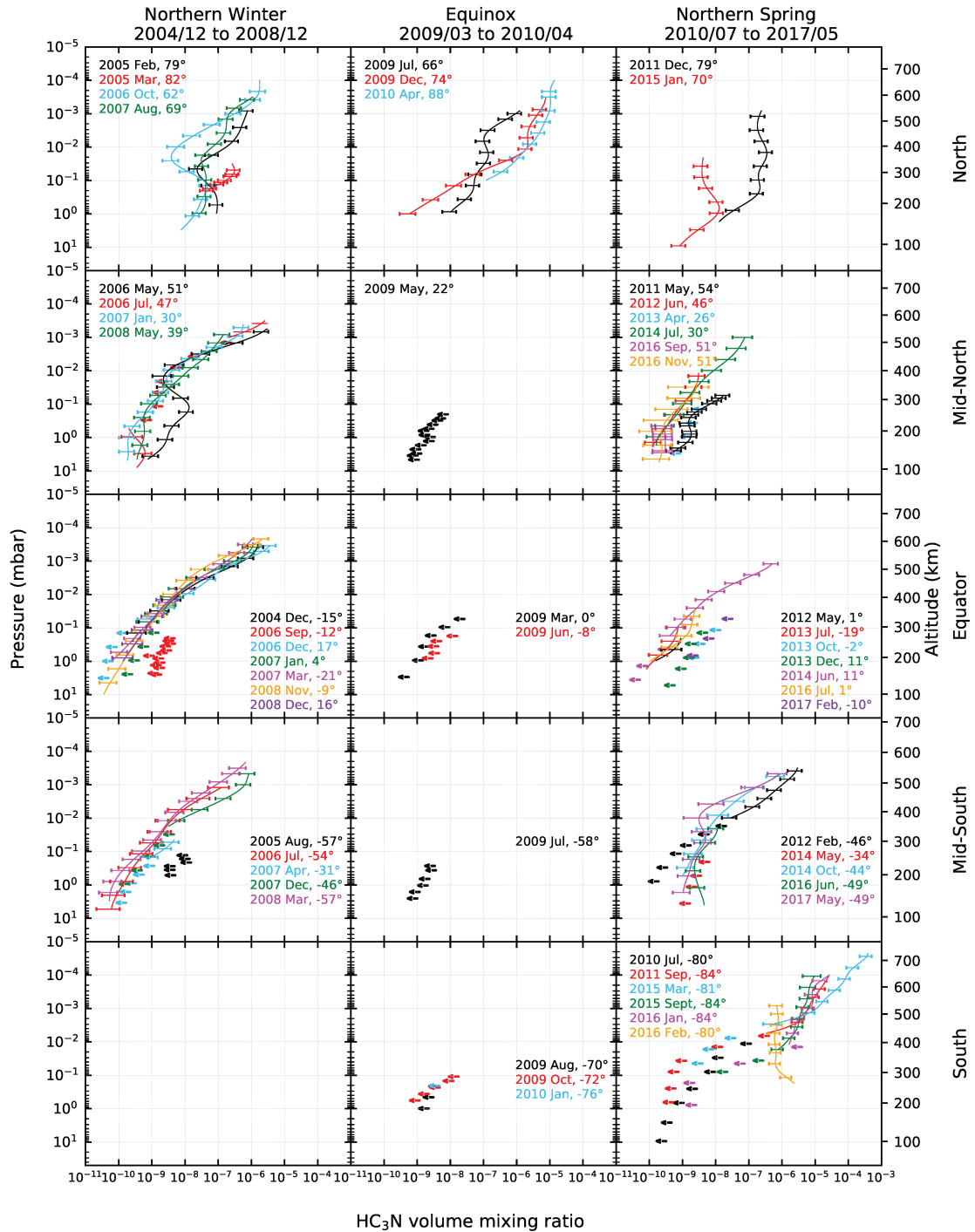


FIGURE 63 – Profils d'abondance de HC₃N, similaire à la figure 55.

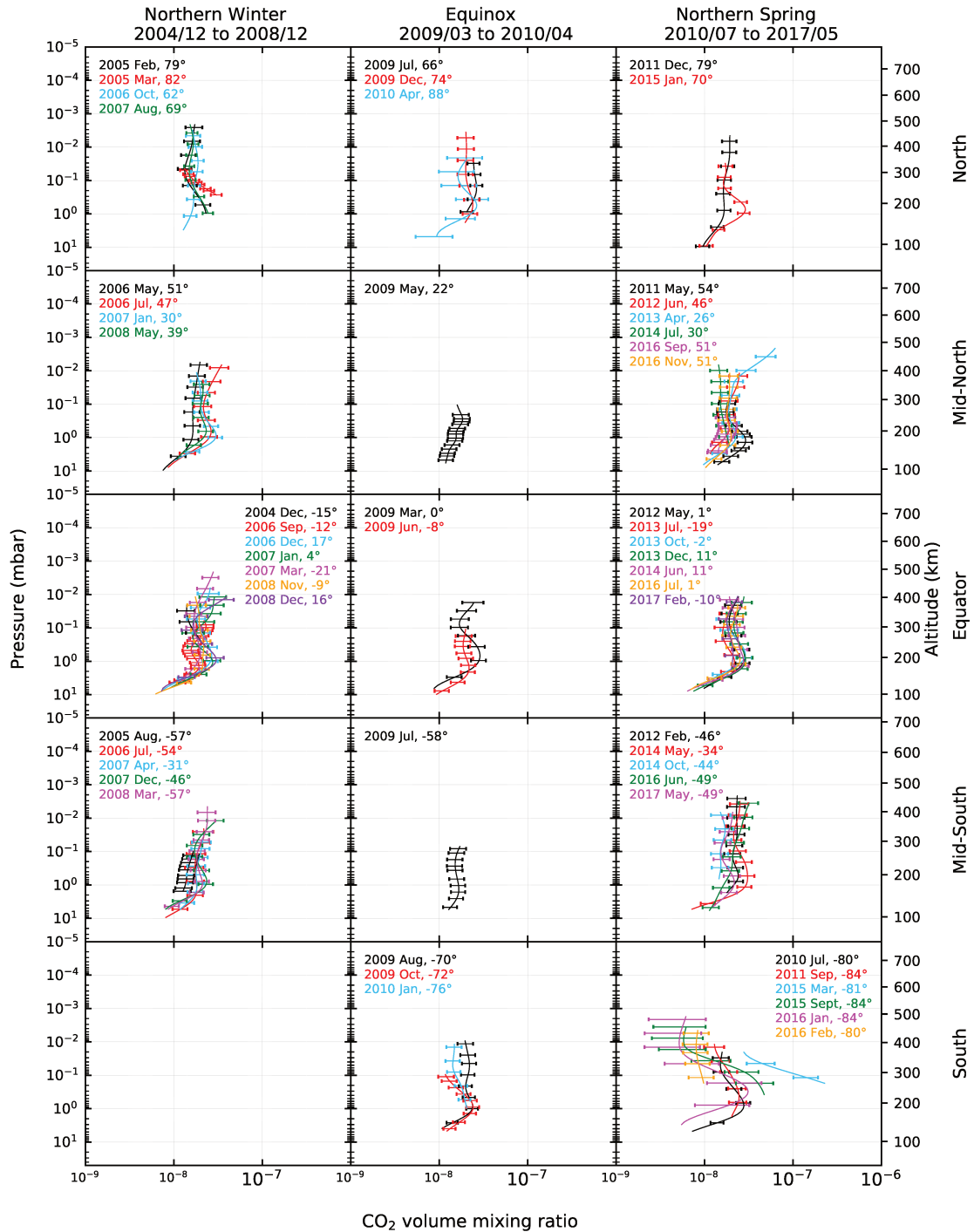


FIGURE 64 – Profils d'abondance de CO₂, similaire à la figure 55.

Analyse des moyennes et basses latitudes



Sommaire

7.1	Evolution des profils de température et d'abondance	101
7.2	Comparaison avec les modèles photochimiques	101

Dans ce chapitre, je discute des résultats des profils de température et d'abondance des composés photochimiques aux latitudes comprises entre 60°N et 60°S. Je compare mes profils d'abondances des composés photochimiques avec les modèles photochimiques de l'atmosphère de Titan.

7.1 Evolution des profils de température et d'abondance

J'ai montré que les profils de température et d'abondance des composés photochimiques ne variaient pas significativement au cours des saisons à moyenne et basse latitude entre 10 mbar (~90 km) et 0,01 mbar (~290 km), ce qui est en accord avec les précédentes études utilisant les données CIRS (Achterberg et al., 2008; Vinatier et al., 2015; Sylvestre et al., 2018). Les profils de température sont légèrement plus froids entre l'hiver nord et le printemps nord à cause de la diminution du flux solaire reçu dû à l'éloignement de Titan par rapport au Soleil. Cependant, les moyennes latitudes proches du vortex polaire d'hiver montrent de plus fortes variations de leur profils de température et d'abondance qui ne sont pas discutées dans ce chapitre mais aux chapitres suivants, relatifs aux variations dans les régions polaires.

7.2 Comparaison avec les modèles photochimiques

Dans cette section, la comparaison avec les modèles photochimiques ne sont valables qu'à moyennes et basses latitudes.

L'acétylène :

J'ai constaté que la fraction molaire de C₂H₂(acétylène) varie dans la mésosphère au-dessus de 10⁻² mbar (~400 km) sans aucune corrélation avec l'heure locale. Ces variations ne sont pas expliquées pour le moment.

Dans la région 10-0,01 mbar, les profils d'abondance de C₂H₂ montrent un maximum local de rapport de mélange à ~0,2 mbar (~265 km) que les modèles photochimiques ne prévoient pas (Krasnopolsky, 2014; Loison et al., 2015; Dobrijevic et al., 2016; Vuitton et al., 2019). Au

maximum local, le rapport de mélange volumique de C_2H_2 observé de $\sim 4 \times 10^{-6}$ est conforme à un facteur 2 près avec les prédictions des modèles photochimiques. A haute altitude vers 5×10^{-4} mbar (~ 500 km), le rapport de mélange de C_2H_2 obtenu en novembre 2008 est similaire au rapport de mélange de C_2H_2 obtenu par des mesures d'occultations stellaires de Cassini/UVIS à 550 km en février 2008 à $6^\circ S$ (Koskinen et al., 2011).

L'acide cyanhydrique :

Les profils d'abondance de HCN présentent un maximum local de rapport de mélange vers 0,3 mbar (~ 245 km) et un minimum local autour de 0,01 mbar (~ 410 km), ces extrema ne sont pas reproduits par les modèles photochimiques (Loison et al., 2015; Krasnopolsky, 2014; Dobrijevic et al., 2016; Vuitton et al., 2019). Toutefois, la valeur du rapport de mélange à 0,3 mbar, de $\sim 10^{-6}$, correspond aux prédictions de ces modèles photochimiques. Je remarque que le coefficient de diffusion turbulente (K_0) joue un rôle important dans la prédiction du profil d'abondance de HCN de Vuitton et al. (2019). Le modèle nominal de cette étude utilise un coefficient de diffusion turbulente minimal égal à $K_0 = 300 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$, et prédit un profil d'abondance de HCN en désaccord avec les profils obtenus. Par contre, le modèle avec un coefficient de diffusion turbulente plus faible, $K_0 \sim 100 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$, prédit un profil d'abondance de HCN en accord avec les profils obtenus. A haute altitude vers 500 km, le rapport de mélange de HCN en novembre 2008 de $\sim 7 \times 10^{-6}$ est en accord avec le rapport de mélange obtenu par UVIS à 550 km en février 2008 à $6^\circ S$ (Koskinen et al., 2011).

L'éthylène :

Les rapports de mélange de C_2H_4 observés autour de 0,1 mbar (~ 290 km) sont cohérents avec les prédictions des modèles photochimiques de Krasnopolsky (2014); Loison et al. (2015); Dobrijevic et al. (2016), mais 5 fois plus faibles que dans le modèle photochimique de Vuitton et al. (2019). De 5 à 0,1 mbar, le gradient vertical négatif que j'ai obtenu sur les profils d'abondance est en contradiction avec ces modèles photochimiques. Selon Crespin et al. (2008), il s'explique par le fait que C_2H_4 ne condense pas aux conditions de température et de pression de Titan et que l'air enrichi en C_2H_4 est transporté par advection du pôle hiver vers l'équateur dans la basse stratosphère.

Le propane :

Pour C_3H_8 , les profils d'abondance déduits vers l'équateur sont en accord avec les prédictions des modèles photochimiques de Krasnopolsky (2014); Loison et al. (2015); Dobrijevic et al. (2016); Vuitton et al. (2019) entre 10 mbar (~ 90 km) et 0,01 mbar (~ 410 km).

Le méthylacétylène :

Les profils d'abondance de C_3H_4 sont relativement constants avec l'altitude entre 3 mbar (~ 140 km) et 0,1 mbar (~ 300 km), ce qui est conforme aux modèles photochimiques de Vuitton et al. (2019) et Krasnopolsky (2014), alors que les modèles photochimiques de Loison et al. (2015) et Dobrijevic et al. (2016) prédisent que l'abondance du C_3H_4 diminue avec l'altitude. A 0,02 mbar, les rapports de mélange de C_3H_4 entre janvier 2007 et 2012 sont cohérents avec les quatre modèles photochimiques. En juin 2014, au-dessus de 0,01 mbar (~ 410 km), les profils montrent un gradient d'abondance positif comme prédit par le modèle photochimique de Vuitton et al.

(2019), alors que ce changement de pente est observé à 600 km dans les modèles de Loison et al. (2015) et Dobrijevic et al. (2016) et à 300 km dans le modèle de Krasnopolsky (2014).

Le diacétylène :

Les profils d'abondance de C_4H_2 pendant l'hiver nord sont en accord entre 0,8 mbar (~200 km) et 0,01 mbar (~410 km) avec les prédictions du modèle photochimique de Dobrijevic et al. (2016) et avec celui de Vuitton et al. (2019) sans réaction de perte d'hydrogène hétérogène. Krasnopolsky (2014) prédit un profil d'abondance de C_4H_2 avec un fort gradient positif dans cette gamme d'altitude qui n'est pas accord avec les profils d'abondance observés. Dobrijevic et al. (2016) et Vuitton et al. (2019) prédisent un minimum local de rapport de mélange autour de 500 km qui n'est pas observé sur les profils d'abondance de C_4H_2 quelque soit la saison. Par contre, ces modèles photochimiques prédisent un gradient d'abondance positif au-dessus de 500 km, alors que les profils d'abondance le montrent au-dessus de 0,01 mbar (~410 km) pendant l'hiver nord. À plus haute altitude vers 5×10^{-4} mbar (560 km), les rapports de mélange de C_4H_2 observés de $\sim 7 \times 10^{-7}$ pendant l'hiver nord sont cohérents avec la valeur obtenue par UVIS de 5×10^{-7} à environ 500 km en février 2008 à 6°S (Koskinen et al., 2011). Au printemps nord, les profils d'abondance de C_4H_2 montrent un gradient d'abondance positif entre 10 mbar (~90 km) et 10^{-3} mbar (~530 km) qui n'est pas aussi fort que le gradient du modèle photochimique de Krasnopolsky (2014), et qui n'est pas prévu par les modèles photochimiques de Dobrijevic et al. (2016) et Vuitton et al. (2019).

Le cyanoacétylène :

Les profils d'abondance de HC_3N ont pu être contraints à des altitudes jusqu'à 590 km ($2-3 \times 10^{-4}$ mbar) pendant l'hiver nord, ce qui est supérieur à ce qui avait été obtenu dans une étude précédente dans la région équatoriale (Vinatier et al., 2015). La détection actuelle à haute altitude de l'émission de HC_3N est le résultat de l'amélioration du rapport signal/bruit dans les spectres au limbe grâce à la nouvelle calibration et à la procédure décrite en section 4.3. Les profils d'abondance de HC_3N atteignent un rapport de mélange d'environ 2×10^{-6} à $\sim 3 \times 10^{-4}$ mbar (~580 km), ce qui est en accord avec la valeur de $\sim 10^{-6}$ obtenue par UVIS à 550 km en février 2008 à 6°S (Koskinen et al., 2011). À haute altitude vers 3×10^{-4} mbar, les valeurs de rapport de mélange de HC_3N sont ~14 fois plus élevées que la valeur prédite par le modèle photochimique de Vuitton et al. (2019) lorsqu'ils utilisent la profondeur optique des aérosols de Lavvas et al. (2010) multipliée par un facteur deux. Le composé photochimique HC_3N est très sensible à la photodissociation par les photons UV, donc plus l'opacité des aérosols est élevée, plus l'efficacité de photodissociation de HC_3N est faible en raison de la protection UV induite par les aérosols. Dans les modèles photochimiques de Loison et al. (2015) et Dobrijevic et al. (2016), qui incluent un profil de profondeur optique d'aérosol différent, les rapports de mélange de HC_3N sont ~300 fois inférieurs à notre valeur à 3×10^{-4} mbar. En revanche, les rapports de mélange de HC_3N sont 30 fois plus faibles que dans le modèle photochimique de Krasnopolsky (2014), dans lequel le profil de profondeur optique des aérosols est calculé à partir des observations de Huygens. De plus, les modèles photochimiques (Krasnopolsky, 2014; Loison et al., 2015; Dobrijevic et al., 2016; Vuitton et al., 2019) prédisent un minimum local de rapport de mélange vers 500 km qui n'est pas observé sur nos profils d'abondance.

Le dioxyde de carbone :

Les profils d'abondance de CO_2 sont cohérents avec le modèle photochimique de Krasnopolsky

(2012), mais ils sont plus abondants d'un ordre de grandeur que les profils d'abondance prédits par les modèles photochimiques de Loison et al. (2015) et Vuitton et al. (2019). Cependant, la chimie appliquée au modèle de Krasnopolsky (2012) est fautive selon Vuitton et al. (2019) (p.178), et le désaccord entre ces différents modèles photochimiques suggère qu'il existe une source variable d'oxygène (Vuitton et al., 2019). Par contre, le maximum local de rapport de mélange vers 1 mbar (~190 km) et le minimum local vers 0,1 mbar (~300 km) ne sont pas prédits par les modèles photochimiques (Krasnopolsky, 2012; Loison et al., 2015; Vuitton et al., 2019). Ce maximum local est également observé au pôle sud et semble stable avec la saison.

L'éthane :

Les profils d'abondance de C_2H_6 sont tout à fait cohérents avec le modèle photochimique de Vuitton et al. (2019) lorsqu'ils utilisent une valeur minimale du coefficient de diffusion turbulent minimal légèrement inférieur à la valeur nominale de $300 \text{ cm}^2\text{s}^{-1}$, ou lorsque le profil de profondeur optique des aérosols provenant de Lavvas et al. (2010) est réduit d'un facteur 2. Comme pour le HC_3N , la protection UV des aérosols limite l'efficacité de la photodissociation. Dans le modèle de Vuitton et al. (2019), le profil d'abondance de C_2H_6 est très sensible à la profondeur optique des aérosols, puisque pour une profondeur optique nominale, C_2H_2 est moins photodissocié, ce qui conduit à moins de radicaux C_2H et CH_3 , précurseurs de C_2H_6 . Les profils d'abondance de C_2H_6 prédits par les modèles photochimiques de Loison et al. (2015) et Dobrijevic et al. (2016) correspondent à un profil de profondeur optique des aérosols et un taux de recombinaison de CH_3 différents de ceux de Vuitton et al. (2019), et sont compatibles avec les profils de C_2H_6 observés. Le modèle photochimique de Krasnopolsky (2014) prédit un profil de C_2H_6 moitié moins abondant entre 100 et 250 km que les profils observés. De plus au-dessus de 250 km, le profil théorique de C_2H_6 prédit un fort gradient vertical qui n'est pas observé sur les profils observés. Ce modèle photochimique utilise un profil de profondeur optique des aérosols basé sur les observations de Huygens et un taux de recombinaison de CH_3 encore différent, ce qui pourrait expliquer ce désaccord.

Le benzène :

A basse latitude, nous déduisons principalement des limites supérieures à $2\text{-}\sigma$ de rapport de mélange entre 20 mbar (~80 km) et 0,01 mbar (~410 km). Selon les modèles photochimiques, le faible rapport de mélange de C_6H_6 en-dessous de 300 km résulte d'une photodissociation efficace des radicaux phényle. À 10 mbar (~100 km), les limites supérieures ne dépassent pas quelques 10^{-10} , en accord avec les modèles photochimiques de Vuitton et al. (2019) et Krasnopolsky (2014) qui prédisent un rapport de mélange ne dépassant pas 10^{-10} ou quelques 10^{-9} à cette altitude.

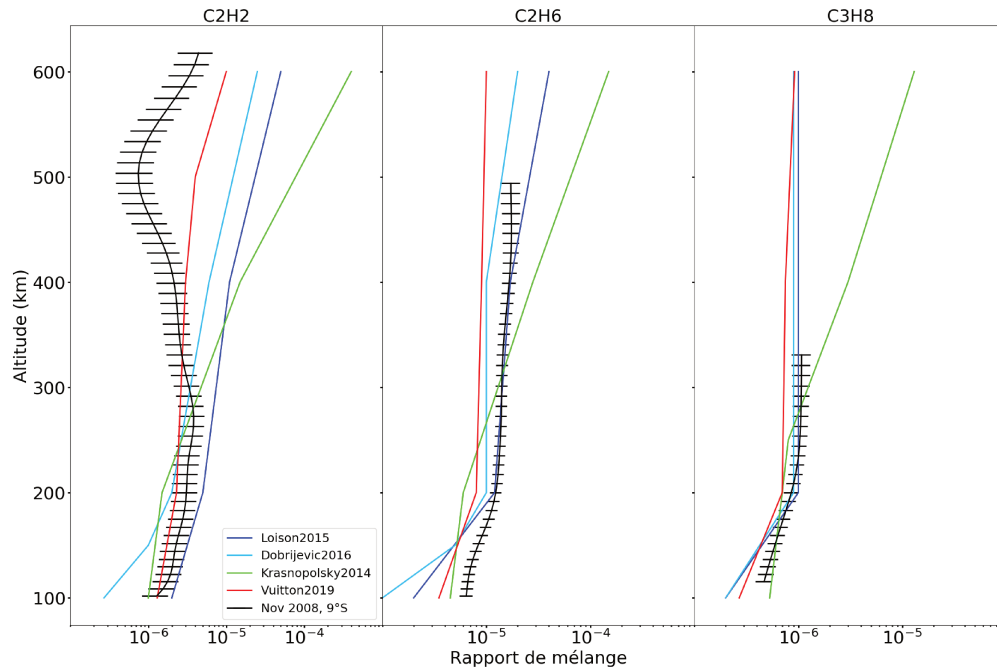


FIGURE 65 – Comparaison des profils (en noir) de C_2H_2 , C_2H_6 et C_3H_8 équatoriaux, lors du flyby T47, aux modèles photochimiques de : Loison et al. (2015) (bleu), Dobrijevic et al. (2016) (cyan), Krasnopolsky (2014) (vert) et Vuitton et al. (2019) (rouge).

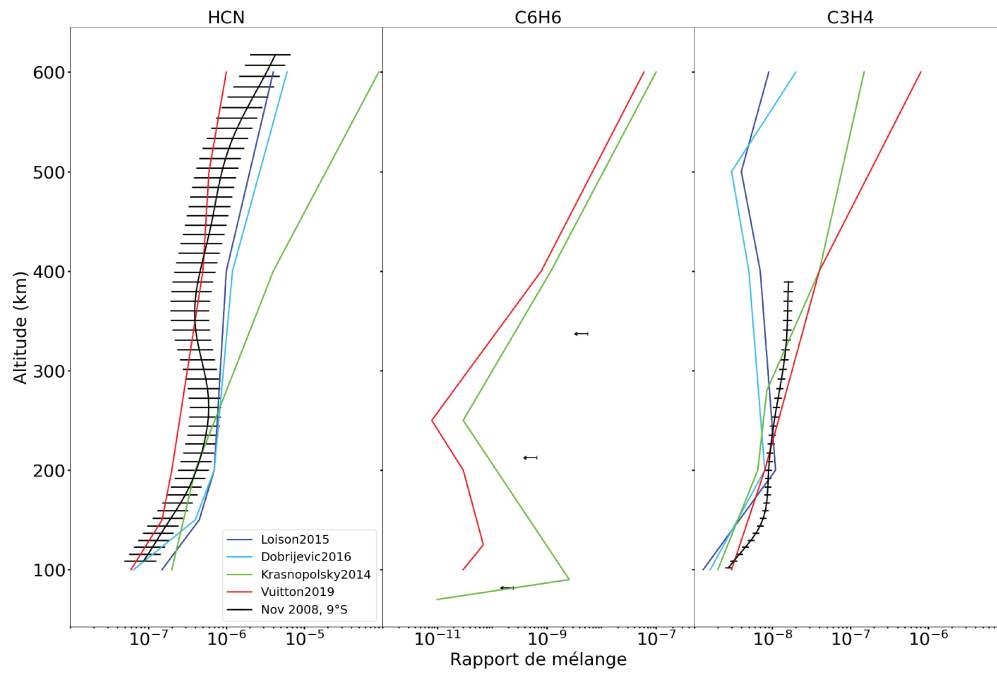


FIGURE 66 – Similaire à la figure 65, comparaison pour les profils de HCN, C_6H_6 et C_3H_4 .

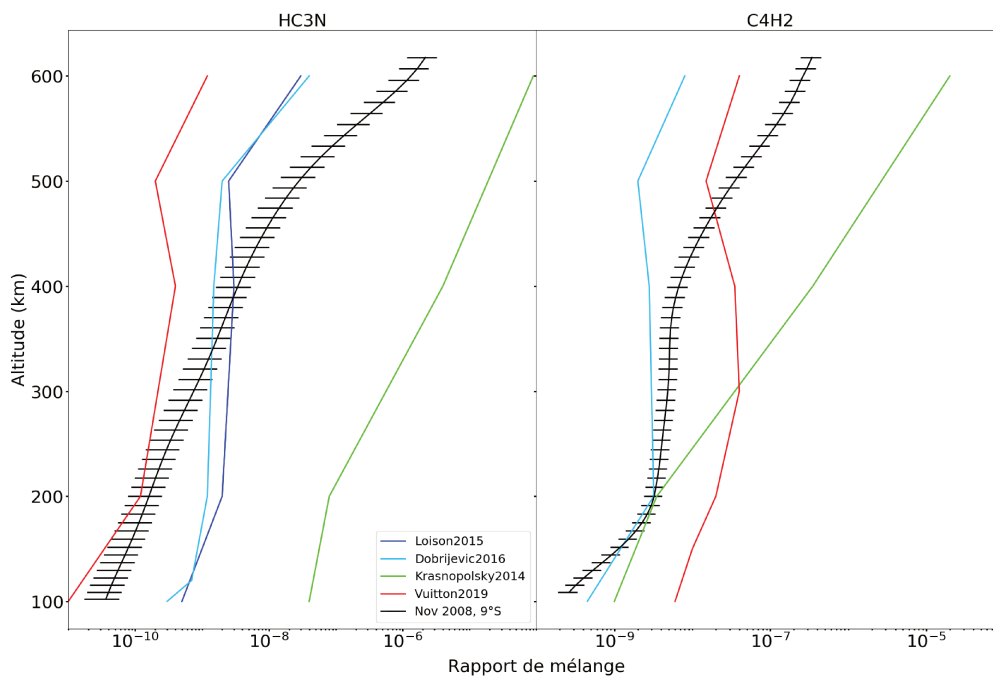


FIGURE 67 – Similaire à la figure 65, comparaison pour les profils de HC_3N et C_4H_2 .

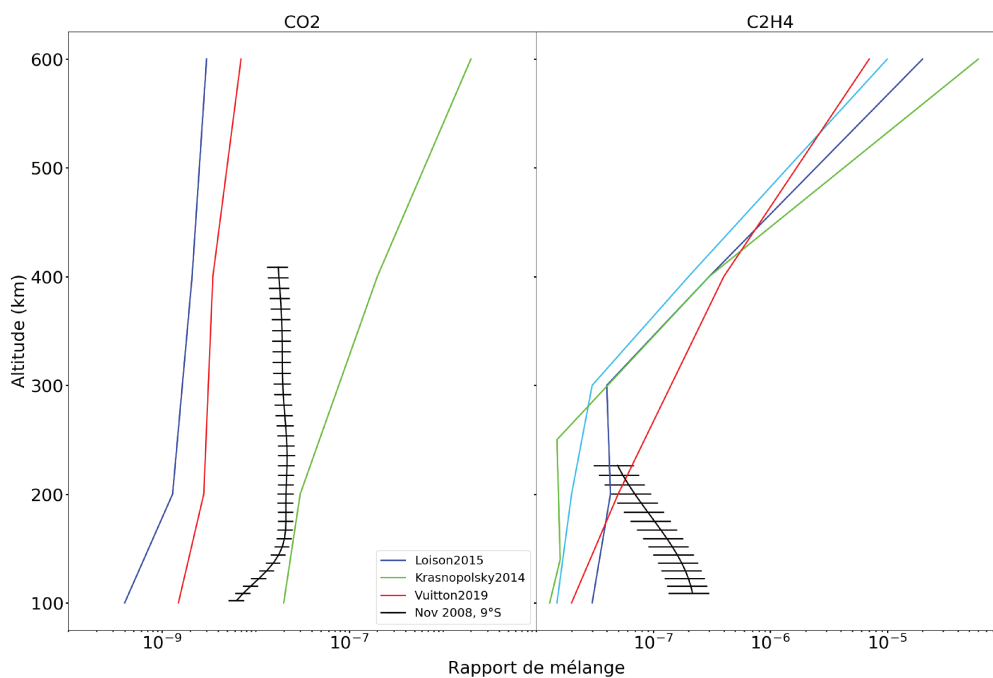


FIGURE 68 – Similaire à la figure 65, comparaison pour les profils de CO_2 et C_2H_4 .

Analyse du pôle Nord

Sommaire

8.1	Hiver nord	107
8.2	Autour de l'équinoxe de printemps nord	108
8.3	Printemps nord	108
8.4	Observation possible d'une onde d'inertie-gravité	109

Ce chapitre se concentre sur les variations saisonnières dans la région polaire nord durant la mission Cassini entre le milieu de l'hiver nord et la fin du printemps nord, en comparant les résultats obtenus avec les différents GCM de Titan existants. Puis, je discuterai la possible détection d'une onde d'inertie-gravité le 28 décembre 2009 à 75°N dans la stratosphère.

8.1 Hiver nord

En février 2005, le profil de température dans la région polaire nord est plus chaud entre 0,3 mbar (~230 km) et 3×10^{-3} mbar (~480 km) que le profil de température autour de l'équateur en décembre 2004, qui est conforme aux analyses précédentes des observations CIRS (Vinatier et al., 2015; Achterberg et al., 2011) et des prédictions des GCM (Newman et al., 2011; Lebonnois et al., 2012; Lora et al., 2015). Sous 3×10^{-3} mbar (~480 km), j'ai également observé un enrichissement de tous les composés photochimiques, sauf le CO₂, par rapport à leur abondance vers l'équateur, ce qui est en accord avec les résultats de Vinatier et al. (2015), Teanby et al. (2019) et Sylvestre et al. (2018). Cet enrichissement diffère considérablement d'un composé à l'autre. Dans la stratosphère sous la région de 0,1 mbar, l'enrichissement est plus marqué pour HC₃N, C₆H₆, C₄H₂, C₃H₄ et HCN, un peu plus faible pour C₂H₂, et faible pour C₂H₆ et C₃H₈. D'après les prédictions des GCM, la branche d'air descendante de la cellule de circulation pôle-à-pôle transporte de l'air enrichi en composés photochimiques provenant de la haute atmosphère et chauffe adiabatiquement la mésosphère, ce qui induit des températures plus élevées localement autour de 0,01 mbar (~410 km), au lieu des 0,1 mbar (~275 km) où se situe la stratopause dans la région équatoriale. En dessous de 0,3 mbar (~230 km), le profil de température dans la région polaire nord est plus froid qu'à l'équateur (de ~20 K à 1 mbar, ~175 km), en accord avec les résultats de Vinatier et al. (2015), Achterberg et al. (2011) et Teanby et al. (2019). Ces faibles températures sont probablement dûes à l'absence de flux solaire dans la basse stratosphère, car la nuit polaire se situe en-dessous de 300 km vers 82°N en février 2005.

Entre février 2005 et août 2007, j'ai observé une baisse de la température de la stratopause dans la région polaire nord de ~7 K à 0,01 mbar (~410 km), conforme aux observations précédentes de CIRS (Vinatier et al., 2015; Achterberg et al., 2011). Ce refroidissement pourrait être dû à l'affaiblissement de la branche descendante de la cellule de circulation pôle-à-pôle à la fin de

l'hiver. Cette hypothèse est appuyée par le changement de structure verticale de la vitesse des vents zonaux autour de la région polaire nord déduite par Achterberg et al. (2011) entre 2005 et 2009 (voir fig14), et prédit par les GCM (Newman et al., 2011; Lebonnois et al., 2012; Lora et al., 2015). Les profils de température dans la basse stratosphère sous 0,3 mbar (~230 km) n'ont pas varié entre 2005 et 2007.

8.2 Autour de l'équinoxe de printemps nord

D'août 2007 ($L_s=335^\circ$) à juillet 2009 ($L_s=359^\circ$), la température de la stratopause a diminué de ~21 K à 0,01 mbar (~375 km), ce qui est en accord avec les précédentes études de CIRS (Vinatier et al., 2015; Achterberg et al., 2011). Ces températures vers 0,01 mbar ne sont pas reproduites par le GCM de Newman et al. (2011) qui prédit des températures plus élevées (supérieures à 210 K) entre 0,1 et 0,01 mbar à $L_s=0^\circ$. Ce refroidissement pourrait s'expliquer par la faiblesse du réchauffement adiabatique associé au mouvement descendant de la cellule atmosphérique en raison de la coexistence des deux cellules de circulation équateur-pôle qui sont prédites plus faibles et qui devraient se produire autour de l'équinoxe de printemps nord (Newman et al., 2011; Lebonnois et al., 2012; Lora et al., 2015). La basse stratosphère se refroidit encore comparée à l'équateur en raison du flux solaire plus faible à basse altitude. En décembre 2009, j'ai observé une oscillation sur le profil thermique que je traite plus en détail dans la section 8.4. En avril 2010, le profil de température déduit montre des températures entre 1 mbar (~160 km) et 0,01 mbar (~360 km) plus faibles qu'en juillet 2009, mais cette différence est probablement due à leur différence en latitude : 89 et 67°, respectivement.

En ce qui concerne les profils d'abondance autour de l'équinoxe de printemps nord, j'ai observé un fort enrichissement en composés photochimiques au-dessus de 0,1 mbar (~250 km) comparés au milieu de l'hiver (figure 69). Cet enrichissement dans la mésosphère pourrait être dû à l'effet combiné de la réactivation de la photochimie dans la région polaire nord causée par l'augmentation du flux solaire à des altitudes supérieures à 500 km (Lebonnois et al., 2001), et du transport de cet air enrichi vers des altitudes plus profondes par la branche descendante de la cellule de circulation équateur-à-pôle.

8.3 Printemps nord

D'avril 2010 à décembre 2011, j'ai observé un refroidissement au-dessus de $\sim 10^{-2}$ mbar (~450 km) et un léger réchauffement sous ce niveau, en accord avec les études de CIRS par Vinatier et al. (2015) et Teanby et al. (2019). De plus, les profils d'abondance de décembre 2011 montrent un appauvrissement de tous les composés photochimiques au-dessus de 0,1 mbar (~260 km) par rapport à avril 2010, aussi observés par Vinatier et al. (2015). Ce refroidissement et cet appauvrissement dans la mésosphère pourraient s'expliquer par la présence d'une cellule de circulation pôle-à-pôle au début du printemps nord, dans laquelle la branche ascendante se produit dans la région polaire nord, comme le prédisent les GCM (Newman et al., 2011; Lebonnois et al., 2012; Lora et al., 2015). En revanche, la basse stratosphère s'est réchauffée probablement en raison de l'augmentation du flux solaire dans la région polaire nord.

Plus tard en janvier 2015, le profil de température s'est réchauffé entre 10 mbar (~100 km)

et 0,03 mbar (~ 340 km), avec une augmentation de ~ 9 K à 1 mbar (~ 175 km) et ~ 20 K à 0,1 mbar (~ 280 km), en accord avec Coustenis et al. (2016) et les prédictions du GCM de Newman et al. (2011). Ce réchauffement pourrait s'expliquer par l'augmentation du flux solaire qui atteint la région polaire nord. Au-dessus de 0,03 mbar, la température dans la mésosphère n'a pas varié entre décembre 2011 et janvier 2015. Par contre, les profils d'abondance des composés photochimiques au-dessus de 0,1 mbar (~ 280 km), sauf C_2H_6 et C_3H_8 , se sont appauvris pendant cette période, ce qui est cohérent avec la présence d'une branche d'air ascendante de la cellule de circulation pôle-à-pôle. En fait, Vinatier et al. (en préparation) montrent que l'air appauvri est observé jusqu'aux moyennes latitudes nord.

Un autre point à souligner est l'enrichissement en composés photochimiques observé entre 1 mbar (~ 175 km) et 0,1 mbar (~ 280 km) pendant la période de décembre 2011 à janvier 2015. Cette persistance de l'enrichissement pourrait s'expliquer par la présence d'un reliquat de la cellule de circulation pôle-à-pôle d'hiver qui se serait confinée dans la stratosphère aux hautes latitudes nord, comme le prédit le GCM de Lebonnois et al. (2012) (figure 70).

8.4 Observation possible d'une onde d'inertie-gravité

Lors du flyby T64 le 28 décembre 2009, le profil thermique inversé présente une oscillation marquée entre 5×10^{-2} mbar (~ 300 km) et 10^{-3} (~ 500 km) mbar dont l'amplitude est de 3-4 K (figure 71). Cette oscillation n'est pas observée sur les autres profils de température entre 2004 et 2017, sauf peut-être sur le profil de température à 44°S en février 2012. J'ai donc poussé l'analyse de données en recherchant d'autres données proches en date et en latitude afin de comprendre si cette oscillation persistait avec le temps. Pour cela, j'ai tout d'abord ré-analysé le jeu de données des spectres au limbe du flyby T64 avec $0,5 \text{ cm}^{-1}$ de résolution spectrale (heure locale : 12h00, longitude : 255°O), que j'ai séparé en deux sous-ensembles afin d'avoir un espacement temporel d'environ 6000 secondes, pour rechercher un possible décalage vertical de l'oscillation.

J'ai d'autre part trouvé un jeu de données de spectres au limbe enregistrés avec une résolution spectrale de $15,5 \text{ cm}^{-1}$ le 11 décembre 2009 (heure locale : 21 h, longitude : 106°O) à 73°N et 78°N, afin de vérifier si l'oscillation était également présente à une date antérieure. A partir de ces différents ensembles de données, j'ai déduit les profils de température en utilisant la même méthodologie et le même profil *a priori* pour chaque cas. Sur la figure 71, je montre les profils de température déduits pour les différents jeux de données : ceux avec une résolution spectrale de $0,5 \text{ cm}^{-1}$ (bleu et cyan) et ceux avec une résolution spectrale de $15,5 \text{ cm}^{-1}$ à 73°N et 78°N (orange et rouge respectivement). Je conclus que l'oscillation a persisté pendant au moins 6 000 secondes le 28 décembre 2009, alors qu'un jour titalien avant, l'atmosphère ne présentait pas une telle oscillation à une latitude voisine.

Supposons que cette oscillation soit le résultat de la propagation d'une onde atmosphérique. A partir de la figure 71, j'estime que les extrema de température se sont déplacés de $\sim -10 \pm 20$ km en 6 000 secondes (je suis confiant sur la barre d'erreur, qui correspond à la moitié de la distance verticale entre deux spectres au limbe), donnant une vitesse de phase c_z comprise entre -5 et $+1,7 \text{ m.s}^{-1}$. Je peux aussi mesurer une longueur d'onde verticale $L_z \sim 170$ km entre 5×10^{-2} mbar (~ 310 km) et 10^{-3} mbar (~ 480 km).

