



**HAL**  
open science

# Caractérisation des atmosphères exo-planétaires à l'aide d'observations à moyenne et haute résolution spectrale

Simon Petrus

## ► To cite this version:

Simon Petrus. Caractérisation des atmosphères exo-planétaires à l'aide d'observations à moyenne et haute résolution spectrale. Planétologie et astrophysique de la terre [astro-ph.EP]. Université Grenoble Alpes [2020-..], 2021. Français. NNT : 2021GRALY070 . tel-03579843

**HAL Id: tel-03579843**

**<https://theses.hal.science/tel-03579843>**

Submitted on 18 Feb 2022

**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

Pour obtenir le grade de

### DOCTEUR DE LA COMMUNAUTÉ UNIVERSITÉ GRENOBLE ALPES

Spécialité : **Astrophysique**

Arrêté ministériel : 25 mai 2016

Présentée par

**Simon Petrus**

Thèse dirigée par **Gaël CHAUVIN**, Chargé de recherche à  
l'Université Grenoble Alpes, et  
codirigée par **Mickaël BONNEFOY**, Chargé de recherche à  
l'Université Grenoble Alpes

préparée au sein de l' Institut de Planétologie et  
d'Astrophysique de Grenoble  
dans l'École Doctorale de Physique

## Caractérisation des atmosphères exo-planétaires à l'aide d'observations à moyenne et haute résolution spectrale

Thèse soutenue publiquement le **12 Novembre 2021**,  
devant le jury composé de :

**M., Jean-Philippe, BERGER**

Astronome à l'OSUG, Président

**M., David, LAFRENIERE**

Professeur à l'Université de Montréal, Rapporteur

**M., David, EHRENREICH**

Professeur à l'Université de Genève, Rapporteur

**Mme., Beth, BILLER**

Professeur à l'Université d'Edimbourg, Membre

**Mme., Amelia, BAYO**

Professeur à l'Université de Valparaiso, Membre

**M., Benjamin, CHARNAY**

Chargé de recherche à l'Observatoire de Paris, Membre





---

*"À Franck Petrus, Marie-Thérèse Duclercq, Philippe Duclercq et Nicolas Brasseur.  
Père, grand-mère, grand-père et ami.  
Partis former de nouvelles planètes lors de cette thèse."*

---



## Remerciements

Bien que mon nom soit inscrit sur ce document, ce travail ne vaut que par les innombrables personnes qui m'ont aidé, de près ou de loin, scientifiquement ou personnellement, à le mener au bout.

Je souhaite, tout d'abord, remercier Gaël Chauvin et Mickaël Bonnefoy pour m'avoir permis de consacrer ces trois dernières années (et demi) à l'étude d'un sujet aussi passionnant et surprenant. Merci pour tout ce que vous m'avez apporté et appris. Merci pour votre implication sans faille. Merci pour votre disponibilité. En résumé : merci pour cet encadrement exemplaire !

Je remercie également ma famille, mes parents Franck et Esther et mon frère Noé qui m'ont toujours soutenu lors de mes choix académiques et personnels ainsi que mes grands parents et mes nombreux cousins, cousines, petits-cousins et petites-cousines avec qui je partage toujours de bons moments.

Je n'aurai pas réussi à arriver jusque là sans Mélissa avec qui je partage ma vie depuis maintenant 8 ans et qui a toujours su trouver les mots et les encouragements pour me permettre d'atteindre mes objectifs.

Lors de mes différentes formations j'ai eu la chance de rencontrer de nombreuses personnes d'exception que je suis fier de compter parmi mes amis. Tout d'abord Antoine Ricquart que je connais maintenant depuis plus de 30 ans (merci d'être né un jour après moi). Mes amis du lycée qui sont et seront toujours des "biches" de confiances. Mes amis de l'IUT avec qui j'ai découvert la vie étudiante. Mes amis de l'ISTP dont je garde en mémoire les longues soirées de révisions (entre autres !). Mes amis de l'Université qui m'ont accompagné jusqu'à cette thèse. Enfin, mes amis rencontrés ici et là et qui restent aujourd'hui très proches. Merci à tous du fond du cœur pour tous ces moments partagés qui ont été pour moi un réel moteur.



## Résumé

La découverte de la première exoplanète, 51 Pegasi b en 1995, marque un jalon dans l'histoire de l'astronomie moderne. Depuis, plus de 4300 nouvelles planètes ont été détectées, à l'aide de méthodes de détection indirectes (vitesses radiales, transits planétaires, micro-lentilles gravitationnelles) ou directes (imagerie, astrométrie). La diversité de ces exoplanètes en matière de séparations, masses, rayons ou multiplicités, a totalement bouleversé nos connaissances sur la physique et l'architecture des systèmes planétaires, jusque là limitées à notre propre système solaire, et pose les questions de leur formation et de leur évolution. Y a-t-il un mécanisme de formation universel ou des modes de formation propres à chaque type de planète ?

C'est dans ce contexte dynamique et en constante évolution que mon travail se place. Ces trois dernières années, j'ai développé et appliqué un outil d'analyse Bayésienne, fondé sur l'algorithme du *nested sampling*, pour estimer les propriétés atmosphériques et physiques d'exoplanètes et de jeunes naines brunes de faible masse. Certaines de ces propriétés sont connues pour être des traceurs des mécanismes physiques en jeu lors de la formation des objets sous-stellaires, comme la métallicité ou le rapport C/O.

La première partie de ce manuscrit se focalise sur la caractérisation atmosphérique de neuf jeunes naines brunes de faible masse, en utilisant une grille de spectres synthétiques générée avec les modèles BT-SETTL. Puis, nous nous intéresserons à la méthode du *molecular mapping*, qui tire profit de l'information spectrale et spatiale permise par les spectrographes à intégrale de champ, pour détecter et caractériser des compagnons planétaires. Enfin, une troisième partie présentera les résultats préliminaires de l'analyse de la librairie X-Shyne, composée de trente-huit analogues planétaires isolés, jeunes et froids, à l'aide de trois modèles d'atmosphères : ATMO, BT-SETTL et Exo-REM.

Ces études ont permis, entre autres, de caractériser l'atmosphère d'analogues planétaires apportant des indices sur leur mode de formation (les rapports C/O estimés pointent vers des mécanismes de formation stellaires pour les objets de X-Shyne.), de confirmer et étendre aux naines froides les relations empiriques entre les propriétés physiques de ces objets (âge, température effective, gravité) et leurs propriétés spectrales, de mettre en évidence les limites d'utilisation des modèles d'atmosphères, et d'explorer le potentiel de détection et de caractérisation du *molecular mapping*. La librairie unique X-Shyne fournira dans l'avenir des objets de comparaison aux observations de compagnons planétaires ; proposera des gabarits pour la génération de données simulées, afin de préparer l'arrivée de la nouvelle génération d'instruments ; et sera utilisée pour développer de nouvelles versions de modèles d'atmosphères.

*Mots clés* : Atmosphères, Observations, Exoplanètes, Formation, Spectroscopie à moyenne et haute résolution



# Abstract

The discovery of the first exoplanet, 51 Pegasi b in 1995, marks a milestone in the history of modern astronomy. Since then, more than 4300 new planets have been detected, using indirect (radial velocities, planetary transits, gravitational micro-lenses) or direct (imaging, astrometry) methods of detection. The diversity of these exoplanets in terms of separation, mass, radius or multiplicity, has completely upset our knowledge of the physics and architecture of planetary systems, until then limited to our own solar system, and raises questions about their formation and their evolution. Is there a universal mechanism of formation or a mechanism specific to each type of planet ?

It is in this dynamic and constantly evolving context that my work takes place. Over the past three years, I have developed and applied a Bayesian analysis tool, based on the nested sampling algorithm, to estimate the atmospheric and physical properties of exoplanets and young, low mass, brown dwarfs. Some of these properties are known to be tracers of the physical mechanisms involved in the formation of substellar objects, such as the metallicity or the C/O ratio. The first part of this manuscript focuses on the atmospheric characterisation of nine young low mass brown dwarfs using a grid of synthetic spectra, generated with the BT-SETTL models. Then, I will focus on the molecular mapping method, which takes advantages of the spectral and spatial information enabled by integral field spectrographs, to detect and characterise planetary companions. Finally, a third part will present the preliminary results of the analysis of the X-Shyne library, composed of thirty-eight isolated, young and cold planetary analogues, using three atmospheric models : ATMO, BT-SETTL and Exo-REM.

These studies allowed the atmospheric characterisation of planetary analogues and provided clues on their formation mode (the estimated C/O ratios point to stellar mechanisms for the objects of X-Shyne). They also confirmed and extended to cold dwarfs the empirical relations between the physical properties of these objects (age, effective temperature, gravity) and their spectral properties, highlighted the limits of use of atmospheric models, and explored the potential for detection and characterisation of the molecular mapping. The unique library X-Shyne will serve, in the future, as objects of comparison for observations of planetary companions, as templates for the generation of simulated data in order to prepare for the arrival of the new generation of instruments, and will be used to develop new versions of atmospheric models.

*Keywords* : Atmospheres, Observations, Exoplanets, Formation, Medium and high resolution spectroscopy



# Table des matières

Remerciements . . . . .	i
Résumé . . . . .	iii
Abstract . . . . .	v
Table des matières . . . . .	vii
<b>1 Introduction</b>	<b>1</b>
1.1 Exoplanètes : 25 ans de découvertes . . . . .	3
1.1.1 Vitesses radiales, des Jupiters chauds aux premières super-Terres . . . . .	3
1.1.2 La méthode des transits planétaires . . . . .	4
1.1.3 Observation directe des compagnons . . . . .	6
1.1.4 Techniques alternatives . . . . .	8
1.1.5 Bilan et enjeux de l’observation planétaire . . . . .	8
1.2 Formation planétaire . . . . .	9
1.2.1 Les contraintes observationnelles . . . . .	9
1.2.2 Formation par accréation de cœur . . . . .	12
1.2.3 Formation par instabilité de disque . . . . .	14
1.2.4 Conditions initiales et évolution . . . . .	15
1.3 Naines brunes comme analogues exoplanétaires ? . . . . .	16
1.3.1 Historique et définition . . . . .	16
1.3.2 Extension des classifications spectrales standards . . . . .	17
1.3.3 Propriétés et observations des naines brunes jeunes . . . . .	21
1.4 Sonder l’atmosphère d’une exoplanète ? . . . . .	22
1.4.1 La spectroscopie de transit . . . . .	23
1.4.2 La spectroscopie en imagerie directe . . . . .	23
1.4.3 La spectroscopie Doppler à haute résolution . . . . .	24
1.5 Caractérisation analytique des atmosphères sous-stellaires . . . . .	24
1.5.1 Le <i>forward modelling</i> et les modèles auto-consistants . . . . .	25
1.5.2 Le <i>retrieval</i> et les modèles paramétrés . . . . .	27
1.5.3 Les méthodes d’inversion . . . . .	28
1.6 Les atmosphères exoplanétaires comme traceurs de la formation ? . . . . .	36
1.6.1 Le rapport C/O comme diagnostique du lieu de formation ? . . . . .	37
1.6.2 Les rapports d’isotopes comme futurs traceurs de formation. . . . .	38
1.7 Apport du travail de thèse . . . . .	39
<b>2 Caractérisation atmosphérique des objets sous-stellaires jeunes</b>	<b>41</b>
2.1 Acquisition des spectres X-Shooter . . . . .	43
2.1.1 Description de l’instrument . . . . .	43
2.1.2 La routine de réduction de données ESOreflex . . . . .	44
2.1.3 Développement d’une routine d’extraction adaptée aux objets ponctuels faibles . . . . .	46
2.2 Le code ForMoSA : <u>F</u> orward <u>M</u> odeling for <u>S</u> pectral <u>A</u> nalysis . . . . .	49
2.2.1 Pourquoi ForMoSA ? . . . . .	49

2.2.2	Tri des spectres synthétiques non-convergés . . . . .	50
2.2.3	Pre-processing : manipulation des grilles et des données . . . . .	50
2.2.4	Processing : le <i>nested sampling</i> . . . . .	52
2.2.5	Options et paramètres du <i>nested sampling</i> . . . . .	53
2.2.6	Processing : La partie <i>retrieval</i> de ForMoSA . . . . .	55
2.2.7	Post-processing : Résultats et figures . . . . .	56
2.3	Première application : La librairie UpperSco . . . . .	56
2.3.1	Contexte de l'étude . . . . .	56
2.3.2	Caractérisation d'un échantillon de naines brunes jeunes . . . . .	56
2.3.3	Méthode appliquée . . . . .	58
2.3.4	Publication de l'étude . . . . .	59
2.4	Discussion & perspectives . . . . .	81
2.4.1	Défis liés à la caractérisation des atmosphères sous-stellaires jeunes . . . . .	81
2.4.2	Des marqueurs d'accrétion dans l'atmosphère des naines brunes jeunes . . . . .	81
<b>3</b>	<b>Le <i>molecular mapping</i> : une méthode de détection et de caractérisation prometteuse</b>	<b>85</b>
3.1	La spectroscopie intégrale de champ et l'instrument SINFONI . . . . .	87
3.1.1	Combiner les résolutions spatiales et spectrales . . . . .	87
3.1.2	L'instrument SINFONI (SINGle Faint Object Near-IR Investigation) . . . . .	89
3.1.3	Réduction des données SINFONI . . . . .	90
3.2	Le <i>molecular mapping</i> . . . . .	91
3.2.1	Problématique et naissance de l'algorithme . . . . .	91
3.2.2	La méthode du <i>molecular mapping</i> et le code TExTRIS (T <b>oolkit for</b> <b>Ex</b> oplanet <b>de</b> T <b>ection and</b> <b>cha</b> Racterization with <b>If</b> S) . . . . .	92
3.2.3	Application du <i>molecular mapping</i> à des grilles de spectres synthétiques . . . . .	95
3.3	Application du <i>molecular mapping</i> : Le cas de HIP 65426 b . . . . .	96
3.3.1	Un compagnon prioritaire . . . . .	96
3.3.2	Le besoin de spectres à moyenne et haute résolution . . . . .	97
3.3.3	Observations et méthodes . . . . .	98
3.3.4	Publication de l'étude . . . . .	98
3.4	Discussion & perspectives . . . . .	119
3.4.1	Le potentiel du <i>molecular mapping</i> . . . . .	119
3.4.2	Conséquences sur notre compréhension des mécanismes de formation . . . . .	119
3.4.3	Perspectives du <i>molecular mapping</i> . . . . .	120
<b>4</b>	<b>Analyse d'une librairie de jeunes analogues planétaires</b>	<b>123</b>
4.1	X-Shyne : Un échantillon d'analogues planétaires unique . . . . .	125
4.2	Description de l'échantillon . . . . .	127
4.2.1	Les associations jeunes sondées . . . . .	127
4.2.2	La diversité de X-Shyne . . . . .	129
4.2.3	Quatre compagnons dans X-Shyne . . . . .	129
4.3	Description des observations et bilan des spectres obtenus . . . . .	132
4.4	Analyse empirique de la librairie X-Shyne . . . . .	136
4.4.1	Exploration des indices de gravité de surface des naines L aux naines T . . . . .	136
4.4.2	Les objets isolés de X-Shyne comme analogues planétaires . . . . .	143
4.5	Analyse synthétique . . . . .	146
4.5.1	Entrées et configuration de ForMoSA . . . . .	146
4.5.2	Analyse des distributions postérieures . . . . .	148
4.5.3	Premiers résultats : utilisation de l'ensemble de l'intervalle spectral . . . . .	151
4.5.4	Sélection de fenêtres spectrales pour les ajustements . . . . .	154
4.5.5	Discussion des paramètres estimés . . . . .	156

4.6	Conclusion et perspectives de la librairie X-Shyne . . . . .	160
4.6.1	Analyse complète des raies d'absorption . . . . .	160
4.6.2	Analyse des raies d'émission . . . . .	160
4.6.3	Estimation des rapports isotopiques . . . . .	160
4.6.4	Exploration des paramètres atmosphériques et dynamiques de X-Shyne . . . . .	161
<b>Bibliographie</b>		<b>I</b>
<b>A Annexe 1 : Résumé des conditions d'observations de la librairie X-Shyne</b>		<b>XXXVIII</b>
<b>B Annexe 2 : Estimations des propriétés atmosphériques et physiques de la librairie X-Shyne</b>		<b>XLI</b>



# 1

## Introduction

---

*L'étude des exoplanètes est un domaine de recherche relativement jeune. La diversité des exoplanètes détectées depuis une trentaine d'années a totalement bousculé notre connaissance de la physique et de l'architecture des systèmes planétaires. Bien que les instruments, les techniques d'observations et les méthodes d'analyse soient en continuel développement, de nombreuses questions restent encore à résoudre comme la formation et l'évolution de ces objets.*

*Ce chapitre a pour vocation d'introduire les principales idées et approches explorées lors de cette thèse, afin d'apporter des éléments de réponse. Je commencerai par présenter les différentes méthodes permettant de détecter les exoplanètes, puis je décrirai les mécanismes de formation planétaire proposés. J'introduirai ensuite l'intérêt d'étudier les naines brunes de faible masse comme analogues planétaires et détaillerai les différentes techniques pour caractériser leur atmosphère, afin d'y rechercher des traceurs de formation.*

---

---

## Sommaire

---

<b>1.1 Exoplanètes : 25 ans de découvertes</b> . . . . .	<b>3</b>
1.1.1 Vitesses radiales, des Jupiters chauds aux premières super-Terres . . . . .	3
1.1.2 La méthode des transits planétaires . . . . .	4
1.1.3 Observation directe des compagnons . . . . .	6
1.1.4 Techniques alternatives . . . . .	8
1.1.5 Bilan et enjeux de l'observation planétaire . . . . .	8
<b>1.2 Formation planétaire</b> . . . . .	<b>9</b>
1.2.1 Les contraintes observationnelles . . . . .	9
1.2.2 Formation par accrétion de cœur . . . . .	12
1.2.3 Formation par instabilité de disque . . . . .	14
1.2.4 Conditions initiales et évolution . . . . .	15
<b>1.3 Naines brunes comme analogues exoplanétaires ?</b> . . . . .	<b>16</b>
1.3.1 Historique et définition . . . . .	16
1.3.2 Extension des classifications spectrales standards . . . . .	17
1.3.3 Propriétés et observations des naines brunes jeunes . . . . .	21
<b>1.4 Sonder l'atmosphère d'une exoplanète ?</b> . . . . .	<b>22</b>
1.4.1 La spectroscopie de transit . . . . .	23
1.4.2 La spectroscopie en imagerie directe . . . . .	23
1.4.3 La spectroscopie Doppler à haute résolution . . . . .	24
<b>1.5 Caractérisation analytique des atmosphères sous-stellaires</b> . . . . .	<b>24</b>
1.5.1 Le <i>forward modelling</i> et les modèles auto-consistants . . . . .	25
1.5.2 Le <i>retrieval</i> et les modèles paramétrés . . . . .	27
1.5.3 Les méthodes d'inversion . . . . .	28
<b>1.6 Les atmosphères exoplanétaires comme traceurs de la formation ?</b> . . . . .	<b>36</b>
1.6.1 Le rapport C/O comme diagnostique du lieu de formation ? . . . . .	37
1.6.2 Les rapports d'isotopes comme futurs traceurs de formation. . . . .	38
<b>1.7 Apport du travail de thèse</b> . . . . .	<b>39</b>

---

## 1.1 Exoplanètes : 25 ans de découvertes

Ces trente dernières années de détection ont permis de révéler la grande diversité des planètes, jusque-là limitée par les huit planètes de notre système solaire.

Aujourd’hui, plus de 4300 exoplanètes<sup>1</sup> ont été confirmées dans de nombreux systèmes, autour d’étoiles simples et multiples, à différents stades évolutifs. Cette population s’étend des super-géantes gazeuses aux planètes telluriques plus petites que Vénus, couvrant une grande distribution de paramètres orbitaux, ou abritant des réservoirs pour la formation probable de jeunes exolunes. Des dizaines de nouvelles découvertes viennent enrichir cette liste chaque année grâce à diverses techniques de détection ayant chacune leurs limites. Dans cette section, je vais décrire ces méthodes, leurs domaines d’applications et leurs principaux résultats.

### 1.1.1 Vitesses radiales, des Jupiters chauds aux premières super-Terres

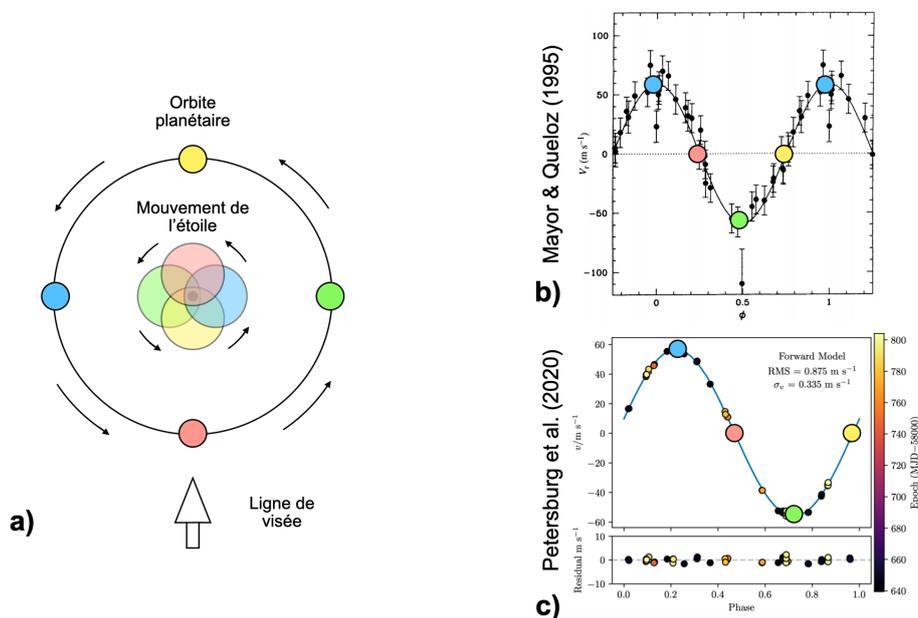


FIGURE 1.1 – Schéma et exemples de détection par vitesse radiale. a) Processus physique en jeu. L’étoile tourne autour du centre de gravité du système, ainsi elle s’approche (entre rouge et jaune) et s’éloigne (entre jaune et rouge) de l’observateur en fonction de la phase orbitale de la planète, ce qui est mesurable par effet Doppler. b) Détection de la première exoplanète, 51 Pegasi b, en utilisant le spectrographe ELODIE ( $dRV = 13 \text{ m.s}^{-1}$ ; Mayor & Queloz 1995). c) Re-détection de 51 Pegasi b en utilisant le spectrographe EXPRES ( $dRV = 30 \text{ cm.s}^{-1}$ ; Petersburg et al. 2020). Ces deux exemples illustrent les avancées technologiques entre 1995 et 2020 pour les mesures de vitesse radiale.

A partir de 1988, plusieurs études présentent des variations temporelles de vitesses radiales d’étoiles (Chi1 Ori A et Gamma Cep, Campbell et al. 1988; HD 114762, Latham et al. 1989). Ces variations sont interprétées comme la signature d’un ou plusieurs compagnons de masses sous-stellaires en orbite autour de ces étoiles (l’étoile elle-même tourne autour du centre de masse du système planétaire, Pepe et al. 2011; Udry & Mayor 2008). En observant des variations périodiques de la vitesse radiale de l’étoile 51 Pegasi, Mayor & Queloz (1995) (Prix Nobel de physique 2019) détectèrent le premier compagnon planétaire de l’histoire, 51 Pegasi b, grâce au spectrographe

1. exoplanet.eu/

ELODIE situé à l'Observatoire de Haute Provence (Baranne et al., 1996). Cette planète de masse jovienne orbite en 4.23 jours à  $\sim 0.052$  ua, soit 7.4 fois plus proche que ne l'est Mercure du Soleil. Elle sera la première représentante des objets baptisés "Jupiters chauds" qui comptent actuellement moins de 1% des planètes connues (Fernandes et al., 2019). La Figure 1.1 illustre le principe de base de la méthode des vitesses radiales et montre la différence entre des données de 51 Pegasi mesurées en 1995 et celles mesurées en 2020.

Le spectrographe ELODIE utilisé pour la détection de 51 Pegasi b permettait une précision de mesure de la vitesse de l'étoile de  $13 \text{ m.s}^{-1}$  pour des étoiles de magnitude  $< 9$  mag. Depuis, cette précision n'a cessé d'être améliorée avec CORALIE en 1998 ( $2 \text{ m.s}^{-1}$ ) ou HARPS en 2003 ( $1 \text{ m.s}^{-1}$ ), pour atteindre actuellement  $0.1 \text{ m.s}^{-1}$  avec le spectrographe ESPRESSO du VLT (Pepe et al., 2021). Cette précision sera poussée jusqu'à  $0.02 \text{ m.s}^{-1}$  avec l'arrivée de l'ELT et HIRES (Marconi et al., 2021) dans les prochaines années. Ces développements d'instruments toujours plus performants ont permis de nombreuses découvertes jalons, notamment avec HARPS qui détecta la première super-Terre ( $\mu$  Ara c,  $M < 14 M_{\oplus}$ , Santos et al. 2004), le système HD 69830 surnommé le trio de Neptune qui est composé de trois compagnons de masse neptunienne ( $M < 10.2, 11.8$  et  $18.1 M_{\oplus}$ , Alibert et al. 2006), les planètes Gliese 581 d ( $M = 7.09 M_{\oplus}$ , située dans la zone habitable) et Gliese 581 e ( $M < 1.94 M_{\oplus}$ ) du système Gliese 581 (Mayor et al., 2009), mais aussi plus récemment, la présence d'une planète de masse terrestre autour de l'étoile la plus proche du système Proxima b ( $M < 1.29 M_{\oplus}$ , Anglada-Escudé et al. 2016). Cette technique permet ainsi de détecter la présence de compagnons et d'estimer une limite inférieure sur leur masse ( $M_p \cdot \sin(i)$ , en raison de l'incertitude sur l'inclinaison de l'orbite planétaire). L'activité stellaire peut également induire une variation de vitesse radiale de l'étoile et ainsi limiter les détections de compagnons en imitant un signal planétaire. Identifier et caractériser cette activité est actuellement l'un des principaux défis de cette méthode pour éviter les fausses détections et permettre la détection d'exo-Terres dans des zones habitables (Santos et al. 2014, Robertson & Mahadevan 2014, Gilbertson et al. 2020).

### 1.1.2 La méthode des transits planétaires

Outre des observations de vitesse radiale des étoiles, des variations photométriques ont également été mesurées pour certaines d'entre elles, notamment HD 209458 (Henry et al., 1999). Ces observations motivèrent le développement d'une nouvelle méthode de détection appelée "méthode des transits planétaires". Cette méthode consiste à observer une variation du flux lumineux (courbe de transit) d'une étoile lorsqu'un compagnon passe entre l'observateur et cette étoile. Les premiers transits ont tout d'abord été observés sur des compagnons déjà détectés par vitesses radiales, comme Charbonneau et al. (2000), qui mesurèrent des courbes de transit de HD 209458 avec la caméra STARE Project Schmidt. La Figure 1.2 présente un schéma d'un transit ainsi que deux exemples illustrant l'évolution de la qualité des transits observés entre 2000 et 2014 pour l'objet HD 209458 b. L'étude des courbes de transit a permis d'estimer le rayon du compagnon et ses paramètres orbitaux comme sa période, son inclinaison et son excentricité ( $P \sim 3.5$  jours,  $i \sim 86.6^\circ$ ,  $e \sim 0.008$ , Southworth 2010, Crossfield et al. 2012).

En faisant l'hypothèse d'une inclinaison orbitale aléatoire et pour un compagnon situé à 0.05 ua, les chances d'avoir un transit sont d'environ 10% (variable avec le rayon de l'étoile). Ainsi, de nombreuses campagnes d'observations ont été lancées pour détecter de nouveaux candidats autour de dizaines de milliers d'étoiles. Le programme le plus prolifique est, sans nul doute, le télescope spatial Kepler lancé en 2009 (Borucki et al., 2010). Aujourd'hui ce sont 2662 planètes qui ont été détectées par Kepler en 9.6 ans par l'observation et le suivi de 530 506 étoiles<sup>2</sup>. Grâce à ce nombre, il a été possible de faire de la statistique sur cette population et ainsi montrer qu'il y a plus de planètes que d'étoiles dans notre galaxie. Parmi les découvertes "ponctuelles" de Kepler,

2. [www.nasa.gov/kepler/missionstatistics](http://www.nasa.gov/kepler/missionstatistics)

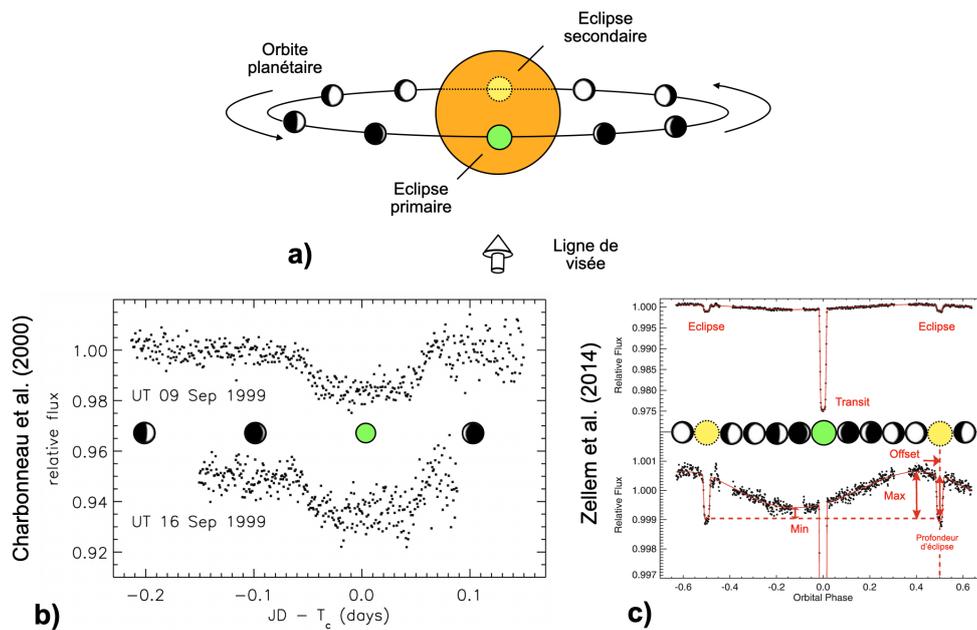


FIGURE 1.2 – Schéma et exemples de détection par transit. a) Processus physique en jeu. Le compagnon vient cacher une partie du flux lumineux émis par l'étoile lors d'un transit primaire. Puis l'étoile vient cacher le flux lumineux émis par la planète (ainsi que le flux réfléchi de l'étoile) lors d'un transit secondaire (voir la Section 1.4). Cette perte de flux peut être mesurée par photométrie. b) Première mesure d'une courbe de transit d'une exoplanète, HD 209458 b en utilisant la caméra STARE (Charbonneau et al., 2000). c) Courbe de transit de HD 209458 b par le télescope spatial Spitzer/IRAC (Zellem et al., 2014). La plus grande sensibilité de Spitzer/IRAC permet d'avoir une courbe de transit plus précise, de mesurer les éclipses secondaires et d'obtenir une courbe de phase. Le décalage de la courbe de phase donne la longitude de brillance de l'hémisphère de la planète (voir la Section 1.4 pour plus de détails).

on peut citer la détection de Kepler-10 c en tant que première planète tellurique de masse dix fois supérieure à la Terre (Dumusque et al., 2014), ou encore le système Kepler-90 qui est, à ce jour, le seul système connu (autre que le nôtre) qui comprend huit planètes (Shallue & Vanderburg, 2018). La mission Kepler a aussi permis la détection de Kepler-19 c (Ballard et al., 2011), qui marque la première détection d'une planète grâce à la méthode des "variations de temps de transit" ("Transit Timing Variations", Holman & Murray 2005), qui consiste à détecter des perturbations de la périodicité des transits d'un compagnon par l'interaction gravitationnelle avec une autre planète du système qui ne transite pas. D'autres missions spatiales ont également apporté leur lot d'exoplanètes détectées par transit. On peut citer CoRoT (Baglin et al., 2006), qui détecta 32 planètes dont CoRoT-7 b (Léger et al., 2009), la première super-Terre ( $M < 21 M_{\oplus}$ ) avec un rayon connu ( $R = 1.68 R_{\oplus}$ ), ou la mission TESS, lancée en avril 2018, qui a déjà identifié près de 2200 candidats compagnons en observant des étoiles 30 à 100 fois plus brillantes que celles observées par Kepler dans une région du ciel 400 fois plus grande.

La méthode des transits planétaires ne se limite pas à la détection et à l'estimation des paramètres physiques et dynamiques des planètes. Grâce à cette méthode, il est aussi possible de sonder l'atmosphère de ces objets. Cet aspect sera détaillé dans la partie 1.4.

### 1.1.3 Observation directe des compagnons

Bien que les méthodes des vitesses radiales et des transits planétaires permettent effectivement de détecter et caractériser les compagnons indirectement, elles sont néanmoins limitées à l'environnement proche de l'étoile ( $< 5$  ua). Tirant parti du développement de systèmes d'optique adaptative performants sur les télescopes de 8m, Chauvin et al. (2004) observèrent pour la première fois en imagerie directe un compagnon de masse planétaire, 2MASSWJ 1207334-393254 b, avec l'instrument NACO installé au VLT (Lenzen et al., 1998; Rousset et al., 2003). Outre la prouesse technologique de séparer la lumière émise par l'étoile de celle du compagnon qu'elle représente, cette découverte pionnière posa les bases de la caractérisation directe des compagnons jeunes de masse planétaire en estimant sa masse à  $5 \pm 2 M_{\text{Jup}}$  et sa température effective  $T_{\text{eff}}$  à  $1250 \pm 200$  K.

Les deux principaux facteurs limitants de l'imagerie directe sont la possibilité de séparer deux points dans le ciel (résolution spatiale, aussi appelée résolution angulaire) et la possibilité de discerner des objets faiblement lumineux proches d'objets plus lumineux (contraste). La résolution angulaire est principalement limitée par la fonction d'étalement de points (ou FEP), dont la largeur à mi-hauteur est proportionnelle à  $\lambda/D$ , où  $\lambda$  est la longueur d'onde d'observation et  $D$  est le diamètre d'ouverture des télescopes (on parle de limite de diffraction : un objet ponctuel donnera une image étendue à travers un système optique).

Le front d'onde lumineux des sources astronomiques va être déformé lors de son passage dans l'atmosphère terrestre, en raison des mouvements d'air (ou turbulences), qui vont continuellement affecter l'indice de réfraction atmosphérique. La FEP résultante (sur les échelles de temps d'observation) sera brouillée, avec une largeur à mi-hauteur de l'ordre de  $\lambda/r_0$ , où  $r_0$  est la taille moyenne des perturbations ( $\sim 20$  cm pour les télescopes chiliens à Paranal). Discerner deux sources proches à la limite de diffraction du télescope devient alors impossible.

Pour pallier à ces limitations, trois étapes sont nécessaires pour observer et traiter des données d'imagerie directe à haut-contraste et haute résolution angulaire. Les effets de ces étapes sur les données d'imagerie sont illustrés dans la Figure 1.3 et détaillés ci-dessous.

- I/ La première étape consiste à restaurer le front d'onde lumineux avec des techniques d'optique adaptative. En analysant une partie de la lumière ayant traversé l'atmosphère et provenant d'un objet connu (étoile de référence ou étoile simulée dans les hautes couches de l'atmosphère avec un laser), il est possible de mesurer la déformation du front d'onde par les turbulences atmosphériques. Une boucle d'asservissement (avec une consigne de planéité) va ensuite permettre de corriger cette déformation pour restaurer des images astronomiques

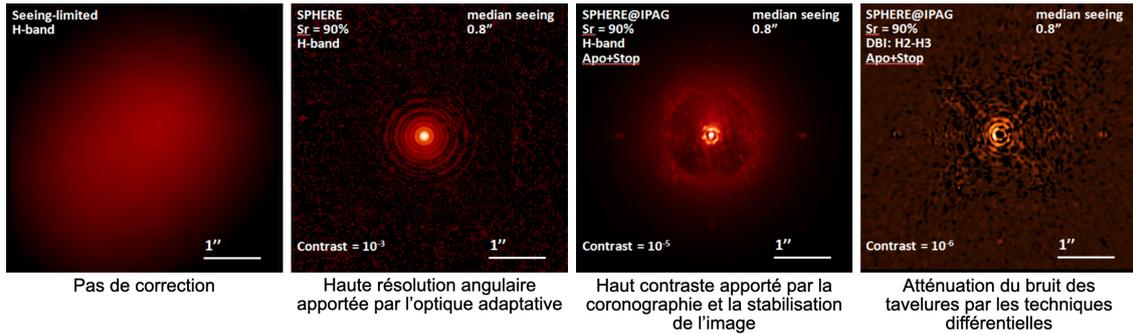


FIGURE 1.3 – Application des techniques de haute résolution angulaire, de haut contraste et de soustraction des résidus stellaires à des données d'imagerie. Figure issue de Chauvin 2018.

à la limite de diffraction du télescope. Les modules d'optique adaptative extrême actuels (SPHERE, GPI, SCeXAO) permettent d'atteindre des valeurs de correction de 90% pour le rapport de Strehl, facteur mesurant la capacité du système à concentrer le flux stellaire dans le coeur cohérent de la FEP à la limite de diffraction du télescope ( $\ll 1\%$  de Strehl sans correction, 100% pour la tâche d'Airy).

- II/ Une fois la résolution spatiale à la limite de diffraction retrouvée, une seconde étape consiste à bloquer la lumière de l'étoile centrale. Pour cela, un masque coronagraphique est appliqué et permet de réduire d'un facteur 100, typiquement, l'intensité de l'étoile, pour éviter de saturer le détecteur, réduire l'intensité du halo stellaire sans supprimer le signal planétaire.
- III/ Malgré la présence d'un coronographe, des résidus de flux stellaires restent présents sous forme de tavelures (ou "speckles") et doivent être filtrés pour éviter d'être interprétés comme une signature planétaire. Cette dernière étape est obtenue en utilisant des stratégies observationnelles et des techniques différentielles (les limitations de ces méthodes seront détaillées dans la Section 3.2.1), comme l'imagerie différentielle avec référence ("reference differential imaging", RDI, Beuzit et al. 1997), qui compare les données aux observations d'une étoile de référence ayant des propriétés proches de l'étoile observée et généralement observée juste avant/après la cible scientifique ; l'imagerie différentielle spectrale ("spectral differential imaging", SDI, Marois et al. 2000), qui implique d'observer dans deux longueurs d'ondes proches, pour lesquelles des différences spectrales sont attendues entre l'étoile et le compagnon. La soustraction des deux images permet de soustraire les tavelures (aux effets chromatiques près) tout en conservant un signal lié au compagnon ; ou encore l'imagerie différentielle angulaire ("angular differential imaging", ADI, Marois et al. 2008), qui exploite la rotation du champ lorsque celle-ci n'est pas compensée par le télescope (le compagnon bouge dans le champ pendant l'observation alors que les tavelures sont statiques ou quasi-statiques). La soustraction de la FEP lors de la séquence d'observation, puis la compensation de l'effet de rotation de champ permet de retrouver le signal planétaire en ayant diminué les résidus stellaires. Ces méthodes peuvent être combinées entre elles pour maximiser les performances de détections.

Actuellement, seules quelques dizaines de compagnons de masse planétaire ont pu être détectés par imagerie directe. L'une des découvertes pionnières fut celle du système HR 8799. En combinant l'optique adaptative des télescopes Keck (caméra NIRC2) et Gemini (caméra NIRI), et en appliquant la méthode de l'ADI, Marois et al. (2008) ont pour la première fois observé en imagerie directe un système planétaire comprenant plusieurs compagnons. Ils observèrent trois compagnons : b ( $M = 7 \pm 3 M_{\text{Jup}}$ , séparation projetée  $\rho = 68$  ua), c ( $M = 10 \pm 3 M_{\text{Jup}}$ ,  $\rho = 38$  ua) et d ( $M = 10 \pm 3 M_{\text{Jup}}$ ,  $\rho = 24$  ua), puis une nouvelle planète fut ajoutée au système, HR 8799 e ( $M = 9.6 \pm 1.9 M_{\text{Jup}}$ ,  $\rho = 16.4 \pm 1.5$  ua, Marois et al. 2010, Gravity Collaboration et al. 2019, Brandt et al.

2021b). Notons aussi la découverte de  $\beta$  Pictoris b ( $M = 8-12 M_{\text{Jup}}$ ) par [Lagrange et al. \(2009\)](#). Ces découvertes ont prouvé que l'implémentation de modes d'imagerie différentielle (SDI, RDI, ADI) et le développements de techniques de traitement numérique dédiées ([Lafrenière et al., 2007](#)) sont essentiels pour abaisser les seuils de détection. Elles ont aussi motivé le développement des instruments d'imagerie à haut contraste VLT/SPHERE ([Beuzit et al. 2019](#); première détection : HIP 65426 b, [Chauvin et al. 2017](#)), Gemini/GPI ([Macintosh et al. 2014](#); première détection : 51 Eri b, [Macintosh et al. 2015](#)) et Subaru/SCEXAO ([Jovanovic et al. 2016](#)).

#### 1.1.4 Techniques alternatives

D'autres techniques ont été mises au point pour détecter et caractériser les exoplanètes en exploitant d'autres perturbations ou observables liées à la présence de planète(s).

Parmi les méthodes de détection reliées à l'influence gravitationnelle d'un compagnon, on peut citer les micro-lentilles gravitationnelles ([Bond et al., 2004](#)), qui s'appuient sur une modification brève du flux observé d'une étoile lointaine (source) lorsqu'un système (étoile + planètes : la lentille) traverse l'axe de visée ([Mao & Paczynski, 1991](#)). De telles perturbations ont été observées pour la première fois avec OGLE 2003-BLG-235/MOA 2003-BLG-53 et aujourd'hui, plus de 150 planètes ont été détectées via cette méthode, qui est cependant limitée aux planètes lointaines (plusieurs centaines de parsecs). Les deux missions EUCLID (lancement vers 2022) et NGRST (lancement vers 2025) seront en partie consacrées à des observations de micro-lentilles gravitationnelles.

Depuis quelques années, l'observation des disques circum-stellaires a permis d'identifier des perturbations du mouvement Keplerien des poussières et du gaz qui les constituent. Ces perturbations peuvent être interprétées par la présence d'une ou plusieurs planètes dans ce disque ("Disk Kinematics", [Casassus & Pérez 2019](#); [Pinte et al. 2018, 2019, 2020](#)).

Enfin, l'astrométrie est la mesure de la position et du mouvement des étoiles dans le plan du ciel. Ces astres bougent et la présence d'un compagnon modifie leur trajectoire. En 1989, l'Agence Spaciale Européenne lança le satellite Hipparcos dont la mission fut de mesurer la position et le mouvement de plus de 100 000 étoiles en quatre ans avec une précision de 20-30 mas. Le catalogue Tycho 2 compte aujourd'hui plus de 2.5 millions d'étoiles (99% des étoiles de magnitude  $< 11$  mag) grâce à des revues des données Hipparcos ([van Leeuwen, 2007](#)). La première exoplanète détectée par astrométrie fut DENIS-P J082303.1-491201 b ([Sahlmann et al., 2013](#)) avec la caméra VLT/FORS2. Cependant, peu de planètes ont été découvertes avec cette méthode. Depuis 2014, c'est la mission Gaia qui a la charge d'observer et suivre les étoiles du ciel. Grâce à une précision de l'ordre de la micro-arcseconde ( $\mu\text{as}$ ), elle a pu observer plus de 2 milliards d'étoiles avec des magnitudes  $< 20.7$  mag. Le catalogue final DR4 (Data Release 4) de Gaia donnera les résidus temporels des solutions après soustraction des mouvements propres et parallactiques pour toutes ces étoiles permettant, potentiellement, la détection de quelques centaines à plusieurs milliers de nouvelles planètes géantes.

#### 1.1.5 Bilan et enjeux de l'observation planétaire

Il existe plusieurs techniques de détection. Certaines sont des méthodes indirectes comme les vitesses radiales et les transits planétaires qui exploitent l'impact des planètes sur leur environnement (influence gravitationnelle, variation de flux lumineux de l'étoile, etc.). L'imagerie directe est à ce jour la seule méthode permettant une observation résolue spatialement et directe des exoplanètes. Elle favorise l'observation de planètes à larges séparations ( $a > 5$  ua), massives ( $M > 1 M_{\text{Jup}}$ ) et géantes ( $R > 1 R_{\text{Jup}}$ ). Grâce à des stratégies d'observation à haute résolution angulaire et haut contraste telles que l'optique adaptative et la coronagraphie couplées à des méthodes d'analyses différentielles (ADI, RDI, SDI), il est possible de séparer la lumière du compagnon de celle de l'étoile et avoir ainsi accès à son spectre. Les méthodes des vitesses radiales et des transits planétaires sont plus indiquées pour les planètes proches de leur étoile ( $a < 6$  ua pour les vitesses

radiales et  $a < 1$  ua pour les transits planétaires). Les vitesses radiales donnent accès à la masse du compagnon et les transits planétaires à son rayon.

Pour optimiser la caractérisation des propriétés physiques d'une exoplanète, il est important d'utiliser toutes les techniques possibles. Ainsi, en couplant la masse de HD 209458 b obtenue par vitesse radiale avec son rayon estimé par transit, on a pu déterminer sa densité moyenne  $\rho \sim 0.38 \text{ g.cm}^{-3}$  (par comparaison, les densités moyennes de Saturne et de la Terre sont de  $\rho_{Sat} \sim 0.69 \text{ g.cm}^{-3}$  et  $\rho_{Ter} \sim 5.51 \text{ g.cm}^{-3}$ ). Un suivi par vitesses radiales est également nécessaire pour confirmer des candidats compagnons identifiés par transit et écarter les faux positifs.

Dans le cas d'observations par imagerie directe, la masse des planètes géantes jeunes est déterminée grâce aux prédictions de modèles évolutifs, encore très peu contraints, ce qui reste une limitation importante. Actuellement, l'un des plus grands enjeux de l'observation planétaire est de contraindre ces modèles, en couplant des observations issues de l'imagerie directe avec des mesures de vitesses radiales. Bien que quelques planètes semblent être dans l'intervalle de demi-grands axes et de masses détectables par vitesse radiale et par imagerie directe, un tel couplage est difficile (mais possible depuis peu, [Nowak et al. 2020](#)). En effet, l'imagerie directe favorise l'observation de planètes jeunes autour d'étoiles peu massives. Ces étoiles privilégiées sont généralement actives, ce qui perturbe les mesures de vitesse radiale. De plus, comme l'illustre la Figure 1.4, la détection par imagerie se limite aux planètes à larges séparations et donc avec de grandes périodes orbitales. Pour joindre ces deux populations de planètes, de nombreux efforts sont en cours et repoussent les limites de détection par vitesse radiale, comme l'acquisition et l'analyse de données sur plusieurs années ([Boisse et al., 2012](#); [Rowan et al., 2016](#); [Wittenmyer et al., 2020](#)).

Une autre approche, récemment explorée, consiste à coupler les techniques d'imagerie directe avec les techniques d'astrométrie moins sensibles aux effets d'activité. On peut mentionner comme études pionnières celle de  $\beta$  Pic b ([Snellen & Brown 2018](#), [Lagrange et al. 2019](#)), ou plus récemment celle de HR 8799 e ([Brandt et al., 2021b](#)).

Finalement, le gain en résolution angulaire avec les nouvelles générations d'imageurs d'exoplanètes et de grands télescopes va permettre d'accéder aux séparations plus proches (recouvrement avec les techniques de vitesse radiale et d'astrométrie), et le développement de techniques et stratégies dédiées pour corriger les effets d'activité devraient permettre de considérablement contraindre les relations masse-luminosité des jeunes Jupiters dans les années à venir.

*Ces trente dernières années de détection ont permis de révéler une grande diversité de nouveaux mondes, jusqu'alors limitée à celle de notre propre Système Solaire. Cette diversité pose des questions fondamentales qui sont aujourd'hui au coeur de l'astronomie planétaire moderne : Comment ces planètes se forment-elles ? Comment évoluent-elles ? De quoi sont-elles composées ? Sont-elles habitées ?*

## 1.2 Formation planétaire

### 1.2.1 Les contraintes observationnelles

Pour contraindre les modèles de formation des objets sous-stellaires, le système solaire fut le premier système planétaire à être étudié. La masse, l'orbite, et la composition des planètes telluriques et géantes qui le composent, mais aussi son architecture globale, sont autant de paramètres à reproduire pour comprendre les différentes étapes de sa formation et de son évolution. Mais c'est véritablement l'étude des systèmes extra-solaires qui constitue la plus grande mine d'informations pour explorer la formation planétaire et son incroyable diversité en matière d'architectures et de propriétés physiques, dépassant tout ce que nous pouvions imaginer il y a 25 ans.

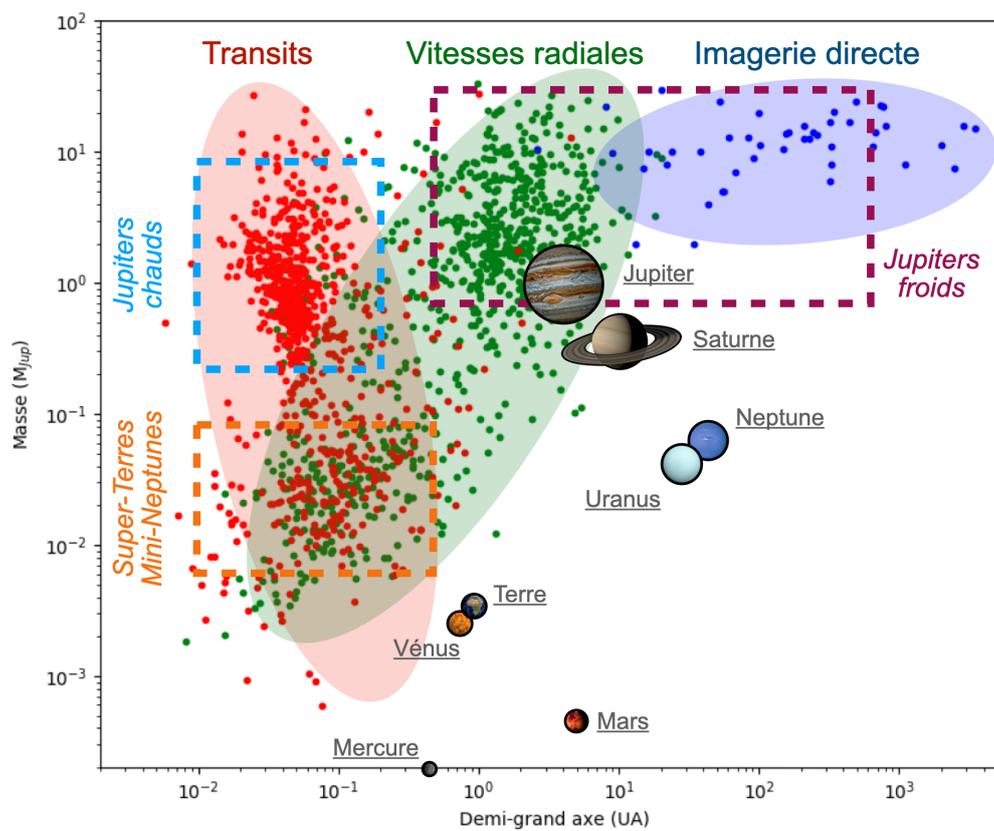


FIGURE 1.4 – Démographie des exoplanètes confirmées, présentées en fonction de leur masse et de leur demi-grand axe. Cette figure illustre les biais d'observation propres à chaque méthode.

## Démographie exoplanétaire

L'étude de la démographie des exoplanètes, initiée dès le début des années 2000, est l'un des piliers de la compréhension des mécanismes de formation et d'évolution des planètes géantes et telluriques. Son but est de déterminer la distribution de la population des planètes en fonction de leurs propriétés physiques (masse, rayon, demi-grand axe, atmosphère, etc.), des propriétés physiques de leur étoile hôte et de leur environnement (multiplicité, système planétaire, disque, etc.). Caractériser au mieux ces distributions est important car elles contiennent des informations précieuses sur la formation et l'évolution des planètes. Par exemple, la forme de la distribution en demi-grand axe des planètes géantes semble dépendre de la formation du cœur de ces planètes (Mordasini, 2018), de leur migration à travers le disque dans lequel elles se sont formées (Ida et al., 2018) et de leur interaction avec ce disque (Alexander & Pascucci, 2012). Ainsi, en comparant les distributions avec les prédictions des modèles de formation et d'évolution, il est possible de tester les processus physiques clés considérés (formation, migration, interactions dynamiques, etc.). La considération des données recueillies grâce aux différentes techniques d'observation (voir la Section 1.1) a permis de dégager des tendances statistiques sur les planètes observées :

- Les géantes gazeuses à courte séparation sont plutôt rares. Wittenmyer et al. (2016) estimèrent que  $6.2^{+2.8}_{-1.6}\%$  des étoiles de type solaire abritaient des planètes avec une masse comprise entre 0.3 et 13  $M_{\text{Jup}}$ , à une séparation de 3 à 7 ua (relevé de vitesses radiales avec l'Anglo-Australian Planet Search). Pour les mêmes gammes de masses et de séparations, Fernandes et al. (2019) estimèrent une occurrence similaire ( $3.8 \pm 0.8\%$ , relevés de vitesses radiales avec HARPS et CORALIE). Ils mesurèrent une augmentation de cette occurrence avec une augmentation de la séparation, jusqu'à un point de rupture (vers 2-3 ua) à partir duquel elle diminue. Cette occurrence pour les planètes géantes a aussi été confirmée par Santerne et al. (2016) ( $4.6 \pm 0.6\%$ ) grâce à des données de transits obtenues avec Kepler.
- À plus large séparation ( $>10$  ua), de récentes études ont montré, grâce aux résultats des derniers relevés des imageurs GPI et SPHERE, que  $\sim 10\%$  des étoiles BA abritaient un compagnon de 2-13  $M_{\text{Jup}}$  (Nielsen et al. 2019, Vigan et al. 2021). Cette occurrence est néanmoins deux fois plus faible pour les étoiles de type M, et quatre fois plus faible pour les étoiles FGK (ce minimum pour les étoiles FGK n'est pas encore compris et fait l'objet de plusieurs études actuellement).
- En analysant des données de vitesses radiales et de transits, il a été possible d'estimer le nombre moyen de petites planètes ( $R \sim 1-20 R_{\oplus}$ ), orbitant à des périodes  $P \sim 1-100$  jours, à  $\sim 0.4$  autour d'étoiles FGK (Fulton et al. 2017, Hsu et al. 2019, Bashi et al. 2020). Ce nombre chute à  $<0.27$  pour les planètes ayant un rayon  $R \sim 0.75-1.5 R_{\oplus}$ , orbitant dans la zone habitable de leur étoile (Hsu et al., 2019).
- Il existe une bi-modalité dans la distribution en taille des petites planètes (séparées entre 1.5 et 2.0  $R_{\oplus}$ , Fulton & Petigura 2018), interprétée comme une perte de matière provoquée par une photo-érosion des couches externes de l'atmosphère à cause de l'irradiation de l'étoile ou d'une surchauffe de l'enveloppe apportée par le refroidissement du cœur solide; ainsi qu'une transition en densité à  $M \sim 2.0 M_{\oplus}$  (Chen & Kipping, 2017), interprétée comme la limite entre les planètes solides de type Terre (atmosphère composée d'éléments plus lourds que l'hydrogène et l'hélium, comme  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{CO}$ , etc.) et les planètes de type mini-Neptune (atmosphère riche en H et He).
- La probabilité de présence d'un compagnon augmente avec la métallicité de l'étoile hôte :  $-0.5 < [\text{Fe}/\text{H}] < 0.0$  dex : 3% de chances ;  $[\text{Fe}/\text{H}] > +0.3$  dex : 25% de chances (Fischer & Valenti, 2005), cela pouvant être expliqué par l'augmentation de la vitesse de formation de proto-planètes avec l'augmentation de la métallicité du disque circum-stellaire (Petigura et al., 2018). Les chances de trouver un compagnon jovien à courte séparation ( $a < 2.5$  ua) augmentent également avec la masse de l'étoile hôte : étoiles de faible masse K et M :

1.8% de chances ; étoiles de masse solaire : 4.2% de chances ; étoiles sous-géantes : 8.9% de chances (Johnson et al., 2007). Notons aussi que les planètes ayant le même ratio de masse qu'entre Neptune et le Soleil semblent être les objets les plus courants à faible séparation (Suzuki et al., 2016).

Malgré ces trente ans de données collectées et des centaines d'études sur la démographie des planètes, de nombreux points d'interrogation restent à lever. Comment les limites de détections biaisent-elles ces statistiques ? Quelle est la fréquence des systèmes stellaires partageant la même architecture que celle de notre système solaire ? A quel point les propriétés des étoiles hôtes influencent-elles l'architecture finale des systèmes formés ? Quels sont les mécanismes de formation planétaires les plus efficaces ? Peuvent-ils être en action sur différentes échelles de temps et dans différentes régions d'un même système planétaire ?

### Observation des disques circum-stellaires

L'observation des planètes dans leur environnement de formation, c'est à dire dans les disques proto-planétaires, offre également de sérieuses contraintes aux modèles de formation. La présence de disques autour des étoiles jeunes a d'abord été révélée par l'observation d'excès infrarouges dans les spectres de ces étoiles et l'identification de signatures spectrales caractéristiques des disques, liées à la présence de poussières circum-stellaires (exemple : Malfait et al. 1998). Grâce notamment au télescope spatial Hubble et au mm-interféromètre ALMA (voir la Figure 1.6, à gauche), il a été possible d'observer directement la morphologie de ces disques (inaccessible par spectroscopie). On a ainsi pu détecter des disques asymétriques (Oppenheimer et al., 2008), certains contenant des spirales (Hashimoto et al., 2011; Monnier et al., 2019) ou des fossés (ALMA Partnership et al., 2015). Ces différentes sous-structures révèlent, très probablement, la présence de planètes en formation qui interagissent directement avec leur environnement proche (migration, sur-densité, etc.). Sachant que d'autres mécanismes physiques peuvent aussi jouer un rôle pour façonner ces jeunes systèmes (instabilités hydrodynamiques, photo-évaporation, etc.), deux principaux scénarios sont actuellement considérés pour la formation planétaire, celui de l'accrétion sur cœur et celui de l'instabilité du disque.

#### 1.2.2 Formation par accrétion de cœur

Cette approche est la combinaison de deux mécanismes : l'accrétion d'un noyau solide et l'accrétion d'une enveloppe de gaz. Les collisions régulières entre les grains de poussière contenus dans le disque permettent, si la vitesse différentielle des grains est suffisamment faible, leur coalescence grâce à la force électrostatique (Blum & Wurm, 2008). Cependant, une fois une taille de quelques dizaines de centimètres atteinte, ces corps vont commencer à se découpler du gaz dans lequel ils se sont formés. Une forte friction va être exercée par le gaz, qui aura pour conséquences d'augmenter les vitesses relatives de collisions impliquant l'érosion et/ou la destruction des corps, et de leur faire perdre du moment cinétique, les faisant ainsi spiraler vers l'étoile. Deux mécanismes permettent cependant de franchir cette "barrière du mètre". L'instabilité de diffusion ("streaming instability", Youdin & Goodman 2005) implique l'apparition de zones créées par la turbulence du gaz, dans lesquelles les particules solides peuvent s'accumuler, augmentant ainsi la vitesse de croissance des corps. Développée plus récemment, l'accrétion de galets ("pebble accretion"; Lambrechts & Johansen 2012; Ormel & Klahr 2010) consiste en l'accrétion de grains de quelques dizaines de millimètres créés localement qui suivent le planétésimal à travers le disque. Ce mécanisme est le plus prometteur aujourd'hui pour expliquer la formation des planètes géantes et telluriques, car la vitesse relative entre les galets et le planétésimal en formation reste faible. Il permet aussi d'expliquer le rapport de masses entre les planètes internes et externes (10-100 ×) du système solaire, car les grains sont plus gros à larges séparations (après la ligne des glaces) et permettent donc de former des planètes plus massives.

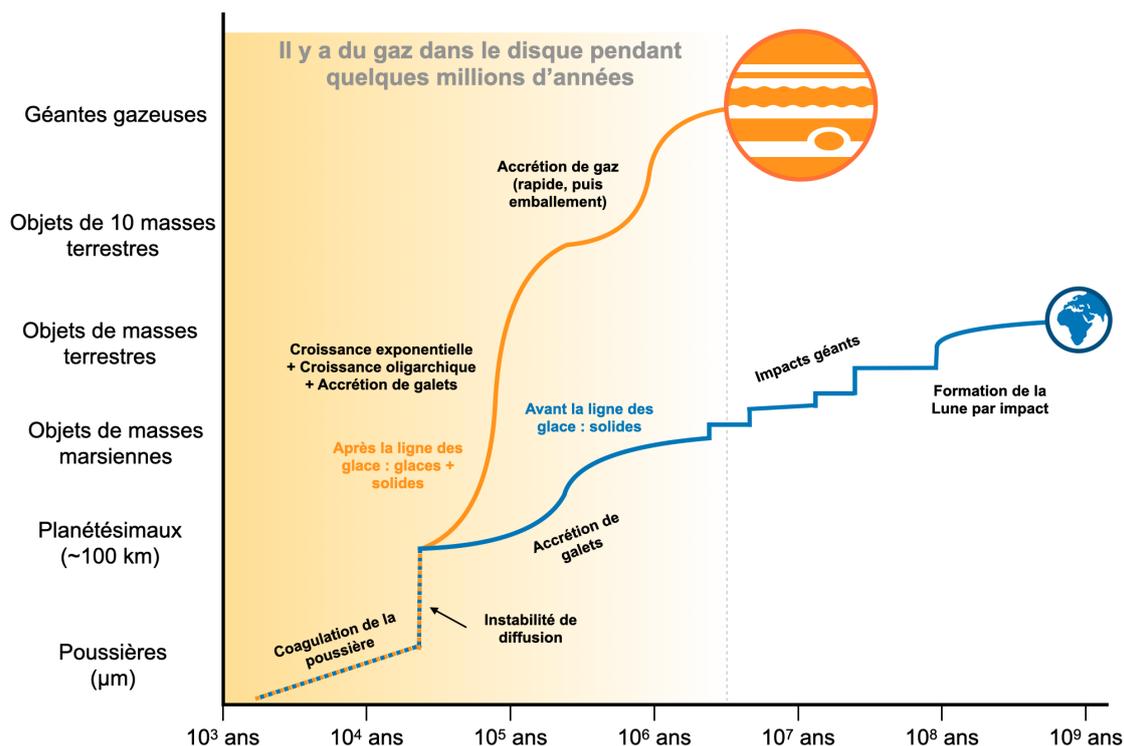


FIGURE 1.5 – Évolution probable de la masse de Jupiter et de la Terre en fonction du temps. Les principaux mécanismes en jeu dans la formation par accrétion de cœur sont représentés. Figure reproduite depuis [Meech & Raymond \(2019\)](#).

Une fois la barrière du mètre franchie, ces objets de quelques kilomètres de diamètre appelés "planétésimaux" continuent de grossir ([Kokubo & Ida, 1998](#)) pour former des proto-planètes grâce aux principes de croissance exponentielle (le taux d'accrétion croît avec la masse) et de croissance oligarchique (seuls les objets les plus gros continuent à grossir). Lorsqu'une proto-planète a atteint une masse critique ( $5\text{-}20 M_{\oplus}$ , [Papaloizou & Terquem 1999](#)), elle enclenche un effondrement du gaz environnant sur elle-même et devient une géante gazeuse, dans le cas contraire elle devient une planète tellurique (ces deux scénarios sont illustrés par la Figure 1.5).

Pendant ces phases de croissance, les planètes de faible masse peuvent migrer à travers le disque en interagissant avec ce dernier ([Tanaka et al., 2002](#)). Leur migration est principalement dirigée vers l'étoile (migration de Type I) et rapide ( $\sim 0.1$  Myr pour une planète de  $10 M_{\oplus}$ , plus rapide pour les planètes plus massives). Des interactions fortes avec le disque peuvent accélérer, ralentir, ou stopper cette migration. Avec les mêmes interactions, les planètes géantes migrent aussi vers le disque mais tout en continuant d'accréter du gaz. Quand elles atteignent une masse suffisante ( $\sim 10 M_{\text{Jup}}$ ), un fossé apparaît autour de leur orbite et elles peuvent alors migrer en s'éloignant de l'étoile (migration de Type II). Ces migrations ont un fort impact sur la morphologie du système. Elles peuvent créer des orbites résonantes entre les planètes ([Terquem & Papaloizou, 2007](#)), en éjecter ([Raymond et al., 2010](#)), sculpter des disques de débris ([Raymond et al., 2012](#)), ou encore déstabiliser la distribution de petits corps dans le système ([Raymond & Morbidelli 2014](#)).