J'ai déterminé le type d'onde qui vérifie les caractéristiques ci-dessus et remplit les critères

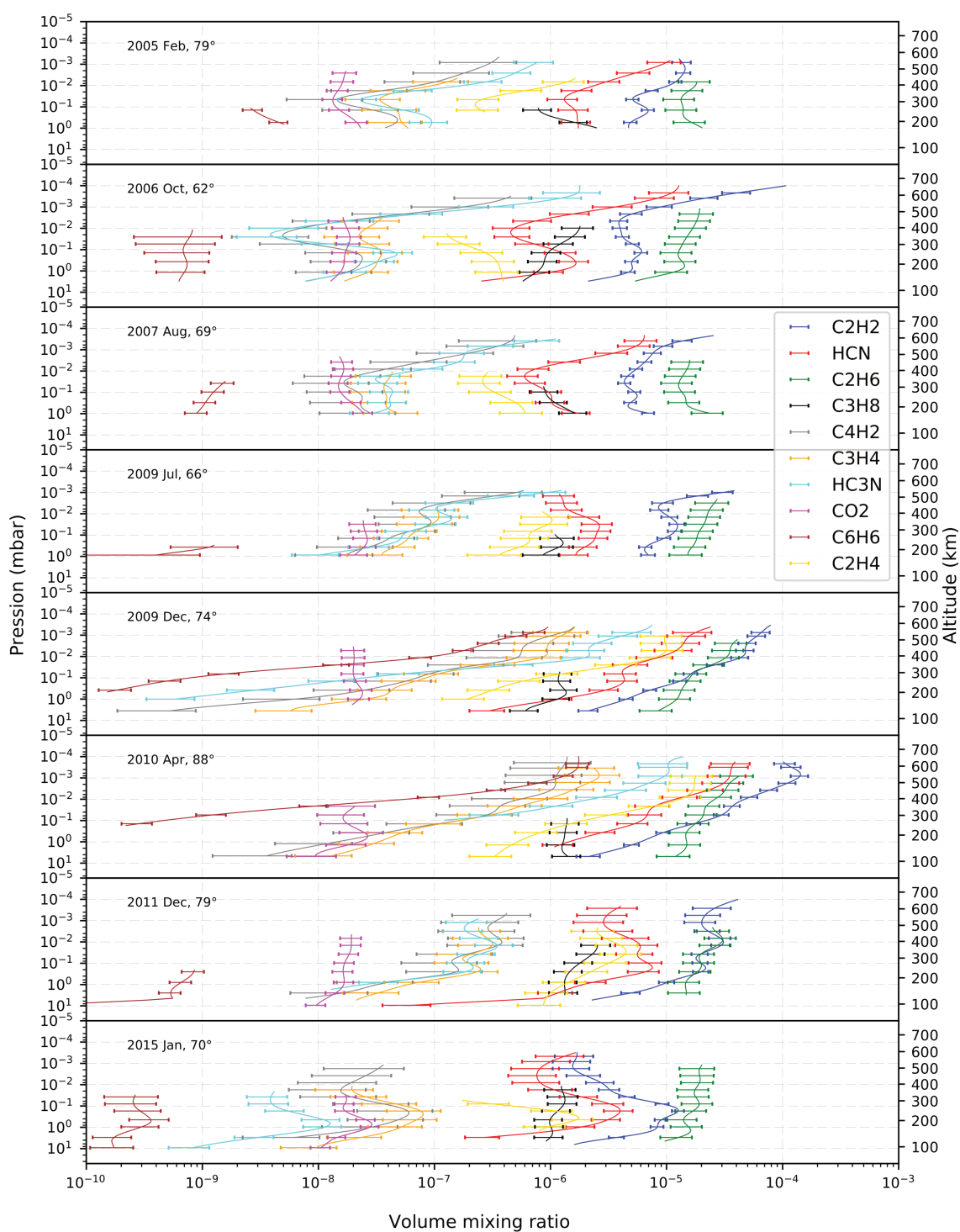


FIGURE 69 – Evolution temporelle des profils d'abondance des composés photochimiques présents dans la région polaire nord pendant la mission Cassini.

requis parmi six différents types d'ondes possibles dans un régime cyclostrophique selon les travaux de Peralta et al. (2014a) et Peralta et al. (2014b). J'ai constaté qu'une onde d'inertie-

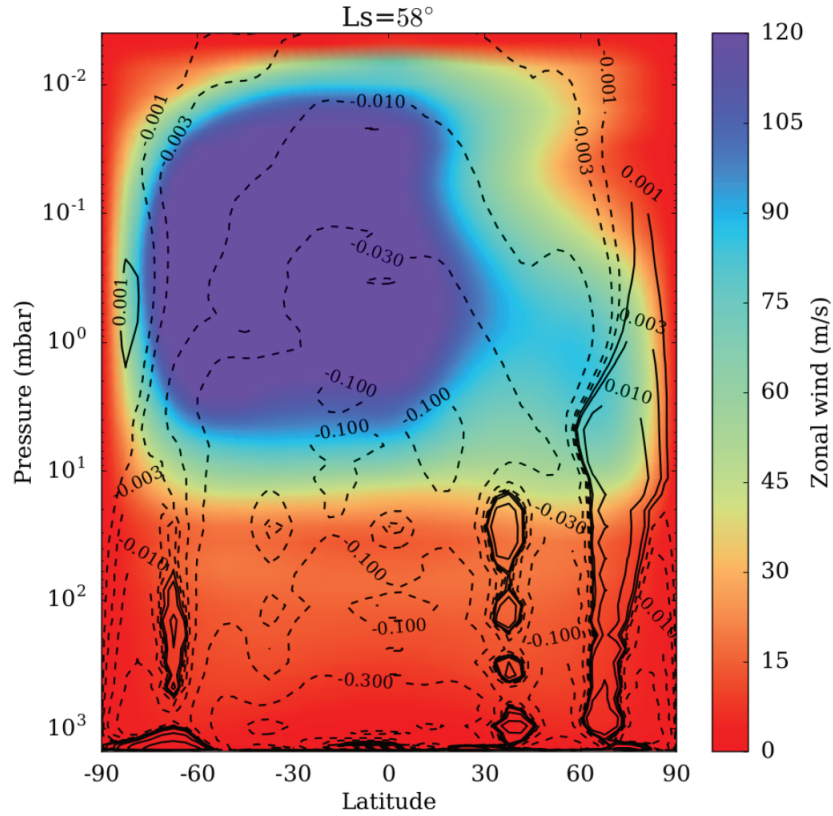


FIGURE 70 – Simulation numérique de la fonction de courant dans le GCM de Lebonnois et al. (2012) : les traits pleins correspondent au sens horaire, les tirets au sens anti-horaire. Le code de couleur fait référence au vent zonal.

gravité est pertinente pour notre cas. La relation générale de dispersion est donnée par :

$$\omega = \pm \sqrt{\frac{N_B^2 k_x^2 + \xi^2 \left(m^2 + \frac{1}{4H_0^2} \right)}{k_x^2 + m^2 + \frac{1}{4H_0^2}}} + k_x u_0 \quad (63)$$

où N_B est la fréquence de Brunt-Väisälä ($\sim 2,4 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ à 400 km), k_x est le nombre d'onde horizontal, m est le nombre d'onde vertical, H_0 est l'échelle de hauteur ($\sim 50 \text{ km}$ à 400 km d'altitude), u_0 est la vitesse du vent zonal ($65 \pm 15 \text{ m s}^{-1}$ à 74°N et 400 km, déduit par les résultats de Achterberg et al. (2011) en 2009), et ξ est une fréquence définie comme :

$$\xi^2 = 2\psi \left(\psi - \frac{1}{a+z} \frac{\partial u_0}{\partial \phi} \right) \quad (64)$$

où a est le rayon de Titan, z l'altitude (400 km), ϕ la latitude et ψ la fréquence centrifuge définie comme :

$$\psi = \frac{u_0}{a+z} \tan(\phi) \quad (65)$$

J'ai évalué le cisaillement méridien du vent zonal $\partial u_0/\partial\phi$ à partir de la carte de vent zonal de la figure 14 montrant une variation de $-40 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ entre 69°N et 76°N en 2009, et j'ai trouvé que $\xi \sim 1.7 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$.

Je trouve que pour tout nombre d'onde horizontal ($k_x = 2\pi n/L_x$, où L_x est le périmètre du cercle de latitude à 74°N à 400 km d'altitude, et n un entier positif), une des deux solutions de l'équation 63 donne une vitesse de phase verticale $c_z > 7 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, qui est exclue par l'observation (figure 71). Pour $n \leq 10$, l'autre solution donne c_z entre 1,3 et $-3 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, ce qui est en accord avec l'observation. J'ai remarqué que pour ces solutions, la vitesse de groupe verticale déduite à partir de l'équation 63 est positive étant donné que $\xi < N_B$, ce qui signifie que l'énergie se propage vers le haut. Leur vitesse de phase horizontale c_k varie entre -87 (pour $n = 1$) et $+4 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ (pour $n = 10$), ce qui est inférieur au vent zonal $u_0 = 65 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$. Pour $n \leq 6$, les ondes se déplacent vers l'ouest. La période de l'onde ($2\pi/\omega$) est d'au moins 17 heures.

Ces ondes d'inertie-gravité vérifient les critères de Peralta et al. (2014a) : (1) ξ^2 varie d'un facteur inférieur à 2 sur la gamme de latitudes considérée, (2) la vitesse de phase horizontale intrinsèque $|\overline{c_k}| = |c_k - u_0| = \frac{|w|}{k_x}$ est supérieure à $\lambda_z \times \partial u_0/\partial z$ ($\sim 50 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$) pour $n \leq 10$.

Cette oscillation pourrait donc s'expliquer par une onde d'inertie-gravité, mais le mécanisme nécessaire pour produire l'onde est inconnu. Comme l'énergie des ondes se propage vers le haut, elle pourrait être produite par convection dans la troposphère, peut-être en raison d'une certaine instabilité autour de l'équinoxe de printemps nord.

Si la structure oscillante des profils de température à 74°N n'est pas due à une onde, elle pourrait avoir une origine radiative, comme des couches d'aérosols localisées produisant un réchauffement accru ou une couche enrichie en composés photochimiques autour de 10^{-2} mbar ($\sim 300 \text{ km}$) qui renforcerait le refroidissement par rayonnement. Cependant, le profil d'opacité des aérosols déduit simultanément avec celui du profil de température ne présentait pas de variations significatives qui pourraient être liées à des couches détachées d'aérosols. De plus, les profils d'abondance des composés photochimiques déduits sont relativement uniformes vers 10^{-2} mbar ($\sim 300 \text{ km}$) où se situe le minimum local de température observé sur la figure 71. J'exclue donc une origine purement radiative pour expliquer l'oscillation observée sur le profil de température en décembre 2009 à 74°N .

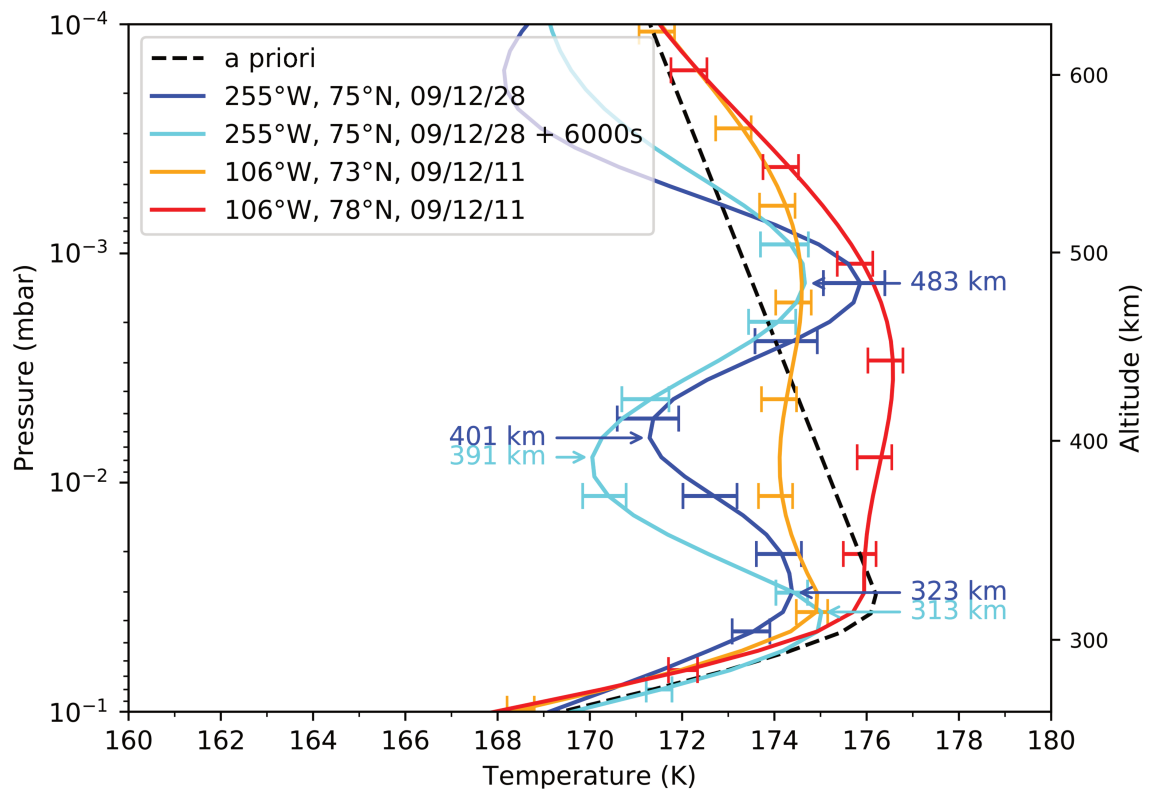


FIGURE 71 – Profils de température déduis à partir des spectres au limbe ayant une résolution spectrale de : $0,5 \text{ cm}^{-1}$ (bleu et cyan), de $15,5 \text{ cm}^{-1}$ (orange et rouge). Le profil cyan est espacé de 6 000 secondes par rapport au profil bleu. Le profil en tiret noir correspond au profil de température *a priori*.

Analyse du Pôle Sud

Sommaire

9.1	Autour de l'équinoxe d'automne sud	115
9.2	Automne sud	116

Ce chapitre se concentre sur les variations saisonnières dans la région polaire sud à partir d'août 2009 jusqu'en février 2016. Il n'y a pas eu de spectres au limbe avec une résolution spectrale de $0,5 \text{ cm}^{-1}$ acquis dans la région polaire sud pendant la période 2005-2009.

9.1 Autour de l'équinoxe d'automne sud

En août 2009, le profil de température dans la région polaire sud est similaire à celui vers l'équateur en mars 2009 entre 0,3 mbar ($\sim 240 \text{ km}$) et 0,02 mbar ($\sim 370 \text{ km}$), ce qui est en accord avec les précédentes observations de CIRS (Achterberg et al., 2011; Vinatier et al., 2015; Teanby et al., 2017). Cette similitude entre la région polaire sud et la région équatoriale n'est pas prédite par le GCM de Newman et al. (2011), qui prédit une température plus élevée (de $\sim 20 \text{ K}$) dans la région polaire sud à cette gamme d'altitude. En-dessous de 0,3 mbar ($\sim 240 \text{ km}$), le profil de température de la région polaire sud est environ 5 K plus froid que celui autour de l'équateur à 1 mbar ($\sim 185 \text{ km}$), ce qui est cohérent avec les résultats de Vinatier et al. (2015), Achterberg et al. (2011), et Teanby et al. (2019) et aux prédictions du GCM de Newman et al. (2011). Au-dessus de 0,02 mbar ($\sim 370 \text{ km}$), les températures mésosphériques sont plus élevées dans la région polaire sud qu'autour de l'équateur (de $\sim 10 \text{ K}$ à 2×10^{-3} mbar, 480 km). Cela pourrait résulter du réchauffement adiabatique causé par la branche descendante de la cellule de circulation équateur-à-pôle, comme observé dans la région polaire nord pendant l'hiver nord en 2005-2008. Cependant, la coexistence des deux cellules de circulation équateur-à-pôle rendrait la descente d'air moins intense, et par conséquent le terme de chauffage adiabatique, que lorsqu'une seule cellule atmosphérique globale est présente, selon les prédictions des GCM (Newman et al., 2011; Lebonnois et al., 2012; Lora et al., 2015).

En août 2009, les profils d'abondance de C_2H_2 et HCN dans la région polaire sud sont enrichis au-dessus de 0,001 mbar ($\sim 520 \text{ km}$) et 0,01 mbar ($\sim 400 \text{ km}$) par rapport à la région équatoriale, respectivement (figure 72). Ces enrichissements dans la mésosphère sont dûs au transport d'air enrichi en provenance des hautes altitudes par la branche descendante de la cellule de circulation équateur-pôle.

Plus tard en juillet 2010, la température dans la région polaire sud au-dessus de 0,03 mbar ($\sim 455 \text{ km}$) augmente de $\sim 10 \text{ K}$ et diminue entre 10 mbar ($\sim 95 \text{ km}$) et 0,03 mbar, avec une baisse de $\sim 8 \text{ K}$ à 0,2 mbar ($\sim 255 \text{ km}$). Alors que la mésosphère était probablement chauffée par la

compression adiabatique causée par la branche descendante de la cellule de circulation équateur-à-pôle, la stratosphère s'est très probablement refroidie en raison de la diminution du flux solaire.

9.2 Automne sud

En septembre 2011, la température dans la région polaire sud a augmenté dans la mésosphère entre 0,08 mbar (~ 280 km) et 4×10^{-3} mbar (~ 420 km) (de ~ 7 K à 0,01 mbar, 380 km), alors qu'en-dessous de 0,08 mbar, l'atmosphère s'est fortement refroidie, de ~ 16 K à 1 mbar (175 km), en accord avec les précédentes observations de CIRS (Vinatier et al., 2015; Coustenis et al., 2016; Teanby et al., 2017). Cette diminution de température est plus faible que les prédictions du GCM de Newman et al. (2011), qui prédit des températures plus basses d'environ 20-30 K par rapport à ce que j'observe. À cette date, tous les profils d'abondance des composés photochimiques montrent des enrichissements mésosphériques (figures 69 et 72) comparés aux profils d'abondance en juillet 2010, ce qui est en accord avec les résultats de Vinatier et al. (2015) et Teanby et al. (2017). De plus, C_6H_6 et HC_3N apparaissent dans l'atmosphère dans la région polaire sud pour la première fois en septembre 2011, depuis le début de la mission Cassini. Cela suggère, qu'à cette date, que la cellule de circulation pôle-à-pôle est bien établie dans la moyenne atmosphère, puisque la mésosphère de la région polaire sud est enrichie en composés photochimiques et les températures y sont plus élevées, ce qui est en accord avec Teanby et al. (2017).

Entre septembre 2011 et mars 2015, l'atmosphère dans la région polaire sud s'est fortement refroidie entre 0,3 mbar (~ 210 km) et 4×10^{-4} mbar (~ 500 km), avec une diminution de température d'environ 26 K à 0,01 mbar (~ 350 km). Ce fort refroidissement dans la moyenne atmosphère est cohérent avec les résultats de Coustenis et al. (2018) qui ont déduit une diminution constante de température entre juin 2012 et septembre 2014 dans la gamme de pression 0,01-20 mbar, et avec les résultats de Teanby et al. (2017). Les simulations des GCM ne prédisent pas un aussi fort refroidissement dans la mésosphère. De plus, les profils d'abondance montrent un fort enrichissement en composés photochimiques au-dessus de 0,01 mbar (~ 350 km) comparé à septembre 2011 (figure 72). Ces profils sont différents de ceux déduits par Teanby et al. (2017) qui montrent un maximum local d'abondance de C_2H_2 et C_3H_4 vers 440 km qui n'est pas observé. De plus, les rapports de mélange volumique de C_2H_2 , HCN, C_2H_6 et C_6H_6 à 2×10^{-5} mbar (~ 645 km) sont plus abondants que les valeurs des rapports de mélange déduits à 1050 km par l'instrument INMS (Cui et al., 2009; Magee et al., 2009). Selon Teanby et al. (2017), l'enrichissement des composés photochimiques à courte durée de vie (i.e. : C_3H_4 , C_4H_2 , HC_3N et C_6H_6) dans la mésosphère a fortement augmenté l'efficacité du refroidissement radiatif à grande longueur d'onde entre septembre 2011 et mars 2015, ce qui est cohérent avec les profils d'abondance et de température observés. Cela est également cohérent avec le nuage de HCN observé par VIMS en mai 2012 à 300 km dans la région polaire sud, qui requiert des températures proches de 125 K afin de permettre au HCN de condenser (De Kok et al., 2014). Simultanément, un autre nuage a été observé par l'instrument ISS (West et al., 2016). En juillet 2012, l'instrument CIRS a observé une émission à 220 cm^{-1} qui a été attribuée à un condensat (Jennings et al., 2012), et en mai 2013, de la glace de benzène a été observée sous 300 km par Vinatier et al. (2018).

Entre mars et septembre 2015 ($L_s=66^\circ$), l'atmosphère de la région polaire sud s'est fortement réchauffée entre 0,2 mbar (~ 215 km) et 10^{-4} mbar (~ 600 km), d'environ 31 K à 0,04 mbar (~ 285 km), comme l'ont aussi observé Teanby et al. (2017). Par contre, le GCM de Newman et al. (2011) prédit pour $L_s=90^\circ$ des températures plus élevées, d'environ 30 K, entre 0,1 et 0,01 mbar que

les températures observées. Pendant cette même période, les profils d'abondance montrent un appauvrissement au-dessus de 10^{-3} mbar (figure 72), ce qui est cohérent avec les observations de CIRS par Teanby et al. (2017). Cependant, la basse stratosphère dans la région polaire sud est plus enrichie en composés photochimiques que dans la région équatoriale, en accord avec les résultats de Sylvestre et al. (2018). Selon Teanby et al. (2017), la réapparition d'une mésosphère chaude est le résultat de la stabilisation du vortex polaire avec une légère réduction de l'abondance des composés photochimiques, cohérent avec mes observations (figure 72), et une augmentation du chauffage adiabatique par de la branche descendante.

Entre septembre 2015 et janvier/février 2016, la moyenne atmosphère dans la région polaire sud s'est fortement refroidie en-dessous de 0,01 mbar (~ 325 km), d'environ 30 K à 0,2 mbar (~ 210 km), en accord avec les résultats de Teanby et al. (2017). Cependant, les températures observées sont environ 30 K plus basses que les températures prédites par le GCM de Newman et al. (2011) à 0,2 mbar. Ce refroidissement stratosphérique est probablement dû à l'absence de flux solaire dans la région polaire sud et à la diminution de l'efficacité relative du chauffage adiabatique à mesure que la pression augmente. Ces profils de température dans la région polaire sud montrent une stratopause plus froide que celle observée dans la région polaire nord pendant l'hiver nord en 2005-2008. Les profils d'abondance en janvier 2016 sont similaires à ceux de septembre 2015 entre 0,1 mbar (~ 230 km) et 10^{-4} mbar (~ 565 km), en accord avec les résultats de Teanby et al. (2017), tandis qu'entre janvier et février 2016 les profils d'abondance sont devenus relativement constants avec l'altitude.

Entre octobre 2014 et juin 2016 à 51°S , la mésosphère au-dessus de 0,04 mbar (~ 310 km) s'est considérablement réchauffée (de ~ 11 K à 0,01 mbar, 375 km) alors que l'atmosphère au-dessous de la région 0,04-mbar s'est refroidie de 1-2 K. Ce réchauffement mésosphérique pourrait être expliqué par une augmentation du chauffage adiabatique causé par la branche descendante de la cellule de circulation pôle-à-pôle. Teanby et al. (2017) suggèrent que le vortex polaire sud s'étendait jusqu'à $\sim 60^{\circ}\text{S}$ en 2016, ce qui est en accord avec nos observations.

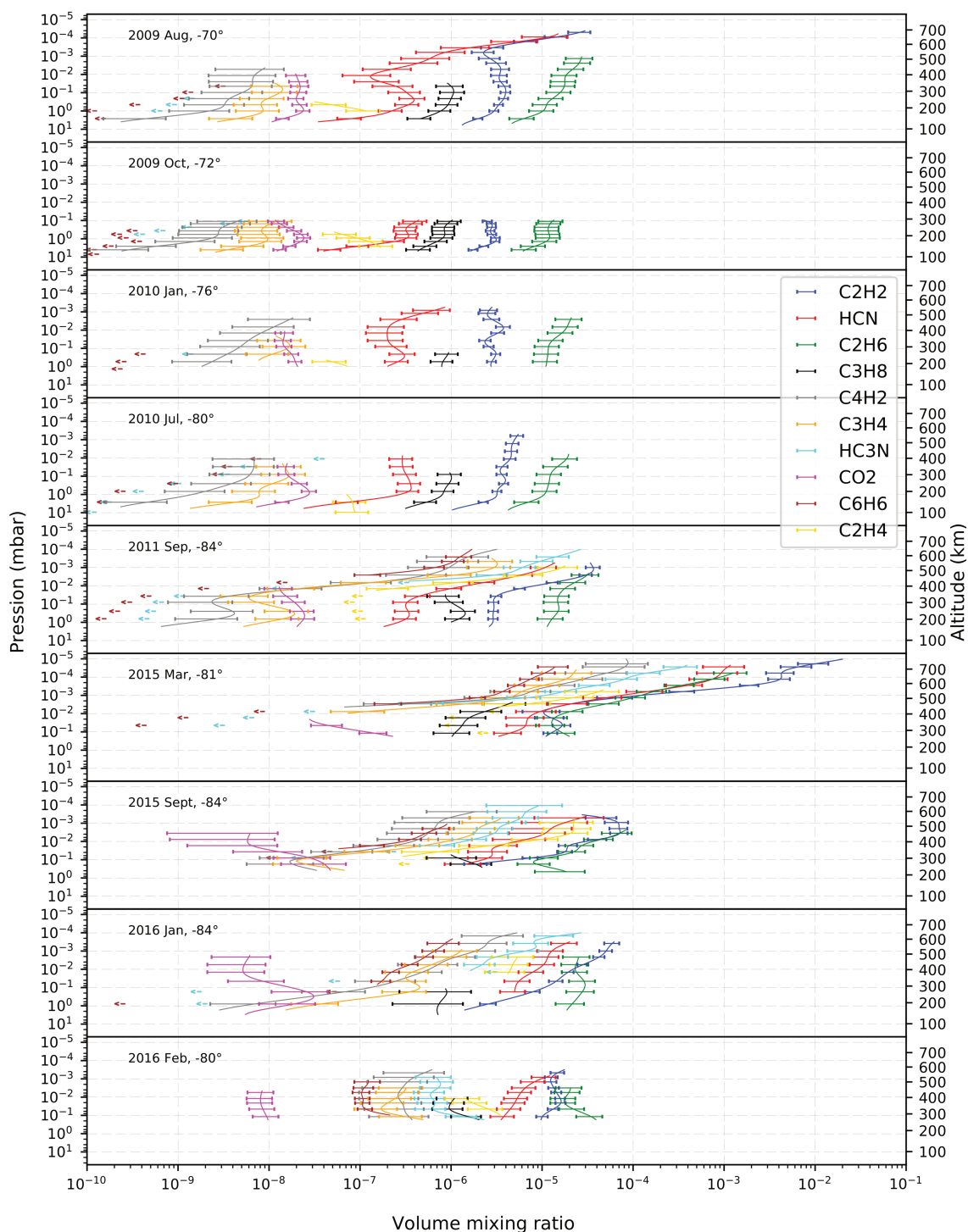


FIGURE 72 – Evolution temporelle des profils d'abondance des composés photochimiques présents dans la région polaire sud pendant la mission Cassini.

10

Rapports isotopiques

Sommaire

10.1 Rapport isotopique $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ dans HCN	120
10.2 Rapport isotopique $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ dans HCN	121
10.3 Spike à 706 cm^{-1}	122

Ce chapitre porte sur le travail que j'ai effectué en début de thèse sur la détermination des rapports isotopiques $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ et $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ dans HCN. J'avais utilisé une ancienne version de calibration (*calib_v4.3.1*), et je n'avais pas appliqué la méthodologie décrite en 4.3 pour améliorer le rapport signal-à-bruit des spectres observés. A travers ce chapitre, je discute des résultats obtenus sur ces rapports isotopiques, du problème rencontré, et des moyens mis en oeuvre pour y remédier.

Les isotopologues mineurs de HCN observés dans la gamme de nombre d'onde du FP3 sont H^{13}CN et HC^{15}N (figure 73). La différence en masse modifie la fréquence de vibration des liaisons, et la bande ν_2 de HCN est alors centrée à $706,0\text{ cm}^{-1}$ pour H^{13}CN , et $711,0\text{ cm}^{-1}$ pour HC^{15}N . Toutefois, les pics en intensité sont décalés d'environ $0,3\text{ cm}^{-1}$ par rapport aux centres de bande.

Pour déterminer ces rapports isotopiques, j'utilise en entrée de l'inversion tous les profils d'abondance des composés photochimiques extraits des inversions des spectres (équivalents à ceux du chapitre 6 pour la version de calibration *calib_v4.3.1*). Puis j'utilise comme profil d'abondance *a priori* pour les isotopologues H^{13}CN et HC^{15}N le profil de HCN, dont l'abondance est divisée par un facteur 89 et 58 correspondant aux valeurs des rapports isotopiques attendues dans la moyenne atmosphère de Titan, respectivement. Pendant l'inversion, je contrais les profils solutions des isotopologues à varier de façon uniforme avec l'altitude en augmentant fortement le lissage, pour cela j'utilise une longueur de corrélation $L = 200$. Le rapport des profils d'abondance de HCN à ceux des isotopologues mineurs détermine les rapports isotopiques. La barre d'erreur à $1-\sigma$ associée aux rapports isotopiques χ est calculée comme :

$$\delta R = \sqrt{\delta R_T^2 + \delta R_{\Delta km}^2 + \delta R_{bruit}^2 * \left(\frac{\max(rms)}{\max(NESR)} \right)^2} \quad (66)$$

Où $\delta R_{\Delta T}^2$ est l'erreur causée par l'incertitude sur la température, $\delta R_{\Delta km}^2$ est l'erreur liée à l'incertitude sur le décalage en altitude ($\pm 2\text{ km}$) et $\delta R_{\Delta bruit}^2$ est l'erreur due au bruit instrumental multipliée par un facteur $\frac{\max(rms)}{\max(NESR)}$.

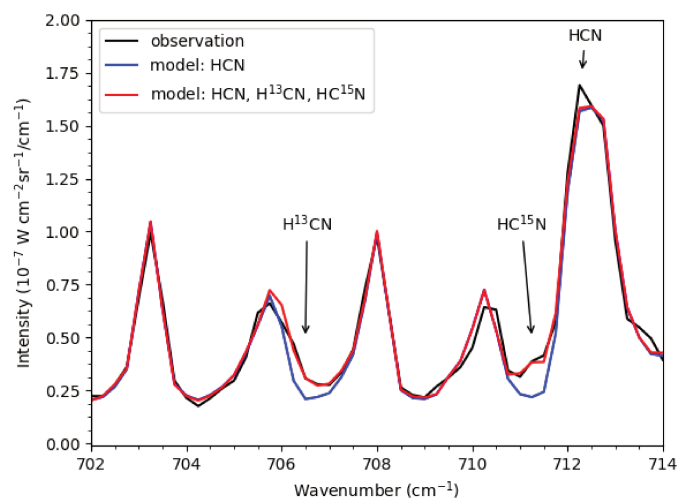


FIGURE 73 – Détection des raies spectrales des isotopologues H^{13}CN et HC^{15}N vers 706,3 et 711,3 cm^{-1} , respectivement. La courbe en noir correspond au spectre observé à 136 km d'altitude, issue de la version de calibration *calib_v4.3.1* lors du flyby T78. Les courbes en rouge et bleu correspondent aux spectres synthétiques avec et sans ces isotopologues dans le modèle, respectivement.

10.1 Rapport isotopique $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ dans HCN

Les rapports isotopiques $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ dans HCN en fonction de la latitude sont affichés sur la figure 74 pendant la majorité de la mission. Dans la suite, nous allons parler du rapport $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ au lieu du rapport $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$, car les valeurs sont plus parlantes. Nous avons affiché les rapports $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ car la source de bruit est moins importante sur HC^{14}N que sur HC^{15}N . Au premier ordre, nous pouvons observer que le rapport isotopique $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ ne semble pas varier significativement en fonction de la latitude ou de la saison. La moyenne pondérée (figure 74, courbe noire) donne une valeur du rapport isotopique $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ de 60 ± 2 , en bon accord avec les précédentes études listées à la table 4. Cependant, la valeur du χ^2 réduit de 2 indique que les barres d'erreur sont sous-estimées ou qu'un modèle où le rapport $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ est constant en latitude n'est pas le plus approprié.

Sur la figure 74, nous observons que le rapport isotopique $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ moyen dans HCN, 60 ± 2 , est plus grand que celui dans N_2 (réservoir principal d'azote) avec 167 ± 0.6 , valeur provenant des mesures INMS (Niemann et al., 2010). Selon le modèle photochimique de Vuitton et al. (2019), le décalage des niveaux d'énergie rovibrationnelle de $^{14}\text{N}^{15}\text{N}$ par rapport à $^{14}\text{N}^{14}\text{N}$ induit un effet d'écrantage. Cet effet permet à $^{14}\text{N}^{15}\text{N}$ d'être photodissocié à plus basse altitude, avec un pic de photodissociation vers 970 km d'altitude, alors que pour $^{14}\text{N}^{14}\text{N}$, le pic est vers 1130 km (figure 56 de Vuitton et al. (2019)). La fraction de ^{15}N croît à mesure que l'altitude diminue jusqu'à 800 km. Les voies de recyclage et de production secondaire de l'azote par les rayons cosmiques galactiques homogénéisent le rapport $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ en-dessous de 800 km. De plus, il s'avère que l'état chimique $\text{N}(^2\text{D})$ est plus enrichi en ^{15}N que l'état $\text{N}(^4\text{S})$. Donc les molécules formées à partir de l'état $\text{N}(^4\text{S})$, comme HCN, sont donc moins enrichies en ^{15}N et présentent un rapport $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ plus important.

Toujours sur la figure 74, deux points (verts) semblent être situés au-delà de 3 écarts-type de la valeur moyenne pendant le printemps nord : vers 84°S et 33°S . Si nous enlevons ces deux valeurs de notre échantillon, le χ^2 réduit n'est plus que de $\sim 1,3$. Nous pouvons expliquer la grande valeur du premier point. Dans la région polaire sud pendant l'automne, l'air à haute altitude est amené dans la moyenne atmosphère par la descente d'air de la cellule pôle-à-pôle atmosphérique. La valeur correspondante du rapport isotopique $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ dans HCN de 108 ± 20 peut potentiellement être un bon indicateur des processus chimiques en jeu dans la haute atmosphère. Les modèles photochimiques prédisent une forte valeur de ce rapport isotopique à haute altitude (> 1200 km) de 88 (Vuitton et al., 2019), qui est proche de notre valeur à 84°S , qui résulte de la plus grande efficacité de la photodissociation des isotopologues les moins abondants.

Valeur	Instrument/région spectrale	Référence
$65 \pm 6,5$	IRAM/submm	Marten et al. (2002)
72 ± 9	SMA/submm	Gurwell (2004) A
94 ± 13	SMA/submm	Gurwell (2004) B
56 ± 8	CIRS/IR	Vinatier et al. (2007a)
65 ± 12	SMA/submm	Gurwell et al. (2011)
76 ± 6	Herschel SPIRE/submm	Courtin et al. (2011)
$72,2 \pm 2,2$	ALMA/submm	Molter et al. (2016)
60 ± 2	CIRS/IR	mon travail

TABLE 4 – Liste des différentes études portant sur la détermination du rapport isotopique $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ dans HCN dans l'atmosphère de Titan. A et B font référence au profil de température utilisé pour déterminer les rapports isotopiques : A issue de Lellouch et al. (1990), B issue de Coustenis and Bézard (1995).

10.2 Rapport isotopique $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ dans HCN

Les rapports isotopiques $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ dans HCN issus de la majorité des observations listées en table 3 sont présentés sur la figure 75. La moyenne pondérée du rapport isotopique $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ de 152 ± 4 est en désaccord avec la valeur terrestre standard de 89 (et de ceux dans le système solaire), et avec les précédentes études listées dans la table 5. La dernière étude sur le rapport $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ dans HCN avec les mesures CIRS avait conclu sur des valeurs proches de la valeur terrestre standard : 89_{-18}^{+22} (15°S) et 68_{-12}^{+16} (83°N) pendant le flyby T4 à $0,5 \text{ cm}^{-1}$ de résolution spectrale (Vinatier et al., 2007a). Ce désaccord avec cette dernière étude nous a poussé à chercher l'origine de ce désaccord et de le résoudre au mieux, qui est expliqué en détails dans la prochaine section.

Dans l'atmosphère de Titan, les rapports isotopiques $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ des autres composés photochimiques carbonés ont des valeurs proches de la valeur protosolaire (Bézard et al., 2014). Le rapport isotopique $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ dans le méthane, réservoir principal de carbone, permet de contraindre le commencement du dégazage du méthane depuis l'intérieur de Titan. Selon le modèle géologique de Mandt et al. (2012), le cas où le taux de dégazage est relativement faible devant le fractionnement isotopique dû à l'échappement atmosphérique et à la photochimie suggère que le dégazage du méthane a commencé au mieux il y a 470 millions d'années. Dans le cas contraire, le dégazage aurait au mieux commencé il y a 940 millions d'années.

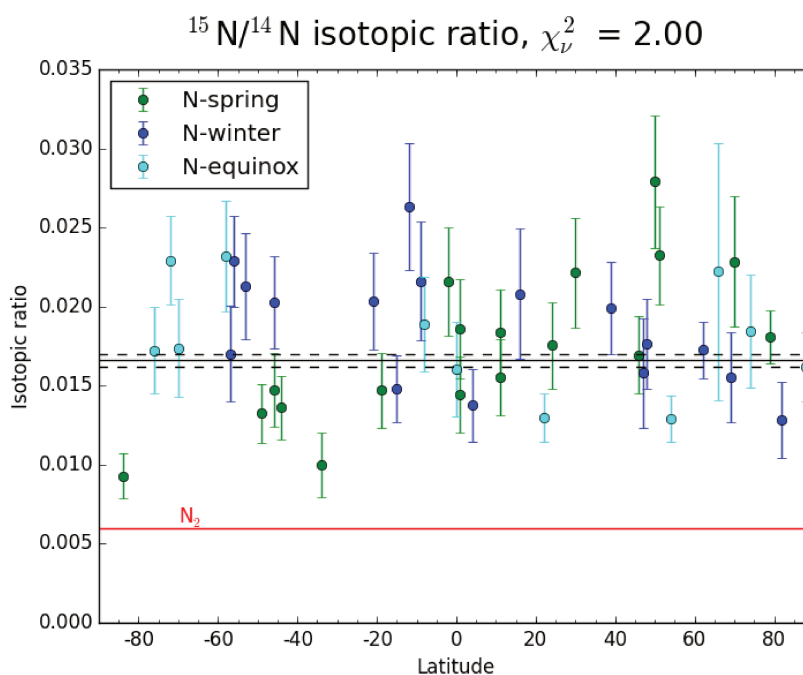


FIGURE 74 – Rapports isotopiques $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ dans HCN en fonction de la latitude à partir de la majeure partie des observations listées en table 3 avec la calibration *calib_v4.3.1*. Le code couleur fait référence à la saison : bleu = hiver nord, cyan = proche équinoxe de printemps nord et vert = printemps nord. La ligne noire correspond à la moyenne pondérée des rapports isotopiques, et les pointillés noirs correspondent à la barre d'erreur à $1\text{-}\sigma$ associée. La ligne rouge correspond au rapport isotopique $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ dans N_2 , le réservoir principal d'azote.

Valeur	Instrument/région spectrale	Référence
108 ± 20	SMA/submm	Gurwell (2004) A
132 ± 25	SMA/submm	Gurwell (2004) B
79 ± 17	CIRS/IR	Vinatier et al. (2007a)
96 ± 13	Herschel SPIRE/submm	Courtin et al. (2011)
66 ± 35	Herschel PACS/submm	Rengel et al. (2014)
$89,8\pm 2,8$	ALMA/submm	Molter et al. (2016)
152 ± 4	CIRS/IR	mon travail

TABLE 5 – Liste des différentes études portant sur la détermination du rapport isotopique $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ dans HCN dans l'atmosphère de Titan. A et B font référence au profil de température utilisé pour déterminer les rapports isotopiques : A issue de Lellouch et al. (1990), B issue de Coustenis and Bézard (1995).

10.3 Spike à 706 cm^{-1}

Suite au résultat du rapport isotopique $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$, j'ai recherché des explications possible à ce résultat. J'ai appliqué différentes méthodologies pour déterminer ce rapport isotopique, mais les valeurs obtenues étaient semblables. En traçant la moyenne de l'écart-type des limbes d'un jeu de données (figure 76), j'ai observé la présence d'un spike de 0.5 Hz vers 706 cm^{-1} , dans

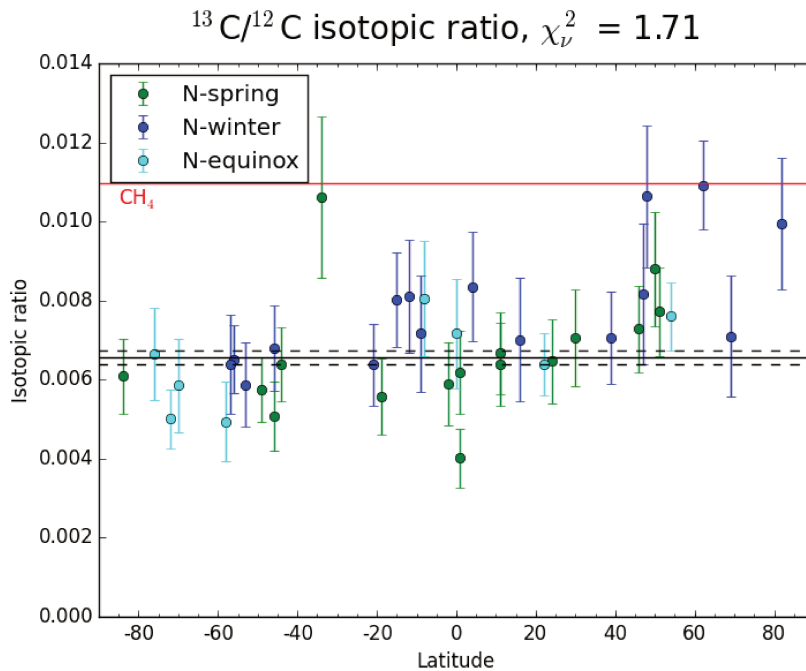


FIGURE 75 – Rapports isotopiques $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ dans HCN en fonction de la latitude à partir de la majeure partie des observations listées en table 3 avec la calibration *calib_v4.3.1*. Le code couleur fait référence à la saison : bleu = hiver nord, cyan = proche équinoxe de printemps nord et vert = printemps nord. La ligne noire correspond à la moyenne pondérée des rapports isotopiques, et les pointillés noirs correspondent à la barre d'erreur à $1\text{-}\sigma$ associée. La ligne rouge correspond au rapport isotopique $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ dans CH₄, le réservoir principal de carbone.

la région d'émission de H¹³CN. H¹³CN est déterminé à partir de 5 points spectraux comparés aux 82 points spectraux pour déterminer HCN. La présence d'un spike impacte grandement le détermination du profil vertical de H¹³CN.

Pour cela, j'ai développé un code Python qui modifie le fichier de bruit instrumental (NESR) en ajoutant la contribution des spikes (détaillé en section 4.2.1). L'augmentation du bruit au niveau de la bande de H¹³CN augmente les barres d'erreurs et peut changer la valeur du profil de H¹³CN retrouvée. La valeur du rapport isotopique et l'erreur associée devraient être plus fiables, car nous aurons pris en compte la source d'erreur liée au spike. Cependant, je n'ai eu le temps d'appliquer les nouveaux fichiers de bruit pour cette étude car j'ai dû reprendre l'analyse de l'ensemble des spectres en utilisant la nouvelle version de calibration *calib_v4.3.5*.

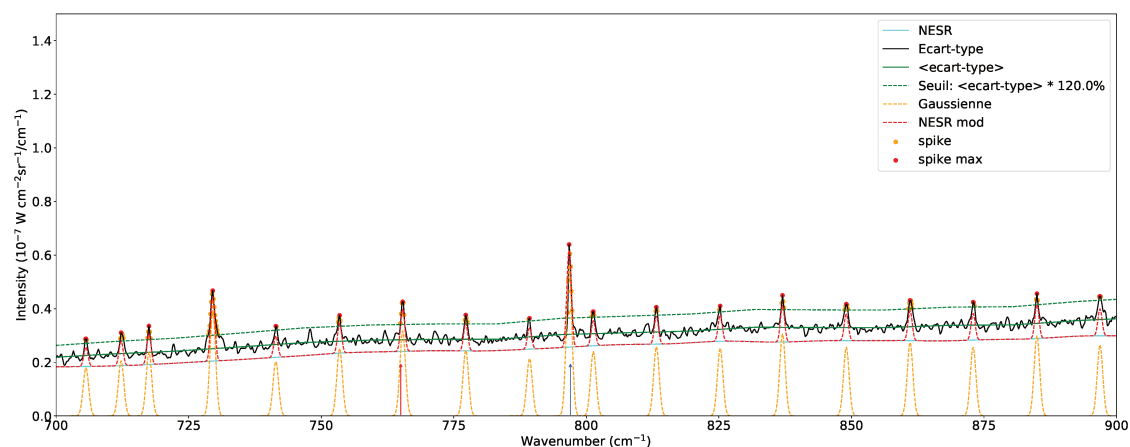


FIGURE 76 – Ecart-type moyen de la radiance pour les spectres au limbe pendant le flyby T96 (décembre 2013), extrait de la version de calibration *calib_v4.3.1*. Les spikes à 0,5 Hz sont espacés de 12 cm^{-1} de façon régulière, nous pouvons voir le motif entre 730 et 780 cm^{-1} . A partir de ce motif, nous pouvons déduire la position des autres spikes à 0,5 Hz. Nous constatons que le spike tout à gauche est un spike à 0,5 Hz alors que le suivant ne l'est pas, et pourrait correspondre à la dispersion de la radiance de la bande de HCN.

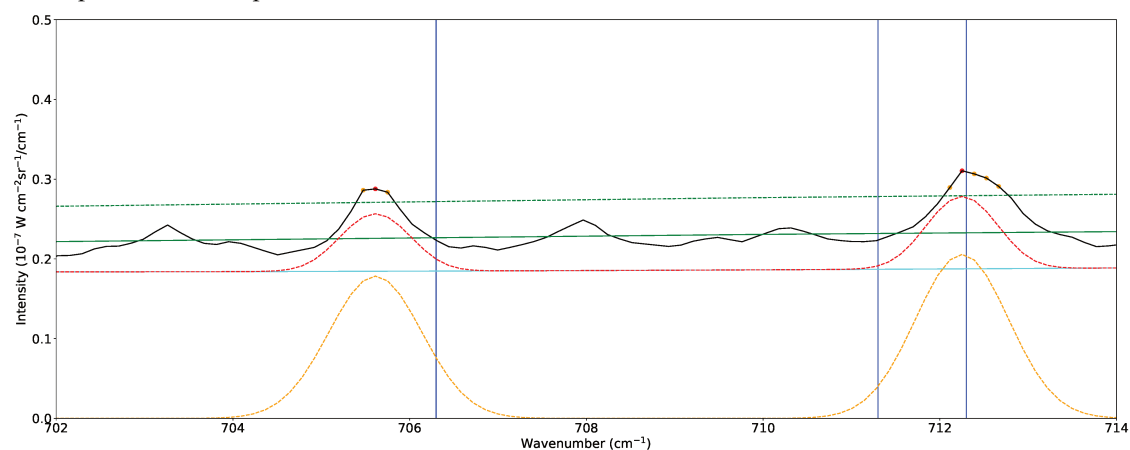


FIGURE 77 – Zoom de la figure 76 dans la gamme spectrale 702 - 714 cm^{-1} . Les barres bleues verticales montrent de gauche à droite, la position des raies spectrales de H^{13}CN ($706,3 \text{ cm}^{-1}$), HC^{15}N ($711,3 \text{ cm}^{-1}$) et HCN ($712,3 \text{ cm}^{-1}$). Le spike vers 706 cm^{-1} est un spike à 0,5 Hz.