Des populations de planètes synthétiques ont été générées en utilisant les mécanismes d'accrétion de cœur. On peut citer les modèles pionniers de [Ida & Lin \(2004, 2008, 2010\)](#); [Ida et al. \(2013\)](#) pour lesquels l'accrétion de planétésimaux, l'accrétion de gaz, les migrations de Type I et II, l'influence des lignes de glaces et l'interaction gravitationnelle entre les planétésimaux formés sont pris en compte et modélisés par des lois de puissance. Le modèle de Bern ([Alibert et al.,](#)

2004; Mordasini et al., 2017) s'affranchit en partie de ces lois de puissance en résolvant partiellement la structure et l'évolution des disques et l'intérieur des planètes. Une évolution thermodynamique post-formation (Mordasini et al., 2012b) ainsi que de l'échappement atmosphérique (Jin et al., 2014) sont inclus, donnant accès au rayon et à la luminosité de chaque planète. Les interactions entre les planètes lors de leur formation sont assurées par un modèle à N-corps (Alibert et al., 2013). D'autres modèles incluent le mécanisme d'accrétion de galets, comme Bitsch et al. (2015b) ou Ndugu et al. (2018). La dernière génération de modèles présentée dans Mordasini (2018) permet de bien expliquer la démographie actuelle des planètes à faible séparation. Cependant l'accrétion de galets reste à être implémentée dans ces simulations.

### 1.2.3 Formation par instabilité de disque

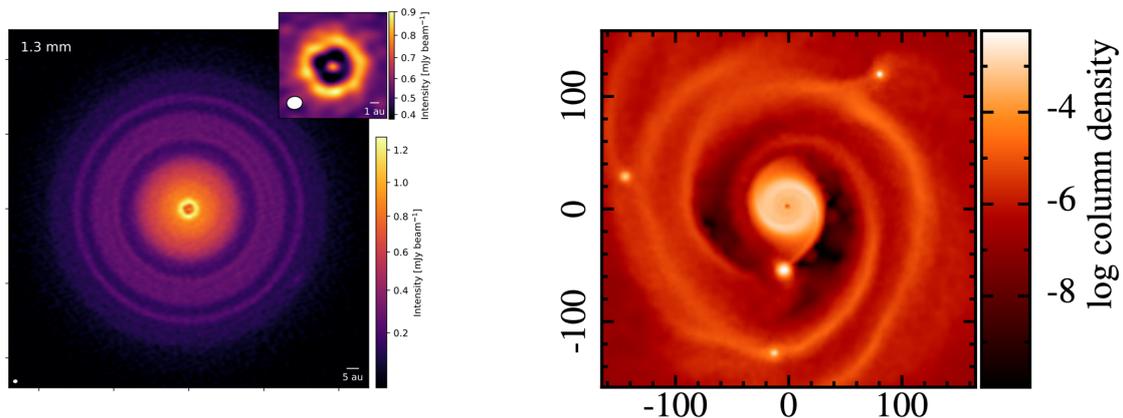


FIGURE 1.6 – À gauche : Image de l'émission thermique du disque proto-planétaire autour de l'étoile TW Hya à 1.3 mm obtenue avec ALMA. Un zoom de la région interne à 0.2" est montré où l'on peut voir ce disque (tirée de Macías et al. 2021). À droite : Simulation montrant des proto-planètes formées par instabilité de disque après 0.5 Myr autour d'une étoile de  $2.0 M_{\odot}$  (tirée de Cadman et al. 2020).

Après la formation d'un disque autour d'une proto-étoile, il est proposé que celui-ci développe des instabilités à large échelle (ondes de gravité spirales), créant des zones localisées de surdensité qui peuvent s'effondrer pour former des planètes (Boss, 2000; Cameron, 1978; Mercer & Stamatellos, 2020). Deux conditions sont nécessaires pour former des planètes via ce mécanisme (D'Angelo et al., 2010). La gravité induite par le disque (verticalement) doit être plus grande que la gravité exercée par l'étoile centrale (voir le paramètre de Toomre Q, Toomre 1981) et la vitesse d'effondrement doit être rapide par rapport à la vitesse de rotation du disque pour éviter que les grumeaux ne soient dilués sur l'orbite. Seules les zones externes du disque ( $> 100$  ua), denses et froides, sont propices à sa fragmentation. La Figure 1.6 (à droite) montre les résultats d'un modèle récent d'effondrement gravitationnel localisé sur des surdensités du disque, formant ainsi des proto-planètes à larges séparations.

Une évolution récente de ce mécanisme est le développement de l'approche de "réduction par effet de marée" ("tidal downsizing" en anglais, voir la revue de Nayakshin 2017) qui consiste en la formation d'un amas de masse jovienne à large séparation ( $\sim 100$  ua) par fragmentation du disque, suivie d'une migration vers l'étoile pendant laquelle solides et gaz sont accrétés (suivant des mécanismes en jeu dans la formation par accrétion de cœur). Si cet amas ne s'est pas assez contracté, il sera détruit par effet de marée et sera accrété par l'étoile, dans le cas contraire il formera une planète géante avec un cœur solide (Nayakshin, 2010). Ce scénario permet de créer des planètes géantes massives très rapidement ( $\sim 10\,000$  ans).

En intégrant des modèles de disques et les mécanismes de formation (instabilité gravitation-

nelle, sédimentation), de migration et de destruction de noyau, [Forgan & Rice \(2013\)](#) ont généré une population de planètes synthétiques. Plusieurs scénarios ont été testés en faisant varier la vitesse de migration, les propriétés des fragments créés ( $\sim 10^5$  fragments par simulation) et l'impact de la fragmentation sur la morphologie des disques. En général, la moitié des fragments sont détruits. La majorité de ceux restant se trouvent à large séparation ( $> 20$  ua) après 1 Myr avec des masses  $M > 5 M_{\text{Jup}}$ . Leur cœur solide a une masse typique de  $6 M_{\oplus}$  et seulement 0.001% de ces cœurs perdent leur enveloppe pour devenir des planètes telluriques. Il semble donc possible de former des planètes via le mécanisme d'instabilité des disques mais elles sont en grande majorité géantes, gazeuses et à larges séparations. Toutefois, les relevés en imagerie directe montrent que le nombre de planètes géantes formées par ce mécanisme reste très probablement faible, indiquant une efficacité limitée pour les masses planétaires les plus grandes dans les prescriptions actuelles ([Rameau et al., 2013a](#)).

D'autres modèles de planètes synthétiques existent, comme ceux de [Nayakshin & Fletcher \(2015\)](#) (accrétion de galets), ou de [Müller et al. \(2018b\)](#) (introduction d'un critère d'ouverture de d'orbites vides dans le disque), qui présentent des conclusions cohérentes avec celles de [Forgan & Rice \(2013\)](#). Certains modèles hybrides allient l'instabilité du disque et l'accrétion du cœur pour montrer qu'il est possible de former des planètes à quelques ua de l'étoile ([Boss, 2019](#)).

#### 1.2.4 Conditions initiales et évolution

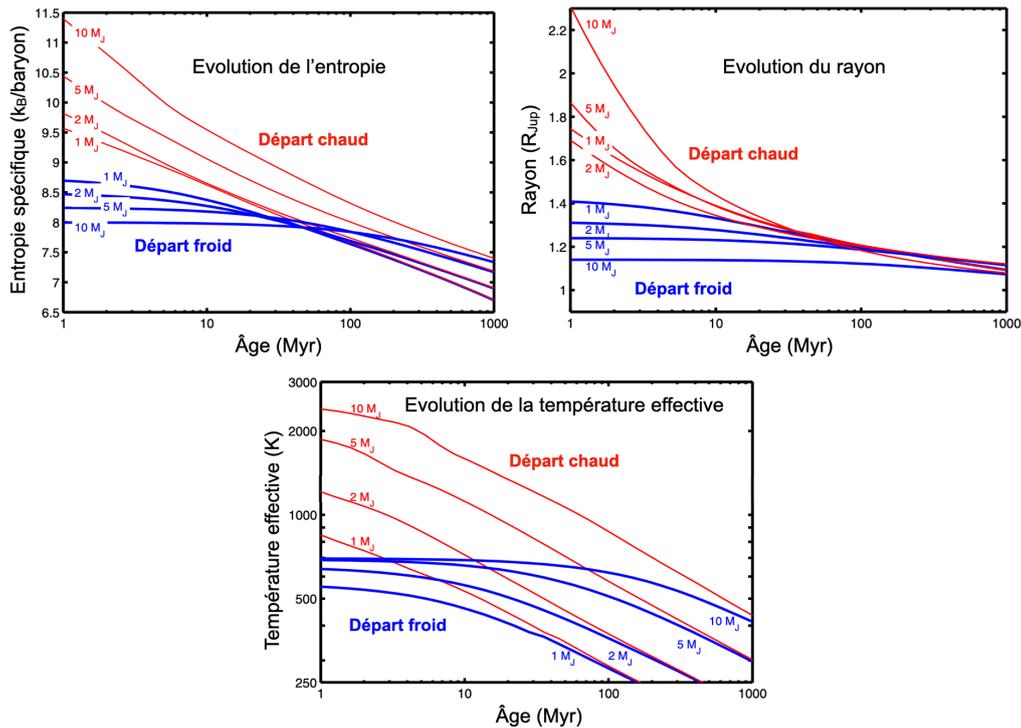


FIGURE 1.7 – Évolution de l'entropie spécifique, du rayon et de la température effective pour des planètes formées par des modèles départ chaud (en rouge) et départ froid (en bleu) et pour des masses allant de 1 à  $10 M_{\text{Jup}}$ . Figure tirée de [Spiegel & Burrows \(2012\)](#).

Les études démographiques à partir des relevés de vitesses radiales et de transit indiquent que l'accrétion de cœur et la migration sont sans doute les mécanismes clés pour expliquer la présence de planètes à courte séparation en raison principalement d'arguments liés à : i/ la corrélation fréquence - métallicité, ii/ la densité élevée des planètes géantes indiquant la probable présence de cœurs, iii/ le nombre très important de planètes telluriques observées. À plus large séparation, les relevés en imagerie directe indiquent l'existence de deux populations de compagnons (exoplanètes

et naines brunes), partageant un espace commun en masse et demi-grand axe, mais formées par des mécanismes différents : accréation sur cœur et instabilité du disque pour les planètes, contre fragmentation gravo-turbulente de nuages moléculaires pour les naines brunes (mécanisme stellaire).

N'ayant pas atteint une masse suffisante pour enclencher la fusion de l'hydrogène, ces naines brunes et ces exoplanètes sont amenées à se refroidir et à se contracter jusqu'à atteindre la pression de dégénérescence des électrons. La Figure 1.7 illustre cette évolution et montre l'importance des conditions initiales aux âges jeunes qui sont aujourd'hui modélisées selon trois approches différentes. Si lors de la formation, un choc dissipe l'entropie initialement présente dans le disque, on parlera de "départ froid" (ou "cool-start"). Si, au contraire, toute l'entropie du disque est transférée dans la planète, on parlera de "départ chaud" (ou "hot-start"). Une approche intermédiaire dite de "départ tiède" ("warm-start") est aussi envisagée (Spiegel & Burrows, 2012), en intégrant des paramètres de poids sur les taux de perte d'entropie par l'accréation de matière ou l'effondrement de fragments du disque. Les mécanismes régissant cette entropie initiale sont aujourd'hui difficiles à modéliser dans leur ensemble et il est complexe de l'attribuer à un mode de formation privilégié (Cumming et al., 2018; Mordasini et al., 2012b). L'entropie initiale d'une planète ne semble donc pas forcément représentative de son mode de formation. D'autres pistes sont actuellement explorées, comme la recherche de traceurs de formation dans leur atmosphère (voir la Section 1.6).

*L'observation des exoplanètes à un âge donné ne nous offre qu'une vision limitée sur leurs origines qui, comme nous l'avons vu, peuvent être l'aboutissement de différents processus physiques lors de leur formation et de leur évolution (physique et dynamique). Explorer la diversité de leurs atmosphères en lien avec leur histoire ouvre, aujourd'hui, une perspective ambitieuse et excitante pour affiner notre compréhension des mécanismes de formation et d'évolution planétaires. Dans ce cadre particulier, l'étude de jeunes analogues planétaires, naines brunes isolées de très faible masse, offre ici un jalon comparatif unique, dans un contexte observationnel plus simple, pour les premières études actuelles pionnières de jeunes exoplanètes imagées (Konopacky et al. 2013, Gravity Collaboration et al. 2020), et pour préparer l'exploration physique et chimique systématique d'atmosphères exoplanétaires avec les prochaines générations de télescopes au sol (ELTs) et dans l'espace (JWST, NGRST, ARIEL).*

## 1.3 Naines brunes comme analogues exoplanétaires ?

### 1.3.1 Historique et définition

En 1962, Shiv S. Kumar modélise la structure interne des étoiles de faible masse et propose pour la première fois l'idée que certains objets dont la masse est inférieure à une masse critique ne peuvent pas atteindre la température centrale nécessaire aux réactions de fusion nucléaire en leur cœur, propre aux étoiles de la séquence principale (Kumar, 1962). L'année suivante, grâce à des modèles de cœur radiatifs couplés à des modèles d'enveloppes convectives, Hayashi & Nakano (1963) quantifient cette masse critique et montrent que des objets de masses  $M < 0.08 M_{\odot}$  sont entièrement convectifs, permettant un réapprovisionnement en éléments lourds dans les couches externes de l'atmosphère.

A cause de leur faible luminosité, principalement due à l'énergie résiduelle accumulée lors de leur formation, il faudra attendre près de 30 ans pour que ces objets, baptisés "naines brunes", soient observés. Parmi ces découvertes pionnières, nous pouvons citer Gl 229B (Nakajima et al., 1995) et Teide 1 (Rebolo et al., 1995), qui furent confirmées la même année que la découverte

de la première exoplanète 51 Peg b, et GD 165B (Becklin & Zuckerman, 1988), observée plus tôt mais qui devra attendre 10 ans avant d'être confirmée (Kirkpatrick et al., 1999b). Suite à ces découvertes révolutionnaires, un premier grand relevé du ciel, le Two Micron All Sky Survey (2MASS, Skrutskie et al. 1997), a révélé l'abondante population de naines brunes dans notre voisinage proche. Puis, d'autres grands relevés dans l'infrarouge ont permis l'explosion du nombre de naines brunes détectées, comme le Deep Near Infrared Southern Sky Survey (DENIS, Epchtein et al. 1997), le Sloan Digital Sky Survey (SDSS, York et al. 2000), le Wide-field Infrared Survey Explorer (WISE, Wright et al. 2010), le VISTA Hemisphere Survey (VHS, McMahon et al. 2013), ou le Panoramic Survey Telescope And Rapid Response System (Pan-STARRS, Chambers et al. 2016).

Bien que la frontière entre les naines brunes et les étoiles soit admise comme étant la masse limite permettant la fusion de l'hydrogène, la limite entre naines brunes et planètes est encore débattue. Historiquement, elle fut fixée à  $\sim 13.6 M_{\text{Jup}}$ , ce qui correspond à la limite de masse permettant la fusion du deutérium (Burrows et al., 1997; Chabrier et al., 2005). Cependant, cette masse limite dépend de la métallicité et de la quantité de deutérium présente à la formation, entre autres (Spiegel et al., 2011). La découverte de naines brunes isolées de masse  $< 13.6 M_{\text{Jup}}$  (Lucas et al., 2001) ou de planètes de forte masse en orbites proches (exemple de CoRoT-3b,  $M \sim 22 M_{\text{Jup}}$ ,  $a = 0.057$  ua, Deleuil et al. 2008) a montré un chevauchement en masses entre ces deux types d'objets, ce qui a remis en question cette taxonomie. Le mode de formation est aujourd'hui une piste envisagée pour différencier les planètes des naines brunes, mais celui-ci s'avère complexe à identifier observationnellement (voir la Section 1.2). Les principaux scénarios proposés sont la fragmentation turbulente d'un nuage moléculaire, l'instabilité du disque (voir la section 1.2), la fragmentation et l'effondrement d'un corps stellaire plus massif (Hennebelle et al., 2011; Matsumoto & Hanawa, 2003), l'éjection d'un embryon d'étoile du nuage moléculaire pendant son effondrement (Bate et al., 2002) et la photo-érosion d'un cœur pré-stellaire (Hester et al., 1996).

Parmi la population de plusieurs milliers de naines brunes connues, celles jeunes et tardives se révèlent être des analogues précieux des planètes imagées, bien que leur mode de formation puisse différer de ces dernières. Elles se placent dans les mêmes gammes de rayons, de températures effectives et de masses. Dès les premières données spectrales et photométriques obtenues pour des compagnons de masse planétaire jeunes, il est apparu que ces objets présentaient des propriétés spectrales similaires aux naines brunes de faible masse jeunes isolées de types spectraux équivalents, en matière de pente spectrale (spectres habituellement rouges), de raies/bandes d'absorption (détection et profil de raie) et de forme spectrale (bande H triangulaire).

Plusieurs relevés et analyses ont ainsi permis de fournir des bibliothèques de spectres d'analogues planétaires couvrant une large gamme de types spectraux à basse, moyenne et haute résolution. Ces bibliothèques sont résumées dans la Table 1.1 et sont couramment utilisées comme sources d'objets de comparaison pour classer les compagnons et objets sous-stellaires imagés (Lachapelle et al., 2015; Lodieu et al., 2018; Petrus et al., 2020).

### 1.3.2 Extension des classifications spectrales standards

Aujourd'hui, les étoiles sont classées selon le système Morgan-Keenan utilisant les lettres O (pour les plus chaudes), B, A, F, G, K, et M (pour les plus froides). À la fin des années 90, des relevés du ciel dans l'infrarouge (2MASS Kirkpatrick et al. 1997, DENIS Delfosse et al. 1997) ont révélé différentes naines brunes froides isolées dont les propriétés spectrales déviaient de celles admises pour les naines de type M9.5. Les photons, émis selon une loi de corps noir par le cœur de ces objets, passent à travers leur atmosphère et interagissent avec les molécules, les atomes et les poussières qui la composent. Le spectre de corps noir est ainsi sculpté et contient l'empreinte des propriétés atmosphériques (température effective, gravité de surface, composition chimique, etc.). Ces objets furent regroupés dans deux nouvelles classes spectrales : la classe "L" et la classe "T" plus froides (Kirkpatrick et al., 1999a), puis plus tard la classe "Y" formée d'objets encore plus

TABLEAU 1.1 – *Librairies de spectres d’analogues planétaires. Le nombre de sources donné n’indique que les naines brunes jeunes (< 300 Myr), mais ces librairies peuvent également contenir les spectres d’objets plus âgés.*

Référence	Couverture spectrale	Résolution	Type spectral	Nombre de sources
Allers et al. (2007)	0.9-2.5 $\mu\text{m}$	$\sim 300$	L1-M6	6
Lodieu et al. (2008)	1.15-2.50 $\mu\text{m}$	$\sim 1700$	M8-L2	23
Rice et al. (2010)	1.15-1.35 $\mu\text{m}$	$\sim 2000-20\,000$	M6-M8.5	17
Patience et al. (2012)	1.1-2.46 $\mu\text{m}$	$\sim 2000-4000$	M9.5-L5	9
Allers & Liu (2013)	0.9-2.4 $\mu\text{m}$	$\sim 100-2000$	M5-L7	73
Bonnefoy et al. (2014a)	1.1-2.5 $\mu\text{m}$	$\sim 1500-2000$	M6-L0	15
Manjavacas et al. (2014)	1.1-2.5 $\mu\text{m}$	$\sim 1500-1700$	M9.5-L3	7
Gagné et al. (2015a)	0.8-2.45 $\mu\text{m}$	$\sim 100-6000$	M4-L7	88
Liu et al. (2016)	0.7-2.5 $\mu\text{m}$	$\sim 200$	M9-L7	44
Cruz et al. (2018)	0.6-2.4 $\mu\text{m}$	$\sim 200$	L0-L8	27
Petrus et al. (2020)	0.5-2.5 $\mu\text{m}$	$\sim 5000$	M8.5-M9.5	9
Zhang et al. (2021b)	0.8-2.5 $\mu\text{m}$	$\sim 100$	T8-T9	7

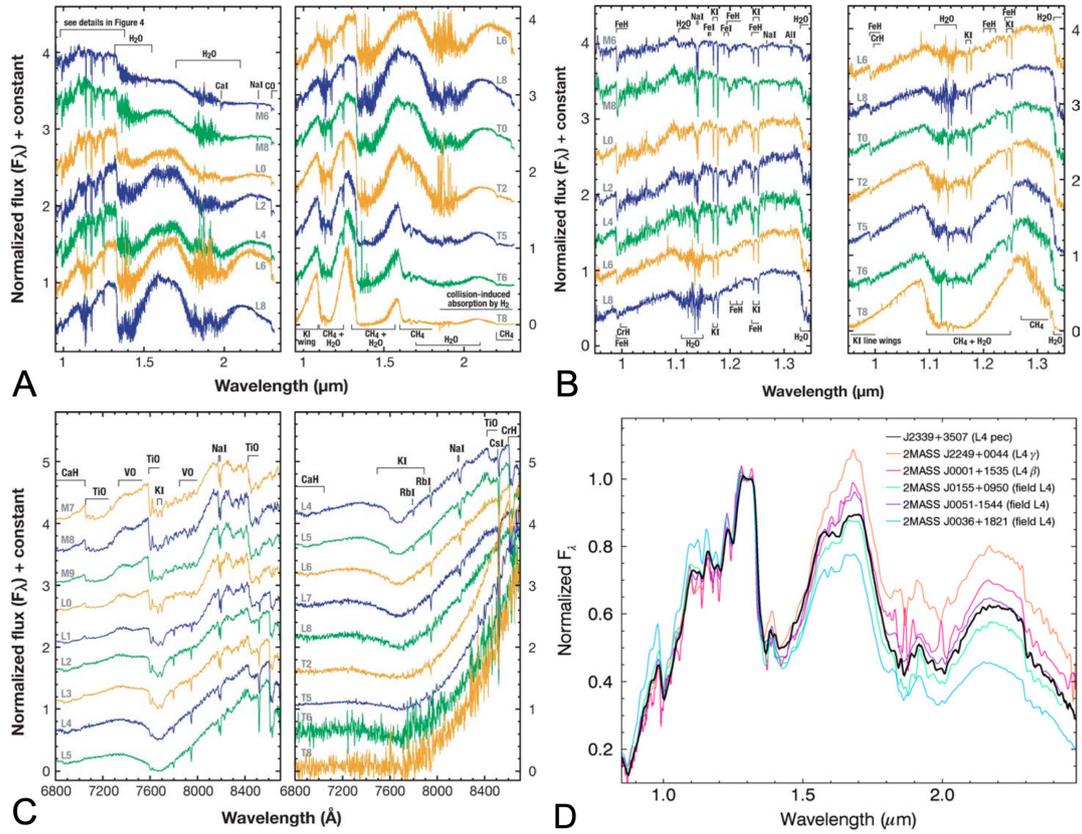


FIGURE 1.8 – A, B, C : Identification des caractéristiques spectrales des naines L et T dans l'infrarouge proche. Les figures sont issues de Kirkpatrick (2005). L'évolution de l'influence des nuages avec la température est visible, particulière à la transition L-T avec l'apparition de bandes d'absorption du méthane à 1.15, 1.6 et 2.2  $\mu\text{m}$ . D : Comparaison de naines L4 pour différentes classes de gravité. La forme triangulaire de la bande H est plus piquée pour des objets jeunes (faible gravité). La figure est tirée de Gagné et al. (2015a).

froids. La Figure 1.8 compare des spectres à moyenne résolution de naines L et T.

### CLASSE L

Les objets de classe L ont une  $T_{\text{eff}}$  comprise entre 1400 et 2400 K<sup>3</sup>, ils émettent ainsi principalement dans l'optique et dans le proche infrarouge. Cette classe est composée de 9 sous-classes, de la plus chaude : L0, à la plus froide : L9 (voir la Table 6 de [Kirkpatrick et al. 1999a](#) pour une description détaillée des propriétés de ces sous-classes). Au stade L0, les absorptions d'oxyde de vanadium (VO, 0.74, 0.79  $\mu\text{m}$ ) sont assez fortes, et des absorptions d'oxyde de titane (TiO, 0.8432  $\mu\text{m}$ ) et d'hydrures (FeH 0.8692  $\mu\text{m}$  et CrH 0.8611  $\mu\text{m}$ ) sont aussi visibles. On trouve de faibles doublets du rubidium (Rb I) et césium (Cs I). Le premier composé à disparaître (aux alentours de la sous-classe L2.5) avec la diminution de la température est le TiO, qui va lentement se condenser dans des grains de perovskite ( $\text{CaTiO}_3$ ). C'est ensuite au tour du VO, qui se condense en solide vers 1750 K (sous-classe L4), puis du sodium (Na I), qui disparaît entièrement avec la sous-classe L8. Les absorptions d'autres éléments comme le lithium (Li I), le Rb I, le Cs I, le potassium (K I) dans l'optique sont de plus en plus profondes avec la diminution de la température, ainsi que l'eau ou le monoxyde de carbone (CO) dans le proche infrarouge. Le faible nombre d'objets après L8 et avant T1 montre que la transition L-T, qui correspond à la sédimentation supposée des nuages ou à une transition de phase, est un phénomène très rapide au cours de l'évolution des objets.

### CLASSE T

GI 229 B fut non seulement l'un des premiers compagnons sous-stellaires découverts, mais aussi le premier représentant de la classe T. [Oppenheimer et al. \(1998\)](#) ont montré que son spectre était dominé par de larges absorptions d'eau et de méthane ( $\text{CH}_4$ ) dans l'infrarouge. Des raies d'absorption de Cs I et des fines bandes d'absorption de méthane et d'eau ont aussi été détectées dans l'optique. [Burgasser et al. \(2003\)](#) ont présenté un échantillon de 13 spectres de naines T dans l'optique et le proche infrarouge (0.63-1.01  $\mu\text{m}$ ) dans lesquels ils ont identifié une grande variété d'absorptions atomiques et moléculaires. Les doublets de Na I et K I sont fortement présents, ainsi que d'autres doublets plus faibles comme le Cs I ou le Rb I. Les bandes d'absorption moléculaire les plus marquées sont celles de l'eau (0.9250 et 0.9450  $\mu\text{m}$ ). Les hydrures FeH et CrH sont aussi détectés dans les spectres des naines T, mais tendent à disparaître pour les naines T tardives.

### CLASSE Y

[Burrows et al. \(2003\)](#) ont modélisé des spectres de naines brunes ultra-froides ( $T_{\text{eff}} = 150\text{-}800$  K), faisant le pont avec les planètes géantes de notre Système Solaire, Jupiter et Saturne, ayant des températures effectives de 88 K et 63 K, respectivement. Ils ont noté la formation de nuages de glace d'eau, la domination des absorptions d'ammoniac ( $\text{NH}_3$ ), et l'augmentation du flux dans l'infrarouge moyen à des températures  $T_{\text{eff}} \sim 400\text{K}$ . Ces caractéristiques ont motivé la création d'une nouvelle classe spectrale nommée Y. Cette population a été observée pour la première fois par le satellite Wide-field Infrared Survey Explorer (WISE; [Wright et al. 2010](#)). Depuis, quelques dizaines de naines brunes Y ont été identifiées (voir [Kirkpatrick et al. 2012](#), [Schneider et al. 2015](#), ou plus récemment [Bardalez Gagliuffi et al. 2020](#)). L'étude détaillée de ces spectres est aujourd'hui très importante pour comprendre les processus physiques mis en jeu dans les atmosphères ultra-froides comme celles des exoplanètes géantes à larges séparations évoluant dans ces gammes de  $T_{\text{eff}}$  ([Leggett et al. 2017](#)). Les prochains instruments comme NIRSpec ou MIRI embarqués dans le James Webb Space Telescope (JWST) devraient apporter de précieux spectres dans l'infrarouge moyen nécessaires à la caractérisation physique des naines Y.

3. Cette gamme de  $T_{\text{eff}}$  est donnée à titre indicatif. Elle peut varier d'une étude à l'autre et varie avec l'âge.

### 1.3.3 Propriétés et observations des naines brunes jeunes

#### Indicateur d'âge

Les classes spectrales sont un puissant outil pour caractériser les objets observés. Néanmoins, contrairement aux étoiles de la séquence principale, elles ne sont pas suffisantes pour avoir accès aux paramètres physiques (masse et rayon) à cause de l'évolution de leurs propriétés spectrales avec l'âge. Par exemple, une étoile de faible masse âgée ( $M \sim 80 M_{\text{Jup}}$ , 10 milliards d'années), une naine brune de faible masse jeune ( $M \sim 20 M_{\text{Jup}}$ , 100 millions d'années) et un objet de masse planétaire très jeune ( $M \sim 3 M_{\text{Jup}}$ , 1 million d'années) peuvent partager le même type spectral (ici L5). Ainsi, contraindre l'âge est primordial pour caractériser une naine brune.

La détermination de l'âge absolu des étoiles et des naines brunes est une tâche difficile et représente un réel défi astrophysique du point de vue observationnel et théorique. Elle repose actuellement sur plusieurs diagnostics, utilisant les prédictions des modèles de structure interne (sous-)stellaire, reportées dans des diagrammes couleur-magnitude par exemple (isochrones photométriques); comparées à des mesures de la rotation (sous-)stellaire à type spectral donné (gyrochronologie); liées à des indicateurs spectroscopiques d'activités chromosphérique, ou d'accrétion (raie d'émission  $H_{\alpha}$ ); liées à la présence d'éléments détruits au cours du temps (lithium), à une activité X, ou à la présence d'excès de flux dans l'infra-rouge. Lors de ces 30 dernières années, l'appartenance à une association s'est aussi révélée un moyen très efficace d'associer les étoiles et les naines brunes isolées à un groupe partageant des propriétés cinématiques communes, mais aussi un âge commun.

Plusieurs associations d'étoiles jeunes ont ainsi pu être identifiées, comme Argus (Torres et al. 2008;  $\sim 30$  Myr),  $\beta$  Pictoris (Zuckerman et al. 2001;  $\sim 10$  Myr), TW Hydrae (Kastner et al. 1997b,  $\sim 10$  Myr), AB Doradus (Zuckerman et al. 2004;  $\sim 150$  Myr) ou Scorpion-Centaure (de Zeeuw et al. 1999; 11-17 Myr). Ces associations se composent d'objets s'étant formés récemment ( $< 150$  Myr) et constituent ainsi des laboratoires idéaux pour mesurer les propriétés fondamentales de la formation des étoiles (pour lesquelles on s'attend à avoir des abondances stellaires), des naines brunes et des planètes, à des âges jeunes (plus facilement observables). Dans le cas de planètes jeunes découvertes, leur âge est généralement associé à celui de l'étoile hôte, bien que les planètes puissent s'être formées plus tard dans l'environnement circum-stellaire (quelques  $10^5$  ans par instabilité de disque et quelques  $10^6$  ans par accrétion de cœur).

Au cours de leur évolution, les naines brunes et les exoplanètes (peu ou pas irradiées) refroidissent et se contractent, leur rayon diminue et ainsi, leur gravité de surface augmente. Il existe donc une dégénérescence entre l'âge, la gravité de surface et la masse des naines brunes et objets de masses planétaires, qui peuvent partager la même  $T_{\text{eff}}$  à des moments différents de leur évolution (comme énoncé plus haut). Du fait de leur différence de masses et de rayons, les objets n'ont pas nécessairement les mêmes  $\log(g)$  pour une même  $T_{\text{eff}}$ . Une naine brune mature va avoir un rayon qui va progressivement atteindre  $1 R_{\text{Jup}}$ , alors que les planètes jeunes ont des rayons élevés ( $1-3 R_{\text{Jup}}$ ). La gravité de surface semble donc être un bon indicateur de l'âge. A basse gravité et donc aux âges jeunes, la photosphère se situe à des pressions atmosphériques plus faibles, ce qui impacte directement les caractéristiques spectrales observables dans le proche infrarouge. Aux âges jeunes, les bandes de FeH ( $0.99$ ,  $1.20$  et  $1.55 \mu\text{m}$ ), les doublets du Na I ( $1.14$  et  $2.21 \mu\text{m}$ ) et du K I ( $1.17$  et  $1.25 \mu\text{m}$ ) sont plus faibles et la bande H a une forme triangulaire typique, alors que la bande de VO ( $1.06 \mu\text{m}$ ) est plus forte. En utilisant des rapports de profondeur de ces raies et une analyse de la forme de la bande H, Allers & Liu (2013) proposèrent une classification des naines brunes M5-L6 en fonction de leur gravité de surface, "very-low gravity" (vl-g) et "intermediate gravity" (int-g). Ils conclurent que les objets classés vl-g ont un âge de 10-30 millions d'années et que ceux classés int-g sont plus âgés (50-200 millions d'années). Une autre classification, proposée par Cruz et al. (2009), utilise la profondeur des doublets de Na I et K I pour classer les objets selon les types  $\alpha$  (gravité normale; âge  $> 150$  Myr),  $\beta$  (faible gravité; âge  $\sim 100$  Myr),  $\gamma$  (très faible gravité; âge  $\sim 10$  Myr), et  $\delta$  (gravité extrêmement faible; âge  $< 10$  Myr; identifié par

Kirkpatrick 2005).

### Signature & processus d'accrétion

En modélisant la formation de planètes géantes par accrétion de cœur, Gressel et al. (2013) ont montré la présence d'un fossé dans le disque circum-stellaire au centre duquel se trouve une proto-planète qui va progressivement accréter un disque circum-planétaire autour d'elle. Ce disque est continuellement réapprovisionné en gaz et en poussière lorsque ceux-ci tombent dans le fossé. Szulágyi et al. (2019) ont étudié l'impact d'un disque proto-planétaire sur les observations. Ils ont montré que ces disques sont plus lumineux que les planètes qu'ils entourent. Cela peut avoir des conséquences dramatiques lors de l'utilisation des modèles d'évolution pour estimer la masse de ces planètes (sur-estimation d'un facteur  $\sim 20$ ). L'accrétion de matière sur la planète est fortement turbulente et des phénomènes magnétiques peuvent provoquer l'apparition de jets de matière. Les modèles prévoient aussi la présence de chocs d'accrétion qui peuvent exciter les atomes (principalement de l'hydrogène) présents dans le gaz, ce qui a pour conséquence l'apparition de raies d'émission dans le spectre des planètes, comme  $H_\gamma$  (434,1 nm),  $H_\beta$  (486,1 nm),  $H_\alpha$  (656.3 nm), O I (844,6 nm), Ca II (854,4 nm), ou encore  $Pa_\beta$  (1282.2 nm).

Certaines de ces raies d'émission ont été détectées dans les spectres d'une dizaine de compagnons de masses inférieures à  $30 M_{\text{Jup}}$  et âgés de 1-10 Myr, parmi lesquels nous pouvons citer TWA5 B (Neuhäuser et al., 2000), GQ Lup B (Seifahrt et al., 2007), PDS 70 b (Wagner et al., 2018) et c (Haffert et al., 2019), 2MASS 0249 c (Chinchilla et al., 2021), CT Cha B (Schmidt et al., 2008), USco CTIO 108 B (Béjar et al., 2008), DH Tau B (Bonnetfoy et al., 2014a), GSC 06214-00210 B (Bowler et al., 2011), SR 12 C (Santamaría-Miranda et al., 2018); mais aussi dans les spectres de naines brunes isolées, comme par exemple 2MASS 0045 (Gagné et al., 2014), 2MASS 0226 (Boucher et al., 2016), ou encore VISTA J1607 et VISTA J1611 (Lodieu et al., 2018). A partir de ces raies, il est possible de calculer le taux d'accrétion à partir de leur largeur à 10% (Natta et al., 2004), de leur flux intégré (Alcalá et al., 2017; Rigliaco et al., 2012), ou en utilisant directement les prédictions des modèles d'accrétion (Aoyama et al., 2018).

*Ayant des propriétés physiques similaires aux exoplanètes en matière de masse, d'âge, de température effective et de luminosité, les naines brunes jeunes de faible masse représentent une opportunité unique d'observer et de comprendre la physique en jeu dans l'atmosphère des jeunes exoplanètes imagées, mais aussi d'explorer les différences possibles relatives à des mécanismes de formation diverses. Leur étude s'appuie, par ailleurs, sur des techniques d'observation classiques (spectroscopie optique et infrarouge longue fente), avec un traitement de données relativement simple pour accéder à leur propriétés spectrales.*

## 1.4 Sonder l'atmosphère d'une exoplanète ?

Bien que les paramètres physiques tels que la masse, le rayon, la luminosité et les paramètres orbitaux apportent une grande quantité d'informations permettant de réfléchir sur la formation et l'évolution des planètes, ils ne permettent pas de connaître la physique des atmosphères exoplanétaires, soupçonnée de renfermer des indices sur le mode de formation.

Charbonneau et al. (2002) détectèrent une absorption de sodium dans l'atmosphère de HD 209458 b. Ils interprétèrent ces observations par la présence de nuages dans les couches externes de cet objet et furent ainsi les premiers à explorer l'atmosphère d'une exoplanète. La caractérisation des atmosphères permet de comprendre les phénomènes physiques en jeu dans les couches

externes des planètes (présence de nuages, vent super-sonique, irradiation par l'étoile hôte, etc.) et d'étudier leur composition chimique, afin d'y trouver des signatures de formation (voir Section 1.2) ainsi que des bio-marqueurs (Des Marais et al., 2002). Ces études s'appuient aujourd'hui pour les exoplanètes sur trois techniques principales :

### 1.4.1 La spectroscopie de transit

La spectroscopie de transit peut être appliquée dans trois configurations différentes (voir la Figure 1.2 pour une illustration). La spectroscopie en transmission (aussi appelée "éclipse primaire") est possible lorsque le compagnon passe devant son étoile hôte. La lumière de l'étoile passe alors en partie à travers les couches externes de la planète, et interagit avec les éléments chimiques présents qui en absorbent une partie. La variation du rayon de l'éclipse en fonction de la longueur d'onde hors et pendant le transit donne donc accès à la signature spectrale de ces couches atmosphériques. Ainsi, la spectroscopie en transmission est idéale pour observer la composition chimique des différentes couches de l'atmosphère, et de nombreux éléments atomiques et moléculaires ont été détectés, comme K, Na (Redfield et al., 2008; Wilson et al., 2015), H<sub>2</sub>O (Kreidberg et al., 2014), Cr, Sc, Y, Mg, Fe, Ti (traces de Co, Ca, Sr à confirmer Hoeijmakers et al. 2019), ou encore CO, CO<sub>2</sub> (Spake et al., 2021), voir aussi (Madhusudhan, 2012). La spectroscopie en transmission est aussi idéale pour étudier les effets d'absorption et de diffusion des nuages (Wakeford & Sing, 2015). Lors d'une "éclipse secondaire", la planète passe derrière l'étoile. Avant cet événement, le spectre observé est composé du spectre de l'étoile, de la lumière réfléchiée par la planète (ratio dépendant de la longueur d'onde d'observation, de la température et de l'albedo de la planète observée), mais aussi du spectre émis par son côté jour (de Wit et al., 2012), alors que pendant l'éclipse, seul reste le flux émis de l'étoile. La différence entre le spectre pendant l'éclipse et juste avant (ou après) permet donc d'obtenir le spectre de la planète du côté jour. Il est possible de déterminer la température de cette phase et sa composition chimique. Enfin, il est aussi possible d'étudier la courbe de lumière complète en plus des transits primaires et secondaires qui nous informe sur les différences de température entre le jour et la nuit, de cartographier en latitude et longitude l'atmosphère complète de la planète, l'évolution de points chauds et froids, et donc plus globalement d'explorer les phénomènes de circulation atmosphérique, de formation et de condensation de molécules et de nuages (Stevenson et al., 2014).

### 1.4.2 La spectroscopie en imagerie directe

La manière la plus intuitive d'explorer l'atmosphère d'une planète est encore d'observer directement son émission thermique. Partageant une gamme de température commune avec les planètes en transit, les planètes imagées présentent des similitudes spectrales. Bien que leur rayon, masse et gravité de surface ne soient pas connues, les techniques et sensibilités actuelles permettent de couvrir une grande couverture spectrale, jusqu'à des résolutions spectrales relativement élevées ( $R \sim 5000$ ), pour une exploration de plus en plus riche des signatures atomiques (K I, Na I, Mg I) et moléculaires (FeH, VO, H<sub>2</sub>O, CH<sub>4</sub>, NH<sub>3</sub>, CO) des jeunes exoplanètes géantes imagées (exemples de détection : Lee et al. 2013, Line et al. 2015). Par ailleurs, le fait d'être actuellement imagées et caractérisées à plusieurs ua de leur étoile hôte implique aussi un environnement très différent, sans forte irradiation stellaire. Elles ne sont donc pas soumises aux mêmes gradients de températures jour/nuit (jusqu'à 500 K de différence) et ne subissent pas les mêmes effets d'évaporation atmosphérique ou de déformation par effet de marée liée à l'étoile centrale, comme vu pour certains Jupiters chauds.

Notons tout de même des processus communs liés à la formation et la sédimentation de nuages (silicates, eau, etc.), l'importance des effets de chimie hors équilibre thermodynamique (convection, circulation) et la connexion entre leur métallicité atmosphérique et leur formation/évolution, qui motivent une étude croisée de ces propriétés physiques et atmosphériques, dans des gammes

de masses et températures similaires, mais des environnements très différents en matière d'architecture, d'irradiation, d'évolution et de formation. C'est cette approche qui a été utilisée dans le cadre de cette thèse. Elle sera détaillée tout au long de ce manuscrit.

### 1.4.3 La spectroscopie Doppler à haute résolution

Le spectre mesuré d'une étoile abritant un compagnon non-résolu est une combinaison de la lumière provenant de l'étoile et de celle provenant de la planète. La planète étant en rotation autour de l'étoile, elle présente une vitesse radiale différente qui varie en fonction de sa phase orbitale. La spectroscopie Doppler à haute résolution a pour but de filtrer la composante spectrale de l'étoile en supprimant les signatures fixes du spectre observé au cours de l'orbite de la planète (voir la revue de [Birkby 2018](#)). Les absorptions moléculaires de la planète sont combinées avec celles d'un modèle par corrélations croisées pour former un signal dont le profil, la vitesse moyenne et l'intensité peuvent être utilisés pour sortir des informations sur le contenu moléculaire de l'atmosphère, la dynamique des vents, la vitesse rotationnelle et Keplerienne de la planète. Grâce à cette technique, de nombreuses espèces chimiques ont été détectées dans l'atmosphère de Jupiters chauds comme, CO ([Brogi et al., 2012](#); [Snellen et al., 2010](#)), H<sub>2</sub>O ([Birkby et al., 2013](#)), TiO ([Nugroho et al., 2017](#)), HCN ([Cabot et al., 2019](#)) et des composés atomiques Fe et Fe<sup>+</sup>, Ti et Ti<sup>+</sup> ([Hoeijmakers et al., 2018a](#)). Cette technique est applicable à des planètes proches qui ne transitent pas, elle rend donc possible la caractérisation spectrale des planètes détectées par la méthode des vitesses radiales. Notons aussi qu'il est possible de coupler la spectroscopie Doppler à haute résolution avec des techniques d'imagerie à haut-contraste. Cela a été fait pour la planète  $\beta$  Pic b et a permis de détecter du CO et de déterminer sa vitesse de rotation, en utilisant les différences spectrales entre l'étoile et le compagnon pour filtrer les résidus stellaires ([Snellen et al., 2014a](#)). Plus récemment, [Hoeijmakers et al. \(2018b\)](#) généralisèrent ces techniques de corrélations croisées à des cubes de données issus de spectrographes à intégrale de champs pour détecter  $\beta$  Pic b dans un champ de vue 2D grâce à sa signature moléculaire. Un chapitre de ce manuscrit est consacré à cette technique.

*Les spectres planétaires représentent une véritable mine d'information sur les processus physiques chimiques en jeu dans l'atmosphère de ces objets. L'un des principaux défis de l'astronomie moderne est la lecture et l'interprétation de ces informations. Nous allons maintenant voir plusieurs techniques qui permettent d'estimer les caractéristiques atmosphériques des planètes et des naines brunes.*

## 1.5 Caractérisation analytique des atmosphères sous-stellaires

Notre compréhension de la physique en jeu dans les atmosphères planétaires est le reflet de notre capacité à les reproduire via des modèles dont nous maîtrisons les principaux éléments physiques. Depuis les premières acquisitions de spectres d'exoplanètes, de nombreuses équipes ont mis au point des modèles permettant aujourd'hui d'estimer leurs paramètres atmosphériques. Deux approches différentes sont utilisées. Le *retrieval* tente de reproduire les spectres observés en faisant varier des paramètres servant à générer un spectre synthétique. Le *forward modelling* utilise des grilles de spectres synthétiques pré-compilées et cherche, dans ces grilles, le modèle le plus représentatif des observations. Dans cette partie, nous détaillerons ces deux approches, puis les méthodes statistiques utilisées pour estimer les paramètres atmosphériques via ces méthodes.

### 1.5.1 Le *forward modelling* et les modèles auto-consistants

La philosophie des modèles auto-consistants est de tenir compte de notre compréhension des processus physiques (température, pression), dynamiques (sédimentation des grains solides, convection, irradiation) et chimiques (réactions chimiques, abondances), impliqués dans l'atmosphère des planètes géantes pour reproduire le flux émergent de l'atmosphère de ces objets à l'aide d'hypothèses, a priori, sur l'atmosphère, comme les équilibres chimiques, l'équilibre radiatif-convectif et la physique gouvernant la formation de nuages. On trouve deux familles de modèles auto-consistants. Les modèles 1D qui calculent un spectre en sortie d'atmosphère par transfert radiatif à travers des couches parallèles successives dans l'atmosphère (essentiel des modèles proposés), et les modèles 3D (aussi appelés "modèles de circulation globale") qui généralisent les modèles 1D à trois dimensions.

L'une des principales difficultés pour reproduire le flux émis par des objets de faible masse est la modélisation des nuages et de la poussière atmosphérique, et leur impact sur les spectres, notamment lors de la transition L-T. Les naines T et Y paraissent aussi légèrement plus rouges que ce qui est attendu pour des objets totalement dénués de nuages dans la partie optiquement mince de l'atmosphère, ce qui motive l'idée que d'autres types de nuages et de poussières se forment à ces températures, comme des sulfites, du sel alcalin ou des nuages d'eau (Burrows et al., 2003; Morley et al., 2012).

La grande diversité des planètes (telluriques et massives à courtes séparations, massives à larges séparations, isolées, etc.) implique une grande diversité d'atmosphères et donc une grande diversité de modèles. Parmi les modèles récents spécialisés dans la reproduction de spectres de planètes proches de leur étoile, nous pouvons citer UMA (Seager & Sasselov, 1998), petitCODE (Mollière et al., 2017), GENESIS (Gandhi & Madhusudhan, 2017), ou encore HELIOS (Malik et al., 2017), qui peuvent prendre en compte l'irradiation de l'étoile. Ils ne seront pas détaillés dans ce manuscrit, mais de récentes revues expliquent leurs principales caractéristiques (Hubeny, 2017). D'autres modèles négligent l'influence du flux de l'étoile et tentent de reproduire les spectres des naines brunes et exoplanètes à larges séparations ou isolées.

Allard et al. (2001) ont étudié les deux cas extrêmes pour traiter les nuages et la poussière en prenant en compte la formation de grains dans l'atmosphère. Avec leur modèle AMES-COND, ces grains vont provoquer une déplétion du gaz dans la photosphère modifiant les abondances moléculaires, puis vont sédimenter immédiatement dans des couches atmosphériques plus basses. Leur opacité n'est pas prise en compte lors du calcul de transfert radiatif (celui-ci étant fait par le code PHOENIX, Hauschildt et al. 1997). A l'inverse, avec leur modèle AMES-DUSTY, Allard et al. (2001) font l'hypothèse que tous les grains formés vont rester en suspension dans toutes les couches de la photosphère et ainsi apporter une opacité prise en compte dans le calcul de transfert radiatif. En comparant les spectres synthétiques générés par ces deux modèles avec des spectres d'étoiles et de naines brunes observées, Allard et al. (2001) ont observé que les spectres de ces objets à des  $T_{\text{eff}} > 1800$  K étaient correctement reproduits par les spectres synthétiques du modèle AMES-DUSTY, cela pouvant être expliqué par un mélange vertical convectif efficace permettant de réalimenter en grains les couches externes de l'atmosphère. A l'inverse, ils ont montré que les spectres plus froids ( $T_{\text{eff}} < 1300$  K), comme celui de la naine T Gliese 229 B, étaient mieux reproduits par le modèle AMES-COND, pour lequel tous les grains ont sédimenter en dessous de la photosphère. Il y a donc un régime particulier entre 1300 K et 1800 K (correspondant à la transition L-T) pour lequel les spectres devraient être reproduits par un modèle intermédiaire aux modèles AMES-COND et AMES-DUSTY.

Une nouvelle famille de modèles a donc vu le jour en couplant les effets de sédimentation avec des processus de repopulation des grains dans la photosphère. Certains font le choix d'inclure de la microphysique complexe dans le modèle de formation de nuages, comme les DRIFT-PHOENIX (Helling et al., 2008) dont la distribution de nuages est paramétrée par un profil de mélange vertical, ou les BT-Settl (Allard et al., 2012) dont la distribution en taille des grains dans les différentes

TABLEAU 1.2 – Exemples d’espaces des paramètres explorés par les principaux modèles d’atmosphères de naines brunes et d’exoplanètes à larges séparations ou isolées. [1] Allard et al. (2001), [2] Helling et al. (2008), [3] Allard et al. (2012), [4] Madhusudhan et al. (2011b), [5] Morley et al. (2012), [6] Charnay et al. (2018), [7] Tremblin et al. (2017), [8] Marley et al. (2021).  $f_{sed}$  est le pouvoir de sédimentation des nuages et  $\gamma$  est l’indice adiabatique.

	$T_{eff}$ (K)	$\log(g)$ (dex)	[M/H]	Autres	Nuages	Ref
AMES-COND	[100, 3000]	[2.5, 6.0]	-	-	Sans	[1]
AMES-DUSTY	[1400, 3000]	[3.5, 6.0]	-	-	Avec	[1]
DRIFT-PHOENIX	[1000, 3000]	[3.0, 6.0]	[-0.6, 0.3]	-	Avec	[2]
BT-Settl	[400, 70000]	[3.5, 5.5]	[-4.0, 0.5]	-	Avec	[3]
Madhusudhan11	[600, 1700]	[3.5, 5.0]	-	M = [2, 40] $M_{Jup}$ Âge = [4 Myr, 1 Gyr]	Avec	[4]
Morley12	[400, 1300]	[4.0, 5.5]	-	$f_{sed}$ = [2, 5]	Avec	[5]
Exo-REM	[300, 1800]	[3.0, 5.0]	[-0.5, 0.5]	C/O = [0.3, 0.75]	Avec	[6]
ATMO	[800, 3000]	[2.5, 5.5]	[0.0, 0.5]	$\gamma$ = [0.01, 0.1] C/O = [0.3, 0.7]	Sans	[7]
SONORA	[200, 2400]	[2.5, 5.5]	[-0.5, 0.5]	C/O = [0.275, 0.825]	Sans	[8]

couches de l’atmosphère est calculée par comparaison entre les échelles de temps de différents mécanismes de condensation, de sédimentation et de mélange des grains. D’autres modèles ont préféré simplifier la physique utilisée pour le traitement des nuages en évitant une microphysique trop complexe et en fixant certains paramètres. On peut citer le modèle de Tsuji (2002) qui généralisa les modèles d’atmosphère stellaire aux objets plus froids en faisant l’hypothèse que des petits grains ( $< 0.01 \mu m$ ) peuvent se former dans la photosphère et y rester, le modèle de Ackerman & Marley (2001) qui fait l’hypothèse d’un équilibre entre la diffusion turbulente et la sédimentation d’une distribution de taille de grains (étendu aux objets plus froids par Morley et al. 2012), le modèle de Marley et al. (2010) qui prend en compte d’éventuels trous dans la couche nuageuse ou les modèles de Burrows et al. (2006) et Madhusudhan et al. (2011b) qui utilisent trois paramètres libres pour décrire la forme des nuages (deux paramètres) et la taille des grains (un paramètre). La majorité de ces modèles peinent cependant à reproduire les spectres d’objets à la transition L-T. C’est pourquoi une nouvelle génération de modèles a été développée, pour fournir des spectres synthétiques à ces températures.

Le modèle Exo-REM (Charnay et al., 2018) limite la complexité de la microphysique utilisée qui est souvent difficile à interpréter et ne permet pas toujours de contraindre les paramètres atmosphériques. Le flux est calculé itérativement à travers 65 sous-couches de la photosphère (la même technique est utilisée dans les modèles BT-Settl) à l’équilibre radiatif-convectif. La chimie hors-équilibre n’est permise que pour quelques molécules (CO, CH<sub>4</sub>, CO<sub>2</sub>, et NH<sub>3</sub>) et le modèle de nuages inclut la formation de fer, de silicates, de Na<sub>2</sub>S, de KCl et d’eau. En simulant uniquement les processus physiques et chimiques dominants et en incluant l’effet de rétroaction des nuages sur la structure thermique de l’atmosphère, les Exo-REM reproduisent les spectres d’objets à la transition L-T en limitant le risque de sur-interprétation des paramètres utilisés pour les générer.

Comme nous l’avons vu, la transition L-T est marquée par une rupture de la couverture nuageuse. Cependant, les modèles sans nuages ne permettent pas de reproduire les spectres d’objets T et Y qui semblent plus rouges. Cette différence a été interprétée par Morley et al. (2012) comme

l'apparition de nouveaux nuages de sulfites et de chlorures ( $\text{MnS}$ ,  $\text{Na}_2\text{S}$ ,  $\text{KCl}$ ), mais cela ne suffit pas à améliorer les spectres modélisés. Avec le modèle ATMO, Tremblin et al. (2015) ont montré que des processus de convection de double diffusion ("fingering convection" en anglais) et d'instabilités thermodynamiques  $\text{CO}/\text{CH}_4$  et  $\text{N}_2/\text{NH}_3$  peuvent imiter l'impact rougissant des nuages et être utilisés pour reproduire les spectres de naines Y et T. Il est néanmoins possible que le couplage de ces deux approches, avec et sans nuage, soit nécessaire pour parfaitement modéliser l'atmosphère des planètes géantes froides.

Chacun de ces modèles peut ainsi générer un spectre synthétique en limitant le nombre de paramètres libres comme la  $T_{\text{eff}}$ , la gravité de surface ou les abondances chimiques (métallicité, rapport C/O) et former des grilles de spectres synthétiques pré-compilés utilisées pour contraindre les paramètres physiques des objets observés. Cela implique un certain nombre d'hypothèses sur des processus physiques (mélange vertical, super-saturation, taille des grains, etc.) et de fixer des paramètres. Les exemples des grilles de spectres synthétiques les plus utilisées sont donnés dans la Table 1.2. L'approche du *forward modelling* est aujourd'hui très utilisée dans l'étude des atmosphères d'objets sous-stellaires (Saumon et al. 2000, Cushing et al. 2008, Manjavacas et al. 2016, Petrus et al. 2020). Elle est au cœur de cette thèse et sera développée dans les différents chapitres.

### 1.5.2 Le *retrieval* et les modèles paramétrés

Tandis que les modèles auto-consistants fixent les paramètres pour former des grilles, l'idée clé du *retrieval* est d'utiliser une forme paramétrée de ces modèles. En faisant varier la composition chimique ainsi que le profil pression-température (P-T), les codes de *retrieval* adaptent leur modèle aux observations. Cela a deux avantages par rapport aux modèles auto-consistants. Le calcul des profils P-T et des compositions chimiques est ce qui prend le plus de temps lors de la génération d'un spectre via des modèles auto-consistants, ainsi les paramétrer réduit les temps de calculs. La paramétrisation permet également de s'affranchir des hypothèses nécessaires, a priori, aux modèles auto-consistants comme les conditions d'équilibre de l'atmosphère, car les profils P-T et les abondances sont estimés directement grâce aux données. Cependant, cette approche comporte aussi des inconvénients. Le fait de faire varier trop de paramètres peut mener à un sur-ajustement des modèles sur les données et donc une sur-interprétation des résultats. De plus, le *retrieval* est fortement dépendant de la qualité des données. Par exemple, une signature spectrale faible peut être interprétée comme la présence de nuages (Deming et al., 2013) ou par une faible abondance du composé chimique responsable de cette signature (Madhusudhan et al., 2014).

Étant directement ajustés sur les données, les modèles de *retrieval* ont dû se spécialiser selon les données obtenues par transits (transmission, émission, réflexion) et celles obtenues par imagerie directe. Cependant, ils respectent tous la même architecture, à savoir le calcul de la structure de l'atmosphère (profil P-T, densité, concentration des espèces chimiques, profil des nuages), puis le calcul de transfert radiatif à travers cette atmosphère. Le profil P-T est, la plupart du temps, injecté comme paramètre libre et permet de calculer les profils de pression, de température et de densité en fonction de l'altitude en faisant l'hypothèse que les gaz sont parfaits et à l'équilibre hydrostatique. Les autres paramètres libres sont les abondances des éléments chimiques. Ces modèles peuvent aussi prendre en compte les propriétés des nuages et leur inhomogénéité, comme dans Benneke & Seager (2012); Kreidberg (2015); Line & Parmentier (2016). Au final, un modèle de *retrieval* comporte  $> 10$  paramètres libres (parfois  $> 100$ ), contre  $\sim 4$  à  $10$  pour les modèles auto-consistants.

Le calcul de transfert radiatif permettant de générer un spectre synthétique dépend de la configuration de la planète lors de l'observation. Pour les planètes observées en transmission, le spectre mesuré résulte des effets cumulés des opacités de l'atmosphère qui vont absorber du flux de l'étoile à différentes altitudes. Pour modéliser ce spectre, un modèle d'étoile est utilisé. Son flux synthétique émis est ensuite comparé, à chaque longueur d'onde, aux opacités des éléments chimiques de l'atmosphère simulée en tenant compte de la profondeur d'atmosphère traversée par chaque rayon (qui dépend de l'altitude et donc du profil P-T). Pour les planètes observées en émission,

le spectre mesuré est une combinaison du spectre émis par l'étoile (un modèle stellaire est aussi utilisé), du spectre réfléchi par la planète (des modèles sont en cours de développement, [Lupu et al. 2016](#); [Mukherjee et al. 2021](#)) et du spectre émis par la planète. Des modèles d'émissions thermiques simulent un flux émis par les couches profondes de l'atmosphère. Les photons simulés passent à travers l'atmosphère et interagissent avec les éléments chimiques de l'atmosphère synthétisée grâce au profil P-T et aux abondances chimiques. Les données d'imagerie directe sont elles aussi modélisées par des modèles d'émission thermique. La masse et le rayon n'étant pas connus a priori, le rayon planétaire, la gravité de surface et la distance par rapport à l'observateur sont inclus dans les paramètres libres. Des exemples de codes optimisés pour chaque configuration planétaire sont donnés dans la Table 1.3.

TABLEAU 1.3 – Exemples des codes de retrieval les plus utilisés. Les références pointent vers les articles de présentation des codes ou des exemples d'utilisation. Les méthodes d'inversion Markov chain Monte Carlo (MCMC), Bootstrap Monte Carlo (BMC), Optimal Estimation (OE) et nested sampling (NS) sont décrites dans la Section 1.5.3. Cette table est tirée de [Madhusudhan \(2018\)](#)

Code/Auteurs	Configurations compatibles	Méthodes d'inversion	Ref
Madhusudhan et al.	Transit primaire Éclipse secondaire	MCMC	<a href="#">Madhusudhan &amp; Seager (2010)</a>
CHIMERA	Transit primaire Éclipse secondaire Imagerie directe	OE, BMC, MCMC, NS	<a href="#">Line et al. (2013)</a>
NEMESIS	Transit primaire Éclipse secondaire	OE	<a href="#">Lee et al. (2012, 2014)</a>
Benneke & Seager	Transit primaire	NS	<a href="#">Benneke &amp; Seager (2013)</a>
$\tau$ -REx	Transit primaire Éclipse secondaire	MCMC, NS	<a href="#">Waldmann et al. (2015a,b)</a>
HELIOS-R	Imagerie directe Éclipse secondaire	NS	<a href="#">Lavie et al. (2017)</a>
ATMO	Transit primaire Éclipse secondaire	MCMC	<a href="#">Evans et al. (2017)</a>
BART	Transit primaire Éclipse secondaire	MCMC	<a href="#">Harrington et al. (2019)</a>
POSEIDON	Transit primaire	NS	<a href="#">MacDonald &amp; Madhusudhan (2017a)</a>
HyDRA	Éclipse secondaire	NS	<a href="#">Gandhi &amp; Madhusudhan (2018)</a>

### 1.5.3 Les méthodes d'inversion

Afin de déterminer les paramètres atmosphériques des sources observées, les modèles d'atmosphère peuvent être couplés à des méthodes d'estimation statistique optimisées. Le but de ces méthodes est d'explorer l'espace de paramètres défini par le modèle et de contraindre le jeu de paramètres qui minimise la différence avec l'observation en mettant en exergue les possibles dégénérescences entre ces paramètres. La manière la plus simple est de générer des grilles représentatives de l'espace des paramètres (grilles de paramètres libres pour les modèles *retrieval*

et grilles de spectres synthétiques pour le *forward modelling*) et de comparer chaque noeud de la grille aux observations, en calculant un  $\chi^2$  par exemple. Bien que cette méthode donne une bonne approximation des paramètres optimaux, elle est cependant limitée par le temps de calcul et l'échantillonnage de la grille. Afin d'optimiser l'exploration des grilles (identification de minimums de  $\chi^2$  locaux, visualisation des dégénérescences entre les paramètres), tout en propageant les erreurs des spectres observés aux paramètres atmosphériques estimés, des modules d'analyse Bayésienne ont très rapidement été utilisés.

### Le théorème de Bayes

Au XVIII<sup>e</sup> siècle, Thomas Bayes formalisa l'idée que des résultats expérimentaux notés  $Pr(B)$  peuvent, dans une certaine mesure, modifier une connaissance a priori notée  $Pr(A)$  en une connaissance a posteriori notée  $Pr(A|B)$  (A sachant B), par l'intermédiaire d'une quantité notée  $Pr(B|A)$ , indiquant la connaissance a posteriori des mesures expérimentales. Il formalisa cette idée en utilisant les probabilités de ces différentes valeurs, et énonça le théorème de Bayes :

$$Pr(A|B) = \frac{Pr(B|A) Pr(A)}{Pr(B)} \quad (1.1)$$

Dans notre cas, nous utiliserons l'observation de l'atmosphère d'une exoplanète pour améliorer notre connaissance de sa température effective, sa gravité de surface, son rayon, sa métallicité, etc., en la comparant avec un spectre synthétique généré par un modèle d'atmosphère. Le théorème de Bayes devient alors :

$$Pr(\theta|\mathcal{D}, \mathcal{I}) = \frac{Pr(\mathcal{D}|\theta, \mathcal{I}) Pr(\theta|\mathcal{I})}{Pr(\mathcal{D}|\mathcal{I})} \quad (1.2)$$

Avec  $\theta$  le jeu de paramètres libres qui a permis de générer le spectre synthétique considéré,  $\mathcal{D}$  le spectre issu de l'observation et  $\mathcal{I}$  le modèle utilisé pour générer les spectres synthétiques. On appellera :

- $Pr(\theta|\mathcal{D}, \mathcal{I}) = p(\theta)d\theta$  l'information a posteriori (posterior) sur la densité de probabilité des paramètres libres du modèle contraint par les données.
- $Pr(\mathcal{D}|\theta, \mathcal{I}) = \mathcal{L}(\theta)$  la fonction de vraisemblance qui quantifie en tout point de l'espace des paramètres la correspondance entre le spectre synthétique correspondant et le spectre observé.
- $Pr(\theta|\mathcal{I}) = \pi(\theta)d\theta$  la connaissance que nous avons sur les caractéristiques de la source a priori (*prior*) avant de les comparer à l'observation.
- $Pr(\mathcal{D}|\mathcal{I}) = \mathcal{Z}$  l'évidence statistique qui marginalise  $\mathcal{L}$  à tout l'espace des paramètres par la formule :

$$\mathcal{Z} = \int_{\Omega} \mathcal{L}(\theta) \pi(\theta) d\theta = \int_0^1 \mathcal{L}(\mathcal{X}) d\mathcal{X} \quad (1.3)$$

Où  $\Omega$  est l'espace des paramètres et  $\mathcal{X}$  est le volume de *prior*  $\pi(\theta)$ , définie par :

$$\mathcal{X} = \frac{\int_{\mathcal{L}>\lambda} \pi(\theta) d\theta}{\int_{\Omega} \pi(\theta) d\theta} \quad (1.4)$$

Où  $\lambda$  est la valeur de vraisemblance. L'évidence statistique est une valeur clé pour comparer les performances de plusieurs modèles car elle reflète la complexité de ceux-ci (Trota, 2008; Waldmann et al., 2015a). En calculant le facteur de Bayes comme le rapport d'évidence entre deux modèles  $M_1$  et  $M_2$  à comparer :

$$\mathcal{B} = \frac{\mathcal{L}_{M_1}}{\mathcal{L}_{M_2}} \quad (1.5)$$

celui-ci agit comme un rasoir d'Occam et permet de sélectionner le modèle le moins complexe, à qualité d'ajustement équivalente.

Pour chaque longueur d'onde du spectre synthétique, on définit une fonction densité de probabilité sur la base de ce que nous supposons sur la distribution des données expérimentales (les spectres observés). Ici, nous allons supposer que les erreurs de chaque point du spectre sont Gaussiennes et que ces points sont indépendants. Bien qu'elles soient de bonnes approximations, les instruments peuvent induire des erreurs corrélées dans les données, il faut alors prendre en compte ces corrélations en utilisant une matrice de covariance dans le calcul de vraisemblance. La fonction densité de probabilité Gaussienne, sera centrée sur le point du spectre synthétique  $\tilde{y}$  et avec un écart type  $\tilde{\sigma}$ ,  $y$  étant les données :

$$f(y; \tilde{y}, \tilde{\sigma}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\tilde{\sigma}^2}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{y-\tilde{y}}{\tilde{\sigma}}\right)^2} \quad (1.6)$$

On note ici que la fonction densité de probabilité ne dépend que du modèle. Maintenant, nous allons supposer que son écart type correspond à l'erreur sur les données expérimentales  $\sigma$  :

$$f(y, \sigma; \tilde{y}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{y-\tilde{y}}{\sigma}\right)^2} \quad (1.7)$$

La vraisemblance est le produit des valeurs de la fonction densité de probabilité appliqué à tous les points  $i$  des données expérimentales :

$$\mathcal{L} = \prod_i f(y_i, \sigma_i; \tilde{y}_i) = \prod_i \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_i^2}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{y_i-\tilde{y}_i}{\sigma_i}\right)^2} \propto e^{-\frac{1}{2}\sum_i \left(\frac{y_i-\tilde{y}_i}{\sigma_i}\right)^2} \propto e^{-\frac{1}{2}\chi^2} \quad (1.8)$$

On reconnaît ici le  $\chi^2$  :

$$\chi^2 = \sum_i \left(\frac{y_i-\tilde{y}_i}{\sigma_i}\right)^2 \quad (1.9)$$

On voit que, pour des points de mesure supposés indépendants avec des erreurs supposées Gaussiennes, maximiser la vraisemblance est équivalent à minimiser le  $\chi^2$ .

L'enjeu est maintenant d'avoir une méthode optimisée pour sonder l'espace des paramètres et converger vers les paramètres maximisant la vraisemblance. Plusieurs stratégies sont utilisées. L'estimation optimale (OE) consiste à calculer et minimiser des moindres carrés de façon non linéaire à la manière de l'algorithme de Levenberg-Marquardt. Cette méthode est cependant limitée aux espaces des paramètres simples (distributions postérieures mono-modales et Gaussiennes), ce qui n'est généralement pas le cas pour les atmosphères planétaires. De plus, il est compliqué d'estimer les erreurs des paramètres estimés. Pour cela, il faut coupler l'estimation optimale avec un autre algorithme, par exemple le Bootstrap Monte-Carlo (BMC), qui génère des observations simulées à partir des données et de leurs erreurs. Chaque observation simulée est ajustée par OE, ce qui donne ainsi la distribution de probabilités des paramètres directement reliée à la distribution de probabilités des erreurs des points de mesure. D'autres algorithmes sont utilisés et permettent d'avoir accès aux posteriors des paramètres directement. Nous allons détailler les algorithmes MCMC et *nested sampling* qui sont les plus courants.

### La méthode de Markov Chain Monte Carlo - Metropolis Hastings

Une stratégie est de réaliser une exploration linéaire de l'espace des paramètres. L'algorithme utilise des chaînes de Markov qui vont, par itérations successives (donc séquentiellement), explorer l'espace des paramètres. La Figure 1.9 illustre ces chaînes de Markov et l'algorithme du MCMC. Celui-ci repose sur trois ingrédients principaux :

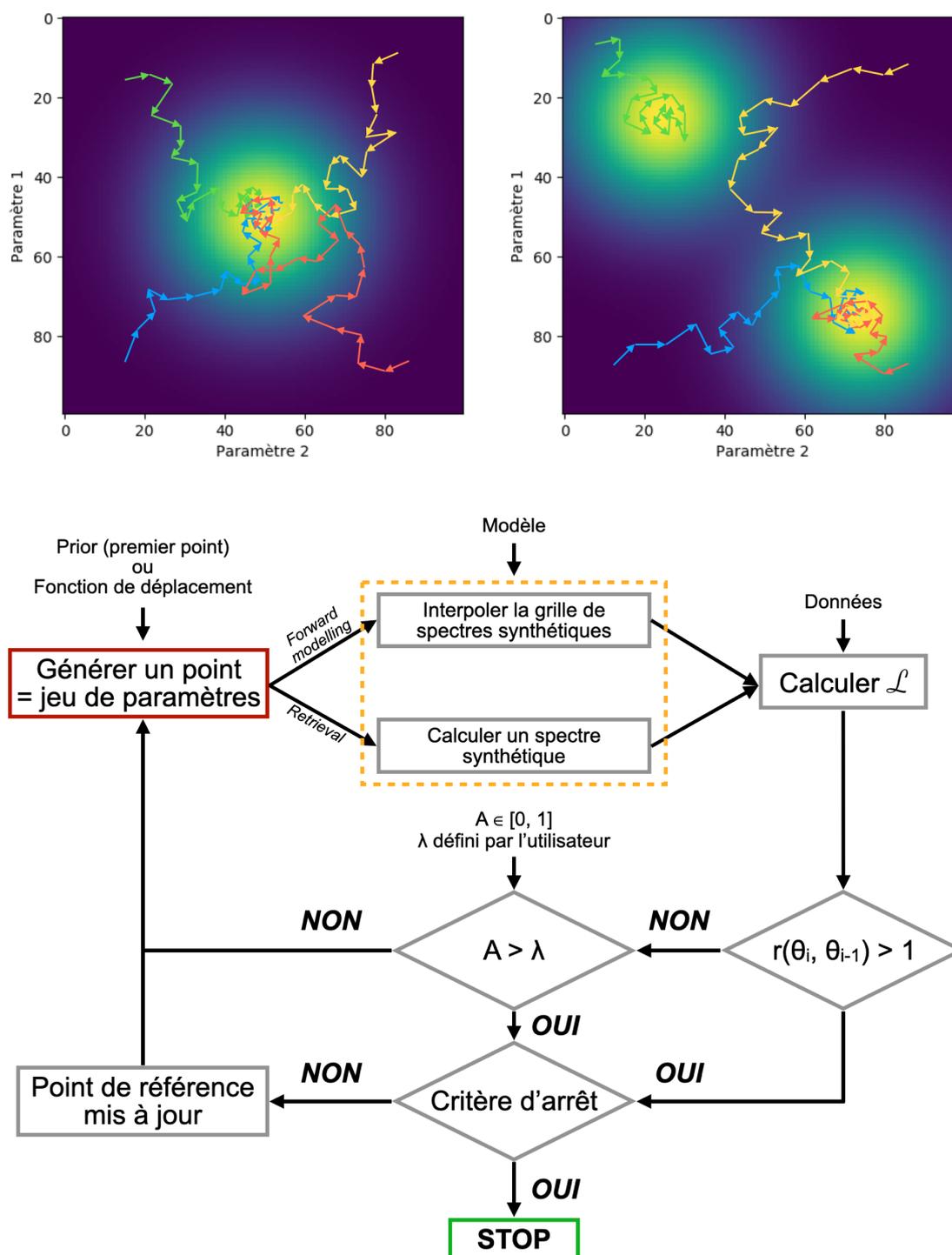


FIGURE 1.9 – En bas : Algorithme du MCMC. Le critère d'arrêt est choisi par l'utilisateur. Il peut s'agir, par exemple, d'un nombre d'itérations maximal ou d'un écart de vraisemblance minimum à atteindre entre deux itérations. En haut : Illustration des chaînes de Markov sur un espace de paramètres mono-modal (à gauche) et bi-modal (à droite). Ici, quatre chaînes sont représentées mais une application pratique peut en compter des centaines.

- *Le tirage Monte Carlo* : Ce bloc consiste à créer des nombres aléatoires  $\theta$  à partir d'une loi de distribution définie par la fonction *prior*. Il s'agit, dans le cas d'un *prior* plat, de générer des nombres dans un intervalle, en considérant que chaque valeur a une probabilité égale d'être tirée, mais il est aussi possible de définir des distributions plus complexes, comme par exemple une loi normale  $\mathcal{N}(\mu; \sigma)$  de moyenne  $\mu$  et d'écart type  $\sigma$ . Un modèle est ensuite calculé avec ces paramètres  $\theta$ , soit par interpolation de la grille de spectres synthétiques dans le cas du *forward modelling*, soit généré directement dans le cas du *retrieval*. Puis la vraisemblance est calculée en comparant ce modèle et l'observation.
- *Les chaînes de Markov* : C'est un modèle stochastique qui décrit une séquence d'évènements dont la probabilité dépend seulement de l'évènement précédent. Ici, le principe des Chaînes de Markov est de générer un jeu de paramètres  $\theta_i$  aléatoirement en utilisant un processus Monte Carlo. La loi de distribution utilisée (*prior*) à l'étape  $\theta_i$  dépend du jeu de paramètres généré à l'étape précédente  $\theta_{i-1}$ . On génère ainsi une marche aléatoire qui doit respecter les principes de réversibilité (le rapport des probabilités de déplacement entre deux jeux de paramètres successifs doit être égal au rapport des probabilités de ces deux jeux de paramètres  $Pr(\theta_i \rightarrow \theta_{i+1})/Pr(\theta_{i+1} \rightarrow \theta_i) = Pr(\theta_{i+1})/Pr(\theta_i)$ ), d'irréductibilité (le déplacement est possible vers tous les points de l'espace des paramètres avec une probabilité  $Pr(\theta_i \rightarrow \theta_{i+1})$  non nulle) et de non périodicité. Le choix de la distribution de probabilité  $Pr(\theta_i \rightarrow \theta_{i+1})$  est délicat et influence grandement l'évolution des chaînes. Généralement, c'est une fonction Gaussienne qui est choisie avec un écart type de 0.44 pour un espace des paramètres à 1D et 0.23 sinon (valeurs estimées pour optimiser la convergence). Dans le cas d'espace des paramètres à plusieurs dimensions, des corrélations peuvent apparaître. Pour en tenir compte, on peut utiliser l'échantillonnage de Gibbs qui découple  $Pr(\theta_i \rightarrow \theta_{i+1})$  en un système  $\{Pr(\theta_{0,i} \rightarrow \theta_{0,i+1}), Pr(\theta_{1,i} \rightarrow \theta_{1,i+1}), \dots, Pr(\theta_{N,i} \rightarrow \theta_{N,i+1})\}$  où N est le nombre de paramètres libres, passant alors d'un problème à N dimensions, à N problèmes à 1 dimension.
- *La fonction de Metropolis Hastings* : Cette fonction est une condition d'acceptation du nouveau point généré. A chaque nouveau point, on calcule le rapport :

$$r(\theta_i; \theta_{i-1}) = \frac{Pr(\theta_i | \mathcal{D}, \mathcal{I})}{Pr(\theta_{i-1} | \mathcal{D}, \mathcal{I})} = \frac{\frac{\mathcal{L}(\theta_i) \pi(\theta_i)}{\int \mathcal{L}(\theta) \pi(\theta) d\theta}}{\frac{\mathcal{L}(\theta_{i-1}) \pi(\theta_{i-1})}{\int \mathcal{L}(\theta) \pi(\theta) d\theta}} = \frac{\mathcal{L}(\theta_i) \pi(\theta_i)}{\mathcal{L}(\theta_{i-1}) \pi(\theta_{i-1})} \quad (1.10)$$

On remarque premièrement que l'évidence étant la même pour les points  $\theta_i$  et  $\theta_{i-1}$ , elle disparaît dans le rapport. La fonction *prior*  $\pi$  est définie à l'avance, et la fonction de vraisemblance  $\mathcal{L}$  est calculée par comparaison entre le spectre synthétique généré au point  $\theta_i$  et les données expérimentales. Le fait que ce rapport soit supérieur à 1 signifie que la probabilité que le paramètre recherché soit  $\theta_i$  avec ces données est plus grande que la probabilité qu'il soit  $\theta_{i-1}$ . On maximise donc les chances d'avoir le bon jeu de paramètres, le nouveau point est accepté. Au contraire, si ce rapport est plus petit que 1, alors le nouveau point minimise nos chances d'avoir le bon jeu de paramètres, il est rejeté et on génère un autre nouveau point à tester. En réalité, on utilise un autre tirage aléatoire pour déterminer si ce nouveau point est effectivement rejeté ou non. Si ce nombre entre 0 et 1 est plus grand qu'une valeur  $\lambda$  définie, alors le point est tout de même accepté. Cela permet d'éviter d'être piégé dans un maximal local de vraisemblance et de continuer à explorer l'espace des paramètres. Bien que l'algorithme Metropolis-Hastings soit à ce jour le plus utilisé, il en existe d'autres, comme par exemple l'algorithme du recuit simulé.

En pratique, on utilise plusieurs Chaînes de Markov simultanées. En effet, l'une des faiblesses du MCMC-MH est qu'il explore l'espace des paramètres point par point, il est donc possible (et probable) que des zones de cet espace ne soient pas parcourues par les chaînes lancées. Par ailleurs, bien qu'il soit possible pour une chaîne de Markov d'échapper à un maximum local, ce

risque n'est pas nul (problème des vraisemblances multi-modales). Ainsi, l'utilisation de plusieurs chaînes en parallèles maximise les ensembles de paramètres testés, et permet de continuer l'exploration, même si certaines chaînes sont bloquées dans des maxima locaux, mais cela augmente le temps de la routine. Le code peut aussi avoir du mal à converger dans des espaces de paramètres trop complexes et le choix des points initiaux de chaque chaîne a aussi son importance. Deux stratégies peuvent être adoptées. La première est de générer ces points aléatoirement dans l'espace des paramètres, ce qui permet de s'assurer de son exploration globale (équivalent à un *prior* plat). La seconde utilise une information a priori pour générer ces points de départ dans les zones les plus susceptibles de maximiser la vraisemblance pour optimiser le temps de convergence (il est possible d'utiliser d'autres algorithmes comme le Levenberg-Marquardt pour définir ces zones).

L'une des difficultés du MCMC-MH est qu'une étape supplémentaire est nécessaire pour calculer l'évidence  $\mathcal{Z}$ , particulièrement pour les espaces de paramètres avec un nombre élevé de dimensions. Plusieurs techniques ont été développées en ce sens, comme le calcul de l'estimateur de moyenne harmonique de la vraisemblance (Newton & Raftery, 1994), l'approximation de la distribution postérieure par une distribution Gaussienne multidimensionnelle pour simplifier le calcul l'Équation 1.3 (Kass & Raftery, 1995), ou l'échantillonnage de l'espace des paramètres pour transformer l'intégrale de l'Équation 1.3 en somme (Weinberg, 2009).

### Le *nested sampling*

Le *nested sampling* (proposé par Skilling 2004) est une technique bayésienne alternative au MCMC qui se démocratise dans la communauté astrophysique. Contrairement au MCMC, cette méthode explore l'espace des paramètres en utilisant des surfaces à N-dimensions de plus en plus petites (N étant le nombre de dimensions de l'espace des paramètres). Cette nouvelle approche permet d'explorer l'intégralité de l'espace des paramètres en s'affranchissant du problème des maxima locaux de vraisemblance.

Un ajustement par *nested sampling* suit différentes étapes, illustrées par la Figure 1.10 :

- *Initialisation* : Après avoir défini l'espace des paramètres à sonder à travers les *priors*, un grand nombre de points, appelés "points vivants", sont générés dans cet espace par tirage Monte Carlo (nombre défini par l'utilisateur). Pour chaque point, un spectre synthétique est calculé en utilisant le modèle d'atmosphère choisi (*retrieval*) ou interpolé dans une grille de spectres pré-compilés (*forward modelling*) puis, est comparé aux observations pour obtenir la vraisemblance.
- *Itérations* : Le point avec la plus petite vraisemblance, noté  $\mathcal{L}_{min}$ , est identifié. Cette valeur permet de délimiter une zone contenant tous les points de l'espace des paramètres ayant une vraisemblance plus grande que le point sélectionné. La surface de cette zone (ou le volume, ou l'hypervolume en fonction des dimensions de l'espace des paramètres) est par définition le volume de *prior*  $\mathcal{X}$  défini par l'équation 1.4. Quand  $\mathcal{X}=1$ , tout l'espace des paramètres est intégré et  $\mathcal{L}=\mathcal{L}_{min}$ . En revanche, quand  $\mathcal{X} \sim 0$ , on a  $\mathcal{L} \sim \mathcal{L}_{max}$ . Finalement, le point sélectionné est supprimé et un nouveau point est généré aléatoirement dans  $\mathcal{X}$ . Son spectre est calculé ou interpolé et sa vraisemblance est calculée.
- *Maximisation de la vraisemblance* : On répète l'étape d'itération pour ainsi réduire la zone de l'espace des paramètres jusqu'à ce qu'un critère d'arrêt soit atteint.

L'une des forces du *nested sampling* est la possibilité de calculer directement l'évidence statistique  $\mathcal{Z}$ . La Figure 1.11 illustre la relation entre  $\mathcal{L}$ ,  $\mathcal{X}$  et  $\mathcal{Z}$  qui correspond à l'intégrale de  $\mathcal{L}(\mathcal{X})$ , selon l'équation 1.3. Le calcul de  $\mathcal{Z}$  peut être approximé en utilisant la règle des trapèzes et devient :

$$\mathcal{Z} = \sum_{i=1}^M \omega_i \cdot \mathcal{L}_i \quad (1.11)$$

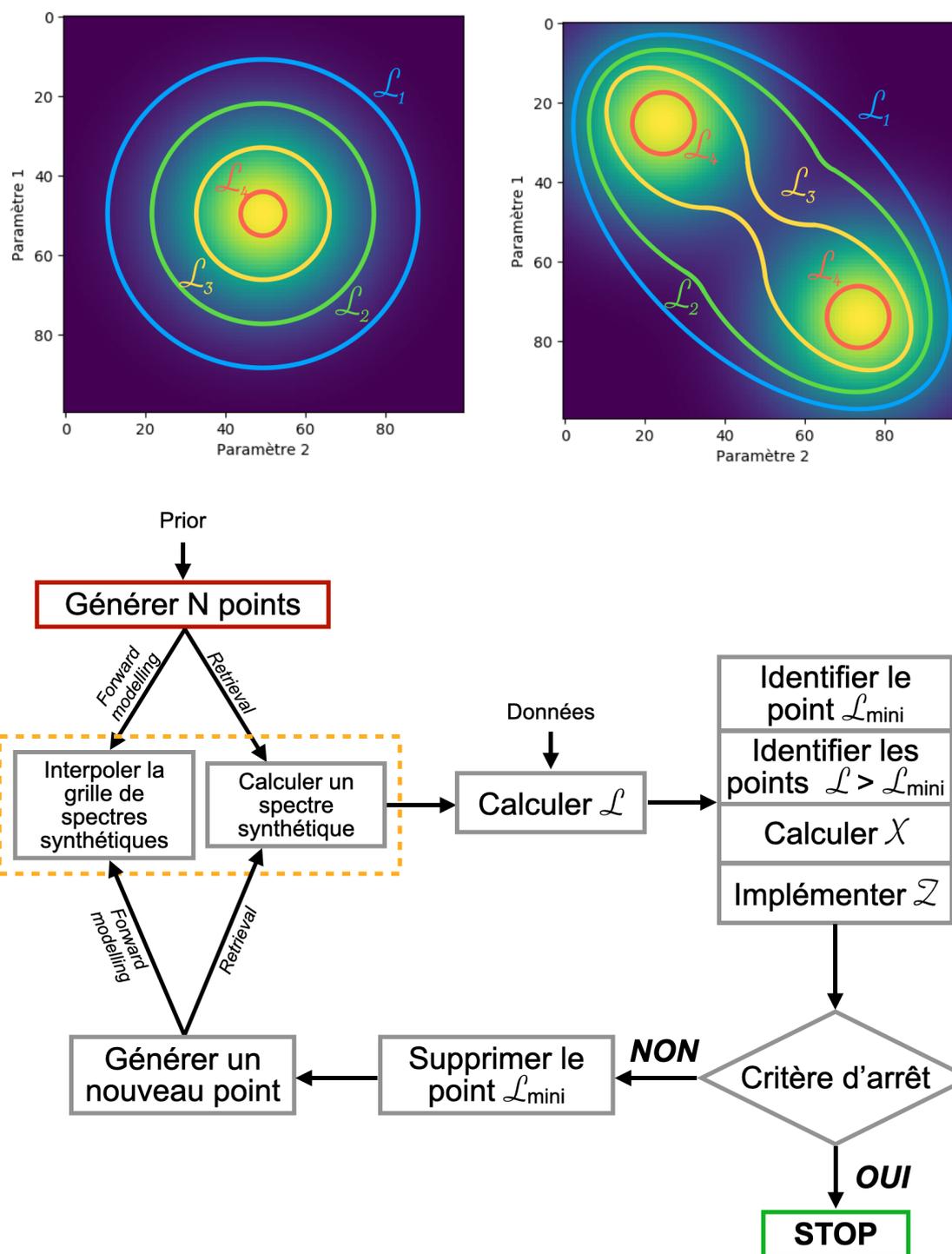


FIGURE 1.10 – En bas : Algorithme du nested sampling. Le critère d'arrêt est également choisi par l'utilisateur. En haut : Illustration de quatre itérations. L'espace des paramètres est réduit au fur et à mesure que les points vivants ayant la plus faible vraisemblance sont supprimés puis réinjectés. On peut voir dans le cas d'un espace de paramètres bi-modal (à droite) qu'il peut se scinder en plusieurs sous-espaces, assurant ainsi son exploration de façon homogène et globale.

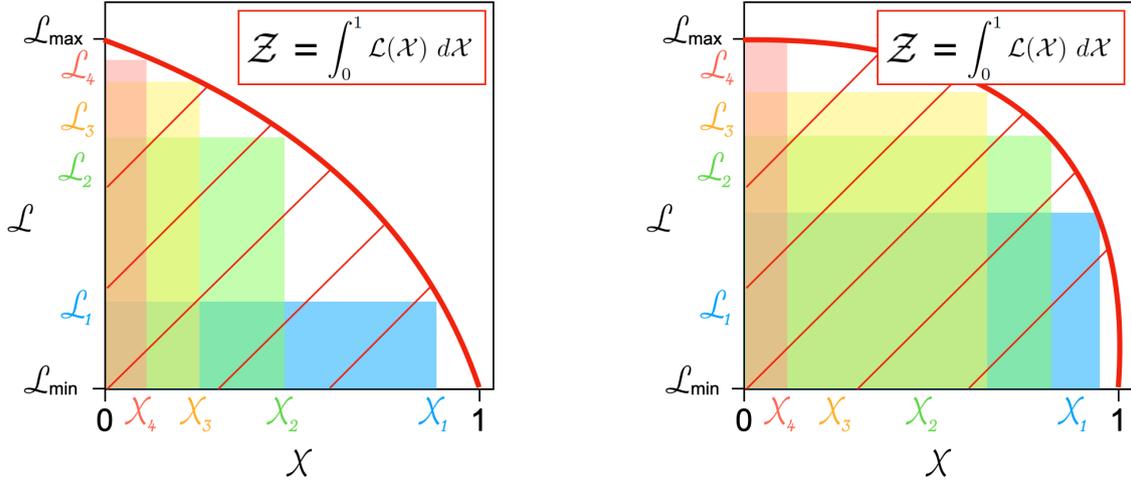


FIGURE 1.11 – Évolution de la vraisemblance en fonction du volume de prior dans le cas d'un espace des paramètres mono-modal (à gauche) et bi-modal (à droite). Le code couleur est le même que pour la Figure 1.10.

Où  $\mathcal{L}_i$  est la vraisemblance à la  $i$ -ème itération, le poids  $\omega_i = (1/2)/(\mathcal{X}_{i-1} - \mathcal{X}_{i+1})$  et  $M$  le nombre total d'itérations. Ainsi, à chaque itération, l'évidence  $\mathcal{Z}$  est recalculée avec la vraisemblance et le volume de *prior* défini par le nouveau point généré. Dans certains codes elle peut même être utilisée comme critère d'arrêt (l'algorithme s'arrête lorsque que la différence de  $\mathcal{Z}$  entre deux itérations est plus faible qu'une valeur choisie).

La possibilité d'explorer l'espace des paramètres de façon homogène et globale fait du *nested sampling* un algorithme idéal pour caractériser les atmosphères dont l'espace des paramètres est bien souvent complexe (multi-modalités, dégénérescences, etc.) et le calcul direct de l'évidence statistique permet de faire de la comparaison de modèles naturellement. Plusieurs codes publics permettent d'utiliser facilement des modules de *nested sampling*, chacun ayant ses spécificités. `nestle`<sup>4</sup>, simple d'utilisation, qui définit  $\mathcal{X}$  par des ellipsoïdes, `PyMultiNest`<sup>5</sup> qui permet la parallélisation, `dynesty`<sup>6</sup> qui ajuste le nombre de points vivants en fonction de la complexité de l'espace des paramètres, ou encore `UltraNest`<sup>7</sup> qui ne définit plus  $\mathcal{X}$  par des ellipsoïdes contenant l'ensemble des points vivants mais par la surface d'ellipsoïdes définis autour de chaque point.

C'est le *nested sampling* qui fut choisit pour cette thèse, cette approche sera donc développée au cours de ce manuscrit.

*Le retrieval et le forward modelling sont deux approches actuellement utilisées pour estimer les propriétés atmosphériques des planètes et des naines brunes, en comparant leur spectre à des spectres modélisés. Ces deux méthodes ont chacune leurs avantages et leurs inconvénients. Le retrieval paramétrise et ajuste les modèles d'atmosphères aux données, ce qui peut entraîner des résultats biaisés par un relâchement de certains paramètres clés dans les modèles (abondances chimiques). Tandis que le forward modelling cherche, dans des grilles de spectres synthétiques pré-compilés, le jeu de paramètres donnant le spectre le plus représentatif des observations. La fiabilité des résultats est alors limitée par les hypothèses utilisées pour générer les grilles (modèles de*

4. [kylebarbary.com/nestle/](http://kylebarbary.com/nestle/)

5. [johannesbuchner.github.io/PyMultiNest/](https://johannesbuchner.github.io/PyMultiNest/)

6. [dynesty.readthedocs.io/en/latest/](https://dynesty.readthedocs.io/en/latest/)

7. [johannesbuchner.github.io/UltraNest/index.html](https://johannesbuchner.github.io/UltraNest/index.html)

*nuages, dynamique de l'atmosphère, abondances chimiques, etc.). Dans la prochaine et dernière partie de cette introduction nous verrons les liens entre les paramètres atmosphériques et le mode de formation des objets sous-stellaires.*

## 1.6 Les atmosphères exoplanétaires comme traceurs de la formation?

L'un des principaux enjeux de la caractérisation atmosphérique des planètes est de trouver des contraintes sur leur formation. L'une des pistes envisagées concerne l'exploration des propriétés chimiques des atmosphères.

Un système stellaire est issu d'un nuage moléculaire instable. Lors de son effondrement une proto-étoile est créée ainsi qu'un disque en rotation autour de cette proto-étoile. Ces deux objets s'étant formés en même temps, ils sont supposés partager la même composition chimique (c'est à dire la composition du nuage moléculaire). Ce disque est amené à se refroidir et les lignes des glaces de ses composants migrent progressivement vers l'étoile, modifiant le profil radial et le profil vertical de ces abondances chimiques relatives des composants volatils en phases gazeuses ( $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{N}_2$  et  $\text{CH}_4$ ) et condensées. De plus, lors de sa formation, une planète peut être amenée à s'enrichir en éléments lourds en accréant de la matière solide du disque. L'érosion de son cœur solide ou sa dilution peut aussi participer à cet enrichissement, comme montré par les sondes Casini et JUNO sur Saturne et Jupiter (Liu et al., 2019).

La composition chimique des planètes formées dans les disques doit donc dépendre du lieu, de l'époque et du mécanisme de sa formation. Cependant, l'évolution des propriétés du disque (irradiation par l'étoile, inhomogénéités, fossés etc.), les migrations planétaires et les réactions qui peuvent altérer la matière accrétée par la planète, entre autres, apportent une complexité supplémentaire.

Depuis les premières observations de transits, on a pu détecter des éléments chimiques dans les atmosphères des planètes observées (principalement Na et K), d'abord via des observations spatiales avec Hubble (Charbonneau et al., 2002) puis au sol (Redfield et al., 2008). Depuis, une trentaine d'autres éléments ont pu être détectés dans les atmosphères de Jupiters et de Neptunes chauds, comme du Li (Chen et al., 2018), du Ti et du Fe (Hoeijmakers et al., 2018a), du C, du O et du Mg (Fossati et al., 2010; Vidal-Madjar et al., 2004), mais il est encore difficile de détecter des éléments dans l'atmosphère de super-Terres. Des molécules ont aussi été détectées, comme de l'eau (exemple : Deming et al. 2013), du HCN et du  $\text{NH}_3$  (MacDonald & Madhusudhan, 2017b) et du CO et  $\text{CH}_4$  dans les atmosphères de planètes imagées (exemple : Barman et al. 2015). Une liste exhaustive des détections chimiques est donnée dans la Table 1 de Madhusudhan (2019).

La métallicité (notée  $[\text{M}/\text{H}]$ ) est la mesure de toutes les abondances atomiques autres que l'hélium et l'hydrogène. Les découvertes de planètes présentant une sur-métallicité par rapport à leur étoile (par exemple, HD 149026b Sato et al. 2005; GJ436b Bean et al. 2006; HAT-P-11b Bakos et al. 2010) ont suggéré un lien entre cette métallicité et leur mode de formation. C'est d'abord le mécanisme d'accrétion de cœur qui est invoqué en raison de la formation d'un corps solide entraînant un enrichissement en éléments lourds dans la composition des planètes. Cette idée est renforcée par Boley (2009) qui montra que les modèles de formation par accrétion de cœur sont plus efficaces pour former des planètes lorsque la fraction de solide dans les disques proto-planétaires est grande. Mais les choses ne sont pas si simples. En effet, Boley et al. (2011) montrèrent que l'instabilité du disque peut aussi former des planètes sur-métalliques par des processus de capture de matériaux solides (planétésimaux, astéroïdes) avant la phase d'emballlement d'accrétion du gaz (Helled et al., 2006). En revanche, dans le cas d'une formation par fragmenta-

tion turbulente d'un nuage moléculaire, la métallicité est sensée être similaire entre la planète et son étoile hôte. Ainsi, la métallicité d'une planète n'est pas suffisante pour contraindre son mode de formation. Les abondances atomiques et moléculaires semblent être de bons candidats comme traceur de la formation.

La mesure des abondances des atomes et des molécules est compliquée, principalement à cause de la précision des instruments. Récemment, les modèles d'atmosphères ont cependant intégré des paramètres macroscopiques pouvant influencer la présence de ces éléments chimiques, comme l'irradiation de l'étoile, la métallicité, le rapport carbone-oxygène C/O, les abondances de carbone et d'oxygène par rapport aux abondances solaires C/H et O/H, ou encore des rapports isotopiques comme le D/H, ou le  $^{12}\text{CO}/^{13}\text{CO}$ .

### 1.6.1 Le rapport C/O comme diagnostique du lieu de formation ?

Une approche explorée pour relier le mode de formation aux abondances chimiques est de se demander quels éléments chimiques étaient disponibles dans le disque avant la formation de la planète. Les premiers modèles d'abondances chimiques dans les disques ont fait l'hypothèse d'un disque statique autour d'une étoile de type solaire et ont défini les lignes des glaces des espèces les plus abondantes, comme  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}_2$  ou  $\text{CO}$  situées à  $\sim 1, 10, 40$  ua, respectivement (Öberg et al., 2011). Ainsi, les phases gazeuses et solides de ces éléments sont définies selon leur position par rapport aux lignes des glaces. Par exemple, entre les lignes des glaces  $\text{H}_2\text{O}$  et  $\text{CO}_2$ , on trouvera de la glace d'eau mais le  $\text{CO}_2$  et le  $\text{CO}$  seront gazeux. La Figure 1.12 illustre l'abondance de carbone et d'oxygène ainsi que le rapport C/O en fonction de la distance à l'étoile.

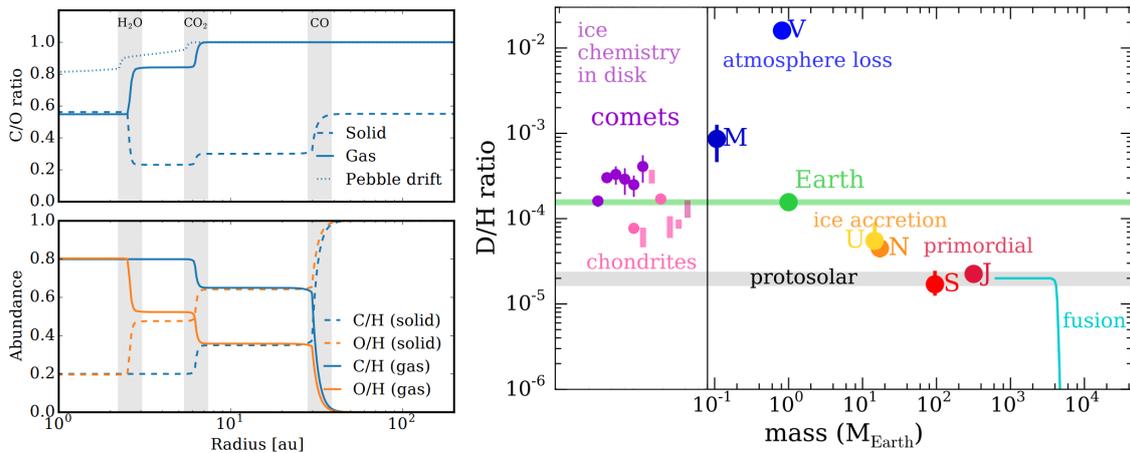


FIGURE 1.12 – En haut à gauche : Variation radiale du rapport C/O des gaz et des solides dans le disque. Les lignes des glaces de l'eau, du  $\text{CO}_2$  et du  $\text{CO}$  sont illustrées en gris. La ligne pointillée illustre l'augmentation du C/O due à la migration des galets. En bas à gauche : Abondances de carbone et de l'oxygène comparées aux valeurs solaires. Figure tirée de Madhusudhan (2019). À droite : Rapport D/H des objets du système solaire en fonction de leur masse. On voit que Saturne et Jupiter présentent une abondance de deutérium solaire, tandis que les autres objets sont enrichis en deutérium. Figure tirée de Morley et al. (2019)

Madhusudhan et al. (2011a) mesurèrent pour la première fois le rapport C/O de l'atmosphère d'une planète, le Jupiter chaud WASP-12b, en utilisant un code de *retrieval* sur sept points photométriques mesurés avec Spitzer. Ils estimèrent  $\text{C/O} \geq 1$ . Kreidberg et al. (2015) utilisèrent des spectres en transmission mesurés par Hubble pour contraindre le rapport C/O à  $0.5 \pm 0.3$  pour le même objet avec un autre code de *retrieval*. Cette différence illustre la complexité d'estimer ces rapports et l'importance du type de données utilisées. Les grilles de spectres synthétiques sont elles aussi utilisées pour estimer le C/O, comme par Konopacky et al. (2013) qui mesurèrent un

rapport C/O =  $0.65 \pm 0.10$  dans l'atmosphère de HR 8799 c en ajustant, par minimisation de  $\chi^2$ , leurs spectres OSIRIS et Keck II sur une de ces grilles (ces résultats sont rediscutés par Barman et al. 2015). Ces mesures de C/O furent généralisées à tout le système HR 8799 par Lavie et al. (2017) qui démontrèrent l'importance de la qualité de la bande K pour permettre une estimation propre du rapport C/O grâce aux signatures de CO présentes vers  $2.3 \mu\text{m}$ . Plus récemment, Gravity Collaboration et al. (2020) ont déterminé le rapport C/O de  $\beta$  Pic b en comparant l'approche *forward modelling* (minimisation de  $\chi^2$  avec les modèles Exo-REM) et *retrieval* (avec le code petitRADTRANS). Ils estimèrent un C/O =  $0.43 \pm 0.05$  avec les deux méthodes. Ils poussèrent l'analyse de ce rapport en couplant les profils d'abondances dans les disques (phases gazeuses et solides de H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub> ou CO par rapport aux lignes des glaces) avec des modèles simples d'accrétion de cœur et d'instabilité du disque pour explorer les différentes possibilités de formation (processus et localisation dans le disque) de  $\beta$  Pic b à la vue du rapport C/O estimé. Ils conclurent que le scénario de formation le plus probable était l'accrétion de cœur entre les lignes des glaces H<sub>2</sub>O et CO<sub>2</sub>. Nous avons étendu ce type d'analyse à l'exoplanète HIP 65426 b dans le Chapitre 3 de cette thèse. Après avoir estimé un rapport C/O < 0.55 avec la méthode du *forward modelling* (utilisation de l'algorithme *nested sampling* sur des grilles Exo-REM) et du *molecular mapping*, nous avons conclu que HIP 65426 b a pu être formé proche de son étoile ( $a < 10 \text{ ua}$ ), puis a migré à plus large séparation ( $a \sim 90 \text{ ua}$ ). Néanmoins, nos valeurs de C/O ne nous ont pas permis d'exclure une formation par instabilité de disque.

### 1.6.2 Les rapports d'isotopes comme futurs traceurs de formation.

Le deutérium est un isotope de l'hydrogène qui contient deux neutrons. Le rapport D/H est devenu un traceur important de la formation des planètes depuis les premières détections de CH<sub>3</sub>D dans l'atmosphère de Jupiter par Beer & Taylor (1973), puis pour les autres planètes du système solaire grâce à des observations dans l'infrarouge proche et moyen (Courtin et al. 1984, de Bergh et al. 1986, Feuchtgruber et al. 1999, Lellouch et al. 2001). Il est apparu que Jupiter et Saturne avaient des rapports D/H solaires, tandis que Uranus et Neptune étaient enrichies en deutérium d'un facteur  $\sim 2.5$  (voir la Figure 1.12 à droite). Cette différence fut interprétée par le rapport de masse entre le cœur solide formé par accrétion et le gaz capturé lors de la phase d'emballlement. Ce rapport est très faible pour Jupiter et Saturne. Celles-ci présentent une abondance de deutérium solaire, contrairement à Uranus et Neptune pour lesquelles cette abondance est sur-solaire, du à l'accrétion de glaces. Les planètes telluriques et les petits corps du système solaire sont aussi fortement enrichis en deutérium.

La détermination du rapport D/H dans l'atmosphère des exoplanètes est aujourd'hui limitée par l'instrumentation. En effet, la bande moléculaire du CH<sub>3</sub>D est observable entre 4 et 5  $\mu\text{m}$ , à une résolution minimum de  $R \sim 1000$  (Morley et al., 2019), tandis que le HDO (autre traceur du deutérium) est détectable vers 3.7  $\mu\text{m}$ , rendant compliquées les observations depuis le sol. De plus, la détection de ces raies semble favorisée pour des planètes froides ( $T_{\text{eff}} < 1000 \text{ K}$ ). Mollière & Snellen (2019) ont néanmoins prédit que le HDO dans l'atmosphère de planètes comme Proxima b pourra être détecté par ELT/METIS et que la détection de CH<sub>3</sub>D sera possible par le JWST et l'ELT (pour des planètes à des  $T_{\text{eff}} < 600 \text{ K}$ ).

D'autres rapports d'isotopes sont aussi considérés, comme le rapport  $^{12}\text{CO}/^{13}\text{CO}$ , qui semble présenter des différences entre les exoplanètes et les naines brunes isolées (Zhang et al., 2021a). Néanmoins, ces études restent encore très préliminaires et l'arrivée des nouveaux instruments de l'ELT et du JWST permettra d'approfondir cette approche.

## 1.7 Apport du travail de thèse

La détection des compagnons planétaires et l'étude de leur propriétés atmosphériques est un domaine de recherche relativement récent mais non moins dynamique et en constante évolution (découvertes d'objets à étudier, mises au point de nouveaux modèles, explorations de nouvelles techniques d'analyse de données de pointes, ou développement d'instruments toujours plus performants). C'est dans ce contexte que se place ma thèse.

Une partie de ce travail est consacrée à la caractérisation de l'atmosphère d'objets de masse sous-stellaire par comparaison avec des modèles d'atmosphères. Dans ce sens, j'ai été amené à développer un nouveau code de *forward modelling*, ForMoSA, fondé sur l'algorithme du *nested sampling*. Ce code est présenté dans le Chapitre 2, ainsi qu'une application sur une librairie de neuf jeunes naines brunes de faible masse. Je profiterai de ce chapitre pour décrire l'instrument X-Shooter, qui a été utilisé, ainsi qu'une routine d'extraction que j'ai développée pour optimiser la qualité des spectres obtenus. Cette étude nous a permis d'apporter des pistes pour expliquer le mode de formation des objets de notre échantillon et a ouvert des perspectives concernant la caractérisation d'atmosphères d'objets plus froids.

Le Chapitre 3 explorera la nouvelle méthode du *molecular mapping*, qui exploite l'information spatiale et spectrale permise par les spectrographes à intégrale de champ, pour détecter et caractériser des compagnons de masse planétaire. J'ai été en charge d'adapter le nouveau code TExTRIS à la caractérisation atmosphérique en le couplant à des grilles de spectres synthétiques pré-compilées. Après avoir décrit l'instrument SINFONI, utilisé pour ce travail, la méthode du *molecular mapping* et le code, je présenterai une application sur le système HIP 65426. Cette étude a montré le potentiel du *molecular mapping* pour contraindre les abondances atmosphériques de ces objets. Elle a aussi posée de nombreuses questions concernant les limites de la méthode et les perspectives à envisager avec l'arrivée de nouveaux instruments dans les prochaines années.

Je présentai finalement, dans le Chapitre 4, les résultats préliminaires de l'analyse d'une librairie de trente-huit analogues planétaires couvrant de larges gammes d'âges, de températures effectives et de types spectraux. Ce travail, toujours en cours, vise, entre autres, à sonder les abondances chimiques (rapport C/O, métallicité) dans l'atmosphère de ces objets, grâce à l'utilisation des dernières générations de modèles d'atmosphères, afin d'en dégager des tendances, utiles à la contrainte de leur mode de formation.



# 2

## Caractérisation atmosphérique des objets sous-stellaires jeunes

---

*Dans le chapitre précédent, nous avons énoncé le besoin de répondre aux questions relatives à la formation et à l'évolution des exoplanètes. Il est possible que l'atmosphère contienne des marqueurs des modes de formation des objets. Dans ce contexte, la population des naines brunes jeunes de masse planétaire constitue un laboratoire idéal pour explorer ces perspectives et servir de référence comparative à l'étude des exoplanètes jeunes.*

*Dans ce chapitre, je commencerai par décrire l'instrument X-Shooter (principale source de données de cette thèse) ainsi que le traitement des données brutes en données exploitables. Je présenterai ensuite l'outil ForMoSA que j'ai développé et utilisé pour caractériser les atmosphères sous-stellaires. Je détaillerai enfin une application concrète de ce code sur une population de naines brunes jeunes et chaudes.*

---

---

## Sommaire

---

<b>2.1</b>	<b>Acquisition des spectres X-Shooter</b>	<b>43</b>
2.1.1	Description de l'instrument	43
2.1.2	La routine de réduction de données ESOreflex	44
2.1.3	Développement d'une routine d'extraction adaptée aux objets ponctuels faibles	46
<b>2.2</b>	<b>Le code ForMoSA : <u>F</u>orward <u>M</u>odeling for <u>S</u>pectral <u>A</u>nalysis</b>	<b>49</b>
2.2.1	Pourquoi ForMoSA?	49
2.2.2	Tri des spectres synthétiques non-convergés	50
2.2.3	Pre-processing : manipulation des grilles et des données	50
2.2.4	Processing : le <i>nested sampling</i>	52
2.2.5	Options et paramètres du <i>nested sampling</i>	53
2.2.6	Processing : La partie <i>retrieval</i> de ForMoSA	55
2.2.7	Post-processing : Résultats et figures	56
<b>2.3</b>	<b>Première application : La librairie UpperSco</b>	<b>56</b>
2.3.1	Contexte de l'étude	56
2.3.2	Caractérisation d'un échantillon de naines brunes jeunes	56
2.3.3	Méthode appliquée	58
2.3.4	Publication de l'étude	59
<b>2.4</b>	<b>Discussion &amp; perspectives</b>	<b>81</b>
2.4.1	Défis liés à la caractérisation des atmosphères sous-stellaires jeunes	81
2.4.2	Des marqueurs d'accrétion dans l'atmosphère des naines brunes jeunes	81

---

## 2.1 Acquisition des spectres X-Shooter

### 2.1.1 Description de l'instrument

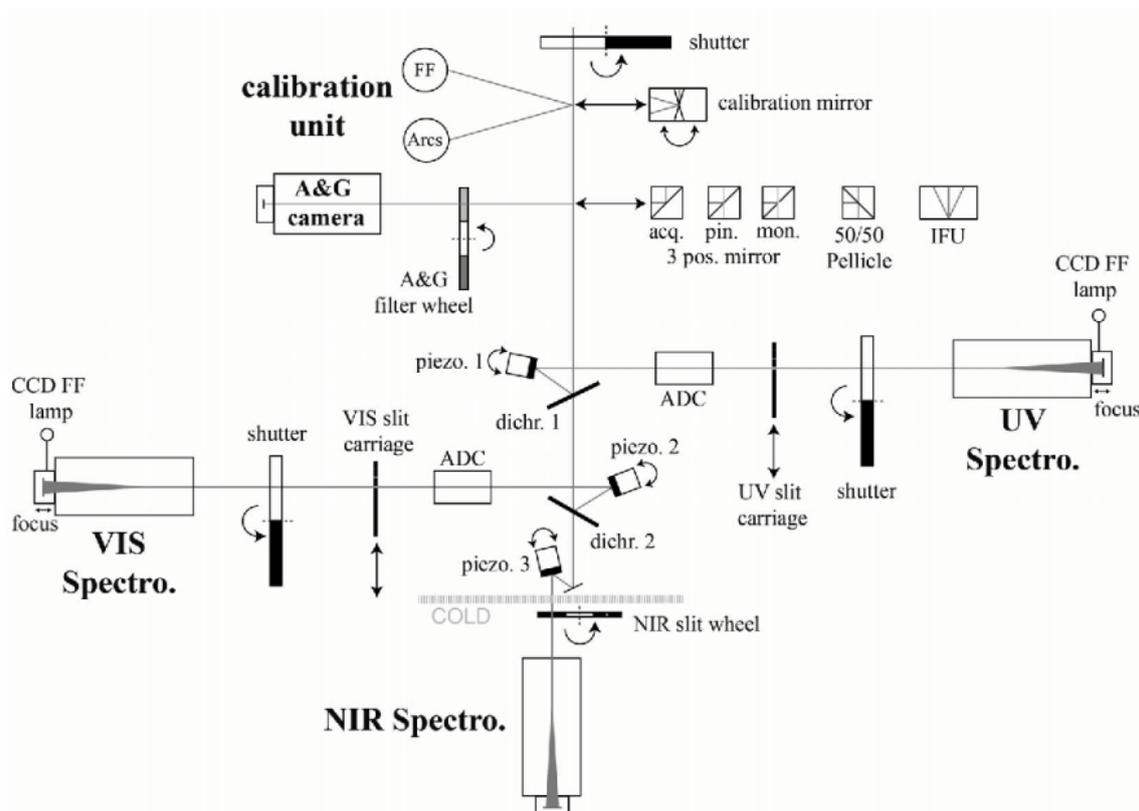


FIGURE 2.1 – Schéma des différents éléments de X-Shooter et du chemin optique. Cette figure est tirée du manuel de X-Shooter<sup>1</sup>.

X-Shooter est le premier instrument de seconde génération installé au foyer Cassegrain de l'UT3 du VLT (déplacé ensuite au foyer Cassegrain de l'UT2). Il est le fruit d'une collaboration de l'ESO regroupant des équipes danoises, françaises, italiennes et hollandaises. C'est un spectrographe à échelle permettant en une seule exposition d'obtenir un spectre à moyenne résolution ( $R \sim 3000-12000$ ) entre  $0.3$  et  $2.5 \mu\text{m}$  grâce à trois bras observant indépendamment dans l'ultraviolet et le bleu (UVB), le visible (VIS) et le proche infrarouge (NIR).

Le chemin que doit parcourir la lumière avant d'atteindre les détecteurs est composé d'une série de sous-systèmes optiques. La Figure 2.1 illustre ces différents sous-systèmes.

- L'unité de calibration qui consiste en une structure mécanique contenant des lampes de calibration, une sphère d'intégration, des relais optiques et un miroir à trois positions qui pilote la source de lumière à détecter (calibrations ou science). Cette unité est utilisée pour calibrer en longueurs d'ondes les détecteurs et mesurer l'homogénéité du détecteur ("flatfield").
- L'unité d'acquisition et de guidage qui dirige le flux lumineux soit vers les détecteurs, soit vers une caméra dont le rôle est de centrer la source à observer avec une précision  $< 0.1''$ .
- L'unité à intégrale de champ (IFU) qui redimensionne le champ de vue initial ( $4'' \times 1.8''$ ) en un champ de vue allongé ( $12'' \times 0.6''$ ) puis transmet directement le flux lumineux aux

1. [www.eso.org/sci/facilities/paranal/instruments/X-Shooter/doc/VLT-MAN-ESO-14650-4942\\_P105v1.pdf](http://www.eso.org/sci/facilities/paranal/instruments/X-Shooter/doc/VLT-MAN-ESO-14650-4942_P105v1.pdf)

spectrographes (si le mode "IFU" est utilisé).

- La boîte dichroïque (si le mode spectroscopie "SLIT" est utilisé) qui sépare le flux lumineux vers les trois différents bras à l'aide de deux séparatrices à haute efficacité (perte de flux lumineux  $<5\%$ ).
- Les miroirs de compensation qui maintiennent l'alignement des faisceaux lumineux dans les différents bras (précision  $<0.02''$ ) et qui compensent d'éventuels décalages dus à la différence de diffraction atmosphérique du télescope et celle dans l'instrument.
- Les réducteurs focaux qui assurent un front lumineux plat sur les détecteurs et les Correcteurs de Dispersion Atmosphériques (ADCs) qui compensent la dispersion atmosphérique pour limiter les pertes de flux à travers la fente utilisée pour la dispersion sur le détecteur (ils permettent aussi d'orienter la fente selon une direction choisie sur le ciel). Notons que le bras NIR n'est pas équipé d'ADC car la compensation de la dispersion atmosphérique est assurée par le miroir de compensation qui est calibré pour la compenser à  $1.310 \mu\text{m}$ , soit le centre de la gamme de longueurs d'ondes couverte par le bras NIR.

Une fois le faisceau lumineux guidé jusqu'aux spectrographes, il est dispersé à travers une fente puis, avec un jeu de miroirs sphériques, sa dispersion est accentuée puis collimatée avant d'atteindre une caméra. Le design de ces éléments n'est pas exactement le même pour les bras UVB, VIS et NIR, mais ces différences ne seront pas détaillées ici. Notons cependant que les caméras des bras UVB et VIS sont refroidies à une température de 153 K et 135 K respectivement, tandis que le bras NIR est totalement cryogénisé à une température de 79 K pour éviter des contaminations sur le détecteur dues à l'émission thermique. Grâce à la mise à disposition de plusieurs largeurs de fentes pour chaque bras, l'utilisateur a le choix entre plusieurs résolutions spectrales. La liste des fentes et les propriétés spectrales associées sont résumées dans la Figure 2.2.

UVB			VIS			NIR		
Slit width	R $\lambda/\Delta\lambda$	Sampling [pix/FWHM]	Slit width	R $\lambda/\Delta\lambda$	Sampling [pix/FWHM]	Slit width	R $\lambda/\Delta\lambda$	Sampling [pix/FWHM]
0.5	9700	3.1	0.4	18400	2.5	0.4	11600	1.6
0.8	6700	5.0	0.7	11400	4.4	0.6	8100	2.5
1.0	5400	6.2	0.9	8900	5.7	0.9	5600	2.5
1.3	4100	8.1	1.2	6500	7.6	1.2	4300	4.8
1.6	3200	9.9	1.5	5000	9.5			
IFU	8600	3.9	IFU	13500	3.7	IFU	8300	2.4

FIGURE 2.2 – Configurations possibles des fentes de dispersion proposées par l'instrument X-Shooter. La résolution spectrale est assurée par le choix de la largeur de fente pour chaque bras. Cette table est tirée du manuel de X-Shooter.

L'observation obtenue prend la forme d'une image 2D composée de plusieurs bandes incurvées appelées "ordres", dans lesquelles se trouve l'information spectrale.

### 2.1.2 La routine de réduction de données ESOREFLEX

Pour faciliter la réduction des données, l'ESO a développé une chaîne de réduction de données automatisée pour chacun des instruments à disposition. Cette routine, ESOREFLEX<sup>2</sup>, permet d'obtenir un spectre, calibré en flux, après plusieurs étapes. Elle est développée et améliorée tous les ans et comporte un grand nombre d'options et de tests de qualité. Seules la philosophie générale de la routine et ses principales étapes sont décrites ici.

2. [www.eso.org/sci/software/esoreflex](http://www.eso.org/sci/software/esoreflex)

### Soustraction du biais et du courant d'obscurité

La première étape est de supprimer le biais (signal de lecture du capteur lors du transfert de l'image) et le courant d'obscurité (signal thermique dû à l'échauffement du capteur). Pour cela, une acquisition de "dark" est faite en masquant l'entrée des caméras. Un algorithme de  $\kappa$ -sigma est appliqué sur cette acquisition. Il consiste en une série d'itérations lors desquelles la moyenne et l'écart-type des données sont calculés et les pixels avec une valeur non-comprise dans  $moyenne \pm \kappa \times deviation\ standard$  sont rejetés ( $\kappa$  étant un paramètre de sélection défini par l'utilisateur). L'algorithme s'arrête après un certain nombre d'itérations, ou lorsque la valeur de la moyenne calculée ne varie plus. Cela permet de s'affranchir d'éventuels mauvais pixels lors du calcul de la moyenne. Une fois la moyenne de cette acquisition calculée, elle est soustraite aux données. Notons que les pixels déviants sont identifiés à partir de cette acquisition à l'aide de l'algorithme  $\kappa$ -sigma, où  $\kappa=3$ . Cette mesure du biais et du courant d'obscurité est faite tous les jours.

### Détermination du bruit du détecteur

L'incertitude  $\sigma_i$  pour chaque pixel  $i$  est donnée par :

$$\sigma_i = \sqrt{\sigma_0^2 + \frac{D_i}{G}} \quad (2.1)$$

où  $D_i$  est la valeur du pixel de l'acquisition,  $\sigma_0$  est le bruit de lecture du détecteur et  $G$  son gain (données constructeur).

### Identification des différents ordres

En illuminant les détecteurs avec une lampe ThAr, il est possible d'avoir une première estimation de la position des ordres sur le détecteur en découpant l'image obtenue en sous-images carrées (taille définie par l'utilisateur). Dans chacune de ces sous-images, le pixel le plus lumineux est identifié (raie spectrale). Plusieurs découpages sont effectués pour raffiner la position des ordres. Finalement, un polynôme est ajusté sur ces raies pour obtenir une valeur de longueur d'onde et de numéro d'ordre à chaque position  $[X, Y]$  du détecteur. Chaque ordre est ensuite découpé puis corrigé de sa courbure grâce aux paramètres de ce polynôme.

La calibration en longueur d'onde est assurée par des lampes de calibrations (ThAr, Ar, Hg, Ne et Xe) et permet une précision de  $2 \text{ km.s}^{-1}$  ( $7.10^{-6} \mu\text{m}$  à  $1 \mu\text{m}$ ). Cette calibration est effectuée tous les deux jours.

### Correction du "flat"

La mesure du "flat" permet de corriger les données de la réponse du détecteur en mesurant les variations d'intensité pixel à pixel. Des lampes halogène et deutérium sont utilisées pour illuminer le détecteur. Les acquisitions de "flat" sont corrigées du biais et du courant d'obscurité, puis normalisées par leur exposition pour avoir une carte de réponse pixel à pixel qui est divisée aux données. L'acquisition du "flat" est faite tous les trois jours.

### Soustraction du ciel

La stratégie d'observation ABBA consiste à centrer la fente sur l'objet ( $A_1$ ), puis à la décaler sur le ciel de chaque côté de l'objet ( $B_1$  et  $B_2$ ) et enfin à la recentrer sur l'objet ( $A_2$ ). En calculant  $(A_1 - B_1 + A_2 - B_2)/2$  on peut soustraire le ciel aux données.

## Extraction du spectre 1D

À cette étape, les données sont sous la forme d'une trace 2D calibrée en longueur d'onde, soustraite du ciel et corrigée du biais, du courant d'obscurité et des variations pixel à pixel.

Un spectre 1D est extrait de cette trace. Chaque "colonne de pixels" (direction de la fente) de chaque ordre est ajustée par une loi Gaussienne. La position et la largeur équivalente de ces Gaussiennes peuvent varier avec la longueur d'onde, elles sont ainsi ajustées par des polynômes dont les paramètres sont déterminés par la longueur d'onde (ordre sur le détecteur). Le flux lumineux est calculé comme l'intégrale de cette Gaussienne sur la colonne de pixels. Le spectre 1D ainsi que la trace 2D sont formés en joignant chaque ordre, puis sont calibrés en flux en utilisant une acquisition dédiée, généralement d'une étoile standard dont la luminosité est connue, effectuée avant ou après l'observation de l'objet et dans les mêmes conditions (temps d'intégration, choix de la fente, etc.).

### 2.1.3 Développement d'une routine d'extraction adaptée aux objets ponctuels faibles

Lors de l'extraction des spectres de la librairie X-Shyne, il est apparu qu'un grand nombre de mauvais pixels n'étaient pas filtrés par la routine ESOflex. J'ai donc développé une routine d'extraction pour améliorer la qualité de l'extraction des spectres à partir de la trace 2D générée par ESOflex. Cet algorithme peut être décomposé en plusieurs étapes.

#### Identification des mauvais pixels

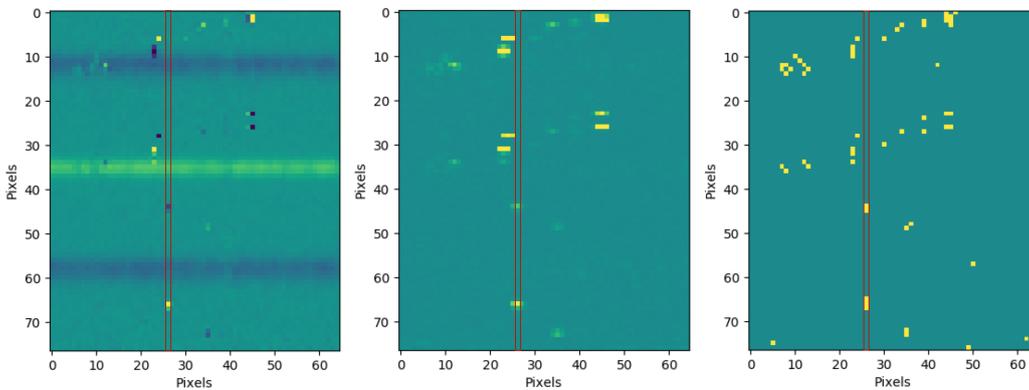


FIGURE 2.3 – Exemple d'identification des mauvais pixels dans une portion de la trace 2D fournie par ESOflex. À gauche : La trace de départ. Au centre : La carte de variation pixel à pixel. À droite : La carte de mauvais pixels. La colonne rouge servira d'exemple pour la Figure 2.4.

En utilisant le sur-échantillonnage de X-Shooter selon l'axe des longueurs d'ondes, il est possible de générer une carte de variations de flux pixel à pixel avec la formule :

$$C_{var} = \frac{(T_{i+1} - T_i) + (T_i - T_{i-1})}{2} = \frac{T_{i+1} - T_{i-1}}{2} \quad (2.2)$$

où  $C_{var}$  est cette carte de variations (Figure 2.3, au centre),  $T_i$  la trace 2D issue de ESOflex (Figure 2.3, à gauche),  $T_{i-1}$  cette trace décalée d'un pixel vers la gauche et  $T_{i+1}$  décalée d'un pixel vers la droite. L'échantillonnage de X-Shooter étant supérieur à Nyquist, les traces  $T_{i+1}$  et  $T_{i-1}$  sont quasiment identiques aux mauvais pixels près. À partir de  $C_{var}$ , les pixels déviants sont identifiés à l'aide d'une méthode  $\kappa$ -sigma (Figure 2.3, à droite).

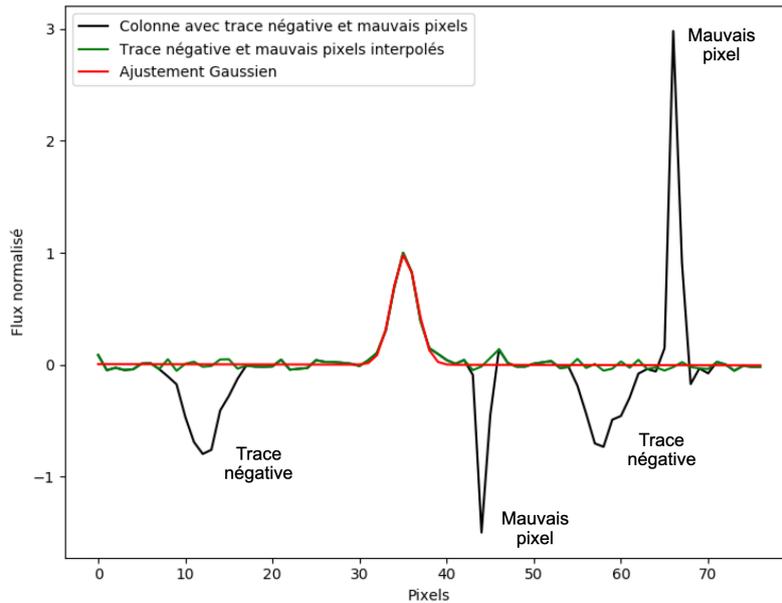


FIGURE 2.4 – Avant d’intégrer le flux de la trace de science, les mauvais pixels et les traces négatives sont interpolés. Puis une loi Gaussienne est ajustée sur les données. Ces étapes sont répétées pour chaque colonne de pixels de la trace.

### Correction des mauvais pixels et extraction du flux

Pour extraire le spectre 1D depuis la trace 2D, les mauvais pixels de la trace 2D sont identifiés puis réinterpolés pour chaque colonne de pixels (Figure 2.4). L’approche ABBA a pour conséquence l’apparition d’une trace négative dans les traces 2D (visible sur la Figure 2.3 à gauche). Ces traces négatives sont elles aussi ré-interpolées. Puis, pour extraire le flux lumineux, une loi Gaussienne est ajustée et intégrée pour chaque colonne de pixels (idem pour la routine ESOreflex). Notons qu’une base linéaire est ajoutée à cette loi Gaussienne pour prendre en compte un éventuel biais entre la zone de science sur le détecteur et celle du ciel.

### Correction de la trace et extraction spectrale

Lors de l’extraction du spectre, des variations de la position et de l’écart-type des lois Gaussiennes ajustées ont été détectées, en particulier pour le bras NIR. L’amplitude de ces variations en fonction de la longueur d’onde correspond aux limites des différents ordres du détecteur, elles peuvent être expliquées par une mauvaise correction de la courbure de ces ordres. La routine ESOreflex corrige cela par des ajustements polynomiaux. Nous avons cependant choisi d’adopter une extraction en trois temps. Lors d’une première extraction, chaque paramètre de la loi Gaussienne est laissé libre. Puis la résolution de la courbe de positions de ces Gaussiennes en fonction de la longueur d’onde est réduite (courbe rouge sur la Figure 2.5 en haut) afin d’estimer ces variations. Cette courbe est utilisée pour fixer la position des Gaussiennes lors d’une deuxième extraction du spectre. De la même façon, la résolution de la courbe d’écart-type des Gaussiennes est réduite (courbe rouge sur la Figure 2.5 au milieu). Une troisième extraction est effectuée en fixant la position et l’écart type des Gaussiennes. Lors de cette dernière extraction, des résidus sont calculés en soustrayant la Gaussienne ajustée aux données, puis l’erreur sur chaque point est calculé en intégrant une loi Gaussienne de position et d’écart-type identiques à l’ajustement, mais avec une amplitude égale à la déviation standard des résidus. Notons que la conversion pixel-longueur d’onde est assurée par une calibration grâce aux lampes de calibration de l’instrument.