11

Conclusions et perspectives

Sommaire

11.1 Conclusions	125
11.2 Perspectives	126

11.1 Conclusions

Les observations au limbe acquises par CIRS avec une résolution spectrale de $0,5 \text{ cm}^{-1}$ ont permis de mettre en avant les variations saisonnières des profils de température et d'abondance dans la moyenne atmosphère de Titan entre 2004 et 2017, soit environ une demi-année saturnienne.

Pendant l'hiver nord, dans la région polaire nord, j'ai observé dans la mésosphère des températures à 0,1 mbar ($\sim 175 \text{ km}$) qui sont beaucoup plus élevées qu'aux latitudes équatoriales pendant la période 2005-2007. Cela est probablement dû au réchauffement par compression de la branche descendante de la cellule de circulation globale pôle-à-pôle. Ce réchauffement induit une stratopause située vers 0,01 mbar ($\sim 410 \text{ km}$), une décade de pression au-dessus de celle vers l'équateur (0,1 mbar, $\sim 275 \text{ km}$). Le transport vertical vers les basses couches atmosphériques explique également l'enrichissement important de la plupart des composés photochimiques par rapport aux latitudes moyennes et équatoriales, en particulier dans la stratosphère sous la région de 0,1 mbar. L'enrichissement varie d'une espèce à l'autre, il est fort pour des molécules comme HC_3N , C_6H_6 , C_4H_2 , C_3H_4 et HCN , et faible voir nul pour C_2H_6 , C_3H_8 et CO_2 . En 2009-2010, peu après l'équinoxe de printemps nord, j'ai observé un fort enrichissement de tous les composés photochimiques au-dessus de 0,1 mbar ($\sim 250 \text{ km}$) par rapport à la période hivernale, qui peut être expliqué par la combinaison de l'augmentation du flux solaire et de la production photochimique locale. Simultanément, l'atmosphère s'est refroidie dans toute la région de 1 à 0,001 mbar ($\sim 165\text{-}495 \text{ km}$). Un an plus tard, en décembre 2011, l'atmosphère s'est refroidie au-dessus de 0,03 mbar ($\sim 320 \text{ km}$) mais s'est réchauffée en-dessous de 0,03 mbar, probablement en raison de l'augmentation du flux solaire. Jusqu'en janvier 2015, la température a continué d'augmenter sous 0,03 mbar ($\sim 340 \text{ km}$), donnant une stratopause située à 0,1 mbar ($\sim 280 \text{ km}$), une altitude proche de celle de la région équatoriale.

Au cours du printemps nord de décembre 2011 à janvier 2015 dans la région polaire nord, les espèces photochimiques étaient toujours enrichies par rapport à l'équateur entre 1 et 0,1 mbar ($\sim 175\text{-}280 \text{ km}$), peut-être en raison d'une cellule de circulation résiduelle, comme prédit par le GCM de Lebonnois et al. (2012).

La région polaire sud a montré de fortes variations saisonnières sur les profils de température

et d'abondance entre juillet 2010 et janvier 2016. De juillet 2010 à septembre 2011, l'atmosphère sous 0,1 mbar (~280 km) s'est refroidie, probablement à cause de la diminution du flux solaire. De septembre 2011 à mars 2015, l'atmosphère s'est fortement refroidie entre 0,2 et 4×10^{-4} mbar (225-500 km), en partie à cause du fort enrichissement en composés photochimiques au-dessus de 0,01 mbar (~350 km) qui augmente l'efficacité du refroidissement radiatif (Teanby et al., 2017). De plus, les rapports de mélange que j'ai déduit en mars 2015 sont plus élevés à 2×10^{-5} mbar (~645 km) que ceux mesurés *in-situ* par INMS à 1050 km (Cui et al., 2009; Magee et al., 2009). Plus tard, en septembre 2015, j'ai observé que la température avait augmenté entre 0,2 mbar (215 km) et 10^{-4} mbar (600 km). Selon les travaux de Teanby et al. (2017), ceci est le résultat de la légère diminution des composés photochimiques actifs dans l'infrarouge et du renforcement de la cellule de circulation pôle-à-pôle, qui permet à la contribution du chauffage adiabatique de la branche descendante de contrecarrer la contribution du refroidissement par l'émission thermique. En janvier 2016, les températures sont beaucoup plus basses qu'en septembre 2015 en-dessous de 0,01 mbar (~325 km), probablement en raison du manque de flux solaire. En juin 2016, je peux déterminer que le vortex polaire, caractérisé par un enrichissement des espèces photochimiques, s'est étendu vers l'équateur jusqu'à ~50°S.

Les latitudes équatoriales présentent de faibles variations saisonnières sur les profils de température et d'abondance pendant toute la durée de la mission. J'ai noté que les profils d'abondance du CO₂ dans la région équatoriale montrent un maximum local à 1 mbar (~188 km) et un minimum local près de 0,1 mbar (~290 km) qui ne sont pas prédits par les modèles photochimiques (Krasnopolsky, 2014; Loison et al., 2015; Dobrijevic et al., 2016; Vuitton et al., 2019). J'ai pu détecter HC₃N à des latitudes équatoriales et à haute altitude avec une abondance de quelques ppmv à ~580 km (3×10^{-4} mbar), ce qui est cohérent avec les résultats des occultations stellaires observées par l'instrument UVIS à 550 km (Koskinen et al., 2011).

J'ai observé une oscillation sur le profil thermique de décembre 2009 à 74°N entre 300 et 500 km d'altitude. Ses caractéristiques (longueur d'onde verticale et faible vitesse de phase verticale) correspondent à une onde d'inertie-gravité, compte tenu de l'estimation du vent zonal et du cisaillement méridien à cette latitude et à ce moment.

En conclusion, j'ai montré que la branche descendante de la cellule de circulation pôle-à-pôle ou équateur-à-pôle a un fort impact sur la structure thermique et l'abondance des composés photochimiques aux niveaux des régions polaires dans la mésosphère et la stratosphère. La présence du vortex polaire s'étend en latitude pendant l'hiver et peut impacter des latitudes moyennes.

Tous les profils verticaux présentés dans ce manuscrit sont disponibles et peuvent être téléchargés sur VESPA (Virtual European Solar and Planetary Access, <http://vespa.obspm.fr/planetary/data/>).

11.2 Perspectives

Il reste une grande quantité d'information à extraire des spectres infrarouges CIRS. Par exemple, j'ai observé un résidu de radiance dans la région spectrale 775-800 cm⁻¹, possiblement attribué au propionitrile (C₂H₅CN). Il est possible que d'autres molécules attendues puissent être détectées sur les spectres CIRS à 0,5 cm⁻¹ de résolution spectrale.

Dans l'immédiat, je conclus mon travail de thèse sur la détermination des rapports isotopiques $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ et $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ dans HCN à partir des observations analysées pendant ma thèse. Il serait aussi intéressant de calculer le rapport isotopique $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ dans C_2H_2 , afin de le comparer avec la valeur trouvée dans HCN. D'après les études précédentes, le rapport isotopique $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ varie très peu d'un composé photochimique à l'autre.

Je pense que pour contraindre au mieux les profils de température et d'abondance à partir des observations CIRS, il est très important de contraindre l'abondance du méthane en fonction de la latitude et de la saison.

Il est difficile de comparer l'évolution des deux pôles car la couverture par la mission Cassini n'est pas symétrique en saison. De plus, le pôle nord en hiver est 1 UA plus proche du Soleil que le pôle sud en hiver en raison de l'excentricité de Saturne. Cette asymétrie de l'insolation peut conduire à une asymétrie dans la dynamique aux hautes latitudes.

Le suivi du pôle sud pendant l'hiver sud est actuellement impossible depuis les télescopes au sol comme ALMA, car le pôle sud pointe dans la direction opposée à la Terre. Cependant, nous pouvons étudier l'évolution de la région polaire nord pendant l'été nord, afin de la comparer à la région polaire sud à une saison similaire.

A Annexes

A.1 Projection de la ligne de visée

Afin de m'aider à comprendre la géométrie de l'observation, j'ai développé un code Python pour projeter la ligne de visée dans l'atmosphère de Titan (voir annexe A.4.2). Pour cela, j'établis l'équation de la droite paramétrée :

$$\overrightarrow{AM} = t \overrightarrow{AB} \quad (67)$$

Avec, A le point visé au limbe, B le point où se trouve la sonde, M un point sur la ligne de visée (\overrightarrow{AB}) et t un scalaire.

Je récupère les informations sur la distance sonde-Titan (*body_spacecraft_range*) et les coordonnées géographiques de la sonde projetées sur Titan (*body_sub_spacecraft_latitude*, *body_sub_spacecraft_longitude*) via la commande :

```
vanilla /volumes/planeto/cirs/calib_v4.3.4/apod_spectra/XXYY -fields "
SCET DET body_spacecraft_range latitude_zpd[5] longitude_zpd[5]
altitude_zpd[5] body_sub_spacecraft_latitude
body_sub_spacecraft_longitude body_sub_solar_longitude
body_sub_solar_latitude" -select "det 21 30 fov_targets 4096 4096
rti 401 401 shutter 0 0 altitude_zpd[5] 0 600 latitude_zpd[5] -90
90 longitude_zpd[5] 0 360 body_spacecraft_range 0 10000000"
```

Nous pouvons voir sur les figures 78 et 79 les latitudes traversées par la ligne de visée au limbe (courbes bleue et orange) en fonction de l'altitude. Nous constatons sur la figure 78 que la ligne de visée atteint une latitude maximale correspondant à l'altitude minimale. Nous pouvons donc être sûr que les informations recueillies par ces spectres correspondent à la latitude sondée. Par contre, sur la figure 79, la ligne de visée atteint 88°S à 250 km d'altitude avant d'atteindre 80°S à 210 km d'altitude. L'altitude sondée est donc vue à l'arrière de Titan, car la ligne de visée traverse le pôle sud. Donc l'altitude visée par ce spectre au limbe est contaminée par le rayonnement provenant de la région polaire où de forts gradients thermiques et d'abondances sont observés à cette période de l'année (automne sud).

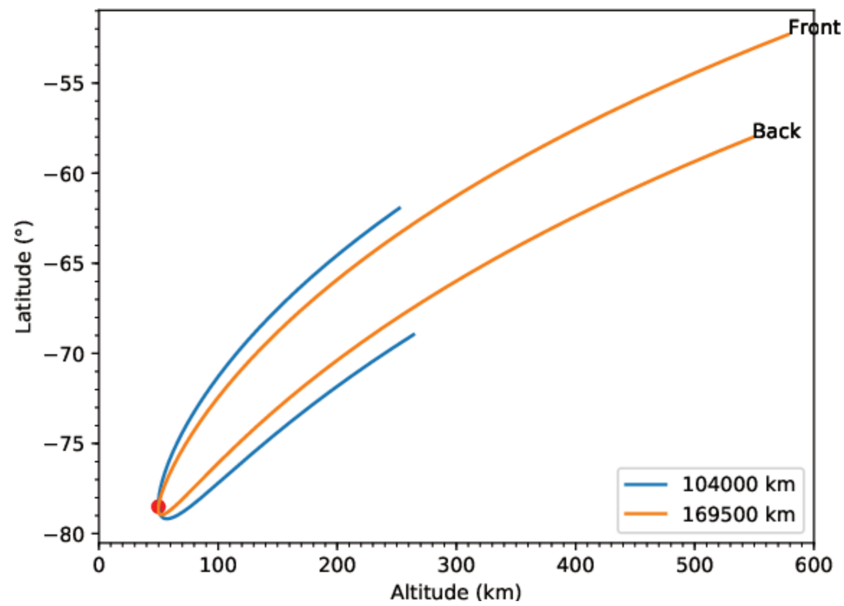


FIGURE 78 – Latitude des régions traversées par la ligne de visée en fonction de l'altitude, pour le flyby T110. Les courbes bleue et orange correspondent à la ligne de visée au début et à la fin de la séquence de mesures de CIRS, respectivement. Le point rouge correspond à l'altitude minimale de la ligne de visée. Les annotations "front" et "back" représentent la partie en avant et en arrière de la ligne de visée par rapport à l'altitude minimale.

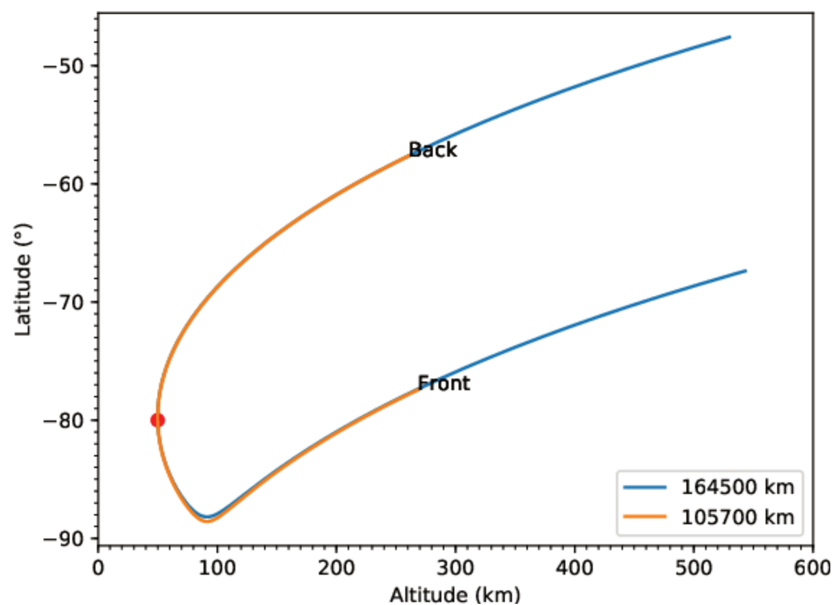


FIGURE 79 – Similaire à la figure 78, pour le flyby T117.

A.2 Livres

Titan

- Lifting Titan's Veil, Ralph Lorenz and Jacqueline Mitton, CAMBRIDGE
- Titan Unveiled, Ralph Lorenz and Jacqueline Mitton, PRINCETON
- Titan Interior, Surface, Atmosphere, and Space Environment, Müller-Wodarg, CAMBRIDGE PLANETARY SCIENCE

Atmosphère planétaire

- An introduction to dynamic meteorology, James R. Holton, Academic Press
- Atmospheric evolution on inhabited and lifeless worlds, David C. Catling and James F. Kasting, CAMBRIDGE
- An introduction to atmospheric physics, David G. Andrews, CAMBRIDGE
- Planetary sciences, Imke de Pater et Jack J. Lissauer, CAMBRIDGE

Spectroscopie infrarouge

- Exploration of the Solar System by infrared remote sensing, R. A. Hanel, CAMBRIDGE
- Fundamentals of Atmospheric Radiation, Craig F. Bohren, WILEY-VCH

A.3 Articles

A.3.1 Article paru dans The Astrophysical Journal Letters en 2018, 861 :L25, 5pp



Detection Opportunity for Aromatic Signature in Titan's Aerosols in the 4.1–5.3 μm Range

Christophe Mathé¹ , Thomas Gautier², Melissa G. Trainer³, and Nathalie Carrasco^{2,4} 

¹ LESIA, Observatoire de Paris, Université PSL, CNRS, Sorbonne Université, Univ. Paris Diderot, Sorbonne Paris Cité, 5 place Jules Janssen, 92195 Meudon, France
christophe.mathe@obspm.fr

² LATMOS, CNRS, Université Versailles St-Quentin, Sorbonne Université, Université Paris-Saclay, 11 Bvd d'Alembert F-78280 Guyancourt. France
thomas.gautier@latmos.ipsl.fr

³ NASA Goddard Space Flight Center, 8800 Greenbelt Road, Greenbelt MD, USA

⁴ Institut Universitaire de France, France

Received 2018 May 29; revised 2018 June 21; accepted 2018 June 27; published 2018 July 13

Abstract

The *Cassini/Huygens* mission provided new insights on the chemistry of the upper atmosphere of Titan. The presence of large molecules and ions (>100 's of amu) detected by *Cassini* at high altitude was not expected, and questions the original assumptions regarding the aerosol formation pathways. From recent laboratory studies, it has been shown that the inclusion of trace amounts of aromatic species drastically impacts the chemistry of aerosol formation and induces observable changes in the properties of the aerosols. In this Letter we focus on the effect of one of the simplest nitrogenous aromatics, pyridine ($\text{C}_5\text{H}_5\text{N}$), on the infrared signature of Titan's aerosol analogs. We introduce initial gas mixtures of (i) $\text{N}_2\text{-C}_5\text{H}_5\text{N}$ (100%/250 ppm), (ii) $\text{N}_2\text{-CH}_4\text{-C}_5\text{H}_5\text{N}$ (99%/1%/250 ppm), and (iii) $\text{N}_2\text{-CH}_4$ (99%/1%) in a cold plasma discharge. The material produced, herein called tholins, is then analyzed by mid-infrared spectroscopy. When adding pyridine in the discharge, the tholins produced present an aromatic signature in the 4.1–5.3 μm ($1850\text{--}2450\text{ cm}^{-1}$) spectral region, attributed to overtones of aromatic C–H out-of-plane bending vibrations. We also observe a spectral shift of the nitrile and iso-nitrile absorption band with the inclusion of pyridine in the gas mixture. These results could help to investigate the data obtained at Titan by the *Cassini/Visual and Infrared Mapping Spectrometer* (VIMS) instrument in the 1–5 μm infrared window.

Key words: astrochemistry – infrared: planetary systems – methods: laboratory: solid state – planets and satellites: atmospheres – solid state: refractory

1. Introduction

The largest moon of Saturn, Titan, has fascinated numerous scientists because it is the only moon in our solar system that possesses an atmosphere. Titan's atmosphere is composed of nitrogen ($\sim 98\%$), methane ($\sim 1.5\%$), and traces species of hydrocarbons (Waite et al. 2005). In the ionosphere ($\sim 1000\text{ km}$), gas is dissociated and ionized by solar photon irradiation and energetic particles from Saturn's magnetosphere. This chemistry leads to the formation of complex photochemical aerosols in the atmosphere. Since the discovery of Titan's thick haze layer by the *Voyager* probe (Smith et al. 1981), the question of the aerosol composition has been widely investigated (Khare et al. 1984; Imanaka et al. 2004; Gautier et al. 2012). The results from the *Cassini/Huygens* mission have provided constraints on the chemical composition of the aerosol, though not a comprehensive analysis (Hörst 2017). Results from the *Huygens/Aerosol Collector Pyrolyser* (ACP) experiment demonstrated that the atmospheric aerosols incorporate a large fraction of nitrogen (Israël et al. 2005). *Cassini/Composite Infrared Spectrometer* (CIRS) detected C–H bending mode in the aerosol signature in the far-infrared (far-IR; Vinatier et al. 2012).

However, aromaticity in Titan's aerosol remains uncertain. Dinelli et al. (2013) reported a detection of an unidentified emission around $3.28\ \mu\text{m}$ (3049 cm^{-1}) in Titan's atmosphere, observed by the Visual and Infrared Mapping Spectrometer (VIMS) instrument on board *Cassini*. Based on the in situ measurements of small molecules by Ion and Neutral Mass Spectrometer (INMS), the feature could be attributed to aromatic molecules like benzene (Waite et al. 2007). Yet, the small

concentration of benzene (few ppm) did not explain the large magnitude of the emission peak observed by VIMS. Dinelli et al. (2013) suggested that the unidentified emission could be due to a solid signature of polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) or heterocyclic aromatic compounds in the Titan's upper atmosphere (Coates et al. 2007; Waite et al. 2007). López-Puertas et al. (2013) further attempted to compare this unidentified emission peak to PAH emission features. PAHs have their vibrational signatures in the spectral range of the unidentified emission. Moreover, PAHs excited by UV-solar radiation redistribute internally the energy in their vibrational modes, causing near and mid-infrared (mid-IR) emissions. To analyze this unidentified emission, VIMS observations were compared to an excitation model of a set of PAHs and polycyclic aromatic nitrogen heterocycles (PANHs). The observed spectral feature from VIMS was found to be consistent with the combination of several PAH spectra. López-Puertas et al. (2013) established a list of the 19 most abundant PAHs fitting well with the VIMS observations and composed of 10–11 aromatics rings on average. This attribution is not unique or univocal, but provides strong evidence that there may be an aromatic component in Titan's aerosols.

In this Letter we investigate the infrared spectra of aerosol analogs with a high aromatic content with the aim of identifying new features that would be indicators the aromatic component of Titan's aerosols. To produce such highly aromatic aerosols, we begin with trace amounts of pyridine ($\text{C}_5\text{H}_5\text{N}$). Indeed, previous laboratory investigations by Sebree et al. (2014) showed that aerosols produced with trace amounts of 1- and 2-ring aromatics provided the best match to broad

aerosol emission features below 200 cm^{-1} actually, observed at Titan in CIRS far-IR spectra (Anderson & Samuelson 2011). Aerosol analogs with a nitrogen component, including those formed with pyridine, provided the strongest feature in this region of the spectrum. Here, pyridine is chosen in order to favor a high nitrogen content, consistently with the *Huygens*/ACP detection (Israël et al. 2005), and because this compound has been inferred from INMS data to be present in the upper atmosphere (Vuitton et al. 2007).

A typical signature for aromaticity would be the fingerprints due to the $\nu_{(0-1)}$ transition of the out-of-plane C–H bending modes, which are usually located in the $600\text{--}900\text{ cm}^{-1}$ wavenumber range (Tommasini et al. 2016). However, this region is generally crowded for hydrocarbons (Coustenis et al. 2010), making it challenging to decipher in complicated spectra. Fortunately, such fingerprints have a counterbalance due to aromatic overtones linked to the $\nu_{(0-3)}$ transition in the $1800\text{--}2100\text{ cm}^{-1}$ wavenumber range, which happens to be a region of the spectrum free from any other vibrational absorptions (Herzberg 1950). We thus choose to investigate this spectral band, which partially coincides with a *Cassini*/VIMS observable range ($1\text{--}5\text{ }\mu\text{m}$) (Brown et al. 2005), to characterize the spectra of our laboratory aerosols (Brown et al. 2005).

2. Experimental Details

Aerosols analogs were produced using the Production d’Aérosols en Microgravité par Plasma REactifs (PAMPRE) experiment, based on a plasma discharge in a gas mixture of nitrogen with methane and/or pyridine. Then, the tholins produced are extracted from the reactor to be analyzed by infrared spectroscopy with an attenuated total reflection (ATR) method.

The PAMPRE setup is based on a capacitively coupled radio-frequency (13.6 MHz) system as energy source to induce a plasma in gas mixtures. The experimental details can be found in Szopa et al. (2006).

The gas mixture is injected into the top of the vacuum reactor at a 55 sccm (standard cubic centimeter per second) flow rate. The PAMPRE reactor is operated at room temperature, at a pressure of 0.9 mbar and an effective power of 30 W.

When the reactor is on, the plasma induces chemistry that leads to the formation of organic aerosol, considered analogs of Titan’s haze particulates. Due to charge effects, aerosols are maintained in levitation in the plasma, allowing for growth in the free atmosphere without induced wall effects. The aerosol formation process is self-limiting. Once the solid particles reach a critical diameter they become too heavy, and the electric field yields and the gravitation forces take over. The particles fall through the grid and deposit outside of the reactor for collection on a glass vessel. These solid products are called tholins. An estimate of the production rate, defined as the ratio between the mass of tholins produced and the production duration, is obtained by weighing the total collected sample with a 0.1 mg precision scale. This estimate only corresponds to the lower limit of the production rate, as a few tholins remain on the glass vessel due to electrostatic charging and cannot be extracted. The detailed protocol and a discussion on the limitations of this procedure, together with a study on the influence of methane percentage on tholins production rate in the PAMPRE reactor, can be found in Sciamma-O’Brien et al. (2010).

Table 1
Initial Composition of the Gas Mixtures

Initial Gas Mixture	N ₂ (%)	CH ₄ (%)	C ₅ H ₅ N (ppm)
N ₂ –CH ₄	99	1	0
N ₂ –CH ₄ –C ₅ H ₅ N	~99	1	250
N ₂ –C ₅ H ₅ N	~100	0	250

Here, three different gas mixtures were used to produce aerosols as presented in Table 1: (1) a reference case with only N₂ and CH₄ in the initial gas mixture, (2) a second case to evaluate the effect of traces of pyridine in addition to CH₄ to compare to the reference mix, and (3) a third case to evaluate the capacity of pyridine itself to generate aerosols with a highly aromatic signature.

To test the effect of pyridine in the N₂–CH₄ chemical system, we have chosen to set the methane concentration at 1% in our experiments, in agreement with a lower limit for Titan’s atmospheric composition (Niemann et al. 2010).

Experiments were made using reactants from Air Liquide: N₂ (>99,999% purity), a certified CH₄/N₂ mixture (10% CH₄, >99,999% purity), and a certified pyridine/N₂ mixture (550 ppm of pyridine, >95% purity).

The ATR method enables a direct measurement of the infrared spectra of solid product without further preparation. For this analysis a few micrograms of bulk tholins are deposited onto the ATR plate of a Nicolet 6700 Fourier Transform InfraRed—ATR from Thermo Fisher Scientific. Spectra were recorded on the $1800\text{--}2500\text{ cm}^{-1}$ wavenumber range with a 2 cm^{-1} spectral resolution and a Michelson velocity set at $0.624\text{ cm}^{-1}\text{ s}^{-1}$. All spectra were normalized to the most intense peak around 2169 cm^{-1} and corrected for atmospheric background.

3. Results and Discussion

3.1. Aerosol Production Efficiency

Rough estimates of the production rates were measured for the two experiments performed with 250 ppm of pyridine, with and without methane. For a similar plasma duration of 6 hr, we found a mass production of 70 and 8.2 mg with and without methane, respectively. The production rate in the presence of 1% methane is an order of magnitude larger (11.7 mg/h and 1.4 mg/h, respectively), but needs to be scaled to consider the relative amount of carbon introduced in the two experiments. Each molecule of pyridine contains five carbon atoms, so the 250 ppm of pyridine provides 1250 ppm carbon atoms to the reactive mixture. There is, therefore, one order of magnitude less carbon provided by 250 ppm pyridine than by 1% methane amount in the discharge. Thus, the methane and the aromatic pyridine have roughly the same efficiency to produce solid particles in the plasma experiment. This suggests that on Titan a few ppm of aromatic molecules could contribute significantly to the aerosol formation, especially at altitudes where methane photochemistry is no longer active. This is consistent with previously reported studies (Trainer et al. 2013, Sebree et al. 2014).

3.2. Aerosol Spectral Signature

The spectra of the three samples in the $1850\text{--}2450\text{ cm}^{-1}$ range are shown in Figure 1.

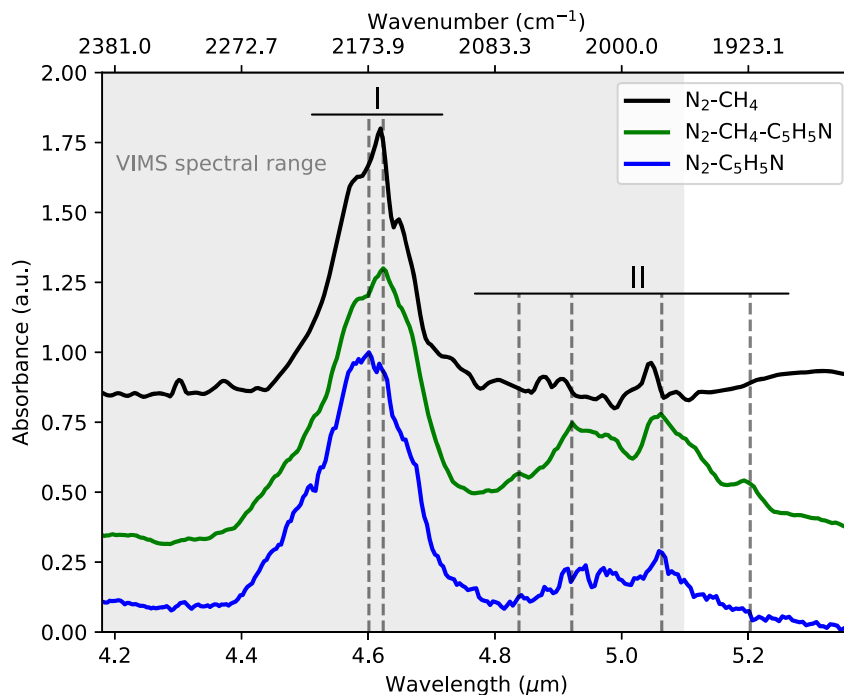


Figure 1. Infrared spectra of tholins in the 4.1–5.3 μm spectral range (1850–2450 cm^{-1}). The curves are labeled with the initial gas mixture used to produce tholins (see Table 1): $\text{N}_2\text{-CH}_4$ (black curve), $\text{N}_2\text{-C}_5\text{H}_5\text{N}$ (blue curve), and $\text{N}_2\text{-CH}_4\text{-C}_5\text{H}_5\text{N}$ (green curve). Regions I and II correspond to nitrile vibration and aromatic overtones, respectively. The gray corresponds to the VIMS spectral range.

Two features stand out in this range of the spectra: one region between 2100 and 2250 cm^{-1} (zone I), and the second between 1900 and 2100 cm^{-1} (zone II). For each region, the band center position, intensity, and potential attribution are detailed in Table 2.

Zone I corresponds to the well-known absorption bands due to the nitrile (R-CN) and iso-nitrile (R-NC) functions (Imanaka et al. 2004; Gautier et al. 2012). When comparing the three spectra in Figure 1, the first aspect of note is the similarity in position of this feature. It is dominated by an absorption band peaking at 2173 cm^{-1} corresponding to the stretching mode of nitrile or iso-nitrile terminal functions branched on aliphatic structures.

However, a second contribution appears in this broad band, peaking at around 2240 cm^{-1} (see peaks attribution in Table 2). The weight of this contribution is strongest in the $\text{N}_2\text{-C}_5\text{H}_5\text{N}$ spectrum, becoming a clear shoulder on the band at 2173 cm^{-1} (blue curve in Figure 1). The shift to a higher wavenumber is consistent with the signature of nitrile functionalities branched on aromatic rings (Sciamma-O’Brien et al. 2017).

The absorption features in zone I are consistent with the formation of nitrile and iso-nitrile functions, primarily branched from aliphatic structures, for the three tholins samples—even in the experiment with only pyridine as the carbon source. However, some of the nitrile and iso-nitrile functional groups may also be branched from aromatic rings, as suggested by the contribution of a signature at around 2240 cm^{-1} . This signature is especially prominent in the samples produced with pyridine.

Zone II shows a new band appearing between 1900–2100 cm^{-1} in the spectra of samples produced with pyridine. Four main peaks can be distinguished within the $\text{N}_2\text{-CH}_4\text{-C}_5\text{H}_5\text{N}$ (green curve) at positions 1922, 1973, 2026, and 2074 cm^{-1} . These bands have also been observed in recent

work by Sciamma-O’Brien et al. (2017) in tholins produced with mixtures of nitrogen, methane, and benzene.

This spectral region does not match with any fundamental vibration of organic chemical functional groups, but we can confidently attribute them to aromatic derivatives overtones (ν_{0-3}) because of the following.

1. A recent simulation study on the fundamental fingerprints (ν_{0-1}) of 51 pure PAHs has shown the spectral region between 730 and 910 cm^{-1} corresponds to out-of-plane CH bending at the edge of the aromatic cycle (Tommasini et al. 2016).
2. Overtone signatures are due to the n harmonic of the fundamental vibrational state (ν_{0-1}) of a molecule, corresponding to the ν_{0-n} transition (Young et al. 1951; Kendall 1966).
3. The frequencies of overtones do not correspond exactly to n -times the frequency of the fundamental vibration, but rather are expected to show some shift toward a lower wavenumber due to the anharmonicity of molecules (Herzberg 1950).
4. Gautier et al. (2017) also reported the detection of polymeric patterns in the mass spectra of tholins produced with gas mixture of nitrogen, methane, and one or two rings aromatics. These were interpreted as a possible signature of aromatic functions within the structure of tholins produced in such a gas mixture.

The detection of these C–H out-of-plane bending at the edge of the aromatic cycle overtones, in a region free of fundamental vibration of any other organic chemical functional groups, confirms the inclusion of aromatic cycles in the macromolecular structure of our tholins and provides a first observational opportunity for the determination of aromatic content of Titan’s aerosols.

Table 2
List of the Absorption Bands Detected in the 4.1–5.3 μm Spectral Range

Region	$\text{N}_2\text{-CH}_4$		$\text{N}_2\text{-C}_2\text{H}_5\text{N}$		$\text{N}_2\text{-CH}_4\text{-C}_2\text{H}_5\text{N}$		Potential Attributions
	Center μm (cm^{-1})	Intensity	Center μm (cm^{-1})	Intensity	Center μm (cm^{-1})	Intensity	
I	4.65 (2151)	m	4.68 (2137)	m	4.66 (2145)	w	$-\text{N}=\text{C}=\text{N}-$ (l), $-\text{CN}$ (m)
	4.62 (2164)	vs	4.60 (2173)	vs	4.62 (2163)	vs	Conjugated $-\text{CN}$, such as $-\text{C}=\text{C}(-\text{NH}_2)$ (l), $\text{C}-\text{NC}$ stretching (l), $-\text{NC}$ (m), $\text{C}_{\text{ar}}-\text{CN}?$
	4.52 (2210)	w	4.54 (2204)	w	$\text{C}_{\text{ar}}-\text{NC}?$
	4.48 (2230)	w	4.48 (2233)	m	4.47 (2235)	w	$\text{R}-\text{NC}$ stretching (l), $-\text{N}=\text{C}=\text{N}-$ (m)
II	5.20 (1922)	m	Overtone $\text{C}-\text{H}$ (solo)
	5.05 (1980)	vw	5.06 (1977)	w	5.06 (1975)	s	Overtone $\text{C}-\text{H}$ (duo)
	4.94 (2025)	w	4.92 (2032)	s	Overtone $\text{C}-\text{H}$ (trio)
	4.89 (2045)	vw	4.84 (2067)	w	Overtone $\text{C}-\text{H}$ (quatro)

Note. Potential attribution of peaks in regions I are taken from (1) Imanaka et al. (2004) and (2) Gautier et al. (2012). Band intensity legend: vs = very strong; s = strong, m = medium, w = weak, vw = very weak.

Thus, we suggest that the observation of these bands, which could be partially detectable in the *Cassini*/VIMS-infrared (IR) observational range, would provide the strongest indication yet regarding the aromaticity of Titan's aerosols.

4. Conclusion

In this Letter we have identified a strongly indicative signature of aromaticity of Titan's aerosol analogs in the 4.3–5.1 μm spectral range. This signature is attributed to overtones of the aromatic structural vibrations of the aerosols. The latter frequencies correspond to out-of-plane bending vibrations in the 11.7–15.4 μm spectral range. Two instruments on *Cassini* have been able to observe the Titan atmosphere at these wavelengths. The fingerprint frequencies would be in the FP3 window of the CIRS instrument, and were tentatively reported by Vinatier et al. (2012) with a signature at 13.25 μm . The corresponding overtones would be within the VIMS-IR spectral range.

Regarding a search for an aromatic signature in Titan's aerosols, our results indicate that targeting the overtones in the existing VIMS-IR data and the fingerprint frequencies in the CIRS-FP3 window would provide a strategy for complementary detections.

Our work, therefore, provides a new detection opportunity for aromatic signature in Titan's aerosols using the 4.1–5.3 μm range of the VIMS-IR instrument. Such a detection could provide the most convincing evidence of the possible aromaticity of Titan's aerosols. The aromatic or aliphatic nature of Titan's aerosols is an important issue, as these functionalities affect optical properties and chemical activity. A significant aromatic component in the aerosol would induce a different fate of the aerosols both in the atmosphere and on Titan's surface, for example regarding their reactivity at low altitude or on the surface (Gudipati et al. 2013) and their respective solubility in Titan's lakes (Cable et al. 2012; Malaska & Hodyss 2014; Chevrier et al. 2015).

C.M. wishes to thank the Paris Observatory for its financial support for this work. N.C. thanks the European Research Council for its financial support under the ERC PrimChem project (grant agreement No. 636829). M.G.T. thanks the NASA Solar System Workings Program for financial support.

The authors thank Fabrice Duvernay for the fruitful discussion on the anharmonicity of overtones signatures.

ORCID iDs

Christophe Mathé  <https://orcid.org/0000-0002-2905-9001>
Nathalie Carrasco  <https://orcid.org/0000-0002-0596-6336>

References

- Anderson, C. M., & Samuelson, R. E. 2011, *Icar*, **212**, 762
Brown, R. H., Baines, K. H., Bellucci, G., et al. 2005, *SSRv*, **115**, 111
Cable, M. L., Hörst, S. M., Hodyss, R., et al. 2012, *Chem. Rev.*, **112**, 3
Chevrier, V. F., Luspay-Kuti, A., & Singh, S. 2015, *LPSC*, **1832**, 2763
Coates, A. J., Crary, F. J., Lewis, G. R., et al. 2007, *GeoRI*, **34**, L22103
Coustenis, A., Jennings, D. E., Nixon, C. A., et al. 2010, *Icar*, **207**, 461
Dinelli, B. M., López-Puertas, M., Adriani, A., et al. 2013, *GeoRL*, **40**, 1489
Gautier, T., Carrasco, N., Mahjoub, A., et al. 2012, *Icar*, **221**, 320
Gautier, T., Sebree, J. A., Li, X., et al. 2017, *P&SS*, **140**, 27
Gudipati, M. S., Jacovi, R., Couturier-tamburelli, I., Lignell, A., & Allen, M. 2013, *NatCo*, **4**, 1648
Herzberg 1950, *Molecular Spectra and Molecular Structure* (New York: Van Nostrand Reinhold)
Hörst, S. M. 2017, *JGRE*, **122**, 432
Imanaka, H., Khare, B. N., Elsila, J. E., et al. 2004, *Icar*, **168**, 344
Israël, G., Szopa, C., Raulin, F., et al. 2005, *Natur*, **438**, 796
Kendall 1966, *Applied Infrared Spectroscopy* (New York: Van Nostrand Reinhold)
Khare, B. N., Sagan, C., Arakawa, E. T., et al. 1984, *Icar*, **60**, 127
López-Puertas, M., Dinelli, B. M., Adriani, A., et al. 2013, *ApJ*, **770**, 132
Malaska, M. J., & Hodyss, R. 2014, *Icar*, **242**, 74
Niemann, H. B., Atreya, S. K., Demick, J. E., et al. 2010, *JGRE*, **115**, E12006
Sciamma-O'Brien, E., Carrasco, N., Szopa, C., Buch, A., & Cernogora, G. 2010, *Icar*, **209**, 704
Sciamma-O'Brien, E., Upton, K. T., & Salama, F. 2017, *Icar*, **289**, 214
Sebree, J. A., Trainer, M. G., Loeffler, M. J., & Anderson, C. M. 2014, *Icar*, **236**, 146
Smith, B. A., Soderblom, L., Beebe, R., et al. 1981, *Sci*, **212**, 163
Szopa, C., Cernogora, G., Boufendi, L., Correia, J. J., & Coll, P. 2006, *P&SS*, **54**, 394
Tommasini, M., Lucotti, A., Alfè, M., Ciajolo, A., & Zerbi, G. 2016, *AcSpA*, **152**, 134
Trainer, M. G., Sebree, J. A., Yoon, Y. H., & Tolbert, M. A. 2013, *ApJL*, **766**, L4
Vinatier, S., Rannou, P., Anderson, C. M., et al. 2012, *Icar*, **219**, 5
Vuitton, V., Yelle, R. V., & Mcewan, M. J. 2007, *Icar*, **191**, 722
Waite, J. H., Niemann, H. B., Yelle, R. V., et al. 2005, *Sci*, **308**, 982
Waite, J. H., Young, D. T., Cravens, T. E., et al. 2007, *Sci*, **316**, 870
Young, C. W., Du Vall, R. B., & Wright, N. 1951, *AnaCh*, **2**, 1

A.3.2 Article soumis à Icarus

Seasonal changes in the middle atmosphere of Titan from Cassini/CIRS observations: temperature and trace species abundance profiles

Christophe Mathé^{1a}, Sandrine Vinatier^a, Bruno Bézard^a, Sébastien Lebonnois^b, Nicolas Goriuss^c, Donald E. Jennings^c, Andrei Mamoutkine^d, Ever Guandique^e

^a*LESIA, Observatoire de Paris, Université PSL, CNRS, Sorbonne Université, Université de Paris, 5 place Jules Janssen, 92195 Meudon, France*

^b*Laboratoire de Météorologie Dynamique, Sorbonne Université, ENS, Université PSL, Ecole Polytechnique, Université Paris-Saclay, CNRS, France*

^c*NASA/Goddard Space Flight Center, Code 693, Greenbelt, MD 20771, USA*

^d*Department of Astronomy, University of Maryland, College Park, MD 20742, USA*

^e*ADNET Systems, Inc., Bethesda, MD 20817, USA*

Abstract

The Cassini/Composite InfraRed Spectrometer (CIRS) instrument has been observing the middle atmosphere of Titan over almost half a Saturnian year. We used the CIRS dataset processed through the up-to-date calibration pipeline to characterize seasonal changes of temperature and abundance profiles in the middle atmosphere of Titan, from mid-northern winter to early northern summer all around the satellite. We used limb spectra from 590 to 1500 cm^{-1} at 0.5- cm^{-1} spectral resolution, which allows us to probe different altitudes. We averaged the limb spectra recorded during each flyby on a fixed altitude grid to increase the signal-to-noise ratio. These thermal infrared data were analyzed by means of a radiative transfer code coupled with an inversion algorithm, in order to retrieve vertical temperature and abundance profiles. These profiles cover an altitude range of approximately 100 to 600 km, at 10- or 40-km vertical resolution (depending on the observation). Strong changes in temperature and composition occur in both polar regions where a vortex is in place during the winter. At this season, we observe a global enrichment in photochemical compounds in the mesosphere and stratosphere and a hot stratopause located around 0.01 mbar, both linked to downwelling in a pole-to-pole circulation cell. After the northern spring equinox, between December 2009 and April 2010, a stronger enhancement of photochemical compounds occurred at the north pole above the 0.01-mbar region, likely due to combined photochemical and dynamical effects. During the southern autumn in 2015, above the South pole, we also observed a strong enrichment in photochemical compounds that contributed to the cooling of the stratosphere above 0.2 mbar (~ 300 km). Close to the northern spring equinox, in December 2009, the thermal profile at 74°N exhibits an oscillation that we interpret in terms of an inertia-gravity wave.

Keywords: Titan, atmosphere, Infrared observations, Atmospheres, structure, Atmospheres, composition

1 1. Introduction

2 The Cassini spacecraft has been exploring the Saturnian system between July
3 2004 and September 2017. During almost half a Saturnian year, it performed
4 127 close flybys of Titan. The stratosphere and mesosphere of Titan are mainly
5 composed of N_2 (98.4%) and CH_4 (1.5%) with traces of dihydrogen, hydrocarbons,
6 nitriles and oxygen compounds (Bézard et al., 2014). The two main compounds,
7 N_2 and CH_4 , are dissociated by the ultraviolet solar flux and by electrons
8 from Saturn’s magnetosphere, which leads to the formation of photochemical
9 compounds and aerosols through complex pathways. One-dimensional photochemical
10 models, coupling neutral and ion chemistry together with vertical eddy transport
11 and condensation, have been developed by different groups (see, e.g. Krasnopolsky,
12 2014; Loison et al., 2015; Dobrijevic et al., 2016; Vuitton et al., 2019, for
13 the most recent ones). Saturn’s obliquity induces strong seasonal changes in
14 Titan’s atmosphere. In winter/summer seasons, general circulation models
15 (GCM) predict a pole-to-pole circulation cell in the middle atmosphere with
16 the ascending branch located at the summer pole and the descending branch
17 at the winter pole (Newman et al., 2011; Lebonnois et al., 2012; Lora et al.,
18 2015). A polar vortex, present during winter, vanishes in early spring. Around
19 the equinoxes, GCMs predict the presence of two equator-to-pole circulation
20 cells in the middle atmosphere, with an ascending branch at low latitudes and
21 descending branches at both poles (Newman et al., 2011; Lebonnois et al., 2012;
22 Lora et al., 2015). The descending branches of these pole-to-pole or equator-
23 to-pole circulation cells enrich in photochemical compounds and adiabatically
24 heats the mesosphere at high latitudes.