La plupart des mauvais pixels conservés lors de l’extraction par ESOreflex sont corrigés via cette routine (voir la Figure 2.5 en bas). Une dernière vérification visuelle est faite pour chaque

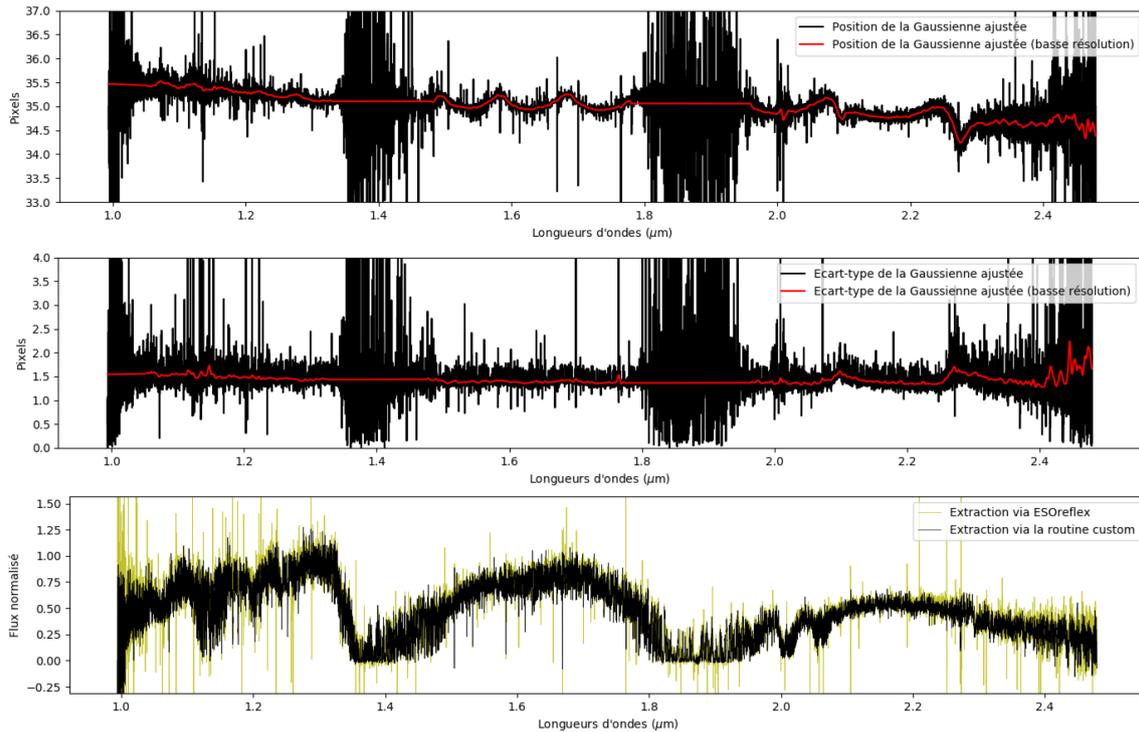


FIGURE 2.5 – En haut : Illustration des variations à basse résolution de la position des lois Gaussiennes utilisées pour extraire le flux de la trace. Au milieu : Illustration des variations à basse résolution de l'écart-type. En bas : Comparaison entre le spectre extrait par ESoreflex et celui extrait par cette routine.

spectre pendant laquelle les mauvais pixels résiduels sont identifiés et ré-interpolés.

### Correction des telluriques et de la vitesse barycentrique

Lors de leur passage dans l'atmosphère, les photons interagissent avec les éléments chimiques la composant, en particulier l'eau, créant ainsi des absorptions que l'on souhaite corriger pour ne capter que l'information spectrale de la source à étudier. Nous avons choisi d'utiliser la routine Molecfit (Smette et al., 2015) pour supprimer ces absorptions telluriques. Cette routine combine un code de transfert radiatif, une base de données de raies moléculaires et des profils atmosphériques pour modéliser la fonction d'étalement de points de l'instrument. Les profils atmosphériques sont calculés en tenant compte de la position de l'observatoire (climat, altitude, etc.), ainsi que des conditions météorologiques lors de l'observation (humidité, couverture nuageuse, etc.) et de la position de la source dans le ciel pour estimer l'épaisseur de la couche atmosphérique traversée par les photons. L'effet de cette correction des telluriques est visible entre le spectre montré en bas de la Figure 2.5 et le spectre final en bas de la Figure 2.6. La vitesse barycentrique de la source est aussi corrigée grâce aux fonctions `PyAstronomy.pyasl.baryvel` et `PyAstronomy.pyasl.baryCorr` qui calculent la vitesse héliobarycentrique de la Terre et la projettent dans la direction de l'observation, puis avec la fonction `PyAstronomy.pyasl.helcorr` qui combine cette vitesse à la rotation de la Terre pour corriger le spectre (effet Doppler)<sup>3</sup>.

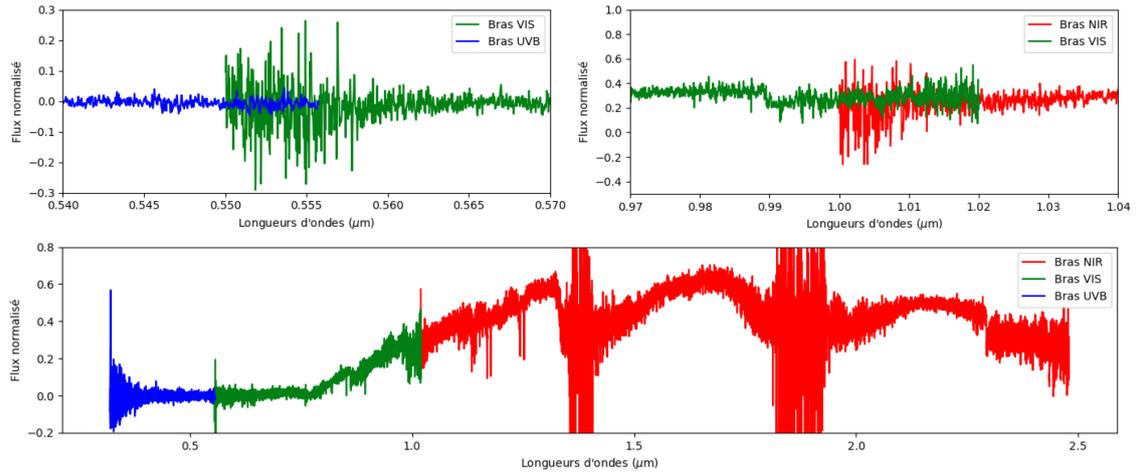


FIGURE 2.6 – Illustration de l'assemblage des spectres des différents bras (en bas) en utilisant le chevauchement local entre deux bras successifs (en haut).

### Assemblage des différents bras et calibration

La dernière étape de cette routine de réduction consiste à former le spectre de la source observée sur l'intégralité de la gamme spectrale permise par X-Shooter, en assemblant les spectres issus des trois différents bras.

Une recalibration est d'abord effectuée en utilisant des mesures de magnitudes en bande K disponibles dans la littérature. Cette étape permet de s'assurer d'éviter d'éventuels problèmes lors de la calibration par la routine ESOREflex. Puis le spectre du bras VIS est calibré sur celui du bras NIR en utilisant leur chevauchement en longueurs d'ondes entre  $1.00\ \mu\text{m}$  et  $1.02\ \mu\text{m}$  (un ajustement des médianes de chaque bras dans cet intervalle est effectué). Cette opération est répétée entre les bras UVB et VIS qui se chevauchent entre  $0.550\ \mu\text{m}$  et  $0.555\ \mu\text{m}$ . La Figure 2.6 montre ces chevauchements et le spectre assemblé final. On voit qu'au bord des spectres, des mauvais pixels n'ont pas été corrigés. Ils sont réinterpolés lors d'une ultime étape de vérification du spectre.

*Les performances d'observation de X-Shooter nous permettent d'obtenir en une seule observation des spectres à moyenne résolution entre  $0.3\ \mu\text{m}$  et  $2.5\ \mu\text{m}$ . Ces spectres sont d'abord réduits par la routine ESOREflex, extraits par une routine développée pendant cette thèse, corrigés des absorptions telluriques et recalibrés. Nous allons maintenant aborder l'outil principal que j'ai développé et utilisé pour extraire les propriétés atmosphériques des sources observées à partir de leur spectre.*

## 2.2 Le code ForMoSA : Forward Modeling for Spectral Analysis

### 2.2.1 Pourquoi ForMoSA ?

Comme nous l'avons vu dans la Section 1.5, il existe deux approches pour comparer des modèles aux données spectrophotométriques recueillies sur les exoplanètes : le *retrieval* et le *forward modelling*. Pour ces deux méthodes, plusieurs stratégies d'exploration de l'espace des paramètres sont utilisées (le MCMC et le *nested sampling* étant les plus courants). Bien qu'il existe plu-

3. [pyastronomy.readthedocs.io/en/latest/pyaslDoc/aslDoc/baryvel.html](http://pyastronomy.readthedocs.io/en/latest/pyaslDoc/aslDoc/baryvel.html)

siieurs codes de *retrieval*, les codes de *forward modelling* sont quant à eux bien moins nombreux et utilisent généralement le MCMC. ForMoSA est donc né du besoin de combler ce manque en développant notre propre code de *forward modelling* fondé sur la méthode du *nested sampling*.

ForMoSA a été développé en Python3 et sera très prochainement disponible à la communauté, via la plate-forme `github`. Le code peut être décomposé en trois blocs successifs : le tri des potentiels spectres déviants dans les grilles de modèles, la manipulation de ces grilles et des observations pour permettre leur comparaison et l'application du *nested sampling*.

### 2.2.2 Tri des spectres synthétiques non-convergés

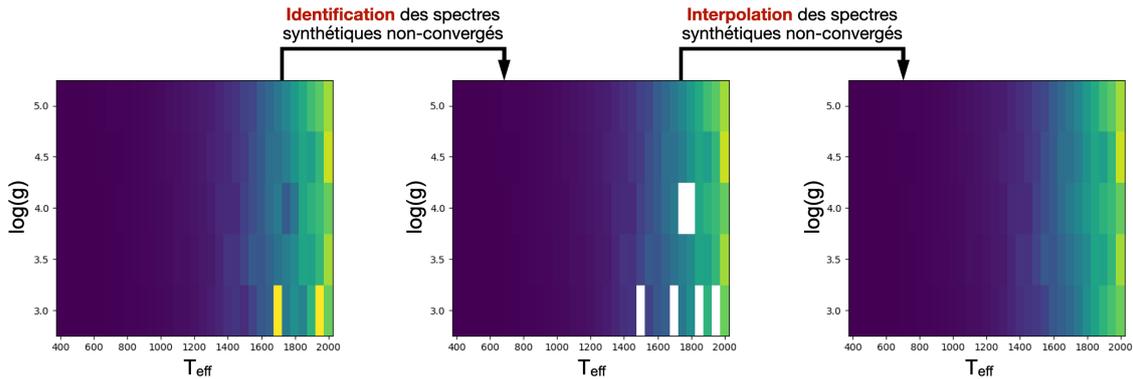


FIGURE 2.7 – Illustration du tri et de l'interpolation des grilles de modèle. La valeur représentée ici est le flux intégré des spectres synthétiques Exo-REM pour des spectres de métallicité  $[M/H]=0.0$  et  $C/O=0.15$ . À gauche : La grille présente des inhomogénéités en flux intégré. Au centre : Les spectres déviants sont identifiés et supprimés de la grille. À droite : Les spectres déviants et les trous dans la grille sont interpolés.

Les spectres synthétiques des grilles sont générés indépendamment avec, pour chacun, un jeu de paramètres différent. Dans les centaines (voir milliers) de spectres qui composent une grille, il est possible que le calcul d'un certain nombre n'ait pas convergé, injectant des spectres déviants dans la grille. Ces spectres peuvent ensuite fournir une information fautive, utilisée pour les interpolations nécessaires lors de l'exploration de l'espace des paramètres, et ainsi biaiser leur estimation. La vérification de l'homogénéité des grilles est donc une étape cruciale avant de les utiliser. Cette vérification a été faite en utilisant deux critères de réjection différents : le flux intégré et la pente spectrale dans le proche infrarouge. Pour chaque grille, une inspection visuelle a été faite et chaque spectre présentant une déviance en flux intégré ou pente spectrale a été retiré de la grille (voir la Figure 2.7, à gauche et au centre).

### 2.2.3 Pre-processing : manipulation des grilles et des données

Les grilles de spectres synthétiques fournies par les équipes de développeurs sont des grilles génériques pouvant être utilisées pour tout jeu de données, spectroscopiques ou photométriques (dans la limite de leur couverture en longueurs d'ondes). Le premier bloc de ForMoSA consiste donc à rendre ces spectres synthétiques comparables aux observations. Cela nécessite plusieurs étapes.

#### Extraction des données observées

En premier lieu, le fichier contenant les données est lu et les informations qu'il contient sont stockées. On y trouve les informations spectrales composées de la couverture en longueurs d'ondes ( $\mu\text{m}$ ), le flux calibré (en  $\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\mu\text{m}^{-1}$ ) et les erreurs de flux associées (en  $\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\mu\text{m}^{-1}$ ). Une

variable de sélection est donnée pour chaque point du spectre (si cette valeur = 1, le point est extrait, il ne l'est pas pour une valeur = 0). La résolution du spectre observé ainsi que l'instrument utilisé sont renseignés pour chaque point du spectre afin de pouvoir combiner des données issues de différents programmes. Il est aussi possible d'utiliser des points photométriques, pour cela le nom du filtre photométrique correspondant doit être donné à la place du nom de l'instrument.

### Réduction possible de la résolution spectrale des données observées

Il se peut que les spectres synthétiques présents dans les grilles soient à plus basse résolution spectrale que les données. Dans ce cas, il est nécessaire de réduire la résolution des données. Pour des raisons d'optimisation de temps de calcul, les spectres synthétiques sont généralement générés échantillonnés à Nyquist, ce qui permet de minimiser le nombre de points dans le spectre tout en gardant l'information spectrale. Pour comparer la résolution des spectres synthétiques à celle des observations, il suffit de comparer  $R_{obs}$  connu avec  $R_{synt}$  :

$$R_{synt} = \frac{\lambda_i}{2(\lambda_i - \lambda_{i-1})} \quad (2.3)$$

où  $\lambda_i$  est la longueur d'onde à laquelle on souhaite réduire la résolution et  $\lambda_{i-1}$  la longueur d'onde précédente. Pour avoir cette information, l'échantillonnage en longueurs d'onde d'un spectre synthétique de la grille est extrait.

Dans le cas où  $R_{obs} \leq R_{synt}$ , la résolution spectrale des données n'est pas réduite, sinon une convolution par une loi Gaussienne est appliquée. L'écart-type  $\sigma_{conv}$  de cette Gaussienne est calculée par :

$$\begin{aligned} \sigma_{conv} &= \frac{FWHM_{conv}}{2.355} = \frac{\sqrt{FWHM_{synt}^2 - FWHM_{obs}^2}}{2.355} \\ &= \frac{\sqrt{(2 \cdot (\lambda_i - \lambda_{i-1}))^2 - (\frac{\lambda_i}{R_{obs}})^2}}{2.355} \end{aligned} \quad (2.4)$$

où  $FWHM_{conv}$ ,  $FWHM_{synt}$  et  $FWHM_{obs}$  sont les largeurs à mi-hauteur de la Gaussienne utilisée pour la convolution, d'une Gaussienne correspondant à la résolution des spectres synthétiques et d'une Gaussienne correspondant à la résolution des observations, respectivement.

Ce procédé permet de garder le maximum d'informations spectrales, en réduisant la résolution des données au maximum de résolution entre les données et les spectres synthétiques. Notons qu'il est également possible de réduire la résolution des observations à une valeur arbitraire  $R_{target}$ , la formule précédente devient alors

$$\begin{aligned} \sigma_{conv} &= \frac{FWHM_{conv}}{2.355} = \frac{\sqrt{FWHM_{target}^2 - FWHM_{obs}^2}}{2.355} = \frac{\sqrt{(\frac{\lambda_i}{R_{target}})^2 - (\frac{\lambda_i}{R_{obs}})^2}}{2.355} \\ &= \frac{\lambda_i \sqrt{(\frac{1}{R_{target}})^2 - (\frac{1}{R_{obs}})^2}}{2.355} \end{aligned} \quad (2.5)$$

Le nombre de points des spectres observés et synthétiques peut avoir un grand impact sur le temps de calcul des prochaines étapes du code (interpolation, calcul de la vraisemblance, etc.). ForMoSA propose donc une option permettant de le réduire en choisissant de réinterpoler le spectre observé sur un échantillonnage en longueur d'onde de Nyquist.

### Extraction des spectres synthétiques

Les grilles de modèles utilisées en entrée par ForMoSA sont fournies au format standardisé NetCDF4 par le biais d'un module `xarray`<sup>4</sup>, hérité et maintenu par la communauté des météorologues et géophysiciens et permet la labélisation de grilles à N dimensions, ainsi que des opérations parallélisables sur ces grilles (interpolations et extrapolations, calculs arithmétiques). Chaque spectre de la grille initiale qui n'a pas été rejeté par le test de convergence est extrait. Sa résolution spectrale est réduite de la même façon que pour les données. Les points photométriques extraits des données sont calculés pour les modèles en utilisant les filtres appropriés.

### Normalisation et soustraction du continuum

ForMoSA permet en option de normaliser et/ou soustraire le continuum des données et des spectres synthétiques, ce qui permet de s'affranchir d'éventuels problèmes de reproduction des spectres à basse résolution de la part des modèles.

Pour la normalisation, le flux du spectre à normaliser est intégré à travers un filtre choisi par l'utilisateur<sup>5</sup>, puis l'ensemble de ce spectre est divisé par ce flux intégré. Dans le cas où le spectre observé est déjà normalisé, il est nécessaire de le re-normaliser selon cette méthode pour assurer une homogénéité avec les spectres synthétiques.

Pour soustraire le continuum, une version basse-résolution du spectre à traiter est calculée selon la méthode de réduction décrite plus haut, puis est soustraite. La résolution à utiliser est choisie par l'utilisateur de façon à estimer au mieux le continuum. ForMoSA permet aussi d'estimer le continuum par un polynôme, mais cette méthode peut créer des biais lorsque le degré du polynôme est mal choisi. L'intérêt de soustraire le continuum est d'avoir accès uniquement à l'information spectrale à moyenne/haute résolution des raies atomiques et moléculaires et d'éviter des potentiels biais à plus basse résolution (perte de flux, erreurs systématiques des modèles, etc.).

### Interpolation des spectres synthétiques déviants

Comme décrit dans la Section 2.2.2, un tri des spectres synthétiques déviants est nécessaire. Cela a pour conséquence d'introduire des trous dans la grille, représentés par des valeurs non définies ("NaN"). Cette dernière étape a pour but d'interpoler ces trous (voir la Figure 2.7, à droite).

La fonction `xarray.DataArray.interpolate_na` (interpolation linéaire) est utilisée dans les différentes dimensions de la grille afin d'avoir une grille finale homogène.

#### 2.2.4 Processing : le *nested sampling*

Cette partie du code est consacrée à l'exploration de l'espace des paramètres à l'aide de l'algorithme du *nested sampling*. Il existe de nombreux modules de *nested sampling* python disponibles, nous avons choisi, pour le moment, d'en inclure trois dans ForMoSA (seul code de *forward modelling* appliqué aux planètes imagées à faire cela, voir le code AURORA pour une comparaison des saveurs de *nested sampling* avec l'approche *retrieval*, Welbanks & Madhusudhan 2021). Bien que ces modules aient leurs spécificités, ils ont chacun besoin de deux ingrédients essentiels calculés à chaque itération.

#### La définition du *prior*

Lors d'une analyse Bayésienne, le *prior* représente l'information que nous avons a priori sur ce que l'on cherche à déterminer (ici les paramètres atmosphériques des exoplanètes imagées). En

---

4. [xarray.pydata.org/en/stable/](https://xarray.pydata.org/en/stable/)

5. Les filtres disponibles dans ForMoSA ont été importés de [svo2.cab.inta-csic.es/theory/fps/](https://svo2.cab.inta-csic.es/theory/fps/)

pratique ce *prior* va influencer le tirage aléatoire des points vivants (ou des *walkers* dans le cas du MCMC). Plus l'information a priori est précise, plus rapide sera la convergence dans l'espace des paramètres. Dans le cas de ForMoSA, la solution la plus conservatrice a été retenue. Les *priors* sont définis uniformes et bornés selon les dimensions de la grille utilisée, mais l'utilisateur a le choix de définir une autre distribution de *priors*. Ainsi, lors de la première itération, les jeux de paramètres sont générés de façon homogène dans toute la grille, puis de façon homogène dans un espace des paramètres de plus en plus fin selon la convergence du *nested sampling*.

### Le calcul de la vraisemblance

Lorsqu'un jeu de paramètres est généré, il faut comparer le spectre synthétique correspondant avec l'observation pour calculer sa vraisemblance. Les points sont générés aléatoirement, il faut donc interpoler ce spectre synthétique dans la grille. La fonction `xarray.DataArray.interp` est utilisée et permet d'avoir un spectre interpolé linéairement en quelques centièmes de secondes. Comme nous l'avons vu dans la Section 1.5.3, si les hypothèses d'erreurs Gaussiennes et d'indépendance des points sont considérées, maximiser la vraisemblance revient à minimiser le  $\chi^2$ . Dans la pratique, on a sans doute du bruit corrélé, qui est négligé ici. Il est possible le prendre en compte en estimant une matrice de covariance à partir des données (erreurs sur le fit Gaussien lors de l'extraction de la trace), ou en utilisant des algorithmes plus évolués (ces améliorations du code seront explorées dans les prochains mois). Ici, la comparaison entre les spectres synthétiques et observés est donc assurée par un calcul de  $\chi^2$  :

$$\chi^2 = \sum_i \left( \frac{F_{obs,i} - C_K \cdot F_{synt,i}}{F_{err,obs,i}} \right)^2 \quad (2.6)$$

Avec  $F_{obs,i}$ ,  $F_{err,obs,i}$ ,  $F_{synt,i}$  le flux observé, l'erreur associée et le flux synthétique à la longueur d'onde  $i$ , respectivement, et  $C_K$  un facteur de dilution défini dans la Section 2.2.6.

#### 2.2.5 Options et paramètres du *nested sampling*

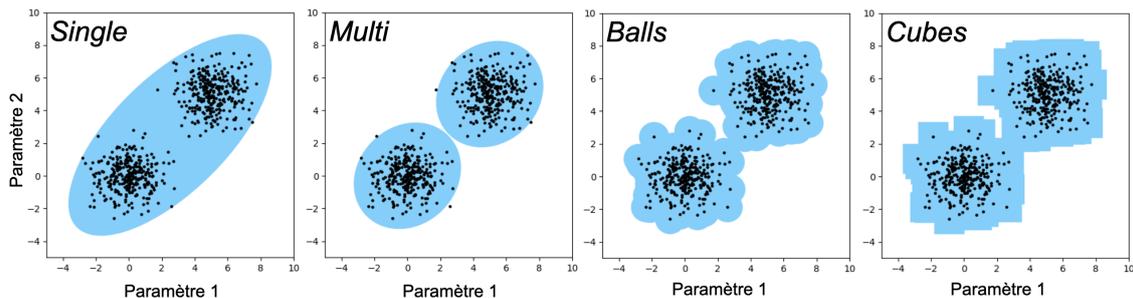


FIGURE 2.8 – Différentes méthodes de détermination du volume de prior.

Un grand nombre de paramètres permet à l'utilisateur d'influencer la mécanique du *nested sampling*. Seuls ceux utilisés dans ForMoSA sont décrits ici.

- **Le calcul du volume de *prior*** : A chaque itération, le point ayant la plus faible vraisemblance est identifié et réinjecté dans une zone de l'espace des paramètres, appelée volume de *prior*, où la vraisemblance est, en théorie, plus grande. Il existe quatre méthodes généralement utilisées pour estimer cette zone. L'option "single" calcule une ellipsoïde simple qui englobe tous les points autres que celui avec la plus faible vraisemblance; ce mode n'est pas applicable dans le cas d'espaces des paramètres multi-modaux. L'option "multi" calcule plusieurs ellipsoïdes et permet de sonder plusieurs modes. L'option "balls" définit une zone

N-sphérique (N étant le nombre de dimensions) autour de chaque point (le rayon de la N-sphère est paramétrisable), le volume *prior* est alors la surface totale de ces zones. L'option "cubes" définit une zone N-cubique autour de chaque point. Le module `nestle` permet les options "single" et "multi", alors que les modules `dynesty` et `ultranest` permettent aussi les options "balls" et "square". Ces différentes approches sont illustrées dans la Figure 2.8.

- **le nombre de points vivants** : Comme nous l'avons vu, le *nested sampling* fait converger un nuage de points à travers l'espace des paramètres vers les spectres synthétiques les plus représentatifs des observations. Le nombre de points constituant ce nuage est important car il permet de s'assurer d'explorer l'espace des paramètres de manière homogène, la contrepartie étant une augmentation du temps de convergence. Certains modules, comme `dynesty` et `ultranest`, permettent en option de faire varier ce nombre de points au cours de la convergence dans le cas d'espaces des paramètres multi-modaux, ou pour sonder des zones particulières. D'autres modules, comme `nestle`, fixent un nombre de points au départ. La Figure 2.9 illustre l'impact de ce nombre de points vivants sur les résultats et le temps de convergence.
- **Le critère d'arrêt** : Le choix du critère d'arrêt dépend des résultats que l'on cherche à obtenir. Comme nous l'avons vu, le *nested sampling* a été développé, entre autres, pour permettre une estimation simple et rapide de l'évidence statistique. Il est donc naturel que le critère d'arrêt par défaut des différents modules de *nested sampling* soit lié à ce calcul d'évidence. A chaque itération, l'évidence restante à calculer est estimée selon :

$$\mathcal{L}_{est} = \mathcal{L}_{max} \times \mathcal{X}_i \quad (2.7)$$

où  $\mathcal{L}_{max}$  est la vraisemblance atteinte maximale et  $\mathcal{X}_i$  le volume de *prior* (zone de l'espace des paramètres) qu'il reste à explorer (cette évidence  $\mathcal{L}_{est}$  est bien sûr sous-estimée par rapport à la valeur réelle). Le critère d'arrêt est alors défini par le rapport entre  $\mathcal{L}_{est}$  et  $\mathcal{L}_i$ , l'évidence actuelle. Si ce rapport est plus petit qu'une valeur choisie, alors l'algorithme estime la valeur d'évidence suffisamment proche de la réalité.

Dans cette thèse, nous nous intéressons plus particulièrement aux postérieurs, nous avons ainsi choisi un critère d'arrêt basé sur la qualité des postérieurs. Lors de la convergence, la vraisemblance ne cesse d'augmenter, mais cette augmentation est de plus en plus faible. A contrario, le volume de *prior* diminue et cette diminution est de plus en plus faible avec la convergence. Le critère d'arrêt est atteint lorsque, pour un certain nombre d'itérations successives (défini par l'utilisateur), l'augmentation de la vraisemblance est plus faible que la réduction du volume de *prior*. L'algorithme estime alors que la vraisemblance atteinte est proche du maximum et que des itérations supplémentaires n'apporteraient plus d'informations.

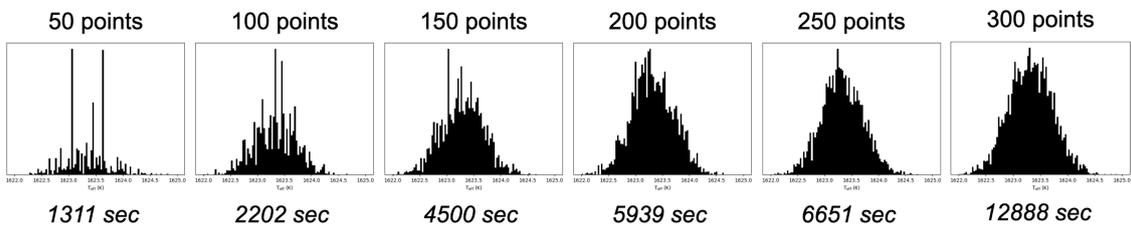


FIGURE 2.9 – Impact du nombre de points vivants injectés dans le *nested sampling* (module `nestle`) sur la qualité des postérieurs obtenus et sur le temps de convergence. Les données utilisées pour l'exemple ont été obtenues avec *X-Shooter* à une résolution  $R \sim 8000$ . La grille *BT-SETTL* a été utilisée ici.

Les modules `nestle`, `dynesty` et `ultranest` sont tous trois inclus dans ForMoSA. `dynesty` et `ultranest` sont plus performants que `nestle` dans le cas d'espaces des paramètres complexes

à haut nombre de dimensions. Ils nécessitent en revanche une convergence plus longue. Les grilles utilisées lors de cette thèse sont relativement peu complexes et les inversions effectuées comportent peu de dimensions ( $<10$ ). Ainsi, pour des raisons de simplicité, le module `nest1e` a été choisi pour chaque utilisation de ForMoSA.

### 2.2.6 Processing : La partie *retrieval* de ForMoSA

Bien que l'objectif premier de ForMoSA soit de comparer des grilles de spectres synthétiques à des données observées, il est également possible (optionnel) de sonder d'autres propriétés atmosphériques et/ou dynamiques que celles proposées par les grilles, selon une approche de *retrieval* :

- *Le rayon  $R$*  : Les spectres synthétiques étant calculés comme le flux lumineux en sortie d'atmosphère, il est nécessaire de les re-normaliser par un facteur de dilution  $C_K$  avant de les comparer aux observations. Si l'utilisateur le souhaite et si la distance  $d$  de la source est connue, il est possible de déterminer  $R$  en définissant :

$$C_K = \left(\frac{R}{d}\right)^2 \quad (2.8)$$

Dans le cas contraire,  $C_K$  est calculé analytiquement par la formule issue de [Cushing et al. \(2008\)](#) :

$$C_K = \frac{\sum_i \frac{F_{\text{synt},i} \cdot F_{\text{obs},i}}{F_{\text{err},\text{obs},i}^2}}{\sum_i \left(\frac{F_{\text{synt},i}}{F_{\text{err},\text{obs},i}}\right)^2} \quad (2.9)$$

- *L'extinction  $A_V$*  : L'extinction peut être causée par de la poussière et du gaz entre la source et l'observateur. Elle a un effet rougissant sur les spectres et il peut donc être utile de l'estimer. Pour cela, la fonction `extinction.fm07` est utilisée. Elle applique les relations de [Fitzpatrick & Massa \(2007\)](#) initialement développées pour décrire l'extinction interstellaire entre 0.091 et 6  $\mu\text{m}$ .
- *La vitesse radiale  $RV$*  : Pour estimer le décalage Doppler induit par la vitesse radiale de la source, la fonction `PyAstronomy.dopplerShift`<sup>6</sup> est utilisée. Elle décale le spectre en appliquant la formule Doppler sans modifier l'axe des longueurs d'ondes.
- *La vitesse de rotation projetée  $v.\sin(i)$*  : La rotation d'une planète sur elle-même entraîne un élargissement des raies d'absorption. Une fraction de la surface projetée de la planète s'éloigne de nous, tandis que l'autre se rapproche. ForMoSA permet de mesurer cette vitesse de rotation (projetée) en appliquant sur les raies la fonction `PyAstronomy.fastRotBroad`<sup>7</sup>, qui les élargit en appliquant la formule de [Gray \(2008\)](#).
- *L'assombrissement centre-bord ou "limb darkening"* : Il est, lui aussi, déterminé par la fonction `PyAstronomy.fastRotBroad` qui l'injecte dans le calcul de  $v.\sin(i)$ . Actuellement, ce paramètre est totalement inconnu pour des objets de masse planétaire à l'extérieur du système solaire. Il est donc laissé non contraint dans l'ajustement du *nested sampling*.

Ces paramètres optionnels sont utilisés pour modifier le spectre synthétique avant le calcul de la vraisemblance. Leur *prior* est défini uniforme par l'utilisateur et leurs valeurs sont tirées aléatoirement (tirage Monte Carlo) et de façon homogène dans un espace des paramètres qui se réduit à chaque itération, de la même façon que les paramètres définis par la grille de spectres synthétiques.

6. [pyastronomy.readthedocs.io/en/latest/pyaslDoc/aslDoc/dopplerShift.html](http://pyastronomy.readthedocs.io/en/latest/pyaslDoc/aslDoc/dopplerShift.html)

7. [pyastronomy.readthedocs.io/en/latest/pyaslDoc/aslDoc/rotBroad.html](http://pyastronomy.readthedocs.io/en/latest/pyaslDoc/aslDoc/rotBroad.html)

## 2.2.7 Post-processing : Résultats et figures

Une fois le critère d'arrêt atteint, la boucle de *nested sampling* s'arrête et l'utilisateur peut avoir accès aux résultats contenus dans un dictionnaire. On y trouve l'évidence statistique et un tableau contenant les paramètres de tous les points ayant été générés avec la valeur de vraisemblance associée. Grâce à ce tableau, il est possible de former la distribution statistique de chaque paramètre (distribution postérieure) et les possibles corrélations entre eux en utilisant le module Python *corner*, ou encore déterminer une valeur pour chaque paramètre ainsi que son erreur. Pour visualiser la qualité de l'ajustement, ForMoSA superpose les données observées, le spectre synthétique qui maximise la vraisemblance, ainsi que des spectres synthétiques dont les paramètres sont tirés aléatoirement dans la limite de leurs erreurs (nombre défini par l'utilisateur).

*Le code ForMoSA permet d'estimer les paramètres atmosphériques des exoplanètes et naines brunes en utilisant l'algorithme du nested sampling dans des grilles de spectres pré-calculés. La prochaine Section détaille la première application de ce code sur des observations de naines brunes.*

## 2.3 Première application : La librairie UpperSco

### 2.3.1 Contexte de l'étude

Comme développé dans le Chapitre 1, les naines brunes forment un pont en masse entre les planètes et les étoiles, mais aux âges jeunes ( $< 150$  Myr) elles partagent des propriétés communes aux exoplanètes en matière de luminosités, rayons, masses, et températures. La dernière génération d'imageurs d'exoplanètes (SPHERE, GPI, SCExAO, MAgAO-X) offrent à ce jour des spectres avec des résolutions spectrales basses de l'ordre de  $R_\lambda = 100$ , permettant une première détermination de leurs propriétés physiques. Actuellement, on compte typiquement une douzaine de jeunes exoplanètes caractérisées spectralement (voir la Table 2.1). Les jeunes naines brunes de masse planétaire isolées ou compagnons à grandes séparations représentent une formidable opportunité pour obtenir une caractérisation plus complète en matière de couverture et de résolution spectrale, pour une exploration plus poussée de leurs propriétés atmosphériques, pour servir de comparaison pour l'étude des jeunes exoplanètes, mais aussi pour tester les prédictions des modèles d'atmosphères sous-stellaires et particulièrement exoplanétaires.

### 2.3.2 Caractérisation d'un échantillon de naines brunes jeunes

L'association Scorpion-Centaure est l'association OB la plus proche du Soleil (Preibisch & Mamajek, 2008). Elle peut être divisée en trois sous-groupes. Le Bas-Centaure Croix du sud (Lower Centaurus-Crux, LCC) situé à  $118 \pm 2$  pc et âgé de 11-12 Myr, le Haut-Centaure Loup (Upper Centaurus-Lupus, UCL) situé à  $140 \pm 2$  pc et âgé de 14-15 Myr et le Haut-Scorpion (Upper Scorpions, US) situé à  $145 \pm 2$  pc et âgé de 5-6 Myr. De par leur jeune âge et leur proximité, ces sous-groupes présentent des laboratoires idéaux pour l'étude des objets jeunes, et en particulier des exoplanètes et des naines brunes de faible masse. De nombreuses études ont révélé des disques autour d'étoiles jeunes (Esplin et al. 2018, David et al. 2019) et de naines brunes de faible masse (Dawson et al., 2013), et les découvertes de naines brunes accrétantes (Lodieu et al., 2018) ont appuyé l'hypothèse de la formation des planètes dans des disques. Ces sous-groupes sont aussi connus pour être le siège de découvertes de compagnons de masse planétaire, parmi lesquels les deux compagnons du système TYC 8998-760 (Bohn et al., 2020b), HD 95086 b (Rameau et al., 2013b), HIP 65426 b (Chauvin et al., 2017) et HD106906 b (Bailey et al., 2014) situés dans LCC,

TABLEAU 2.1 – *Bilan des données spectroscopiques des exoplanètes imagées.*

Nom	Instrument	Résolution spectrale <sup>a</sup>	Couverture spectrale ( $\mu\text{m}$ )	Ref.
$\beta$ Pic b	CRIRES	$\sim 100000$	2.303-2.331	<a href="#">Snellen et al. (2014b)</a>
-	SINFONI	$\sim 5000$	1.929-2.472	<a href="#">Hoeijmakers et al. (2018b)</a>
-	GRAVITY	$\sim 500$	1.96-2.47	<a href="#">Gravity Collaboration et al. (2020)</a>
$\beta$ Pic c	GRAVITY	$\sim 500$	1.96-2.47	<a href="#">Nowak et al. (2020)</a>
ABPic b	SINFONI	$\sim 1500$ -2000	1.1-2.5	<a href="#">Bonney et al. (2010)</a>
HD106906 b	FIRE	$\sim 4800$	0.8-2.5	<a href="#">Bailey et al. (2014)</a>
-	SINFONI	$\sim 2000$ -4000	1.1-2.5	<a href="#">Daemgen et al. (2017)</a>
RXJ160929.1-210524 b	NIRI	$\sim 1000$ -1500	1.5-2.5	<a href="#">Lafrenière et al. (2008)</a>
-	NIFS	$\sim 6000$	1.15-1.35	<a href="#">Lafrenière et al. (2010)</a>
PDS70 b	SINFONI	$\sim 5075$	1.929-2.472	<a href="#">Cugno et al. (2021)</a>
PDS70 b et c	SPHERE	$\sim 50$	0.95-1.35	<a href="#">Mesa et al. (2019)</a>
-	SINFONI	$\sim 1500$	1.45-2.45	<a href="#">Christiaens et al. (2019a)</a>
-	MUSE	$\sim 2484$	0.4650-0.9300	<a href="#">Hashimoto et al. (2020)</a>
-	GRAVITY	$\sim 500$	2.0-2.5	<a href="#">Wang et al. (2021b)</a>
HIP 65426 b	SPHERE	$\sim 50$	0.95-1.35	<a href="#">Chauvin et al. (2017)</a>
-	SINFONI	$\sim 5577$	1.928-2.471	<a href="#">Petrucci et al. (2021)</a>
2M1207 b	NACO	$\sim 700$	1.5-1.8	<a href="#">Chauvin et al. (2004)</a>
-	NACO	$\sim 550$	1.3-2.6	<a href="#">Mohanty et al. (2007)</a>
-	SINFONI	$\sim 1500$ -2000	1.1-2.5	<a href="#">Patience et al. (2010)</a>
HD95086 b	SPHERE	$\sim 33$	0.97-1.66	<a href="#">Chauvin et al. (2018)</a>
-	GPI	$\sim 66$	1.5-2.2	<a href="#">De Rosa et al. (2016)</a>
51 Eri b	GPI	$\sim 66$	1.5-2.2	<a href="#">Macintosh et al. (2015)</a>
-	SPHERE	$\sim 33$	0.97-1.65	<a href="#">Samland et al. (2017)</a>
TYC 8998 b	SINFONI	$\sim 4500$	1.95-2.45	<a href="#">Zhang et al. (2021a)</a>
Kap And b	CHARIS	$\sim 20$	1.13-2.39	<a href="#">Currie et al. (2018)</a>
-	ALES	$\sim 20$	2.8-4.1	<a href="#">Stone et al. (2020)</a>
-	OSIRIS	$\sim 4000$	1.95-2.38	<a href="#">Wilcomb et al. (2020)</a>
HR8799 b	OSIRIS	$\sim 4000$	1.95-2.38	<a href="#">Barman et al. (2015)</a>
-	NIRSPEC	$\sim 35000$	1.94-2.49	<a href="#">Wang et al. (2021a)</a>
HR8799 c	OSIRIS	$\sim 4000$	1.95-2.38	<a href="#">Konopacky et al. (2013)</a>
-	NIRSPEC	$\sim 35000$	1.94-2.49	<a href="#">Wang et al. (2021a)</a>
HR8799 d	SPHERE	$\sim 30$	0.94-1.64	<a href="#">Zurlo et al. (2016)</a>
-	NIRSPEC	$\sim 35000$	1.94-2.49	<a href="#">Wang et al. (2021a)</a>
HR8799 e	SPHERE	$\sim 30$	0.94-1.64	<a href="#">Zurlo et al. (2016)</a>
-	NIRSPEC	$\sim 35000$	1.94-2.49	<a href="#">Wang et al. (2021a)</a>
-		$\sim 500$	1.96-2.47	<a href="#">Gravity Collaboration et al. (2019)</a>

<sup>a</sup> La résolution spectrale donnée ici est la résolution de l'instrument. Les données peuvent être binées, ce qui réduit drastiquement la résolution finale du spectre.

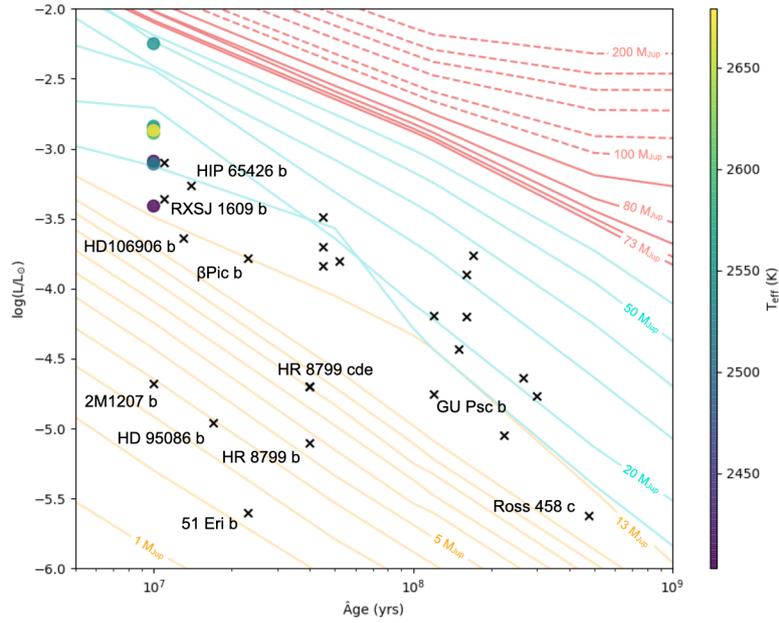


FIGURE 2.10 – Relation luminosité-âge. Les isochrones en masse sont représentées et ont été calculées avec les modèles évolutifs COND03 (Baraffe et al., 2003) pour les traits pleins et de Baraffe et al. (2015) pour les traits en pointillés. Les séparations entre les modèles jaunes-bleus et bleus-rouges marquent les limites de fusion du deuthérium ( $M \sim 13 M_{\text{Jup}}$ ) et de l’hydrogène ( $M \sim 73 M_{\text{Jup}}$ ), respectivement. Les exoplanètes imagées sont représentées par des croix et l’échantillon de naines brunes présenté ici est représenté par des points (leur  $T_{\text{eff}}$  est donnée par leur code couleur).

les deux compagnons accrétant du système PDS70 situé dans UCL (Haffert et al., 2019), ou 1RXS J1609 b situé dans US (Lafrenière et al., 2008), entre autres. Ces découvertes ont motivé l’étude des atmosphères de naines brunes jeunes isolées (donc plus facilement observables) dans ces associations, connues pour partager des propriétés communes aux jeunes exoplanètes géantes, afin de comprendre leur mécanisme de formation.

La première application de ForMoSA fût de caractériser l’atmosphère d’un échantillon de neuf naines brunes jeunes (5–11 Myr) et chaudes ( $T_{\text{eff}} \sim 2500\text{K}$ ) situé dans US. Cet échantillon était composé de six objets isolés et de trois compagnons à larges séparations, afin d’identifier d’éventuelles tendances entre les paramètres atmosphériques des objets et leur configuration (isolés, compagnons, composantes de binaires ou de systèmes hiérarchiques) à type spectral et masse équivalents. La Figure 2.10 compare la luminosité de ces neuf naines brunes avec celle des exoplanètes imagées et montre qu’à âge équivalent, cet échantillon est plus lumineux (plus chaud) que ces exoplanètes. Cependant, il couvre la même gamme de masses que les exoplanètes plus âgées. Les spectres ont été obtenus avec l’instrument X-Shooter à une résolution  $R \sim 5400$  et la grille de modèle utilisée était celle des BT-SETTL, couvrant une gamme en  $T_{\text{eff}}$  de 2100 à 3000K et en  $\log(g)$  de 3.5 à 5.5 dex.

### 2.3.3 Méthode appliquée

Une redéfinition du type spectral de ces neuf naines brunes a d’abord été faite selon une approche empirique, en comparant les spectres obtenus à la librairie Ultracool RIZzo contenant les spectres ( $\sim 0.6\text{-}1.0 \mu\text{m}$ ) de 265 naines brunes (M2-L5) de Cruz et al. (2003), Cruz et al. (2007) et Reid et al. (2008). Nous avons également effectué une analyse fine des propriétés des raies d’absorptions et d’émissions connues pour être des traceurs de température, de gravité de surface,

de métallicité, d'accrétion et d'âge. Nous avons ensuite appliqué le code ForMoSA pour déterminer les propriétés atmosphériques des objets de notre échantillon selon une approche statistique. La version du code utilisée était une version antérieure à celle présentée dans la Section 2.2. Le module `xarray` n'étant pas encore implémenté, l'interpolation des points générés par le *nested sampling* était effectuée en deux temps. Une première interpolation de la grille était faite avec le module Python `griddata` afin d'affiner le pas de chaque paramètre avant de lancer le *nested sampling*, puis le spectre synthétique correspondant au point généré était interpolé à la manière d'un barycentre en prenant en compte les noeuds de la grille voisins.

### 2.3.4 Publication de l'étude

Ce travail a permis la publication d'un article dans le journal *Astronomy & Astrophysics* (Petrus et al., 2020), que je partage dans ce manuscrit.

# A new take on the low-mass brown dwarf companions on wide orbits in Upper-Scorpius<sup>★</sup>

S. Petrus<sup>1</sup>, M. Bonnefoy<sup>1</sup>, G. Chauvin<sup>2,1</sup>, C. Babusiaux<sup>1</sup>, P. Delorme<sup>1</sup>, A.-M. Lagrange<sup>1</sup>, N. Florent<sup>1</sup>, A. Bayo<sup>3,4</sup>, M. Janson<sup>5</sup>, B. Biller<sup>6</sup>, E. Manjavacas<sup>7</sup>, G.-D. Marleau<sup>8</sup>, and T. Kopytova<sup>9,10</sup>

<sup>1</sup> Univ. Grenoble Alpes, CNRS, IPAG, 38000 Grenoble, France  
e-mail: [simon.petrus@univ-grenoble-alpes.fr](mailto:simon.petrus@univ-grenoble-alpes.fr)

<sup>2</sup> Unidad Mixta Internacional Franco-Chilena de Astronomía, CNRS/INSU UMI 3386 and Departamento de Astronomía, Universidad de Chile, Casilla 36-D, Santiago, Chile

<sup>3</sup> Instituto de Física y Astronomía, Universidad de Valparaíso, Valparaíso, Chile

<sup>4</sup> Núcleo Milenio de Formación Planetaria (NPF), Valparaíso, Chile

<sup>5</sup> Department of Astronomy, Stockholm University, AlbaNova University Center, 10691 Stockholm, Sweden

<sup>6</sup> Institute for Astronomy, The University of Edinburgh Royal Observatory, Blackford Hill, Edinburgh EH9 3HJ, UK

<sup>7</sup> W. M. Keck Observatory 65-1120 Māmalahoa Hwy, Kamuela, HI 96743, USA

<sup>8</sup> Institut für Astronomie und Astrophysik, Eberhard Karls Universität Tübingen, Auf der Morgenstelle 10, 72076 Tübingen, Germany

<sup>9</sup> School of Earth & Space Exploration, Arizona State University, Tempe AZ 85287, USA

<sup>10</sup> Ural Federal University, Yekaterinburg 620002, Russia

Received 18 April 2019 / Accepted 27 September 2019

## ABSTRACT

**Context.** The Upper-Scorpius association (5–11 Myr) contains a unique population of low-mass ( $M \leq 30 M_{\text{Jup}}$ ) brown dwarfs either free-floating, forming wide pairs, or on wide orbits around solar-type and massive stars. The detailed relative characterization of their physical properties (mass, radius, temperature, composition, and ongoing accretion) offers the opportunity to potentially explore their origin and mechanisms of formation.

**Aims.** In this study, we aim to characterize the chemical and physical properties of three young, late-M brown dwarfs claimed to be companions of the Upper-Scorpius stars USco 161031.9-16191305, HIP 77900, and HIP 78530 using medium-resolution spectroscopy at UV (0.30–0.56  $\mu\text{m}$ ;  $R_{\lambda} \sim 3300$ ), optical (0.55–1.02  $\mu\text{m}$ ;  $R_{\lambda} \sim 5400$ ), and NIR (1.02–2.48  $\mu\text{m}$ ;  $R_{\lambda} \sim 4300$ ) wavelengths. The spectra of six free-floating analogs from the same association are analyzed for comparison and to explore the potential physical differences between these substellar objects found in different configurations. We also aim to examine and analyze hydrogen emission lines at UV and optical wavelengths to investigate the presence of ongoing accretion processes.

**Methods.** The X-shooter spectrograph at VLT was used to obtain the spectra of the nine young brown dwarfs over the 0.3–2.5  $\mu\text{m}$  range simultaneously. Performing a forward modeling of the observed spectra with the ForMoSA code, we infer the  $T_{\text{eff}}$ ,  $\log(g)$ , and radius of our objects. The code compares here the BT-SETTL15 models to the observed spectra using the Nested Sampling Bayesian inference method. Mass is determined using evolutionary models, and a new analysis of the physical association is presented based on *Gaia*-DR2 astrometry.

**Results.** The  $T_{\text{eff}}$  and  $\log(g)$  determined for our companions are compatible with those found for free-floating analogs of the Upper-Scorpius association and with evolutionary model predictions at the age of the association. However the final accuracy on the  $T_{\text{eff}}$  estimates is strongly limited by nonreproducibility of the BT-SETTL15 models in the range of  $T_{\text{eff}}$  corresponding to the M8–M9 spectral types. We identified  $H_{\alpha}$ ,  $H_{\beta}$ ,  $H_{\gamma}$ , and Ca II H and K emission lines in the spectrum of several objects. We attribute these lines to chromospheric activity except for the free-floating object USco 1608-2315 for which they are indicative of active accretion ( $\dot{M} \leq 10^{-10.76} M_{\odot} \text{yr}^{-1}$ ). We confirm the four-fold over-luminosity of USco 161031.9-16191305 B down to 0.3  $\mu\text{m}$ , which could be explained in part by the activity of this object and if the companion is an unresolved multiple system.

**Key words.** brown dwarfs – stars: atmospheres – stars: fundamental parameters – stars: luminosity function, mass function – planetary systems

## 1. Introduction

The first brown dwarfs (BDs) were contemporaneously discovered with the first exoplanets at the end of the last millennium (Mayor & Queloz 1995; Nakajima et al. 1995; Rebolo et al. 1995). Since then, thousands of BDs have been detected, and

studied in isolation (Cushing et al. 2005; Kirkpatrick 2005) in the field or as wide- or short-period companions to nearby stars (Sahlmann et al. 2011; Allers 2012). Bridging the gap between planets and stars, BDs are too light by definition to burn hydrogen but are massive enough to burn deuterium (Burrows et al. 1997). Despite two decades of intensive study of BDs, many fundamental questions remain unanswered regarding their formation and evolution processes, their physical and atmosphere properties, and their connection to stars and planets. Multiple stellar-like formation pathways have been proposed for

<sup>★</sup> Based on observations collected at the European Organisation for Astronomical Research in the Southern Hemisphere under ESO program 093.C-0769.

these objects: (i) turbulent fragmentation of molecular clouds (Padoan & Nordlund 2004), (ii) premature ejection of protostellar embryos (Bate et al. 2002), (iii) photo-erosion of prestellar cores (Hester et al. 1996), and (iv) disk instability (e.g., Stamatellos & Whitworth 2009). Studies of young star-forming regions are currently ongoing to identify differences in binary statistics linked to these different processes (e.g., Marks et al. 2017; Thies et al. 2015). Alternatively, we know from observations and theory that planetary formation mechanisms like core accretion are probably forming very massive giant planets, and populating the mass distribution of substellar companions up to  $M \leq 35 M_{\text{Jup}}$  (e.g., Mordasini et al. 2009, 2012). There is therefore little doubt that both stellar and planetary formation mechanisms overlap in mass distribution, and an interesting question is to investigate whether stellar and planetary mechanisms might lead to different atmospheric properties that could be traced through observations. Core accretion might indeed lead to an overabundance of heavy elements in the atmosphere. Our ability to identify such chemical imprinting is very challenging, is beyond observational limitations, and is directly connected to our understanding and modeling of the physics of BD and exoplanet atmospheres. Confronting the latest predictions of substellar atmosphere models with high-quality optical and infrared spectra of young brown dwarfs is a key step toward this goal.

Evolutionary models predict how BDs contract and cool down with time, and how their fundamental parameters such as effective temperature, surface-gravity, radius, and luminosity evolve (Baraffe et al. 2003). The contraction leads to a decrease of the radius and an increase of the surface-gravity. This evolution impacts the bolometric luminosity and the spectrum with a modification of the pseudo-continuum and the appearance of atomic and molecular absorption lines at different evolutionary stages. Spectral morphology has been used for years to extend the old stellar spectral classification into the substellar one, from M-dwarfs to L-, T-, and Y-dwarfs reaching effective temperatures as cold as  $T_{\text{eff}} \leq 450$  K (Kirkpatrick et al. 2012; Kopytova et al. 2014). The fine characterization of the BD atmospheres therefore improves our global understanding of their physical properties, and also of their formation and evolution.

There are currently two approaches for the spectral characterization of BDs. The first is empirical and based on comparison with libraries of known young and old BDs (e.g., Allers & Liu 2013; Bonnefoy et al. 2014; Bayo et al. 2017), and is tightly connected and limited by the size and the diversity of these libraries. A complementary alternative is the comparison of the observed spectra to the recent models of substellar atmospheres (e.g., Allard et al. 2001; Helling & Woitke 2006; Barman et al. 2011; Madhusudhan et al. 2011; Morley et al. 2012; Tremblin et al. 2017; Charnay et al. 2018) of BDs and giant planets. This offers the advantage that the physical parameters for a given model can be derived independently of other observations, and that the influence of new physical ingredients can be tested (e.g., new atomic and molecular line opacities, presence and properties of clouds, nonequilibrium chemistry, thermochemical instability, etc.). Nevertheless, this latter approach is hindered by our limited observational knowledge and constraints to disentangle the relative importance of the tested physical parameters, eventually leading to significant degeneracies and systematic errors when using different families of atmosphere models or simply different sets of physical parameters. Both approaches remain therefore highly complementary today.

The detection of forming companions is a new observational window on the initial conditions of planetary systems (formation

zone, timescales, and modes; accretion physics; e.g., Mordasini et al. 2017). Thus far,  $H_\alpha$  (656.3 nm) and  $\text{Pa}\beta$  (1282.2 nm) lines have been detected in the spectra of eight companions with masses below  $30 M_{\text{Jup}}$  and ages in the 1–10 Myr range (TWA 5 B, GQ Lup B, CT Cha B, USco CTIO 108 B, DH Tau B, GSC 06214-00210 B, SR 12 C, PDS 70 B, Neuhäuser et al. 2000; Seifahrt et al. 2007; Schmidt et al. 2008; Béjar et al. 2008; Bonnefoy et al. 2014; Bowler et al. 2011; Santamaría-Miranda et al. 2018; Wagner et al. 2018; Zhou et al. 2014; Wu et al. 2017b). These lines are known tracers of active accretion and of substellar chromospheric activity. Submillimeter observations of these objects have so far failed to reveal excess emission from the expected mass reservoir (circumplanetary disk) surrounding these objects (Dai et al. 2010; Bowler et al. 2015; MacGregor et al. 2017; Wolff et al. 2017; Wu et al. 2017a,b) and only one companion, GSC 06214-00210 B, shows clear excess emission at near-infrared (NIR) wavelengths (Bowler et al. 2011). This might indicate that these companions bear very compact and optically thick disks (Wu et al. 2017b).

The Upper-Scorpius subgroup (hereafter Upper-Sco) in the Scorpius-Centaurus OB association contains one of the nearest ( $d = 146 \pm 3$  pc; de Bruijne 1999; de Zeeuw et al. 1999; Galli et al. 2018) and richest populations of young stars and substellar objects (e.g. Ardila et al. 2000; Lodieu et al. 2007, 2018; Luhman et al. 2018) down to the planetary-mass range. The extinction is low in this region ( $A_V \leq 2$  mag; Walter et al. 1994; Lallement et al. 2019). At an estimated age of 5–11 Myr (Pecaut et al. 2012; David et al. 2019), stars harbor primordial, transitional, and debris disks (Luhman & Mamajek 2012; Esplin et al. 2018) suggesting planet or BD formation within disks at different completion levels. Upper-Sco also contains a large sample of low-mass BDs ( $M < 30 M_{\text{Jup}}$ ) and planetary mass companions identified with deep-imaging and high-contrast imaging techniques. These companions are found over a wide range of projected separations ( $\sim 300$ – $3400$  au; Béjar et al. 2008; Lafrenière et al. 2008, 2010, 2011; Ireland et al. 2011; Aller et al. 2013) from M 7- to B6-type stars. Some of the free-floating low-mass BDs and companions harbor disks (e.g., Bowler et al. 2011; Dawson et al. 2013) and are actively accreting (Herczeg et al. 2009; Bowler et al. 2011; Lodieu et al. 2018). This unique population of low-mass BDs and planetary mass objects with various configurations (as companions, binaries, free-floating) and likely diverse origins represents a unique test bed for planet and BD formation models.

In this paper, we present a new study of three young BD companions to the stars HIP 78530, HIP 77900, and USco 161031.9-16191305 (hereafter USco 1610-1913), members of the Upper-Scorpius association. We obtain VLT/X-shooter 0.3– $2.5 \mu\text{m}$  spectra of these objects, and use them to characterize their physical properties. The data notably extend previous analysis of these objects to the optical at medium resolving powers, thus enabling investigation of emission lines related to accretion, and testing of the atmospheric models of young BDs. We provide an up-to-date description of our targets in Sect. 2. The observations and the data reduction are detailed in Sect. 3. In Sect. 4, we present our results using both empirical and synthetic model approaches. Our ForMoSA forward modeling tool is used to explore the different atmospheric models and determine the most probable physical properties of these three companions. In Sect. 5, we focus our study on the emission-line properties observed for the three companions. In Sect. 6, we finally summarize and discuss our results in the context of previous work, and present perspective of future studies.

**Table 1.** Description of the properties of the three systems HIP 78530, HIP 77900, and USco 1610-1913.

Source	$d^{(a)}$ (pc)	$A_v^{(b)}$ (mag)	Primary		Companion			Separation (AU)	Ref.
			$T_{\text{eff}}$ (K)	SpT	$T_{\text{eff}}$ (K)	SpT	Mass ( $M_{\text{Jup}}$ )		
USco 1610-1913 B	$143.9 \pm 8.0$	0.13	$4140 \pm 150$	K7	$2400 \pm 150$	M9 $\pm$ 0.5	$20 \pm 5$	$779 \pm 9$	<sup>(c)</sup>
HIP 77900 B	$150.8 \pm 3.0$	0.07	$13\,700 \pm 1500$	B6 $\pm$ 1	$2400 \pm 150$	M9 $\pm$ 0.5	$20 \pm 7$	$3200 \pm 300$	<sup>(c)</sup>
HIP 78530 B	$137.2 \pm 1.5$	0.075	$\approx 10500$	B9V	$2700 \pm 100$	M7 $\pm$ 0.5	$23 \pm 2$	$623 \pm 8$	<sup>(d)</sup>

**References.** <sup>(a)</sup>Galli et al. (2018); <sup>(b)</sup>Lallement et al. (2019); <sup>(c)</sup>Aller et al. (2013); <sup>(d)</sup>Lachapelle et al. (2015).

## 2. Target description

The three companions have close physical properties and spectral types (M8-M9), yet they were selected because they come with different configurations (mass ratio with the host star, projected separation; see Table 1):

**HIP 78530 B.** Was identified by Kouwenhoven et al. (2005) at a separation of  $4.536 \pm 0.006''$  from the  $\sim 2.5 M_{\odot}$  B9V star (Houk & Smith-Moore 1988). HIP 78530 A. Lafrenière et al. (2011) confirmed the companion is co-moving with the primary star. The projected separation between the two objects now corresponds to  $623 \pm 8$  au using the *Gaia*-DR2 distance ( $137.2 \pm 1.5$  pc; Gaia Collaboration 2018). The Banyan  $\Sigma$  tool (Gagné et al. 2018) and the DR2 astrometry confirms the star is a high-probability member (99.9%) of the Upper-Scorpius association. Lafrenière et al. (2011) has provided a medium-resolution ( $R_{\lambda} \sim 5300$  to 6000) spectrum of the companion covering the 1.15–2.40  $\mu\text{m}$  wavelength range. Lachapelle et al. (2015) also presented a lower-resolution spectrum ( $R_{\lambda} \sim 1350$ ) but extending down to 1  $\mu\text{m}$ . The spectra confirm the companion is a young M7  $\pm$  0.5 dwarf. Lachapelle et al. (2015) estimate a  $T_{\text{eff}}$  of  $2700 \pm 100$  K and a luminosity of  $\log(L/L_{\odot}) = -2.53 \pm 0.09$  relying on the HIPPARCOS distance available at that time. These latter authors find a mass of  $23 \pm 2 M_{\text{Jup}}$  assuming an age of 10 Myr for Upper-Scorpius. The primary star has no noticeable excess emission (Carpenter et al. 2009; Luhman & Mamajek 2012; McDonald et al. 2017) and low extinction ( $A_v = 0.48$  Neckel & Klare 1980).

**HIP 77900 B.** Was identified in UKIDSS and Pan-STARRS 1 images by Aller et al. (2013) from its red colors. It is located at a projected separation of  $21.8''$  from the B6 star (Garrison 1967) HIP 77900, a high probability member of Upper-Sco (97.6% membership probability according to Banyan  $\Sigma$ ). Unlike for the case of HIP 78530 B, the authors did not re-observe the target to check whether it shares the proper motion of the primary star. However, they obtained a low-resolution ( $R_{\lambda} \sim 100$ ) spectrum of the source covering the 0.8–2.5  $\mu\text{m}$  range whose features are indicative of a young M9 ( $\pm 0.5$ ) object from Upper-Sco, and therefore argued that HIP 77900 B is bound to the star. We re-discuss the physical association of the two objects in Sect. 6.1.

**USco 1610-1913 B.** Was identified by Kraus & Hillenbrand (2008) and confirmed to be co-moving with the K7 star GSC 06209-00691 (Kraus & Hillenbrand 2008, 2009; Kraus et al. 2014). The companion was last found at  $5.837 \pm 0.006''$  from the star, now corresponding to a separation of  $779 \pm 9$  au at the *Gaia*-DR2 distance of the primary. Aller et al. (2013) presented a 0.8–2.5  $\mu\text{m}$  low-resolution ( $R_{\lambda} \sim 100$ ) spectrum of the object confirming its youth and substellar nature. These latter authors estimated a M9  $\pm$  0.5 spectral type and found the companion to be four times overluminous with respect

to HIP 77900 B which shared the same spectral properties at this spectral resolution. The spectral type was confirmed by Lachapelle et al. (2015) from a medium-resolution ( $R_{\lambda} \sim 5300$  to 6000) NIR (1.15–2.40  $\mu\text{m}$ ) spectrum of the companion. These latter author find  $T_{\text{eff}}$  in the range 2300–2700 K for the object using DRIFT-PHOENIX and BT-SETTL atmospheric models with a large spread in  $T_{\text{eff}}$  values depending on the wavelength interval considered for the fit. Their analysis also confirms the over-luminosity of the object for the inferred temperature. However, the star had no measured parallax at that time, and the average distance of Upper-Sco from de Zeeuw et al. (1999) was assumed. A second companion (hereafter USco 1610-1913 Ab) was discovered at a projected separation of  $19.4 \pm 0.3$  au (Kraus et al. 2008) from USco 1610-1913 A. USco 1610-1913 Ab has a mass of  $103 \pm 24 M_{\text{Jup}}$  using the contrast reported in Kraus et al. (2008), the new *Gaia*-DR2 distance of USco 1610-1913 A (assuming it is unbiased; see Sect. 6.1), and the Baraffe et al. (2015) tracks at an age of 5–11 Myr.

The six young and isolated free-floating objects (see Table 2) were selected from the sample of Lodieu et al. (2008) late-M/early-L Upper-Sco brown dwarfs. These latter authors also report low-resolution ( $R_{\lambda} \sim 1700$ ) spectra over 1.15–2.50  $\mu\text{m}$  of the sources. Low-resolution ( $R_{\lambda} \sim 1350$ ) multi-epoch red-optical (0.57–0.88  $\mu\text{m}$ ) spectra of these objects have also been collected by Lodieu et al. (2011). The spectra of USco J1610-2239 and USco J1607-2211 exhibit a  $H_{\alpha}$  line. No emission line was detected at that time in the spectra of the remaining objects. Dawson et al. (2013) and Luhman & Mamajek (2012) do not find noticeable infrared excess (up to 22  $\mu\text{m}$ ) for USco J1610-2239, USco J1607-2211 or USco J1607-2242. This is not the case for USco J1606-2335 and USco 1608-2315. The former is found to have *Spitzer* [4.5] and WISE W2 photometry indicative of a disk excess (Luhman & Mamajek 2012), and the latter is found to have a W1-W2 color suggestive of an excess (Dawson et al. 2013) but that excess is not confirmed by Luhman & Mamajek (2012) using similar data. *Gaia*-DR2 distances of  $128.5^{+15.4}_{-12.4}$  pc and  $119.3^{+20.8}_{-15.4}$  pc are available for USco J1610-2239 and USco J1607-2211. Using Banyan  $\Sigma$  (Gagné et al. 2018), we find that the two objects have a 99.6 and 94.9% chance, respectively, of belonging to Upper-Scorpius based on kinematics. USco J1608-2315 also has a *Gaia*-DR2 parallax value ( $\pi = 4.5073 \pm 1.1874$  mas). The object is found at a greater distance than the typical Upper-Sco members and therefore Banyan  $\Sigma$  estimates a lower probability of membership to the association (59.7%). The large error of DR2 for this object leads us to doubt this probability, noting that the target has spectral features clearly indicative of a membership to Upper-Sco (e.g., Lodieu et al. 2008; Bonnefoy et al. 2014). To conclude, adaptive-optics imaging and sparse aperture masking observations (Biller et al. 2011; Kraus & Hillenbrand 2012) of the sources exclude companions with similar masses down to  $\sim 10$  au.

**Table 2.** Observing log.

Target	Date (yyyy-mm-dd)	UT Start-Time (hh:mm)	DIT (s)	NDIT	NEXP	⟨Seeing⟩ ( $''$ )	Airmass	Notes
USco 161031.9-16191305 B	2014-04-02	08:45	190/190/200	1/1/1	8/8/8	0.75	1.02	
HIP 77900 B	2014-04-12	05:45	190/190/197	1/1/1	14/14/14	1.14	1.03	
	2014-04-12	08:38	190/190/197	1/1/1	14/14/14	1.01	1.10	
HIP 78530 B	2014-06-09	04:08	190/190/197	1/1/1	14/14/14	0.50	1.03	
	2014-06-09	05:14	190/190/197	1/1/1	14/14/14	0.85	1.15	
USco J160723.82-221102.0	2014-04-22	09:01	190/190/197	1/1/1	8/8/8	0.73	1.20	
	2014-06-14	23:50	190/190/197	1/1/1	14/14/14	0.52	1.33	
USco J160606.29-233513.3	2014-06-25	04:13	190/190/197	1/1/1	14/14/14	0.86	1.14	
	2014-06-30	03:09	190/190/197	1/1/1	14/14/14	0.69	1.06	
	2014-07-04	01:05	190/190/197	1/1/1	16/16/16	0.65	1.02	
	2014-07-29	00:44	190/190/197	1/1/1	16/16/16	0.67	1.03	
USco J161047.13-223949.4	2014-06-30	04:21	190/190/197	1/1/1	14/14/14	0.88	1.20	(1)
	2014-07-01	03:26	190/190/197	1/1/1	6/6/6	1.03	1.06	
	2014-07-01	04:04	190/190/197	1/1/1	14/14/14	1.14	1.16	
USco J160737.99-224247.0	2014-07-04	05:07	190/190/197	1/1/1	14/14/14	1.38	1.51	
	2014-07-29	02:07	190/190/197	1/1/1	14/14/14	0.61	1.16	
	2014-07-29	03:08	190/190/197	1/1/1	14/14/14	0.54	1.39	
	2014-08-02	01:49	190/190/197	1/1/1	16/16/16	1.33	1.16	
	2014-08-02	03:09	190/190/197	1/1/1	16/16/16	1.12	1.51	
USco J160818.43-223225.0	2014-07-02	03:16	190/190/197	1/1/1	14/14/14	1.11	1.07	
	2014-07-02	04:26	190/190/197	1/1/1	14/14/14	0.80	1.25	
	2014-07-03	03:24	190/190/197	1/1/1	14/14/14	1.03	1.10	
	2014-07-04	03:49	190/190/197	1/1/1	14/14/14	1.14	1.16	
USco J160828.47-231510.4	2014-06-15	01:00	190/190/197	1/1/1	14/14/14	0.95	1.11	
	2014-06-20	05:06	190/190/197	1/1/1	14/14/14	1.20	1.23	

**Notes.** The seeing is measured at  $0.5 \mu\text{m}$  and given for the visible arm. The DIT (Detector Integration Time) values refer to the individual exposure time per frame in the UVB, VIS, and NIR arms, respectively. NDIT are the number of individual frames per exposure, and  $N_{\text{EXP}}$  the number of exposures in the UVB, VIS, and NIR arms. <sup>(1)</sup>no STD observed.

The optical and NIR spectra of the free-floating sources presented here have already been briefly introduced in [Lodieu et al. \(2018\)](#). These sources have increased spectral resolution or are extended at shorter wavelengths compared to previous spectroscopic data, and thus allow us to study the long-term variability of the  $H_\alpha$  line. We therefore re-analyze them in order to use them as empirical templates for the characterization of the three companions HIP 78530 B, HIP 77900 B, and USco 1610-1913 B.

### 3. Observations and data reduction

We used the X-shooter seeing-limited medium-resolution spectrograph mounted at UT2 Cassegrain focus ([Vernet et al. 2011](#)). The wide wavelength coverage of the instrument (300-2480 nm) is ideally suited for the characterization of accreting BDs with emission line series. We chose the  $1.6''$ ,  $1.5''$ , and  $1.2''$ -wide slits for the UVB, VIS, and NIR arms corresponding to resolving powers  $R_\lambda = \lambda/\Delta\lambda = 3300$ , 5400, and 4300, respectively. This setup was adopted for all our targets. The observing log is reported in Table 2. The slits were oriented perpendicular to the position angles of the companions in order to mitigate the flux contamination of the host stars. Each target was observed following an ABBA strategy to evaluate and remove the sky emission at the data processing step. Spectrophotometric standard stars were observed as part of the observatory calibration plan; they are not reported in the log as they were not used for our reduction or analysis.

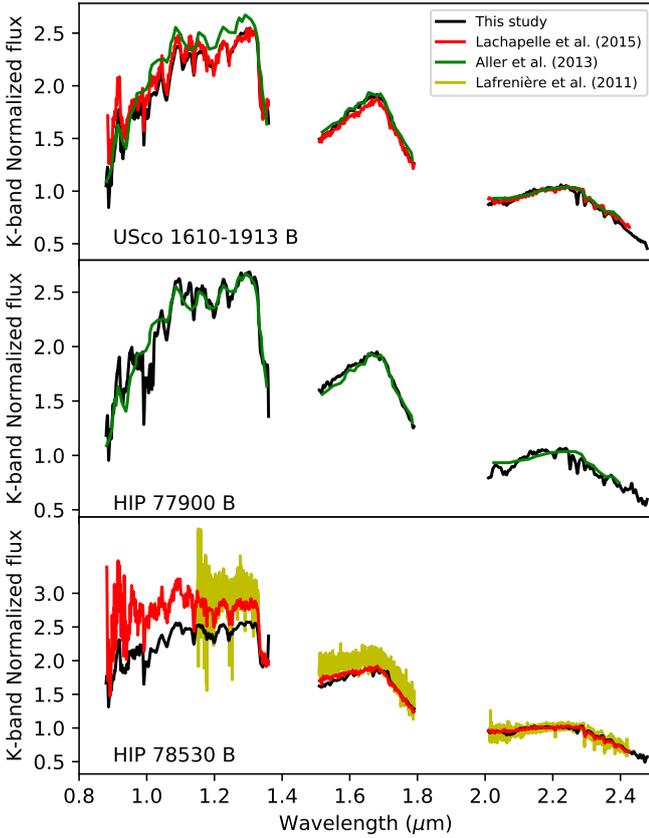
We used the ESO reFLex data-reduction environment ([Freudling et al. 2013](#)) to run the X-shooter pipeline version 2.9.3

on the raw data ([Modigliani et al. 2010](#)). The pipeline produces two-dimensional, curvature-corrected, and flux-calibrated spectra for each target and epoch of observation (trace). The spectra were extracted from the traces using a custom IDL script. The flux in each wavelength channel at the position of the source was averaged within 720 mas aperture in the UVB and VIS arms, and a 1120 mas aperture in the NIR arm. The script computed the noise at the position of the source into each spectral channel following the procedure described in [Delorme et al. \(2017a\)](#). The residual nonlinear pixels in the spectra were removed using the kappa-sigma clipping method. The telluric corrections were evaluated and removed using the molecfit package ([Smette et al. 2015](#); [Kausch et al. 2015](#)). The spectra at each epoch were corrected from the barycentric velocity and renormalized using the epochs when the sky transmission was photometric as an anchor point. Our flux calibration was checked by computing the 2MASS or MKO synthetic photometry from the spectra and comparing the values to published ones ([Lodieu et al. 2008](#)).

## 4. Physical properties

### 4.1. Empirical analysis

[Lachapelle et al. \(2015\)](#) derived the spectral types of USco 1610-1913 B and HIP 78530 B using NIR spectra of these companions. We noticed significant differences between them and the X-shooter spectrum of HIP 78530 B presented here (see Fig. 1). We noticed the same difference for the same target in comparing with the spectrum from [Lafrenière et al. \(2011\)](#). The X-shooter



**Fig. 1.** Comparison between our spectra (black from X-shooter), those from Lachapelle et al. (2015) in red ( $R = 900$ ) and Aller et al. (2013) in green (digitized), and those from Lafrenière et al. (2011) in yellow ( $R = 5300\text{--}6000$ ).

spectrum of USco 1610-1913 B is consistent with the low-resolution spectrum of Aller et al. (2013). We therefore conclude that the differences in the  $J$ -band spectrum of HIP 78530 B may stem from flux losses affecting long-slit observations with AO-fed spectrographs.

#### 4.1.1. Line identification

Figures 2 and 3 show the UVB+optical,  $J$ -,  $H$ -, and  $K$ -band segments of the X-shooter spectra of HIP 78530 B, HIP 77900 B, and USco 1610-1913 B together with two young, isolated brown dwarfs USco 1607-2211 (M 8.5) and TWA 26 (M 9). In the optical part, one can easily identify in Fig. 2 (left) the detection of the strong  $H_\alpha$  line ( $0.6563 \mu\text{m}$ ). Additional Balmer lines,  $H_\gamma$  ( $0.4340 \mu\text{m}$ ) and  $H_\beta$  ( $0.4861 \mu\text{m}$ ), are also detectable in the X-shooter spectra of USco 1610-1913 B and HIP 77900 B (also HIP 78530 B) indicating the possible presence of accretion or chromospheric activity. The doublet of Ca II- $H/K$  ( $0.3934$ ,  $0.3969 \mu\text{m}$ ) is also detected. The detection of these emission lines is discussed in Sect. 5.

In  $J$ -band, we identified several strong absorption lines, like the neutral sodium (Na I) doublet ( $1.138$  and  $1.141 \mu\text{m}$ ), and the neutral potassium (K I) doublets ( $1.168$ ,  $1.177 \mu\text{m}$  and  $1.243$ ,  $1.254 \mu\text{m}$ ). Neutral iron (Fe I) lines ( $1.189$  and  $1.197 \mu\text{m}$ ) are also present as well as weaker Na I ( $1.268 \mu\text{m}$ ), magnesium (Mn I at  $1.290 \mu\text{m}$ ), and titanium (Ti I at  $1.283 \mu\text{m}$ ) lines. We notice the typical triangular shape of the  $H$ -band which is produced by wide  $\text{H}_2\text{O}$  absorption bands and testifies to the young ages of our objects. In  $K$ -band we found the calcium (Ca I) triplet (at

$1.98 \mu\text{m}$ ) and a weak Na I doublet ( $2.206$ ,  $2.209 \mu\text{m}$ ). We also detect CO bands ( $2.295$ ,  $2.322$ ,  $2.352 \mu\text{m}$ ).

#### 4.1.2. Spectral type and surface-gravity determination

We re-investigated the optical classification of our targets using a standard  $\chi^2$  comparison of our spectra to empirical templates from the Ultracool RIZzo Spectral Library<sup>1</sup>. The RIZzo library is made of spectra of 265 M2-L5 brown dwarfs from Cruz et al. (2003), Cruz et al. (2007), and Reid et al. (2008). We restrained the fit to the  $0.75\text{--}0.86 \mu\text{m}$  range. The results of our spectral fitting are shown in Fig. 4 and are reported in Table 3. The spectral type errors are due to the subgroup increment defined in the library. For USco 1610-1913 B, HIP 77900 B, and HIP 78530 B, we find spectral types of  $M 9 \pm 0.5$ ,  $M 9 \pm 0.5$ , and  $M 8 \pm 0.5$ , respectively, with best fits 2MASS J11582484+1354456 (M 9) and 2MASS J07140394+3702459 (M 8) which are both free-floating objects (determined from BANYAN  $\Sigma$  Tool). We also classified our targets in the NIR using absorption lines respecting the Allers & Liu (2013) scheme. In NIR, we find later spectral types for USco 1610-1913 B and HIP 78530 B than the ones derived by Lachapelle et al. (2015), consistent with the redder slope of the X-shooter spectrum of HIP 78530 B, and because of the revised extinction  $A_V$  values (see also Sect. 4.3) considered for the two systems. The optical spectral types derived for the free-floating BDs are in agreement with those of Lodieu et al. (2018) within error bars.

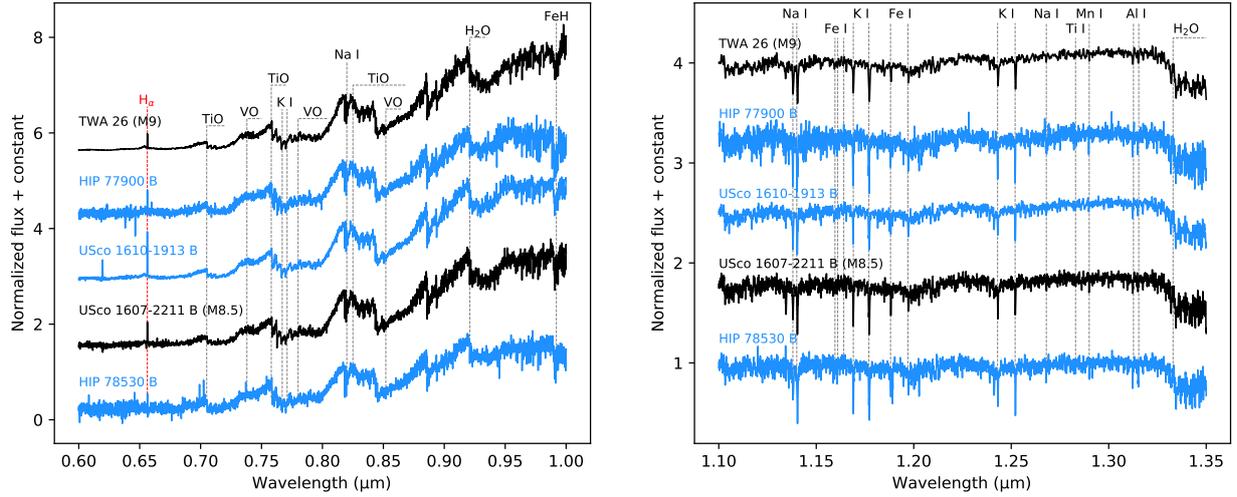
Appendix B shows the systematic differences between each method. The spectral type derived from the  $\text{H}_2\text{O}$  index seems to be one to two subtypes over the one from the visual method. Allers & Liu (2013) explain that the  $\text{H}_2\text{O}$  index could be sensitive to gravity and so can be biased. We choose the spectral type from the visual comparison to avoid this bias.

In addition to the spectral-type determination, we also applied the surface-gravity classification formalized by Allers & Liu (2013). The results are reported in Table 3 and show that HIP 77900 B and HIP 78530 B are identified as young, intermediate-surface-gravity BDs. USco 1610-1913 B is confirmed as a very-low-surface-gravity BD. The gravity class of HIP 78530 B is consistent with that derived by Lachapelle et al. (2015). Our results are consistent with those of Lodieu et al. (2018) for the classification of the young free-floating objects.

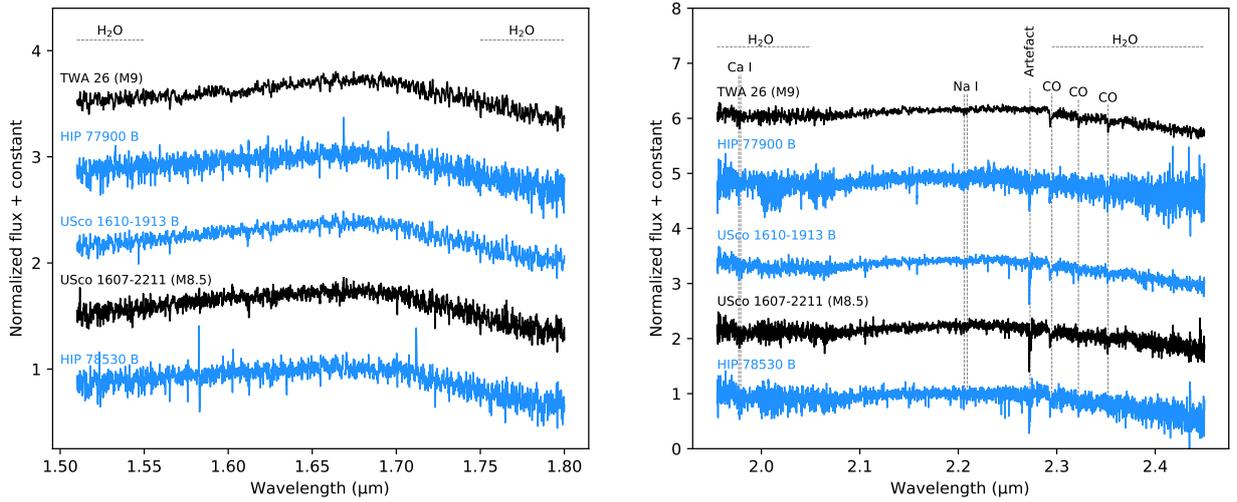
#### 4.1.3. Over-luminosity of USco 1610-1913 B

Figure 5 shows the comparison between the visible and NIR calibrated flux of USco 1610-1913 B with the fluxes of young reference BDs of similar spectral types from our sample with *Gaia* parallaxes. We also include a comparison to the X-shooter spectrum of TWA 26 (Manara et al. 2013). All BDs have been scaled to the distance of USco 1610-1913A. All these objects reproduce the detailed absorptions and pseudo-continuum shape of USco 1610-1913 B spectrum provided that an extra scaling factor of two (TWA 26) and four (USco 1610-2239, HIP 77900 B) is considered. This over-luminosity of USco 1610-1913 B has already been noted by Aller et al. (2013) and Lachapelle et al. (2015). We confirm it over our extended wavelength range and resolution relying on an extended set of comparison objects from the association with now-published parallaxes. We discuss the possible origins of the over-luminosity in Sect. 6.

<sup>1</sup> <https://jgagneastro.com/the-ultracool-rizzo-spectral-library/>



**Fig. 2.** Comparison of the optical spectra normalized at  $0.82 \mu\text{m}$  (*left*) and  $J$ -band normalized at  $1.32 \mu\text{m}$  (*right*) of USco 1610-1913 B, HIP 77900 B, and HIP 78530 B (blue) to the free-floating object USco 1607-2211 from our original sample of spectra of Upper-Scorpius BDs and to the TW Hydrae association member TWA 26 (Manara et al. 2013) (black). All objects have a  $H_{\alpha}$  emission line ( $656.3 \text{ nm}$ ; red label) in addition to molecular and atomic absorption lines typical of late-M dwarfs.



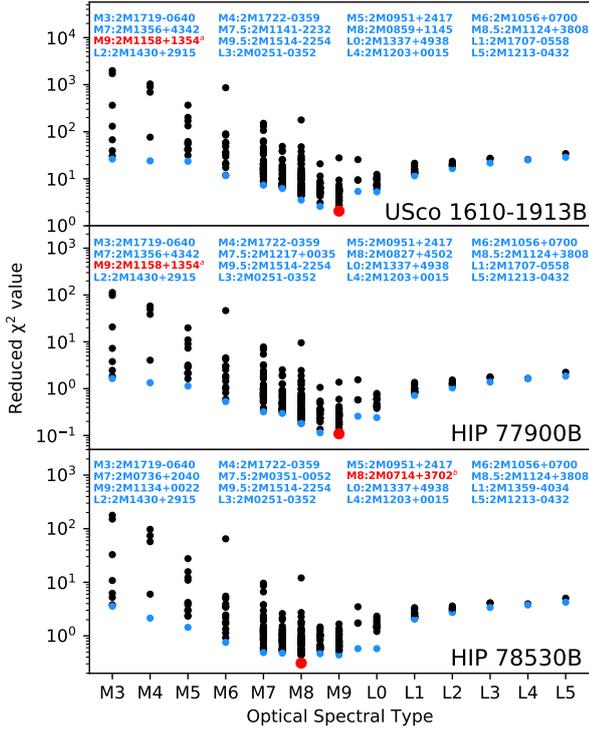
**Fig. 3.** As in Fig. 2 but for  $H$ -band normalized at  $1.65 \mu\text{m}$  (*left*) and  $K$ -band normalized at  $2.15 \mu\text{m}$  (*right*).

**Table 3.** Results of the empirical analysis.

Source	Spectral types				Gravity				Type
	Visual	NIR			Score <sup>(a)</sup>				
		H <sub>2</sub> O (H) <sup>(b)</sup>	H <sub>2</sub> O-1 (J) <sup>(c)</sup>	H <sub>2</sub> O-2 (K) <sup>(c)</sup>	FeH <sub>z</sub>	FeH <sub>j</sub>	K I <sub>j</sub>	H-cont	
USco 1610-1913 B	M9 ± 0.5	M9.1 ± 0.2	L0.1 ± 0.2	M8.9 ± 0.2	2	2	2	2	v-low
HIP 77900 B	M9 ± 0.5	M8.4 ± 0.5	M9.9 ± 0.4	M9.5 ± 0.5	1	2	1	2	int
HIP 78530 B	M8 ± 0.5	M8.4 ± 0.4	M8.4 ± 0.4	M8.2 ± 0.4	1	2	1	2	int
USco 1607-2242	M9 ± 0.5	L1.1 ± 1.9	L1.7 ± 1.5	L0.7 ± 1.7	n	1	2	2	v-low
USco 1608-2232	M9 ± 0.5	L0.9 ± 0.8	L1.5 ± 0.6	L0.1 ± 0.7	2	2	1	2	v-low
USco 1606-2335	M9 ± 0.5	M9.9 ± 0.9	L0.5 ± 0.8	M9.3 ± 1.0	2	1	1	2	int
USco 1610-2239	M9 ± 0.5	M9.9 ± 0.5	L0.3 ± 0.4	M9.3 ± 0.5	2	2	2	2	v-low
USco 1608-2315	M8.5 ± 1.0	L0.0 ± 0.4	L0.6 ± 0.4	M9.1 ± 0.4	2	2	1	2	v-low
USco 1607-2211	M8.5 ± 1.0	M9.4 ± 0.5	L0.4 ± 0.4	M8.3 ± 0.5	2	2	1	2	v-low

**Notes.** The systematic differences about the spectral-type determination are discussed in Appendix B.

**References.** Relations and coefficients: <sup>(a)</sup>Allers & Liu (2013), <sup>(b)</sup>Allers et al. (2007), <sup>(c)</sup>Slesnick et al. (2004).



**Fig. 4.** Chi-squared from the comparison between the X-shooter spectra of USco 1610-1913 B, HIP 77900 B, and HIP 78530 B to the optical spectra of the Ultracool RIZzo spectral library. We indicate the best-fitting object for each group in blue. The  $\chi^2$  minimum for all objects is represented in red. (a) : Cruz et al. (2003). (b) : Reid et al. (2008).

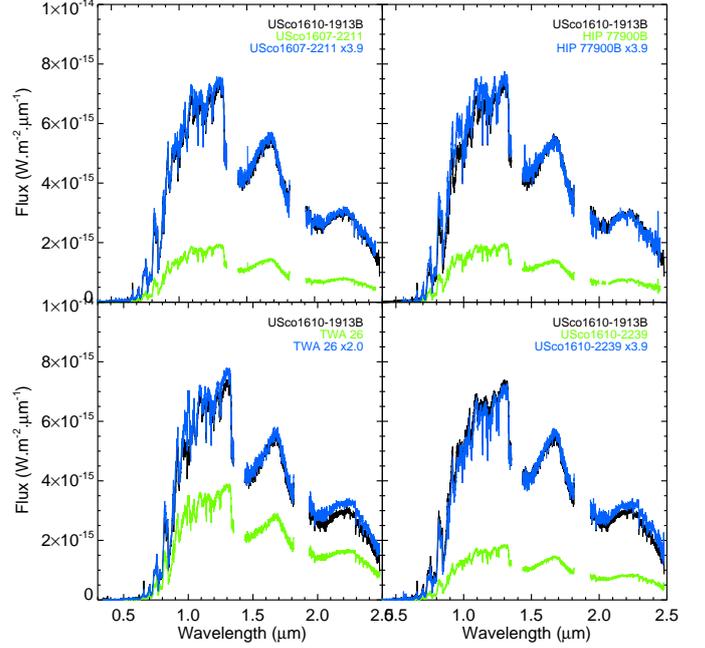
## 4.2. Forward modeling analysis

### 4.2.1. Description of the atmospheric models

We used a forward-modeling approach to determine the atmospheric parameters of the young BDs observed in this study. Forward modeling codes enable comparison of the object spectrum to pre-computed grids of models which include our best knowledge of atmospheric physics. We used grids of synthetic spectra produced by the BT-SETTL15 model (Allard et al. 2012). This model handles the radiative transfer using the PHOENIX code (Hauschildt et al. 1997; Allard et al. 2001). It accounts for convection using the mixing-length theory, and works at hydrostatic and chemical equilibrium. The opacities are treated line by line (details on each element are given in Rajpurohit et al. 2018). The code models the condensation, coalescence, and mixing of 55 types of grains. The abundances of solids are determined comparing the timescales of these different processes at each layer. In this study, we considered the predictions of the BT-SETTL15 model with  $T_{\text{eff}}$  ranging from 2100 to 3000 K (in steps of 100 K), and a range of  $\log(g)$  from 3.5 to 5.5 dex (in steps of 0.5 dex). We assumed a solar metallicity  $M/H = 0.0$ , in broad agreement with the values reported in Sco-Cen (Bubar et al. 2011). These grids have been extensively used in previous studies of young BDs (Manjavacas et al. 2014; Bonnefoy et al. 2014; Delorme et al. 2017b; Bayo et al. 2017), but never as part of a Bayesian methodology, as developed here with the ForMoSA code.

### 4.2.2. The ForMoSA code

For this work, we chose to develop our own forward modeling code relying on the Nested Sampling procedure (Skilling 2006).



**Fig. 5.** Comparison of the flux-calibrated 0.4–2.5  $\mu\text{m}$  spectra of USco 1610-1913 B (black) to those of reference objects scaled to the distance of the companion (green). The companion is 2.0–3.9 times more luminous than objects with the same spectral type.

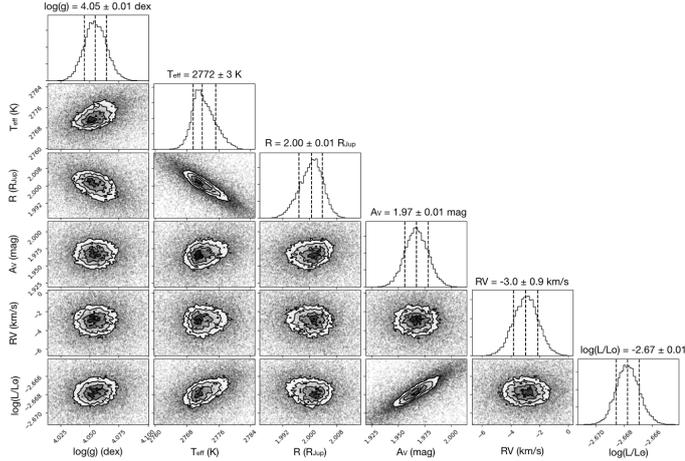
The method explores and recursively isolates different patches of likelihood levels in the parameter space. It offers several advantages over classical Markov-chain-Monte-Carlo algorithms also used for the forward modeling (e.g., Bonnefoy et al. 2018; Samland et al. 2017). The approach avoids missing local minimum within vast and degenerate parameter spaces while ensuring the convergence of the exploration.

The code ForMoSA (for FORward MOdeling for Spectral Analysis) takes as input an observed spectrum with associated error bars and any grid of synthetic spectra (here the BT-SETTL15 grid). The Nested Sampling is handled by the *nestle* Python module<sup>2</sup>. ForMoSA re-samples the data and the models in order to make them comparable. The grid of model spectra are first interpolated onto the wavelength grid of the observation and degraded to the spectral resolution of the instrument that acquired the data. The optical spectra of our targets and the models were degraded to  $R_{\lambda} = 3300, 5400$  and  $4300$ , similar to the UVB, VIS, and NIR parts of the spectrum, respectively.

In our case, we hypothesize that data points are independent in the observed spectra, and therefore the likelihood is derived from the  $\chi^2$  value. To compute  $\chi^2$  at each step, we need to generate a model spectrum for a set of free-parameters that does not necessarily exist in the original grid of spectra. Therefore, we generated a model spectrum on demand following a two-step process:

A preliminary phase consists in reducing the grid meshes. To do so, ForMoSA interpolates and reduces each  $T_{\text{eff}}$  increment to 10 K and  $\log(g)$  increments to 0.01 dex. We considered the linear and bicubic spline interpolation approaches, and finally selected the bicubic spline interpolation which better accounts for the flux variation through the grid. This step needs to be taken only once and ensures a regular grid. In doing this, we increase the accuracy of the second interpolation phase.

<sup>2</sup> <http://kylebarbary.com/nestle/>



**Fig. 6.** Posteriors of HIP 78530 B in using ForMoSA on the  $J + H + K$  and with the extinction parameter free.

The second phase arises in the course of the nested sampling process when a new point in the parameter space is defined. The closest neighbors approach was found to provide the best trade-off between the reliability of the interpolation process and the computation time needed to run the interpolation.

Each synthetic spectrum gives the flux at the top of the atmosphere. The comparison with the observed spectrum also requires multiplication of the model by a dilution factor  $C_k = (\frac{R}{d})^2$ , with  $R$  the object radius and  $d$  the distance. We adopt distances for the host stars from the *Gaia* DR2. We considered flat priors on  $T_{\text{eff}}$  (2100–2900 K) and  $\log(g)$  (3.5–5.5 dex). Here,  $T_{\text{eff}}$  and radius are linked together by the luminosity (Boltzmann law) so we have chosen a flat prior on  $R$  (0.5–30.0  $R_{\text{Jup}}$ ) to be conservative and ensure we do not limit the exploration of  $T_{\text{eff}}$ . We also provide the luminosity from the posterior distributions of  $R$  and  $T_{\text{eff}}$ . ForMoSA can also consider interstellar extinction ( $A_v$ ) as a free parameter using the extinction law from [Fitzpatrick & Massa \(2007\)](#), the radial velocity (RV) by a Doppler shifting law<sup>3</sup>, and the projected rotational velocity  $v \sin(i)$  according to the rotational broadening law from “The Observation and Analysis of Stellar Photospheres” by Gray<sup>4</sup>. Figure 6 illustrates a typical output of ForMoSA on HIP 78530 B. The method allows us to identify correlations between parameters such as  $T_{\text{eff}}$  and  $R$ .

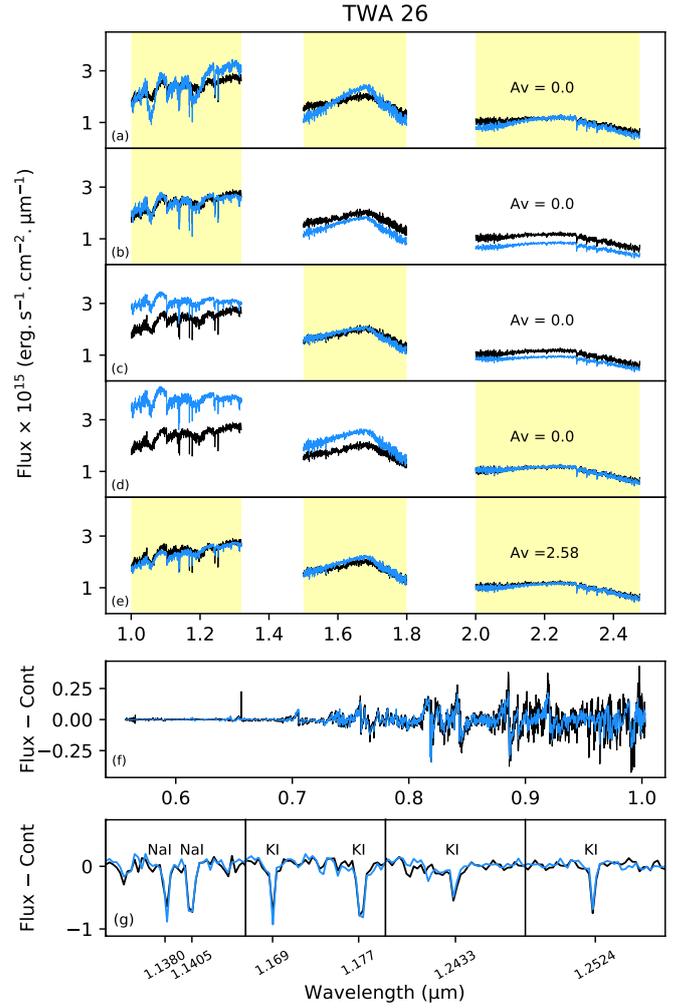
### 4.3. Results

As a safety check, the ForMoSA code was applied to our three companions HIP 78530 B, HIP 77900 B, and USco 1610-1913 B and two well-known young BDs, TWA 26 and TWA 29, with similar spectral types and ages ( $\sim 8$  Myr) and observed by [Manara et al. \(2013\)](#). We considered wavelengths from 1.0 to 2.5  $\mu\text{m}$  in all our fits to avoid biases related to the residual contamination of HIP 78530 B and ran a homogeneous analysis on all objects. The results are shown in Figs. 7–11. The numerical values are given in Tables C.1–C.2.

Panels a–d of Figs. 7–11 show the X-shooter spectra (black) with the resulting best fit (blue) considering different spectral windows ( $J + H + K$ ,  $J$ ,  $H$  and  $K$ , respectively), and a fixed-extinction assumption from the *Gaia* DR2 extinction maps and values at the location of our targets ([Lallement et al. 2019](#)).

<sup>3</sup> Function `PyAstronomy.pyasl.dopplerShift`

<sup>4</sup> Function `PyAstronomy.pyasl.rotBroad`



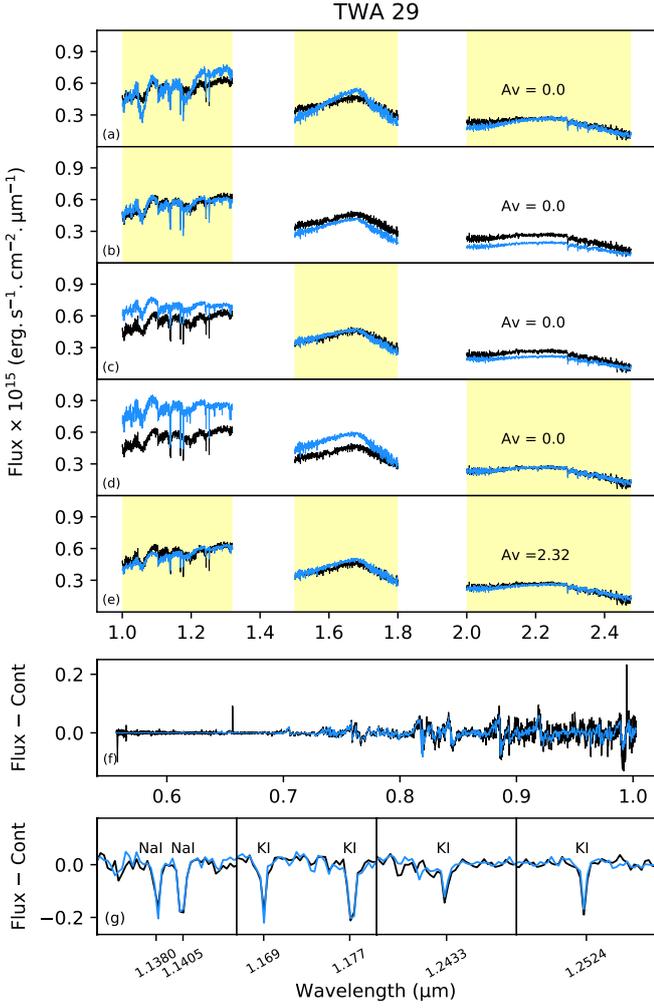
**Fig. 7.** Best fits of TWA 26 (in black) by BT-SETTL15 models (in blue) using different portions of the spectrum for the fit (shaded yellow rectangles). We define the fitting zones as follows:  $J = 1.0\text{--}1.32 \mu\text{m}$ ;  $H = 1.5\text{--}1.8 \mu\text{m}$ ;  $K = 2.0\text{--}2.48 \mu\text{m}$ . We perform the following fits: (a)  $J + H + K$ ; (b)  $J$ ; (c)  $H$ ; (d)  $K$ ; (e)  $J + H + K$  with  $A_v$  as a free parameter; (f) the optical part (0.56–1.00  $\mu\text{m}$ ) of the flux-continuum and  $v \sin(i)$  as a free parameter; and (g) examples of lines fitted on the flux-continuum.

From these maps, we calculate the  $A_0$  extinction at 550.0 nm and assume that the difference with the  $A_v$  extinction is negligible ( $A_0 \approx A_v$ ). The fitting spectral range is indicated by the yellow background.

Panel e shows the best fit when using the complete  $J + H + K$ -band spectral range, and adding the extinction value  $A_v$  this time as a free parameter. We reddened the models with an extinction function in the code ([Fitzpatrick & Massa 2007](#)).

Panel f shows the best fit focused on the optical part (0.56–1.00  $\mu\text{m}$  for all targets but 0.80–1.00  $\mu\text{m}$  for HIP 78530 B). We estimate the pseudo-continuum from the original X-shooter spectrum by degrading it to a very low spectral resolution ( $R_\lambda = 100$ ). We then subtract this pseudo-continuum from the original section to highlight line features. We add the  $v \sin(i)$  as a free parameter with this fit. We determine the radius analytically with the relation from [Cushing et al. \(2008\)](#).

Panel g shows of zoomed view on a the gravity- and metallicity-sensitive lines of K I and Na I with the best-fitting solution. We subtracted the pseudo-continuum using the same

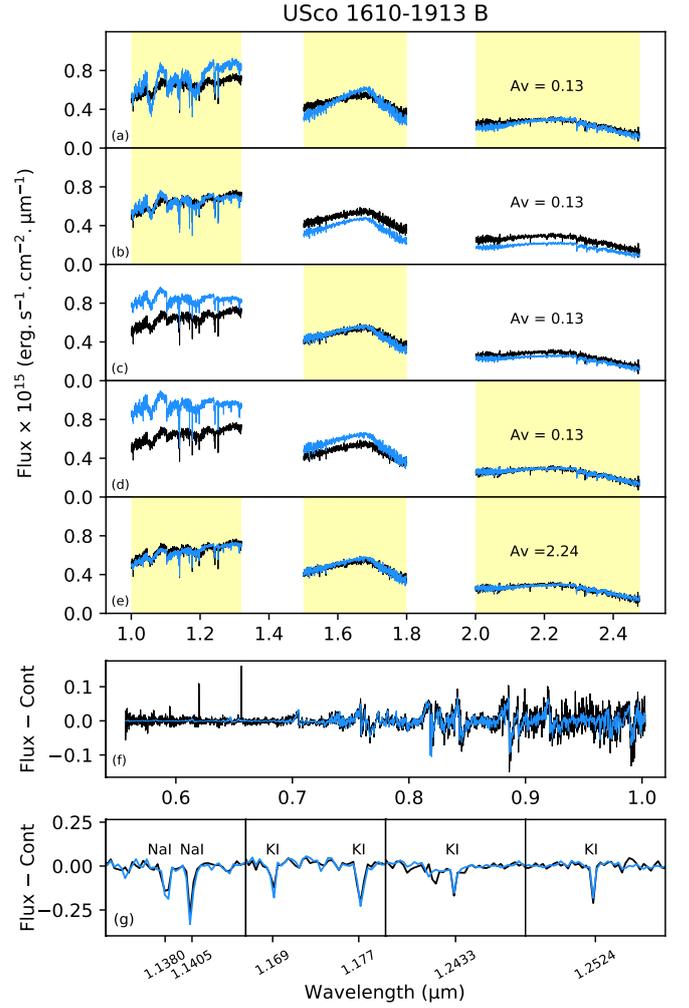


**Fig. 8.** Same as Fig. 7 but for TWA 29.

method as in panel f. The determination of the radius is also analytic.

Generally, the results show that the BT-SETTL15 models fail to consistently reproduce the pseudo-continuum of the X-shooter spectra of all objects at all wavelengths (visible and NIR) with the same range of physical parameters. The same problem arises when considering a  $\chi^2$  test on the original grid of BT-SETTL15 spectra. This is highlighted in panels a–d of all figures, where the best-fit solution varies considerably depending on which spectral range is fit. Similar discrepancies were evidenced by Manjavacas et al. (2014) using older releases of the models (Allard et al. 2011, 2012, 2013; Lachapelle et al. 2015; Bayo et al. 2017). Therefore, the problem remains in the 2015 release of the models.

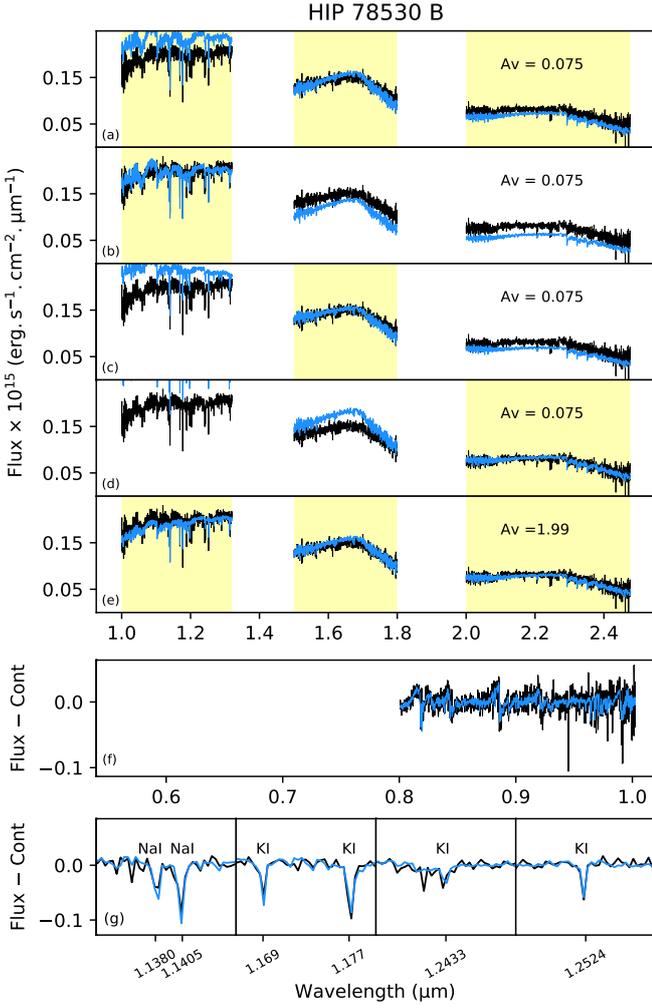
The posteriors of  $T_{\text{eff}}$  are strongly tied to the pseudo-continuum shape. Consequently, they are affected by the choice of the spectral range used to estimate the best fit. For instance, the  $T_{\text{eff}}$  is generally higher from a fit using the *J*-band compared to a fit using *H*- or *K*-band. The surface-gravity is also affected as it remains sensitive to the shape of the VO and H<sub>2</sub>O absorption bands. Notably, the radius, which is linked to the flux dilution factor, seems to be mostly consistent when using three different fitting bands. In addition to the best-fitting solution, the ForMoSA code provides the errors on the posterior solutions. The errors on the posterior solutions are tightly connected to the errors bars on the spectra themselves by the likelihood function. Given the high signal-to-noise ratio (S/N) of the X-shooter spectra



**Fig. 9.** Same as Fig. 7 but for USco 1610-1913 B.

for HIP 78530 B, HIP 77900 B, USco 1610-1913 B, TWA 26, and TWA 29, the resulting fitting error bars are about one to two orders of magnitude smaller than the systematic errors associated with the choice of the spectral fitting window and the non-perfect match of the BT-SETTL15 models with our spectra at all observed wavelengths (see Tables C.1–C.2). Our adopted solutions in  $T_{\text{eff}}$ ,  $\log(g)$ , and  $R$  are therefore derived from the average and dispersion of the solutions from the different spectral fitting windows with the extinction value given by Lallement et al. (2019). The bolometric luminosity is calculated with the Stefan–Boltzmann law.

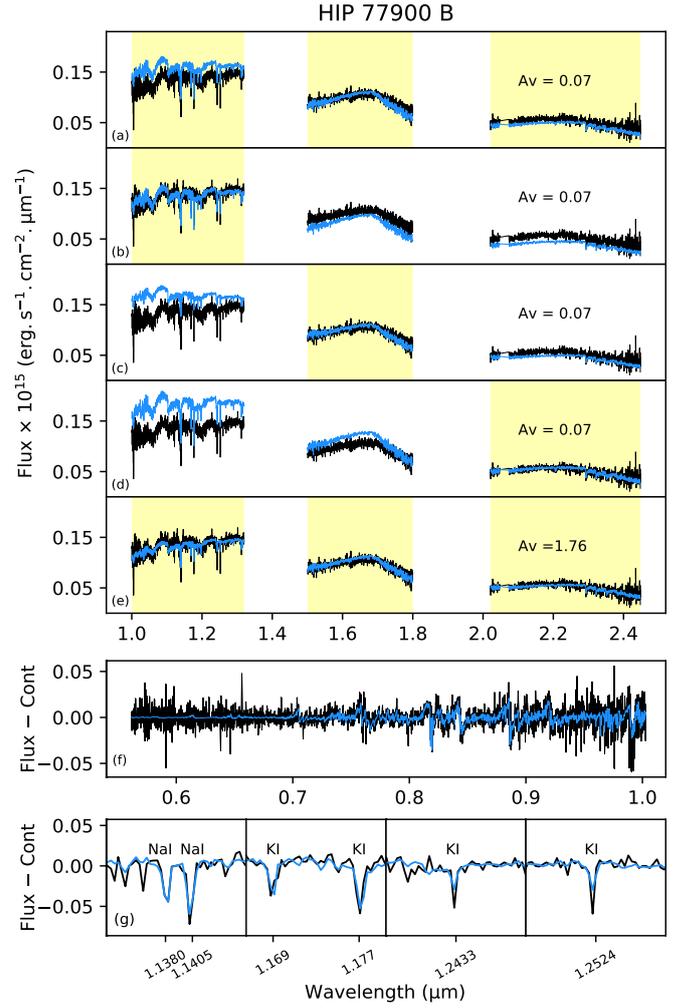
In addition to the different spectral fitting window, the ForMoSA code was also applied with the extinction  $A_V$  as a free parameter. The resulting posteriors can be directly compared with the ones obtained with the *Gaia* DR2 values at the location of our targets (Lallement et al. 2019). Surprisingly, with the simple use of an interstellar extinction law correction, we considerably improve the goodness of the fits of all targets (see Figs. 7–11 panel e). Considering that our targets have no extinction (both sources are located at less than 80 pc; TWA 26 has a transition disk around it but the flux excess appears at  $\lambda > 20 \mu\text{m}$ , Riaz & Gizis 2008; TWA 29 has no known disk, Rodriguez et al. 2015) or precisely known and low interstellar extinction values ( $A_V \leq 0.13$  for our three Upper-Sco companions), the excellent good fit of all objects with artificial  $A_V$  values of 1.76–2.58 mag indicates a missing physical component in the models. As all



**Fig. 10.** Same as Fig. 7 but for HIP 78530 B. We avoid the flux inconsistency presented in Sect. 4.1 by using the wavelength range 0.8–1.0  $\mu\text{m}$  in panel f.

objects are affected, it is very likely that the origin is not circumstellar, but linked to the current state-of-the-art of BT-SETTL15 models, as is for example the complexity of the dust formation process or the dust opacity (Pavlenko et al. 2007). Systematically testing how this deficiency evolves with lower effective temperature, age (surface-gravity), and gravity would be very interesting.

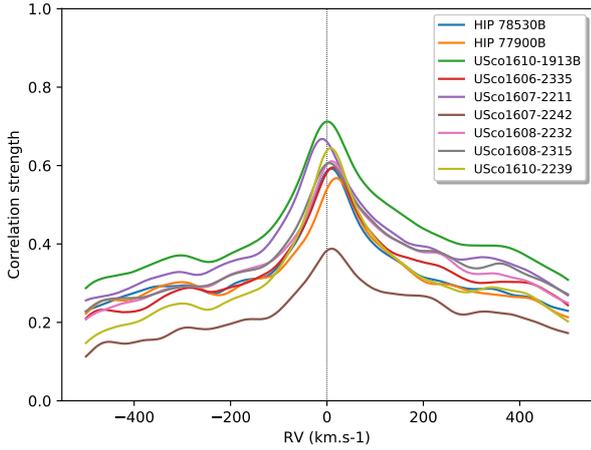
As an additional step to exploit the medium resolution of our X-shooter spectra, the radial and rotational velocity information (line profile and offset) has been incorporated into ForMoSA as additional fitting parameters. The RV can be adjusted on the full spectral window. For the adjustment of  $v \sin(i)$ , we restricted the fitting window to the optical part (0.56–1.00  $\mu\text{m}$ ) with the continuum subtracted to minimize the computation time. This choice is driven by the higher spectral resolution in optical ( $R=5400$ ) and the presence of various absorption lines (NaI, FeH or VO). In Tables C.1 and C.2, one can see that the RV results strongly depend on the choice of the fitting spectral window. We adopted the RV value from the optical fit for the same reasons as for the  $v \sin(i)$ . The two identified causes of this discrepancy are the slope issues in models and a systematic error in the wavelength calibration of the spectra. We therefore decided to independently compute the RVs using a cross-correlation approach between our observed spectra and a spectral template generated by the



**Fig. 11.** Same as Fig. 7 but for HIP 77900 B.

BT-SETTL15 code at  $T_{\text{eff}}=2400$  K and a  $\log(g)=4.0$  dex (see Fig. 12). For most cases, there is a good agreement between the cross-correlation results and the ForMoSA ones in the optical that we therefore adopt as final values. For the rotational velocity, the limited X-shooter spectral resolution does not allow the measurement of the low  $v \sin(i)$  of our targets, but rather places an upper limit of roughly  $\leq 50$   $\text{km s}^{-1}$ . This limit is consistent with the 55  $\text{km s}^{-1}$  limit expected for a resolution of about  $R = 5400$  in the visible arm. Considering the adopted values of  $T_{\text{eff}}$ ,  $\log(g)$ ,  $R$ ,  $RV$ ,  $v \sin(i)$  and  $L$  using the fixed extinction values of Lallement et al. (2019), we now detail the results of ForMoSA target by target.

**TWA 26 and TWA 29.** Both targets are well known and their X-shooter spectra have been analyzed as a sanity check of the ForMoSA code. They have been classified by Manara et al. (2015) as late-M dwarfs with spectral types M9 $\gamma$  and M9.5, respectively. Both are members of the TW Hydrae association, with an age estimate of 8 Myr, and are located at a distance of 49 pc and 83 pc, respectively. They have no extinction observed in their line of sight. Both were characterized by Filippazzo et al. (2015) using a complimentary approach to our work. Exploiting the spectral energy distribution from the visible to the NIR and the mid-infrared (MIR), Filippazzo et al. (2015) derived the bolometric luminosities of these two young brown dwarfs with known distances. Using evolutionary model



**Fig. 12.** Correlation strength as a function of RV for each of our objects. We use the synthetic spectra at  $T_{\text{eff}} = 2400$  K and  $\log(g) = 4.0$  dex from BT-SETTL15.

**Table 4.** Physical properties of TWA 26 and TWA 29.

	$\log(L/L_{\odot})$	$R$ ( $R_{\text{Jup}}$ )	$\log(g)$ (dex)	$T_{\text{eff}}$ (K)	Ref.
TWA 26	$-2.71 \pm 0.09$	$2.20 \pm 0.22$	$4.14 \pm 0.16$	$2552 \pm 188$	(a)
	$-2.83^{+0.38}_{-0.36}$	$1.97^{+0.87}_{-0.52}$	$\leq 4.11$	$2547^{+94}_{-136}$	(b)
TWA 29	$-2.79 \pm 0.15$	$2.00 \pm 0.23$	$4.13 \pm 0.15$	$2391 \pm 249$	(a)
	$-2.77^{+0.10}_{-0.11}$	$2.14^{+0.15}_{-0.10}$	$\leq 4.33$	$2522^{+58}_{-99}$	(b)

**References.** (a)Filippazzo et al. (2015), (b)this work with the adopted values (see Tables C.1–C.2).

predictions from solar metallicity SMHC08 (Saumon & Marley 2008) and DMESTAR (Feiden & Chaboyer 2012, 2013) isochrones, Filippazzo et al. (2015) derived the predicted radii and masses, and therefore the object effective temperatures using the Stefan–Boltzmann law as well as the surface gravities. The results are reported in Table 4, and roughly agree within the error bars with those obtained by the ForMoSA forward modeling of the X-shooter spectra of TWA 26 and TWA 29. As the three Upper-Sco companions HIP 78530 B, HIP 77900 B, and USco 1610-1913 B scan a similar range of temperatures and surface gravities as TWA 26 and TWA 29, this test appears to support the use of ForMoSA to explore their physical properties. These three companions have no known MIR photometry or spectroscopy, and therefore a direct determination of the bolometric luminosity as done by Filippazzo et al. (2015) is not possible here. Based on a fit using the optic wavelength range, we derive a  $v \sin(i) = 66 \pm 2$  km s $^{-1}$  for TWA 29. This is the only object for which we are not limited by the resolving power of the instrument.

**USco 1610-1913 B.** For their study of this companion, Lachapelle et al. (2015) used an incorrect value of  $A_v = 1.1$  given by Carpenter et al. (2009). Using the method described in Carpenter et al. (2008, 2009) derived this relatively high  $A_v$  using the optical (Johnson  $B$  and  $V$ , *Tycho*  $B_T$  and  $V_T$ ) and NIR (2MASS  $J$ ,  $H$ , and  $K_s$ ) photometry and colors, but an incorrect spectral type (K7) for USco 1610-1913. As described in Appendix A, an updated analysis of the full spectral energy

distribution (SED) indicates a later spectral type M0, leading to an extinction value of  $A_v = 0.09 \pm 0.01$  mag, which is more consistent with the value from Lallement et al. (2019):  $A_v = 0.13$ . Using  $A_v = 0.13$  with ForMoSA, we derive an effective temperature of  $T_{\text{eff}} = 2542^{+68}_{-104}$  K and a surface-gravity of  $\log(g) \leq 4.17$  dex, both compatible with a young M9 brown dwarf of very low-gravity for USco 1610-1913 B. However, we find clear non-physical solutions for the radius and the luminosity (for a young late-M dwarf), which confirms the strong over-luminosity of this source, as already pointed out in Sect. 4.1 and discussed further in Sect. 6. We notice a difference between the RV found from ForMoSA and the one found from the cross-correlation algorithm.

**HIP 78530 B.** The extinction maps of Lallement et al. (2019) give a value of  $A_v = 0.075$  along the line of sight of HIP 78530, somewhat different from the value of  $A_v = 0.5$  used by Lachapelle et al. (2015) and from Carpenter et al. (2009). We adopted the former value in our analysis. ForMoSA finds  $T_{\text{eff}} = 2679^{+118}_{-119}$  K, in agreement with the M8 spectral type of the source (Luhman et al. 2003; Filippazzo et al. 2015, this work). The analysis of the continuum-subtracted spectrum yields a surface-gravity estimate compatible with the intermediate-gravity class of the object (Sect. 4.1). The luminosity value of  $\log(L/L_{\odot}) = -2.87^{+0.15}_{-0.15}$  is also compatible with expected  $\log(L/L_{\odot}) = -2.5$  to  $-3.0$  found by Filippazzo et al. (2015) for young M8 $\beta$  and M8 $\gamma$  BDs. Finally, the effective temperature  $T_{\text{eff}}$  and surface-gravity are consistent with the values from Lafrenière et al. (2011).

**HIP 77900 B.** With an extinction value of  $A_v = 0.07$  (Lallement et al. 2019), the resulting effective temperature of  $T_{\text{eff}} = 2602^{+117}_{-97}$  K given by ForMoSA is consistent with the later M9  $\pm 0.5$  spectral type empirically derived for this companion. The estimated surface-gravity of  $\log(g) \leq 4.36$  dex is consistent with the intermediate-gravity classification of Allers & Liu (2013), and the luminosity value of  $\log(L/L_{\odot}) = -2.89^{+0.15}_{-0.13}$  is compatible with the values found for young M9 $\beta\gamma$  brown dwarfs (Filippazzo et al. 2015).

## 5. Emission line properties

Our new high-S/N medium-resolution optical spectra allow us to identify the faint  $H_{\alpha}$  (656.28 nm) emission lines of the three companions and of four out of the six free-floating objects of our sample. Figure 14 shows the line profiles at each epoch. We checked for the emission line detection in the traces to ensure it was not produced by an uncorrected bad pixel (see Sect. 3).  $H_{\alpha}$  lines are commonly attributed to magnetospheric accretion (Manara et al. 2013, 2015; Natta et al. 2004) or chromospheric activity (e.g., White & Basri 2003). The three objects (USco 1610-1913 B, USco 1606-2335, and USco 1608-2315) showing the strongest  $H_{\alpha}$  lines also display other Balmer lines,  $H_{\beta}$  (486.1 nm) and  $H_{\gamma}$  (434.0 nm), in their spectra. We tentatively identify Ca II-H (393.4 nm) and Ca II-K (396.9 nm) emission lines in the spectrum of USco 1610-1913 B as well. The Ca II lines can also be related to accretion or activity (Herczeg & Hillenbrand 2008). We report the apparent fluxes of these emission lines and 10% width of the  $H_{\alpha}$  line in Table C.3. The noisy spectral continua of our objects prevented us from obtaining a robust determination of the continuum and the equivalent widths. Both origins (accretion and activity) for our targets are investigated below.

### 5.1. Accretion rate determination

The accretion rates of each object are reported in Table C.5. They were derived following the relation of Alcalá et al. (2017):

$$\dot{M}_{\text{acc}} = \left(1 - \frac{R_{\text{obj}}}{R_{\text{in}}}\right)^{-1} \frac{L_{\text{acc}} R_{\text{obj}}}{GM_{\text{obj}}} \approx 1.25 \frac{L_{\text{acc}} R_{\text{obj}}}{GM_{\text{obj}}}, \quad (1)$$

where  $L_{\text{acc}}$  is the accretion luminosity,  $R_{\text{in}}$  is the inner disk radius,  $R_{\text{obj}}$  and  $M_{\text{obj}}$  are the radius and mass of the objects, respectively. This is assuming  $R_{\text{obj}}/R_{\text{in}} = 0.2$  (Alcalá et al. 2017) which holds in our mass range, irrespective of the object configuration (companion or isolated). The accretion luminosities were estimated beforehand from the line fluxes of the Ca II lines and the Balmer lines using the relationships given in Rigliaco et al. (2012) and Alcalá et al. (2017), respectively. Radii and masses were in addition inferred from the evolutionary model predictions as indicated in Table 5.

Alternatively, we derived accretion rates based on 10%  $H_{\alpha}$  width following the relations of Natta et al. (2004):

$$\log(\dot{M}_{\text{acc}}) = -12.89(\pm 0.3) + 9.7(\pm 0.7) \times 10^{-3} H_{\alpha} 10\%. \quad (2)$$

The 10%  $H_{\alpha}$  accretion rates are also reported in Table C.5. They tend to be higher than the ones inferred from the Balmer and Ca II line fluxes. A similar divergence between the different accretion proxies is found for the young companion SR 12C (Santamaría-Miranda et al. 2018). The accretion rates of USco 1610-1913 B are compatible with those of the 1–5 Myr late-M sub-stellar companions FW Tau b (Bowler et al. 2014), DH Tau b (Zhou et al. 2014), and GQ Lup b (Wu et al. 2017b), which had the lowest recorded accretion rates among known accreting companions. The accretion rates of HIP 78530 B and HIP 77900 B are found to be an order of magnitude lower, indicating that these objects are nonaccretors.

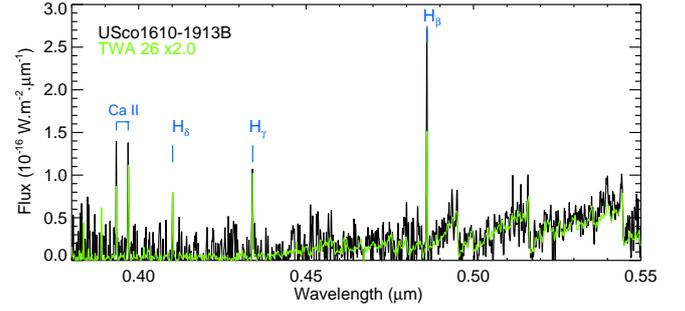
### 5.2. Chromospheric activity

The weakness of the lines suggests the emission arises mostly from chromospheric activity. Manara et al. (2013) provides the  $L_{\text{acc,noise}}/L_{\text{bol}}$  values expected from chromospheric activity for young stars and BDs down to the M9 spectral type:

$$\log(L_{\text{acc,noise}}/L_{\text{bol}}) = (6.17 \pm 0.53) \times \log(T_{\text{eff}}) - (24.54 \pm 1.88). \quad (3)$$

All of our objects apart from USco 1608-2315 have  $\log(L_{\text{acc}}/L_{\text{bol}})$  values below or comparable to the activity threshold  $\log(L_{\text{acc,noise}}/L_{\text{bol}})$  corresponding to their  $T_{\text{eff}}$  (estimated from ForMoSA), indicating that the lines are indeed likely related to chromospheric activity. Herczeg et al. (2009) also identify a  $H_{\alpha}$  line on USco 1607-2211 of similar intensity and came to the same conclusion. We note that this criterion applied to the  $H_{\alpha}$  line of GQ Lup b as observed in April 2016 (Wu et al. 2017b) indicates that the line mostly arises from chromospheric activity in spite of accretion at this epoch<sup>5</sup>. The 10% width of the  $H_{\alpha}$  line may also discriminate between the accretion (large values) and chromospheric activity (small values). A threshold of 200 km s<sup>-1</sup> is generally adopted for BDs (Jayawardhana et al. 2003). All of our objects but USco 1608-2315 have a 10%  $H_{\alpha}$  below the

<sup>5</sup> We considered the  $T_{\text{eff}}$  from Seifahrt et al. (2007) and Zhou et al. (2014) and the luminosity from Zhou et al. (2014) to compute the  $\log(L_{\text{acc,noise}}/L_{\text{bol}}) = -3.8$  to  $-3.48$  value and compare it to  $\log(L_{\text{acc}}/L_{\text{bol}}) = -3.9$  to  $-2.9$  of the object.



**Fig. 13.** Comparison of the UVB spectrum of USco 1610-1913 B (black) and TWA 26 (green) re-normalized to match the spectral continuum of the companion. Emission lines identified in the spectra are reported.

200 km s<sup>-1</sup> limit, supporting line production by chromospheric activity. Therefore, USco 1608-2315 is likely the only true accreting object in our sample. The source also has a tentative disk excess (Sect. 2). Thus, we add USco 1608-2315 to the short list of free-floating accretors with masses below 30  $M_{\text{Jup}}$  (Herczeg et al. 2009; Bayo et al. 2012; Joergens et al. 2013; Alcalá et al. 2014; Boucher et al. 2016; Lodieu et al. 2018).

To further support these conclusions for a few specific objects, Fig. 13 compares the UVB spectra of USco 1610-1913 B and TWA 26 scaled to the distance of USco 1610-1913 B. The flux from TWA 26 had to be multiplied by an additional factor of two to match the flux level of USco 1610-1913 B (see Sect. 6.2). The pseudo-continuum of USco 1610-1913 B is well reproduced by a template with emission lines due to chromospheric activity (Manara et al. 2013). The  $H_{\gamma}$  and  $H_{\delta}$  lines have similar strengths but the  $H_{\beta}$  line appears more luminous in the companion spectrum.