25 Various analyses of spectra recorded by the Cassini/CIRS (Composite InfraRed
26 Spectrometer) have highlighted seasonal changes in temperature and abundance
27 profiles (e.g. Vinatier et al., 2015; Teanby et al., 2017; Sylvestre et al., 2018;
28 Coustenis et al., 2018; Teanby et al., 2019). In particular, thermal and abundance
29 profiles in the middle atmosphere (between 20 and 0.001 mbar) have been
30 monitored by Vinatier et al. (2015) from 2006 to 2013. In the northern polar
31 region, the temperatures in the pressure range 0.4-0.002 mbar observed during
32 the winter, from 2006 to 2008, were higher than in the 2010-2011 period. This
33 probably results from the adiabatic heating provided by the descending branch
34 of the pole-to-pole circulation cell which is stronger during winter (Achterberg
35 et al., 2011). Still during winter, the northern polar region was enriched in
36 photochemical compounds compared to the equatorial region, from the lower
37 stratosphere (Sylvestre et al., 2018; Coustenis et al., 2018; Teanby et al., 2019)
38 to the mesosphere (Vinatier et al., 2015). Then, from 2009 to 2010, shortly after
39 northern spring equinox (August 2009), the northern polar region exhibited a
40 stronger enrichment in photochemical compounds above 0.1 mbar compared to
41 winter. This feature may result from a combination of dynamics and chemistry,

42 in which the solar flux reappearing after the polar night locally reactivates the
43 photochemical production of most species that are then transported downwards
44 by the equator-to-pole circulation cell (Vinatier et al., 2015). This study also
45 suggests that both equator-to-pole cells coexisted from at last January 2010
46 to at least June 2010. In the southern polar region, a mesospheric hot spot
47 around 0.01 mbar (~ 400 km) appeared between 2010 and 2011, likely due to
48 the increasing strength of the adiabatic heating provided by the descending air
49 branch (Vinatier et al., 2015; Teanby et al., 2017). During northern spring,
50 between 2012 and early 2015, Teanby et al. (2017) observed a cold mesosphere
51 near the south pole, which they attributed to a radiative effect linked to the
52 mesospheric enrichment in photochemical compounds inside the polar vortex.
53 This trace gas enrichment, likely resulting from downwelling in the pole-to-pole
54 circulation cell, was also observed in the lower stratosphere at 15 mbar (Sylvestre
55 et al., 2018). From 2015 onwards, the mesosphere near the south pole warmed
56 up, probably due to the increase of the subsidence velocity in the descending
57 branch of the circulation cell (Teanby et al., 2017).

58 We present here an analysis of the whole set of Cassini/CIRS limb spectra
59 recorded at 0.5-cm^{-1} resolution during 56 of the 127 Titan flybys. Our goal
60 is to document the seasonal changes in temperature and composition that take
61 place in the stratosphere and lower mesosphere, at all covered latitudes (poles,
62 mid-latitudes and equator), and during the entire Cassini mission from 2004
63 to 2017. Data selection is described in Section 2 and the methodology used
64 to retrieve the temperature and gas abundance profiles is detailed in Section
65 3. Thermal and abundance profiles of C_2H_2 , C_2H_4 , C_2H_6 , C_3H_4 , C_3H_8 , C_4H_2 ,
66 C_6H_6 , HCN, HC_3N and CO_2 are shown in Section 4. The results are discussed
67 in Section 5 and a brief conclusion is presented in Section 6.

68 2. Observations

69 The CIRS spectrometer was composed of three focal planes (FP) covering
70 the $10\text{-}1500\text{ cm}^{-1}$ wavenumber range: FP1 (10 to 600 cm^{-1}), FP3 (580 to 1100
71 cm^{-1}) and FP4 (1050 to 1500 cm^{-1}). We used both FP3 and FP4, which are
72 each composed of an array of 1×10 pixels. This linear shape is relevant for limb
73 viewing geometry, as the line-of-sight of each pixel traverses the atmosphere
74 down to a given tangent height, which varies from the surface to about 700
75 km. However, even for low tangent heights, limb spectra cannot probe deeper
76 than a pressure level of $\sim 5\text{-}6$ mbar (~ 115 km), due to the large increase of
77 the opacity in the molecular emission bands around this pressure level. Each
78 pixel has a $0.27\times 0.27\text{ mrad}^2$ field-of-view corresponding to a vertical resolution
79 varying from 10 to 40 km (comparable to a pressure scale height), depending
80 on the distance of the spacecraft to Titan during the flyby. More details on
81 the CIRS instrument are given in Kunde et al. (1996), Flasar et al. (2004) and
82 Jennings et al. (2017), and more details on the different types of observations
83 are given in Nixon et al. (2019).

84 We used the CIRS “global calibration” database described in Jennings et al.
85 (2017). We selected limb spectra with a spectral resolution of 0.5 cm^{-1} for which

86 gas molecular emission bands are well separated. Spectral selections cover the
87 entire Cassini mission, from the northern winter in December 2004 to the early
88 northern summer in September 2017, and pole-to-pole latitudes. Characteristics
89 of the observations that we used are listed in Table 1 (Appendix A).

90 In order to increase the signal-to-noise ratio, we averaged all available limb
91 spectra acquired during a given flyby and having close enough tangent heights
92 (see Appendix B for more details on our averaging method). For some flybys
93 (Tb, T06, T16, T28, T59, T84, T103, T120), we complemented the limb spectra
94 with an average of nadir spectra to extend the information available from the
95 retrievals to lower altitudes.

96 For a couple of observations, limb spectra with the highest tangent heights
97 presented negative continua in the 1075-1200 cm^{-1} spectral range due to calibration
98 problems. We developed a procedure that corrects this negative continuum,
99 and allowed us to determine the error due to this effect on temperature and
100 abundance profile retrievals (see Appendix C).

101 3. Retrieval methodology

102 CIRS acquired spectra of the thermal emission of Titan's atmosphere. Molecular
103 gases emit through their rotation and ro-vibration bands, the intensity of which
104 depends on both temperature and gas mixing ratio profiles. The continuum
105 emission is due to the haze opacity and collision-induced absorption of $\text{N}_2\text{-N}_2$,
106 $\text{N}_2\text{-H}_2$, $\text{N}_2\text{-CH}_4$ and $\text{CH}_4\text{-CH}_4$.

107 To infer thermal and molecular mixing ratio profiles from CIRS observations,
108 we proceeded in two steps. First, we retrieved the thermal profile by fitting the
109 ν_4 CH_4 band at 1306 cm^{-1} , assuming a constant methane mixing ratio of 1.48%,
110 as measured *in situ* by the GCMS instrument (Niemann et al., 2010). Impact of
111 this hypothesis on the retrieved thermal profiles is discussed in Appendix D. We
112 also assumed that temperature profiles did not vary with longitude as suggested
113 by Flasar et al. (2005). Molecular gas mixing ratio profiles were inferred in a
114 second step using the thermal profile retrieved in the first step.

115 Retrievals were performed using a line-by-line radiative transfer code coupled
116 with a constrained linear inversion algorithm, described in Conrath et al. (1998)
117 and Vinatier et al. (2015).

118 References for the spectroscopic data used here can be found in Vinatier et al.
119 (2010, 2015), except for the HCN, HC^{15}N and H^{13}CN spectroscopic files that
120 we updated from GEISA (Jacquinet-Husson et al., 2016). We also updated the
121 spectroscopic file of C_3H_8 by incorporating the pseudo line-lists of the ν_7 band
122 (1100-1200 cm^{-1}) and the ν_{21} band (900-940 cm^{-1}) from Sung et al. (2013).

123 3.1. Thermal profile retrievals

124 Temperature and haze optical depth vertical profiles were simultaneously
125 retrieved. We derived the haze optical depth from the fit of the observed
126 continuum in the 1080-1120 cm^{-1} spectral range, since this spectral range is
127 free of molecular band emission. The temperature profile was derived from the
128 fit of the ν_4 CH_4 band in the 1200-1330 cm^{-1} spectral range (Fig. 1).

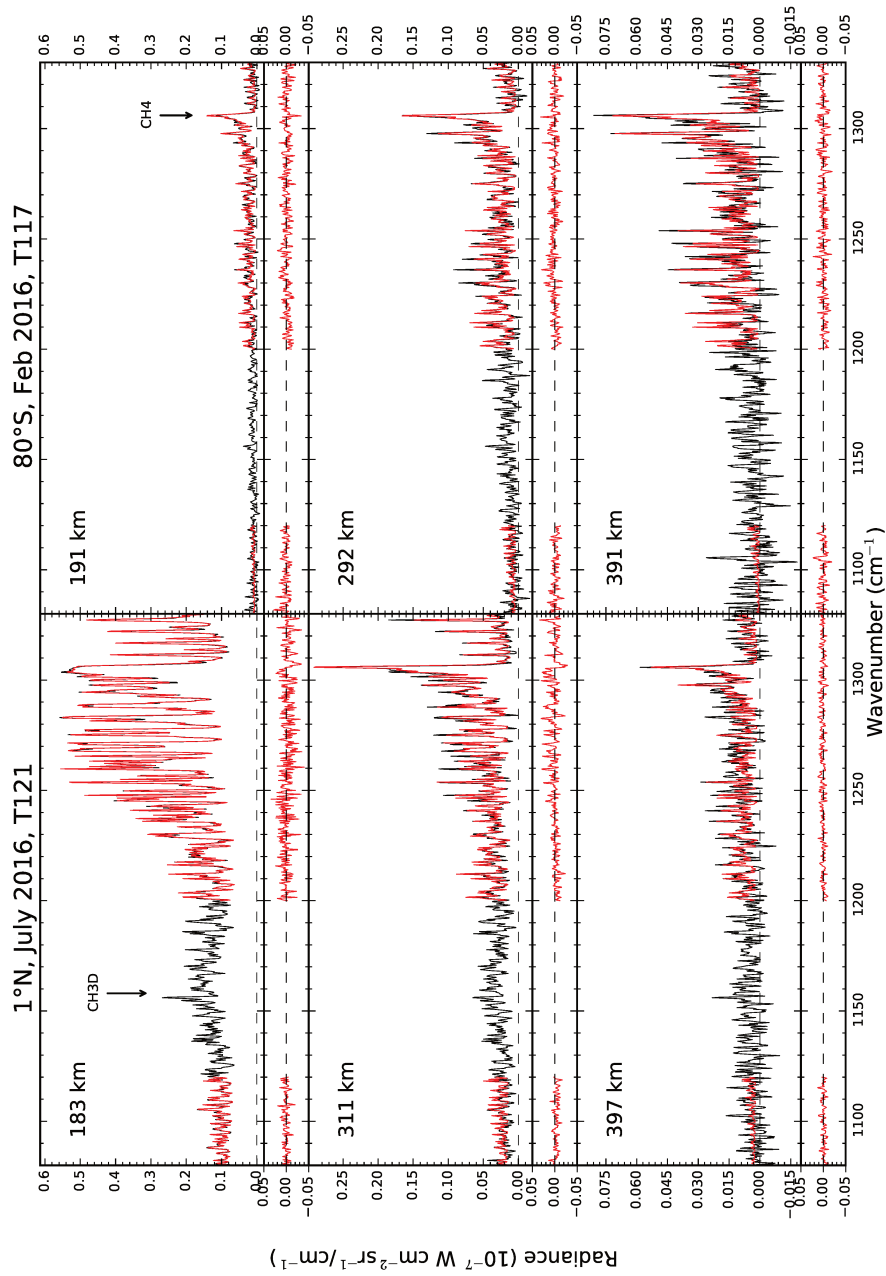


Figure 1: FP4 limb spectra near the equator (left column) and south pole (right column), during northern spring at similar altitudes. Black lines correspond to the observed spectra and red lines correspond to the synthetic ones. Residual radiances (observed - synthetic) are also plotted below. The altitudes correspond to the distance of the line-of-sight to the surface corrected by the vertical altitude shift. Molecules are indicated at the center of their bands.

129 We first determined the vertical shift to apply on the nominal altitude of the
 130 line-of-sight extracted from the CIRS database. This nominal altitude usually
 131 does not allow us to reproduce perfectly the relative intensity of the Q- and
 132 R- or P-branches of the ν_4 CH₄ band. The difference between the nominal
 133 and the physical altitude is due to: (i) CIRS navigation pointing errors and
 134 (ii) our calculated pressure/altitude grid derived from hydrostatic equilibrium
 135 incorporating the *in situ* temperature profile measured by HASI (Fulchignoni
 136 et al., 2005) below 120 km, while CIRS observations probe at higher altitudes.
 137 So, we ran retrievals of our deepest averaged spectra with different vertical shifts
 138 applied to the altitudes of their line-of-sights to infer the one that minimizes the
 139 root mean square (rms) residuals between calculated and observed limb spectra
 140 (see Appendix B).

141 After having set the altitude shift, we determined the spectral shift to
 142 apply to the observed spectra to obtain the best fit of the 1198-1330 cm⁻¹
 143 spectral range, covering the P-, Q- and part of R-branch of the ν_4 CH₄ band.
 144 During the Cassini mission, the CIRS reference wavelength laser changed mode
 145 about 15 times and the CIRS wavelength nominal calibration was performed by
 146 measuring the position of emission lines of methane near 1330 cm⁻¹ for each
 147 mode. The spectral shift was then estimated to be less than 0.01 cm⁻¹ at 1300
 148 cm⁻¹ (Jennings et al., 2017; Brasunas, 2012). However, we noticed from our
 149 extracted datasets that a slight spectral shift of 0.02 cm⁻¹ remained, which
 150 could be due to the thermal drift of the reference wavelength laser diode. We
 151 therefore systematically determined the spectral shift from FP3 and FP4 limb
 152 observations independently, since the spectral shift varies with wavenumber.

153 The 1- σ error on temperature and haze extinction profiles were derived from
 154 the propagation of the spectral noise in the retrievals and the error uncertainty
 155 on the vertical applied shift (δT_{shift}), which is typically of ± 2 km. The spectral
 156 noise contribution to the error bars was calculated from the covariance matrix
 157 of the solution using a tabulated noise equivalent spectral radiance, based on
 158 early observations during the mission, divided by the square root of the number
 159 of spectra (NESR) as the measurement error. However, the actual NESR varies
 160 with the observing sequence and is usually lower than the rms residuals between
 161 calculated and observed limb spectra. So we scaled the temperature error δT_{noise}
 162 due to propagation of the noise by a factor of $\max(\text{rms})/\max(\text{NESR})$, where
 163 $\max(\text{rms})$ is the maximum value of the rms residual for all limb spectra used in
 164 the inversion process and $\max(\text{NESR})$ is the value at 1330 cm⁻¹. The total 1- σ
 165 error on the temperature profile is then:

$$\delta T = \sqrt{(\delta T_{noise})^2 \times \left(\frac{\max(\text{rms})}{\max(\text{NESR})} \right)^2 + (\delta T_{shift})^2} \quad (1)$$

166 For observations in December 2006 (17°N) and January 2007 (4°N), highest
 167 limb spectra presented negative continua that we corrected through a procedure
 168 described in Appendix C. We added the error contribution of this correction that
 169 we estimated as the temperature difference between the retrievals for spectra
 170 with negative continuum spectra and those for the corrected spectra. We found

171 a maximum temperature difference of 5 K at high altitude (usually for tangent
 172 heights higher than 400 km) where corrupted limb spectra are most easily
 173 observed.

174 We also assessed the information content of our retrieved temperature and
 175 haze extinction profiles by using different *a priori* profiles as input to the
 176 retrieval process. We then defined the region of validity of our retrievals as
 177 the altitude range where they do not significantly vary with the assumed *a*
 178 *priori* profile.

179 3.2. Molecular gas volume mixing ratio profile retrievals

180 The molecules observed in the CIRS FP3 spectral range are: C₂H₂, C₂H₄,
 181 C₂H₆, C₃H₈, C₃H₄, C₄H₂, C₆H₆, HCN, HC₃N and CO₂ (Fig. 2). The spectral
 182 shift was determined from the fit of the 700-720 cm⁻¹ spectral range, which
 183 covers the P- and Q-branches of the ν₅ C₂H₂ band and the Q-branch of the
 184 ν₂ HCN band. The vertical shifts inferred from the FP4 limb spectra were
 185 applied to the FP3 limb spectra. As for the temperature retrievals, we tested
 186 the robustness of the retrieved gas mixing ratio profiles by using different *a priori*
 187 profiles. The haze extinction vertical profile retrieved from the FP4 spectra was
 188 used as the *a priori* profile in the retrieval of the haze extinction profile from
 189 the FP3 spectral range, taking into account the spectral dependency of the haze
 190 opacity derived from Vinatier et al. (2012).

191 Molecular gas mixing ratio and haze extinction profiles were retrieved simultaneously
 192 in a given spectral range. We retrieved in a first step the mixing ratio profiles
 193 of C₂H₂ (ν₅ band at 729 cm⁻¹), HCN (ν₂ band at 712 cm⁻¹) and the haze
 194 extinction in the 698-742 cm⁻¹ spectral range, since C₂H₂ has the most intense
 195 emission band in the FP3 spectral range. Then, we retrieved C₂H₆ (ν₉ band
 196 at 822 cm⁻¹), C₃H₈ (ν₂₁ band at 748 cm⁻¹) mixing ratios and haze extinction
 197 from the inversion of limb spectra in the 738-843 cm⁻¹ spectral range. Next,
 198 we retrieved C₃H₄ (ν₉ band at 633 cm⁻¹), C₄H₂ (ν₈ band at 628 cm⁻¹) mixing
 199 ratios and haze extinction from the 595-651 cm⁻¹ spectral range. HC₃N (ν₅
 200 band at 663 cm⁻¹), CO₂ (ν₂ band at 667 cm⁻¹), C₆H₆ (ν₄ band at 673 cm⁻¹)
 201 mixing ratios and haze extinction were retrieved simultaneously from the 658-
 202 680 cm⁻¹ spectral range. In a last step, we retrieved the C₂H₄ (ν₇ band at 949
 203 cm⁻¹) mixing ratio and haze extinction profiles from the 898-990 cm⁻¹ spectral
 204 range.

205 For spectra in which C₆H₆ or HC₃N were not detected, we estimated the
 206 2-σ upper limit on their mixing ratios following the methodology described in
 207 Nixon et al. (2010).

The total relative error on the retrieved mixing ratio is the quadratic sum of
 the errors due to the spectral noise propagation, the uncertainty on the altitude
 shift $(\frac{\delta q}{q})_{shift}$ and on the temperature profile $(\frac{\delta q}{q})_{\Delta T}$:

$$\frac{\delta q}{q} = \sqrt{\left(\frac{\delta q}{q}\right)_{noise}^2 \times \left(\frac{max(rms)}{max(NESR)}\right)^2 + \left(\frac{\delta q}{q}\right)_{shift}^2 + \left(\frac{\delta q}{q}\right)_{\Delta T}^2} \quad (2)$$

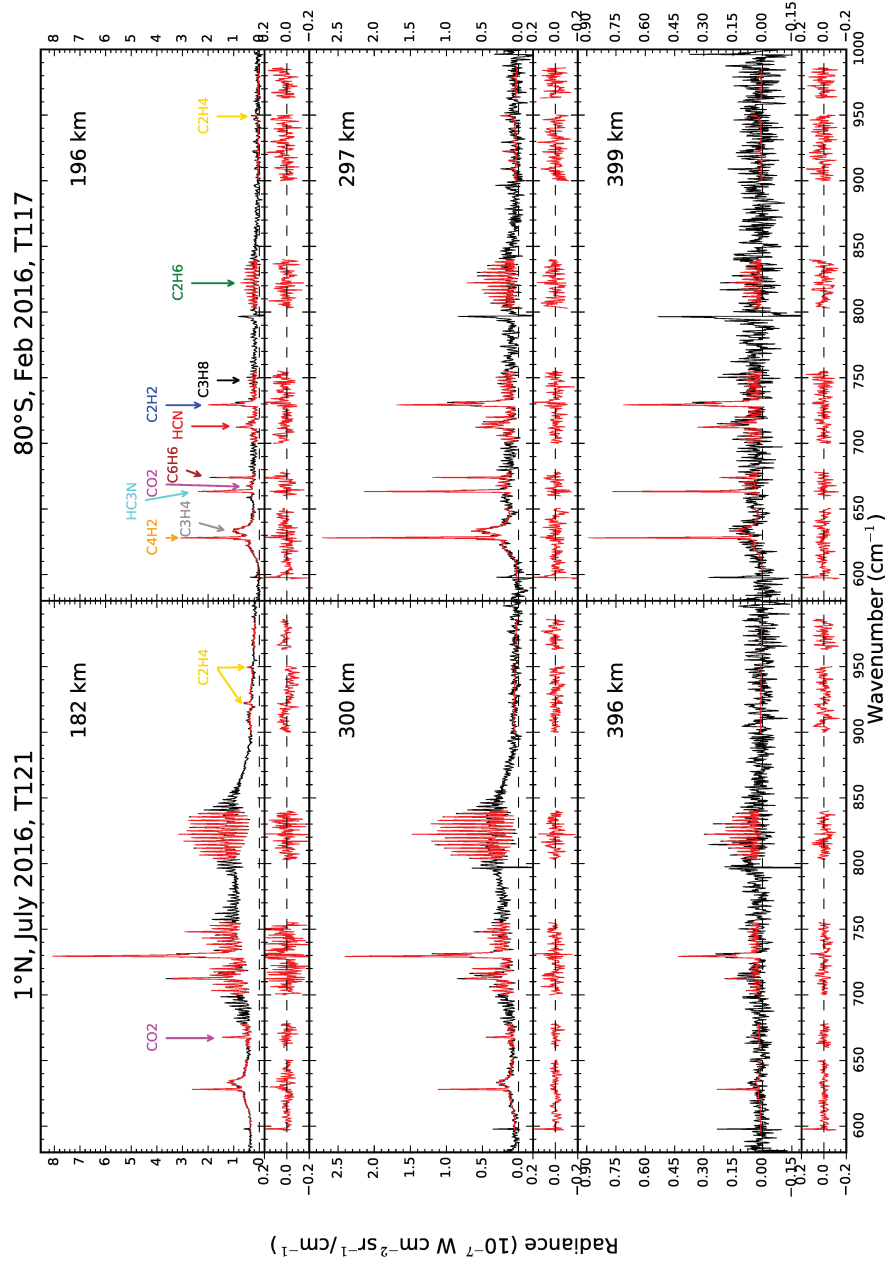


Figure 2: Same as Fig. 1 for FP3 limb spectra near the equator (left column) and south pole (right column) during northern spring at similar altitudes. The features close to 598 and 795 cm^{-1} are due to instrumental noise.

208 4. Results

209 4.1. Thermal profiles

210 Figure 3 shows the thermal profiles retrieved from the limb observations
211 listed in Table 1. These thermal profiles are gathered by latitude range, from
212 top to bottom: north pole (90°N to 60°N), mid-north (60°N to 20°N), equator
213 (20°N to 20°S), mid-south (20°S to 60°S) and south pole (60°S to 90°S) and by
214 season, from left to right: northern winter (December 2004 to December 2008),
215 northern spring equinox (March 2009 to April 2010) and northern spring (July
216 2010 to May 2017).

217 4.1.1. High northern latitudes

218 During northern winter, the northern polar region above 0.1 mbar (~ 270
219 km) is hotter than the equatorial region, with a temperature maximum of ~ 205
220 K at $\sim 10^{-2}$ mbar (~ 400 km) in February 2005 at 82°N, which is the warmest
221 temperature ever observed. In contrast, the northern polar region is colder than
222 the equatorial region below 0.1 mbar (~ 270 km), e.g. at most 150 K at 1 mbar
223 (~ 175 km) in 2005 at 82°N *vs* ~ 170 K in the equatorial region. Near 4 mbar,
224 the temperature in all four profiles is less than 140 K, more than 15 K lower
225 than at equatorial latitudes.

226 From August 2007 to June 2009, i.e. near northern spring equinox, the
227 northern polar region has been cooling in the $0.3\text{--}3 \times 10^{-3}$ mbar ($\sim 310\text{--}430$ km)
228 region, by e.g. ~ 23 K at 10^{-2} mbar (~ 360 km). In December 2009 at 74°N, the
229 thermal profile presented an oscillation between 4×10^{-2} mbar (~ 310 km) and
230 10^{-3} mbar (~ 490 km) that is discussed in Section 5.3.

231 During northern spring, from December 2011 to January 2015, the northern
232 polar region warmed up by ~ 7 K between 10 mbar (~ 90 km) and 1 mbar (~ 170
233 km), and by ~ 15 K between 1 mbar and 0.1 mbar (~ 280 km). On the other
234 hand, above 0.02 mbar (~ 370 km), temperature did not significantly vary in
235 this time lapse. In January 2015, the temperature maximum in the northern
236 polar region was located around 0.1 mbar, two pressure scale heights lower than
237 in 2005, and then similar to the location of the stratopause in the equatorial
238 region.

239 4.1.2. Northern mid-latitudes

240 During northern winter, between May 2006 and May 2008, thermal profiles
241 at latitudes poleward of 40°N were ~ 5 K colder than that at 31°N between 7
242 mbar (~ 105 km) and 0.1 mbar (~ 280 km). The 31°N profile was similar to
243 those in the equatorial region. In contrast, thermal profiles above 40°N were
244 ~ 10 K warmer above 0.02 mbar (~ 370 km) than the one at 31°N. At these
245 latitudes, the temperature around 0.02 mbar decreased from ~ 190 K in May
246 2006 to ~ 177 K in May 2008.

247 Around northern spring equinox in May 2009, the temperature profile at
248 22°N was close to the profile at 31°N in January 2007 between 9 mbar (~ 100
249 km) and 0.5 mbar (~ 210 km), but colder in the 0.2-0.5 mbar region. These

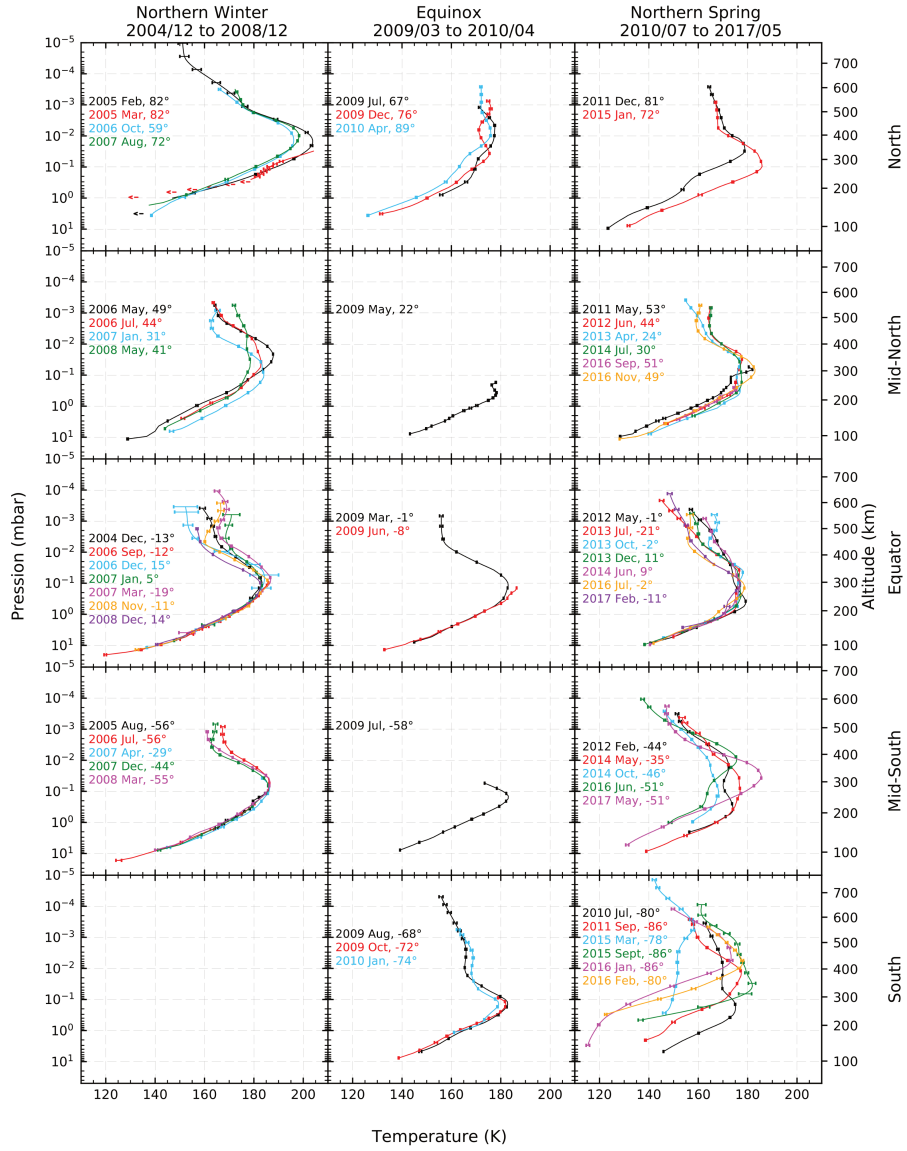


Figure 3: Thermal profiles in the middle atmosphere of Titan. Each row corresponds to a given latitude region: from top to bottom, north pole to south pole. Each column corresponds to a season: left to right, northern winter to northern spring. On each thermal profile, the $1\text{-}\sigma$ errors at the pressure level corresponding to the lines-of-sight of the spectra used for the retrievals are plotted. Arrows correspond to $2\text{-}\sigma$ upper limits. The altitude grid is calculated using the temperature profile of: October 2006 for north, June 2012 for mid-north, May 2012 for equator, June 2016 for mid-south and October 2009 for south.

250 data are at high vertical resolution (~ 10 km) and do not extend higher than 0.1
251 mbar (~ 285 km).

252 During northern spring, the stratosphere warmed up by about 3 K between
253 5 mbar (~ 120 km) and 0.3 mbar (~ 235 km) from May 2011 (53°N) to June 2012
254 (44°N). The temperature profile was roughly isothermal between 0.3 mbar and
255 0.04 mbar (~ 330 km) from June 2012 to July 2014 ($T \sim 175$ K). In November
256 2016, the temperature had increased in this altitude region, reaching a maximum
257 of 183 K at 0.08 mbar (~ 295 km).

258 *4.1.3. Equatorial latitudes*

259 Over the Cassini mission, the lower stratosphere, below the 0.5-mbar level,
260 did not show temperature variations in excess of 5 K at equatorial latitudes.
261 In the 0.1-mbar region, we do not observe strong variations between December
262 2004 and June 2009 ($T \sim 175$ K), while in the 2012-2017 period, the temperature
263 is ~ 7 K lower. Higher, around 0.01 mbar, the situation is less clear but the
264 temperature overall decreases by some 10 K between 2012 and 2017. In the
265 μbar region, thermal profiles show variations over the mission that are correlated
266 neither with latitude nor local time.

267 *4.1.4. Southern mid-latitudes*

268 During southern summer (2004-2008), temperature profiles at southern mid-
269 latitudes did not present strong variations and were quite similar to those around
270 the equator at the same period.

271 Near southern autumn equinox, in July 2009 at 58°S , the stratosphere had
272 slightly cooled, by ~ 2 K between 8 mbar (~ 110 km) and 0.07 mbar (~ 310 km),
273 compared with southern summer conditions.

274 During southern autumn, the atmosphere in February 2012 (44°S) was ~ 2
275 K warmer between 10 mbar (~ 100 km) and 1 mbar (~ 185 km) than that in
276 July 2009 (58°S), while above the 1-mbar level the temperature was lower.
277 The temperature minimum observed in the 44°S -profile near 0.05 mbar (~ 320
278 km) could be due to an oscillation as it is not present in the thermal profile
279 in May 2014 (35°S). This oscillation is similar to that observed in December
280 2009 at 74°N and discussed in Section 5.3. Between May 2014 (35°S) and
281 October 2014 (46°S), the temperature decreased between 1 mbar (~ 180 km)
282 and 2×10^{-4} mbar (~ 575 km), e.g. by ~ 8 K at 0.1 mbar (~ 275 km). Then in
283 June 2016 (51°S), the atmosphere above 0.05 mbar (~ 300 km) had warmed up
284 compared to October 2014 (46°S), by ~ 11 K at 0.01 mbar (~ 375 km), the local
285 temperature maximum, and cooled down below 0.05 mbar by ~ 6 -7 K. Between
286 June 2016 and May 2017 (51°S), the temperature strongly increased between
287 0.3 mbar (~ 225 km) and 0.01 mbar (~ 390 km), by up to ~ 20 K at 0.04 mbar
288 (~ 320 km), which is the local temperature maximum. In the lower stratosphere
289 (0.5-5 mbar), the atmosphere cooled by approximately 15 K between 2012 and
290 2017.

291 *4.1.5. High southern latitudes*

292 During southern summer, CIRS did not record limb spectra at 0.5-cm^{-1}
293 spectral resolution in the south polar region.

294 Around southern autumn equinox, temperature profiles at high southern
295 latitudes did not present strong variations between August 2009 and January
296 2010, being actually similar to the thermal profile near the equator in March
297 2009 below the 0.05-mbar level. Still, we observed a slight cooling between 0.7
298 mbar (~ 195 km) and 0.03 mbar (~ 350 km) during this period, reaching ~ 5 K
299 at 0.1 mbar (~ 290 km), while between 0.03 mbar and 0.001 mbar (~ 520 km)
300 the temperature increased by ~ 3 K.

301 The evolution of the temperature profiles is much more dramatic during
302 southern autumn between 2010 and 2016. At first, we observe a limited decrease
303 in temperature between January 2010 (74°S) and July 2010 (80°S) in the range
304 0.4-0.05 mbar (220-320 km), reaching ~ 3 K at 0.2 mbar (255 km), and a slight
305 increase in the range 0.01-0.001 mbar (395-510 km). Fourteen months later, in
306 September 2011 (86°S), temperature had increased in the range $0.08\text{-}4\times 10^{-3}$
307 mbar (280-430 km), by as much as ~ 7 K at 0.01 mbar (380 km), while the
308 region below the 0.08-mbar level strongly cooled, e.g. by ~ 16 K at 1 mbar (175
309 km). In March 2015 (78°S), the whole region below the 4×10^{-4} -mbar (500 km)
310 region had strongly cooled compared to September 2011, by as much as ~ 26
311 K at 0.01 mbar (~ 350 km). Only six months later, in September 2015 (86°S),
312 we observe a strong increase in temperature below the 10^{-4} -mbar region (~ 595
313 km), reaching ~ 31 K at 0.04 mbar (285 km). A few months later, in January
314 (86°S) and February (80°S) 2016, the thermal profiles had strongly cooled down
315 below 0.01 mbar (~ 325 km), by as much as ~ 30 K at 0.2 mbar (210 km), while
316 they had not changed much above this pressure level.

317 *4.2. Molecular gas volume mixing ratio profiles*

318 Figures 4 to 13 show the gas mixing ratio profiles of: C_2H_2 , C_2H_4 , C_2H_6 ,
319 C_3H_4 , C_3H_8 , C_4H_2 , C_6H_6 , HCN, HC_3N and CO_2 retrieved using the limb
320 observations listed in Table 1.

321 Carbon dioxide (CO_2) does not exhibit strong seasonal variations at any
322 latitude. The profiles show a local maximum around 1 mbar (~ 190 km) at all
323 latitudes, except during the northern winter at high northern latitudes (Fig. 4).
324 The peak-to-peak amplitude of this variation is at most a factor of two. We will
325 not discuss further the CO_2 mixing ratio profiles in the following sections.

326 *4.2.1. High northern latitudes*

327 Seasonal changes of abundance profiles in the northern polar region are also
328 shown in Fig. 14. During northern winter, from February 2005 to August 2007,
329 the abundances of most photochemical compounds between 10 mbar (~ 100 km)
330 and 10^{-4} mbar (~ 690 km) were larger than at equatorial latitudes at the same
331 season. The difference amounts to a factor of 3-5 for C_3H_4 , C_4H_2 , C_2H_4 , C_6H_6
332 and a factor of 50 for HC_3N at 1 mbar (~ 175 km). On the other hand, the
333 C_2H_6 and C_3H_8 profiles did not show significant differences with their equatorial

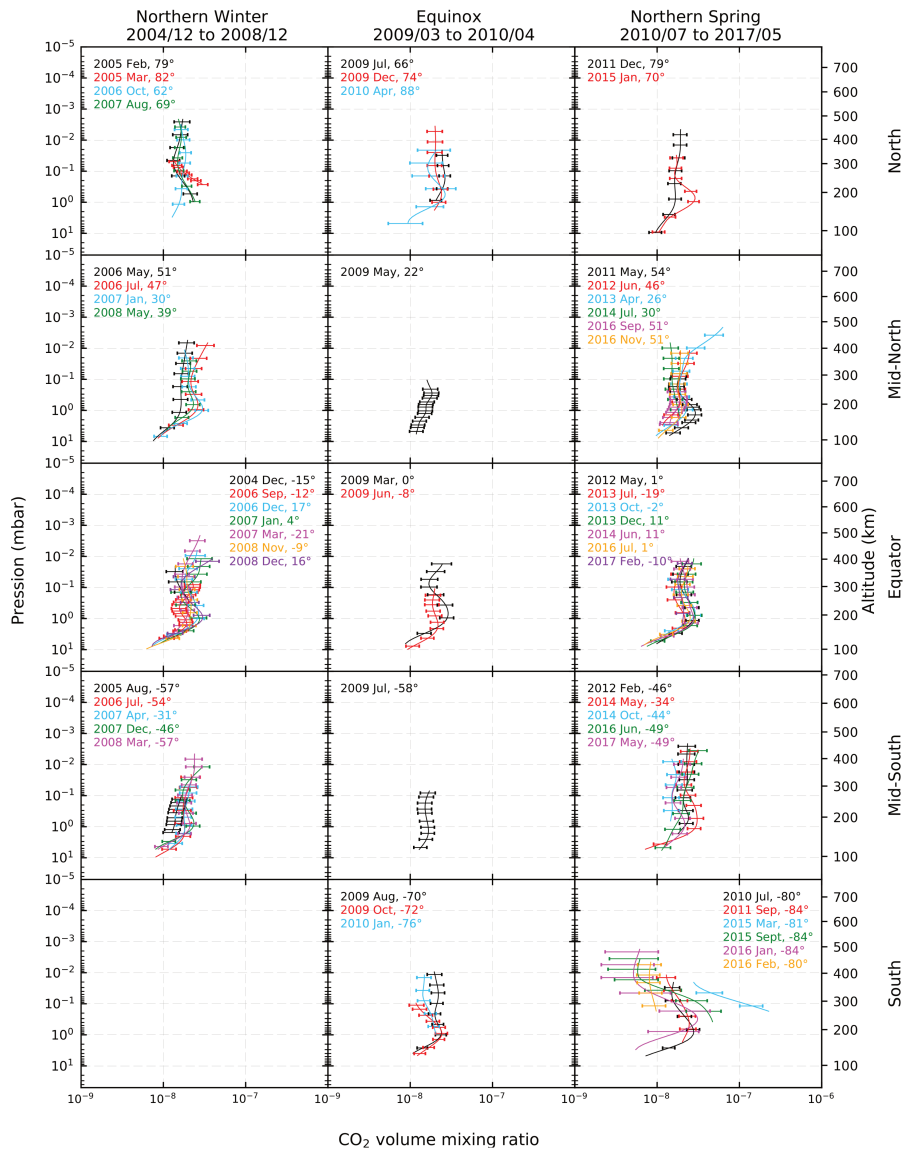


Figure 4: CO₂ gas volume mixing ratio profiles in the middle atmosphere of Titan. Same format as Fig. 3.

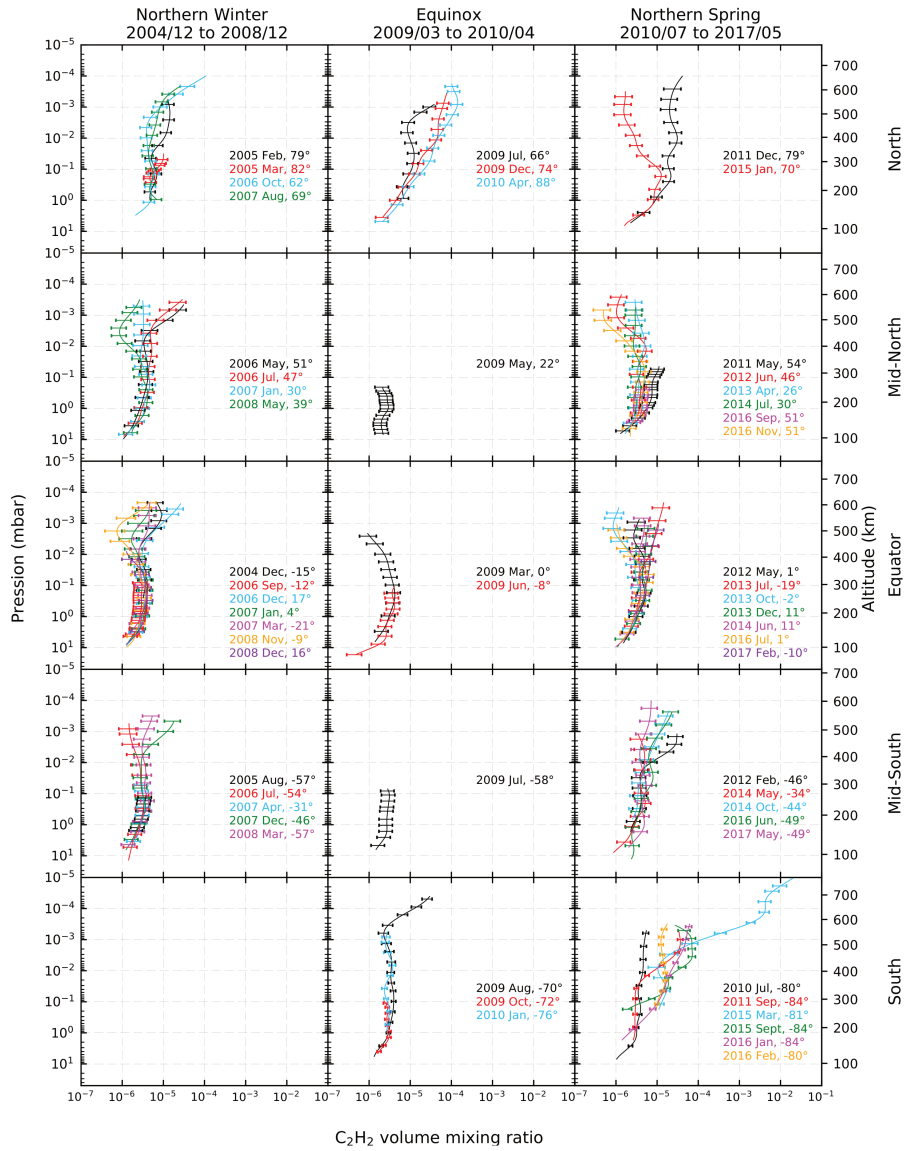


Figure 5: C_2H_2 gas volume mixing ratio profiles in the middle atmosphere of Titan. Same format as Fig. 3.