Figure 14 shows that the two free-floating objects with the strongest lines (USco 1608-2315 and USco 1606-2335) display significant short-term variability. The lines are not detected in the optical spectra of these objects obtained in May 2007 (Lodieu et al. 2011). The  $H_{\alpha}$  lines of USco 1607-2211 and USco 1610-2239 do not show obvious variability in our data, but are not detected in May 2007 (Lodieu et al. 2011) either. It is possible that the nondetections from 2007 arise from a degraded sensitivity of the low-resolution data from Lodieu et al. (2011). Active M-dwarfs are known to display such variability from chromospheric activity (e.g., Gizis et al. 2002), which strengthens our conclusions on the line origins. The variability of USco 1608-2315 could also stem from variation of the accretion rate (Aguayo et al., in prep.; Bonnefoy et al., in prep.).

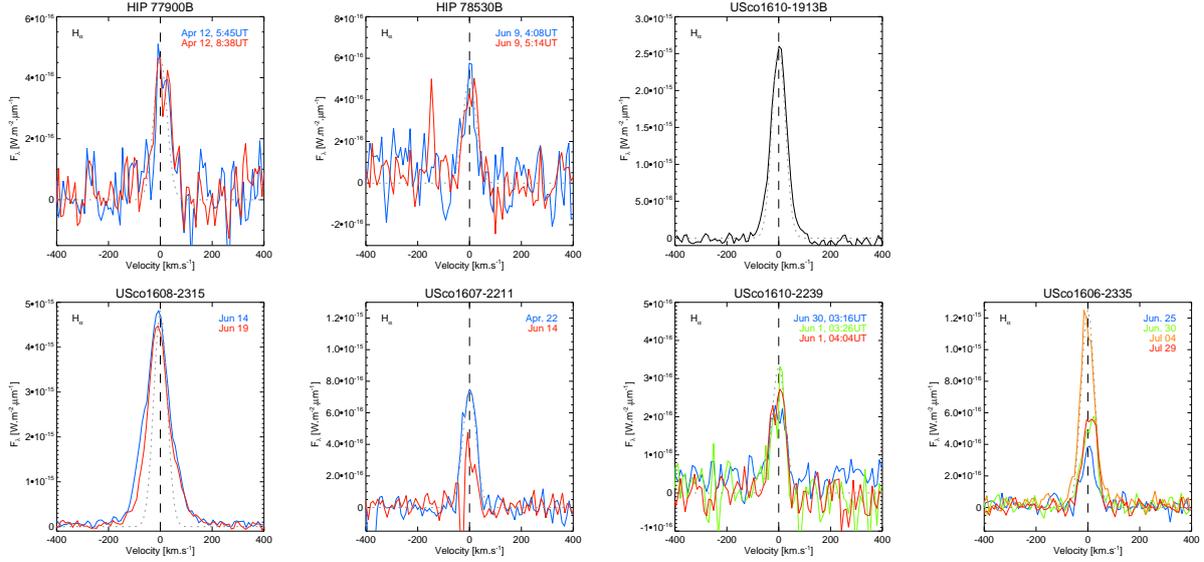
## 6. Discussion

### 6.1. Revisiting the physical association of HIP 77900 B and USco 1610-1913 B with Gaia

HIP 77900 B and USco 1610-1913 B are sufficiently bright and distant from their primary for them to have reported *Gaia* parallaxes. This is to our knowledge the first case for which the physical association of young imaged BD companions with their primary stars can be investigated based on the individual five-parameters astrometric solutions of the system components.

#### 6.1.1. The case of HIP 77900 B

The *Gaia*-DR2 parallax of HIP 77900 A confirms that this system would be extreme if bound ( $22.3'' = 3375$  au projected separation). Very wide systems such as HIP 77900 are expected



**Fig. 14.**  $H_{\alpha}$  line profiles for six of the targets with the strongest line emission. The dotted gray line corresponds to an estimate of the line spread function.

to be rare (e.g., Baron et al. 2018). The companion has not been observed at multiple epochs so it could in principle be a background star. However, the close resemblance of the spectrum of the companion to those of free-floating analogs from our library of Upper-Sco objects identifies it as a likely member of this association. Therefore, HIP 77900 A and B are either coeval or aligned by chance within the association. Their respective distances ( $191_{-43}^{+30}$  pc for A, and  $151.4_{-2.7}^{+2.8}$  pc for B) reveal a  $1.4\sigma$  difference. There is in addition a  $1.8\sigma$  difference between the proper motion in declination of the two objects. The  $p$ -value on the difference on the three astrometric parameters of A and B (0.06) does not allow us to firmly conclude whether or not the system is coeval. The Re-normalized Unit Weight Error (RUWE) values of A and B (0.97 and 1.21) indicate robust solutions. The galactic Cartesian coordinates of HIP 77900 A ( $X_A = 137.8 \pm 2.6$  pc,  $Y_A = -35.5 \pm 0.7$  pc,  $Z_A = 51.8 \pm 1.0$  pc) computed following Gagné et al. (2014) are well within the range of expected values for Upper-Sco (Galli et al. 2018), contrary to those of B ( $X_B = 173.8_{-27.3}^{+39.1}$  pc,  $Y_B = -44.7_{-10.1}^{+7.1}$  pc,  $Z_B = 65.4_{-10.3}^{+14.8}$  pc) which is at odds with the youth of the object. However, we find photometric distances of  $151_{-24}^{+35}$  pc and  $150_{+22}^{-17}$  pc for HIP 77900 B using the flux-calibrated spectra of the spectrally analogous M8.5 dwarfs from our sample (USco 1607-2211 and USco 1610-2239, respectively) with *Gaia* parallaxes. These photometric distances are more consistent with the *Gaia* distance of A and would strengthen the case of a coeval system. However, we found a RV of  $19.3 \pm 1.2$  km s $^{-1}$  for the B component which is not consistent with the  $1.3 \pm 2.6$  km s $^{-1}$  found by Gontcharov (2006) for HIP 77900 A. This result raises severe doubts about the gravitational link between the two objects, and the next *Gaia* data releases of the relative astrometry of A and B will be needed to firmly conclude on their physical association.

### 6.1.2. The case of USco 1610-1913 B

The spectral properties and measured distances of USco 1610-1913 B clearly confirm its membership to Upper-Sco. USco 1610-1913 B and A have been shown to have a common proper motion from 2007 to 2012 and have been proposed to be bound

(Kraus et al. 2014, and ref therein). However, the recent DR2 solutions of these two objects diverge in proper motion ( $2.0$  and  $2.4\sigma$  significance in  $\mu_{\alpha}$  and  $\mu_{\delta} \cdot \cos(\delta)$ , respectively) and in distance ( $1.4\sigma$ ; B is 10.3 pc closer than A). A  $\chi^2$  test on the difference on the three astrometric parameters of each system component (parallaxes and proper motions) taking into account the correlations gives a  $p$ -value of 0.01 which is in favor of a physical bond between the two objects. The  $p$ -value accounts for the slight underestimation of the errors (Lindgren et al. 2018). The reliability of the *Gaia* astrometry may however be questioned for this particular system. Indeed, the  $\sim 0.145''$  M-dwarf companion to USco 1610-1913 A (Kraus et al. 2008) is unresolved in the DR2. The RUWE index is proposed as a more reliable and informative goodness-of-fit statistic than for instance the astrometric excess noise (Lindgren et al. 2018, *Gaia* technical note *Gaia*-C3-TN-LU-LL-124-01). The RUWE of USco 1610-1913 A (1.63) is above the threshold of 1.4 and indicates that the observations are inconsistent with a simple five-parameter astrometric model while B (RUWE = 1.19) shows a more reliable solution. The next releases of *Gaia* will here again solve this ambiguity.

If we keep the hypothesis that the system is bound (or even coeval) and located at the distance of the B component, USco 1610-1913 B remains 4.5 times more luminous than free-floating analogs from the Upper-Sco association. This is illustrated in Fig. 5 using USco 1607-2211 and USco 1610-2239 for comparison, which both have high-quality astrometric solutions. In addition, the probability of a chance alignment within the association is small. Aller et al. (2013) identified USco 1610-1913 B while searching for distant companions within 30 arcseconds of Upper-Sco stars and with optical (Pan-Starrs) and NIR (UKIDSS) colors compatible with young, cool objects. Using the now-available Pan-Starrs data (Chambers et al. 2016), we confirm that USco 1610-1913 B belongs to one of the three objects with the reddest  $i - z$  and  $i - y$  colors within 5 arcmin of USco 1610-1913 A. It is also the only object in this field with colors typical of M7-M9 Upper-Sco objects. Dahm et al. (2012) determined a RV of  $-6.91 \pm 0.27$  km s $^{-1}$  for USco 1610-1913 A. USco 1610-1913 B is the unique target for which we find a strong discrepancy between the RV determined by ForMoSA

**Table 5.** Comparison between parameters from ForMoSA and parameters in using evolutionary models (Chabrier et al. 2000) (BT-SETTL15/ForMoSA independent).

Object	ForMoSA				Bolometric correction + Evolutionary models				
	$\log(L/L_{\odot})$	$R$ ( $R_{\text{Jup}}$ )	$\log(g)$ (dex)	$T_{\text{eff}}$ (K)	$\log(L/L_{\odot})$	$R$ ( $R_{\text{Jup}}$ )	$\log(g)$ (dex)	$T_{\text{eff}}$ (K)	$M$ ( $M_{\text{Jup}}$ )
USco 1610-1913 B <sup>(1)</sup>	$-2.25^{+0.10}_{-0.10}$	$3.87^{+0.24}_{-0.12}$	$\leq 4.17$	$2542^{+68}_{-104}$	$-2.13 \pm 0.17$	$3.6 \pm 0.7$	$4.03 \pm 0.20$	$2827 \pm 169$	$57 \pm 28$
HIP 77900 B <sup>(1)</sup>	$-2.89^{+0.15}_{-0.13}$	$1.76^{+0.15}_{-0.12}$	$\leq 4.36$	$2602^{+117}_{-97}$	$-2.59 \pm 0.16$	$2.8 \pm 0.4$	$4.02 \pm 0.17$	$2611 \pm 185$	$34 \pm 14$
HIP 78530 B <sup>(1)</sup>	$-2.87^{+0.15}_{-0.15}$	$1.83^{+0.16}_{-0.14}$	$\leq 4.34$	$2679^{+118}_{-119}$	$-2.68 \pm 0.17$	$2.6 \pm 0.4$	$4.00 \pm 0.13$	$2544 \pm 179$	$28 \pm 10$
USco 1607-2242	$-3.41^{+0.18}_{-0.18}$	$1.13^{+0.13}_{-0.08}$	$\leq 4.10$	$2403^{+122}_{-152}$	$-3.23 \pm 0.20$	$1.9 \pm 0.2$	$3.99 \pm 0.09$	$2044 \pm 203$	$14 \pm 4$
USco 1608-2232	$-3.09^{+0.15}_{-0.14}$	$1.63^{+0.19}_{-0.12}$	$\leq 4.09$	$2409^{+81}_{-99}$	$-2.96 \pm 0.20$	$2.1 \pm 0.3$	$4.01 \pm 0.06$	$2262 \pm 182$	$17 \pm 4$
USco 1606-2335	$-3.11^{+0.16}_{-0.16}$	$1.46^{+0.15}_{-0.10}$	$\leq 4.36$	$2519^{+114}_{-141}$	$-3.05 \pm 0.20$	$2.1 \pm 0.2$	$4.01 \pm 0.06$	$2215 \pm 179$	$16 \pm 4$
USco 1610-2239	$-2.88^{+0.17}_{-0.14}$	$1.93^{+0.24}_{-0.14}$	$\leq 4.01$	$2499^{+102}_{-108}$	$-2.75 \pm 0.20$	$2.5 \pm 0.3$	$3.97 \pm 0.08$	$2467 \pm 173$	$24 \pm 7$
USco 1608-2315	$-2.86^{+0.11}_{-0.15}$	$2.00^{+0.12}_{-0.09}$	$\leq 4.16$	$2487^{+81}_{-147}$	$-2.71 \pm 0.20$	$2.5 \pm 0.4$	$3.98 \pm 0.08$	$2474 \pm 179$	$24 \pm 8$
USco 1607-2211	$-2.84^{+0.07}_{-0.11}$	$1.92^{+0.05}_{-0.06}$	$\leq 4.05$	$2557^{+65}_{-117}$	$-2.76 \pm 0.24$	$2.5 \pm 0.4$	$3.98 \pm 0.09$	$2461 \pm 204$	$24 \pm 8$

**Notes.** The luminosity has been determined using the bolometric corrections at  $J$  and  $K$  bands from Filippazzo et al. (2015). For the luminosity of our reference objects we directly use the Filippazzo et al. (2015) values. We also provide the mass values. <sup>(1)</sup>With the hypothesis that companions are at the same distance as the primary star.

and the cross-correlation approach ( $11.5 \pm 0.4$  and  $0.9 \text{ km s}^{-1}$ , respectively). Both values are in addition inconsistent with the RV derived by Dahm et al. (2012) for the A component, and are therefore inconclusive. Although we cannot firmly exclude that USco 1610-1913 A and B are simply members of Upper-Sco aligned by chance, parallaxes and common proper motion do support possibility that they form at least a comoving and possible coeval pair.

## 6.2. The over-luminosity of USco 1610-1913 B

Evolutionary models of Chabrier et al. (2000) predict a  $T_{\text{eff}} = 2827 \pm 169 \text{ K}$  for USco 1610-1913 B using the bolometric luminosity of the source. This corresponds to a M5 brown dwarf (see Table 5), incompatible with the spectral type of  $M9 \pm 0.5$  derived from our empirical analysis. Our results using the ForMoSA code (see Sect. 4.3) further confirm this over-luminosity based on model atmosphere fits. There are several other sources in the literature which are similarly over-luminous, such as USco 1602-2401 B (Aller et al. 2013) or 2MASS J162243.85-195 105.7 (Dahm et al. 2012). Aller et al. (2013) proposed that differences in the accretion history of USco 1610-1913 B could play a role in such a discrepancy as proposed by Baraffe et al. (2012). For late K- and M-dwarfs, chromospheric activity as found in our spectra decreases the objects  $T_{\text{eff}}$  and increases their radii (López-Morales 2007; Morales et al. 2008). Based on a sample of  $669 M < 1 M_{\odot}$  nonaccreting stars from the Palomar/Michigan State University catalog (PMSU; Reid et al. 1995; Hawley et al. 1996), Stassun et al. (2012) proposed empirical relations to determine the bias induced by chromospheric activity:

$$\frac{\Delta T_{\text{eff}}}{T_{\text{eff}}} (\%) = (-3.12 \pm 3.15) \times \left( \log \left( \frac{L_{\text{H}\alpha}}{L_{\text{bol}}} \right) + 4 \right) + (-5.1 \pm 0.7) \quad (4)$$

$$\frac{\Delta R}{R} (\%) = (8.00 \pm 7.63) \times \left( \log \left( \frac{L_{\text{H}\alpha}}{L_{\text{bol}}} \right) + 4 \right) + (11.2 \pm 1.6). \quad (5)$$

Despite these variations of the radius and  $T_{\text{eff}}$  of the atmosphere, the bolometric luminosity remains constant. This effect cannot explain the over-luminosity of USco 1610-1913 B. An alternative explanation would be that the companion is an unresolved quadruple system presumably with all components having similar spectral types in this case. Such systems are expected to be rare among A- and FG-type stars (Raghavan et al. 2010; De Rosa et al. 2014; Tokovinin 2014). The system would be even more exotic and rare considering that USco 1610-1913 A is a binary and that USco 1610-1913 B has to be composed of four identical objects to account for its over-luminosity. Quadruples tend to be found as 2+2 tight binary systems. The discovery of a quadruple system made of two pairs of M5 eclipsing binaries in Upper-Sco (Wang et al. 2018) shows that such objects exist in isolation. To our knowledge, adaptive-optics images of the system have not displayed PSF-elongation or resolved the companion as a higher-order object but new NIR high-resolution ( $R$  80 000 to 100 000) spectrographs (ESO/NIRPS, CRIRES+) could investigate the multiplicity of USco 1610-1913B in the near future.

## 7. Conclusion

Based on medium-resolution spectra obtained with the X-shooter spectrograph at the VLT, we carried out an in-depth characterization of three low-mass BD companions on wide-orbits, namely USco 161031.9-16191305 B, HIP 77900 B, and HIP 78530 B of the Upper-Scorpius association, together with six young isolated brown dwarfs of similar spectral types and ages. The X-shooter data yield the first medium-resolution optical spectra of the companion objects. We can summarize the main results as follows:

1. The re-investigation of the spectral classification of the three companions USco 1610-1913 B, HIP 77900 B and HIP 78530 B confirms that they have spectral types  $M9 \pm 0.5$ ,  $M9 \pm 0.5$ , and  $M8 \pm 0.5$ , respectively. HIP 77900 B and HIP 78530 B are identified as young, intermediate-surface-gravity brown dwarfs, whereas USco 1610-1913 B is confirmed as a very-low-surface-gravity brown dwarf.

2. The development and use of the ForMoSA forward modeling code relying on the Nested Sampling procedure enables us to infer posterior probability distributions of the physical properties ( $T_{\text{eff}}$ ,  $\log(g)$ ,  $R$ ,  $L$  and extinction) of USco 1610-1913 B, HIP 77900 B and HIP 78530 B using the BT-SETTL15 atmospheric models and the X-shooter spectra. We find that generally, the models fail to reproduce the pseudo-continuum of the X-shooter spectra over a broad range of wavelengths. Our solutions are mainly affected by the choice of the spectral range considered to estimate the best fit, and the fitting error bars remain about one to two orders of magnitude smaller given the high S/N of the X-shooter spectra. Finally, when the extinction is considered as a free parameter, the ForMoSA fitting solutions are considerably improved at all wavelengths with extinction values of 1.6–2.6 mag suggesting a clear deficiency in the dust grain modeling of the BT-SETTL15 atmospheric models. These inconsistencies currently limit our ability to investigate the chemical abundance of heavy elements in the atmosphere of these young brown dwarfs, which could trace different formation mechanisms. Finally, the key physical properties such as  $T_{\text{eff}}$ ,  $\log(g)$ , and  $L$  are in agreement with the empirical analysis, but indicate a clear over-luminosity for USco 1610-1913 B.
3. The study of the medium-resolution optical part of the X-shooter spectra allowed us to identify the presence of various Balmer lines for the three companions USco 1610-1913 B, HIP 77900 B, and HIP 78530 B, and the two isolated brown dwarfs USco 1608-2315 and USco 1607-2211, and allowed us to investigate their origin. Their low accretion rate, low accretion luminosity and low 10% width tend to promote them as signatures tracing chromospheric activity except for USco 1608-2315, which adds to the limited population of accreting free-floating young brown dwarfs with masses below  $30 M_{\text{Jup}}$ .
4. The nature of USco 1610-1913 B and HIP 77900 B was revisited and discussed in the context of the new *Gaia* DR2 results. The *Gaia* solutions of USco 1610-1913 A are probably affected by the binarity of USco 1610-1913 A itself. For HIP 77900 B, the parallax is surprisingly inconsistent with the photometric distance. Nevertheless, a coeval (bound or unbound) configuration remains the most plausible one for both systems. Finally, we showed that the over-luminosity of USco 1610-1913 B cannot be explained by chromospheric activity suggesting that it might be a high-order multiple component if we want to reconcile spectral type and observed luminosity. Further studies using high-resolution spectrographs ( $R_{\lambda} \approx 80\,000$ – $100\,000$ ) like ESO3.6 m/NIRPS or VLT/CRIRES+ are required to explore such a hypothesis.

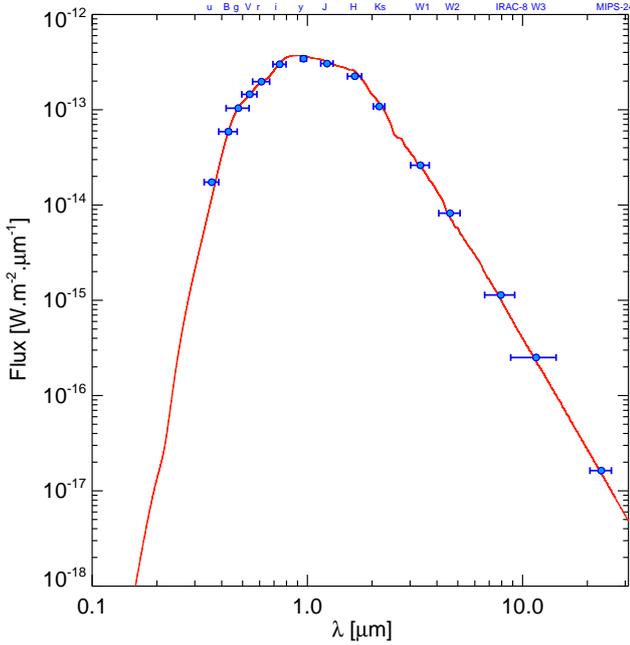
*Acknowledgements.* The authors thank the ESO staff for conducting the observations. We are grateful to D. Lachapelle for providing the spectra of HIP 78530 B and USco 1610-1913 B. We also thank J. Bouvier for advising us on accretion process and chromospheric activity effects. We acknowledge financial support from the Programme National de Planétologie (PNP), the Programme National de Physique Stellaire (PNPS) of CNRS-INSU in France, and the Agence Nationale de la Recherche (GIPSE project; grant ANR-14-CE33-0018). This research has made use of the SIMBAD database and VizieR catalogue access tool (operated at CDS, Strasbourg, France). This research has made use of NASA's Astrophysics Data System and of the Extrasolar Planet Encyclopedia (<http://exoplanet.eu/>). This publication makes use of VOSA, developed under the Spanish Virtual Observatory project supported from the Spanish MINECO through grant AyA2017-84089. G-DM acknowledges the support of the DFG priority program SPP 1992 "Exploring the Diversity of Extrasolar Planets" (KU 2849/7-1).

## References

- Alam, S., Albareti, F. D., Allende Prieto, C., et al. 2015, *ApJS*, 219, 12  
 Alcalá, J. M., Natta, A., Manara, C. F., et al. 2014, *A&A*, 561, A2  
 Alcalá, J. M., Manara, C. F., Natta, A., et al. 2017, *A&A*, 600, A20  
 Allard, F., Hauschildt, P. H., Alexander, D. R., Tamanai, A., & Schweitzer, A. 2001, *ApJ*, 556, 357  
 Allard, F., Homeier, D., & Freytag, B. 2011, *ASP Conf. Ser.*, 448, 91  
 Allard, F., Homeier, D., & Freytag, B. 2012, *Phil. Trans. R. Soc. London, Ser. A*, 370, 2765  
 Allard, F., Homeier, D., Freytag, B., et al. 2013, *Mem. Soc. Astron. It. Suppl.*, 24, 128  
 Allers, K. N. 2012, *IAU Symp.*, 282, 105  
 Allers, K. N., & Liu, M. C. 2013, *ApJ*, 772, 79  
 Allers, K. N., Jaffe, D. T., Luhman, K. L., et al. 2007, *ApJ*, 657, 511  
 Aller, K. M., Kraus, A. L., Liu, M. C., et al. 2013, *ApJ*, 773, 63  
 Ardila, D., Martín, E., & Basri, G. 2000, *AJ*, 120, 479  
 Baraffe, I., Chabrier, G., Barman, T. S., Allard, F., & Hauschildt, P. H. 2003, *A&A*, 402, 701  
 Baraffe, I., Vorobyov, E., & Chabrier, G. 2012, *ApJ*, 756, 118  
 Baraffe, I., Homeier, D., Allard, F., & Chabrier, G. 2015, *A&A*, 577, A42  
 Barman, T. S., Macintosh, B., Konopacky, Q. M., & Marois, C. 2011, *ApJ*, 735, L39  
 Baron, F., Artigau, É., Rameau, J., et al. 2018, *AJ*, 156, 137  
 Bate, M. R., Bonnell, I. A., & Bromm, V. 2002, *MNRAS*, 332, L65  
 Bayo, A., Rodrigo, C., Barrado, Y., Navascués, D., et al. 2008, *A&A*, 492, 277  
 Bayo, A., Barrado, D., Huéramo, N., et al. 2012, *A&A*, 547, A80  
 Bayo, A., Barrado, D., Allard, F., et al. 2017, *MNRAS*, 465, 760  
 Béjar, V. J. S., Zapatero Osorio, M. R., Pérez-Garrido, A., et al. 2008, *ApJ*, 673, L185  
 Biller, B., Allers, K., Liu, M., Close, L. M., & Dupuy, T. 2011, *ApJ*, 730, 39  
 Bonnefoy, M., Chauvin, G., Lagrange, A. M., et al. 2014, *A&A*, 562, A127  
 Bonnefoy, M., Perraut, K., Lagrange, A.-M., et al. 2018, *A&A*, 618, A63  
 Boucher, A., Lafrenière, D., Gagné, J., et al. 2016, *ApJ*, 832, 50  
 Bowler, B. P., Liu, M. C., Kraus, A. L., Mann, A. W., & Ireland, M. J. 2011, *ApJ*, 743, 148  
 Bowler, B. P., Liu, M. C., Kraus, A. L., & Mann, A. W. 2014, *ApJ*, 784, 65  
 Bowler, B. P., Andrews, S. M., Kraus, A. L., et al. 2015, *ApJ*, 805, L17  
 Bubar, E. J., Schaeuble, M., King, J. R., Mamajek, E. E., & Stauffer, J. R. 2011, *AJ*, 142, 180  
 Burrows, A., Marley, M., Hubbard, W. B., et al. 1997, *ApJ*, 491, 856  
 Carpenter, J. M., Mamajek, E. E., Hillenbrand, L. A., & Meyer, M. R. 2006, *ApJ*, 651, L49  
 Carpenter, J. M., Bouwman, J., Silverstone, M. D., et al. 2008, *ApJS*, 179, 423  
 Carpenter, J. M., Mamajek, E. E., Hillenbrand, L. A., & Meyer, M. R. 2009, *ApJ*, 705, 1646  
 Chabrier, G., Baraffe, I., Allard, F., & Hauschildt, P. 2000, *ApJ*, 542, L119  
 Chambers, K. C., Magnier, E. A., Metcalfe, N., et al. 2016, *ArXiv e-prints* [arXiv:1612.05560]  
 Charnay, B., Bézard, B., Baudino, J. L., et al. 2018, *ApJ*, 854, 172  
 Cruz, K. L., Reid, I. N., Liebert, J., Kirkpatrick, J. D., & Lowrance, P. J. 2003, *AJ*, 126, 2421  
 Cruz, K. L., Reid, I. N., Kirkpatrick, J. D., et al. 2007, *AJ*, 133, 439  
 Cushing, M. C., Rayner, J. T., & Vacca, W. D. 2005, *ApJ*, 623, 1115  
 Cushing, M. C., Marley, M. S., Saumon, D., et al. 2008, *ApJ*, 678, 1372  
 Cutri, R. M., Skrutskie, M. F., van Dyk, S., et al. 2003, *2MASS All Sky Catalog of Point Sources* (Washington: NASA/IPAC)  
 Cutri, R. M., et al. 2013, *VizieR Online Data Catalog: II/328*  
 Dahm, S. E., Slesnick, C. L., & White, R. J. 2012, *ApJ*, 745, 56  
 Dai, Y., Wilner, D. J., Andrews, S. M., & Ohashi, N. 2010, *AJ*, 139, 626  
 David, T. J., Hillenbrand, L. A., Gillen, E., et al. 2019, *ApJ*, 872, 161  
 Dawson, P., Scholz, A., Ray, T. P., et al. 2013, *MNRAS*, 429, 903  
 de Bruijne, J. H. J. 1999, *MNRAS*, 310, 585  
 De Rosa, R. J., Patience, J., Wilson, P. A., et al. 2014, *MNRAS*, 437, 1216  
 de Zeeuw, P. T., Hoogerwerf, R., de Bruijne, J. H. J., Brown, A. G. A., & Blaauw, A. 1999, *AJ*, 117, 354  
 Delorme, P., Dupuy, T., Gagné, J., et al. 2017a, *A&A*, 602, A82  
 Delorme, P., Schmidt, T., Bonnefoy, M., et al. 2017b, *A&A*, 608, A79  
 Draine, B. T. 2003a, *ARA&A*, 41, 241  
 Draine, B. T. 2003b, *ApJ*, 598, 1017  
 Draine, B. T. 2003c, *ApJ*, 598, 1026  
 Esplin, T. L., Luhman, K. L., Miller, E. B., & Mamajek, E. E. 2018, *AJ*, 156, 75  
 Feiden, G. A., & Chaboyer, B. 2012, *ApJ*, 761, 30  
 Feiden, G. A., & Chaboyer, B. 2013, *ApJ*, 779, 183  
 Filippazzo, J. C., Rice, E. L., Faherty, J., et al. 2015, *ApJ*, 810, 158  
 Fitzpatrick, E. L., & Massa, D. 2007, *ApJ*, 663, 320  
 Freudling, W., Romaniello, M., Bramich, D. M., et al. 2013, *A&A*, 559, A96

- Gaia Collaboration (Brown, A. G. A., et al.) 2018, *A&A*, 616, A1
- Gagné, J., Lafrenière, D., Doyon, R., Malo, L., & Artigau, É. 2014, *ApJ*, 783, 121
- Gagné, J., Mamajek, E. E., Malo, L., et al. 2018, *ApJ*, 856, 23
- Galli, P. A. B., Joncour, I., & Moraux, E. 2018, *MNRAS*, 477, L50
- Garrison, R. F. 1967, *ApJ*, 147, 1003
- Gizis, J. E., Reid, I. N., & Hawley, S. L. 2002, *AJ*, 123, 3356
- Gontcharov, G. A. 2006, *Astron. Lett.*, 32, 759
- Hauschildt, P. H., Baron, E., & Allard, F. 1997, *ApJ*, 483, 390
- Hawley, S. L., Gizis, J. E., & Reid, I. N. 1996, *AJ*, 112, 2799
- Helling, C., & Woitke, P. 2006, *A&A*, 455, 325
- Henden, A. A., Templeton, M., Terrell, D., et al. 2016, VizieR Online Data Catalog: II/336
- Herczeg, G. J., & Hillenbrand, L. A. 2008, *ApJ*, 681, 594
- Herczeg, G. J., Cruz, K. L., & Hillenbrand, L. A. 2009, *ApJ*, 696, 1589
- Hester, J. J., Scowen, P. A., Sankrit, R., et al. 1996, *AJ*, 111, 2349
- Houk, N., & Smith-Moore, M. 1988, *Michigan Catalogue of Two-dimensional Spectral Types for the HD Stars* (Michigan: University of Michigan), 4
- Ireland, M. J., Kraus, A., Martinache, F., Law, N., & Hillenbrand, L. A. 2011, *ApJ*, 726, 113
- Jayawardhana, R., Ardila, D. R., Stelzer, B., & Haisch, K. E., Jr. 2003, *AJ*, 126, 1515
- Joergens, V., Bonnefoy, M., Liu, Y., et al. 2013, *A&A*, 558, L7
- Kausch, W., Noll, S., Smette, A., et al. 2015, *A&A*, 576, A78
- Kirkpatrick, J. D. 2005, *ARA&A*, 43, 195
- Kirkpatrick, J. D., Gelino, C. R., Cushing, M. C., et al. 2012, *ApJ*, 753, 156
- Kopytova, T. G., Crossfield, I. J. M., Deacon, N. R., et al. 2014, *ApJ*, 797, 3
- Kouwenhoven, M. B. N., Brown, A. G. A., Zinnecker, H., Kaper, L., & Portegies Zwart, S. F. 2005, *A&A*, 430, 137
- Kraus, A. L., & Hillenbrand, L. A. 2008, *ApJ*, 686, L111
- Kraus, A. L., & Hillenbrand, L. A. 2009, *ApJ*, 703, 1511
- Kraus, A. L., & Hillenbrand, L. A. 2012, *ApJ*, 757, 141
- Kraus, A. L., Ireland, M. J., Martinache, F., & Lloyd, J. P. 2008, *ApJ*, 679, 762
- Kraus, A. L., Ireland, M. J., Cieza, L. A., et al. 2014, *ApJ*, 781, 20
- Lachapelle, F.-R., Lafrenière, D., Gagné, J., et al. 2015, *ApJ*, 802, 61
- Lafrenière, D., Jayawardhana, R., & van Kerkwijk, M. H. 2008, *ApJ*, 689, L153
- Lafrenière, D., Jayawardhana, R., & van Kerkwijk, M. H. 2010, *ApJ*, 719, 497
- Lafrenière, D., Jayawardhana, R., Janson, M., et al. 2011, *ApJ*, 730, 42
- Lallement, R., Babusiaux, C., Vergely, J. L., et al. 2019, *A&A*, 625, A135
- Lindgren, L., Hernández, J., Bombrun, A., et al. 2018, *A&A*, 616, A2
- Lodieu, N., Hambly, N. C., Jameson, R. F., et al. 2007, *MNRAS*, 374, 372
- Lodieu, N., Hambly, N. C., Jameson, R. F., & Hodgkin, S. T. 2008, *MNRAS*, 383, 1385
- Lodieu, N., Dobbie, P. D., & Hambly, N. C. 2011, *A&A*, 527, A24
- Lodieu, N., Zapatero Osorio, M. R., Béjar, V. J. S., & Peña Ramírez, K. 2018, *MNRAS*, 473, 2020
- López-Morales, M. 2007, *ApJ*, 660, 732
- Luhman, K. L., & Mamajek, E. E. 2012, *ApJ*, 758, 31
- Luhman, K. L., Stauffer, J. R., Muench, A. A., et al. 2003, *ApJ*, 593, 1093
- Luhman, K. L., Herrmann, K. A., Mamajek, E. E., Esplin, T. L., & Peca, M. J. 2018, *AJ*, 156, 76
- MacGregor, M. A., Wilner, D. J., Czekala, I., et al. 2017, *ApJ*, 835, 17
- Madhusudhan, N., Burrows, A., & Currie, T. 2011, *ApJ*, 737, 34
- Manara, C. F., Testi, L., Rigliaco, E., et al. 2013, *A&A*, 551, A107
- Manara, C. F., Testi, L., Natta, A., & Alcalá, J. M. 2015, *A&A*, 579, A66
- Manjavacas, E., Bonnefoy, M., Schlieder, J. E., et al. 2014, *A&A*, 564, A55
- Marks, M., Martín, E. L., Béjar, V. J. S., et al. 2017, *A&A*, 605, A11
- Mayor, M., & Queloz, D. 1995, *Nature*, 378, 355
- McDonald, I., Zijlstra, A. A., & Watson, R. A. 2017, *MNRAS*, 471, 770
- Modigliani, A., Goldoni, P., Royer, F., et al. 2010, in *Observatory Operations: Strategies, Processes, and Systems III* (Bellingham, USA: SPIE), 7737, 773728
- Morales, J. C., Ribas, I., & Jordi, C. 2008, *A&A*, 478, 507
- Mordasini, C., Alibert, Y., & Benz, W. 2009, *A&A*, 501, 1139
- Mordasini, C., Alibert, Y., Benz, W., Klahr, H., & Henning, T. 2012, *A&A*, 541, A97
- Mordasini, C., Marleau, G.-D., & Mollière, P. 2017, *A&A*, 608, A72
- Morley, C. V., Fortney, J. J., Marley, M. S., et al. 2012, *ApJ*, 756, 172
- Nakajima, T., Oppenheimer, B. R., Kulkarni, S. R., et al. 1995, *Nature*, 378, 463
- Natta, A., Testi, L., Muzerolle, J., et al. 2004, *A&A*, 424, 603
- Neckel, T., & Klare, G. 1980, *A&AS*, 42, 251
- Neuhäuser, R., Guenther, E. W., Petr, M. G., et al. 2000, *A&A*, 360, L39
- Padoan, P., & Nordlund, Å. 2004, *ApJ*, 617, 559
- Pavlenko, Y. V., Jones, H. R. A., Martín, E. L., et al. 2007, *MNRAS*, 380, 1285
- Peca, M. J., & Mamajek, E. E. 2013, *ApJS*, 208, 9
- Peca, M. J., Mamajek, E. E., & Bubar, E. J. 2012, *ApJ*, 746, 154
- Preibisch, T., Guenther, E., & Zinnecker, H. 2001, *AJ*, 121, 1040
- Raghavan, D., McAlister, H. A., Henry, T. J., et al. 2010, *ApJS*, 190, 1
- Rajpurohit, A. S., Allard, F., Rajpurohit, S., et al. 2018, *A&A*, 620, A180
- Rebolo, R., Zapatero Osorio, M. R., & Martín, E. L. 1995, *Nature*, 377, 129
- Reid, I. N., Hawley, S. L., & Gizis, J. E. 1995, *AJ*, 110, 1838
- Reid, I. N., Cruz, K. L., Kirkpatrick, J. D., et al. 2008, *AJ*, 136, 1290
- Riaz, B., & Gizis, J. E. 2008, *ApJ*, 681, 1584
- Rigliaco, E., Natta, A., Testi, L., et al. 2012, *A&A*, 548, A56
- Rodriguez, D. R., van der Plas, G., Kastner, J. H., et al. 2015, *A&A*, 582, L5
- Sahlmann, J., Ségransan, D., Queloz, D., et al. 2011, *A&A*, 525, A95
- Samland, M., Mollière, P., Bonnefoy, M., et al. 2017, *A&A*, 603, A57
- Santamaría-Miranda, A., Cáceres, C., Schreiber, M. R., et al. 2018, *MNRAS*, 475, 2994
- Saumon, D., & Marley, M. S. 2008, *ApJ*, 689, 1327
- Schmidt, T. O. B., Neuhäuser, R., Seifahrt, A., et al. 2008, *A&A*, 491, 311
- Seifahrt, A., Neuhäuser, R., & Hauschildt, P. H. 2007, *A&A*, 463, 309
- Skilling, J. 2006, *Bayesian Anal.*, 1, 833
- Slesnick, C. L., Hillenbrand, L. A., & Carpenter, J. M. 2004, *ApJ*, 610, 1045
- Smette, A., Sana, H., Noll, S., et al. 2015, *A&A*, 576, A77
- Stamatellos, D., & Whitworth, A. P. 2009, *MNRAS*, 392, 413
- Stassun, K. G., Kratter, K. M., Scholz, A., & Dupuy, T. J. 2012, *ApJ*, 756, 47
- Thies, I., Pflamm-Altenburg, J., Kroupa, P., & Marks, M. 2015, *ApJ*, 800, 72
- Tokovinin, A. 2014, *AJ*, 147, 87
- Tremblin, P., Chabrier, G., Baraffe, I., et al. 2017, *ApJ*, 850, 46
- Vernet, J., Dekker, H., D'Odorico, S., et al. 2011, *A&A*, 536, A105
- Wagner, K., Follete, K. B., Close, L. M., et al. 2018, *ApJ*, 863, L8
- Walter, F. M., Vrba, F. J., Mathieu, R. D., Brown, A., & Myers, P. C. 1994, *AJ*, 107, 692
- Wang, J., David, T. J., Hillenbrand, L. A., et al. 2018, *ApJ*, 865, 141
- White, R. J., & Basri, G. 2003, *ApJ*, 582, 1109
- Wolff, S. G., Ménard, F., Cáceres, C., et al. 2017, *AJ*, 154, 26
- Wu, Y.-L., Close, L. M., Eisner, J. A., & Sheehan, P. D. 2017a, *AJ*, 154, 234
- Wu, Y.-L., Sheehan, P. D., Males, J. R., et al. 2017b, *ApJ*, 836, 223
- Zhou, Y., Herczeg, G. J., Kraus, A. L., Metchev, S., & Cruz, K. L. 2014, *ApJ*, 783, L17

## Appendix A: Temperature and reddening of USco 1610-1913



**Fig. A.1.** Spectral energy distribution of USco 1610-1913 dereddened by  $A_v = 0.09$  mag compared to the best-fitting BT-NEXTGEN model (red line) corresponding to  $T_{\text{eff}} = 3800$  K,  $\log g = 4.0$  dex, and  $M/H = 0$  dex.

We built the SED of USco 1610-1913 from SDSS ( $u, g, r, i$  bands Alam et al. 2015), APASS ( $B$  and  $V$  bands Henden et al. 2016), Pan-Starrs ( $y$  band Chambers et al. 2016), 2MASS ( $J, H, K_s$ , Cutri et al. 2003) and WISE (W1, W2, W3 bands Cutri et al. 2013) photometry collected through the VOSA (Bayo et al. 2008) web interface<sup>6</sup> supplemented by *Spitzer* (8, 24  $\mu\text{m}$ ) photometry taken from Carpenter et al. (2006).

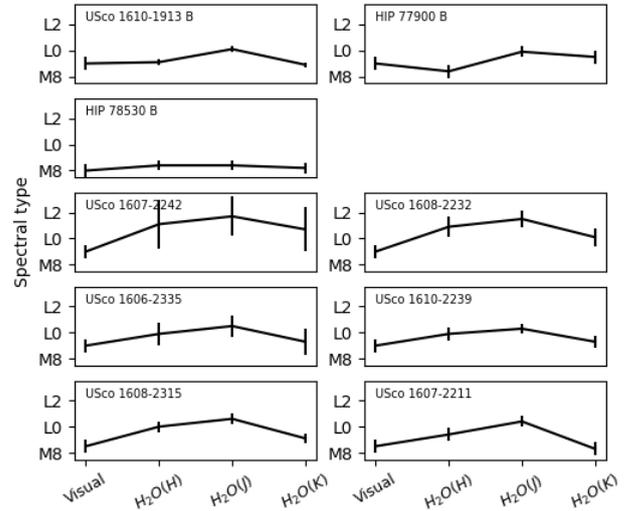
We compared dereddened SED of the object to synthetic spectra from the BT-NEXTGEN library (Allard et al. 2012) with  $T_{\text{eff}}$  in the range 3500–4000 K and  $M/H = 0$ . The surface-gravity was varied from 3.0 to 5.0 dex and does not influence the fit. We considered  $A_v$  in the range 0–5 mag in steps of 0.01 mag

and a reddening law (Draine 2003a,c,b) with a reddening parameter  $R_v = A_v/E(B-V) = 3.1$ .

We find a best fit for  $T_{\text{eff}} = 3800 \pm 100$  K and  $A_v = 0.09 \pm 0.01$  mag (Fig. A). The temperature is in broad agreement (Pecaut & Mamajek 2013) with that expected for the quoted K7 spectral type (Preibisch et al. 2001) and rather suggests a M0 type for the object. We confirm the lack of an excess up to 24  $\mu\text{m}$ . The fit clearly excludes solutions at a higher  $T_{\text{eff}}$  and a reddening of  $A_v = 1.1$  mag as reported by Carpenter et al. (2009).

## Appendix B: Systematic differences in spectral type determination

To determine the spectral type of our sources we focused on the visible using a standard  $\chi^2$  comparison between our spectra and the Ultracool RIZZO Spectral Library (see Sect. 4.1). We also used relations between the spectral type and the  $\text{H}_2\text{O}$  absorption bands from Allers et al. (2007) ( $\text{H}_2\text{O}$  (H)) and Slesnick et al. (2004) ( $\text{H}_2\text{O}$  (J);  $\text{H}_2\text{O}$  (K)). Figure B shows the systematic differences according to each method used to determine the spectral type.



**Fig. B.1.** Determination of the spectral type in using  $\chi^2$  comparison in optical and  $\text{H}_2\text{O}$  absorption bands.

<sup>6</sup> <http://svo2.cab.inta-csic.es/theory/vosa/index.php>

## Appendix C: Additional tables

Table C.1. Results from fits with ForMoSA.

TWA 26	<i>J</i>	<i>H</i>	<i>K</i>	<i>JHK</i>	<i>JHK</i> and $A_v$	<i>JHK</i> -cont	OPT-cont	OPT-croscor	Adopted
$T_{\text{eff}}$ (K)	$2412 \pm 1$	$2640 \pm 1$	$2590 \pm 1$	$2114 \pm 1$	$2587 \pm 1$	$2534 \pm 2$	$2522 \pm 3$	–	$2547^{+94}_{-136}$ <sup>(a)</sup>
$\log(g)$ (dex)	$4.10 \pm 0.01$	3.5	3.5	3.5	3.5	$3.95 \pm 0.01$	$4.32 \pm 0.01$	–	$\leq 4.11$ <sup>(b)</sup>
$R(R_{\text{Jup}})$	$2.61 \pm 0.01$	$2.46 \pm 0.01$	$2.83 \pm 0.01$	$3.72 \pm 0.01$	$3.10 \pm 0.01$	NA	NA	–	$1.97^{+0.87}_{-0.52}$ <sup>(a)</sup>
RV (km s <sup>-1</sup> )	$-20.0 \pm 0.2$	$10.2 \pm 0.2$	$4.1 \pm 0.1$	$15.1 \pm 0.1$	$5.4 \pm 0.1$	$1.4 \pm 0.1$	$18.2 \pm 0.2$	–	$18.2 \pm 0.2$
$\log(L/L_{\odot})$	$-2.68 \pm 0.01$	$-2.57 \pm 0.01$	$-2.48 \pm 0.01$	$-2.60 \pm 0.01$	$-2.41 \pm 0.01$	NA	NA	–	$-2.83^{+0.38}_{-0.36}$ <sup>(c)</sup>
$A_v$ (mag)		0.0			$2.58 \pm 0.01$	0.0		–	0.0 <sup>(d)</sup>
$v \sin(i)$ (km s <sup>-1</sup> )				–			$\leq 44$	–	$\leq 44$
TWA 29	<i>J</i>	<i>H</i>	<i>K</i>	<i>JHK</i>	<i>JHK</i> and $A_v$	<i>JHK</i> -cont	OPT-cont	OPT-croscor	Adopted
$T_{\text{eff}}$ (K)	$2425 \pm 2$	$2577 \pm 3$	$2564 \pm 5$	$2133 \pm 1$	$2554 \pm 2$	$2519 \pm 7$	$2495 \pm 7$	–	$2522^{+58}_{-99}$
$\log(g)$ (dex)	$4.11 \pm 0.02$	3.5	$4.31 \pm 0.02$	3.5	3.5	$3.99 \pm 0.02$	$4.29 \pm 0.03$	–	$\leq 4.33$
$R(R_{\text{Jup}})$	$2.08 \pm 0.01$	$2.05 \pm 0.01$	$2.28 \pm 0.01$	$2.92 \pm 0.01$	$2.48 \pm 0.01$	NA	NA	–	$2.14^{+0.15}_{-0.10}$
RV (km s <sup>-1</sup> )	$-21.0 \pm 1.0$	$8.1 \pm 0.7$	$-7.0 \pm 0.5$	$-18.1 \pm 0.3$	$-9.9 \pm 0.4$	$-6.7 \pm 0.5$	$3.2 \pm 1.0$	–	$3.2 \pm 1.0$
$\log(L/L_{\odot})$	$-2.87 \pm 0.01$	$-2.77 \pm 0.01$	$-2.69 \pm 0.01$	$-2.79 \pm 0.01$	$-2.62 \pm 0.01$	NA	NA	–	$-2.77^{+0.10}_{-0.11}$
$A_v$ (mag)		0.0			$2.32 \pm 0.01$	0.0		–	0.0
$v \sin(i)$ (km s <sup>-1</sup> )				–			$66 \pm 2$	–	$66 \pm 2$
USco 1610-1913 B	<i>J</i>	<i>H</i>	<i>K</i>	<i>JHK</i>	<i>JHK</i> and $A_v$	<i>JHK</i> -cont	OPT-cont	OPT-croscor	Adopted
$T_{\text{eff}}$ (K)	$2440 \pm 2$	$2607 \pm 3$	$2580 \pm 3$	2100	$2652 \pm 2$	$2654 \pm 8$	$2565 \pm 4$	–	$2542^{+68}_{-104}$
$\log(g)$ (dex)	$4.16 \pm 0.01$	3.5	$3.94 \pm 0.02$	3.5	$3.78 \pm 0.02$	$3.94 \pm 0.02$	$4.23 \pm 0.02$	–	$\leq 4.17$
$R(R_{\text{Jup}})$	$3.76 \pm 0.01$	$3.76 \pm 0.01$	$4.10 \pm 0.01$	$5.12 \pm 0.01$	$4.31 \pm 0.01$	NA	NA	–	$3.87^{+0.24}_{-0.12}$
RV (km s <sup>-1</sup> )	$18.9 \pm 0.9$	$5.3 \pm 0.6$	$-2.4 \pm 0.4$	$13.2 \pm 0.2$	$-2.2 \pm 0.3$	$-0.1 \pm 0.2$	$11.5 \pm 0.4$	0.9	$11.5 \pm 0.4$
$\log(L/L_{\odot})$	$-2.34 \pm 0.01$	$-2.23 \pm 0.01$	$-2.17 \pm 0.01$	$-2.26 \pm 0.01$	$-2.08 \pm 0.01$	NA	NA	–	$-2.25^{+0.10}_{-0.10}$
$A_v$ (mag)		0.13			$2.24 \pm 0.01$	0.13		–	0.13
$v \sin(i)$ (km s <sup>-1</sup> )				–			$\leq 44$	–	$\leq 44$
HIP 78530 B	<i>J</i>	<i>H</i>	<i>K</i>	<i>JHK</i>	<i>JHK</i> and $A_v$	<i>JHK</i> -cont	OPT-cont	OPT-croscor	Adopted
$T_{\text{eff}}$ (K)	$2566 \pm 6$	$2791 \pm 6$	$2681 \pm 8$	$2590 \pm 1$	$2772 \pm 3$	$2713 \pm 13$	$2619 \pm 14$	–	$2679^{+118}_{-119}$
$\log(g)$ (dex)	$4.30 \pm 0.04$	$4.00 \pm 0.03$	$3.64 \pm 0.09$	$4.05 \pm 0.01$	$4.05 \pm 0.01$	$4.27 \pm 0.04$	$4.76 \pm 0.04$	–	$\leq 4.34$
$R(R_{\text{Jup}})$	$1.81 \pm 0.01$	$1.70 \pm 0.01$	$1.98 \pm 0.01$	$1.93 \pm 0.01$	$2.00 \pm 0.01$	NA	NA	–	$1.83^{+0.16}_{-0.14}$
RV (km s <sup>-1</sup> )	$-14.0 \pm 2.2$	$-2.0 \pm 1.3$	$-10.7 \pm 1.2$	$-7.8 \pm 0.7$	$-3.0 \pm 0.9$	$-4.2 \pm 0.9$	$7.5 \pm 1.0$	8.5	$7.5 \pm 1.0$
$\log(L/L_{\odot})$	$-2.89 \pm 0.01$	$-2.80 \pm 0.01$	$-2.74 \pm 0.01$	$-2.82 \pm 0.01$	$-2.67 \pm 0.01$	NA	NA	–	$-2.87^{+0.15}_{-0.15}$
$A_v$ (mag)		0.075			$1.97 \pm 0.01$	0.075		–	0.075
$v \sin(i)$ (km s <sup>-1</sup> )				–			$\leq 50$	–	$\leq 50$
HIP 77900 B	<i>J</i>	<i>H</i>	<i>K</i>	<i>JHK</i>	<i>JHK</i> and $A_v$	<i>JHK</i> -cont	OPT-cont	OPT-croscor	Adopted
$T_{\text{eff}}$ (K)	$2511 \pm 6$	$2713 \pm 6$	$2583 \pm 13$	$2570 \pm 1$	$2713 \pm 3$	$2688 \pm 17$	$2604 \pm 13$	–	$2602^{+117}_{-97}$
$\log(g)$ (dex)	$4.23 \pm 0.04$	$3.58 \pm 0.05$	$4.27 \pm 0.09$	$4.12 \pm 0.01$	$4.03 \pm 0.02$	$4.13 \pm 0.04$	$4.59 \pm 0.05$	–	$\leq 4.36$
$R(R_{\text{Jup}})$	$1.73 \pm 0.01$	$1.65 \pm 0.01$	$1.90 \pm 0.01$	$1.79 \pm 0.01$	$1.88 \pm 0.01$	NA	NA	–	$1.76^{+0.15}_{-0.12}$
RV (km s <sup>-1</sup> )	$-22.7 \pm 2.3$	$-22.7 \pm 1.3$	$-29.5 \pm 1.6$	$-23.9 \pm 0.8$	$-22.8 \pm 0.9$	$-22.9 \pm 0.8$	$19.3 \pm 1.2$	20.1	$19.3 \pm 1.2$
$\log(L/L_{\odot})$	$-2.97 \pm 0.01$	$-2.87 \pm 0.01$	$-2.84 \pm 0.01$	$-2.90 \pm 0.01$	$-2.76 \pm 0.01$	NA	NA	–	$-2.89^{+0.15}_{-0.13}$
$A_v$ (mag)		0.07			$1.76 \pm 0.01$	0.07		–	0.07
$v \sin(i)$ (km s <sup>-1</sup> )				–			$\leq 44$	–	$\leq 44$

**Notes.** <sup>(a)</sup>Mean and standard deviation between *J*, *H* and *K* bands. <sup>(b)</sup>High value between *J*, *H*, *K* and *JHK*-cont bands. <sup>(c)</sup>Stefan–Boltzmann law in using  $T_{\text{eff}}$  and radius ranges. <sup>(d)</sup>From Lallement et al. (2019)’s maps (derived from Galli et al. 2018).

**Table C.2.** Results from fits with ForMoSA.

USco 1606-2335	<i>J</i>	<i>H</i>	<i>K</i>	<i>JHK</i>	<i>JHK</i> and $A_v$	<i>JHK</i> -cont	OPT-cont	OPT-croscor	Adopted
$T_{\text{eff}}$ (K)	$2390 \pm 12$	$2620 \pm 13$	$2547 \pm 18$	$2350 \pm 5$	$2650 \pm 7$	$2574 \pm 38$	$2414 \pm 45$	–	$2519^{+114}_{-141}$
$\log(g)$ (dex)	$4.13 \pm 0.08$	3.5	3.5	3.5	$3.89 \pm 0.06$	$4.28 \pm 0.08$	5.0	–	$\leq 4.36$
$R$ ( $R_{\text{Jup}}$ )	$1.41 \pm 0.01$	$1.37 \pm 0.01$	$1.59 \pm 0.02$	$1.65 \pm 0.01$	$1.66 \pm 0.01$	NA	NA	–	$1.46^{+0.15}_{-0.10}$
RV ( $\text{km s}^{-1}$ )	$-11.7 \pm 4.9$	$-0.9 \pm 1.6$	$-10.0 \pm 2.8$	$-10.1 \pm 1.2$	$-3.4 \pm 1.5$	$-4.3 \pm 1.6$	$13.6 \pm 3.6$	13.1	$10.1 \pm 4.1$
$\log(L/L_{\odot})$	$-3.23 \pm 0.01$	$-3.09 \pm 0.01$	$-3.01 \pm 0.01$	$-3.12 \pm 0.01$	$-2.91 \pm 0.01$	NA	NA	–	$-3.11^{+0.16}_{-0.16}$
$A_v$ (mag)		0.0			$3.06 \pm 0.03$		0.0	–	$0.0^{(d)}$
$v \sin(i)$ ( $\text{km s}^{-1}$ )				–			$\leq 45$	–	$\leq 45$
USco 1607-2211	<i>J</i>	<i>H</i>	<i>K</i>	<i>JHK</i>	<i>JHK</i> and $A_v$	<i>JHK</i> -cont	OPT-cont	OPT-croscor	Adopted
$T_{\text{eff}}$ (K)	$2445 \pm 5$	$2616 \pm 6$	$2609 \pm 5$	$2384 \pm 1$	$2621 \pm 2$	$2674 \pm 13$	$2532 \pm 15$	–	$2557^{+65}_{-117}$
$\log(g)$ (dex)	$3.92 \pm 0.07$	3.5	$3.79 \pm 0.06$	3.5	$4.20 \pm 0.01$	$4.02 \pm 0.03$	$4.25 \pm 0.06$	–	$\leq 4.05$
$R$ ( $R_{\text{Jup}}$ )	$1.92 \pm 0.01$	$1.87 \pm 0.01$	$1.96 \pm 0.01$	$2.18 \pm 0.01$	$2.07 \pm 0.01$	NA	NA	–	$1.92^{+0.05}_{-0.06}$
RV ( $\text{km s}^{-1}$ )	$-31.0 \pm 1.8$	$-28.2 \pm 1.1$	$-0.5 \pm 0.6$	$-14.2 \pm 0.4$	$-8.3 \pm 0.5$	$-9.1 \pm 0.5$	$-10.1 \pm 1.3$	$-10.2$	$-11.1 \pm 1.4$
$\log(L/L_{\odot})$	$-2.92 \pm 0.01$	$-2.83 \pm 0.01$	$-2.79 \pm 0.01$	$-2.85 \pm 0.01$	$-2.74 \pm 0.01$	NA	NA	–	$-2.84^{+0.07}_{-0.11}$
$A_v$ (mag)		0.0			$1.64 \pm 0.01$		0.0	–	0.0
$v \sin(i)$ ( $\text{km s}^{-1}$ )				–			$\leq 45$	–	$\leq 45$
USco 1607-2242	<i>J</i>	<i>H</i>	<i>K</i>	<i>JHK</i>	<i>JHK</i> and $A_v$	<i>JHK</i> -cont	OPT-cont	OPT-croscor	Adopted
$T_{\text{eff}}$ (K)	$2265 \pm 14$	$2512 \pm 13$	$2432 \pm 23$	2100	$2579 \pm 8$	$2432 \pm 71$	$2380 \pm 102$	–	$2403^{+122}_{-152}$
$\log(g)$ (dex)	$3.84 \pm 0.07$	3.5	3.5	3.5	3.5	$3.96 \pm 0.14$	$4.01 \pm 0.27$	–	$\leq 4.10$
$R$ ( $R_{\text{Jup}}$ )	$1.09 \pm 0.02$	$1.06 \pm 0.01$	$1.24 \pm 0.02$	$1.47 \pm 0.01$	$1.31 \pm 0.01$	NA	NA	–	$1.13^{+0.13}_{-0.08}$
RV ( $\text{km s}^{-1}$ )	$-19.0 \pm 6.1$	$-0.1 \pm 1.2$	$-5.3 \pm 3.3$	$-9.9 \pm 1.2$	$-1.1 \pm 1.4$	$-1.1 \pm 1.5$	$6.7 \pm 11.6$	9.6	$5.7 \pm 10.8$
$\log(L/L_{\odot})$	$-3.55 \pm 0.01$	$-3.39 \pm 0.01$	$-3.31 \pm 0.01$	$-3.42 \pm 0.01$	$-3.16 \pm 0.01$	NA	NA	–	$-3.41^{+0.18}_{-0.18}$
$A_v$ (mag)		0.0			$3.82 \pm 0.04$		0.0	–	0.0
$v \sin(i)$ ( $\text{km s}^{-1}$ )				–			$\leq 45$	–	$\leq 45$
USco 1608-2232	<i>J</i>	<i>H</i>	<i>K</i>	<i>JHK</i>	<i>JHK</i> and $A_v$	<i>JHK</i> -cont	OPT-cont	OPT-croscor	Adopted
$T_{\text{eff}}$ (K)	$2317 \pm 7$	$2482 \pm 8$	$2427 \pm 12$	2100	$2555 \pm 5$	$2510 \pm 26$	$2363 \pm 50$	–	$2409^{+81}_{-99}$
$\log(g)$ (dex)	$3.85 \pm 0.05$	3.5	3.5	3.5	3.5	$4.01 \pm 0.08$	5.0	–	$\leq 4.09$
$R$ ( $R_{\text{Jup}}$ )	$1.52 \pm 0.01$	$1.56 \pm 0.01$	$1.81 \pm 0.01$	$2.13 \pm 0.01$	$1.91 \pm 0.01$	NA	NA	–	$1.63^{+0.19}_{-0.12}$
RV ( $\text{km s}^{-1}$ )	$-14.1 \pm 3.6$	$-0.5 \pm 1.2$	$-3.5 \pm 1.9$	$-10.5 \pm 0.8$	$-1.4 \pm 1.1$	$-1.5 \pm 1.2$	$11.1 \pm 4.0$	9.7	$11.0 \pm 4.5$
$\log(L/L_{\odot})$	$-3.22 \pm 0.01$	$-3.08 \pm 0.01$	$-2.99 \pm 0.01$	$-3.10 \pm 0.01$	$-2.85 \pm 0.01$	NA	NA	–	$-3.09^{+0.15}_{-0.14}$
$A_v$ (mag)		0.0			$3.65 \pm 0.02$		0.0	–	0.0
$v \sin(i)$ ( $\text{km s}^{-1}$ )				–			$\leq 47$	–	$\leq 47$
USco 1608-2315	<i>J</i>	<i>H</i>	<i>K</i>	<i>JHK</i>	<i>JHK</i> and $A_v$	<i>JHK</i> -cont	OPT-cont	OPT-croscor	Adopted
$T_{\text{eff}}$ (K)	$2344 \pm 4$	$2555 \pm 5$	$2561 \pm 7$	2100	$2659 \pm 3$	$2664 \pm 15$	$2494 \pm 27$	–	$2487^{+81}_{-147}$
$\log(g)$ (dex)	$3.80 \pm 0.03$	3.5	3.5	3.5	$3.66 \pm 0.02$	$4.13 \pm 0.03$	$4.27 \pm 0.10$	–	$\leq 4.16$
$R$ ( $R_{\text{Jup}}$ )	$1.96 \pm 0.01$	$1.92 \pm 0.01$	$2.11 \pm 0.01$	$2.78 \pm 0.01$	$2.26 \pm 0.01$	NA	NA	–	$2.00^{+0.12}_{-0.09}$
RV ( $\text{km s}^{-1}$ )	$-15.4 \pm 2.1$	$-0.1 \pm 0.5$	$-1.8 \pm 1.0$	$-13.8 \pm 0.4$	$-0.2 \pm 0.3$	$-0.1 \pm 0.2$	$10.6 \pm 2.3$	5.3	$10.4 \pm 2.5$
$\log(L/L_{\odot})$	$-2.98 \pm 0.01$	$-2.84 \pm 0.01$	$-2.76 \pm 0.01$	$-2.86 \pm 0.01$	$-2.63 \pm 0.01$	NA	NA	–	$-2.86^{+0.11}_{-0.15}$
$A_v$ (mag)		0.0			$3.28 \pm 0.01$		0.0	–	0.0
$v \sin(i)$ ( $\text{km s}^{-1}$ )				–			$\leq 45$	–	$\leq 45$
USco 1610-2239	<i>J</i>	<i>H</i>	<i>K</i>	<i>JHK</i>	<i>JHK</i> and $A_v$	<i>JHK</i> -cont	OPT-cont	OPT-croscor	Adopted
$T_{\text{eff}}$ (K)	$2397 \pm 6$	$2596 \pm 5$	$2503 \pm 7$	$2343 \pm 2$	$2633 \pm 3$	$2612 \pm 16$	$2514 \pm 19$	–	$2499^{+102}_{-108}$
$\log(g)$ (dex)	$3.87 \pm 0.05$	3.5	3.5	3.5	3.5	$3.97 \pm 0.04$	$4.31 \pm 0.08$	–	$\leq 4.01$
$R$ ( $R_{\text{Jup}}$ )	$1.87 \pm 0.01$	$1.85 \pm 0.01$	$2.15 \pm 0.01$	$2.21 \pm 0.01$	$2.21 \pm 0.01$	NA	NA	–	$1.98^{+0.24}_{-0.14}$
RV ( $\text{km s}^{-1}$ )	$-13.0 \pm 2.1$	$-0.1 \pm 0.4$	$-3.4 \pm 1.1$	$-7.6 \pm 0.5$	$-0.9 \pm 0.6$	$-0.5 \pm 0.6$	$7.7 \pm 1.7$	7.9	$11.3 \pm 1.8$
$\log(L/L_{\odot})$	$-2.98 \pm 0.01$	$-2.85 \pm 0.01$	$-2.78 \pm 0.01$	$-2.87 \pm 0.01$	$-2.67 \pm 0.01$	NA	NA	–	$-2.86^{+0.17}_{-0.14}$
$A_v$ (mag)		0.0			$2.91 \pm 0.01$		0.0	–	0.0
$v \sin(i)$ ( $\text{km s}^{-1}$ )				–			$\leq 45$	–	$\leq 45$

**Table C.3.** Apparent fluxes of the emission lines for the companions and free-floating brown dwarfs from our original sample.

Object	Date	Ca II-H ( $10^{-19} \text{ W m}^{-2}$ )	Ca II-K ( $10^{-19} \text{ W m}^{-2}$ )	H $\gamma$ ( $10^{-19} \text{ W m}^{-2}$ )	H $\beta$ ( $10^{-19} \text{ W m}^{-2}$ )	H $\alpha$ ( $10^{-19} \text{ W m}^{-2}$ )	10% H $\alpha$ ( $\text{km s}^{-1}$ )
USco 1610-1913 B	2014-04-02	$0.27 \pm 0.11$	$0.23 \pm 0.15$	$0.23 \pm 0.18$	$0.56 \pm 0.21$	$4.86 \pm 0.26$	145
HIP 77900 B	2014-04-12 05:45UT	<0.31	<0.22	<0.45	<0.46	$0.40 \pm 0.15$	...
HIP 77900 B	2014-04-12 08:38UT	<0.20	<0.23	<0.24	<0.37	$0.58 \pm 0.15$	...
HIP 78530 B	2014-06-09 04:08UT	<0.95	<0.99	<1.28	<2.61	$0.68 \pm 0.36$	...
HIP 78530 B	2014-06-09 05:14UT	<0.47	<0.72	<0.79	<2.19	$0.61 \pm 0.29$	...
USco 1607-2242	all epochs	<0.06	<0.10	<0.07	<0.09	<0.10	...
USco 1608-2232	all epochs	<0.04	<0.04	<0.03	<0.10	<0.14	...
USco 1606-2335	2014-06-25	<0.15	<0.13	$0.14 \pm 0.14$	$0.23 \pm 0.17$	$0.53 \pm 0.19$	...
USco 1606-2335	2014-06-30	<0.09	<0.32	$0.22 \pm 0.19$	$0.18 \pm 0.11$	$0.72 \pm 0.17$	169
USco 1606-2335	2014-07-04	<0.07	<0.09	$0.24 \pm 0.12$	$0.39 \pm 0.11$	$1.58 \pm 0.15$	136
USco 1606-2335	2014-07-29	<0.08	<0.09	$0.18 \pm 0.10$	$0.22 \pm 0.08$	$0.85 \pm 0.15$	105:
USco 1610-2239	2014-06-30	<0.10	<0.10	<0.15	<0.13	$0.28 \pm 0.09$	...
USco 1610-2239	2014-07-01 03:26UT	<0.16	<0.93	<0.19	<0.19	$0.41 \pm 0.16$	...
USco 1610-2239	2014-07-01 04:04UT	<0.07	<0.11	<0.13	<0.12	$0.39 \pm 0.11$	...
USco 1608-2315	2014-06-15	<0.11	<0.29	$1.07 \pm 0.23$	$1.85 \pm 0.25$	$11.99 \pm 0.38$	220
USco 1608-2315	2014-06-20	<0.11	<0.25	$0.83 \pm 0.14$	$1.07 \pm 0.14$	$7.65 \pm 0.30$	209
USco 1607-2211	2014-04-22	<0.17	<0.15	<0.20	<0.23	$0.99 \pm 0.18$	160
USco 1607-2211	2014-06-14	<0.11	<0.11	<0.17	<0.23	...	...

**Notes.** We also report the 10% width of the H $\alpha$  line. The upper limits on the line flux correspond to the  $1\sigma$  noise level of the continuum.

**Table C.4.** Accretion luminosities computed from the emission lines.

Object	Date	Ca II-H $\log(L_{\text{acc}}/L_{\odot})$	Ca II-K $\log(L_{\text{acc}}/L_{\odot})$	H $\gamma$ $\log(L_{\text{acc}}/L_{\odot})$	H $\beta$ $\log(L_{\text{acc}}/L_{\odot})$	H $\alpha$ $\log(L_{\text{acc}}/L_{\odot})$	Balmer $\log(L_{\text{acc}}/L_{\odot})$	$\log(L_{\text{acc,noise}}/L_{\odot})$
USco 1610-1913 B	2014-04-02	$-5.57 \pm 0.21$	$-5.56 \pm 0.37$	$-6.00 \pm 0.70$	$-5.89 \pm 0.14$	$-5.61 \pm 0.05$	$-5.70 \pm 0.30$	-5.65
HIP 77900 B	2014-04-12 05:45UT	$\leq -5.52$	$\leq -5.65$	$\leq -5.67$	$\leq -6.06$	$-6.79 \pm 0.05$	$-6.79 \pm 0.05$	-6.06
HIP 77900 B	2014-04-12 08:38UT	$\leq -5.73$	$\leq -5.63$	$\leq -5.98$	$\leq -6.05$	$-6.61 \pm 0.02$	$-6.61 \pm 0.02$	-6.07
HIP 78530 B	2014-06-09 04:08UT	$\leq -5.04$	$\leq -4.95$	$\leq -5.22$	$\leq -5.18$	$-6.62 \pm 0.18$	$-6.62 \pm 0.18$	-6.07
HIP 78530 B	2014-06-09 05:14UT	$\leq -5.36$	$\leq -5.09$	$\leq -5.45$	$\leq -5.26$	$-6.67 \pm 0.13$	$-6.67 \pm 0.13$	-6.07
USco 1607-2242	all epochs	$\leq -6.26$	$\leq -5.93$	$\leq -6.56$	$\leq -6.79$	$\leq -7.51$	...	...
USco 1608-2232	all epochs	$\leq -6.45$	$\leq -6.34$	$\leq -6.97$	$\leq -6.74$	$\leq -7.34$	...	...
USco 1606-2335	2014-06-25	$\leq -5.84$	$\leq -5.81$	$-6.20 \pm 1.34$	$-6.33 \pm 0.63$	$-6.69 \pm 0.16$	$-6.58 \pm 0.71$	-6.60
USco 1606-2335	2014-06-30	$\leq -6.07$	$\leq -5.41$	$-6.01 \pm 1.01$	$-6.45 \pm 0.44$	$-6.54 \pm 0.09$	$-6.49 \pm 0.51$	-6.60
USco 1606-2335	2014-07-04	$\leq -6.19$	$\leq -5.98$	$-5.97 \pm 0.40$	$-6.06 \pm 0.16$	$-6.15 \pm 0.03$	$-6.13 \pm 0.20$	-6.60
USco 1606-2335	2014-07-29	$\leq -6.13$	$\leq -5.98$	$-6.11 \pm 0.45$	$-6.35 \pm 0.20$	$-6.46 \pm 0.06$	$-6.40 \pm 0.24$	-6.60
USco 1610-2239	2014-06-30	$\leq -6.13$	$\leq -6.04$	$\leq -6.31$	$\leq -6.73$	$-7.12 \pm 0.09$	$-7.12 \pm 0.09$	-6.33
USco 1610-2239	2014-07-01 03:26UT	$\leq -5.92$	$\leq -5.04$	$\leq -6.20$	$\leq -6.54$	$-6.93 \pm 0.15$	$-6.93 \pm 0.15$	-6.33
USco 1610-2239	2014-07-01 04:04UT	$\leq -6.30$	$\leq -5.99$	$\leq -6.38$	$\leq -6.77$	$-6.96 \pm 0.07$	$-6.96 \pm 0.07$	-6.33
USco 1608-2315	2014-06-15	$\leq -5.98$	$\leq -5.45$	$-5.25 \pm 0.21$	$-5.29 \pm 0.09$	$-5.16 \pm 0.03$	$-5.20 \pm 0.11$	-6.30
USco 1608-2315	2014-06-20	$\leq -5.98$	$\leq -5.52$	$-5.37 \pm 0.18$	$-5.56 \pm 0.08$	$-6.34 \pm 0.04$	$-5.99 \pm 0.10$	-6.30
USco 1607-2211	2014-04-22	$\leq -5.96$	$\leq -5.92$	$\leq -6.25$	$\leq -6.52$	$-6.57 \pm 0.07$	$-6.57 \pm 0.07$	-6.27
USco 1607-2211	2014-06-14	$\leq -6.16$	$\leq -6.06$	$\leq -6.32$	$\leq -6.52$	...	...	...

**Notes.** The accretion luminosity for each line is derived from [Rigliaco et al. \(2012\)](#). The weighted mean of the  $L_{\text{acc}}$  values are reported in the ‘‘Balmer’’ column. The  $\log(L_{\text{acc,noise}}/L_{\odot})$  value of USco 1610-1913 B assumes the companion is a single object. In case of higher multiplicity, and assuming a  $L_{\text{bol}}$  similar to HIP 77900 B, we find  $\log(L_{\text{acc,noise}}/L_{\odot}) = -6.11^{+0.19}_{-0.22}$ .

**Table C.5.** Accretion rates from apparent fluxes of the emission lines for the companions and free-floating brown dwarfs from our original sample.

Object	Date	Ca II-H $\log(M_{\odot} \text{ yr}^{-1})$	Ca II-K $\log(M_{\odot} \text{ yr}^{-1})$	H $_{\gamma}$ $\log(M_{\odot} \text{ yr}^{-1})$	H $_{\beta}$ $\log(M_{\odot} \text{ yr}^{-1})$	H $_{\alpha}$ $\log(M_{\odot} \text{ yr}^{-1})$	10% H $_{\alpha}$ $\log(M_{\odot} \text{ yr}^{-1})$
USco 1610-1913 B	2014-04-02	$-12.10 \pm 0.53$	$-12.09 \pm 0.69$	$-12.53 \pm 1.02$	$-12.42 \pm 0.46$	$-12.14 \pm 0.37$	$-11.48 \pm 0.40$
HIP 77900 B	2014-04-12 05:45UT	$<-11.69$	$<-11.82$	$<-11.84$	$<-12.23$	$-13.22 \pm 0.30$	...
HIP 77900 B	2014-04-12 08:38UT	$<-11.90$	$<-11.80$	$<-12.15$	$<-12.22$	$-13.04 \pm 0.27$	...
HIP 78530 B	2014-06-09 04:08UT	$<-11.20$	$<-11.11$	$<-11.38$	$<-11.34$	$-13.01 \pm 0.41$	...
HIP 78530 B	2014-06-09 05:14UT	$<-11.52$	$<-11.25$	$<-11.61$	$<-11.42$	$-13.06 \pm 0.36$	...
USco 1607-2242	all epochs	$<-12.32$	$<-11.99$	$<-12.62$	$<-12.85$	$<-13.57$	...
USco 1608-2232	all epochs	$<-12.56$	$<-11.45$	$<-13.08$	$<-12.85$	$<-13.45$	...
USco 1606-2335	2014-06-25	$<-11.86$	$<-11.83$	$-12.39 \pm 1.51$	$-12.52 \pm 0.80$	$-12.88 \pm 0.33$	...
USco 1606-2335	2014-06-30	$<-12.09$	$<-11.43$	$-12.20 \pm 1.18$	$-12.64 \pm 0.61$	$-12.73 \pm 0.26$	$-11.25 \pm 0.42$
USco 1606-2335	2014-07-04 $<-12.21$	$<-12.00$	$-12.16 \pm 0.57$	$-12.25 \pm 0.33$	$-12.34 \pm 0.20$	$-11.57 \pm 0.40$	...
USco 1606-2335	2014-07-29	$<-12.15$	$<-12.00$	$-12.30 \pm 0.62$	$-12.54 \pm 0.37$	$-12.65 \pm 0.23$	$-11.87 \pm 0.37$
USco 1610-2239	2014-06-30	$<-12.29$	$<-12.20$	$<-12.47$	$<-12.89$	$-13.46 \pm 0.27$	...
USco 1610-2239	2014-07-01 03:26UT	$<-12.08$	$<-11.20$	$<-12.36$	$<-12.70$	$-13.27 \pm 0.33$	...
USco 1610-2239	2014-07-01 04:04UT	$<-12.46$	$<-12.15$	$<-12.54$	$<-12.93$	$-13.30 \pm 0.25$	...
USco 1608-2315	2014-06-15	$<-12.10$	$<-11.57$	$-11.59 \pm 0.43$	$-11.63 \pm 0.31$	$-11.50 \pm 0.25$	$-10.76 \pm 0.45$
USco 1608-2315	2014-06-20	$<-12.10$	$<-11.64$	$-11.71 \pm 0.40$	$-11.90 \pm 0.30$	$-12.68 \pm 0.26$	$-10.86 \pm 0.45$
USco 1607-2211	2014-04-22	$<-12.08$	$<-12.04$	$<-12.37$	$<-12.64$	$-12.91 \pm 0.29$	$-11.34 \pm 0.41$
USco 1607-2211	2014-06-14	$<-12.28$	$<-12.18$	$<-12.44$	$<-12.64$	...	...

**Notes.** The accretion rate for each line is derived from [Alcalá et al. \(2017\)](#) and the one from the 10% H $_{\alpha}$  is derived from [Natta et al. \(2004\)](#).

## 2.4 Discussion & perspectives

### 2.4.1 Défis liés à la caractérisation des atmosphères sous-stellaires jeunes

La capacité de X-Shooter à produire des spectres dans le proche infrarouge à haut signal à bruit, moyenne résolution spectrale et sur une grande gamme de longueurs d'ondes, en fait l'instrument idéal pour étudier les propriétés atmosphériques des exoplanètes à large séparation et naines brunes jeunes et en accréation. La richesse des données de X-Shooter donne accès à de nombreuses raies d'absorptions atomiques et moléculaires qui peuvent être utilisées comme traceurs de formation ou pour étudier l'architecture des naines brunes observées, avec entre autres, la possibilité de déterminer leurs propriétés cinématiques (vitesse radiale et rotationnelle). Grâce à ForMoSA, il est également possible de déterminer leurs propriétés atmosphériques en utilisant des grilles de spectres synthétiques calculés à partir de notre compréhension actuelle des mécanismes physico-chimiques considérés dans les dernières générations de modèles atmosphériques BT-SETTL. Par conséquent, dans le cadre d'observations à haut signal à bruit couvrant une grande gamme spectrale, notre interprétation et ses limitations sont ainsi directement liées à celle des modèles actuels.

Dans le cas des modèles BT-SETTL, la forme triangulaire caractéristique de la bande H n'est pas bien reproduite, ainsi que la pente spectrale dans le proche infrarouge. Ces problèmes de modélisation entraînent des biais dans la détermination des propriétés physiques de l'atmosphère en fonction de l'intervalle en longueurs d'ondes utilisé pour l'ajustement aux observations. Cette étude a par ailleurs montré que l'ajout d'un paramètre supplémentaire d'extinction (suivant les lois d'extinction interstellaire) permettait d'améliorer significativement et de manière systématique l'ajustement du continuum spectral de l'ensemble des objets étudiés. Cette correction, qui n'est pas cohérente avec notre connaissance de l'extinction interstellaire pour ces sources, indique un problème probable dans le traitement de la formation des poussières dans ces jeunes atmosphères sous-stellaires proches de la transition M/L.

Les résultats de ce travail, ciblant de jeunes naines brunes M tardives de 10-20 Myr, posent plusieurs questions concernant le comportement des modèles d'atmosphères BT-SETTL sur une gamme étendue de propriétés physiques en matière de température effective, de gravité de surface (donc de masse et de rayon) et de type spectral. Ils appellent aussi l'utilisation d'une nouvelle génération de modèles testant différents effets physiques, comme les modèles ATMO (effet des instabilités thermodynamiques ne nécessitant pas la présence de nuages), différentes paramétrisations des poussières avec les modèles Exo-REM (microphysique simplifiée, modèles calibrés pour les objets de la transition L-T), pour mieux dégager les ingrédients physiques clés afin de reproduire la richesse des spectres X-Shooter observés, mais aussi préparer l'arrivée de données complémentaires à plus haute résolution spectrale (CRIRES+, NIRPS, Spirou) et sur des gammes spectrales étendues (JWST/NIRSpec et MIRI). Cette étude pilote a par ailleurs posé les premières marques d'un relevé systématique plus large avec le projet X-Shyne sur une quarantaine de jeunes naines brunes couvrant un espace de paramètres physiques étendu vis-à-vis du programme Upper Sco. Ce programme, présenté dans le Chapitre 4, inclut des jeunes analogues exoplanétaires sur des âges de 10-150 Myr, des températures de 800-1700 K, et des masses de 5-25  $M_{\text{Jup}}$ .

### 2.4.2 Des marqueurs d'accréation dans l'atmosphère des naines brunes jeunes

Dans les années 90 émergea l'idée d'un réservoir de matière autour des compagnons de masse planétaire, sous la forme d'un disque circum-planétaire (analogie possible avec les disques circum-stellaires autour des étoiles). Lors de leur formation, les planètes présentant une telle structure, peuvent accréter une partie de leur masse en puisant de la poussière et du gaz de leur disque circum-planétaire. Cela a été détecté par [Haffert et al. \(2019\)](#) qui détectèrent de fortes raies d'émission d'hydrogène (accréation) à la position de PDS70 b, et par [Christiaens et al. \(2019b\)](#) qui mesurèrent l'excès de flux du disque circum-planétaire autour de la planète. Plus récemment, ([Benisty](#)

et al., 2021) ont pu, pour la première fois, résoudre le disque circum-planétaire (réservoir de matière) autour de PDS70 c, grâce à des observations ALMA.

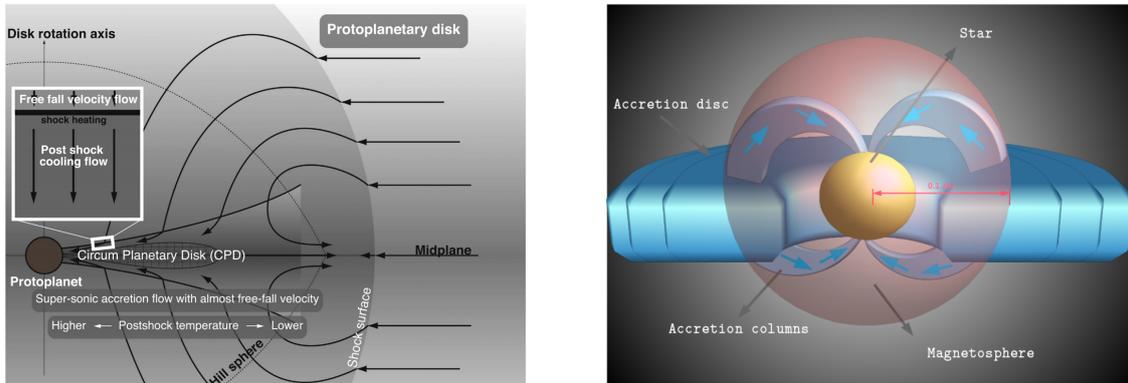


FIGURE 2.11 – Schémas simplifiés des deux mécanismes actuellement invoqués pour la formation des planètes par accrétion. À gauche : Accrétion par courant de matière (figure issue de Aoyama et al. (2018)). À droite : Accrétion par colonne d'accrétion. C'est ici le cas d'une étoile T-Tauri en formation qui est montré, ce modèle a été adapté pour les planètes (figure issue de Romero et al. (2011)).

Bien que la présence de disques circum-planétaires comme réservoirs de matière utilisée lors de la formation des planètes soit vérifiée, l'étude observationnelle des mécanismes d'accrétion débute. Certaines simulations récentes montrent que la poussière et le gaz du disque peuvent chuter sur le cœur de la proto-planète à travers des courants de matière (voir la Figure 2.11, à gauche), produisant un choc d'accrétion à la surface du disque (Aoyama et al., 2018; Szulágyi & Mordasini, 2017). Ce mode d'accrétion nécessite que la proto-planète soit enveloppée par le disque sans discontinuité. D'autres modèles, adaptés des modèles d'accrétion magnétosphérique généralement utilisés pour expliquer la formation des étoiles T-Tauri (voir la Figure 2.11, à droite), prédisent que la matière tombe sur la planète en suivant des colonnes d'accrétion, créant un choc à la surface de la planète (Thanathibodee et al., 2019). Ce mécanisme semble être le plus probable pour les planètes détachées de leur disque, à larges orbites ( $>100\text{au}$ ) et plus anciennes.

Lors du choc d'accrétion, l'hydrogène présent dans le gaz (composé majoritaire) chauffe, se ionise et forme des raies d'émissions, dont la plus lumineuse est la raie  $H_\alpha$  ( $0.6563\ \mu\text{m}$ ). L'étude de cette raie est aujourd'hui l'une des pistes privilégiée pour contraindre les mécanismes d'accrétion. Elle permet d'estimer le taux d'accrétion, la température, la densité et la cinématique du gaz dans le choc. Ces propriétés peuvent ensuite être comparées à celles prédites par les modèles d'accrétion (Aoyama et al., 2021a).

Comme montré dans la Table 2.1, seuls quelques spectres à moyenne résolution de compagnons planétaires ont pu être obtenus. À trop basse résolution ( $R < 700$ ), le contraste entre la raie  $H_\alpha$  et la luminosité de l'étoile est trop fort pour permettre une détection. Ainsi, seul le système PDS70 a été identifié comme contenant des planètes accrétantes. Ce manque de diversité motive l'étude des phénomènes d'accrétion (potentiellement semblables) en jeu dans la formation des naines brunes jeunes, de faible masse, isolées ou à large séparation.

Dans l'étude présentée dans ce chapitre, nous avons détecté des émissions  $H_\alpha$  pour sept de nos neuf naines brunes. À partir de la luminosité de ces raies, nous avons pu calculer le taux d'accrétion (Alcalá et al., 2017). En comparant la largeur à 10% de ces raies, il est cependant apparu que certaines d'entre elles étaient en réalité dues à de l'activité chromosphérique dans la haute atmosphère des objets. Cependant, nous avons identifié USco 1608-2315 comme nouvelle naine brune accrétante de  $30 M_{\text{Jup}}$ . Notons que de la variabilité a été mesurée pour ces raies  $H_\alpha$ , pouvant être due à des variations d'activité chromosphérique (Gizis et al., 2002) ou à des phases d'accrétion accrues dans le cas de USco 1608-2315. La recherche et l'analyse de signatures d'accrétion dans

les spectres des naines brunes est donc une précieuse source d'information pour comprendre les mécanismes d'accrétion. Il est nécessaire de pousser ces études vers les objets sous-stellaires de masse planétaire (voir le Chapitre 4). D'autres pistes sont aussi à explorer, comme le suivi temporel de la variabilité des raies d'émission pour contraindre la nature physique du processus de leur émission, l'utilisation d'imageurs polarimétriques pour détecter les poussières du disque circum-planétaire, la recherche de poussières avec des données millimétriques (utilisation de ALMA) pour contraindre la masse du disque, ou encore l'ajout d'un modèle de disque circum-planétaire dans ForMoSA pour contraindre à la fois les propriétés de la planète et du disque.

L'étude de l'accrétion des compagnons planétaires est aujourd'hui grandement limitée par la difficulté d'observer ces marqueurs (raies d'émission de l'hydrogène). Actuellement, les observations sont principalement obtenues par l'instrument MUSE, cependant, l'arrivée de nouveaux instruments, pourrait changer la donne. Les spectrographes à intégrale de champ combinent la haute résolution spatiale, le haut contraste et la résolution spectrale. Ils sont donc tout indiqués pour rechercher des raies d'émission dans le spectre des compagnons planétaires proches de l'étoile. Grâce aux nouveaux instruments au sol, comme SPHERE+ et ERIS au VLT ou METIS et HARMONI à l'ELT, et dans l'espace, comme avec MIRI et NIRSpec embarqués à bord du JWST, il sera possible de détecter de nombreuses raies d'émission susceptibles d'être des signatures d'accrétion, comme  $H_\alpha$ , mais aussi  $H_\gamma$  ( $0.4341 \mu\text{m}$ ),  $H_\beta$  ( $0.4861 \mu\text{m}$ ), O I ( $0.8446 \mu\text{m}$ ), Ca II ( $0.8544 \mu\text{m}$ ),  $\text{Pa}_\beta$  ( $1.2822 \mu\text{m}$ ) ou  $\text{Br}_\gamma$  ( $2.166 \mu\text{m}$ ).



# 3

## Le *molecular mapping* : une méthode de détection et de caractérisation prometteuse

---

*Les techniques d'imagerie différentielle, couplées à l'optique adaptative et à la coronographie, sont couramment utilisées de nos jours sur les grands télescopes pour imager les systèmes exoplanétaires au-delà de  $\sim 10$  ua, en soustrayant la contribution du flux stellaire. Elles ont, dès les premières découvertes, permis d'obtenir des mesures photométriques pour caractériser les propriétés des jeunes exoplanètes imagées (luminosité, couleurs et températures, présence de rougissement lié aux nuages). Le couplage à des spectrographes à intégrale de champ (OSIRIS, SINFONI, GPI, SPHERE) a montré la richesse de la diversité spectrale, pour améliorer les performances de détection des nouvelles générations d'imageurs de planètes, mais aussi pour ouvrir la possibilité d'une caractérisation étendue des propriétés exoplanétaires, incluant l'étude de la composition, des abondances moléculaires, des propriétés cinématiques et rotationnelles.*

*Dans ce chapitre, je reviendrai sur la technique récente de *molecular mapping*, qui exploite pleinement cette diversité et les différences spectrales entre les étoiles et les exoplanètes, pour optimiser leur détection et caractérisation avec les spectrographes à intégrale de champ. Je commencerai par décrire l'instrument SINFONI, puis je détaillerai l'algorithme du *molecular mapping* et le code `TE $\alpha$ TRIS` qui utilise cet algorithme, puis je présenterai une application de ce code sur des données SINFONI du système HIP 65426.*

---

---

## Sommaire

---

<b>3.1</b>	<b>La spectroscopie intégrale de champ et l'instrument SINFONI</b>	<b>87</b>
3.1.1	Combiner les résolutions spatiales et spectrales	87
3.1.2	L'instrument SINFONI (SINgle Faint Object Near-IR Investigation)	89
3.1.3	Réduction des données SINFONI	90
<b>3.2</b>	<b>Le <i>molecular mapping</i></b>	<b>91</b>
3.2.1	Problématique et naissance de l'algorithme	91
3.2.2	La méthode du <i>molecular mapping</i> et le code TExTRIS (Toolkit for Exoplanet deTection and chaRacterization with IfS)	92
3.2.3	Application du <i>molecular mapping</i> à des grilles de spectres synthétiques	95
<b>3.3</b>	<b>Application du <i>molecular mapping</i> : Le cas de HIP 65426 b</b>	<b>96</b>
3.3.1	Un compagnon prioritaire	96
3.3.2	Le besoin de spectres à moyenne et haute résolution	97
3.3.3	Observations et méthodes	98
3.3.4	Publication de l'étude	98
<b>3.4</b>	<b>Discussion &amp; perspectives</b>	<b>119</b>
3.4.1	Le potentiel du <i>molecular mapping</i>	119
3.4.2	Conséquences sur notre compréhension des mécanismes de formation	119
3.4.3	Perspectives du <i>molecular mapping</i>	120

---

### 3.1 La spectroscopie intégrale de champ et l'instrument SINFONI

#### 3.1.1 Combiner les résolutions spatiales et spectrales

Ces dernières années, une troisième dimension s'est particulièrement développée : la diversité spectrale, pour pousser à la fois les aspects de caractérisation mais aussi de détection. La combinaison de la haute résolution spatiale, des techniques de haut contraste et de la diversité spectrale offre des perspectives riches, comme la découverte "à l'aveugle" de compagnons lors de relevés du ciel et la caractérisation de ces détections avec le même jeu de données, ouvrant la voie aux futurs imageurs d'exoplanètes telluriques sur les télescopes extrêmement grands au sol. Dans ce cadre, les spectrographes à intégrale de champ sont particulièrement intéressants pour exploiter pleinement les deux dimensions spatiales d'une image, permettant l'exploration de l'environnement stellaire en plus de la dimension spectrale. À ce jour, il existe trois grandes familles de spectrographes à intégrale de champ, dont les principaux sont indiqués dans la Table 3.1.

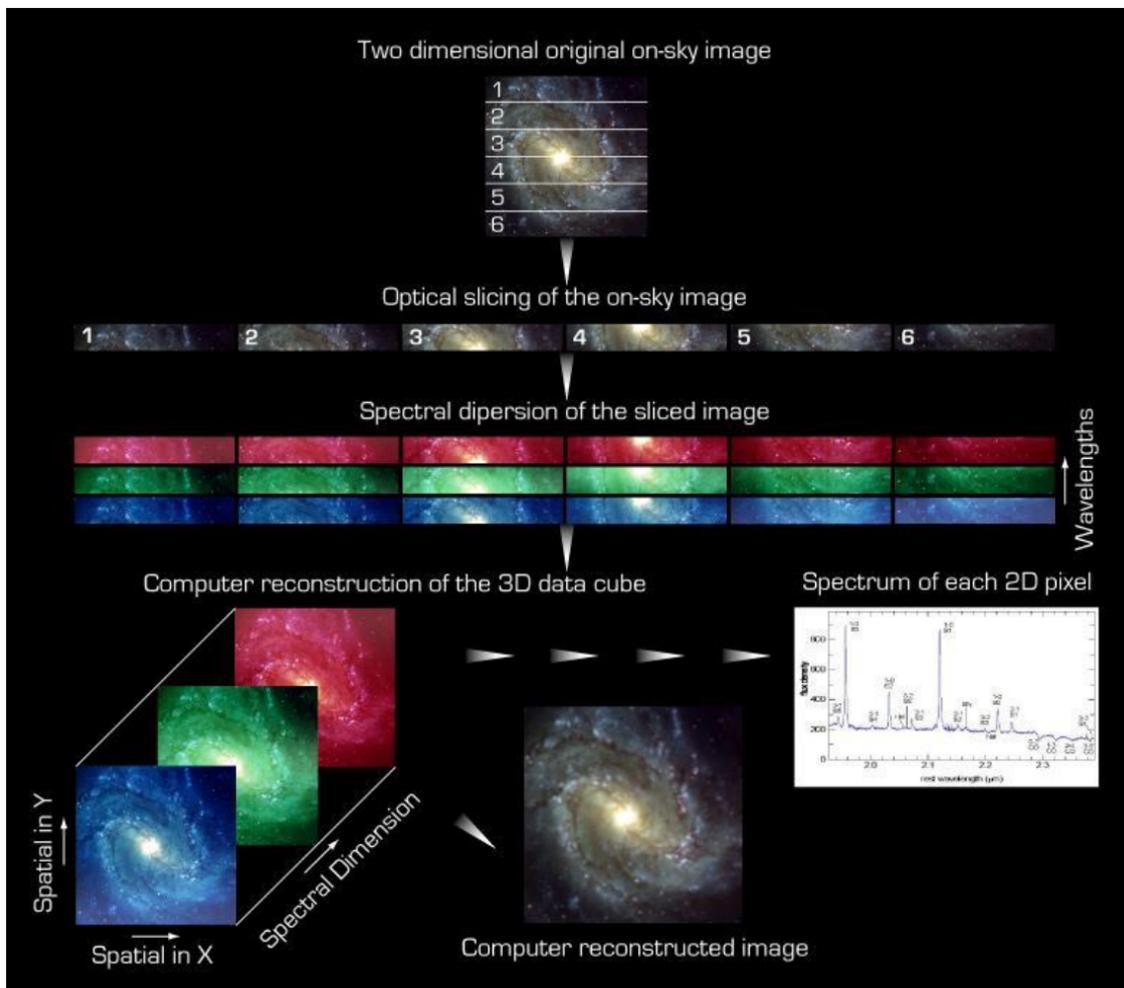


FIGURE 3.1 – Principes de base de la spectroscopie à intégrale de champ. Ici, l'image est découpée en six bandes, dont la lumière est dispersée. Ces bandes sont ensuite recollées pour former un cube de données à trois dimensions. Figure issue du manuel de SINFONI<sup>1</sup>.

- La première famille des spectrographes à intégrale de champ utilise des matrices de microlentilles qui échantillonnent le champ de vue puis dispersent la lumière sur le détecteur

1. [www.eso.org/sci/facilities/paranal/decommissioned/sinfoni/doc/VLT-MAN-ESO-14700-3517-P103.1.pdf](http://www.eso.org/sci/facilities/paranal/decommissioned/sinfoni/doc/VLT-MAN-ESO-14700-3517-P103.1.pdf)

TABLEAU 3.1 – Liste des principaux spectrographes à intégrale de champ. Ceux indiqués en gras ne sont pas encore opérationnels.

Nom	Loc.	Couverture spectrale ( $\mu\text{m}$ )	$R_\lambda$	Champ de vue	Échantillonnage spatial	Concept
SPHERE/IFS	VLT/UT3	0.95-1.35 (-1.65)	$\sim 50$ ( $\sim 30$ )	$1.73''^2$	$0.0074''^2$	Lentilles
<b>SPHERE+</b>	-	-	<b><math>\sim 5000</math></b>	-	-	-
GPI IFS	Gemini Nth	0.9-2.4	$\sim 40$ (en bande H)	$2.7''^2$	$0.01417''^2$	Lentilles
OSIRIS	Keck	0.95-2.4	$\sim 3800$	$20.4''^2$	$0.02''^2$ (min)	<i>Slicer</i>
SINFONI	VLT/UT3	1.1-2.45	$\sim 2000$ -4000	$8''^2/3''^2/0.8''^2$	$0.25''^2/0.1''^2/0.025''^2$	<i>Slicer</i>
<b>ERIS</b>	<b>VLT/UT4</b>	-	<b><math>\sim 8000</math></b>	-	-	<b><i>Slicer</i></b>
MUSE	VLT/UT4	0.465-0.93	$\sim 2000$ -4000	$1''^2/7.5''^2$	$0.2''^2/0.025''^2$	<i>Slicer</i>
<b>NIRSpec</b>	<b>JWST</b>	<b>0.6-5</b>	<b><math>\sim 100</math>-2700</b>	<b><math>3''^2</math></b>	<b><math>0.1''^2</math></b>	<b><i>Slicer</i></b>
<b>MIRI</b>	<b>JWST</b>	<b>4.6-28.6</b>	<b><math>\sim 1500</math>-3500</b>	<b><math>\sim 3.5''^2</math>-<math>7''^2</math></b>	<b><math>\sim 0.176''^2</math>-<math>0.645''^2</math></b>	<b><i>Slicer</i></b>
<b>METIS</b>	<b>ELT</b>	<b>3-5</b>	<b><math>\sim 100000</math></b>	<b><math>1.0'' \times 0.5''</math></b>	<b><math>0.023''^2</math></b>	<b><i>Slicer</i></b>
<b>HARMONI</b>	<b>ELT</b>	<b>0.46-2.46</b>	<b><math>\sim 3300</math>-17300</b>	<b><math>0.6'' \times 0.8''</math>-<math>9.1'' \times 6.2''</math></b>	<b><math>4''^2</math>-<math>0.060'' \times 0.030''</math></b>	<b><i>Slicer</i></b>

avec un certain facteur de remplissage (dans les deux dimensions spatiales). Cette technique est actuellement communément utilisée sur les spectro-imageurs d'exoplanètes, notamment avec SPHERE/IFS ([Antichi et al., 2009](#)), GPI ([Macintosh et al., 2014](#)) qui atténuent, voire annulent complètement la lumière diffusée par les éléments optiques. En revanche, ils n'assurent pas une bonne compacité des informations spatiales et spectrales sur les détecteurs, et impliquent des superpositions d'information lumineuse (crosstalk) dans les dimensions spatiales et spectrale, ce qui rend ainsi leur utilisation optimisée pour de la basse résolution.

- La seconde famille est celle des spectrographes à intégrale de champ fibrés, comme l'instrument GIRAFFE du VLT, qui comporte trois modules fibrés (MEDUSA : 132 fibres de 200  $\mu\text{m}$ ; IFU : 15 $\times$ 20 fibres de 140  $\mu\text{m}$ ; ARGUS : 308 fibres de 140  $\mu\text{m}$ ). Ces fibres peuvent être ré-arrangées sur une dimension du détecteur pour offrir un meilleur facteur de remplissage associé à une plus grande résolution et/ou couverture spectrale ( $R\sim 5500\text{-}65000$  et  $d\lambda\sim 370\text{-}900$  nm pour GIRAFFE). La taille du détecteur reste toujours une limite sur le nombre d'éléments spatiaux et spectraux. Une autre limite est directement liée au nombre total de fibres qu'il est possible de fabriquer (typiquement  $\sim 100$ ), et donc à la taille du champ de vue disponible, en considérant un échantillonnage spatial typiquement à Nyquist (ou deux fois Nyquist).
- Enfin, la dernière famille est celle des découpeurs de champ ("slicers"), qui permettent de découper optiquement le champ de vue selon des tranches, ré-arrangées selon une dimension. C'est notamment le cas de l'instrument MUSE au VLT, ou de SINFONI, qui a été utilisé dans cette thèse. MAVIS sur le VLT puis METIS et HARMONI sur l'ELT ainsi que NIRSPEC et MIRI sur le JWST utiliserons également cette technologie. L'un des inconvénients de ce type d'instrument est que les éléments optiques des *slicers* introduisent de la lumière diffusée (et donc, entre autres, du bruit de photon). Ils n'apparaissent donc pas comme les plus appropriés, a priori, à long terme. Cette approche sera détaillée dans la suite de ce manuscrit et illustrée dans la Figure 3.1.

Un avantage important des spectrographes à intégrale de champ est qu'ils permettent d'allier la caractérisation avec la détection, en exploitant les deux dimensions spatiales pour explorer l'environnement proche des étoiles, mais aussi la morphologie, les cartes de composition, et la cinématique d'objets résolus (galaxies, nébuleuses, jets, corps du système solaire, exemples : [Mazzalay et al. 2013](#), [McLeod et al. 2019](#)) et potentiellement, au-delà d'une certaine résolution spectrale, les caractéristiques physico-chimiques (composition, physique de l'accrétion) et cinématiques (vitesses radiales et rotationnelles) des objets observés (propos de ce chapitre). Dans le cas précis de l'imagerie directe et de l'étude de la jeune exoplanète HIP 65426 b observée avec SINFONI au VLT, nous allons voir dans ce chapitre à quel point ces instruments sont précieux pour la détection de jeunes exoplanètes géantes et la caractérisation de leur atmosphère, mais aussi quelles sont leurs limites actuelles et les perspectives qu'ils offrent pour la décennie à venir.

#### 3.1.2 L'instrument SINFONI (Single Faint Object Near-IR Investigation)

SINFONI ([Bonnet et al., 2004](#); [Eisenhauer et al., 2003](#)) est un spectrographe à intégrale de champs développé par l'ESO et installé au foyer Cassegrain du VLT/UT3 (initialement installé au VLT/UT4 en 2004). Le 30 juin 2019, cet instrument a été retiré de la batterie d'instruments du VLT pour être mis à jour et ré-installé avec la caméra NIX, dans le cadre du nouvel instrument ERIS du VLT qui sera sur le ciel au début de l'année 2022. Il est composé de deux composants majeurs, une version modifiée de MACAO, qui assure la haute résolution angulaire (système d'optique adaptative) et SPIFFI, un spectrographe à intégrale de champ de type *slicer*. Notons que cet instrument comporte aussi un mode "Pupil-Tracking" qui permet un traitement ADI des données (voir la Section 1.1.3).

### la haute résolution spatiale : MACAO

MACAO est un système d'optique adaptative développé par l'ESO sur le principe d'un miroir bimorphe et d'un analyseur de front d'onde à courbure pour restaurer la résolution spatiale des observations à la limite de diffraction du télescope (typiquement 40mas en bande H). La boucle d'optique adaptative peut être fermée avec une étoile standard dans le champ (mode "Natural Guide Star"). Les performances du système d'AO dépendent de la luminosité de l'étoile standard. Dans le cas d'une étoile de 10 mag, le rapport de Strehl peut atteindre 0.5 (50% de la limite de diffraction permise par le télescope) pour une observation à un seeing de 0.8", alors que pour une étoile standard de 14 mag, le rapport de Strehl est limité à 0.2 dans les mêmes conditions d'observation. Si aucune étoile ne permet d'atteindre un Strehl suffisant, une étoile artificielle peut être créée avec un laser (mode "Laser Guide Star"). Enfin, si les conditions le permettent, la boucle d'optique adaptative peut être ouverte, et l'instrument est alors limité par le *seeing*.

### la moyenne résolution spectrale : SPIFFI

Ce spectrographe à intégrale de champ, issu de la collaboration entre le MPE et le NOVA, est composé lui-même de plusieurs sous-modules :

- *Le découpage de l'image* : Dans ce module, 32 miroirs plans séparent la lumière captée du champ de vue en 32 bandes, qui sont ensuite ré-agencées en une bande unique par 32 autres miroirs.
- *Le collimateur* : Cette bande est collimatée par trois miroirs (un sphérique, deux elliptiques).
- *La dispersion* : SPIFFI permet de disperser la lumière dans la bande J (1.10-1.40  $\mu\text{m}$ ), H(1.45-1.85  $\mu\text{m}$ ), K (1.95-2.45  $\mu\text{m}$ ) et H+K (1.45-2.45  $\mu\text{m}$ ) pour obtenir des spectres à des résolutions de  $\sim 2000$ ,  $\sim 3000$ ,  $\sim 4000$  et  $\sim 1500$ , respectivement. La dispersion est permise par un substrat d'aluminium. Une roue permet de sélectionner la gamme de longueur d'onde souhaitée, puis une caméra développée par le consortium NOVA/MPE/ESO enregistre les données et permet d'obtenir des images à une résolution spatiale de 0.25", 0.1" et 0.025" avec un champ de vue de 8"  $\times$  8", 3"  $\times$  3" et 0.8"  $\times$  0.8", respectivement.

Tous ces composants sont refroidis dans un bain d'azote liquide pour réduire leur rayonnement thermique et ainsi limiter les contaminations sur le détecteur.

### 3.1.3 Réduction des données SINFONI

De la même manière que pour X-Shooter (voir la Section 2.1.2), une routine de réduction de données automatisée a été développée pour l'instrument SINFONI, puis intégrée à l'outil de gestion des queues de traitement ESOREFLEX. Nous verrons dans cette section les étapes principales de cette routine, dont le détail est disponible sur le site de l'ESO<sup>2</sup> :

- *Identification des mauvais pixels* : Une observation dédiée est utilisée (*flatfield*), un polynôme est appliqué pour chaque pixel selon l'axe z (spectral), puis la moyenne des coefficients polynomiaux est calculée. Les pixels dont les coefficients dévient d'un facteur défini par l'utilisateur sont identifiés. Le flux spectral intégré de chaque pixel est ensuite calculé en utilisant une mesure du courant d'obscurité (*dark*), puis la déviation standard spatiale de ce flux intégré est estimée. Les pixels dont le flux intégré dévie d'un facteur défini par l'utilisateur sont identifiés. L'ensemble des mauvais pixels sont ré-interpolés.
- *Identification des différentes bandes* : Les distorsions de chacune des 32 bandes sont déterminées et corrigées en utilisant des observations dédiées et leur position et distance sont calculées.

2. [www.eso.org/sci/facilities/paranal/instruments/sinfoni/doc/VLT-MAN-ESO-14700-4037.pdf](http://www.eso.org/sci/facilities/paranal/instruments/sinfoni/doc/VLT-MAN-ESO-14700-4037.pdf)

- *Calibration en longueur d'onde* : Des raies d'émission sont recherchées par corrélation croisée avec un spectre synthétique. Un polynôme est ajusté sur la position de chaque raie détectée pour générer une carte de calibration en longueur d'onde.
- *Reconstruction du cube* : La position de chaque bande et la calibration en longueur d'onde permettent de reconstruire le cube de données final.

Bien que cette méthode permette d'obtenir des cubes de qualité, une mauvaise estimation de la position des bandes ou une mauvaise calibration peuvent survenir. Il est donc conseillé de développer des routines pour corriger ces problèmes et améliorer la qualité des cubes. C'est ce qui a été fait pour l'étude présentée dans la Section 3.3.

*Grâce à l'utilisation de l'optique adaptative et de son spectrographe à intégrale de champ, SINFONI permet de coupler la haute résolution spatiale et la moyenne résolution spectrale. Sa couverture en longueurs d'ondes qui couvre les bandes J, H et K en fait, à l'instar de X-Shooter, un instrument de choix pour l'étude des exoplanètes et des naines brunes. Dans les prochaines sections, nous verrons comment exploiter cette source d'information avec une méthode récemment développée : le molecular mapping.*

## 3.2 Le molecular mapping

### 3.2.1 Problématique et naissance de l'algorithme

Aujourd'hui, le principal défi de l'imagerie directe des exoplanètes géantes est de détecter un point source typiquement 1 million de fois plus faible que l'étoile hôte à une séparation angulaire de quelques 100 mas, pour permettre l'exploration de distances physiques au-delà de 10 ua (pour une étoile jeune typique à 100 pc). Depuis plus de dix ans, les techniques d'imagerie différentielle (angulaire, spectrale, polarimétrique et avec référence) ont permis un gain significatif pour soustraire les résidus stellaires aux séparations les plus proches. Elles possèdent toutefois chacune des limitations à considérer pour pousser les performances des futurs spectro-imageurs d'exoplanètes.

L'imagerie différentielle avec une étoile de référence (RDI) est utilisée depuis les débuts de l'imagerie à haut contraste au sol et dans l'espace (Beuzit et al., 1997). Elle se base sur l'observation d'une étoile de référence ayant les mêmes propriétés que l'étoile visée (en matières de luminosité et de propriétés spectrales), l'estimation de sa PSF, puis la soustraction de cette PSF de référence aux données d'intérêt. Cette technique est principalement utilisée dans le cas d'observations spatiales (Choquet et al., 2016; Weinberger et al., 1999), car la PSF est relativement stable sur le long terme ce qui motive l'analyse de grands relevés pour fournir des bibliothèques de PSFs de référence (ALICE, Choquet et al. 2015). Ce n'est pas le cas au sol à cause des variations atmosphériques qui peuvent modifier cette PSF de référence en quelques dizaines de minutes, nécessitant ainsi d'observer des étoiles de référence pour chaque observation (efforts humains et coûts en termes de temps télescope). Le développement de nouvelles stratégies d'observation sont en cours pour réduire ce temps d'obtention de la PSF de référence (0.5-1h) à une dizaine de minutes (méthode du star-hopping RDI, Wahhaj et al. 2021). De nouvelles techniques de traitement numériques, comme LOCI (Lafrenière et al., 2007) ou la PCA (Meshkat et al., 2014), sont également utilisées pour reconstruire des halos à partir de bibliothèques hétérogènes d'images de PSF.

L'imagerie angulaire différentielle (ADI) (Marois et al., 2008), qui exploite la rotation du champ de vue sur détecteur lorsque la pupille et la PSF sont figées, est typiquement limitée par le compromis à trouver entre l'évolution temporelle de la PSF et des tavelures quasi-statiques et la rotation de champ (liée aux coordonnées de l'étoile et à l'heure d'observation), permettant

de minimiser les effets d’auto-soustraction du signal planétaire. Il en résulte que les séparations proches (100-300 mas), les plus intéressantes, restent souvent très difficiles à atteindre sur les grands télescopes de 10m (outre la problématique de contraste des exoplanètes).

L’imagerie différentielle spectrale (SDI) (Marois et al., 2000; Racine et al., 1999) offre la possibilité d’une calibration simultanée de la PSF à deux longueurs d’ondes suffisamment proches pour optimiser leur soustraction (aux résidus différentiels près). Elle implique toutefois d’avoir un signal planétaire contrasté (absorptions moléculaires comme le méthane, atomiques comme le  $H\alpha$ ) ou une séparation pas trop proche (au-delà du point de bifurcation pour l’homothétie spatiale) pour minimiser encore les effets d’auto-soustraction. Cette technique est étendue dans le cas de spectrographes à intégrale de champ à basse résolution (comme SPHERE, GPI) pour exploiter, non pas deux, mais une dizaine de canaux spectraux. Elle peut bien sûr être couplée à l’ADI. Toutefois, elle reste généralement limitée par les aberrations chromatiques des spectrographes actuels, qui limitent les performances ultimes en matière de détection.

Finalement, l’imagerie différentielle polarimétrique (PDI) (Kuhn et al., 2001) permet d’obtenir deux images simultanées dans deux états de polarisation linéaire. Elle est particulièrement adaptée pour l’imagerie de structures étendues polarisées, comme les disques de poussières proto-planétaires et de débris. Dans le cas de l’étude des exoplanètes, elle reste à ce jour très ambitieuse en raison du faible degré de polarisation attendu (Hunziker et al., 2020; Milli et al., 2013; van Holstein et al., 2021).

Depuis quelques années, une nouvelle méthode très prometteuse de soustraction du halo stellaire a émergé. Avec le spectrographe de champ OSIRIS, Konopacky et al. (2013), puis Barman et al. (2015), ont mené une étude pionnière pour optimiser spectralement la soustraction des résidus de halo stellaire et ont confirmé la présence de monoxyde de carbone et d’eau dans le spectre de HR 8799 b et c par corrélation croisée entre le spectre extrait de leur cube de données et des spectres synthétiques d’absorptions de CO, d’eau et de méthane, tirant partie des techniques de corrélation bien connues dans le domaine des détections planétaires par vitesses radiales. Hoeijmakers et al. (2018b) généralisèrent cette corrélation croisée à tous les spaxels (pixel spatial) du champ en s’inspirant des travaux de Snellen et al. (2015). Ils développèrent ainsi un nouvel algorithme baptisé *molecular mapping*. Ils appliquèrent cette méthode sur des données SINFONI du système  $\beta$  Pic, ce qui permit de re-détecter le compagnon  $\beta$  Pic b, grâce à ses absorptions d’eau et de monoxyde de carbone. De plus, en faisant une corrélation croisée entre chaque pixel de leur cube et chaque spectre synthétique d’une grille BT-SETTL, Hoeijmakers et al. (2018b) ont montré qu’il était possible de caractériser l’atmosphère d’un compagnon avec le *molecular mapping*. Cependant, cette méthode est limitée par la résolution spectrale des observations qui doit être suffisante pour révéler des absorptions moléculaires et elle demande de connaître a priori les propriétés spectrales de la planète. Enfin, une étape de soustraction du halo stellaire qui domine le cube de données est nécessaire.

### 3.2.2 La méthode du *molecular mapping* et le code TExTRIS (Toolkit for Exoplanet deTection and chaRacterization with IfS)

La méthode du *molecular mapping* est très récente mais se démocratise vite (PDS70 b Cugno et al. 2021, HR8799 b Petit dit de la Roche et al. 2018). Le besoin d’avoir différents codes indépendants implémentant cette méthode est à l’origine du développement de TExTRIS codé en Python, actuellement optimisé pour le traitement de données SINFONI, et dont la fonction est de détecter et caractériser les exoplanètes. Bien que TExTRIS soit un code collaboratif et que ma participation concernait majoritairement la partie caractérisation, cette Section décrit tout de même les deux aspects du code, en passant en revue les différentes étapes du *molecular mapping* illustrées par la Figure 3.2.

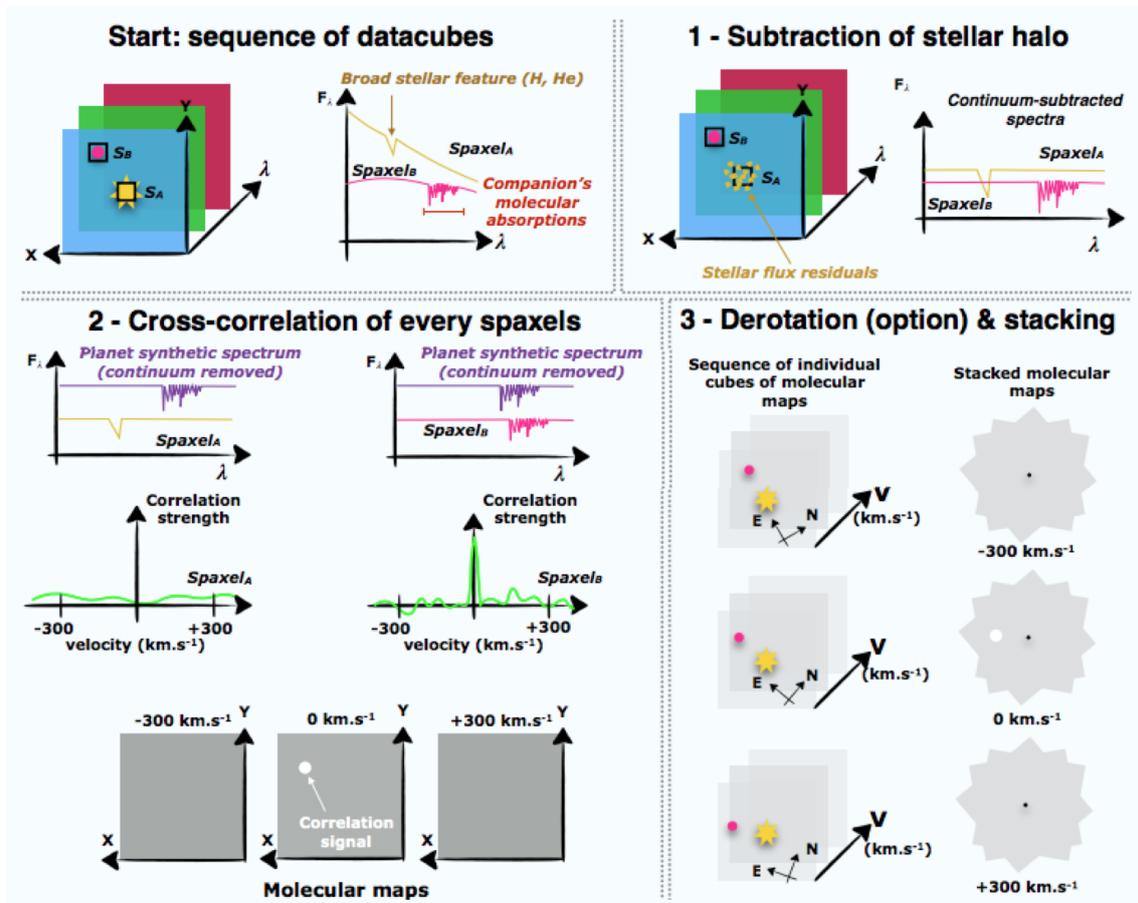


FIGURE 3.2 – Algorithme du molecular mapping. Ici, un système planétaire est observé avec l'étoile primaire (en jaune) et un compagnon (en rose) dans le champ. Le halo de la primaire est soustrait, pour permettre la corrélation croisée de chaque spaxel avec un spectre synthétique.

### Description du cube de données

L'exemple présenté par la Figure 3.2 concerne l'observation d'un système planétaire composé d'une étoile primaire (notée  $S_A$ ) et d'une planète (notée  $S_B$ ). L'étoile étant bien plus brillante que la planète, le flux lumineux dans le cube est complètement dominé par le flux stellaire. Néanmoins, l'information spectrale des deux objets est très différente. A basse résolution, le spectre de l'étoile se rapproche d'un corps noir, tandis que celui de la planète est modifié par la présence de nuages. À plus haute résolution, de fortes absorptions atomiques (H, He) sont visibles dans le spectre de l'étoile, alors que des signatures moléculaires apparaissent dans celui de la planète.

### Soustraction du halo

Afin que les propriétés spectrales de la planète ne soient plus dominées par le flux stellaire, celui-ci est soustrait. La mécanique générale de cette étape consiste en la génération d'un spectre de référence représentatif de celui de l'étoile, à partir des données du cube, puis en la soustraction de ce modèle à chaque spaxel, après l'avoir re-normalisé par le flux de ce spaxel.

Trois méthodes sont implémentées dans TExTRIS pour calculer ce spectre de référence.

- Un spectre médian est calculé dans un anneau d'une taille donnée par l'utilisateur autour de l'étoile. Ce mode est utilisable lorsque l'étoile est dans le champ de vue.
- Un spectre médian est calculé entre plusieurs cubes de données de la même source.
- Les spaxels les plus brillants sont identifiés et leur spectre moyen est calculé. Ce mode est utile lorsque l'étoile est hors-champ.

Le rapport entre le spectre de chaque spaxel et le spectre de référence est ensuite calculé puis convolué par une loi Gaussienne, afin de ne garder que l'information à basse résolution. Ce rapport est utilisé pour générer un modèle du flux stellaire normalisé pour chaque spaxel qui est finalement soustrait au spectre du spaxel. Cette étape est nécessaire mais induit la soustraction du continuum spectral de la planète et l'apparition de résidus de flux stellaires sous la forme de tavelures.

### Corrélation croisée avec un spectre synthétique

Ces tavelures contiennent donc l'information à moyenne/haute résolution spectrale de l'étoile. Les spaxels situés à la position de la planète dans le champ contiennent, quant à eux, l'information à moyenne/haute résolution spectrale de la planète. Ainsi, en faisant une corrélation croisée du spectre contenu dans chaque spaxel avec un spectre synthétique planétaire (soustrait du continuum), un signal de corrélation apparaîtra à la position de la planète, filtrant les tavelures et révélant la planète. Notons que ce signal de corrélation est maximal à la vitesse radiale de la planète.

Le spectre synthétique à corrélérer est extrait, sa résolution spectrale est réduite pour correspondre à celle des observations, puis son continuum est soustrait (pour plus d'informations sur ces étapes, voir la méthode dans la Section 2.2 dédiée à ForMoSA). Pour chaque spaxel du cube, la corrélation croisée est calculée grâce au module Python `PyAstronomy.crosscorrRV`<sup>3</sup>, qui applique une vitesse radiale différente par itération successives et calcule à chaque itération la corrélation selon :

$$cc[i] = \sum_{\lambda} (F_{obs,x,y} \times F_{synt}) \quad (3.1)$$

où  $cc[i]$  est la valeur de la corrélation à l'itération  $i$ ,  $F_{obs,x,y}$  le spectre du spaxel à la position  $(x, y)$  dans le champ et  $F_{synt}$  le spectre synthétique. Afin d'avoir une valeur de corrélation indépen-

3. [pyastronomy.readthedocs.io/en/latest/pyaslDoc/aslDoc/crosscorr.html](https://pyastronomy.readthedocs.io/en/latest/pyaslDoc/aslDoc/crosscorr.html)

dante du rapport de flux entre le spectre des spaxels et celui du spectre synthétique, la corrélation est renormalisée selon

$$cc_{norm}[i] = \frac{cc[i]}{\sqrt{\sum_{\lambda} (F_{obs,x,y}^2 \times F_{synt}^2)}} \quad (3.2)$$

Lorsque le code a balayé l'intervalle en vitesse radiale défini par l'utilisateur, la fonction de corrélation, c'est à dire la valeur de corrélation en fonction du décalage en vitesse radiale, est stockée pour chaque spaxel dans un cube de fonctions de corrélation.

### Dérotation et empilement

Le flux lumineux de la planète étant faible, le signal de corrélation l'est également, il peut donc être nécessaire d'avoir plusieurs observations pour maximiser le signal à bruit. Dans ce cas, une étape finale de dérotation et d'alignement des cubes est effectuée, ainsi qu'un empilement pour faire apparaître le compagnon.

Dans TExTRIS, cette étape est réalisée avant la corrélation croisée mais peut également être réalisée après. Pour chaque cube de données, la position de l'étoile est calculée, puis placée au centre d'un cube plus large (utilisation de la librairie `opencv`<sup>4</sup>). Une fois que l'étoile est alignée, une rotation de chaque cube est effectuée pour les aligner vers le nord. Une étape finale calcule les fonctions de corrélations moyennes entre les cubes pour chaque spaxel.

### 3.2.3 Application du *molecular mapping* à des grilles de spectres synthétiques

Nous venons de voir que la corrélation d'un cube de données avec un spectre synthétique permet de détecter une planète. Néanmoins, cette méthode est limitée par le choix du spectre synthétique à corrélérer, et donc une connaissance a priori des propriétés de la planète est nécessaire pour maximiser la corrélation. Il est donc judicieux d'appliquer les étapes décrites dans la Section 3.2.2 à tous les spectres synthétiques d'une grille de modèle. Chaque spectre étant ainsi corrélé à chaque spaxel du cube de données.

Lorsqu'un cube de fonction de corrélation a été généré pour chaque spectre synthétique, il faut en extraire le signal de corrélation de la planète pour le comparer modèle à modèle. Plusieurs étapes sont nécessaires :

#### Localisation de la planète

La corrélation médiane de chaque spaxel du cube de données est calculée pour former un cube médian, puis, une fonction de Moffat à deux dimensions est ajustée sur ce cube à partir d'une première estimation de la position de la planète obtenue visuellement. Dans le cadre de l'étude présentée dans la Section 3.3, cette étape n'a été réalisée qu'une seule fois, sur le cube correspondant au spectre synthétique grâce auquel la planète était le plus visible. La position obtenue grâce à la fonction de Moffat a ensuite été fixée pour les autres cubes.

#### Extraction de la fonction de corrélation

Une ouverture circulaire est appliquée sur le cube, centrée sur la position de la planète et dont le rayon est fixé par l'utilisateur (généralement relié à la fonction d'étalement de points de l'instrument). Trois méthodes sont implémentées dans TExTRIS pour estimer la fonction de corrélation de la planète avec le spectre synthétique. La fonction de corrélation moyenne entre chacun des

4. [docs.opencv.org/4.5.2/index.html](https://docs.opencv.org/4.5.2/index.html)

pixels contenus dans l'ouverture circulaire est calculée, la fonction de corrélation maximale est identifiée, ou la fonction de corrélation du pixel central est extraite.

### Intégration de la fonction de corrélation

Une loi Gaussienne est utilisée pour ajuster la fonction de corrélation extraite, après avoir appliqué une correction de la vitesse barycentrique et héliocentrique, puis l'intégrale de cette Gaussienne est calculée pour obtenir la valeur du signal de corrélation.

### Création de grille de corrélation

En calculant le signal de corrélation de la planète pour chaque spectre synthétique, il est alors possible de générer une grille permettant de visualiser l'évolution de la valeur de corrélation à travers l'espace des paramètres défini par la grille de spectres synthétiques. Là où la corrélation est maximale se trouvent les spectres synthétiques les plus représentatifs des propriétés atmosphériques de la planète.

*Le molecular mapping est une méthode puissante pour détecter des compagnons à faible séparation en s'appuyant sur leurs différences spectrales à moyenne et haute résolution avec leur étoile hôte. Le code TExTRIS a été développé autour de cette technique pour détecter, mais également caractériser l'atmosphère des compagnons détectés, en utilisant des grilles de spectres synthétiques. Je vais maintenant décrire la première application de ce code.*

## 3.3 Application du *molecular mapping* : Le cas de HIP 65426 b

### 3.3.1 Un compagnon prioritaire

TABLEAU 3.2 – Récapitulatif des propriétés du système HIP 65426. [1] Cutri et al. (2003), [2] Chauvin et al. (2017), [3] Cheetham et al. (2019), [4] Gaia Collaboration et al. (2016).

	HIP 65426 A	HIP 65426 b <sup>[2][3]</sup>		Système
Type spectral	A2V <sup>[1]</sup>	L6±1 <sup>[2]</sup>	Distance	111.4±3.8 pc <sup>[4]</sup>
Rayon	1.77±0.05 R <sub>☉</sub> <sup>[2]</sup>	1.17±0.04 R <sub>Jup</sub> <sup>[3]</sup>	Séparation	92 ua <sup>[2]</sup>
T <sub>eff</sub>	8840±200 K <sup>[2]</sup>	1618±100 K <sup>[3]</sup>	Âge	14±4 Myr <sup>[2]</sup>
Masse	1.96±0.04 M <sub>☉</sub> <sup>[2]</sup>	8±1 M <sub>Jup</sub> <sup>[3]</sup>	M <sub>b</sub> /M <sub>a</sub>	~0.004

HIP 65426 b est la première exoplanète découverte par l'instrument VLT/SPHERE. Elle tourne autour de HIP 65426 (A2V, M=1.96±0.04 M<sub>☉</sub>) située à 111 pc, à une séparation de 110<sub>30</sub><sup>+90</sup> ua. HIP 65426 b est l'un des compagnons imagés les moins massifs (M=6-12 M<sub>Jup</sub>), pour un rapport de masse avec son étoile relativement faible (M<sub>b</sub>/M<sub>a</sub> ~0.004). Ces propriétés sont reportées dans la Table 3.2. Bien que le système soit jeune (14 ±4 Myr), aucun disque de débris n'a été détecté. Toutes ses propriétés posent la question de la formation du système HIP 65426 et font de HIP 65426 b un candidat idéal pour chercher des signatures de formation dans les atmosphères planétaires. Cet objet est d'ailleurs en liste prioritaire des cibles à observer lors de l'arrivée des

nouveaux instruments du JWST (programme "Early Science") et de l'ELT, notre étude pose donc un premier jalon dans la caractérisation de cet objet en attendant les données plus complètes du télescope spatial (NIRSPEC et MIRI).