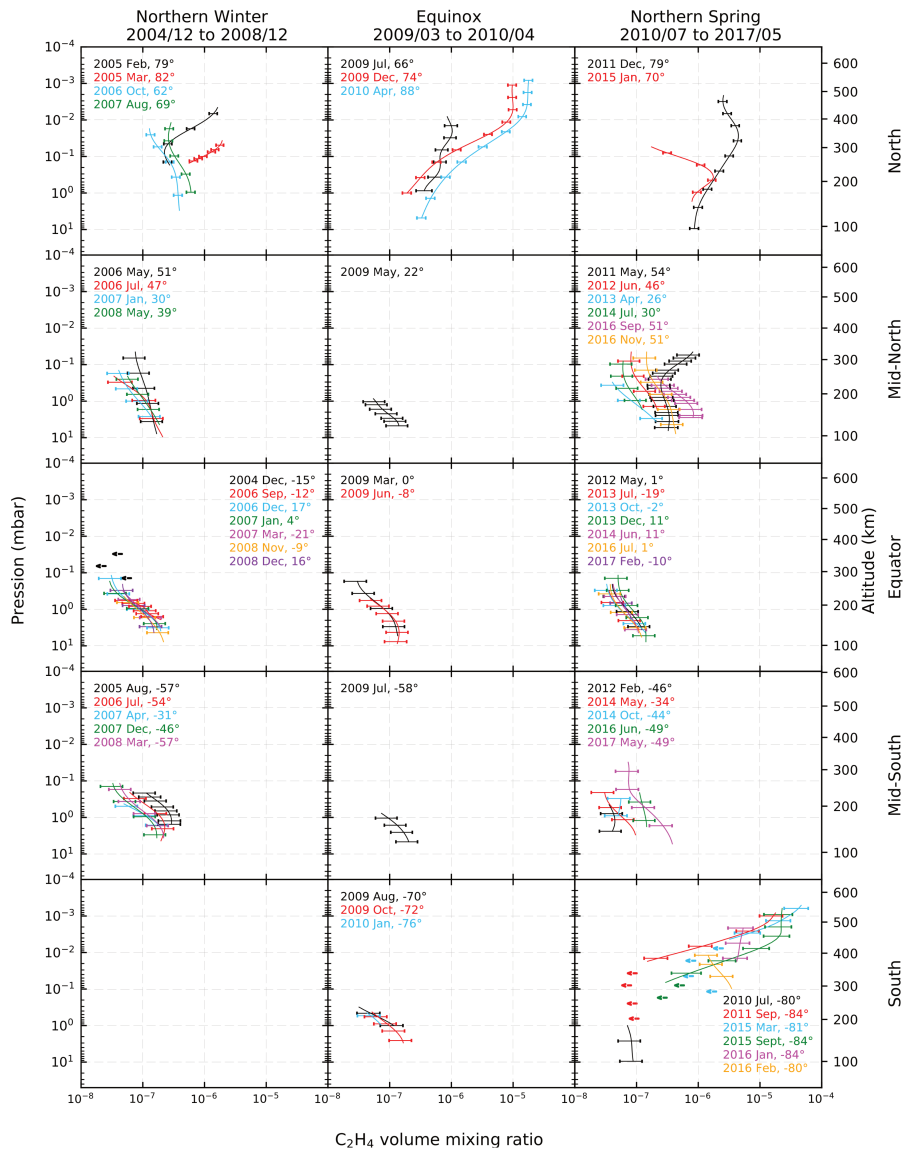


Figure 6: C_2H_4 gas volume mixing ratio profiles in the middle atmosphere of Titan. Same format as Fig. 3.

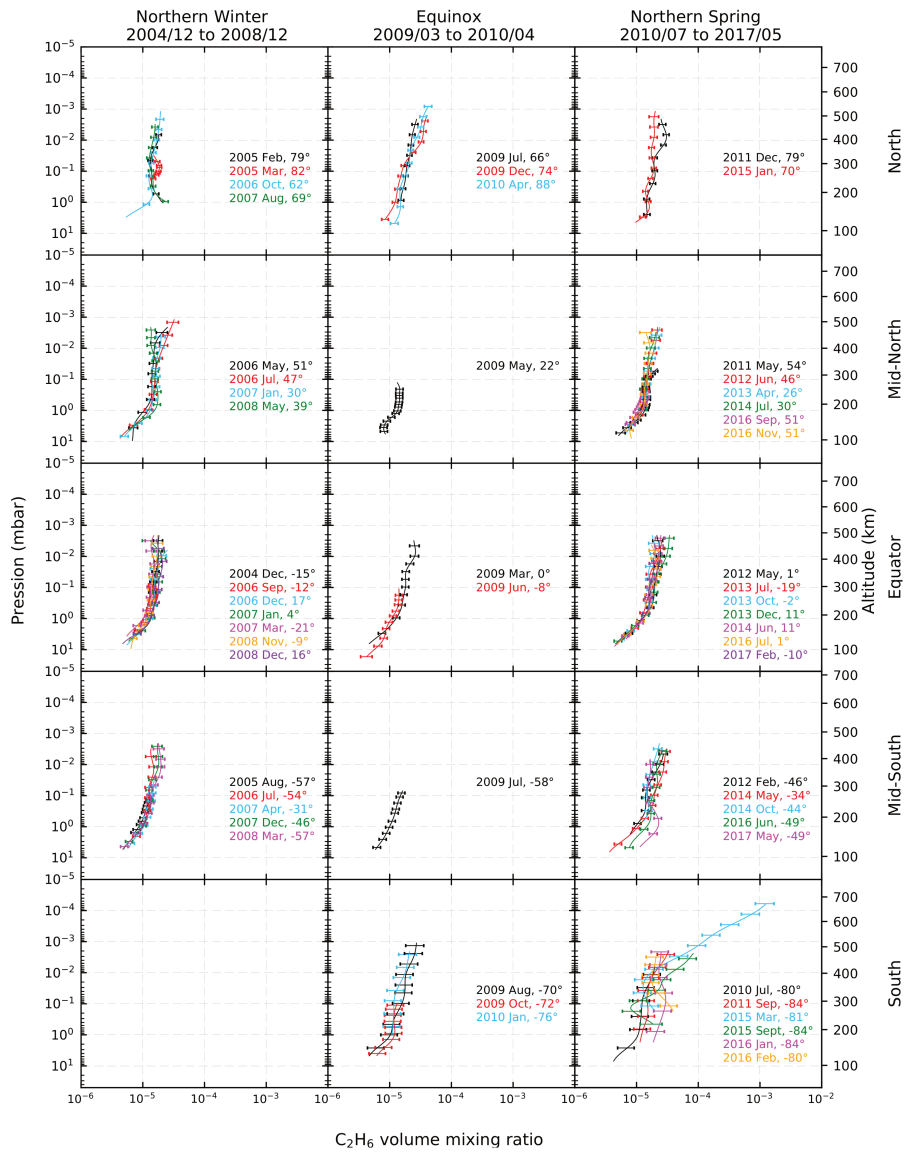


Figure 7: C_2H_6 gas volume mixing ratio profiles in the middle atmosphere of Titan. Same format as Fig. 3.

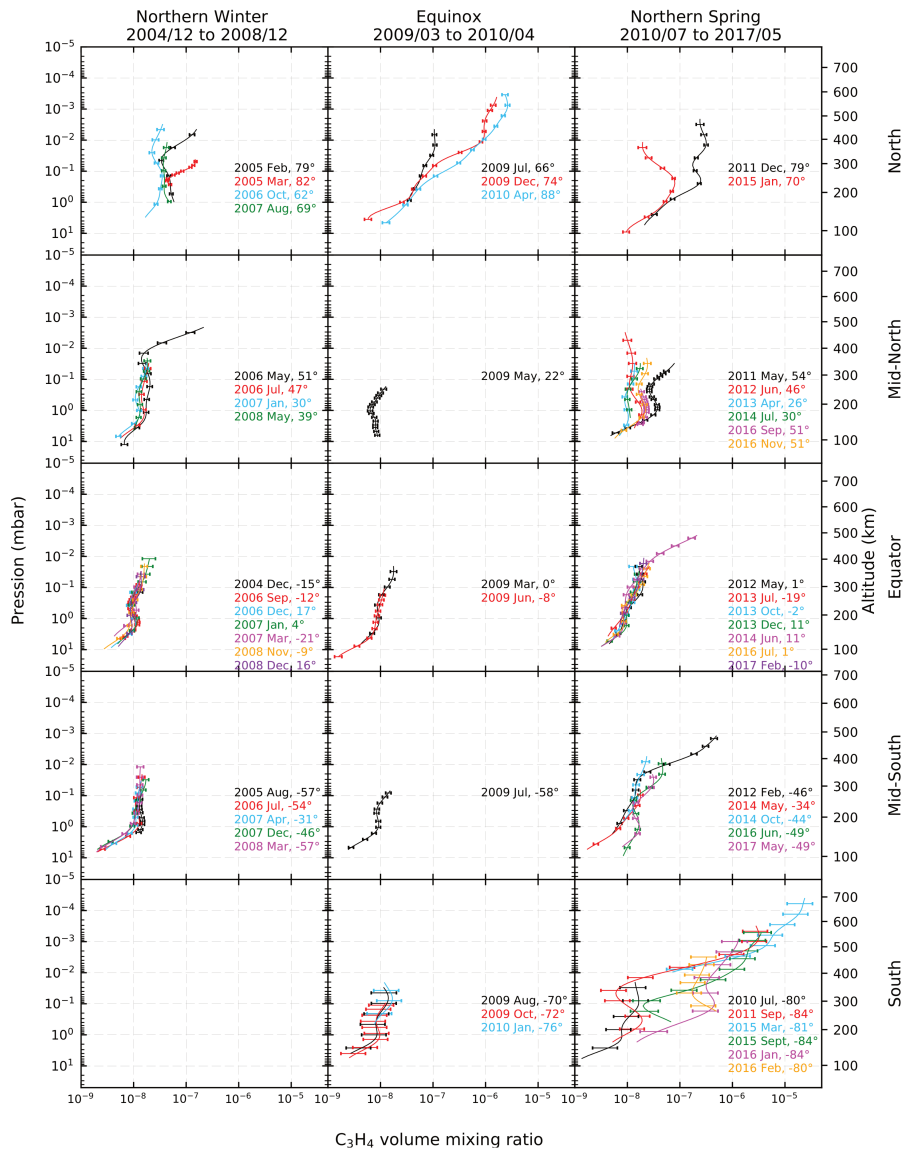


Figure 8: C_3H_4 gas volume mixing ratio profiles in the middle atmosphere of Titan. Same format as Fig. 3.

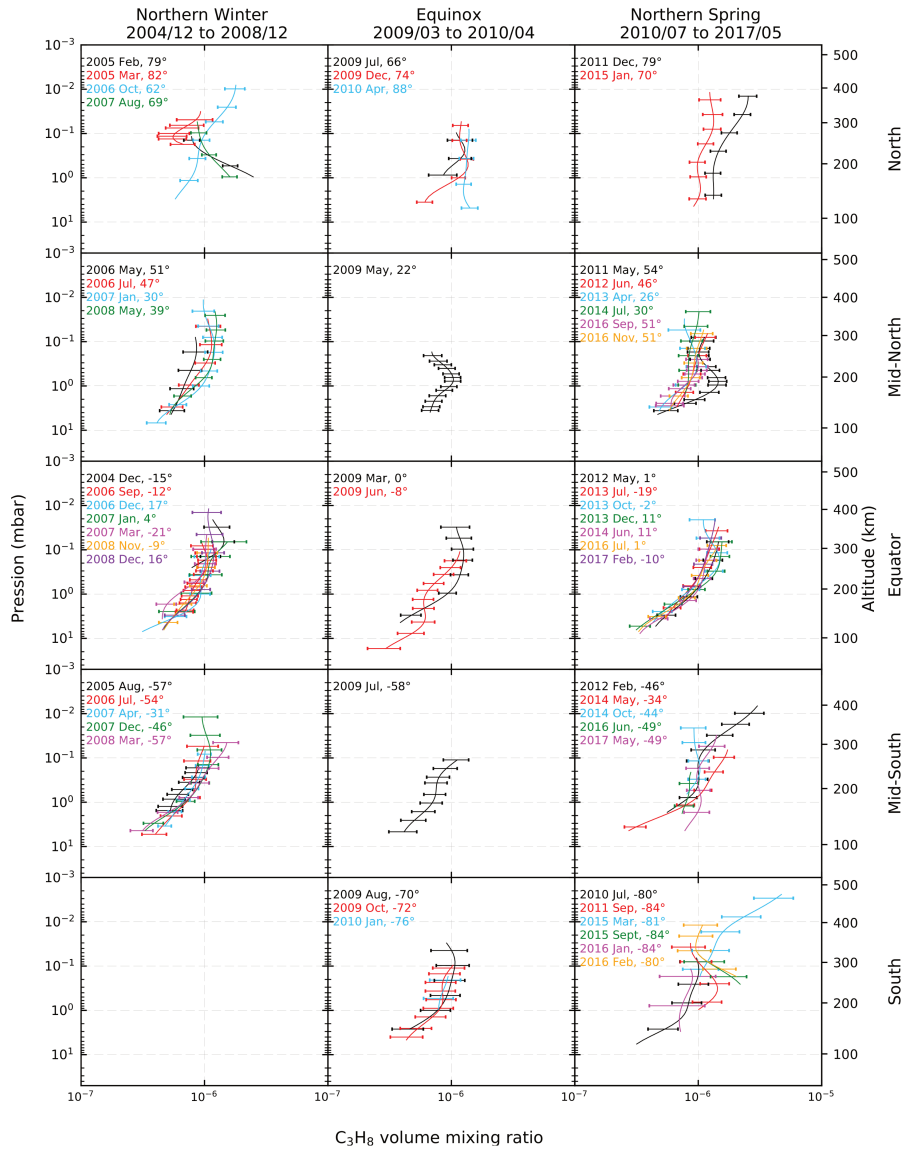


Figure 9: C_3H_8 gas volume mixing ratio profiles in the middle atmosphere of Titan. Same format as Fig. 3.

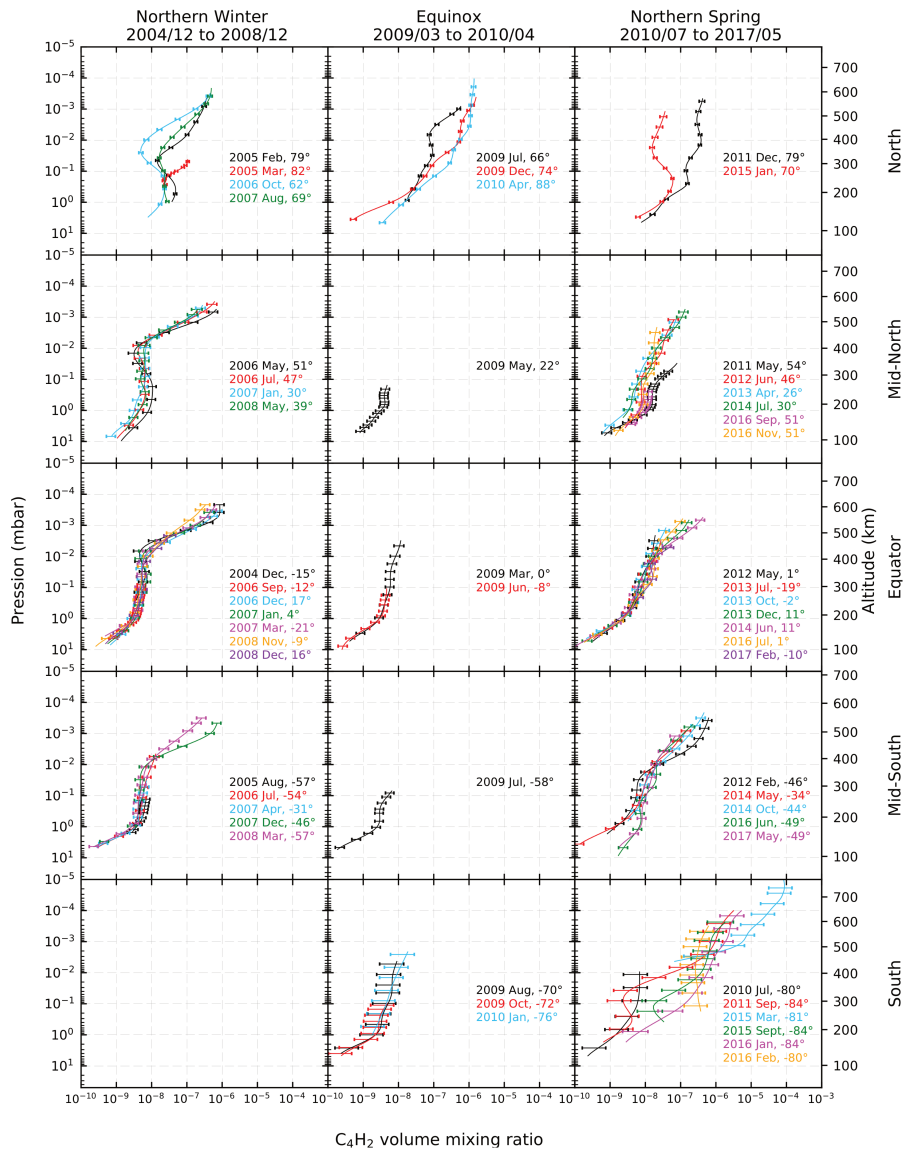


Figure 10: C_4H_2 gas volume mixing ratio profiles in the middle atmosphere of Titan. Same format as Fig. 3.

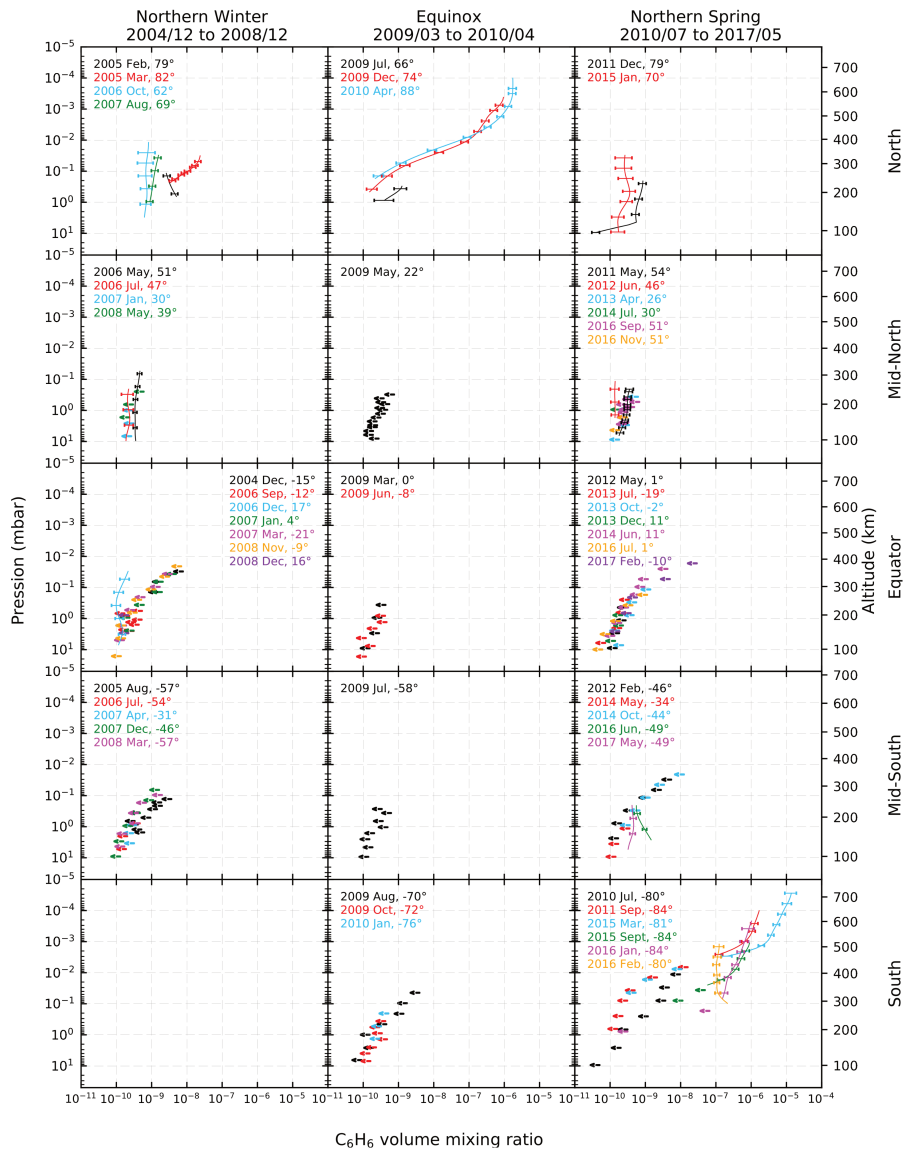


Figure 11: C₆H₆ gas volume mixing ratio profiles in the middle atmosphere of Titan. Same format as Fig. 3.

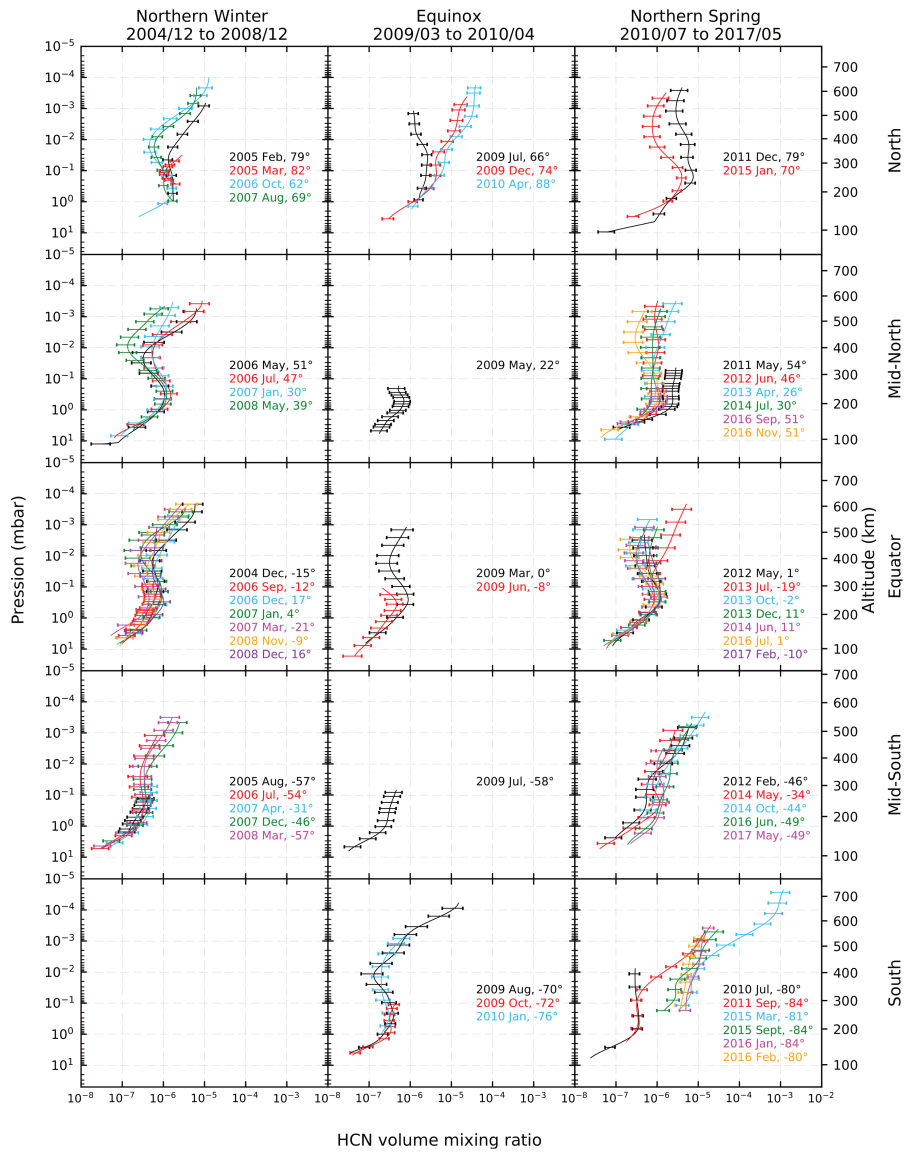


Figure 12: HCN gas volume mixing ratio profiles in the middle atmosphere of Titan. Same format as Fig.3.

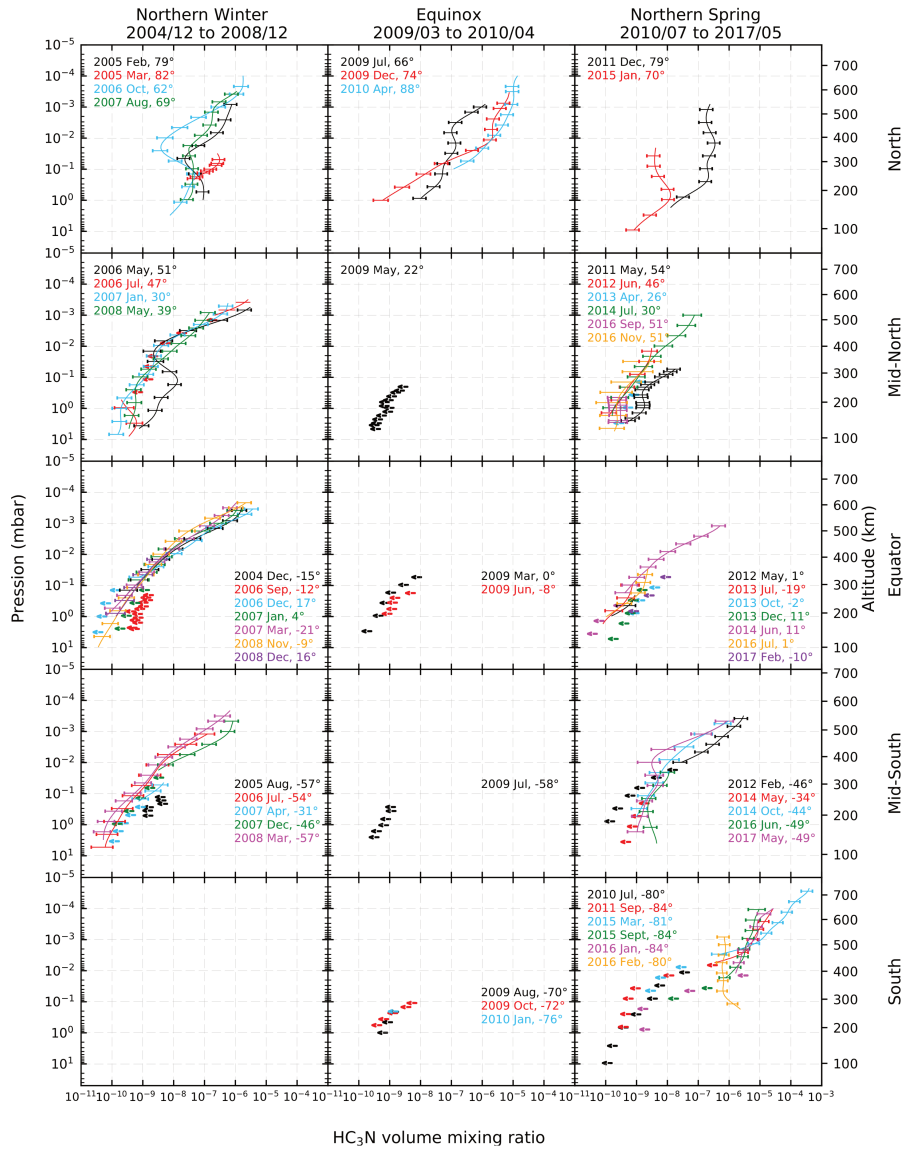


Figure 13: HC₃N gas volume mixing ratio profiles in the middle atmosphere of Titan. Same format as Fig. 3.

334 counterparts. During this period, we also detected benzene below 0.01 mbar
335 (~ 400 km) with a mole fraction of $\sim 4 \times 10^{-9}$ at 80°N , 10^{-9} at 70°N , and $3-$
336 5×10^{-10} at 50°N .

337 In December 2009 and April 2010, shortly after northern spring equinox,
338 we observed an enrichment in photochemical compounds above 0.1 mbar (~ 260
339 km), compared to July 2009. In particular, benzene was detected up to the
340 10^{-4} -mbar level (~ 630 km). We can also note that C_2H_2 was more abundant
341 than C_2H_6 at pressures less than a few 10^{-2} mbar (~ 375 km) (Fig. 14).

342 In the beginning of northern spring in December 2011, we observed a global
343 depletion in molecules, except for C_2H_6 , above 0.1 mbar (~ 260 km) with respect
344 to the April 2010 profiles. We also observed that the C_2H_2 abundance profile
345 was similar to the C_2H_6 profile, and that benzene was only observed below the
346 0.01-mbar (~ 375 km) level with a mixing ratio of a few 10^{-10} at 79°N . Then in
347 January 2015, the depletion in molecules above 0.1 mbar (~ 280 km) was even
348 more pronounced than in December 2011, by factors of ~ 12 , ~ 8 and ~ 3 for
349 C_2H_2 , C_4H_2 and HCN respectively, at 1×10^{-3} mbar (~ 480 km).

350 4.2.2. Mid and equatorial latitudes

351 Between 60°N and 60°S in the stratosphere below 0.01 mbar (~ 410 km),
352 photochemical compounds are slightly more abundant during northern winter
353 season than in northern spring. Above 0.01 mbar, C_2H_2 and HCN abundance
354 profiles show variations that do not seem correlated with year or local time (see
355 Table 1).

356 However, we observe in some specific cases abundance variations at latitudes
357 close to the winter polar vortex. In May 2006 (51°N), a local maximum of the
358 HC_3N mixing ratio occurs at 0.1 mbar (~ 290 km), as is the case at 62°N in
359 October 2006. Around 45°S , we observed an enrichment in all photochemical
360 compounds below 0.1 mbar (~ 290 km) between October 2014 and June 2016,
361 as is seen at higher southern latitudes (Section 4.2.3).

362 4.2.3. High southern latitudes

363 Seasonal changes of abundance profiles in the southern polar region are also
364 shown in Fig. 15. From August 2009 (70°S) to at least July 2010 (80°S), we
365 did not observe strong variations in any abundance profile between 10 mbar
366 (~ 95 km) and 10^{-3} mbar (~ 520 km). In September 2011, during southern
367 autumn, we observed a strong and global enrichment in photochemical products
368 compared to June 2010 between 10^{-2} mbar (~ 380 km) and 10^{-4} mbar (~ 620
369 km). This enrichment reaches a factor of 100-1000 for molecules such as C_3H_4 ,
370 C_4H_2 , HC_3N , C_2H_4 and a factor of 10 for molecules such as C_2H_2 , HCN. At
371 this date, we also detected benzene in the southern polar region above 2×10^{-3}
372 mbar (~ 465 km) with a mixing ratio of at least 10^{-7} - 10^{-6} . Then by March
373 2015, molecular abundances had continued to increase, being larger than in
374 September 2011 by a factor of 10 above 10^{-3} mbar (455 km). Between 0.1 mbar
375 (255 km) and 10^{-3} mbar (455 km), C_2H_2 and HCN mixing ratios were larger
376 by factors of 3 and 10 respectively. In September 2015, only six months later,
377 the abundances of the photochemical compounds had significantly decreased

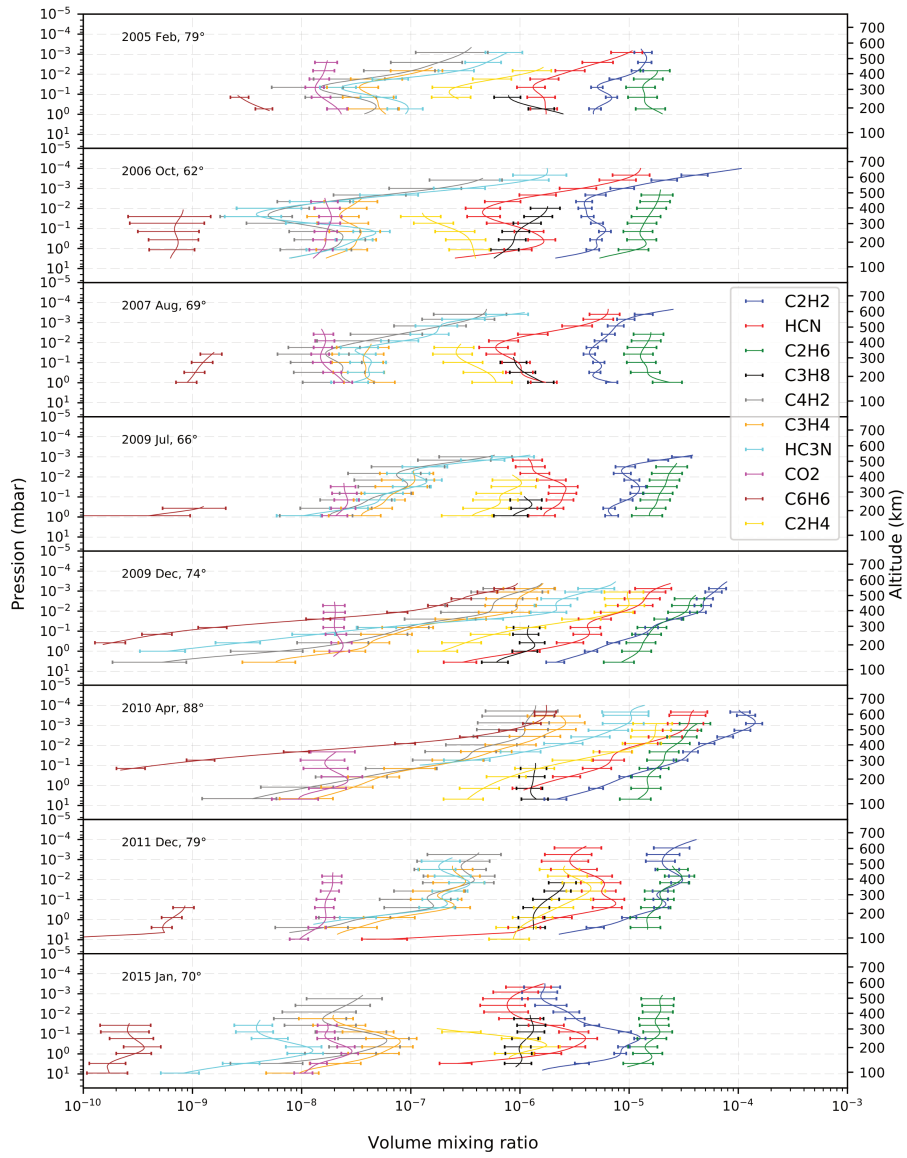


Figure 14: Gas volume mixing ratio profiles from February 2005 to January 2015 in the northern polar region. The altitude scale corresponds to the October 2006 observations.

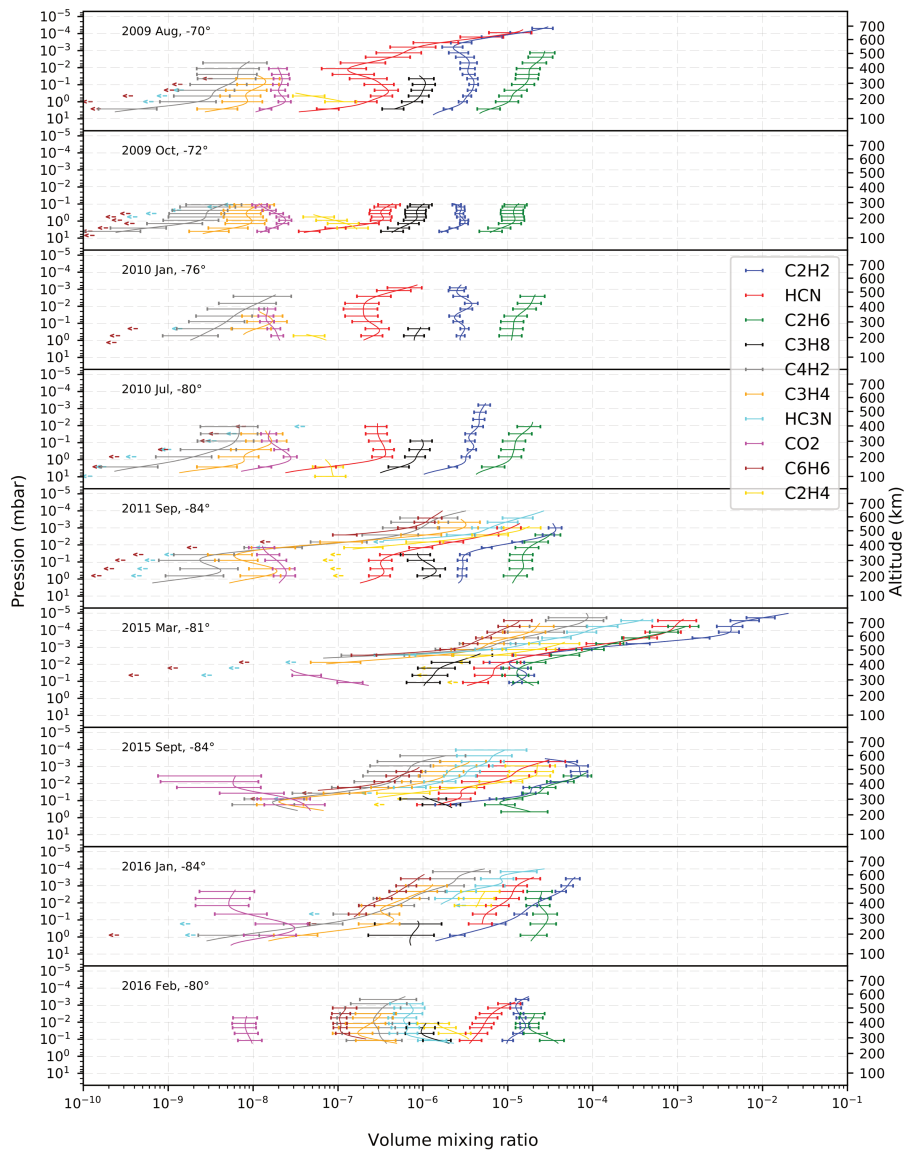


Figure 15: Gas volume mixing ratio profiles from August 2009 to February 2016 in the southern polar region. The altitude scale corresponds to the October 2009 observations.

378 near and above 10^{-3} mbar (~ 475 km) but were still larger than inferred around
379 southern autumn equinox. This decrease continued at a lower pace in the 10^{-3} -
380 mbar region till January 2016. One month later, the abundance profiles we
381 inferred were relatively constant with height between 0.1 mbar (~ 230 km) and
382 10^{-3} mbar (~ 450 km), except for HCN which showed a factor of 3 variation
383 over this altitude range.

384 5. Discussion

385 5.1. Equatorial mixing ratio profiles compared with photochemical models

386 We have shown that temperature and volume mixing ratio profiles do not
387 change significantly over seasons at the equator from 10 (~ 90 km) to 0.01 mbar
388 (~ 290 km), which is consistent with previous CIRS investigations (Achterberg
389 et al., 2008; Vinatier et al., 2015; Sylvestre et al., 2018). On the other hand, we
390 found that the C_2H_2 (acetylene) mole fraction varies in the mesosphere above
391 10^{-2} mbar (~ 400 km) without any correlation with the local time (see Table
392 1). Such variations are not currently explained.

393 If we focus on the 10-0.01 mbar region, our derived C_2H_2 abundance profiles
394 show a local maximum at ~ 0.2 mbar (~ 265 km) that it is not predicted by
395 photochemical models (Krasnopolsky, 2014; Loison et al., 2015; Dobrijevic et al.,
396 2016; Vuitton et al., 2019). At 0.2 mbar, the observed C_2H_2 volume mixing
397 ratio of $\sim 4 \times 10^{-6}$ is consistent within a factor of 2 with photochemical model
398 predictions. The C_2H_2 abundance derived in November 2008 at 5×10^{-4} mbar
399 (~ 500 km) is consistent with the Cassini/UVIS C_2H_2 abundance derived in
400 February 2008 at 550 km at $6^\circ S$ (Koskinen et al., 2011).

401 Our inferred HCN (hydrogen cyanide) equatorial abundance profiles show
402 a local maximum around 0.3 mbar (~ 245 km) and a local minimum around
403 0.01 mbar (~ 410 km), both of which are not reproduced by photochemical
404 models (Loison et al., 2015; Krasnopolsky, 2014; Dobrijevic et al., 2016; Vuitton
405 et al., 2019), while at 0.3 mbar, the derived mixing ratio of $\sim 10^{-6}$ agrees
406 with these model predictions. We note that the eddy mixing coefficient plays
407 an important role in the HCN profile as simulated by Vuitton et al. (2019)
408 who obtained the best match with our retrieved profiles using an eddy mixing
409 coefficient having a minimum value $K_0 \sim 100 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$, instead of $K_0 = 300$
410 $\text{cm}^2 \text{ s}^{-1}$ in the nominal model. In November 2008, our HCN abundance at 500
411 km ($\sim 7 \times 10^{-6}$) is consistent with the mixing ratio derived from UVIS stellar
412 occultation measurements at 550 km in February 2008 at $6^\circ S$ (Koskinen et al.,
413 2011).

414 The C_2H_4 (ethylene) mixing ratios we inferred around 0.1 mbar (~ 290 km)
415 are consistent with predictions of the photochemical models of Krasnopolsky
416 (2014), Loison et al. (2015) and Dobrijevic et al. (2016), but less abundant
417 by a factor of 5 than that of Vuitton et al. (2019). From 5 to 0.1 mbar,
418 the negative vertical gradient we derived is at odds with these photochemical
419 models. According to Cressin et al. (2008), it is explained by the fact that
420 C_2H_4 does not condense in Titan's conditions and by dynamical advection that

421 transports air enriched in C_2H_4 from the winter pole towards the equator in the
422 lower stratosphere.

423 For C_3H_8 (propane), the inferred abundance profiles at the equator are
424 consistent in the range 10-0.01 mbar (~ 90 -410 km) with the photochemical
425 model predictions of Krasnopolsky (2014), Loison et al. (2015), Dobrijevic et al.
426 (2016) and Vuitton et al. (2019).

427 Regarding C_3H_4 (methylacetylene), our abundance profiles show a mixing
428 ratio almost constant with height between 3 mbar (~ 140 km) and 0.1 mbar
429 (~ 300 km), which is consistent with Vuitton et al.'s (2019) and Krasnopolsky's
430 (2014) photochemical models, while in this altitude range, Loison et al.'s (2015)
431 and Dobrijevic et al.'s (2016) photochemical models predict a C_3H_4 abundance
432 decreasing with height. At 0.02 mbar, our C_3H_4 mixing ratios in January 2007
433 and after 2012 are consistent with these photochemical models. In June 2014
434 above 0.01 mbar (~ 410 km), we derived a positive abundance gradient consistent
435 with Vuitton et al.'s (2019) photochemical model, while this change of slope is
436 observed at 600 km in Loison et al.'s (2015) and Dobrijevic et al.'s (2016) models
437 and at 300 km in Krasnopolsky's (2014) photochemical model.

438 The C_4H_2 (diacetylene) abundance profiles retrieved during the northern
439 winter between 0.8 mbar (~ 200 km) and 0.01 mbar (~ 410 km) are in agreement
440 with the predicted abundance profile of Dobrijevic et al.'s (2016) photochemical
441 model, and with the Vuitton et al. (2019) photochemical model with no H
442 heterogeneous loss reaction. Krasnopolsky's (2014) photochemical model predicts
443 a C_4H_2 abundance profile with a strong positive gradient in this altitude region
444 that we do not observe. Dobrijevic et al.'s (2016) and Vuitton et al.'s (2019)
445 photochemical models predict a local mixing ratio minimum around 500 km
446 that is not observed in our C_4H_2 abundance profiles at any season. On the
447 other hand, these photochemical models exhibit a positive abundance gradient
448 above 500 km that we observe above 0.01 mbar (~ 410 km) during the northern
449 winter. At higher altitudes, our C_4H_2 mixing ratio of $\sim 7 \times 10^{-7}$ at 5×10^{-4}
450 mbar (560 km) during the northern winter is consistent with the derived UVIS
451 value of 5×10^{-7} around 500 km in February 2008 at $6^\circ S$ (Koskinen et al.,
452 2011). During the northern spring, our C_4H_2 profiles show a positive abundance
453 gradient between 10 mbar (~ 90 km) and 10^{-3} mbar (~ 530 km) that is not as
454 strong as the gradient in Krasnopolsky's (2014) photochemical model, and is
455 not predicted by Dobrijevic et al. (2016) and Vuitton et al. (2019).

456 We were able to detect HC_3N (cyanoacetylene) emission at altitudes up to
457 590 km (2 - 3×10^{-4} mbar) during the northern winter, which is higher than what
458 was achieved in a previous study at the equator (Vinatier et al., 2015). The
459 present detection of HC_3N at high altitude results from the improvement of
460 the signal-to-noise ratio in limb spectra due to the upgraded calibration and
461 our averaging procedure described in Appendix B. HC_3N reaches a volume
462 mixing ratio of 2×10^{-6} at $\sim 3 \times 10^{-4}$ mbar (~ 580 km), quite consistent with
463 the $\sim 10^{-6}$ value derived at 550 km in February 2008 at $6^\circ S$ from UVIS stellar
464 occultations (Koskinen et al., 2011). At 3×10^{-4} mbar, our HC_3N mixing ratio
465 values are ~ 14 times larger than the predicted value of Vuitton et al. (2019)
466 when they use the aerosol optical depth from Lavvas et al. (2010) multiplied

467 by a factor of 2. Indeed, HC₃N is strongly sensitive to UV photodissociation,
468 so the higher the aerosol opacity the lower the photodissociation efficiency of
469 HC₃N because of aerosol UV-shielding. In Loison et al.'s (2015) and Dobrijevic
470 et al.'s (2016) models, which incorporate a different aerosol optical depth profile,
471 the HC₃N mixing ratios are ~ 300 times smaller than our value at 3×10^{-4}
472 mbar. In contrast, our HC₃N mixing ratios are a factor of 30 smaller than
473 in Krasnopolsky's (2014) photochemical model, in which the aerosol optical
474 depth model derives from Huygens observations. During the northern winter,
475 we did not find the local minimum in the mixing ratio predicted at 500 km
476 by photochemical models (Vuitton et al., 2019; Loison et al., 2015; Dobrijevic
477 et al., 2016; Krasnopolsky, 2014).

478 Regarding CO₂ (carbon dioxide), our abundance profiles are consistent with
479 Krasnopolsky's (2012) photochemical model, but are higher than the Loison
480 et al. (2015) and Vuitton et al. (2019) profiles by an order of magnitude.
481 Interestingly, we observe a local maximum at 1 mbar (~ 190 km) and a local
482 minimum at 0.1 mbar (~ 300 km), which are not predicted by photochemical
483 models (Krasnopolsky, 2012; Loison et al., 2015; Vuitton et al., 2019). This local
484 maximum is also observed at mid-latitudes and at the south pole and seems to
485 be stable with season.

486 Our inferred C₂H₆ (ethane) abundance profiles are quite consistent with
487 the Vuitton et al. (2019) photochemical model when they use a minimum
488 value of the eddy mixing coefficient somewhat lower than the nominal value
489 of $300 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$ or when they use half of the aerosol optical depth from Lavvas
490 et al. (2010). As for HC₃N, UV aerosol shielding limits the efficiency of the
491 photodissociation. In Vuitton et al.'s (2019) model, the C₂H₆ abundance is very
492 sensitive to the aerosol optical depth, since for a nominal aerosol optical depth
493 C₂H₂ is less photodissociated, which leads to less C₂H and CH₃ radicals, the
494 precursors of C₂H₆. The C₂H₆ profiles predicted by the photochemical models
495 of Loison et al. (2015) and Dobrijevic et al. (2016), who used different aerosol
496 depth profile and CH₃ recombination rate, are consistent with our retrieved
497 profile. Krasnopolsky's (2014) photochemical model, with an aerosol optical
498 depth model based on Huygens observations and a different CH₃ recombination
499 rate, has half less ethane than observed between 100 and 250 km, and above
500 this altitude range, the predicted strong abundance gradient is not consistent
501 with our C₂H₆ abundance profiles.

502 Regarding C₆H₆ (benzene), we could only obtain $2\text{-}\sigma$ upper limits of its
503 mixing ratio between 20 mbar (~ 80 km) and 0.01 mbar (~ 410 km), except
504 for December 2006 where we could detect its emission band. According to
505 photochemical models, the low abundance of C₆H₆ below the production region
506 results from efficient photodissociation to phenyl radicals throughout the bulk
507 of the atmosphere. At 10 mbar (~ 100 km), our upper limits do not exceed a
508 few 10^{-10} , consistent with Vuitton et al.'s (2019) and Krasnopolsky's (2014)
509 photochemical models that predict a mixing ratio not exceeding 10^{-10} or a few
510 10^{-9} at this altitude, respectively.

511 *5.2. Evolution of polar regions*

512 *5.2.1. Northern polar region*

513 In February 2005, the temperature profile in the northern polar region is
514 warmer between 0.3 mbar (~ 230 km) and 3×10^{-3} mbar (~ 480 km) than the
515 temperature profile around the equator in December 2004, which is consistent
516 with previous analyses of CIRS observations (Vinatier et al., 2015; Achterberg
517 et al., 2011) and GCM predictions (Newman et al., 2011; Lebonnois et al.,
518 2012; Lora et al., 2015). Below the 3×10^{-3} mbar pressure level (~ 480 km), we
519 also observed an enrichment in all molecules, except CO_2 , compared to their
520 abundances around the equator, in agreement with the results of Vinatier et al.
521 (2015), Teanby et al. (2019) and Sylvestre et al. (2018). This enrichment vastly
522 differs from one compound to another. In the stratosphere, below the 0.1-mbar
523 region, it is most marked for HC_3N , C_6H_6 , C_4H_2 , C_3H_4 and HCN , intermediate
524 for C_2H_2 , and weak for C_2H_6 and C_3H_8 . From the GCMs predictions, the
525 descending air branch of the pole-to-pole circulation cell brings air enriched
526 in photochemical species from the high atmosphere and heats adiabatically the
527 mesosphere, resulting in a temperature local maximum around 0.01 mbar (~ 410
528 km), instead of 0.1 mbar (~ 275 km) for the stratopause in the equatorial region.
529 Below 0.3 mbar (~ 230 km), the temperature profile in the northern polar region
530 is colder than around the equator (by ~ 20 K at 1 mbar, ~ 175 km), in agreement
531 with the results of Vinatier et al. (2015), Achterberg et al. (2011) and Teanby
532 et al. (2019). The smaller stratospheric polar temperatures likely result from
533 the absence of solar heating in the polar night below 300 km.

534 Between February 2005 and August 2007, we observed a decrease of the
535 temperature of the polar stratopause by ~ 7 K at 0.01 mbar (~ 410 km), consistent
536 with previous CIRS observations (Vinatier et al., 2015; Achterberg et al., 2011).
537 This cooling could be due to the weakening of the descending branch of the pole-
538 to-pole circulation cell at the end of winter. This assumption is supported by
539 the decreasing speed of zonal winds around the northern polar region inferred
540 by Achterberg et al. (2011) and predicted by GCMs (Newman et al., 2011;
541 Lebonnois et al., 2012; Lora et al., 2015). The temperature profiles in the lower
542 stratosphere below 0.3 mbar (~ 230 km) did not vary between 2005 and 2007.

543 From August 2007 ($L_s=335^\circ$) to July 2009 ($L_s=359^\circ$), the stratopause
544 temperature decreased by ~ 21 K at 0.01 mbar (~ 375 km), which is consistent
545 with previous analyses of CIRS observations (Vinatier et al., 2015; Achterberg
546 et al., 2011). These observations are not reproduced by Newman et al.'s (2011)
547 GCM which predicts warmer temperatures (in excess of 210 K) between 0.1 and
548 0.01 mbar at $L_s=0^\circ$. This cooling could be explained by the weakness of the
549 adiabatic heating associated with downwelling motion because of the coexistence
550 of two weaker equator-to-pole circulation cells that is predicted to occur around
551 northern spring equinox (Newman et al., 2011; Lebonnois et al., 2012; Lora
552 et al., 2015). The lower stratosphere is still colder than at the equator because
553 of the smaller solar flux at low altitudes. In December 2009, we observed an
554 oscillation on the thermal profile that we discuss further in Section 5.3. In
555 April 2010, the retrieved profile shows temperatures between 1 mbar (~ 160

556 km) and 0.01 mbar (~ 360 km) lower than in July 2009, but this difference is
557 possibly due to their different latitudes (89 and 67°). Regarding abundance
558 profiles around the northern spring equinox, we observed a strong enrichment
559 in photochemical compounds above 0.1 mbar (~ 250 km) compared to earlier
560 during winter (Fig. 14). This enrichment in the mesosphere could be due to
561 a combination of the reactivation of the photochemistry in the northern polar
562 region by the increasing solar flux at altitudes higher than 500 km (Lebonnois
563 et al., 2001), and the transport of this enriched air to deeper altitudes by the
564 descending branch of the equator-to-pole circulation cell.

565 From April 2010 to December 2011, we observed a cooling above $\sim 10^{-2}$
566 mbar (~ 450 km) and a slight heating below this pressure level consistent with
567 Vinatier et al. (2015) and Teanby et al. (2019). Moreover, abundance profiles
568 in December 2011 show a depletion in all molecules above 0.1 mbar (~ 260
569 km) compared to April 2010, as previously noted by Vinatier et al. (2015). This
570 cooling and depletion in the mesosphere could be explained by the establishment
571 of a pole-to-pole circulation cell during the northern spring, in which the ascending
572 branch occurs in the northern polar region, as predicted by GCMs (Newman
573 et al., 2011; Lebonnois et al., 2012; Lora et al., 2015). In contrast, the lower
574 stratosphere warmed up probably due to the increasing solar flux in the northern
575 polar region. Later in January 2015, the temperature profile had warmed up
576 between 10 mbar (~ 100 km) and 0.03 mbar (~ 340 km), with an increase of
577 ~ 9 K at 1 mbar (~ 175 km) and ~ 20 K at 0.1 mbar (~ 280 km), consistent
578 with Coustenis et al.'s (2016) conclusions and Newman et al.'s (2011) GCM
579 predictions. This heating could be explained by the increasing solar flux reaching
580 the northern polar region. Above 0.03 mbar, the temperature in the mesosphere
581 did not vary between December 2011 and January 2015. In contrast, the
582 abundances of all molecules above 0.1 mbar (~ 280 km), except C_2H_6 and C_3H_8 ,
583 decreased over this period, which is consistent with the upwelling provided by
584 the pole-to-pole circulation cell. Actually, Vinatier et al. (in preparation) show
585 that the depleted air is observed down to mid-northern latitudes. Surprisingly,
586 the enrichment in photochemical compounds observed in December 2011 between
587 1 mbar (~ 175 km) and 0.1 mbar (~ 280 km) was still there in January 2015.
588 This could be explained by the persistence of a circulation cell derived from the
589 northern winter pole-to-pole circulation but confined to the stratosphere and to
590 high northern latitudes as seen in the numerical simulation of Lebonnois et al.
591 (2012) (see Fig. 12 of Sylvestre et al., 2018).

592 5.2.2. Southern polar region

593 We discuss here the evolution of the southern polar region starting in 2009
594 around the northern spring equinox, since there were no limb data acquired at
595 high southern latitudes in the 2005-2008 period, during the northern winter.

596 In August 2009, the thermal profile in the southern polar region is similar
597 to the one around the equator in March 2009 between 0.3 mbar (~ 240 km)
598 and 0.02 mbar (~ 370 km), as also derived by Vinatier et al. (2015), Achterberg
599 et al. (2011), and Teanby et al. (2017). This similarity is not reproduced by
600 Newman et al.'s (2011) GCM which predicts a higher temperature (by ~ 20 K).

601 Below 0.3 mbar (~ 240 km), the thermal profile in the southern polar region is
 602 5 K colder than the one around the equator at 1 mbar (~ 185 km), consistent
 603 with the results of Vinatier et al. (2015), Achterberg et al. (2011), and Teanby
 604 et al. (2019) and predictions of Newman et al.'s (2011) GCM. Above 0.02 mbar
 605 (~ 370 km), mesospheric temperatures are warmer in the southern polar region
 606 than around the equator (by ~ 10 K at 2×10^{-3} mbar, 480 km). This could
 607 result from adiabatic heating in the descending branch of the equator-to-pole
 608 circulation cell, as seen in the northern polar region during the northern winter.
 609 However, this heating term is weak due to the coexistence of the two equator-
 610 to-pole circulation cells predicted by GCMs (Newman et al., 2011; Lebonnois
 611 et al., 2012; Lora et al., 2015). In August 2009, C_2H_2 and HCN abundance
 612 profiles in the southern polar region are enriched above 0.001 mbar (~ 520 km)
 613 and 0.01 mbar (~ 400 km), respectively (Fig. 15) compared to the equatorial
 614 region. These enrichments in the mesosphere are due to the descending branch
 615 of the equator-to-pole circulation cell. Later in July 2010, the temperature in
 616 the southern polar region above 0.03 mbar (~ 455 km) increased by ~ 10 K,
 617 and cooled between 10 mbar (~ 95 km) and 0.03 mbar, with a ~ 8 K decrease
 618 at 0.2 mbar (~ 255 km). While the mesosphere was probably heated by the
 619 adiabatic compression occurring in the descending branch of the equator-to-pole
 620 circulation cell, the stratosphere most probably cooled due to the decreasing
 621 solar flux.

622 In September 2011, the temperature in the southern polar region increased
 623 in the mesosphere between 0.08 mbar (~ 280 km) and 4×10^{-3} mbar (~ 420
 624 km) (by ~ 7 K at 0.01 mbar, 380 km), while below 0.08 mbar the atmosphere
 625 strongly cooled, by ~ 16 K at 1 mbar (175 km), in agreement with the CIRS
 626 data retrievals of Vinatier et al. (2015), Coustenis et al. (2016) and Teanby
 627 et al. (2017). This temperature decrease is smaller than in of Newman et al.'s
 628 (2011) GCM, which predicts temperatures lower than observed by 20-30 K.
 629 At this date, all photochemical compound abundance profiles show mesospheric
 630 enhancements (see Fig. 14) compared to abundance profiles in July 2010, consistent
 631 with results of Vinatier et al. (2015) and Teanby et al. (2017). Additionally,
 632 C_6H_6 and HC_3N appeared for the first time in the southern polar region in
 633 September 2011. At this date, this suggests that the pole-to-pole circulation cell
 634 is well established in the middle atmosphere, since we observed in the southern
 635 polar region enrichment in photochemical compounds and warm temperature
 636 in the mesosphere, consistent with Teanby et al. (2017).

637 Between September 2011 and March 2015, the atmosphere in the southern
 638 polar region strongly cooled between 0.3 mbar (210 km) and 4×10^{-4} mbar (500
 639 km) with a temperature decrease of ~ 26 K at 0.01 mbar (350 km). This strong
 640 cooling of the middle atmosphere is consistent with the results of Coustenis
 641 et al. (2018) who inferred a steady decrease of temperature from June 2012 to
 642 September 2014 in the 0.01–20 mbar pressure range, and with Teanby et al.'s
 643 (2017) results. GCMs do not predict such a cooling in the mesosphere. Moreover,
 644 abundance profiles show a stronger enrichment in molecules above 0.01 mbar
 645 (~ 350 km) compared to September 2011 (Fig. 15). These profiles differ from
 646 those retrieved by Teanby et al. (2017) that show a local maximum in the C_2H_2

647 and C_3H_4 mole fractions around 440 km that we did not observe. Additionally,
 648 our C_2H_2 , HCN, C_2H_6 , HC_3N and C_6H_6 volume mixing ratios at 2×10^{-5} mbar
 649 (~ 645 km) are larger than those retrieved with INMS at 1050 km (Cui et al.,
 650 2009; Magee et al., 2009). According to Teanby et al. (2017), the enrichment in
 651 short lifetime molecules (e.g., C_3H_4 , C_4H_2 , HC_3N and C_6H_6) in the mesosphere
 652 strongly increased the efficiency of the long-wave radiative cooling between
 653 September 2011 and March 2015, which is consistent with our derived abundance
 654 and temperature profiles. This is also consistent with the HCN cloud observed
 655 by VIMS in May 2012 at 300 km in the southern polar region that required
 656 temperatures close to 125 K to allow HCN to condense (De Kok et al., 2014).
 657 A polar cloud was also simultaneously observed by Cassini/ISS (West et al.,
 658 2016). In July 2012, CIRS observed an emission feature at 220 cm^{-1} attributed
 659 to a condensate (Jennings et al., 2012), and in May 2013, C_6H_6 ice was observed
 660 below 300 km by Vinatier et al. (2018).

661 From March to September 2015 ($L_s=66^\circ$), the southern polar atmosphere
 662 strongly warmed up between 0.2 mbar (215 km) and 10^{-4} mbar (600 km), by
 663 e.g. by ~ 31 K at 0.04 mbar (285 km), as also observed by Teanby et al. (2017).
 664 In contrast, Newman et al.'s (2011) GCM predicts at $L_s=90^\circ$ temperatures that
 665 are 30 K warmer in the range 0.1–0.01 mbar than those we inferred. Over the
 666 same period, abundance profiles show a decrease above 10^{-3} mbar (see Fig.
 667 15), consistent with Teanby et al.'s (2017) observations. However, the lower
 668 stratosphere in the southern polar region is more enriched in trace gases than
 669 the equator, in agreement with the results of Sylvestre et al. (2018). According
 670 to Teanby et al. (2017), the re-appearance of a hot mesosphere is the result of
 671 the stabilization of the polar vortex with a slight reduction of the abundance of
 672 photochemical compounds, consistent with our observations (Fig. 15), and the
 673 adiabatic heating term outstripping the radiative cooling.

674 Between September 2015 and January/February 2016, the atmosphere in
 675 the southern polar region strongly cooled down below 0.01 mbar (~ 325 km),
 676 e.g. by ~ 30 K at 0.2 mbar (210 km), in agreement with Teanby et al.'s (2017)
 677 results. Our profile is however ~ 30 K colder than Newman et al.'s (2011) GCM
 678 prediction at 0.2 mbar. This stratospheric cooling is likely due to the lack of
 679 solar flux in this region and the relative weakness of the adiabatic heating as
 680 pressure increases. These thermal profiles show a colder stratopause than those
 681 observed in the northern polar region during the winter in 2005. Abundance
 682 profiles in January 2016 are similar to those in September 2015 between 0.1
 683 mbar (~ 230 km) and 10^{-4} mbar (~ 565 km), consistent with Teanby et al.'s
 684 (2017) results, while between January and February 2016 abundance profiles
 685 have become relatively constant with altitude.

686 Between October 2014 and June 2016 at 51°S , the mesosphere above 0.04
 687 mbar (310 km) significantly warmed up (by ~ 11 K at 0.01 mbar, 375 km)
 688 while the atmosphere below the 0.04-mbar region cooled down by 1-2 K. This
 689 mesospheric heating could be explained by an increase of the adiabatic heating
 690 in the descending branch of the pole-to-pole circulation cell. Teanby et al. (2017)
 691 suggested that the southern polar vortex was extending to $\sim 60^\circ\text{S}$ in 2016, which
 692 is consistent with our observations.

693 *5.3. Thermal oscillation in the northern mesosphere near equinox*

694 The thermal profile at 74°N in December 2009 shows an oscillation between
 695 5×10^{-2} (~ 300 km) and 10^{-3} (~ 500 km) mbar with a peak-to-peak amplitude of
 696 3-4 K. We present here a possible explanation of this thermal oscillation. To do
 697 so, we re-analyzed the limb spectra recorded on 28 December 2009 (local time:
 698 12 a.m., longitude: 255°W) at 0.5-cm^{-1} spectral resolution. We split the dataset
 699 in two subsets separated by around 6 000 s, to search for a possible vertical
 700 displacement between the two retrieved thermal profiles. We also analyzed limb
 701 spectra recorded at 15.5-cm^{-1} spectral resolution on 11 December 2009 (local
 702 time: 9 p.m., longitude: 106°W) at 73°N and 78°N, in order to check if the
 703 oscillation was also present at a prior date. From these different datasets of limb
 704 spectra, we retrieved thermal profiles with the same methodology and the same
 705 *a priori* profile for each retrieval. In Fig. 16, we show thermal profiles retrieved
 706 from limb spectra at 0.5-cm^{-1} spectral resolution (blue and cyan) and 15.5-cm^{-1}
 707 spectral resolution at 73°N and 78°N (orange and red respectively). We conclude
 708 that the oscillation persisted at least during 6 000 s on 28 December 2009, while
 709 one Titan day before, the atmosphere did not present such an oscillation at a
 710 location close in latitude.

711 Let's assume that this oscillation results from an atmospheric wave. From
 712 Fig. 16, we estimate that the wave moved in phase by $\sim 10 \pm 20$ km in 6 000 s
 713 (we are confident about the error bar, which corresponds to half of the altitude
 714 gap between two limb spectra), giving a phase speed c_z in the range -5 and
 715 $+1.7$ m s^{-1} . We can also measure a vertical wavelength $L_z \sim 170$ km between
 716 5×10^{-2} mbar (~ 300 km) and 10^{-3} mbar (~ 500 km).

717 We determined the type of wave that verifies the above characteristics and
 718 fulfills the required criteria among six different types of waves in a cyclostrophic
 719 regime according to Peralta et al. (2014a) and Peralta et al. (2014b). We found
 720 that an inertia-gravity wave is relevant to our case. The general dispersion
 721 relation is given by:

$$\omega = \pm \sqrt{\frac{N_B^2 k_x^2 + \xi^2 \left(m^2 + \frac{1}{4H_0^2} \right)}{k_x^2 + m^2 + \frac{1}{4H_0^2}}} + k_x u_0 \quad (3)$$

722 where N_B is the Brunt-Väisälä frequency ($\sim 2.4 \times 10^{-3}$ s $^{-1}$ at 400 km), k_x is
 723 the horizontal wavenumber, m is the vertical wavenumber, H_0 is the pressure
 724 scale height (~ 50 km at 400 km), u_0 is the zonal wind (65 ± 15 m s $^{-1}$ at
 725 74°N and 400 km as retrieved by Achterberg et al. (2011) in 2009), and ξ is a
 726 frequency defined as :

$$\xi^2 = 2\psi \left(\psi - \frac{1}{a+z} \frac{\partial u_0}{\partial \phi} \right) \quad (4)$$

727 where a is Titan's radius, z the altitude (400 km), ϕ is the latitude and ψ is the
 728 centrifugal frequency defined as:

$$\psi = \frac{u_0}{a+z} \tan(\phi) \quad (5)$$

729 We evaluated the meridional shear of the zonal wind $\partial u_0/\partial\phi$ from the map
 730 of Achterberg et al. (2011) showing a -40 m s^{-1} variation from 69°N to 76°N
 731 in 2009, and found that $\xi \sim 1.7 \times 10^{-4}\text{ s}^{-1}$. We find that for any horizontal
 732 wavenumber ($k_x = 2\pi n/L_x$, where L_x is the perimeter of the latitude circle
 733 at 74°N and 400 km , and n a positive integer), one of the two solutions of
 734 Eq. 3 yields a vertical phase velocity $c_z > 7\text{ m s}^{-1}$, which is excluded by our
 735 observations. For $n \leq 10$, the other solution yields c_z between 1.3 and -3 m s^{-1} ,
 736 which is consistent with our observations. Note that for these solutions the
 737 vertical group velocity as derived from Eq. 3 is positive given that $\xi < N_B$, which
 738 means that energy is propagating upwards. Their horizontal phase velocity c_k
 739 varies between -87 (for $n = 1$) and $+4\text{ m s}^{-1}$ (for $n = 10$), smaller than the
 740 zonal wind $u_0 = 65\text{ m s}^{-1}$. For $n \leq 6$, the wave phase moves westwards. The
 741 corresponding period ($2\pi/\omega$) is at least 17 hr . These inertia-gravity waves verify
 742 the criteria of Peralta et al. (2014a): (1) ξ^2 varies by less than a factor of 2 over
 743 a reasonable latitude range around 74°N , e.g. 70°N and 80°N , (2) the intrinsic
 744 horizontal phase velocity $|\bar{c}_k| = |c_k - u_0| = \frac{|\bar{u}|}{k_x}$ is higher than $\lambda_z \times \partial u_0/\partial z$ (~ 50
 745 m s^{-1}) for $n \leq 10$.

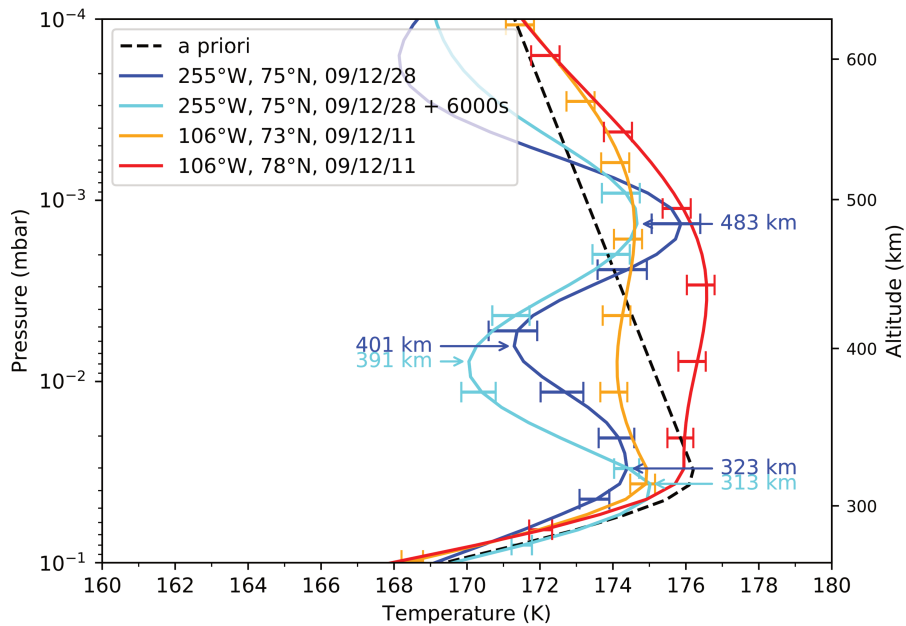


Figure 16: Temperature profiles retrieved on 11 and 28 December 2009: blue and cyan thermal profiles retrieved from spectra recorded at 0.5-cm^{-1} spectral resolution on 28 December 2009 (local time: 12 a.m.), longitude 255°W , latitude 75°N and spaced in time by 6000 s respectively; orange and red thermal profiles retrieved from spectra recorded at 15.5-cm^{-1} spectral resolution on 11 December 2009 (local time: 9 p.m.), longitude 106°W , latitude 73°N and 78°N respectively. The dashed line is the a priori temperature profile used in all retrievals.

746 This oscillation could thus be explained by an inertia-gravity wave, but the

747 mechanism needed to produce the wave is unknown. As the wave energy is
748 propagating upwards, it could be generated from convection in the troposphere,
749 possibly due to some instability occurring around equinox.

750 If the oscillating structure of the 74°N temperature profiles is not due to a
751 wave, it could have a radiative origin, such as localized haze layers producing
752 enhanced heating or a photochemically-enriched layer around 10^{-2} mbar (~ 300
753 km) that would enhance the radiative cooling. However, the haze extinction
754 profile we simultaneously retrieved did not present significant variations that
755 could be linked to detached haze layers. Also, the molecular abundance profiles
756 we retrieved are relatively uniform around 10^{-2} mbar (~ 300 km) where the local
757 minimum in temperature is located. We therefore discard a purely radiative
758 origin for the observed oscillation.

759 6. Conclusion

760 The CIRS limb observations acquired at 0.5-cm^{-1} spectral resolution have
761 allowed us to monitor seasonal changes of temperature and abundance profiles
762 in the middle atmosphere of Titan from 2004 to 2017, i.e. over almost half a
763 Saturnian year. All vertical profiles displayed in this paper are available as
764 supplementary material and can be downloaded from the VESPA data portal
765 (Virtual European Solar and Planetary Access, <http://vespa.obspm.fr/planetary/data/>).
766 We summarize below some important results:

- 767 • During the northern winter, in the northern polar region, we observed
768 temperatures in the mesosphere above 0.1 mbar (~ 175 km) that are much
769 larger than at equatorial latitudes in the period 2005–2007 (northern
770 winter). This is likely due to compressional heating occurring in the
771 descending branch of a global circulation cell. It results in a stratopause
772 located around 0.01 mbar (~ 410 km), one pressure decade above that
773 around the equator (0.1 mbar, 275 km). Downwelling also explains the
774 large enrichment in most photochemical compounds compared to equatorial
775 and mid-latitudes, particularly in the stratosphere below the 0.1-mbar
776 region. The enrichment varies from one species to another, being huge for
777 molecules like HC_3N , C_6H_6 , C_4H_2 , C_3H_4 and HCN , and weak to inexistent
778 for C_2H_6 , C_3H_8 , and CO_2 . In 2009–2010, shortly after the equinox, we
779 derived a strong enrichment in all molecules above the 0.1-mbar (~ 250
780 km) region compared to winter conditions, a possible consequence of the
781 increasing solar flux and local photochemical production. Simultaneously,
782 the atmosphere cooled in the whole 1–0.001 mbar region (165–495 km).
783 A year or so later, in December 2011, the atmosphere had cooled above
784 0.03 mbar (~ 320 km) but warmed up below 0.03 mbar, probably due to
785 the increase of solar flux. Till January 2015, temperature continued to
786 increase below 0.03 mbar (340 km), yielding a stratopause located at 0.1
787 mbar (~ 280 km), similar to its location in the equatorial region.
- 788 • During northern spring at high northern latitudes, the enrichment in all
789 photochemical species in the range 1–0.1 mbar (175–280 km) persisted from

790 December 2011 to January 2015, possibly due to a residual circulation cell
791 as predicted by Lebonnois et al.'s (2012) General Circulation Model (see
792 Fig. 12 of Sylvestre et al., 2018).

- 793 • The southern polar region underwent strong seasonal changes in temperature
794 and abundance profiles from July 2010 to January 2016. From July 2010 to
795 September 2011, the atmosphere below 0.1 mbar (~ 280 km) cooled down,
796 likely in response to the decreasing solar flux. From September 2011 to
797 March 2015, the atmosphere in the region $0.2\text{--}4\times 10^{-4}$ mbar (225–500 km)
798 strongly cooled down, at least partly because of the strong enrichment in
799 photochemical compounds above 0.01 mbar (~ 350 km), which increases
800 the efficiency of the radiative cooling (Teanby et al., 2017). Additionally,
801 the mixing ratios we retrieved in March 2015 are larger at 2×10^{-5} mbar
802 (~ 645 km) than those measured *in situ* with the INMS at 1050 km (Cui
803 et al., 2009; Magee et al., 2009). Later, in September 2015, we observed
804 that the temperature had increased between 0.2 mbar (215 km) and 10^{-4}
805 mbar (600 km). According to Teanby et al. (2017), this is a result of
806 the slight reduction in infrared-active compounds and the strengthening
807 of the pole-to-pole circulation, which allows the adiabatic heating of the
808 descending branch to outstrip the thermal emission cooling. In January
809 2016, the temperatures below 0.01 mbar (~ 325 km) are much lower than
810 in September 2015, probably due to the lack of solar flux. In June
811 2016, we see that the polar vortex, characterized by an enrichment of
812 the photochemical species, was extending equatorward down to $\sim 50^\circ\text{S}$.
- 813 • The equatorial latitudes present weak seasonal variations of thermal and
814 abundance profiles from the northern winter to the northern spring. We
815 note that equatorial CO_2 abundance profiles show a local maximum at 1
816 mbar (188 km) and a local minimum near 0.1 mbar (290 km) that are not
817 predicted by photochemical models (Krasnopolsky, 2014; Loison et al.,
818 2015; Dobrijevic et al., 2016; Vuitton et al., 2019). We have been able
819 to detect HC_3N at equatorial latitudes at altitudes as high as ~ 580 km
820 (3×10^{-4} mbar) with an abundance of a few ppmv, consistent with UVIS
821 stellar occultation retrievals at 550 km (Koskinen et al., 2011).
- 822 • An oscillation of the thermal profile between 300 and 500 km has been
823 observed in December 2009 at 74°N . Its characteristics (vertical wavelength
824 and weak vertical phase velocity) are consistent with an inertia-gravity
825 wave, given the estimated zonal wind and meridional shear at this latitude
826 and time.

827 To conclude, we have shown that the descending branch of the circulation
828 cell strongly impacts the thermal structure and abundances of photochemical
829 products at high latitudes in the mesosphere and stratosphere. Comparing the
830 evolution of both poles is difficult since the coverage by the Cassini mission is not
831 symmetric in season. Moreover, the north pole in winter is 1 AU closer to the
832 Sun than the south pole in winter due to Saturn's eccentricity. This asymmetry

833 in the insolation pattern may lead to an asymmetry in the dynamics at high
834 latitudes. Unfortunately, the southern pole, presently in the polar night, cannot
835 be observed from ground-based facilities such as ALMA (Cordiner et al., 2018;
836 Thelen et al., 2019) but we can still study the evolution of the north pole during
837 the northern summer, in order to compare with the south pole at a similar
838 season.

839 **7. Acknowledgments**

840 C. M. thanks the ESEP label (n°2011-LABX-030) for his support. We
841 acknowledge support from the Centre National d'Études Spatiales (CNES) and
842 the Programme National de Planétologie (INSU/CNRS). We are grateful to the
843 CIRS team for their unflagging involvement in the processing and calibration of
844 the data. C. M. also thanks Véronique Vuitton for fruitful discussions.

845 **Bibliography**

846 **References**

- 847 Achterberg, R.K., Conrath, B.J., Gierasch, P.J., Flasar, F.M., Nixon, C.A.,
848 2008. Titan's middle-atmospheric temperatures and dynamics observed by
849 the Cassini Composite Infrared Spectrometer. *Icarus* 194, 263–277. doi:10.
850 1016/j.icarus.2007.09.029.
- 851 Achterberg, R.K., Gierasch, P.J., Conrath, B.J., Michael Flasar, F., Nixon,
852 C.A., 2011. Temporal variations of Titan's middle-atmospheric temperatures
853 from 2004 to 2009 observed by Cassini/CIRS. *Icarus* 211, 686–698. doi:10.
854 1016/j.icarus.2010.08.009.
- 855 Bézard, B., Yelle, R.V., Nixon, C.A., 2014. The composition of Titan's
856 atmosphere, in: Müller-Wodarg, I.C.F., Griffith, C.A., Lellouch, E., Cravens,
857 T.E. (Eds.), *Titan*. Cambridge, UK: Cambridge University Press, p. 158.
858 doi:10.1017/CB09780511667398.008.
- 859 Brasunas, J.C., 2012. Laser mode behavior of the Cassini CIRS Fourier
860 transform spectrometer at Saturn. *Infrared Phys. Technol.* 55, 533–537.
861 doi:10.1016/j.infrared.2012.07.003.
- 862 Conrath, B.J., Gierasch, P.J., Ustinov, E.A., 1998. Thermal Structure and Para
863 Hydrogen Fraction on the Outer Planets from Voyager IRIS Measurements.
864 *Icarus* 135, 501–517. doi:10.1006/icar.1998.6000.
- 865 Cordiner, M.A., Nixon, C.A., Charnley, S.B., Teanby, N.A., Molter, E.M.,
866 Kisiel, Z., Vuitton, V., 2018. Interferometric imaging of Titan's HC₃N,
867 H¹³CCCN and HCCC¹⁵N. *Astrophys. J. Lett.* 859, L15. doi:10.3847/
868 2041-8213/aac38d.
- 869 Coustenis, A., Jennings, D.E., Achterberg, R.K., Bampasidis, G., Lavvas, P.,
870 Nixon, C.A., Teanby, N.A., Anderson, C.M., Cottini, V., Flasar, F.M., 2016.
871 Titan's temporal evolution in stratospheric trace gases near the poles. *Icarus*
872 270, 409–420. doi:10.1016/j.icarus.2015.08.027.
- 873 Coustenis, A., Jennings, D.E., Achterberg, R.K., Bampasidis, G., Nixon, C.A.,
874 Lavvas, P., Cottini, V., Flasar, F.M., 2018. Seasonal Evolution of Titan's
875 Stratosphere Near the Poles. *Astrophys. J. Lett.* 854, L30. doi:10.3847/
876 2041-8213/aaadbd.
- 877 Crespin, A., Lebonnois, S., Vinatier, S., Bézard, B., Coustenis, A., Teanby,
878 N.A., Achterberg, R.K., Rannou, P., Hourdin, F., 2008. Diagnostics of Titan's
879 stratospheric dynamics using Cassini/CIRS data and the 2-dimensional IPSL
880 circulation model. *Icarus* 197, 556–571. doi:10.1016/j.icarus.2008.05.
881 010.

- 882 Cui, J., Yelle, R.V., Vuitton, V., Waite, J.H., Kasprzak, W.T., Gell, D.A.,
883 Niemann, H.B., Müller-Wodarg, I.C.F., Borggren, N., Fletcher, G.G., Patrick,
884 E.L., Raaen, E., Magee, B.A., 2009. Analysis of Titan's neutral upper
885 atmosphere from Cassini Ion Neutral Mass Spectrometer measurements.
886 *Icarus* 200, 581–615. doi:10.1016/j.icarus.2008.12.005.
- 887 De Kok, R.J., Teanby, N.A., Maltagliati, L., Irwin, P.G.J., Vinatier, S., 2014.
888 HCN ice in Titan's high-altitude southern polar cloud. *Nature* 514, 65–67.
889 doi:10.1038/nature13789.
- 890 Dobrijevic, M., Loison, J.C., Hickson, K.M., Gronoff, G., 2016. 1D-coupled
891 photochemical model of neutrals, cations and anions in the atmosphere of
892 Titan. *Icarus* 268, 313–339. doi:10.1016/j.icarus.2015.12.045.
- 893 Flasar, F.M., Achterberg, R.K., Conrath, B.J., Gierasch, P.J., Kunde, V.G.,
894 Nixon, C.A., Bjoraker, G.L., Jennings, D.E., Romani, P.N., Simon-Miller,
895 A.A., Bézard, B., Coustenis, A., Irwin, P.G.J., Teanby, N.A., Brasunas,
896 J.C., Pearl, J.C., Segura, M.E., Carlson, R.C., Mamoutkine, A., Schinder,
897 P.J., Barucci, A., Courtin, R., Fouchet, T., Gautier, D., Lellouch, E.,
898 Marten, A., Prangé, R., Vinatier, S., Strobel, D.F., Calcutt, S.B., Read, P.L.,
899 Taylor, F.W., Bowles, N., Samuelson, R.E., Orton, G.S., Spilker, L.J., Owen,
900 T.C., Spencer, J.R., Showalter, M.R., Ferrari, C., Abbas, M.M., Raulin,
901 F., Edgington, S., Ade, P., Wishnow, E.H., 2005. Titan's Atmospheric
902 Temperatures, Winds, and Composition. *Science* (80-.). 308, 975–978.
903 doi:10.1126/science.1111150.
- 904 Flasar, F.M., Kunde, V.G., Abbas, M.M., Achterberg, R.K., Ade, P., Barucci,
905 A., Bézard, B., Bjoraker, G.L., Brasunas, J.C., Calcutt, S.B., Carlson, R.C.,
906 Césarsky, C.J., Conrath, B.J., Coradini, A., Courtin, R., Coustenis, A.,
907 Edberg, S., Edgington, S., Ferrari, C., Fouchet, T., Gautier, D., Gierasch,
908 P.J., Grossman, K., Irwin, P.G.J., Jennings, D.E., Lellouch, E., Mamoutkine,
909 A.A., Marten, A., Meyer, J.P., Nixon, C.A., Orton, G.S., Owen, T.C., Pearl,
910 J.C., Prangé, R., Raulin, F., Read, P.L., Romani, P.N., Samuelson, R.E.,
911 Segura, M.E., Showalter, M.R., Simon-Miller, A.A., Smith, M.D., Spencer,
912 J.R., Spilker, L.J., Taylor, F.W., 2004. Exploring the Saturn system in the
913 thermal infrared: The composite infrared spectrometer. *Space Sci. Rev.* 115,
914 169–297. doi:10.1007/s11214-004-1454-9.
- 915 Fulchignoni, M., Ferri, F., Angrilli, F., Ball, A.J., Bar-Nun, A., Barucci, M.A.,
916 Bettanini, C., Bianchini, G., Borucki, W., Colombatti, G., Coradini, M.,
917 Coustenis, A., Debei, S., Falkner, P., Fanti, G., Flamini, E., Gaborit, V.,
918 Gard, R., Hamelin, M., Harri, A.M., Hathi, B., Jernej, I., Leese, M.R.,
919 Lehto, A., Stoppato, P.F.L., López-Moreno, J.J., Mäkinen, T., McDonnell,
920 J.A.M., McKay, C.P., Molina-Cuberos, G., Neubauer, F.M., Pirronello, V.,
921 Rodrigo, R., Saggin, B., Schwingenschuh, K., Seiff, A., Simões, F., Svedhem,
922 H., Tokano, T., Towner, M.C., Trautner, R., Withers, P., Zarnecki, J.C., 2005.
923 In situ measurements of the physical characteristics of Titan's environment.
924 *Nature* 438, 785–791. doi:10.1038/nature04314.

- 925 Jacquinet-Husson, N., Armante, R., Scott, N.A., Chédin, A., Crépeau, L.,
926 Boutammine, C., Bouhdaoui, A., Crevoisier, C., Capelle, V., Boonne, C.,
927 Poulet-Crovisier, N., Barbe, A., Chris Benner, D., Boudon, V., Brown, L.R.,
928 Buldyreva, J., Campargue, A., Coudert, L.H., Devi, V.M., Down, M.J.,
929 Drouin, B.J., Fayt, A., Fittschen, C., Flaud, J.M., Gamache, R.R., Harrison,
930 J.J., Hill, C., Hodnebrog, Ø., Hu, S.M., Jacquemart, D., Jolly, A., Jiménez,
931 E., Lavrentieva, N.N., Liu, A.W., Lodi, L., Lyulin, O.M., Massie, S.T.,
932 Mikhailenko, S., Müller, H.S.P., Naumenko, O.V., Nikitin, A.V., Nielsen,
933 C.J., Orphal, J., Perevalov, V.I., Perrin, A., Polovtseva, E., Predoi-Cross, A.,
934 Rotger, M., Ruth, A.A., Yu, S.S., Sung, K., Tashkun, S.A., Tennyson, J.,
935 Tyuterev, V.G., Vander Auwera, J., Voronin, B.A., Makie, A., 2016. The
936 2015 edition of the GEISA spectroscopic database. *J. Mol. Spectrosc.* 327,
937 31–72. doi:10.1016/j.jms.2016.06.007.
- 938 Jennings, D.E., Anderson, C.M., Samuelson, R.E., Flasar, F.M., Nixon, C.A.,
939 Bjoraker, G.L., Romani, P.N., Achterberg, R.K., Cottini, V., Hesman, B.E.,
940 Kunde, V.G., Carlson, R.C., De Kok, R.J., Coustenis, A., Vinatier, S.,
941 Bampasidis, G., Teanby, N.A., Calcutt, S.B., 2012. First observation in the
942 south of Titan’s far-infrared 220 cm⁻¹ cloud. *Astrophys. J. Lett.* 761, L15.
943 doi:10.1088/2041-8205/761/1/L15.
- 944 Jennings, D.E., Flasar, F.M., Kunde, V.G., Nixon, C.A., Segura, M.E., Romani,
945 P.N., Goriunov, N., Albright, S.A., Brasunas, J.C., Carlson, R.C., Mamoutkine,
946 A.A., Guandique, E.A., Kaelberer, M.S., Aslam, S., Achterberg, R.K.,
947 Bjoraker, G.L., Anderson, C.M., Cottini, V., Pearl, J.C., Smith, M.D.,
948 Hesman, B.E., Barney, R.D., Calcutt, S.B., Vellacott, T.J., Spilker, L.J.,
949 Edgington, S.G., Brooks, S.M., Ade, P.A.R., Schinder, P.J., Coustenis,
950 A., Courtin, R., Michel, G., Fettig, R.K., Pilorz, S., Ferrari, C., 2017.
951 Composite infrared spectrometer (CIRS) on Cassini. *Appl. Opt.* 56, 5274–
952 5294. doi:10.1364/AO.56.005274.
- 953 Koskinen, T.T., Yelle, R.V., Snowden, D.S., Lavvas, P., Sandel, B.R., Capalbo,
954 F.J., Benilan, Y., West, R.A., 2011. The mesosphere and lower thermosphere
955 of Titan revealed by Cassini/UVIS stellar occultations. *Icarus* 216, 507–534.
956 doi:10.1016/j.icarus.2011.09.022.
- 957 Krasnopolsky, V.A., 2012. Titan’s photochemical model: Further update,
958 oxygen species, and comparison with Triton and Pluto. *Planet. Space Sci.*
959 73, 318–326. doi:10.1016/j.pss.2012.08.013.
- 960 Krasnopolsky, V.A., 2014. Chemical composition of Titan’s atmosphere and
961 ionosphere: Observations and the photochemical model. *Icarus* 236, 83–91.
962 doi:10.1016/j.icarus.2014.03.041.
- 963 Kunde, V.G., Ade, P.A.R., Barney, R.D., Bergman, D., Bonnal, J.F., Borelli, R.,
964 Boyd, D., Brasunas, J.C., Brown, G.V., Calcutt, S.B., Carroll, F., Courtin,
965 R., Cretolle, J.B., Crooke, J.A., Davis, M.A., Edberg, S., Fettig, R.K., Flasar,
966 F.M., Glenar, D.A., Graham, S., Hagopian, J.G., Hakun, C.F., Hayes, P.A.,

- 967 Herath, L., Horn, L., Jennings, D.E., Karpati, G., Kellebenz, C., Lakew, B.,
968 Lindsay, J., Lohr, J., Lyons, J.J., Martineau, R.J., Martino, A.J., Matsumura,
969 M., McCloskey, J., Melak, T., Michel, G., Morrell, A., Mosier, C., Pack, L.G.,
970 Plants, M., Robinson, D., Rodriguez, L., Romani, P.N., Schaefer, B., Schmidt,
971 S.M., Trujillo, C., Vellacott, T.J., Wagner, K., Yun, D., 1996. Cassini Infrared
972 Fourier Spectroscopic Investigation. *Proc. SPIE* 2803, 162–177. doi:10.1117/
973 12.253416.
- 974 Lavvas, P., Yelle, R.V., Griffith, C.A., 2010. Titan’s vertical aerosol structure
975 at the Huygens landing site: Constraints on particle size, density, charge, and
976 refractive index. *Icarus* 210, 832–842. doi:10.1016/j.icarus.2010.07.025.
- 977 Lebonnois, S., Burgalat, J., Rannou, P., Charnay, B., 2012. Titan global climate
978 model: A new 3-dimensional version of the IPSL Titan GCM. *Icarus* 218,
979 707–722. doi:10.1016/j.icarus.2011.11.032.
- 980 Lebonnois, S., Toublanc, D., Hourdin, F., Rannou, P., 2001. Seasonal Variations
981 of Titan’s Atmospheric Composition. *Icarus* 152, 384–406. doi:10.1006/
982 icar.2001.6632.
- 983 Lellouch, E., Bézard, B., Flasar, F.M., Vinatier, S., Achterberg, R.K., Nixon,
984 C.A., Bjoraker, G.L., Gorius, N., 2014. The distribution of methane in Titan’s
985 stratosphere from Cassini/CIRS observations. *Icarus* 231, 323–337. doi:10.
986 1016/j.icarus.2013.12.016.
- 987 Loison, J.C., Hébrard, E., Dobrijevic, M., Hickson, K.M., Caralp, F., Hue, V.,
988 Gronoff, G., Venot, O., Bénilan, Y., 2015. The neutral photochemistry of
989 nitriles, amines and imines in the atmosphere of Titan. *Icarus* 247, 218–247.
990 doi:10.1016/j.icarus.2014.09.039.
- 991 Lora, J.M., Lunine, J.I., Russell, J.L., 2015. GCM simulations of Titan’s middle
992 and lower atmosphere and comparison to observations. *Icarus* 250, 516–528.
993 doi:10.1016/j.icarus.2014.12.030.
- 994 Magee, B.A., Waite, J.H., Mandt, K.E., Westlake, J., Bell, J., Gell, D.A., 2009.
995 INMS-derived composition of Titan’s upper atmosphere: Analysis methods
996 and model comparison. *Planet. Space Sci.* 57, 1895–1916. doi:10.1016/j.
997 pss.2009.06.016.
- 998 Newman, C.E., Lee, C., Lian, Y., Richardson, M.I., Toigo, A.D., 2011.
999 Stratospheric superrotation in the TitanWRF model. *Icarus* 213, 636–654.
1000 doi:10.1016/j.icarus.2011.03.025.
- 1001 Niemann, H.B., Atreya, S.K., Demick, J.E., Gautier, D., Haberman, J.A.,
1002 Harpold, D.N., Kasprzak, W.T., Lunine, J.I., Owen, T.C., Raulin, F.,
1003 2010. Composition of Titan’s lower atmosphere and simple surface
1004 volatiles as measured by the Cassini-Huygens probe gas chromatograph mass
1005 spectrometer experiment. *J. Geophys. Res.* 115, E12006. doi:10.1029/
1006 2010JE003659.

- 1007 Nixon, C.A., Achterberg, R.K., Teanby, N.A., Irwin, P.G.J., Flaud, J.M.,
1008 Kleiner, I., Dehayem-Kamadjeu, A., Brown, L.R., Sams, R.L., Bézard, B.,
1009 Coustenis, A., Ansty, T.M., Mamoutkine, A., Vinatier, S., Bjoraker, G.L.,
1010 Jennings, D.E., Romani, P.N., Flasar, F.M., 2010. Upper limits for undetected
1011 trace species in the stratosphere of Titan. *Faraday Discuss.* 147, 65–81.
1012 doi:10.1039/c003771k.
- 1013 Nixon, C.A., Ansty, T.M., Lombardo, N.A., Achterberg, R.K., Bjoraker, G.L.,
1014 Flasar, F.M., Annex, A., Rice, M., 2019. Cassini Composite Infrared
1015 Spectrometer (CIRS) Observations of Titan 2004-2017. *Astrophys. J. Suppl.*
1016 Ser. .
- 1017 Peralta, J., Imamura, T., Read, P.L., Luz, D., Piccialli, A., López-Valverde,
1018 M.A., 2014a. Analytical solution for waves in planets with atmospheric
1019 superrotation. I. Acoustic and inertia-gravity waves. *Astrophys. J. Suppl.*
1020 Ser. 213, 17. doi:10.1088/0067-0049/213/1/17.
- 1021 Peralta, J., Imamura, T., Read, P.L., Luz, D., Piccialli, A., López-Valverde,
1022 M.A., 2014b. Analytical solution for waves in planets with atmospheric
1023 superrotation. II. Lamb, surface, and centrifugal waves. *Astrophys. J. Suppl.*
1024 Ser. 213, 18. doi:10.1088/0067-0049/213/1/18.
- 1025 Sung, K., Toon, G.C., Mantz, A.W., Smith, M.A.H., 2013. FT-IR measurements
1026 of cold C₃H₈ cross sections at 7-15 μm for Titan atmosphere. *Icarus* 226,
1027 1499–1513. doi:10.1016/j.icarus.2013.07.028.
- 1028 Sylvestre, M., Teanby, N.A., Vinatier, S., Lebonnois, S., Irwin, P.G.J.,
1029 2018. Seasonal evolution of C₂N₂, C₃H₄, and C₄H₂ abundances in Titan's
1030 lower stratosphere. *Astron. Astrophys.* 609, A64. doi:10.1051/0004-6361/
1031 201630255.
- 1032 Teanby, N.A., Bézard, B., Vinatier, S., Sylvestre, M., Nixon, C.A., Irwin,
1033 P.G.J., De Kok, R.J., Calcutt, S.B., Flasar, F.M., 2017. The formation
1034 and evolution of Titan's winter polar vortex. *Nat. Commun.* 8, 1586.
1035 doi:10.1038/s41467-017-01839-z.
- 1036 Teanby, N.A., Sylvestre, M., Sharkey, J., Nixon, C.A., Vinatier, S., Irwin,
1037 P.G.J., 2019. Seasonal evolution of Titan's stratosphere during the Cassini
1038 mission. *Geophys. Res. Lett.* 46, 3079–3089. doi:10.1029/2018gl081401.
- 1039 Thelen, A.E., Nixon, C.A., Chanover, N.J., Cordiner, M.A., Molter, E.M.,
1040 Teanby, N.A., Irwin, P.G.J., Serigano, J., Charnley, S.B., 2019. Abundance
1041 measurements of Titan's stratospheric HCN, HC₃N, C₃H₄, and CH₃CN from
1042 ALMA observations. *Icarus* 319, 417–432. doi:10.1016/j.icarus.2018.09.
1043 023.
- 1044 Vinatier, S., Bézard, B., De Kok, R.J., Anderson, C.M., Samuelson, R.E., Nixon,
1045 C.A., Mamoutkine, A., Carlson, R.C., Jennings, D.E., Guandique, E.A.,
1046 Bjoraker, G.L., Flasar, F.M., Kunde, V.G., 2010. Analysis of Cassini/CIRS

- 1047 limb spectra of Titan acquired during the nominal mission II: Aerosol
1048 extinction profiles in the 600-1420 cm^{-1} spectral range. *Icarus* 210, 852–866.
1049 doi:10.1016/j.icarus.2010.06.024.
- 1050 Vinatier, S., Bézard, B., Lebonnois, S., Teanby, N.A., Achterberg, R.K., Gorius,
1051 N., Mamoutkine, A., Guandique, E., Jolly, A., Jennings, D.E., Flasar, F.M.,
1052 2015. Seasonal variations in Titan’s middle atmosphere during the northern
1053 spring derived from Cassini/CIRS observations. *Icarus* 250, 95–115. doi:10.
1054 1016/j.icarus.2014.11.019.
- 1055 Vinatier, S., Rannou, P., Anderson, C.M., Bézard, B., De Kok, R.J., Samuelson,
1056 R.E., 2012. Optical constants of Titan’s stratospheric aerosols in the 70-
1057 1500 cm^{-1} spectral range constrained by Cassini/CIRS observations. *Icarus*
1058 219, 5–12. doi:10.1016/j.icarus.2012.02.009.
- 1059 Vinatier, S., Schmitt, B., Bézard, B., Rannou, P., Dauphin, C., De Kok,
1060 R.J., Jennings, D.E., Flasar, F.M., 2018. Study of Titan’s fall southern
1061 stratospheric polar cloud composition with Cassini/CIRS: Detection of
1062 benzene ice. *Icarus* 310, 89–104. doi:10.1016/j.icarus.2017.12.040.
- 1063 Vuitton, V., Yelle, R.V., Klippenstein, S.J., Hörst, S.M., Lavvas, P., 2019.
1064 Simulating the density of organic species in the atmosphere of Titan with
1065 a coupled ion-neutral photochemical model. *Icarus* 324, 120–197. doi:10.
1066 1016/j.icarus.2018.06.013.
- 1067 West, R.A., Del Genio, A.D., Barbara, J.M., Toledo, D., Lavvas, P., Rannou, P.,
1068 Turtle, E.P., Perry, J., 2016. Cassini Imaging Science Subsystem observations
1069 of Titan’s south polar cloud. *Icarus* 270, 399–408. doi:10.1016/j.icarus.
1070 2014.11.038.

1071 **Appendices**

1072 *Appendix A: list of observations*

Flyby	Date	Solar longitude (°)	Solar zenith angle (°)	Local time (hh:mm)	Latitude FP3 (°)	Vertical resolution (km)	Altitude shift applied for each block 1/2/3/4 (km) (see Appendix B)
90°N–60°N							
T3	14 Feb 2005	301	108	15:40	79	40	-10/-10/-10/-10/-10/-10/-10/-10
T4	31 Mar 2005	303	107	08:10	82	10	30/4
T19	09 Oct 2006	324	117	19:50	62	40	67/50/53/45
T35	30 Aug 2007	335	92	16:10	69	40	-9/-9/-9/-9
T59	24 Jul 2009	359	68	13:12	66	40	23/23
T64	28 Dec 2009	5	73	12:00	74	40	-3/-10/-8/-12
T67	05 Apr 2010	8	87	1:00	88	40	9/2/4/0
T79	13 Dec 2011	28	77	17:35	79	40	-9/-11/-9/-9
T108	12 Jan 2015	64	47	12:45	70	40	13/5/13/13
60°N–20°N							
T14	20 May 2006	318	148	23:33	51	40	-19/-26/-19/-26
T16	21 Jul 2006	321	143	22:00	47	40	8/1
T24	29 Jan 2007	328	69	15:45	30	40	10/0/0/-5
T43	12 May 2008	344	60	14:38	39	40	11/11/1
T54	05 May 2009	357	95	18:20	22	10	-12/-12/-12/-12
T76	08 May 2011	21	110	2:20	54	10	18/18/13/13
T84	06 Jun 2012	34	77	6:17	46	40	10/5/10/5
T90	05 Apr 2013	44	100	4:40	26	40	-6/-9/-8/-9
T103	20 Jul 2014	58	67	7:00	30	40	-3/-13/-13/-13
T123	27 Sep 2016	83	45	8:33	51	10	-3
T125	30 Nov 2016	85	74	5:32	51	40	13/13/16/16
20°N–20°S							
Tb	13 Dec 2004	299	91	5:33	-15	40	28/33/33/33
T18	07 Sep 2006	322	32	9:48	-12	20	0/0/0/0

Flyby	Date	Solar longitude (°)	Solar zenith angle (°)	Local time (hh:mm)	Latitude FP3 (°)	Vertical resolution (km)	Altitude shift applied for each block 1/2/3/4 (km) (see Appendix B)
T21	12 Dec 2006	326	150	21:59	17	40	-3/-8/2/-6
T23	12 Jan 2007	327	21	11:21	4	40	7/2/7/2
T27	25 Mar 2007	330	55	15:48	-21	40	20/16/23/18
T47	19 Nov 2008	351	20	10:43	-9	40	8/2/2/-2
T49	21 Dec 2008	352	142	21:31	16	40	25/25/15
T51	21 Mar 2009	355	156	22:26	0	40	20/15/25/15
T57	22 Jun 2009	358	110	19:20	-8	20	7/7/7/12
T83	21 May 2012	34	89	17:55	1	40	36/33/35/30
T92	10 Jul 2013	47	172	00:34	-19	40	12/8/12/8
T95	14 Oct 2013	50	23	12:19	-2	40	6/3/6/-2
T96	01 Dec 2013	51	140	1:30	11	40	31/28/31/31
T102	18 Jun 2014	57	99	5:04	11	40	-13/-15/-22/-22
T121	25 Jul 2016	81	89	6:04	1	40	-19/-22/-14/-15
S98	17 Feb 2017	87	161	23:00	-10	115	11/16/21/31
20°S–60°S							
T6	22 Aug 2005	308	89	20:07	-57	10	-1
T15	02 Jul 2006	320	45	13:50	-54	40	5/2/5/2
T28	11 Apr 2007	330	74	6:45	-31	30	4
T39	21 Dec 2007	339	99	4:30	-46	40	13/7/12/4
T42	25 Mar 2008	343	92	4:55	-57	40	1/-9
T58	24 Jul 2009	359	108	20:25	-58	20	0/6/6/6
T82	18 Feb 2012	31	141	1:54	-46	40	1/-9/1/1
T101	17 May 2014	56	124	19:47	-34	40	23/18/23/21
T106	23 Oct 2014	61	124	19:40	-44	40	-27/-33/-24
T120	07 Jun 2016	79	137	3:07	-49	40	2/-5/-3/-4

Flyby	Date	Solar longitude (°)	Solar zenith angle (°)	Local time (hh:mm)	Latitude FP3 (°)	Vertical resolution (km)	Altitude shift applied for each block 1/2/3/4 (km) (see Appendix B)
T126	23 May 2017	90	128	20:00	-49	40	10/-10
60°S–90°S							
T61	25 Aug 2009	1	102	3:42	-70	40	33/23
T62	12 Oct 2009	2	88	17:28	-72	20	5/5/10/5
T65	12 Jan 2010	5	108	23:34	-76	40	-5/-7/-5/-7
T71	06 Jul 2010	11	103	2:15	-80	40	-19
T78	11 Sep 2011	25	98	14:40	-84	40	-1/-8/-4/-8
T110	16 Mar 2015	66	122	2:37	-81	40	108/108/108/82
T113	29 Sep 2015	72	113	15:40	-84	40	71/74/89
T115	31 Jan 2016	76	118	4:00	-84	40	-48/-18/-48/12
T117	16 Feb 2016	76	126	0:00	-80	40	-29/-39

Table 1: List of limb observations used in this study.

1073 *Appendix B: Limb spectra averaging*

1074 During a given flyby, the CIRS instrument acquired a set of limb spectra in
 1075 different altitude ranges during sequences that we call “blocks” (Fig. 17). In a
 1076 block, each of the ten detectors recorded around 30 spectra at roughly the same
 1077 altitude level, as the spacecraft was approaching or getting away from Titan.
 1078 For each block, we first averaged spectra detector-by-detector.

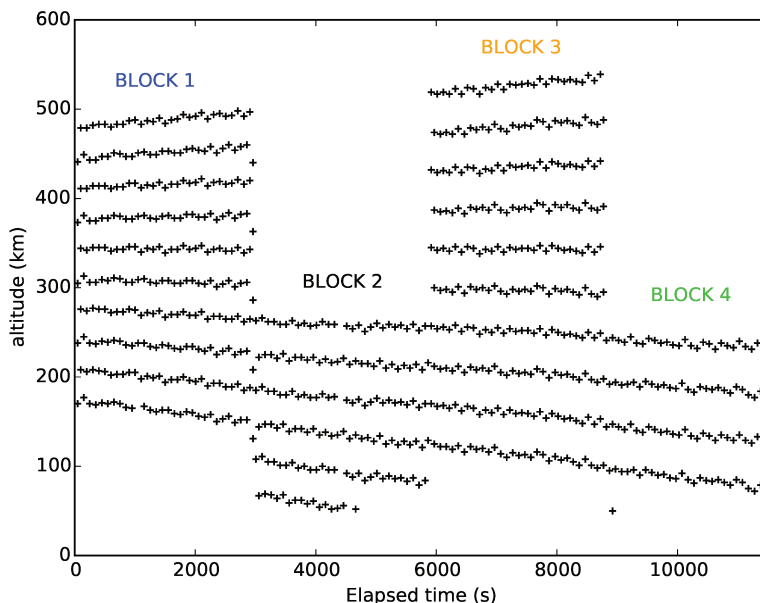


Figure 17: Diagram of measurements performed by CIRS during the T64 flyby (Dec 2009, 74 °N). Each cross corresponds to a spectrum acquired at a given altitude (y-axis) and time (x-axis).

1079 We considered the vertical profile of the spectral radiance in each block, using
 1080 the ten (or less) available averaged spectra (Fig. 18). We integrated the radiance
 1081 over the spectral range 1250-1350 cm^{-1} of the ν_4 band of methane, and altitudes
 1082 were extracted from the CIRS database. Without instrument pointing error, we
 1083 should observe a continuity of the radiance profile from one block to another. In
 1084 fact, we noticed that, for some flybys, we needed to apply a relative altitude shift
 1085 from one block to another. We used one of the two deepest blocks as a reference
 1086 block (e.g. Block 2 in Fig. 17). The reference block is chosen based upon two
 1087 criteria: (1) a medium vertical resolution and (2) one of the two deepest blocks
 1088 since we determined the vertical shift from the fit of the P- and Q-branches
 1089 of the ν_4 methane band in the deepest limb spectra (Section 3.1). Vertical
 1090 shift adjustments relative to the pointing information in the CIRS database
 1091 may originate from the pointing precision achieved through the momentum

1092 wheels of Cassini, which is about 4×10^{-5} rad (Flasar et al., 2004). For the
 1093 limb observations used here, the spacecraft was usually at typically 150 000 km
 1094 from Titan, which gives an error on altitude of about 6 km. In the case shown in
 1095 Fig. 19, we needed to apply relative altitude shifts of about +7 km on Block 1,
 1096 +2 km on Block 3 and -2 km on Block 4. These relative altitude shifts applied
 1097 to the blocks are consistent with the spacecraft pointing precision. This is also
 1098 the case for most of the blocks of limb spectra listed in Table 1 (last column).
 1099 The total altitude shift of each block is the sum of this relative altitude shift and
 1100 the shift derived from the fit of the P- and Q-branches of the ν_4 methane band
 1101 described in section 3.1. Based on the altitude of limb spectra in the reference
 1102 block, we built an altitude grid with a step equal to the vertical resolution of
 1103 the observation. Taking into account the relative altitude shift of each block,
 1104 we linearly interpolated the spectra of each block over this grid and performed
 1105 a linear combination of the spectra from the different blocks.

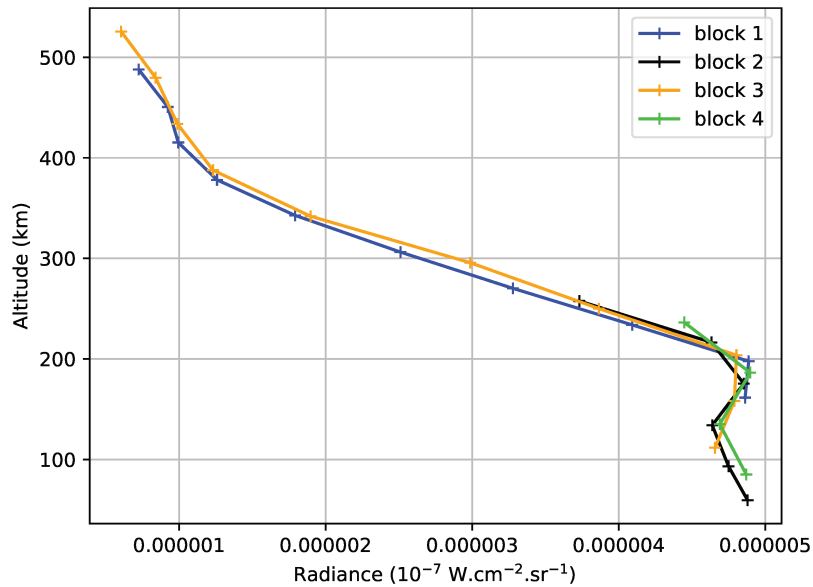


Figure 18: Profiles of spectral radiance integrated over the spectral range $1250\text{-}1350\text{ cm}^{-1}$ for each block of data shown in Fig. 17. Each point corresponds to an averaged spectrum for one specific detector. Colors represent the different blocks used.

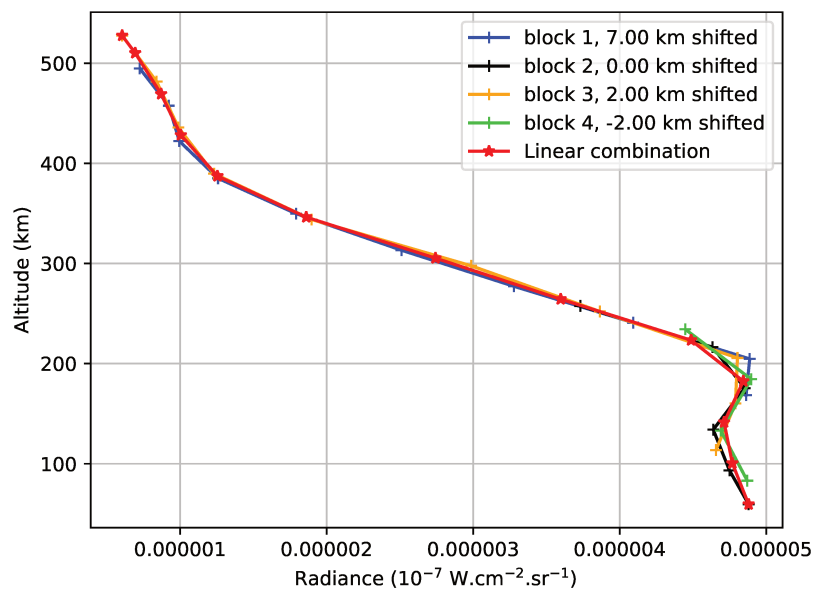


Figure 19: Profiles of spectral radiance integrated over the spectral range $1250\text{-}1350\text{ cm}^{-1}$ after shifting Blocks 1, 3, 4 relative to Block 2. Each point corresponds to an averaged spectrum for one specific detector. Colors represent the different blocks used. The red profile correspond to the linear combination of the radiances from all four blocks.

1106 *Appendix C: negative continuum correction*

1107 Some calibrated FP4 limb spectra show a negative continuum from 1075 to
 1108 1200 cm^{-1} at high altitudes (see Fig. 20 in red) where the signal is low (SNR <
 1109 1). When selecting spectra from the database, we removed from the average the
 1110 spectra showing by eye a negative continuum, referred hereafter as “corrupted”
 1111 spectra. However, the averaged spectra we obtained still presented in some
 1112 cases a negative continuum. We tried an approach to correct the continuum
 1113 in such averaged spectra and estimate the error propagation to the retrieved
 1114 temperature profile.

1115 In the simple case shown here, we extracted from the same block and detector
 1116 two adjacent spectra: a correct spectrum (used as a reference), and a corrupted
 1117 one (Fig. 20). The difference spectrum is close to 0 at 1500 cm^{-1} and shows
 1118 a linear dependence with wavenumber. We therefore decided to add a linear
 1119 radiance contribution to the corrupted spectrum. To do so, we defined on the
 1120 corrupted spectrum three points. Point A, at $x_A = 1100 \text{ cm}^{-1}$, is located in
 1121 the spectral region that we usually use to retrieve the haze optical depth from
 1122 the fit of the continuum. Radiance y_A corresponds to the radiance averaged
 1123 between 1080 and 1120 cm^{-1} . Point B is located at $x_B = 1415 \text{ cm}^{-1}$, between
 1124 the R branch of the $\text{CH}_4 \nu_4$ band and the $\text{C}_2\text{H}_6 \nu_7$ band, and y_B corresponds
 1125 to the averaged radiance between 1406 and 1424 cm^{-1} . Point C is located at
 1126 $x_C = 1487 \text{ cm}^{-1}$, close to the edge of the spectrum.

1127 The linear radiance correction δy that we added to the corrupted spectrum
 1128 is:

$$\delta y = \frac{y_A - y_B}{x_B - x_A} * (x - x_C) \quad (6)$$

1129 The corrected spectrum is then:

$$I_{corrected} = I_{corrupted} + \delta y \quad (7)$$

1130 We added the radiance correction from Eq. 6 to any averaged spectrum in
 1131 which the continuum appeared to be negative.

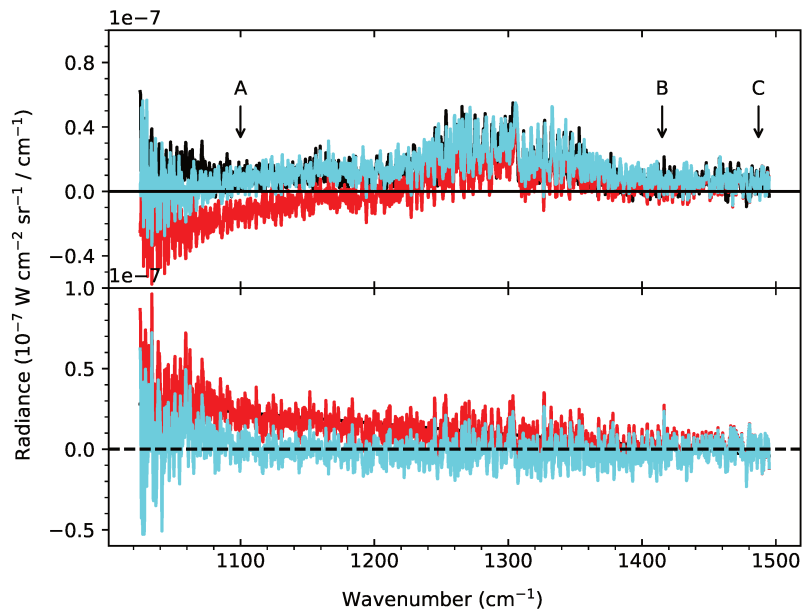


Figure 20: Top panel: a spectrum used as a reference (black) and a corrupted spectrum (red) extracted from Detector 30 in Block 1 of Flyby T71. After the correction procedure, we obtain the spectrum shown in blue. Bottom panel: residuals between *i*) the reference spectrum and the corrupted spectrum (red), and *ii*) the reference spectrum and the corrected spectrum (blue).

1132 *7.1. Appendix D: Influence of the methane abundance on the retrievals*

1133 Our hypothesis of a constant methane mixing ratio in the stratosphere at
 1134 all latitudes may be questioned, considering the work of Lellouch et al. (2014).
 1135 Analyzing Cassini/CIRS spectra of both the rotation and ν_4 methane bands,
 1136 these authors derived latitudinal variations of the stratospheric CH_4 mixing
 1137 ratio during the northern winter, ranging from 1% at the equator and $50\text{-}55^\circ\text{N}$
 1138 and S to 1.5% at $30\text{-}35^\circ\text{N}$ and S and at the poles. We investigated the influence
 1139 of using 1% of methane (instead of 1.48%) on the temperature and molecular
 1140 abundance profile retrievals. We selected the T49 flyby observations (December
 1141 2008, 16°N) and conducted the methodology previously used but with a CH_4
 1142 mixing ratio of 1% instead of 1.48%.

1143 The retrieved temperature profile is at most 4 K warmer with 1% of methane
 1144 in the stratosphere below the 0.1-mbar pressure level (~ 290 km). This warmer
 1145 temperature profile impacts the retrieved abundance profiles, which are about
 1146 20% smaller than those retrieved with 1.48% (Fig. 21). We did not take into
 1147 account this uncertainty on the molecular profiles displayed in Figs. 4-13 as
 1148 Lellouch et al.'s (2014) analysis is limited to the northern winter and the results
 1149 may be different during the northern spring. We also chose to be consistent
 1150 over our whole study in which all retrievals were performed with a uniform
 1151 CH_4 mixing ratio of 1.48%. This investigation points out the importance of
 1152 constraining the methane abundance profile as a function of location and season.

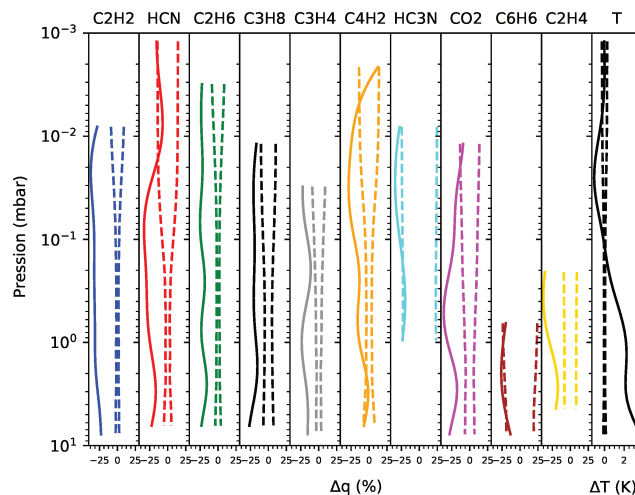


Figure 21: Relative variation of the retrieved mixing ratio (%) and temperature (K) profiles corresponding to a change of the CH_4 mixing ratio above the troposphere from 1.48 % to 1.00% (solid lines). CIRS spectra recorded in December 2008 at 16°N were used for this test. Dashed lines correspond to the formal errors attached to the retrieved profiles with 1.48% of methane.

A.4 Codes informatiques

A.4.1 Code : noise.py

```
#!/usr/bin/env python
# -*- coding: utf-8 -*-
# Purpose: take into account spikes for the noise file
# Author: Christophe MATHE
# Date: 07/03/18

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import os
import math
import sys

def Gauss(x,x0,y0,sigma):
    f = np.zeros(x.shape[0])
    for i in range(x0.shape[0]):
        f += y0[i] * np.exp(-(x-x0[i])**2/(2*sigma**2))
    return f

def smooth(y,box_pts):
    y_smooth = np.median(y)
    return y_smooth

path = '/home/cmathe/Documents/codes/inversion_v4/data_input/'

# Lecture des donnees
data_noise = np.loadtxt(path+'2000_NESR_FP3_0p5cm-1.txt',skiprows=1)
#~ data_noise = np.loadtxt(path+'2000_NESR_FP4_0p5cm-1.txt',skiprows=1)
x_noise = data_noise[:,0]
y_noise = data_noise[:,1]*1e7
mask_noise = (x_noise >= 600) & (x_noise <= 1100)
#~ mask_noise = (x_noise >= 1100) & (x_noise <= 1495)
x_noise_cut = x_noise[mask_noise]
y_noise_cut = y_noise[mask_noise]

file_obs = os.listdir('observations/')
list.sort(file_obs)
nb_obs = 8
stddev = np.zeros((2221,nb_obs)) # pour le FP3
#~ stddev = np.zeros((1881,nb_obs)) # pour le FP4
for i in range(nb_obs):
    data = np.loadtxt('observations/'+file_obs[i],skiprows=3)
    x = data[:,0]
    stddev[:,i] = data[:,3]*1e7

# recupere le fwhm
open_file = open('observations/'+file_obs[0])
data_file = open_file.readlines()
```

```

FWHM = float(data_file[0].split()[0])

# Interpoler pour avoir les memes dimensions
stddev = np.mean(stddev,1)
stddev_interp = np.interp(x_noise_cut,x,stddev)

# Smoother la stddev pour creer le seuil
nb_box = 42
stddev_smooth = np.zeros(nb_box)
npts_box = stddev_interp.shape[0]/nb_box
reste = stddev_interp.shape[0]%nb_box

for i in range(nb_box):
    stddev_smooth[i] = smooth(stddev_interp[i*npts_box:(i+1)*npts_box],nb_box)
x_smooth = np.linspace(x_noise_cut[0],x_noise_cut[-1],stddev_smooth.shape[0])
stddev_smooth_interp = np.interp(x_noise_cut,x_smooth,stddev_smooth)

# Détection des spikes
factor = 1.20
seuil = stddev_smooth_interp*factor
x_spike = x_noise_cut[np.where(stddev_interp > seuil)]
y_spike = stddev_interp[np.where(stddev_interp > seuil)]
y_noise_seuil = stddev_smooth_interp[np.where(stddev_interp > seuil)]

# Recherche des maxima des spikes
x_max=np.zeros([])
y_max=np.zeros([])
y_noise_spike=np.zeros([])
up=x_spike[0]
cpt=0
i=1
ii=0
while((cpt+i) < x_spike.shape[0]):
    if ((x_spike[cpt+i] - up) >= FWHM): # ecart entre deux pics
        up = x_spike[cpt+i]
        i+=1
    else:
        b = up
        u = x_spike[cpt+i]
        ii = 0
        while((u-b) < FWHM):
            if( (cpt+i+1) < x_spike.shape[0] ):
                b = x_spike[cpt+i+ii]
                ii+=1
            if (b != x_spike[-1]):
                u = x_spike[cpt+i+ii]
            else:
                b = x_spike[-2]
                u = x_spike[-1]
                break
        else:
            u = x_spike[-1]
            break

```

```

mask = (x_spike >= x_spike[cpt+i-1]) & (x_spike <= x_spike[cpt+i+ii-1])
xmask = x_spike[mask]
ymask = y_spike[mask]
print xmask,x_spike[cpt+i-1],x_spike[cpt+i+ii-1],i,ii,cpt
y_noise_mask = y_noise_seuil[mask]
y_max = np.append(y_max,max(ymask))
y_noise_spike = np.append(y_noise_spike,y_noise_mask[np.argmax(ymask)])
x_max = np.append(x_max,xmask[np.argmax(ymask)])
up = xmask[-1]
cpt += xmask.shape[0]
i=i-1

# Modélisation des gaussiennes
b = np.sqrt(y_max**2 - y_noise_spike**2)
a = Gauss(x_noise,x_max,b,FWHM)
y_noise_mod = np.sqrt(a**2+y_noise**2)

# Ecriture du nouveau NESR FILE
np.savetxt(file_obs[0].split('_')[0]+'2000_NESR_FP3_0p5cm-1_modified.txt',np.c_[x_noise,y_noise_mod],fmt

# PLOT
plt.figure(0,figsize=(25,10))

plt.title('MODIFIED NESR FILE, '+file_obs[0].split('_')[0])
plt.plot(x_noise_cut,y_noise_cut,color='cyan',label='NESR')
plt.plot(x_noise_cut,stddev_interp,color='black',label='Stddev column(4)')
plt.plot(x_noise_cut,stddev_smooth_interp,'-',color='green',label='median stddev')
plt.plot(x_noise_cut,seuil,'--',color='green',label='Seuil: median stddev * '+str(factor*100)+'%')
plt.plot(x_noise,a,'--',color='orange',label='Gaussienne')
plt.plot(x_noise,y_noise_mod,'--',color='red',label='NESR mod')
plt.scatter(x_spike,y_spike,color='orange',label='spike')
plt.scatter(x_max[1:],y_max[1:],color='red',label='spike max')
plt.text(1050,2.8,'0.5 Hz spike',va='center')
plt.text(1050,2.6,'8 Hz spike (574,765,956)',va='center')
plt.text(1050,2.4,'8.33 Hz spike (596,797,996)',va='center')
plt.annotate("",xy=(1034, 2.8), xycoords='data',
             xytext=(1046, 2.8), textcoords='data',
             arrowprops=dict(arrowstyle="<->",
                             color="black",
                             patchB=None,
                             shrinkB=0,
                             ))
plt.annotate("",xy=(1034, 2.6), xycoords='data',
             xytext=(1046, 2.6), textcoords='data',
             arrowprops=dict(arrowstyle="->",
                             color="red",
                             patchB=None,
                             shrinkB=0,
                             ))
plt.annotate("",xy=(1034, 2.4), xycoords='data',
             xytext=(1046, 2.4), textcoords='data',
             arrowprops=dict(arrowstyle="->",
                             color="blue",

```

```
        patchB=None,
        shrinkB=0,
    ))
for i in [574,765,956]:
    plt.annotate("",xy=(i, 0.2), xycoords='data',
                 xytext=(i, 0), textcoords='data',
                 arrowprops=dict(arrowstyle="->",
                                 color="red",
                                 patchB=None,
                                 shrinkB=2,
                                 ))
for i in [596,797,996]:
    plt.annotate("",xy=(i, 0.2), xycoords='data',
                 xytext=(i, 0), textcoords='data',
                 arrowprops=dict(arrowstyle="->",
                                 color="blue",
                                 patchB=None,
                                 shrinkB=2,
                                 ))
plt.xlabel('Wavenumber (cm-1)')
plt.ylabel('Intensity (10-7 W cm-2 sr-1 / cm-1)')
plt.ylim(0,4.2)
plt.xlim(x_noise[0],x_noise[-1])
plt.legend(loc=0)
plt.savefig(file_obs[0].split('_')[0]+'_filenoise_modified.png')
plt.show()
plt.close()
```

A.4.2 Code : ray-tracker.py

```

'''
Ray tracker for CIRS observations
r: length
theta: [-pi : pi]
phi: [-pi/2 : pi/2]

INPUT:
R_Titan = 2575 km
theta_sp: longitude spacecraft projection
phi_sp: latitude spacecraft projection
theta_zpd: longitude sounded
phi_zpd: latitude sounded
'''

import numpy as np
import math
import matplotlib.pyplot as plt
from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D # to keep: for 3D plot
from matplotlib.ticker import MultipleLocator, FormatStrFormatter

class Navigation:
    def __init__(self, name=None, spacecraft_range=None, spacecraft_latitude=None,
                 spacecraft_longitude=None, zpd_latitude=None, zpd_longitude=None,
                 solar_latitude=None, solar_longitude=None):
        self.name = name
        self.spacecraft_range = spacecraft_range
        self.spacecraft_latitude = spacecraft_latitude
        self.spacecraft_longitude = spacecraft_longitude
        self.zpd_latitude = zpd_latitude
        self.zpd_longitude = zpd_longitude
        self.solar_latitude = solar_latitude
        self.solar_longitude = solar_longitude

def list_flyby():
    t03 = Navigation(name='T03',
                    spacecraft_range=[212928, 146740],
                    spacecraft_latitude=[-3.14, -2.89],
                    spacecraft_longitude=[150.55, 153],
                    zpd_latitude=81,
                    zpd_longitude=89,
                    solar_latitude=-22.5,
                    solar_longitude=[146, 149])

    t72 = Navigation(name='T72',
                    spacecraft_range=[39565, 27673],
                    spacecraft_latitude=[-1.54, -3.34],
                    spacecraft_longitude=[3.9, 357.5],
                    zpd_latitude=-87.5,
                    zpd_longitude=345,

```

```

solar_latitude=None,
solar_longitude=[None, None])

t61 = Navigation(name='T61', spacecraft_range=[144500, 110000],
                 spacecraft_latitude=[9.68, 9.55],
                 spacecraft_longitude=[140.8, 142.8],
                 zpd_latitude=-68,
                 zpd_longitude=81,
                 solar_latitude=None,
                 solar_longitude=[None, None])

t78 = Navigation(name='T78', spacecraft_range=[169300, 108400],
                 spacecraft_latitude=[0.22, 0.21],
                 spacecraft_longitude=[141.5, 142.6],
                 zpd_latitude=-86,
                 zpd_longitude=207,
                 solar_latitude=None,
                 solar_longitude=[None, None])

t110 = Navigation(name='T110', spacecraft_range=[104000, 169500],
                  spacecraft_latitude=[2.78, 1.71],
                  spacecraft_longitude=[202.6, 206],
                  zpd_latitude=-78.5,
                  zpd_longitude=132,
                  solar_latitude=None,
                  solar_longitude=[None, None])

t115 = Navigation(name='T115', spacecraft_range=[164300, 105000],
                  spacecraft_latitude=[-3.43, -4.28],
                  spacecraft_longitude=[19.9, 23],
                  zpd_latitude=-86,
                  zpd_longitude=150,
                  solar_latitude=None,
                  solar_longitude=[None, None])

t117 = Navigation(name='T117', spacecraft_range=[164500, 105700],
                  spacecraft_latitude=[-11, -11.5],
                  spacecraft_longitude=[19.3, 21.6],
                  zpd_latitude=-80,
                  zpd_longitude=210,
                  solar_latitude=25.9,
                  solar_longitude=[28, 31])

flybys = {'T03': t03, 'T61': t61, 'T72': t72, 'T78': t78, 'T110': t110,
          'T115': t115, 'T117': t117}
return flybys

def checkdata(r, theta, phi):
    if r < titan_radius:
        print('Wrong radius:', r, '< ', titan_radius)

    if theta < 0 or theta > 360:

```



```
        print('Wrong longitude: ', theta)

    if phi < 0 or phi > 180:
        print('Wrong latitude: ', phi)

def cartesian2spheric(x, y, z):
    try:
        rho = math.sqrt(x ** 2 + y ** 2 + z ** 2)
        theta = math.atan(y / x)
        phi = math.acos(z / rho)
    except:
        rho = np.zeros(x.shape[0])
        theta = np.zeros(x.shape[0])
        phi = np.zeros(x.shape[0])
        for i in range(x.shape[0]):
            rho[i] = math.sqrt(x[i] ** 2 + y[i] ** 2 + z[i] ** 2)
            if y[i] >= 0:
                theta[i] = math.acos(x[i] / math.sqrt(x[i] ** 2 + y[i] ** 2))
            else:
                theta[i] = 2 * math.pi - math.acos(x[i] /
                    math.sqrt(x[i] ** 2 + y[i] ** 2))
            phi[i] = math.acos(z[i] / rho[i])

    return rho, theta, phi

def spheric2cartesian(r, theta, phi):
    x = r * math.cos(theta) * math.sin(phi)
    y = r * math.sin(theta) * math.sin(phi)
    z = r * math.cos(phi)

    return x, y, z

def radian2degree(theta):
    theta = (theta * 180.0) / math.pi

    return theta

def degree2radian(theta):
    theta = (theta * math.pi) / 180.0

    return theta

def main():
    # DISPLAY
    # FIG2 : 3D plot
    fig2 = plt.figure(1)
    ax2 = fig2.add_subplot(111, projection='3d')
    ax2.set_xlabel('x')
```

```

ax2.set_ylabel('y')
ax2.set_zlabel('z')
# draw sphere
u, v = np.mgrid[0:2 * np.pi:200j, 0:np.pi:100j]
x = titan_radius * (np.cos(u) * np.sin(v))
y = titan_radius * (np.sin(u) * np.sin(v))
z = titan_radius * np.cos(v)
ax2.plot_wireframe(x, y, z, color="orange")

# FIG3 : 2D plot altitude vs latitude, cartesian coord
fig3 = plt.figure(2)
ax3 = fig3.add_subplot(111)
ax3.set_xlabel('Altitude (km)')
ax3.set_ylabel('Latitude (°)')

# FIG4 : 2D plot longitude vs latitude, polar coord
fig4 = plt.figure(3)
ax4 = fig4.add_subplot(111, polar=True)

# Arrays initialize
# fov : field of view (length of array spacecraft_range)
nb_fov = len(flyby.spacecraft_range)
altitude = np.zeros((len_tab_step, nb_fov))
x_m = np.zeros((len_tab_step, nb_fov))
y_m = np.zeros((len_tab_step, nb_fov))
z_m = np.zeros((len_tab_step, nb_fov))
r_m = np.zeros((len_tab_step, nb_fov))
theta_m = np.zeros((len_tab_step, nb_fov))
phi_m = np.zeros((len_tab_step, nb_fov))

for i in range(nb_fov):
    print('Check navigation data')
    print('Spacecraft ...')
    checkdata(titan_radius + flyby.spacecraft_range[i],
              flyby.spacecraft_longitude[i], 90 - flyby.spacecraft_latitude[i])
    print('ok.')
    print('')
    # ZPD : zero path difference, eqv to the tangent point of the line of sight
    print('ZPD ...')
    checkdata(titan_radius, flyby.zpd_longitude, 90 - flyby.zpd_latitude)
    print('ok.')

    r_sp = titan_radius + flyby.spacecraft_range[i]
    theta_sp = degree2radian(flyby.spacecraft_longitude[i])
    phi_sp = degree2radian(90 - flyby.spacecraft_latitude[i])
    x_sp, y_sp, z_sp = spheric2cartesian(r_sp, theta_sp, phi_sp)

    r_zpd = titan_radius + altitude_start
    theta_zpd = degree2radian(flyby.zpd_longitude)
    phi_zpd = degree2radian(90 - flyby.zpd_latitude)
    x_zpd, y_zpd, z_zpd = spheric2cartesian(r_zpd, theta_zpd, phi_zpd)

    r_solar = titan_radius + 200

```

```

theta_solar = degree2radian(flyby.solar_longitude[i])
phi_solar = degree2radian(90 - flyby.solar_latitude)
x_solar, y_solar, z_solar = spheric2cartesian(r_solar, theta_solar, phi_solar)

x_m[:, i] = tab_step * x_sp + x_zpd * (1 - tab_step)
y_m[:, i] = tab_step * y_sp + y_zpd * (1 - tab_step)
z_m[:, i] = tab_step * z_sp + z_zpd * (1 - tab_step)

r_m[:, i], theta_m[:, i], phi_m[:, i] = cartesian2spheric(x_m[:, i], y_m[:, i], z_m[:, i])
theta_m[:, i], phi_m[:, i] = radian2degree(theta_m[:, i]), radian2degree(phi_m[:, i])
phi_m[:, i] = 90 - phi_m[:, i]
altitude[:, i] = r_m[:, i] - titan_radius

for m in range(len_tab_step-1):
    gap = theta_m[m, i] - theta_m[m + 1, i]
    if abs(gap) > 30:
        theta_m[m+1:, i] = theta_m[m+1:, i] + 360
        break

# 3D plot: cartesian coordinate
ax2.plot(x_m[:, i], y_m[:, i], z_m[:, i])
ax2.scatter(x_zpd, y_zpd, z_zpd, color='red')
ax2.scatter(x_solar, y_solar, z_solar, color = 'black')

# 2D plot: altitude vs latitude
for j in range(nb_fov):
    mask = (altitude[:, j] <= altitude_end)
    ax3.plot(altitude[:, j][mask], phi_m[:, j][mask],
            label=str(flyby.spacecraft_range[j])+' km')
    ax3.annotate('Back', xy=[altitude[0, 1], phi_m[0, 1]])
    ax3.annotate('Front', xy=[altitude[-1, 1], phi_m[-1, 1]])

    theta_m[:, j] = degree2radian(theta_m[:, j] - flyby.solar_longitude[j])
    phi_m[:, j] = degree2radian(phi_m[:, j])
    ax4.plot(theta_m[:, j][mask], np.cos(phi_m[:, j][mask])*titan_radius,
            label=str(flyby.spacecraft_range[j])+' km')
    ax4.scatter(degree2radian(flyby.zpd_longitude - flyby.solar_longitude[j]),
            math.cos(degree2radian(flyby.zpd_latitude))*titan_radius, color='red')

ax4.annotate('Back', xy=[theta_m[0, 0], math.cos(phi_m[0, 0])*titan_radius])
ax4.annotate('Front', xy=[theta_m[-1, 0], math.cos(phi_m[-1, 0])*titan_radius])

x_minorlocator = MultipleLocator(10)
y_minorlocator = MultipleLocator(1)
ax3.scatter(altitude_start, flyby.zpd_latitude, color='red')
ax3.legend(loc=4)
ax3.set_xlim(0, 600)
ax3.xaxis.set_minor_locator(x_minorlocator)
ax3.yaxis.set_minor_locator(y_minorlocator)
ax4.set_rorigin(0)
ax4.set_rmax(titan_radius)
ax4.set_rticks(np.cos(np.arange(0,math.pi/2.,math.pi/12.0))*titan_radius)
ax4.set_yticklabels(['0°', '-15°', '-30°', '-45°', '-60°', '-75°', '-90°'])

```

```
ax4.set_rlabel_position(-22.5) # less radial ticks
ax4.set_theta_zero_location('E', offset=180)
ax4.grid(True, alpha=1)
ax4.legend(loc=0)
ax4.annotate('TP', xy=(degree2radian(flyby.zpd_longitude),
                       math.cos(degree2radian(flyby.zpd_latitude))*titan_radius))

fig2.savefig(flyby.name+'_3d_geometry.eps')
fig3.savefig(flyby.name+'_alt_vs_lat.eps')
fig4.savefig(flyby.name+'_alt_vs_lon.eps')
plt.show()

# Input
if __name__ == '__main__':
    titan_radius = 2575
    tab_step = np.linspace(-1e-2, 1e-2, 1000)
    len_tab_step = tab_step.shape[0]
    flyby = list_flyby()['T117']
    altitude_start = 210
    altitude_end = 900
    main()
```

Bibliographie

- Achterberg, R. K., Conrath, B. J., Gierasch, P. J., Flasar, F. M., and Nixon, C. A. (2008). Titan's middle-atmospheric temperatures and dynamics observed by the Cassini Composite Infrared Spectrometer. *Icarus*, 194 :263–277.
- Achterberg, R. K., Gierasch, P. J., Conrath, B. J., Michael Flasar, F., and Nixon, C. A. (2011). Temporal variations of Titan's middle-atmospheric temperatures from 2004 to 2009 observed by Cassini/CIRS. *Icarus*, 211(1) :686–698.
- Anderson, C. M. and Samuelson, R. E. (2011). Titan's aerosol and stratospheric ice opacities between 18 and 500 μm : Vertical and spectral characteristics from Cassini CIRS. *Icarus*, 212(2) :762–778.
- Béghin, C., Sotin, C., and Hamelin, M. (2010). Titan's native ocean revealed beneath some 45 km of ice by a Schumann-like resonance. *Comptes Rendus Geosci.*, 342(6) :425–433.
- Bézard, B., Nixon, C. A., Kleiner, I., and Jennings, D. E. (2007). Detection of $^{13}\text{CH}_3\text{D}$ on Titan. *Icarus*, 191 :397–400.
- Bézard, B., Yelle, R. V., and Nixon, C. A. (2014). The composition of Titan's atmosphere. In Müller-Wodarg, I. C. F., Griffith, C. A., Lellouch, E., and Cravens, T. E., editors, *Titan*, page 158. Cambridge, UK : Cambridge University Press.
- Blanquet, G., Walrand, J., and Dang-Nhu, M. (1992). Absolute line intensities of the ν_9 band of propyne at 15.5 μm . *Spectrochim. Acta Part A Mol. Spectrosc.*, 48 :1231–1233.
- Borysow, A. and Frommhold, L. (1986a). Collision-induced rototranslational absorption spectra of $\text{N}_2\text{-N}_2$ pairs for temperatures from 50 to 300 K. *Astrophys. J.*, 311 :1043–1057.
- Borysow, A. and Frommhold, L. (1986b). Theoretical collision-induced rototranslational absorption spectra for modeling Titan's atmosphere : $\text{H}_2\text{-N}_2$ pairs. *Astrophys. J.*, 303 :494–510.
- Borysow, A. and Frommhold, L. (1987). Collision-induced rototranslational absorption spectra of $\text{CH}_4\text{-CH}_4$ pairs at temperatures from 50 to 300 K. *Astrophys. J.*, 318 :940–943.
- Borysow, A. and Tang, C. (1993). Far infrared CIA spectra of $\text{N}_2\text{-CH}_4$ pairs for modeling of Titan's atmosphere. *Icarus*, 105 :175–183.
- Conrath, B. J., Gierasch, P. J., and Ustinov, E. A. (1998). Thermal Structure and Para Hydrogen Fraction on the Outer Planets from Voyager IRIS Measurements. *Icarus*, 135 :501–517.
- Cordier, D. and Liger-Belair, G. (2018). Bubbles in Titan's Seas : Nucleation, Growth, and RADAR Signature. *Astrophys. J.*, 859 :26.
- Courtin, R., Swinyard, B. M., Moreno, R., Fulton, T., Lellouch, E., Rengel, M., and Hartogh, P. (2011). First results of Herschel-SPIRE observations of Titan. *Astron. Astrophys.*, 536 :L2.

- Coustenis, A. and Bézard, B. (1995). Titan's Atmosphere from Voyager Infrared Observations. IV. Latitudinal Variations of Temperature and Composition. *Icarus*, 115 :126–140.
- Coustenis, A., Jennings, D. E., Achterberg, R. K., Bampasidis, G., Lavvas, P., Nixon, C. A., Teanby, N. A., Anderson, C. M., Cottini, V., and Flasar, F. M. (2016). Titan's temporal evolution in stratospheric trace gases near the poles. *Icarus*, 270 :409–420.
- Coustenis, A., Jennings, D. E., Achterberg, R. K., Bampasidis, G., Nixon, C. A., Lavvas, P., Cottini, V., and Flasar, F. M. (2018). Seasonal Evolution of Titan's Stratosphere Near the Poles. *Astrophys. J. Lett.*, 854 :L30.
- Coustenis, A., Salama, A., Lellouch, E., Encrenaz, T., Bjoraker, G. L., Samuelson, R. E., de Graauw, T., Feuchtgruber, H., and Kessler, M. F. (1998). Evidence for water vapor in Titan's atmosphere from ISO/SWS data. *Astron. Astrophys.*, 336 :L85–L89.
- Crespin, A., Lebonnois, S., Vinatier, S., Bézard, B., Coustenis, A., Teanby, N. A., Achterberg, R. K., Rannou, P., and Hourdin, F. (2008). Diagnostics of Titan's stratospheric dynamics using Cassini/CIRS data and the 2-dimensional IPSL circulation model. *Icarus*, 197 :556–571.
- Cui, J., Yelle, R. V., Vuitton, V., Waite, J. H., Kasprzak, W. T., Gell, D. A., Niemann, H. B., Müller-Wodarg, I. C. F., Borggren, N., Fletcher, G. G., Patrick, E. L., Raen, E., and Magee, B. A. (2009). Analysis of Titan's neutral upper atmosphere from Cassini Ion Neutral Mass Spectrometer measurements. *Icarus*, 200 :581–615.
- Dang-Nhu, M. and Plíva, J. (1989). Intensities in the ν_4 , ν_{12} , ν_{13} , and ν_{14} bands of benzene. *J. Mol. Spectrosc.*, 138 :423–429.
- De Kok, R. J., Teanby, N. A., Maltagliati, L., Irwin, P. G. J., and Vinatier, S. (2014). HCN ice in Titan's high-altitude southern polar cloud. *Nature*, 514 :65–67.
- Di Lauro, C., Lattanzi, F., Brown, L. R., Sung, K., Vander Auwera, J., Mantz, A. W., and Smith, M. A. H. (2012). High resolution investigation of the 7 μm region of the ethane spectrum. *Planet. Space Sci.*, 60 :93–101.
- Dobrijevic, M., Loison, J. C., Hickson, K. M., and Gronoff, G. (2016). 1D-coupled photochemical model of neutrals, cations and anions in the atmosphere of Titan. *Icarus*, 268 :313–339.
- Drummond, J. R. and Steckner, M. (1985). Voigt-function evaluation using a two-dimensional interpolation scheme. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, 34 :517–521.
- Flasar, F. M., Achterberg, R. K., Conrath, B. J., Gierasch, P. J., Kunde, V. G., Nixon, C. A., Bjoraker, G. L., Jennings, D. E., Romani, P. N., Simon-Miller, A. A., Bézard, B., Coustenis, A., Irwin, P. G. J., Teanby, N. A., Brasunas, J. C., Pearl, J. C., Segura, M. E., Carlson, R. C., Mamoutkine, A., Schinder, P. J., Barucci, A., Courtin, R., Fouchet, T., Gautier, D., Lellouch, E., Marten, A., Prangé, R., Vinatier, S., Strobel, D. F., Calcutt, S. B., Read, P. L., Taylor, F. W., Bowles, N., Samuelson, R. E., Orton, G. S., Spilker, L. J., Owen, T. C., Spencer, J. R., Showalter, M. R., Ferrari, C., Abbas, M. M., Raulin, F., Edgington, S., Ade, P., and Wishnow, E. H. (2005). Titan's Atmospheric Temperatures, Winds, and Composition. *Science (80-.)*, 308 :975–978.
- Flasar, F. M., Achterberg, R. K., and Schinder, P. J. (2014). Thermal structure of Titan's troposphere and middle atmosphere. In Müller-Wodarg, I. C. F., Griffith, C. A., Lellouch, E., and Cravens, T. E., editors, *Titan*, chapter 3, pages 102–121. Cambridge, UK : Cambridge University Press.

- Flasar, F. M., Kunde, V. G., Abbas, M. M., Achterberg, R. K., Ade, P., Barucci, A., Bézard, B., Bjoraker, G. L., Brasunas, J. C., Calcutt, S. B., Carlson, R. C., Césarsky, C. J., Conrath, B. J., Coradini, A., Courtin, R., Coustenis, A., Edberg, S., Edgington, S., Ferrari, C., Fouchet, T., Gautier, D., Gierasch, P. J., Grossman, K., Irwin, P. G. J., Jennings, D. E., Lellouch, E., Mamoutkine, A. A., Marten, A., Meyer, J. P., Nixon, C. A., Orton, G. S., Owen, T. C., Pearl, J. C., Prangé, R., Raulin, F., Read, P. L., Romani, P. N., Samuelson, R. E., Segura, M. E., Showalter, M. R., Simon-Miller, A. A., Smith, M. D., Spencer, J. R., Spilker, L. J., and Taylor, F. W. (2004). Exploring the Saturn system in the thermal infrared : The composite infrared spectrometer. *Space Sci. Rev.*, 115 :169–297.
- Fulchignoni, M., Ferri, F., Angrilli, F., Ball, A. J., Bar-Nun, A., Barucci, M. A., Bettanini, C., Bianchini, G., Borucki, W., Colombatti, G., Coradini, M., Coustenis, A., Debei, S., Falkner, P., Fantì, G., Flamini, E., Gaborit, V., Grard, R., Hamelin, M., Harri, A. M., Hathi, B., Jernej, I., Leese, M. R., Lehto, A., Stoppato, P. F. L., López-Moreno, J. J., Mäkinen, T., McDonnell, J. A. M., McKay, C. P., Molina-Cuberos, G., Neubauer, F. M., Pirronello, V., Rodrigo, R., Saggin, B., Schwingenschuh, K., Seiff, A., Simões, F., Svedhem, H., Tokano, T., Towner, M. C., Trautner, R., Withers, P., and Zarnecki, J. C. (2005). In situ measurements of the physical characteristics of Titan’s environment. *Nature*, 438 :785–791.
- Gautier, T., Carrasco, N., Mahjoub, A., Vinatier, S., Giuliani, A., Szopa, C., Anderson, C. M., Correia, J. J., Dumas, P., and Cernogora, G. (2012). Mid- and far-infrared absorption spectroscopy of Titan’s aerosols analogues. *Icarus*, 221 :320–327.
- Griffith, C. A., Owen, T., Miller, G. A., and Geballe, T. (1998). Transient clouds in Titan’s lower atmosphere. *Nature*, 395 :575–578.
- Gudipati, M. S., Jacovi, R., Couturier-tamburelli, I., Lignell, A., and Allen, M. (2013). Photochemical activity of Titan’s low altitude condensed haze. *Nat. Commun.*, 4 :1648.
- Gurwell, M. A. (2004). Submillimeter Observations of Titan : Global Measures of Stratospheric Temperature, CO, HCN, HC₃N, and the Isotopic Ratios ¹²C/¹³C and ¹⁴N/¹⁵N. *Astrophys. J.*, 616 :L7–L10.
- Gurwell, M. A., Moreno, R., Moullet, A., and Butler, B. (2011). Titan’s Stratosphere : Isotopic Ratios in CO and HCN. In *EPSC Abstr.*, volume 6, EPSC-DP.
- Hanel, R. A., Conrath, B. J., Jennings, D. E., and Samuelson, R. E. (2003). *Exploration of the Solar System by Infrared Remote Sensing : Second Edition*. Cambridge, UK : Cambridge University Press.
- Hartle, R. E., Sittler, E. C., Neubauer, F. M., Johnson, R. E., Smith, H. T., Crary, F. J., McComas, D. J., Young, D. T., Coates, A. J., Simpson, D., Bolton, S., Reisenfeld, D., Szego, K., Berthelier, J. J., Rymer, A., Vilppola, J., Steinberg, J. T., and Andre, N. (2006). Preliminary interpretation of Titan plasma interaction as observed by the Cassini Plasma Spectrometer : Comparisons with Voyager 1. *Geophys. Res. Lett.*, 33 :L08201.
- Hofgartner, J. D., Hayes, A. G., Lunine, J. I., Zebker, H., Stiles, B. W., Sotin, C., Barnes, J. W., Turtle, E. P., Baines, K. H., Brown, R. H., Buratti, B. J., Clark, R. N., Encrenaz, P. J., Kirk, R. D., Le Gall, A., Lopes, R. M., Lorenz, R. D., Malaska, M. J., Mitchell, K. L., Nicholson, P. D., Paillou, P., Radebaugh, J., Wall, S. D., and Wood, C. (2014). Transient features in a Titan sea. *Nat. Geosci.*, 7 :493–496.
- Hörst, S. M. (2017). Titan’s atmosphere and climate. *J. Geophys. Res.*, 122 :432–482.

- Hörst, S. M., Vuitton, V., and Yelle, R. V. (2008). Origin of oxygen species in Titan's atmosphere. *J. Geophys. Res.*, 113 :E10006.
- Hunten, D. M., Tomasko, M. G., Flasar, F. M., Samuelson, R. E., Strobel, D. F., and Stevenson, D. J. (1984). Titan. In *Saturn (A85-33976 15-91)*. Tucson, AZ, Univ. Arizona Press. 1984, p. 671-759.
- Iess, L., Rappaport, N. J., Jacobson, R. A., Racioppa, P., Stevenson, D. J., Tortora, P., Armstrong, J. W., and Asmar, S. W. (2010). Gravity Field, Shape, and Moment of Inertia of Titan. *Science* (80-.), 327 :1367–1369.
- Ishimaru, R., Sekine, Y., Matsui, T., and Mousis, O. (2011). Oxidizing proto-atmosphere on Titan : Constraint from N₂ formation by impact shock. *Astrophys. J. Lett.*, 741 :L10.
- Jacquinet-Husson, N., Crepeau, L., Armante, R., Boutammine, C., Chédin, A., Scott, N. A., Crevoisier, C., Capelle, V., Boone, C., Poulet-Crovisier, N., Barbe, A., Campargue, A., Chris Benner, D., Benilan, Y., Bézard, B., Boudon, V., Brown, L. R., Coudert, L. H., Coustenis, A., Dana, V., Devi, V. M., Fally, S., Fayt, A., Flaud, J.-M., Goldman, A., Herman, M., Harris, G. J., Jacquemart, D., Jolly, A., Kleiner, I., Kleinböhl, A., Kwabia-Tchana, F., Lavrentieva, N., Lacombe, N., Xu, L.-H., Lyulin, O. M., Mandin, J.-Y., Maki, A., Mikhailenko, S. N., Miller, C. E., Mishina, T., Moazzen-Ahmadi, N., Müller, H. S. P., Nikitin, A. V., Orphal, J., Perevalov, V. I., Perrin, A., Petkie, D. T., Predoi-Cross, A., Rinsland, C. P., Remedios, J. J., Rotger, M., Smith, M. A. H., Sung, K., Tashkun, S. A., Tennyson, J., Toth, R. A., Vandaele, A. C., and Vander Auwera, J. (2011). The 2009 edition of the GEISA spectroscopic database. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, 112 :2395–2445.
- Jacquinet-Husson, N., Scott, N. A., Chédin, A., Garceran, K., Armante, R., Chursin, A. A., Barbe, A., Birk, M., Brown, L. R., Camy-Peyret, C., Claveau, C., Clerbaux, C., Coheur, P. F., Dana, V., Daumont, L., Debacker-Barilly, M. R., Flaud, J.-M., Goldman, A., Hamdouni, A., Hess, M., Jacquemart, D., Köpke, P., Mandin, J.-Y., Massie, S., Mikhailenko, S., Nemtchinov, V., Nikitin, A. V., Newnham, D., Perrin, A., Perevalov, V. I., Régalia-Jarlot, L., Rublev, A., Schreier, F., Schult, I., Smith, K. M., Tashkun, S. A., Teffo, J. L., Toth, R. A., Tyuterev, V. G., Vander Auwera, J., Varanasi, P., and Wagner, G. (2005). The 2003 edition of the GEISA/IASI spectroscopic database. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, 95 :429–467.
- Jennings, D. E., Anderson, C. M., Samuelson, R. E., Flasar, F. M., Nixon, C. A., Bjoraker, G. L., Romani, P. N., Achterberg, R. K., Cottini, V., Hesman, B. E., Kunde, V. G., Carlson, R. C., De Kok, R. J., Coustenis, A., Vinatier, S., Bampasidis, G., Teanby, N. A., and Calcutt, S. B. (2012). First observation in the south of Titan's far-infrared 220 cm⁻¹ cloud. *Astrophys. J. Lett.*, 761 :L15.
- Jennings, D. E., Flasar, F. M., Kunde, V. G., Nixon, C. A., Segura, M. E., Romani, P. N., Gorius, N., Albright, S. A., Brasunas, J. C., Carlson, R. C., Mamoutkine, A. A., Guandique, E. A., Kaelberer, M. S., Aslam, S., Achterberg, R. K., Bjoraker, G. L., Anderson, C. M., Cottini, V., Pearl, J. C., Smith, M. D., Hesman, B. E., Barney, R. D., Calcutt, S. B., Vellacott, T. J., Spilker, L. J., Edgington, S. G., Brooks, S. M., Ade, P. A. R., Schinder, P. J., Coustenis, A., Courtin, R., Michel, G., Fettig, R. K., Pilorz, S., and Ferrari, C. (2017). Composite infrared spectrometer (CIRS) on Cassini. *Appl. Opt.*, 56 :5274–5294.
- Jolly, A., Benilan, Y., and Fayt, A. (2007). New infrared integrated band intensities for HC₃N and extensive line list for the ν_5 and ν_6 bending modes. *J. Mol. Spectrosc.*, 242 :46–54.
- Jolly, A., Fayt, A., Benilan, Y., Jacquemart, D., Nixon, C. A., and Jennings, D. E. (2010). The ν_8 bending mode of diacetylene : From laboratory spectroscopy to the detection of ¹³C isotopologues in Titan's atmosphere. *Astrophys. J.*, 714 :852–859.

- Korycansky, D. G. and Zahnle, K. J. (2011). Titan impacts and escape. *Icarus*, 211 :707–721.
- Koskinen, T. T., Yelle, R. V., Snowden, D. S., Lavvas, P., Sandel, B. R., Capalbo, F. J., Benilan, Y., and West, R. A. (2011). The mesosphere and lower thermosphere of Titan revealed by Cassini/UVIS stellar occultations. *Icarus*, 216 :507–534.
- Krasnopolsky, V. A. (2012). Titan’s photochemical model : Further update, oxygen species, and comparison with Triton and Pluto. *Planet. Space Sci.*, 73 :318–326.
- Krasnopolsky, V. A. (2014). Chemical composition of Titan’s atmosphere and ionosphere : Observations and the photochemical model. *Icarus*, 236 :83–91.
- Kuiper, G. P. (1944). TITAN : A SATELLITE WITH AN ATMOSPHERE. *Astrophys. J.*, 100 :378–383.
- Kunde, V. G., Ade, P. A. R., Barney, R. D., Bergman, D., Bonnal, J.-F., Borelli, R., Boyd, D., Brasunas, J. C., Brown, G. V., Calcutt, S. B., Carroll, F., Courtin, R., Cretolle, J. B., Crooke, J. A., Davis, M. A., Edberg, S., Fettig, R. K., Flasar, F. M., Glenar, D. A., Graham, S., Hagopian, J. G., Hakun, C. F., Hayes, P. A., Herath, L., Horn, L., Jennings, D. E., Karpati, G., Kellebenz, C., Lakew, B., Lindsay, J., Lohr, J., Lyons, J. J., Martineau, R. J., Martino, A. J., Matsumura, M., McCloskey, J., Melak, T., Michel, G., Morrell, A., Mosier, C., Pack, L. G., Plants, M., Robinson, D., Rodriguez, L., Romani, P. N., Schaefer, B., Schmidt, S. M., Trujillo, C., Vellacott, T. J., Wagner, K., and Yun, D. (1996). Cassini Infrared Fourier Spectroscopic Investigation. *Proc. SPIE*, 2803 :162–177.
- Lavvas, P., Sander, M., Kraft, M., and Imanaka, H. (2011). Surface chemistry and particle shape : Processes for the evolution of aerosols in Titan’s atmosphere. *Astrophys. J.*, 728 :80.
- Lavvas, P., Yelle, R. V., and Griffith, C. A. (2010). Titan’s vertical aerosol structure at the Huygens landing site : Constraints on particle size, density, charge, and refractive index. *Icarus*, 210 :832–842.
- Lebonnois, S., Burgalat, J., Rannou, P., and Charnay, B. (2012). Titan global climate model : A new 3-dimensional version of the IPSL Titan GCM. *Icarus*, 218 :707–722.
- Lebonnois, S., Toubanc, D., Hourdin, F., and Rannou, P. (2001). Seasonal Variations of Titan’s Atmospheric Composition. *Icarus*, 152 :384–406.
- Lellouch, E., Bézard, B., Flasar, F. M., Vinatier, S., Achterberg, R. K., Nixon, C. A., Bjoraker, G. L., and Gorius, N. (2014). The distribution of methane in Titan’s stratosphere from Cassini/CIRS observations. *Icarus*, 231 :323–337.
- Lellouch, E., Gurwell, M. A., Moreno, R., Vinatier, S., Strobel, D. F., Moullet, A., Butler, B., Lara, L., Hidayat, T., and Villard, E. (2019). An intense thermospheric jet on Titan. *Nat. Astron.*
- Lellouch, E., Hunten, D. M., Kockarts, G., and Coustenis, A. (1990). Titan’s Thermosphere Profile. *Icarus*, 83 :308–324.
- Loison, J. C., Hébrard, E., Dobrijevic, M., Hickson, K. M., Caralp, F., Hue, V., Gronoff, G., Venot, O., and Bénilan, Y. (2015). The neutral photochemistry of nitriles, amines and imines in the atmosphere of Titan. *Icarus*, 247 :218–247.
- Lora, J. M., Lunine, J. I., and Russell, J. L. (2015). GCM simulations of Titan’s middle and lower atmosphere and comparison to observations. *Icarus*, 250 :516–528.

- Lunine, J. I. and Stevenson, D. J. (1987). Clathrate and ammonia hydrates at high pressure : Application to the origin of methane on Titan. *Icarus*, 70 :61–77.
- Lutz, B. L., De Bergh, C., and Owen, T. C. (1982). Titan : Discovery of Carbon Monoxide in Its Atmosphere. *NASA STI/Recon Tech. Rep. N*, 83.
- Magee, B. A., Waite, J. H., Mandt, K. E., Westlake, J., Bell, J., and Gell, D. A. (2009). INMS-derived composition of Titan's upper atmosphere : Analysis methods and model comparison. *Planet. Space Sci.*, 57 :1895–1916.
- Mandt, K. E., Waite Jr., J. H., Teolis, B., Magee, B. A., Bell, J., Westlake, J. H., Nixon, C. A., Mousis, O., and Lunine, J. I. (2012). The $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ratio on Titan from *Cassini* INMS measurements and implications for the evolution of methane. *Astrophys. J.*, 749 :160.
- Marten, A., Hidayat, T., Biraud, Y., and Moreno, R. (2002). New millimeter heterodyne observations of Titan : Vertical distributions of nitriles HCN, HC_3N , CH_3CN , and the isotopic ratio $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ in its atmosphere. *Icarus*, 158 :532–544.
- Mathé, C., Gautier, T., Trainer, M. G., and Carrasco, N. (2018). Detection Opportunity for Aromatic Signature in Titan's Aerosols in the 4.1–5.3 μm Range. *Astrophys. J. Lett.*, 861 :L25.
- Molter, E. M., Nixon, C. A., Cordiner, M. A., Serigano, J., Irwin, P. G. J., Teanby, N. A., Charnley, S. B., and Lindberg, J. E. (2016). ALMA Observations of HCN and its Isotopologues on Titan. *Astron. J.*, 152 :42.
- Morbidelli, A., Nesvornyy, D., Laurenz, V., Marchi, S., Rubie, D. C., Elkins-Tanton, L., Wieczorek, M., and Jacobson, S. (2018). The timeline of the lunar bombardment : Revisited. *Icarus*, 305 :262–276.
- Newman, C. E., Lee, C., Lian, Y., Richardson, M. I., and Toigo, A. D. (2011). Stratospheric superrotation in the TitanWRF model. *Icarus*, 213 :636–654.
- Niemann, H. B., Atreya, S. K., Demick, J. E., Gautier, D., Haberman, J. A., Harpold, D. N., Kasprzak, W. T., Lunine, J. I., Owen, T. C., and Raulin, F. (2010). Composition of Titan's lower atmosphere and simple surface volatiles as measured by the Cassini-Huygens probe gas chromatograph mass spectrometer experiment. *J. Geophys. Res.*, 115 :E12006.
- Nixon, C. A., Achterberg, R. K., Teanby, N. A., Irwin, P. G. J., Flaud, J.-M., Kleiner, I., Dehayem-Kamadjeu, A., Brown, L. R., Sams, R. L., Bézard, B., Coustenis, A., Ansty, T. M., Mamoutkine, A., Vinatier, S., Bjoraker, G. L., Jennings, D. E., Romani, P. N., and Flasar, F. M. (2010). Upper limits for undetected trace species in the stratosphere of Titan. *Faraday Discuss.*, 147 :65–81.
- Nixon, C. A., Kaelberer, M. S., Goriun, N., and And The CIRS Instrument Team (2012a). User Guide To the PDS Dataset for the Cassini Composite Infrared Spectrometer (CIRS). Technical report.
- Nixon, C. A., Temelso, B., Vinatier, S., Teanby, N. A., Bézard, B., Achterberg, R. K., Mandt, K. E., Sherrill, C. D., Irwin, P. G. J., Jennings, D. E., Romani, P. N., Coustenis, A., and Flasar, F. M. (2012b). Isotopic ratios in Titan's methane : Measurements and modeling. *Astrophys. J.*, 749 :159.
- Pekkala, K., Graner, G., Wlodarczak, G., Demaison, J., and Koput, J. (1991). A Global Treatment of the $\nu_9 = 1$ and $\nu_{10} = 2$ Vibrational Levels of Propyne. *J. Mol. Spectrosc.*, 149 :214–229.

- Peralta, J., Imamura, T., Read, P. L., Luz, D., Piccialli, A., and López-Valverde, M. A. (2014a). Analytical solution for waves in planets with atmospheric superrotation. I. Acoustic and inertia-gravity waves. *Astrophys. J. Suppl. Ser.*, 213 :17.
- Peralta, J., Imamura, T., Read, P. L., Luz, D., Piccialli, A., and López-Valverde, M. A. (2014b). Analytical solution for waves in planets with atmospheric superrotation. II. Lamb, surface, and centrifugal waves. *Astrophys. J. Suppl. Ser.*, 213 :18.
- Quirico, E., Montagnac, G., Lees, V., McMillan, P. F., Szopa, C., Cernogora, G., Rouzaud, J. N., Simon, P., Bernard, J.-M., Coll, P., Fray, N., Minard, R. D., Raulin, F., Reynard, B., and Schmitt, B. (2008). New experimental constraints on the composition and structure of tholins. *Icarus*, 198 :218–231.
- Radebaugh, J., Lorenz, R. D., Kirk, R. L., Lunine, J. I., Stofan, E. R., Lopes, R. M., Wall, S. D., and the Cassini Radar Team (2007). Mountains on Titan observed by Cassini Radar. *Icarus*, 192 :77–91.
- Rengel, M., Sagawa, H., Hartogh, P., Lellouch, E., Feuchtgruber, H., Moreno, R., Jarchow, C., Courtin, R., Cernicharo, J., and Lara, L. M. (2014). Herschel/PACS spectroscopy of trace gases of the stratosphere of Titan. *Astron. Astrophys.*, 561 :A4.
- Samuelson, R. E., Maguire, W. C., Hanel, R. A., Kunde, V. G., Jennings, D. E., Yung, Y. L., and Aikin, A. C. (1983). CO₂ on Titan. *J. Geophys. Res.*, 88 :8709–8715.
- Sciamma-O'Brien, E., Ricketts, C. L., and Salama, F. (2014). The titan haze simulation experiment on COSMIC : Probing Titan's atmospheric chemistry at low temperature. *Icarus*, 243 :325–336.
- Sekine, Y., Genda, H., Sugita, S., Kadono, T., and Matsui, T. (2011). Replacement and late formation of atmospheric N₂ on undifferentiated Titan by impacts. *Nat. Geosci.*, 4 :359–362.
- Smith, P. H. (1980). The radius of Titan from Pioneer Saturn data. *J. Geophys. Res.*, 85 :5943–5947.
- Sylvestre, M., Teanby, N. A., Vinatier, S., Lebonnois, S., and Irwin, P. G. J. (2018). Seasonal evolution of C₂N₂, C₃H₄, and C₄H₂ abundances in Titan's lower stratosphere. *Astron. Astrophys.*, 609 :A64.
- Teanby, N. A., Bézard, B., Vinatier, S., Sylvestre, M., Nixon, C. A., Irwin, P. G. J., De Kok, R. J., Calcutt, S. B., and Flasar, F. M. (2017). The formation and evolution of Titan's winter polar vortex. *Nat. Commun.*, 8 :1586.
- Teanby, N. A., De Kok, R. J., Irwin, P. G. J., Osprey, S., Vinatier, S., Gierasch, P. J., Read, P. L., Flasar, F. M., Conrath, B. J., Achterberg, R. K., Bézard, B., Nixon, C. A., and Calcutt, S. B. (2008). Titan's winter polar vortex structure revealed by chemical tracers. *J. Geophys. Res. Planets*, 113 :E12003.
- Teanby, N. A., Sylvestre, M., Sharkey, J., Nixon, C. A., Vinatier, S., and Irwin, P. G. J. (2019). Seasonal evolution of Titan's stratosphere during the Cassini mission. *Geophys. Res. Lett.*, 46 :3079–3089.
- Tobie, G., Grasset, O., Lunine, J. I., Mocquet, A., and Sotin, C. (2005). Titan's internal structure inferred from a coupled thermal-orbital model. *Icarus*, 175 :496–502.
- Tomasko, M. G., Archinal, B., Becker, T., Bézard, B., Bushroee, M., Combes, M., Cook, D., Coustenis, A., De Bergh, C., Dafoe, L. E., Doose, L., Douté, S., Eibl, A., Engel, S., Gliem, F., Grieger, B., Holso, K., Howington-Kraus, E., Karkoschka, E., Keller, H. U., Kirk, R., Kramm, R.,

- Küppers, M., Lanagan, P., Lellouch, E., Lemmon, M., Lunine, J. I., McFarlane, E., Moores, J., Prout, G. M., Rizk, B., Rosiek, M., Rueffer, P., Schröder, S. E., Schmitt, B., See, C., Smith, P. H., Soderblom, L., Thomas, N., and West, R. A. (2005). Rain, winds and haze during the Huygens probe's descent to Titan's surface. *Nature*, 438 :765–778.
- Trainer, M. G., Sebree, J. A., Heidi Yoon, Y., and Tolbert, M. A. (2013). The influence of benzene as a trace reactant in Titan aerosol analogs. *Astrophys. J. Lett.*, 766 :L4.
- Vander Auwera, J., Moazzen-Ahmadi, N., and Flaud, J.-M. (2007). Toward an Accurate Database for the 12 μm Region of the Ethane Spectrum. *Astrophys. J.*, 662 :750–757.
- Vinatier, S., Bézard, B., Lebonnois, S., Teanby, N. A., Achterberg, R. K., Gorius, N., Mamoutkine, A., Guandique, E., Jolly, A., Jennings, D. E., and Flasar, F. M. (2015). Seasonal variations in Titan's middle atmosphere during the northern spring derived from Cassini/CIRS observations. *Icarus*, 250 :95–115.
- Vinatier, S., Bézard, B., and Nixon, C. A. (2007a). The Titan $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ and $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ isotopic ratios in HCN from Cassini/CIRS. *Icarus*, 191 :712–721.
- Vinatier, S., Fouchet, T., Teanby, N. A., De Kok, R. J., Irwin, P. G. J., Conrath, B. J., Nixon, C. A., Romani, P. N., Flasar, F. M., and Coustenis, A. (2007b). Vertical abundance profiles of hydrocarbons in Titan's atmosphere at 15°S and 80°N retrieved from Cassini/CIRS spectra. *Icarus*, 188 :120–138.
- Vinatier, S., Rannou, P., Anderson, C. M., Bézard, B., De Kok, R. J., and Samuelson, R. E. (2012). Optical constants of Titan's stratospheric aerosols in the 70-1500 cm^{-1} spectral range constrained by Cassini/CIRS observations. *Icarus*, 219 :5–12.
- Vinatier, S., Schmitt, B., Bézard, B., Rannou, P., Dauphin, C., De Kok, R. J., Jennings, D. E., and Flasar, F. M. (2018). Study of Titan's fall southern stratospheric polar cloud composition with Cassini/CIRS : Detection of benzene ice. *Icarus*, 310 :89–104.
- Vuitton, V., Yelle, R. V., Klippenstein, S. J., Hörst, S. M., and Lavvas, P. (2019). Simulating the density of organic species in the atmosphere of Titan with a coupled ion-neutral photochemical model. *Icarus*, 324 :120–197.
- Vuitton, V., Yelle, R. V., Lavvas, P., and Klippenstein, S. J. (2012). Rapid association reactions at low pressure : Impact on the formation of hydrocarbons on Titan. *Astrophys. J.*, 744 :11.
- Waite Jr., J. H., Niemann, H., Yelle, R. V., Kasprzak, W. T., Cravens, T. E., Luhmann, J. G., McNutt, R. L., Ip, W.-H., Gell, D., De La Haye, V., Müller-Wodarg, I. C. F., Magee, B. A., Borggren, N., Ledvina, S., Fletcher, G. G., Walter, E., Miller, R., Scherer, S., Thorpe, R., Xu, J., Block, B., and Arnett, K. (2005). Ion Neutral Mass Spectrometer Results from the First Flyby of Titan. *Science* (80-), 308 :982–986.
- West, R. A., Del Genio, A. D., Barbara, J. M., Toledo, D., Lavvas, P., Rannou, P., Turtle, E. P., and Perry, J. (2016). Cassini Imaging Science Subsystem observations of Titan's south polar cloud. *Icarus*, 270 :399–408.
- Yelle, R. V. (1991). Non-LTE models of Titan's upper atmosphere. *Astrophys. J.*, 383 :380–400.
- Yelle, R. V., Snowden, D. S., and Müller-Wodarg, I. C. F. (2014). Titan's upper atmosphere : thermal structure, dynamics, and energetics. In Müller-Wodarg, I. C. F., Griffith, C. A., Lellouch, E., and Cravens, T. E., editors, *Titan*, chapter 9, pages 322–354. Cambridge, UK : Cambridge University Press.

Yelle, R. V., Strobell, D. F., Lellouch, E., and Gautier, D. (1997). The Yelle Titan Atmosphere Engineering Models. *ESA Spec. Publ.*, 1177 :243.

Zebker, H. A., Stiles, B., Hensley, S., Lorenz, R., Kirk, R. L., and Lunine, J. (2009). Size and Shape of Saturn's Moon Titan. *Science (80-.)*, 324 :921.

RÉSUMÉ

Cette thèse porte sur l'étude des variations saisonnières des profils verticaux de température et d'abondance de C_2H_2 , C_2H_4 , C_2H_6 , CH_3CCH , C_3H_8 , C_4H_2 , C_6H_6 , HCN , HC_3N et CO_2 dans la moyenne atmosphère de Titan à partir des données à $0,5\text{ cm}^{-1}$ de résolution enregistrées par l'instrument Cassini/CIRS. Ces profils couvrent l'ensemble des latitudes du milieu de l'hiver nord (2005) au début de l'été nord (2017), de 90 à 600 km d'altitude avec une résolution verticale allant de 10 à 40 km.

Les résultats montrent de fortes variations de température et d'abondance dans les régions polaires, notamment dans la mésosphère. La région polaire nord présente un enrichissement inattendu en composés photochimiques dans la mésosphère juste après l'équinoxe de printemps nord. En mars 2015 dans la région polaire sud, les abondances des composés photochimiques ont atteint des valeurs extrêmes jamais observées auparavant. Le profil de température en décembre 2009 à $74^\circ N$ présente une oscillation, potentiellement attribuée à une onde d'inertie-gravité.

MOTS CLÉS

Titan ; Atmosphère ; Spectroscopie infrarouge ; Transfert radiatif ; Méthodes inverses

ABSTRACT

This thesis focus on the study of seasonal changes on temperature and abundance profiles of C_2H_2 , C_2H_4 , C_2H_6 , CH_3CCH , C_3H_8 , C_4H_2 , C_6H_6 , HCN , HC_3N and CO_2 in the middle atmosphere of Titan from Cassini/CIRS data at 0.5 cm^{-1} spectral resolution. These profiles cover all latitudes from the midnorthern-winter (2005) to the early northern summer (2017), from 90 to 600 km with a vertical resolution ranging from 10 to 40 km.

The results show wide variations in temperature and abundance in the polar regions, particularly in the mesosphere. Northern polar region presents an unexpected enrichment at high altitudes shortly after equinox. Highest mixing ratios ever observed in Titan's atmosphere were localized at the south pole in March 2015. The temperature profile in December 2009 at $74^\circ N$ shows an oscillation, potentially attributed to an inertial-gravity wave.

KEYWORDS

Titan ; Atmosphere ; Infrared Spectroscopy ; Radiative Transfer ; Inverse Methods