### 3.3.2 Le besoin de spectres à moyenne et haute résolution

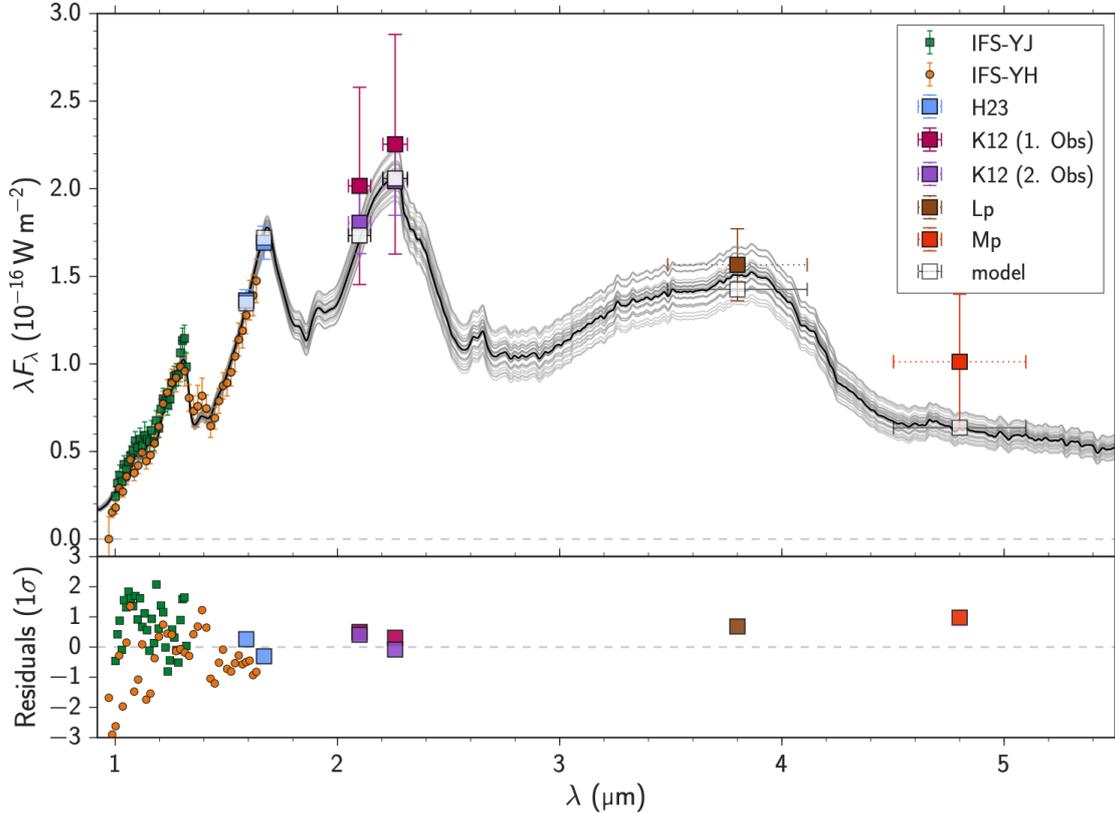


FIGURE 3.3 – *Données spectroscopiques et photométriques recueillies avant les données SINFONI. Ces données ont été comparées aux spectres synthétiques de la grille BT-SETTL avec un code de MCMC pour caractériser son atmosphère. Figure issue de Cheetham et al. (2019).*

Depuis sa découverte, plusieurs observations de HIP 65426 b (Chauvin et al., 2017; Cheetham et al., 2019) ont permis de rassembler des données photométriques avec les filtres  $\text{H}_2$  ( $1.593 \mu\text{m}$ ),  $\text{H}_3$  ( $1.667 \mu\text{m}$ ),  $\text{K}_1$  ( $2.100 \mu\text{m}$ ) et  $\text{K}_2$  ( $2.251 \mu\text{m}$ ) de l'instrument SPHERE et les filtres  $\text{L}'$  ( $3.8 \mu\text{m}$ ) et  $\text{M}'$  ( $4.8 \mu\text{m}$ ) de l'instrument NACO et spectroscopiques avec l'instrument SPHERE/IFS ( $0.97\text{-}1.66 \mu\text{m}$ ,  $R = 30$ ). L'analyse de ces données a donné lieu aux premières caractérisations physiques du compagnon par comparaison avec des modèles d'atmosphères (voir la Figure 3.3), lui attribuant le type spectral L6, une température effective de  $1618 \pm 7 \text{ K}$ , une gravité de surface de  $3.78 \pm 0.04 \text{ dex}$  et un rayon de  $1.17 \pm 0.04 R_{\text{Jup}}$ . Néanmoins, cette caractérisation reste limitée par la faible résolution des spectres. Les données SINFONI présentées lors de ce chapitre ont donné l'opportunité de sonder l'information à moyenne résolution ( $R \sim 5577$ ) de la bande K, et notamment les absorptions de CO qui peuvent permettre de contraindre le rapport C/O, connu pour être un traceur de formation (mécanisme et lieu), comme détaillé dans la Section 1.6. En comparant nos valeurs à celles prédites par des modèles de formation et des populations de planètes synthétiques, nous avons pu apporter des pistes sur l'histoire de ce système. Ces données ont également placé HIP 65426 b dans la très courte liste des compagnons pour lesquels des données à moyenne résolution existent (voir la Table 2.1).

### 3.3.3 Observations et méthodes

Nous avons utilisé des cubes de données issus de l'instrument SINFONI à une résolution spectrale  $R \sim 5577$  couvrant la bande K. Pour réduire les effets de bruit de lecture et de persistance de SPIFFI, l'étoile primaire a été placée en dehors du champ de vue.

TE<sub>x</sub>TRIS a d'abord été utilisé en corrélant les cubes de données à des spectres synthétiques moléculaires (H<sub>2</sub>O, CO, NH<sub>3</sub> et CH<sub>4</sub>) puis à un spectre synthétique Exo-REM avec les propriétés atmosphériques proches de celles déjà mesurées, afin de re-détecter le compagnon de la même façon que [Hoeijmakers et al. \(2018b\)](#) ont re-détecté  $\beta$  Pic b.

Puis TE<sub>x</sub>TRIS a été appliqué sur tous les spectres synthétiques de la grille BT-SETTL15 et Exo-REM pour tester les performances de caractérisation du *molecular mapping*. En parallèle, un spectre du compagnon a été extrait des cubes et ForMoSA a été utilisé pour contraindre ses paramètres atmosphériques avec les mêmes grilles BT-SETTL15 et Exo-REM. La comparaison des postérieurs issus de ForMoSA et des grilles de corrélation générées par TE<sub>x</sub>TRIS a permis de révéler le potentiel du *molecular mapping* pour la caractérisation fine (notamment sur la composition atmosphérique), mais aussi ses limites.

### 3.3.4 Publication de l'étude

Les méthodes utilisées, l'analyse des données et les résultats de cette étude sont détaillés dans un article publié dans le journal *Astronomy & Astrophysics* ([Petrus et al., 2021](#)), qui constituera la suite de ce Chapitre.

## Medium-resolution spectrum of the exoplanet HIP 65426 b<sup>★</sup>

S. Petrus<sup>1</sup>, M. Bonnefoy<sup>1</sup>, G. Chauvin<sup>2,1</sup>, B. Charnay<sup>3</sup>, G.-D. Marleau<sup>4,5,6</sup>, R. Gratton<sup>5</sup>, A.-M. Lagrange<sup>1</sup>, J. Rameau<sup>1</sup>, C. Mordasini<sup>5</sup>, M. Nowak<sup>7,8</sup>, P. Delorme<sup>1</sup>, A. Boccaletti<sup>3</sup>, A. Carlotti<sup>1</sup>, M. Houllé<sup>9</sup>, A. Vigan<sup>9</sup>, F. Allard<sup>10,†</sup>, S. Desidera<sup>8</sup>, V. D'Orazi<sup>8</sup>, H. J. Hoeijmakers<sup>11,12</sup>, A. Wyttenbach<sup>1</sup>, and B. Lavie<sup>11,12</sup>

<sup>1</sup> Univ. Grenoble Alpes, CNRS, IPAG, 38000 Grenoble, France  
e-mail: [simon.petrus@univ-grenoble-alpes.fr](mailto:simon.petrus@univ-grenoble-alpes.fr)

<sup>2</sup> Unidad Mixta Internacional Franco-Chilena de Astronomía, CNRS/INSU UMI 3386 and Departamento de Astronomía, Universidad de Chile, Casilla 36-D, Santiago, Chile

<sup>3</sup> LESIA, Observatoire de Paris, Université PSL, CNRS, Sorbonne Université, Univ. Paris Diderot, Sorbonne Paris Cité, 5 place Jules Janssen, 92195 Meudon, France

<sup>4</sup> Institut für Astronomie und Astrophysik, Universität Tübingen, Auf der Morgenstelle 10, 72076 Tübingen, Germany

<sup>5</sup> Physikalisches Institut, University of Bern, Gesellschaftsstrasse 6, 3012 Bern, Switzerland

<sup>6</sup> Max-Planck-Institut für Astronomie, Königstuhl 17, 69117 Heidelberg, Germany

<sup>7</sup> Institute of Astronomy, University of Cambridge, Madingley Road, Cambridge CB3 0HA, UK

<sup>8</sup> Kavli Institute for Cosmology, University of Cambridge, Madingley Road, Cambridge CB3 0HA, UK

<sup>9</sup> Aix Marseille Univ., CNRS, CNES, LAM, Marseille, France

<sup>10</sup> Univ Lyon, Ens de Lyon, Univ Lyon 1, CNRS, Centre de Recherche Astrophysique de Lyon UMR5574, 69007 Lyon, France

<sup>11</sup> Observatoire de Genève, University of Geneva, Chemin des Maillettes, 1290, Sauverny, Switzerland

<sup>12</sup> Center for Space and Habitability, Universität Bern, Gesellschaftsstrasse 6, 3012, Bern, Switzerland

Received 13 July 2020 / Accepted 3 December 2020

### ABSTRACT

Medium-resolution integral-field spectrographs (IFS) coupled with adaptive-optics such as Keck/OSIRIS, VLT/MUSE, or SINFONI are appearing as a new avenue for enhancing the detection and characterization capabilities of young, gas giant exoplanets at large heliocentric distances ( $>5$  au). We analyzed  $K$ -band VLT/SINFONI medium-resolution ( $R_{\lambda} \sim 5577$ ) observations of the young giant exoplanet HIP 65426 b. Our dedicated IFS data analysis toolkit (TEXTRIS) optimized the cube building, star registration, and allowed for the extraction of the planet spectrum. A Bayesian inference with the nested sampling algorithm coupled with the self-consistent forward atmospheric models BT-SETTL15 and Exo-REM using the ForMoSA tool yields  $T_{\text{eff}} = 1560 \pm 100$  K,  $\log(g) \leq 4.40$  dex,  $[M/H] = 0.05^{+0.24}_{-0.22}$  dex, and an upper limit on the C/O ( $\leq 0.55$ ). The object is also re-detected with the so-called “molecular mapping” technique. The technique yields consistent atmospheric parameters, but the loss of the planet pseudo-continuum in the process degrades or modifies the constraints on these parameters. The solar to sub-solar C/O ratio suggests an enrichment by solids at formation if the planet was formed beyond the water snowline ( $\geq 20$  au) by core accretion (CA hereafter). However, a formation by gravitational instability (GI hereafter) cannot be ruled out. The metallicity is compatible with the bulk enrichment of massive Jovian planets from the Bern planet population models. Finally, we measure a radial velocity of  $26 \pm 15$  km s<sup>-1</sup> compatible with our revised measurement on the star. This is the fourth imaged exoplanet for which a radial velocity can be evaluated, illustrating the potential of such observations for assessing the coevolution of imaged systems belonging to star forming regions, such as HIP 65426.

**Key words.** infrared: planetary systems – methods: data analysis – planets and satellites: atmospheres – techniques: imaging spectroscopy

### 1. Introduction

Direct imaging can provide high-fidelity spectra of young (age  $<150$  Myr) self-luminous giant exoplanets. These spectra are typically made of tens to thousands of data points over a broad wavelength range (0.5–5  $\mu\text{m}$ ) and can be acquired in a few hours of telescope time. The set of spectro-photometric data collected thus far on the few dozen imaged planetary-mass companions (e.g., Chauvin et al. 2005; Mohanty et al. 2007; Lafrenière et al. 2008; Patience et al. 2010; Janson et al. 2010; Konopacky et al. 2013; Bonnefoy et al. 2014; Bailey et al. 2014; Chilcote et al. 2017; Samland et al. 2017) exhibits numerous molecular and

atomic lines (e.g., H<sub>2</sub>O, <sup>12</sup>CO, and K I). They enable us to probe the chemical and physical phenomena at play in exoplanetary atmospheres with effective temperature ( $T_{\text{eff}}$ ) in the range  $\sim 600$ –2300 K, similar to those of mature brown dwarfs (hereafter BDs, Becklin & Zuckerman 1988; Nakajima et al. 1995), but with surface gravities 100 to 1000 times lower because the radii at the very early evolution stages are larger. Planetary formation models indicate that the gaseous envelope of these young Jupiters that formed in circumstellar disks should undergo a differential chemical enrichment depending on the detailed formation history (e.g., Boley et al. 2011; Öberg et al. 2011; Barman et al. 2011; Helling et al. 2014; Öberg & Bergin 2016; Mordasini et al. 2016; Valletta & Helled 2018).

Exoplanet spectra obtained in direct imaging therefore offer the opportunity to determine the physical characteristics of the

<sup>★</sup> Based on observations collected at the European Southern Observatory under ESO programs 0101.C-0840(A).

<sup>†</sup> Deceased.

studied objects (age, mass, radius,  $T_{\text{eff}}$ , and  $\log(g)$ ), explore the impact of surface gravity on the atmospheres (e.g., [Patience et al. 2010](#); [Bonnefoy et al. 2014](#)), reveal any deviation from the host-star chemical composition (e.g. C/O, and [M/H]; [Konopacky et al. 2013](#); [Lavie et al. 2017](#); [Nowak et al. 2019](#)), and ultimately trace their formation mechanism. Atmospheric models, that include the formation of clouds of different compositions (silicates, iron, and sulfites) have been used for more than a decade to reproduce the spectral features, colors, and luminosity of directly imaged planets ([Allard et al. 2001, 2012](#); [Ackerman & Marley 2001](#); [Helling et al. 2008](#); [Barman et al. 2011](#); [Madhusudhan et al. 2011](#); [Morley et al. 2012](#); [Charnay et al. 2018](#); [Mollière et al. 2019](#)). They are now widely used to derive the physical properties of the atmosphere of imaged exoplanets.

With the direct-imaging technique, the challenge of accurately removing the dominant stellar flux on broad wavelength intervals represents the main hurdle for extracting unbiased exoplanet spectra. Since 2013, the high-contrast imagers and spectrographs such as GPI ([Macintosh et al. 2006](#)), SPHERE ([Beuzit et al. 2019](#)) or SCExAO/CHARIS ([Groff et al. 2015](#); [Jovanovic et al. 2015](#)) have gathered low-resolution ( $R_{\lambda} = 30\text{--}350$ ) near-infrared (0.95–2.45  $\mu\text{m}$ ) spectra of exoplanets down to 100 mas from their host star. The spectra confirmed some of the results inferred earlier from photometric spectral energy distributions (e.g., [Marois et al. 2008](#); [Bonnefoy et al. 2013](#)): the reduced surface gravity affects the vertical mixing and the gravitational settling of condensates, which leads to thicker cloud layers, upper atmosphere submicron hazes, and causes cloud opacities to remain down to  $T_{\text{eff}} = 600$  K at early ages ([Bonnefoy et al. 2016](#); [Rajan et al. 2017](#); [Chauvin et al. 2017, 2018](#); [Samland et al. 2017](#); [Greenbaum et al. 2018](#); [Uyama et al. 2020](#); [Delorme et al. 2017](#); [Mesa et al. 2020](#)). These spectra, however had led to contradicting conclusions on the derivation of the atmospheric composition ([Samland et al. 2017](#); [Rajan et al. 2017](#)), possibly owing to the limited resolution of the observations and uncertainties in the atmospheric models. Spectroscopy at medium resolving powers ( $R$  of a few 1000s) is warranted to access this information (see [Lavie et al. 2017](#)) and test the models further.

Adaptive-optics-fed integral-field spectrographs (IFS) operating at medium spectral resolving power ( $R_{\lambda} = 2000\text{--}5000$ ) in the near-infrared such as SINFONI at the VLT, NIFS at Gemini-North, or OSIRIS at the Keck Observatory offer to partly deblend the rich set of molecular absorption that is contained in the exoplanet spectra. They have been used to gather the spectra of young low-mass companions at large distance from their host stars ( $>1''$ ) or in systems with moderate contrasts in the near-infrared ([McElwain et al. 2007](#); [Seifahrt et al. 2007](#); [Schmidt et al. 2008, 2014](#); [Lavigne et al. 2009](#); [Bowler et al. 2011, 2017](#); [Bonnefoy et al. 2014](#); [Bowler & Hillenbrand 2015](#); [Daemgen et al. 2017](#)). More recently, high-contrast imaging techniques such as the angular differential imaging (e.g. ADI, [Marois et al. 2006](#)) have been implemented on these instruments and allowed characterizing companions at shorter separations ( $\rho < 1''$ ; [Bowler et al. 2010](#); [Meshkat et al. 2015](#); [Hoeijmakers et al. 2018](#); [Mesa et al. 2019](#); [Christiaens et al. 2019](#)). Using OSIRIS, [Konopacky et al. \(2013\)](#) and [Barman et al. \(2015\)](#) detected carbon monoxide and water in the spectrum of HR 8799 b and c, which they confirmed using the cross correlation of the spectra with templates of pure  $\text{H}_2\text{O}$ , CO, and  $\text{CH}_4$  absorption. The cross-correlation approach has been generalized to all spaxel contained in IFS datacubes by [Hoeijmakers et al. \(2018\)](#) following a modified prescription of

the algorithm described in [Sparks & Ford \(2002\)](#). This molecular mapping method allows removing the remaining stellar flux residuals, including the quasi-static noise created by the IFS optical elements ([Janson et al. 2008](#)), while providing an interesting mean to unambiguously identify cool companions and characterize their properties ( $T_{\text{eff}}$ ,  $\log(g)$ , [M/H], composition, and radial velocity). The approach has thus far been used on a limited set of data ( $\beta$  Pictoris b, HR8799 b; [Hoeijmakers et al. 2018](#); [Petit dit de la Roche et al. 2018](#)), and its performances and limitations are yet to be investigated on additional data and against alternative methods exploiting the IFS data diversity (e.g., [Marois et al. 2006](#); [Thatte et al. 2007](#); [Ruffio et al. 2019](#)).

HIP 65426 b ([Chauvin et al. 2017](#)) is the first exoplanet discovered with the VLT/SPHERE instrument at a projected separation of 92 au from the young ( $14 \pm 4$  Myr) intermediate-mass star HIP 65426 (A2V,  $M = 1.96 \pm 0.04 M_{\odot}$ ). The star is located at a distance of  $111.4 \pm 3.8$  pc ([Gaia Collaboration 2016](#)) and belongs to the Lower Centaurus-Crux (hereafter LCC) association ([de Zeeuw et al. 1999](#); [Rizzuto et al. 2011](#)). The low-resolution  $Y$ - to  $H$ -band photometry and spectra of HIP 65426 b indicate that the object has a  $L6 \pm 1$  spectral type with clear signatures of reduced surface gravity ([Chauvin et al. 2017](#)). The hot-start evolutionary models ([Baraffe et al. 2003](#); [Chabrier et al. 2000](#); [Mordasini 2013](#)) predict  $M_b = 6\text{--}12 M_{\text{Jup}}$  in the planetary-mass range. Atmospheric models estimate  $T_{\text{eff}}$  in the range 1100–1700 K, a surface gravity  $\log(g)$  lower than 5 dex, and a radius from 1 to  $1.8 R_{\text{Jup}}$ . These physical properties were confirmed by [Cheetham et al. \(2019\)](#), who analysed the SPHERE data together with new VLT/NaCo  $L$ - and  $M$ -bands (3.49–4.11  $\mu\text{m}$  and 4.48–5.07  $\mu\text{m}$ ) observations. They found  $T_{\text{eff}} = 1618 \pm 7$  K,  $\log(g) = 3.78^{+0.04}_{-0.03}$  dex and  $R = 1.17 \pm 0.04 R_{\text{Jup}}$  and estimated a new mass  $M = 8 \pm 1 M_{\text{Jup}}$  (statistical errors). The relatively low mass ratio of HIP 65426 b with A ( $M_b/M_A \sim 0.004$ ), its intermediate semimajor axis ( $110^{+90}_{-30}$  au, [Cheetham et al. 2019](#)), and the nondetection of a debris disk in the system ([Chauvin et al. 2017](#)) question the origin of HIP 65426 b and make the system an interesting test for planet formation theories. [Marleau et al. \(2019\)](#) explored formation scenarios for HIP 65426 b, including the evolution of the protoplanetary disk and the gravitational interaction with possible further companions in the system.

In this paper, we analyze medium-resolution ( $R_{\lambda} \sim 5500$ )  $K$ -band data of HIP 65426 b collected with the VLT/SINFONI IFS to characterize the exoplanet and evaluate the potential of the molecular mapping technique. We describe in Sect. 1 the observations and data reduction based on the molecular mapping and classical ADI extraction techniques. We characterize the planet in Sect. 3 using the new spectroscopic data, and discuss our results in the Sect. 4.

## 2. Observations and data reduction

### 2.1. Observations

HIP 65426 was observed on May 25 and May 26, 2018 with the VLT/SINFONI instrument (program 0101.C-0840; PI Hoeijmakers) mounted at the Cassegrain focus of VLT/UT4<sup>1</sup> (see Table 1). SINFONI is made of a custom adaptive optics module (MACAO) and of an IFS (SPIFFI). SPIFFI cuts the field of view into 32 horizontal slices (slitlets) that are realigned to form a pseudo-slit and are dispersed by a grating on a Hawaii 2RG (2k  $\times$  2k) detector ([Eisenhauer et al. 2003](#); [Bonnet et al. 2004](#)).

<sup>1</sup> A third observation was attempted on May 27, 2018 but the conditions were poor and we did not consider it here.

**Table 1.** Observing log.

Date DD/MM/YYYY	UTC time hh:mm	Instrument	Setup	DIT (s)	$N_{\text{exp}}$	$\mu$	Seeing (")	$\langle \text{Strehl} \rangle$ (%)	$\Delta\pi$ ( $^\circ$ )	Notes
25/05/2018	00:47–00:48	SINFONI	K-0.025"/pix	10	2	1.16	0.7	28.0	0.28	On-axis
25/05/2018	00:51–02:29	SINFONI	K-0.025"/pix	100	53	1.13	0.6	33.0	47.3	Star offcentered
26/05/2018	00:47–00:48	SINFONI	K-0.025"/pix	10	2	1.15	1.0	14.8	0.30	On-axis
26/05/2018	00:51–02:29	SINFONI	K-0.025"/pix	100	41	1.13	1.6	9.9	36.5	Star offcentered

**Notes.** Average Strehl ratio as measured by the real-time computer.  $\Delta\pi$  corresponds to the amount of field rotation.

The instrument was operated with pre-optics and a grating sampling a  $0.8'' \times 0.8''$  field of view with rectangular spaxels of  $12.5 \times 25$  mas size, from 1.928 to 2.471  $\mu\text{m}$ , at a spectral resolution  $R_\lambda = \lambda/\Delta\lambda \sim 5577$  (from the width of the line-spread function). MACAO was used at all times during the observations with the primary star as a reference for the wave-front sensing. The derotator at the telescope focus was in addition turned off to allow pupil-tracking observations.

At each night, the star was first placed inside the field of view, and two 10 s integrations were obtained. The core of the stellar point-spread function (PSF) was then moved outside of the field of view with the instrument field selector, and a sequence of 100 s integrations centered on the expected position of the planet was performed. This strategy is similar to the one adopted on  $\beta$  Pictoris (Hoeijmakers et al. 2018, Bonnefoy et al., in prep.). It reduces the effect of the read-out in the noise budget while avoiding any persistence on the detector of SPIFFI.

## 2.2. Cube building and registration

The data were initially reduced with the SINFONI data handling pipeline v3.2.3 (Abuter et al. 2006) through the EsoReflex environment (Freudling et al. 2013). The pipeline used a set of calibration frames obtained at day time to perform basic cosmetic steps on the raw bidimensional science frames and correct them for the distortion. The pipeline also identified the position of slitlets on the frames and the wavelength associated with each pixel before building a series of datacubes corresponding to each exposure. The sky emission was evaluated and removed through the field of view using the methods from Davies (2007).

We used the Toolkit for Exoplanet deTectioN and chaRacterization with IfS (hereafter TExTRIS) in addition to the ESO recipes to optimize our cubes for the high-contrast science (the main steps are described below; see Bonnefoy et al., in prep. for another application of this tool). The toolkit first corrected the raw SINFONI data for various noises occurring on the detector, as described in Bonnefoy et al. (2014).

TExTRIS also mitigated two different effects on the cubes. First, we corrected an incorrect estimate of the slitlet positions on the raw science frame and masked the first and last two columns of spaxels in the cubes that were affected by crosstalk at the slitlet edges. This step is critical to remove strong stellar flux residuals at the edges of the field of view and to obtain an accurate knowledge of the star position outside the field of view. Then, we reexamined the wavelength calibration performed by the ESO pipeline by comparing the many telluric absorption lines contained in each spaxel to a model generated for the observing conditions with the python module `skycalc_ipy`<sup>2</sup> and based on the ESO Skycalc tool (Noll et al. 2012; Jones et al. 2013). The method was shown to be critical to derive a robust radial

velocity measurement of  $\beta$  Pictoris b (Bonnefoy et al., in prep.) and improve the capabilities of the molecular mapping technique (see Sect. 2.4). It is applicable whenever the spaxels contain enough stellar light to show the telluric absorptions. The shifts were evaluated in each input cube across the field of view. A master median-combined map of the velocity shift was then created, and each individual cube was corrected for the effect. We find that spaxels are redshifted by 21.6 and 16.4  $\text{km s}^{-1}$  on average (0.6 and 4.2  $\text{km s}^{-1}$  dispersion along the sequences) on the first and second observation night, respectively. We found and corrected additional relative shifts of  $\sim \text{km s}^{-1}$  from spaxel to spaxel across the field. These smaller shifts are visible at the same position for all cubes throughout the sequence and indicate differential errors on the wavelength solutions between the slitlets. We validate this recalibration on the final products in Appendix A using an independent method that relies on OH sky emission lines.

We used TExTRIS to recompute the parallactic angles and rotator angular offsets following the method we described in Meshkat et al. (2015) to allow realigning the cubes to north.

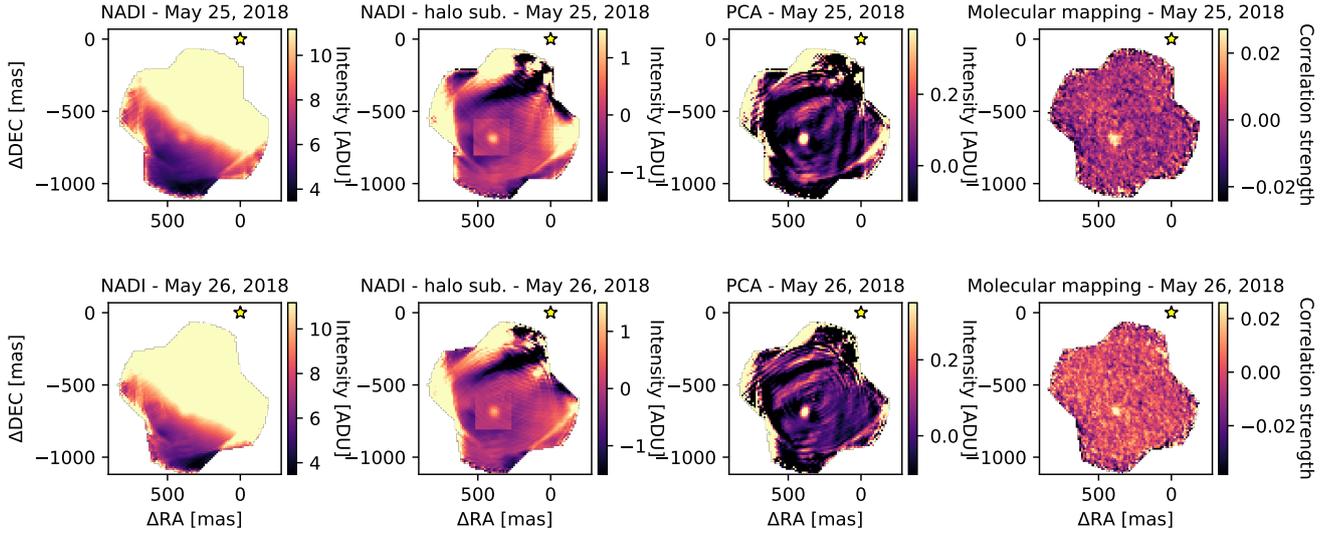
To conclude, the software retrieved the position of the star outside the field of view. SINFONI lacks an atmospheric dispersion corrector, which makes the registration more complex. We followed a three-step strategy. First, the position of the star was evaluated at each wavelength in the last cube, corresponding to the 10 s exposure using a Moffat function. The drift was fit with a low-order polynomial. Second, we accounted for the field selector offsets, the field rotation, and the change in atmospheric refraction to measure the star position outside the field of view in the first 100 s exposure. The theoretical change of the star position due to atmospheric refraction was computed using empirical formulas reported in the source code of the SINFONI data-handling pipeline recipes and adapted to the case of the pupil-tracking mode (see the pipeline user manual<sup>3</sup>). Lastly, we iterated over the next 100 s exposures using our computed change of theoretical atmospheric refraction and the evolution of the parallactic angle.

We assumed a pivot point located at the center of the field of view ( $X = 32, Y = 32$ ; see the ESO manual<sup>4</sup>) for this purpose. The accuracy on the position of that pivot point is tied to the proper correction of the slitlet edges, however, which we evaluate to be accurate to  $\sim 1$  pixel. We therefore explored different pivot point locations within a 3-pixel-wide box centered on the theoretical ones, with 0.5 pixel increments. We conclude that the theoretical value offers the strongest cross-correlation signal (see Sect. 3) on the planet on both nights in our data. The strategy was vetted on

<sup>3</sup> [http://www.eso.org/sci/software/pipelines/index.html#pipelines\\_table](http://www.eso.org/sci/software/pipelines/index.html#pipelines_table)

<sup>4</sup> [https://www.eso.org/sci/facilities/paranal/decommissioned/sinfoni/doc/VLT-MAN-ESO-14700-3517\\_v101.0.pdf](https://www.eso.org/sci/facilities/paranal/decommissioned/sinfoni/doc/VLT-MAN-ESO-14700-3517_v101.0.pdf)

<sup>2</sup> [https://github.com/astronomyk/skycalc\\_ipy](https://github.com/astronomyk/skycalc_ipy)



**Fig. 1.** Detection of HIP 65426 b with SINFONI using (*from left to right*) a simple derotation and stacking of the individual cubes (nADI), a removal of the halo at each wavelength using a circular profile and a local fit with a 2D polynomials, the PCA algorithm (three modes), and the molecular mapping with an Exo-REM model at  $T_{\text{eff}} = 1600$  K,  $\log(g) = 4.0$  dex,  $[M/H] = 0$  dex, and  $C/O = 0.35$  (at  $20 \text{ km s}^{-1}$ ).

similar data obtained on  $\beta$  Pictoris b (Bonnefoy et al., in prep.), and provides a centering with an accuracy better than a spaxel ( $\sim 12.5$  mas) throughout the sequence.

### 2.3. Extraction of emission spectra using the ADI

We applied the angular differential imaging technique (Marois et al. 2006) on each cube slice to evaluate and remove the halo. Both the classic ADI approach and the PCA<sup>5</sup> (five modes) allow retrieving the planet at each epoch with a shape and size compatible with the PSF (Fig. 1). This further validates the star registration process. The post-ADI cubes are affected by residuals from the diffraction pattern that is created by the telescope spiders (the negative and positive lines near the edges of the field of view). The PCA appears to mitigate some of these residuals. We also used the nADI approach considering a simple realignment of the individual cubes to north and a stack. The nADI reveals the planet on top of the stellar halo. We found that the halo could be subtracted on data from May 25, 2018 with the nADI approach removing a circular profile at first and fitting the residuals in a 20-pixel square box around the planet with a 2D polynomial. The box size was chosen to avoid introducing artifacts at the edges of the field of view that could bias the fit while allowing for having a stable (converged) fit of the halo at each wavelength (Appendix B). This method fails to provide an accurate removal of the halo in the data from May 26, 2018, which were obtained in poorer conditions. The companion spectrum was extracted within a 75 mas circular aperture in the PCA and the halo-subtracted nADI cubes. We used the average flux of the residuals in the halo-subtracted nADI cubes in an annulus of radius 50–113 mas to estimate the error bars on the planet flux. A spectrum of the star was obtained from the short-exposure datacubes (see Table 1) within the same aperture, which allowed us to compute the flux ratio with the planet at each wavelength. This ratio was multiplied by a BT-NEXTGEN synthetic spectrum (Allard et al. 2012) at  $T_{\text{eff}} = 8400$  K,  $\log(g) = 3.5$  dex, and  $M/H = 0$  dex degraded to the resolution of SINFONI and flux-calibrated on the TYCHO (B, V), 2MASS (J, H, K), DENIS (K),

WISE (W1 to W4) and AKARI (S9W) photometry (Høg et al. 2000; Cutri et al. 2003, 2012; DENIS Consortium 2005) of the star extracted from the VOSA (Bayo et al. 2008) spectral energy distribution analyzer<sup>6</sup>. This allowed us to obtain final telluric-free spectra of the planet. The spectra of HIP 65426 b extracted from the PCA on both nights have an identical shape but are noisier than the spectrum extracted from the nADI-processed datacubes obtained at one epoch (see Appendix B). The absolute flux of the later spectrum is in excellent agreement with the K1 and K2 photometry reported in Cheetham et al. (2019). We chose to use it for the analysis presented in Sect. 3.

### 2.4. Molecular mapping

We implemented the molecular mapping technique in TExTRIS following the main steps described in Hoeijmakers et al. (2018). A reference spectrum of the star was first extracted from each cube from the median-combination of the 1% most illuminated spaxels in the field of view. This reference spectrum contains a representative set of telluric and stellar features (here Brackett  $\gamma$ ), but does not model the changing slope of the spectra of each individual spaxel across the field of view because the SINFONI PSF evolves with wavelength. A model of the stellar emission was then created for each spaxel ( $i, j$ ) by computing the ratio between the spaxel ( $i, j$ ) and the referenced spectrum. The ratio was smoothed with a Gaussian boxcar of width  $22 \text{ \AA}$  (ten spectral elements) and used to compute a slope-corrected model of each spaxel ( $i, j$ ). The model was then subtracted from the spaxels to create a cube of residuals from which both the continuum emission of the star and of any companion was removed. This step was repeated once for each datacube for the sequence.

We then cross-correlated each spaxel with a template spectrum (see Sect. 3.1) smoothed to the spectral resolution of SINFONI and for which the continuum had been removed before using a Gaussian boxcar of  $20 \text{ \AA}$  too. The cross-correlation function (CCF) was performed with the Python

<sup>5</sup> We used the numpy-LAPACK implementation of the PCA that is implemented as part of the VIP\_HCI package (Gonzalez et al. 2017).

<sup>6</sup> We explored  $T_{\text{eff}}$  from 8000 to 9000K and  $\log(g)$  from 3.5 to 4.5 dex, and we determined the best-matching model using a  $\chi^2$  minimization.

module `crosscorrRV` from the `PyAstronomy` package<sup>7</sup> customized to include a normalization of the CCF following [Briechle & Hanebeck \(2001\)](#). The CCF explores velocities from  $-100$  to  $+100$   $\text{km s}^{-1}$  in steps of  $8$   $\text{km s}^{-1}$  (about four times the original sampling of the data in velocity). The individual cubes of the CCF were then corrected for the barycentric velocity using the Python module `barycorrpy`<sup>8</sup> ([Kanodia & Wright 2018a,b](#)) and combined after they were phased in velocity. The planet was redetected at a separation  $\rho = 812 \pm 18$  mas and  $\text{PA} = 150.2 \pm 1.2^\circ$ , and  $\rho = 796 \pm 18$  mas and  $\text{PA} = 150.6 \pm 1.2^\circ$  on May 25 and 26, 2018, respectively (the error bars correspond to 1 pixel in the SINFONI field). The SINFONI astrometry is compatible within  $2\sigma$  with the one measured on VLT/SPHERE data on May 12, 2018 ( $\rho = 822.9 \pm 2.0$  mas,  $\text{PA} = 149.85 \pm 0.15^\circ$ ), by [Cheetham et al. \(2019\)](#), while it does not rely on a proper calibration of the spaxel size and absolute orientation of the instrument. We present an analysis of the correlation signals in Sect. 3.3.

### 3. Physical properties

We adopted two independent methods for deriving the physical properties of the HIP 65426 b atmosphere. We used a classical forward-modeling approach that compares observed spectra with grids of precomputed synthetic spectra using Bayesian inference methods to estimate posteriors on a set of parameters. We also applied the molecular mapping technique to study the evolution of the cross-correlation signal at the planet location for different molecular templates or grids of atmospheric models used as input. For both methods, we considered grids of BT-SETTL15 and Exo-REM ([Allard et al. 2012](#); [Charnay et al. 2018](#)) synthetic spectra. The corresponding models are described below.

#### 3.1. Atmospheric models

##### 3.1.1. BT-SETTL15

BT-SETTL15 includes a 1D cloud model where the abundance and size distribution of 55 types of grain are determined by comparing the timescale of the condensation, the coalescence, the gravitational settling, and the mixing of these solids that are assumed to be spherical. The details of each solid and chemical element included in the model are described in [Rajpurohit et al. \(2018\)](#). The opacities in the spectral energy distribution were calculated line by line, and the overall radiative transfer was carried out with the PHOENIX code ([Hauschildt et al. 1997](#); [Allard et al. 2001](#)). Convection was handled following the mixing-length theory, and works at hydrostatic and chemical equilibrium. The model also accounts for nonequilibrium chemistry between CO, CH<sub>4</sub>, CO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, and NH<sub>3</sub>. The grid we used (CIFIST2011c<sup>9</sup>) considers a  $T_{\text{eff}}$  from 300 to 7000 K in steps of 100 K, a surface gravity (hereafter  $\log(g)$ ) from 2.5 to 5.5 dex in steps of 0.5 dex. For computing efficiency, we used models with  $T_{\text{eff}}$  in the range of 1200–2000 K, which is a conservative prior considering the previous spectral characterization of HIP 65426 b. The grid does not allow an exploration of nonsolar metallicities in this temperature range.

<sup>7</sup> <https://www.hs.uni-hamburg.de/DE/Ins/Per/Czesla/PyA/PyA/index.html>

<sup>8</sup> <https://github.com/shbhuk/barycorrpy>

<sup>9</sup> <https://phoenix.ens-lyon.fr/Grids/BT-Settl/CIFIST2011c/>

##### 3.1.2. Exo-REM

Exo-REM is an atmospheric radiative-convective equilibrium model that also includes a cloud description that is well suited to reproduce the spectra of brown dwarfs and exoplanets where dust dominates, especially at the L-T transition. Much like the BT-SETTL15 models, the atmosphere is cut into 64 pressure levels. The flux over these layers is calculated iteratively using a constrained linear inversion method for a radiative-convective equilibrium. The initial abundances of each chemical element are first established using the values tabulated in [Lodders \(2010\)](#). The model includes the collision-induced absorptions of H<sub>2</sub>–H<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>–He, ro-vibrational bands from nine molecules (H<sub>2</sub>O, CH<sub>4</sub>, CO, CO<sub>2</sub>, NH<sub>3</sub>, PH<sub>3</sub>, TiO, VO, and FeH), and resonant lines from Na and K. As BT-SETTL15, Exo-REM accounts for nonequilibrium chemistry between CO, CH<sub>4</sub>, CO<sub>2</sub>, and NH<sub>3</sub> that is due to vertical mixing. The abundances of the other species are computed at thermochemical equilibrium. The vertical mixing is parameterized by an eddy-mixing coefficient from cloud-free simulations. The cloud model includes the formation of iron, silicate, Na<sub>2</sub>S, KCl, and water clouds. This grid was generated exclusively for this study and provides spectra from 1.887  $\mu\text{m}$  to 2.500  $\mu\text{m}$  and includes four free parameters: the  $T_{\text{eff}}$  from 300 to 1800 K in steps of 50 K, the  $\log(g)$  from 3.5 to 5.0 dex in steps of 0.5 dex, the [M/H] for  $-0.5$  to  $0.5$  in steps of 0.5 dex, and the [C/O] from 0.35 to 0.8, in steps of 0.05. We note that synthetic spectra are available at higher  $T_{\text{eff}}$  but we chose not to include them because these models do not converge beyond  $T_{\text{eff}} = 1800$  K.

#### 3.2. Bayesian inference of the spectrophotometry

We used the ForMoSA code presented in [Petrus et al. \(2020\)](#) to compare the synthetic spectra to the data following the forward-modeling approach. ForMoSA relies on the nested sampling algorithm ([Skilling 2006](#)) to determine the posterior distribution function of a set of free parameters in the models. This method performs a global exploration of the model parameter space to search for local maxima of likelihoods following an iterative method that isolates a progressively restrained area of iso-likelihood while converging toward the maximum values. This avoids missing local maxima of likelihood and allows us to evaluate the Bayesian evidence that can be used for the model selection ([Trotta 2008](#)).

Because the Bayesian inference implies that random points with a continuous distribution inside the parameter space are generated, we chose to reduce the step of each model grid by interpolating them with the N-dimensional linear interpolation python package `griddata`, which triangulates the input data with `Qhull`<sup>10</sup> before applying barycentric interpolation. The interpolated steps of the BT-SETTL15 grids are 10 K for the  $T_{\text{eff}}$  and 0.1 dex for the  $\log(g)$  while the interpolated steps of the Exo-REM grids are 10 K for the  $T_{\text{eff}}$ , 0.1 dex for the  $\log(g)$ , 0.1 for the metallicity and 0.05 for the C/O ratio. It increases the accuracy of the second interpolation step which occurs over the course of the nested sampling process when a new random point is generated in the parameter space. This interpolation is based on the N-dimensional weighted mean of the closest neighboring spectra inside the interpolated grid. The physical parameters derived by ForMoSA are summarized in Table 2. We stress that the errors given by ForMoSA are statistical and have been determined for each parameter as the range that encompasses 68% of

<sup>10</sup> <http://www.qhull.org/>

**Table 2.** Estimates of the atmospheric parameters of HIP 65426 b for each grid of synthetic precomputed spectra and for each method.

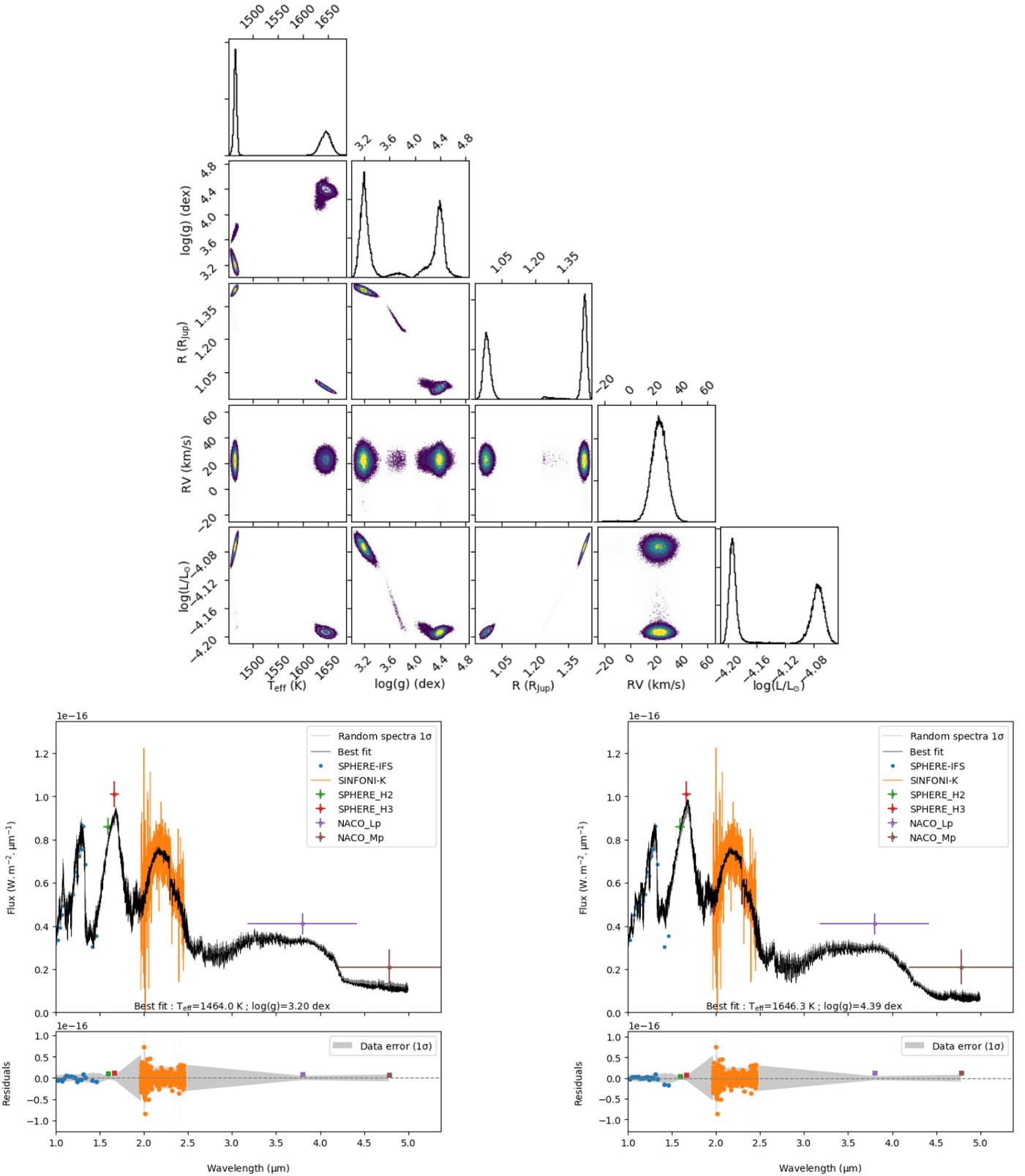
BT-SETTL15							
	$T_{\text{eff}}$ (K)	$\log(g)$ (dex)	R ( $R_{\text{Jup}}$ )	Radial velocity ( $\text{km s}^{-1}$ )	$\log(L/L_{\odot})$		
ForMoSA							
1.0–4.7 $\mu\text{m}$ low $T_{\text{eff}}$ with continuum	$1464^{+3}_{-3}$	$3.20^{+0.09}_{-0.06}$	$1.42^{+0.01}_{-0.01}$	$21.8^{+6.3}_{-6.2}$	$-4.07^{+0.01}_{-0.01}$		
1.0–4.7 $\mu\text{m}$ high $T_{\text{eff}}$ with continuum	$1645^{+10}_{-11}$	$4.38^{+0.07}_{-0.11}$	$0.98^{+0.02}_{-0.01}$	$22.8^{+5.5}_{-5.6}$	$-4.19^{+0.01}_{-0.01}$		
<i>K</i> band low $T_{\text{eff}}$ with continuum	$1461^{+6}_{-6}$	$\leq 3.25$	$1.43^{+0.02}_{-0.02}$	$21.7^{+6.1}_{-6.2}$	$-4.09^{+0.02}_{-0.02}$		
<i>K</i> band high $T_{\text{eff}}$ with continuum	$1610^{+20}_{-37}$	$4.19^{+0.14}_{-0.13}$	$1.03^{+0.05}_{-0.04}$	$22.3^{+6.0}_{-6.1}$	$-4.19^{+0.01}_{-0.01}$		
<i>K</i> band without the continuum	$1633^{+234}_{-260}$	$\leq 4.00$	–	$18.7^{+14.0}_{-16.8}$	–		
TE <sub>x</sub> TRIS							
<i>K</i> band low $T_{\text{eff}}$ without the continuum	1400	3.0	–	$20^{+8}_{-8}$	–		
<i>K</i> band high $T_{\text{eff}}$ without the continuum	1700	3.5	–	$20^{+8}_{-8}$	–		
$\chi^2$ minimization							
<i>K</i> band low $T_{\text{eff}}$ without the continuum	1400	3.5	–	–	–		
<i>K</i> band high $T_{\text{eff}}$ without the continuum	1800	3.5	–	–	–		
Exo-REM							
	$T_{\text{eff}}$ (K)	$\log(g)$ (dex)	[M/H]	C/O	R ( $R_{\text{Jup}}$ )	Radial velocity ( $\text{km s}^{-1}$ )	$\log(L/L_{\odot})$
ForMoSA							
<i>K</i> band with continuum	$1518^{+88}_{-71}$	$\leq 4.20$	$0.05^{+0.24}_{-0.22}$	$\leq 0.50$	$1.28^{+0.10}_{-0.11}$	$20.2^{+6.0}_{-6.4}$	$-4.10^{+0.2}_{-0.2}$
<i>K</i> band without the continuum	$1639^{+141}_{-187}$	$\leq 4.5$	$0.02^{+0.35}_{-0.35}$	$\leq 0.55$	–	$17.0^{+10.8}_{-15.0}$	–
TE <sub>x</sub> TRIS							
<i>K</i> band without the continuum	1700	3.5	0.0	0.40	–	$20^{+8}_{-8}$	–
$\chi^2$ minimization							
<i>K</i> band without the continuum	1500	3.5	0.0	0.40	–	–	–

**Notes.** The errors are statistical and result from the Bayesian inversion. When posteriors are located at the edge of the grid, an upper or lower limit is defined for the corresponding parameter.

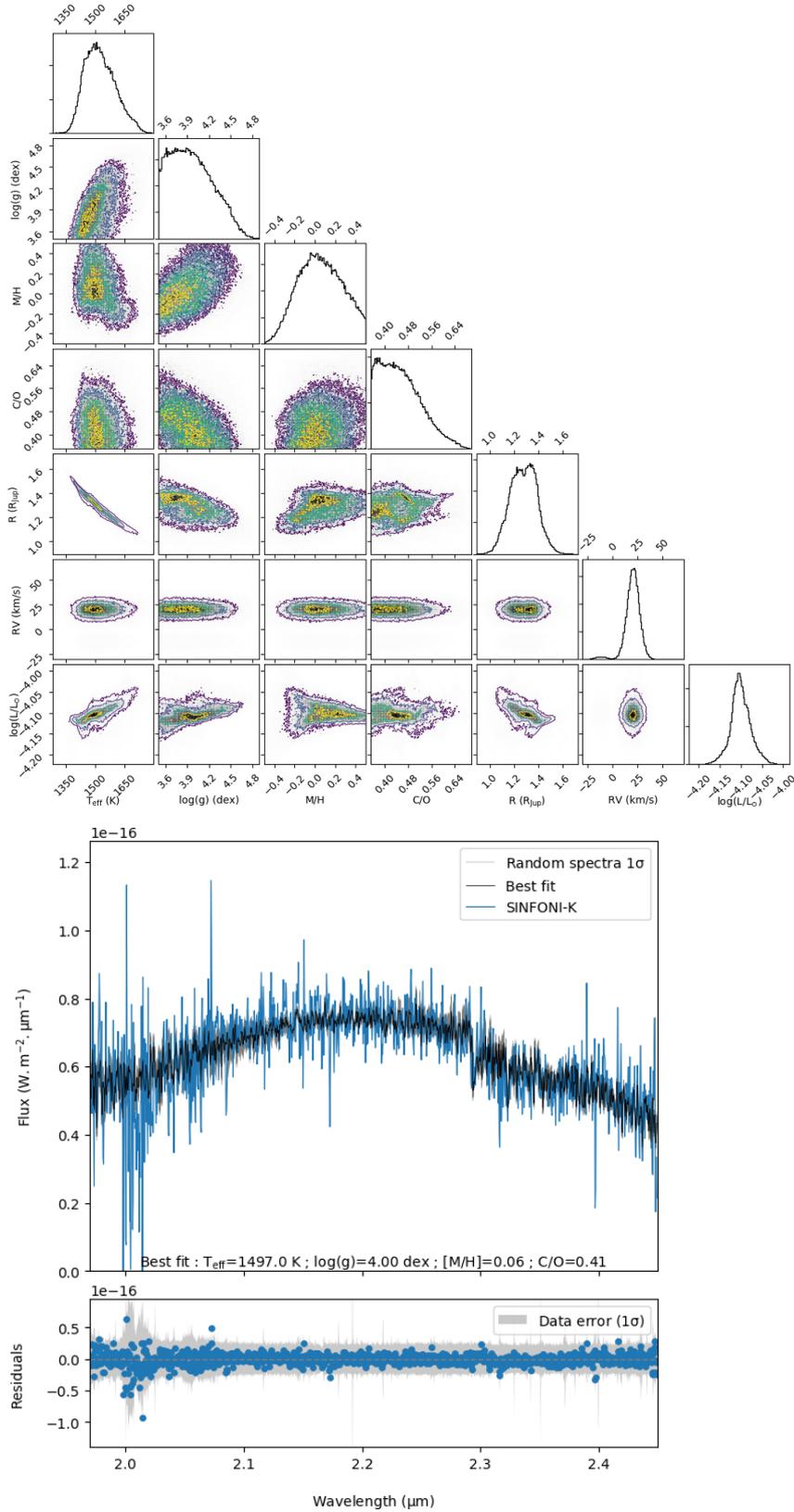
the solutions in each posterior, they do not include possible systematical errors in models, which are difficult to quantify (see Petrus et al. 2020). Whenever the posterior distribution did not show a maximum (e.g., C/O ratio), we defined an upper limit on the given parameter encompassing 68% of the posterior distribution starting from the posterior maximum. Extended grids would be needed to constrain these parameters, but this analysis is left for future work. The best fits to the data, obtained using 20 000 living points in the nested sampling algorithm, are presented in Figs. 2 and 3 for the two families of atmospheric models.

When the 1.0–4.7  $\mu\text{m}$  spectral energy distribution is compared to the BT-SETTL15 models (Fig. 2), two distinct groups of solutions emerge: at low  $T_{\text{eff}}$  ( $T_{\text{eff}} = 1464 \pm 3$  K), and at high  $T_{\text{eff}}$  ( $T_{\text{eff}} = 1645 \pm 10$  K). Both sets of solutions were explored within separate runs using flat priors between 1200–1500 K and 1500–2000 K. The results are shown in Table 2 together with the data and the distribution of 50 synthetic spectra corresponding to draws within the  $1\sigma$  interval of each posterior. The residuals between the observations and the best solutions are also shown, and compared with the data error bars.

The  $L'$  and  $M'$  photometry is up to  $1.5\sigma$  above the predictions. This may be due to the lack of exploration of nonsolar atmospheric composition by the BT-SETTL models, to an imperfect handling of the nonequilibrium chemistry that tends to enhance the  $L'$  and  $M'$  band fluxes in young L–T transition objects (Hubeny & Burrows 2007; Skemer et al. 2014; Moses et al. 2016; Stone et al. 2016) or cloud properties (e.g., Skemer et al. 2014), or even to excess emission from a putative circumstellar disk (Christiaens et al. 2019). Similar deviations beyond 2.5  $\mu\text{m}$  are also seen in the spectral energy distribution fit of mid- and late-L type brown dwarfs from Upper Scorpius (Lodieu et al. 2018) using the same models. We also note that the  $H$ -band fluxes (SPHERE) are not reproduced well in the case of the low- $T_{\text{eff}}$  solution, while the  $L'$ - and  $M'$ -band fluxes and the water-band absorption from 1.35 to 1.45  $\mu\text{m}$  are better represented. Previous version of the BT-SETTL models also failed to represent the shape of the  $H$ -band of young L dwarfs sampled by the SPHERE  $H$ -band filters (Manjavacas et al. 2014). Removing these points does not remove the bimodal posterior distribution.



**Fig. 2.** Application of ForMoSA using the BT-SETTL15 models. *Top:* bimodal posterior distribution. *Bottom left and right:* comparison of the best fit and the observed data for the low  $T_{\text{eff}}$  and high  $T_{\text{eff}}$  modes. The data points were obtained using the low-resolution SPHERE-IFS spectrum ( $R \simeq 30\text{--}50$ ; blue points, Chauvin et al. 2017), the SPHERE-IRDIS  $H$ -band photometry (green and red points; Cheetham et al. 2019), our medium-resolution SINFONI spectrum ( $R \simeq 5500$ ); orange points, this work), and the NaCo  $L'$  and  $M'$ -band photometry (purple and brown points, respectively; Cheetham et al. 2019). We overlaid 50 synthetic spectra picked randomly within the  $1\sigma$  envelop of each posterior in gray.



**Fig. 3.** Same as Fig. 2, but with the grid of Exo-REM spectra and applicable to the *K*-band SINFONI data.

Conversely, one unique set of solutions at intermediate  $T_{\text{eff}}$  is found with the Exo-REM models (Fig. 3), which allow an exploration of nonsolar abundances. Conversely, both models tend to predict close monomodal solutions when the continuum is removed that are in better agreement with the ones found by

Cheetham et al. (2019) made without the SINFONI data, but with much larger uncertainties.

A consistent radial velocity of  $22 \pm 6 \text{ km s}^{-1}$  and  $20 \pm 6 \text{ km s}^{-1}$  is found for HIP 65426 b using the BT-SETTL15 and Exo-REM models at *K*-band, respectively.

We used the  $T_{\text{eff}}$  inferred from ForMoSA and the DUSTY evolutionary model (Chabrier et al. 2000) to derive a planet mass between 8.1 and 10.0  $M_{\text{Jup}}$  consistent with the values from Marleau et al. (2019), and a radius between 1.48 and 1.53  $R_{\text{Jup}}$ . The radii obtained with ForMoSA and the BT-SETTL models for the cold- $T_{\text{eff}}$  solution agree better with the tracks, while those obtained for the high- $T_{\text{eff}}$  prediction are clearly at odds with the expected evolution of a young Jupiter such as HIP 65426b. The Exo-REM models also tend to underpredict the radii, but less strongly. These differences have also been well documented for young L-type planets such as HIP 65426b (e.g., Marley et al. 2012; De Rosa et al. 2016) and could be explained by the imperfect description of the cloud physics and opacity.

### 3.3. Characterization with the molecular mapping

In this section we will define our method to estimate the correlation signal of each spaxel. Then, we will present our results that we obtained cross-correlating our data cubes with entire grids of synthetic spectra.

#### 3.3.1. Extraction of the planet's correlation signal

We ran the molecular mapping steps with the TExTRIS package (Sect. 2.4) on the molecular templates (see Sect. 3.3.2) and the grids of Exo-REM and BT-SETTL15 model spectra (see Sect. 3.3.3). The tool was parallelized to gain computation time and produced as many cross-correlation maps as input model spectra. The planet is detected with a radial velocity of  $20 \pm 8 \text{ km s}^{-1}$  (see Fig. 1). We extracted the cross-correlation signal in the correlation maps by averaging the CCF over the full width at half maximum (FWHM) of the autocorrelation, centered on the radial velocity of the planet to produce averaged correlation maps and within a circular aperture centered on the planet position of 4 pixels radius ( $\sim$ FWHM of the PSF) to extract the correlation signal of the planet. We detail our exploitation of the correlation signal to characterize the properties of the planet below.

#### 3.3.2. Molecular template analysis

We used precomputed templates of individual molecules ( $^{13}\text{CO}$ ,  $^{12}\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{FeH}$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{HDO}$ ,  $\text{K}$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{Na}$ ,  $\text{PH}_3$ ,  $\text{TiO}$ , and  $\text{VO}$ ) as input of TExTRIS to evaluate whether these species produce a strong set of absorption in the planet spectrum. The templates were computed with the Exo-REM model assuming the pressure-temperature profile of a solar-metallicity atmosphere with  $T_{\text{eff}} = 1700 \text{ K}$  and  $\log(g) = 4.0 \text{ dex}$  (e.g., a generic model close to the physical properties of HIP 65426b). We show in Fig. 4 (left column) the averaged correlation maps for the  $\text{CO}$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CH}_4$  and  $\text{NH}_3$  templates, and with the full molecule template ( $T_{\text{eff}} = 1700 \text{ K}$ ,  $\log(g) = 4.0 \text{ dex}$ ,  $[\text{M}/\text{H}] = 0.0$ , and  $\text{C}/\text{O} = 0.50$ ). The planet is detected with the full molecule template, the  $\text{H}_2\text{O}$  template, and marginally with the  $^{12}\text{CO}$  template. The distribution of correlation signals (see Fig. 4, right column) shows a Gaussian distribution and indicates a detection at a signal-to-noise ratio (S/N) of 2.5, 2.2, and 1.2 for the full molecule template, and the  $\text{H}_2\text{O}$  and  $^{12}\text{CO}$  templates, respectively. This is consistent with the mid-L spectral type of the object.

The lack of a clear detection of the  $^{12}\text{CO}$  is unexpected for an L6 object. We discuss this in Sect. 4.1.1.

#### 3.3.3. Exploring the grids of synthetic spectra

As a following step, we explored the evolution of the cross-correlation signal over the synthetic grid of spectra from the BT-SETTL15 and Exo-REM models. Synthetic spectra with anomalous spectral slopes indicative of nonconverged cloud models were excluded and are reported as white rectangles. The application with the BT-SETTL15 grid is shown in Fig. 5, giving the correlation signal evolution with the effective temperature and the surface gravity. The 2D posterior distribution obtained with the ForMoSA code on the continuum-removed SINFONI spectrum (see Sect. 3.2) is overlaid. We also show the corresponding 1D posteriors along with the averaged  $\chi^2$  and mean correlation signals (“pseudo-1D posteriors”). The  $\chi^2$  pseudo-1D posteriors start from the original grid of models. We note that this alternative approach to the forward-modeling also identifies two distinct modes of physical parameters for HIP 65426 b at low  $T_{\text{eff}}$  ( $T_{\text{eff}} \simeq 1400 \text{ K}$ ) and high  $T_{\text{eff}}$  ( $T_{\text{eff}} \simeq 1800 \text{ K}$ ).

A similar analysis with the Exo-REM model grid is shown in Fig. 6 considering different layouts in the parameter space. Their exploitation also shows a similar behavior as previously and favors one family of solutions with  $T_{\text{eff}} = 1700 \text{ K}$ ,  $\log(g) = 3.5$ ,  $[\text{M}/\text{H}] = 0.0$ , and  $\text{C}/\text{O} = 0.40$ . For both models, the detailed set of physical parameters maximizing the correlation signal is reported in Table 2 for the BT-SETTL15 and Exo-REM models. We note that the maximum of the CCF value obtained with both models is similar ( $\sim 0.011$ ). The CCF signal using the Exo-REM models is maximized at solar metallicity, which corresponds de facto to the one of the BT-SETTL15 models.

The comparison of the two approaches (forward-modeling versus molecular mapping) for the characterization of planetary signals is discussed below, together with the physical properties and possible origin of HIP 65426 b.

## 4. Discussion

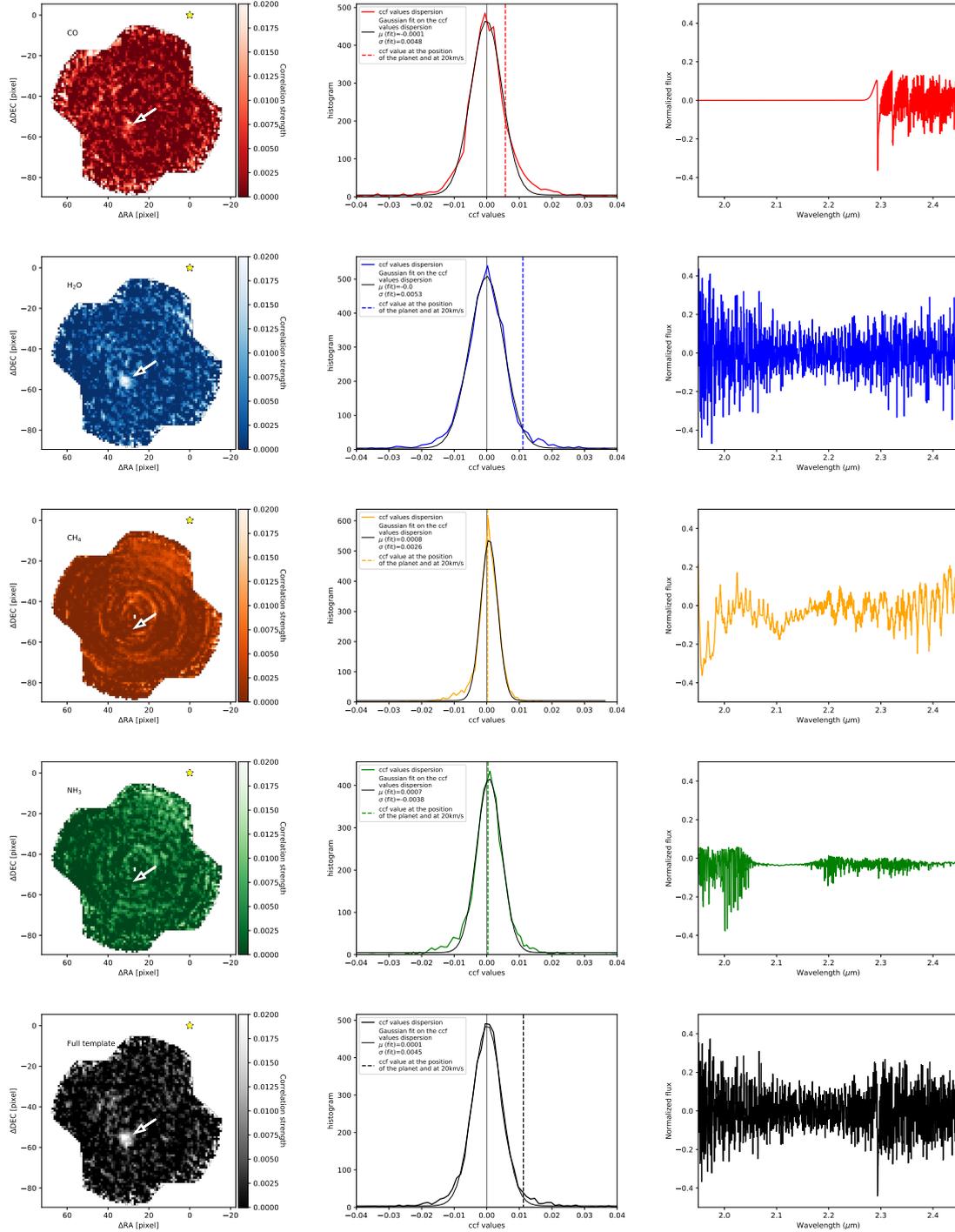
### 4.1. Performances and limitations of our data analysis

In this section we will discuss the potential of the molecular mapping to detect companion and characterize them. We will also present the first comparison between the atmospheric characterization using the molecular mapping and the Bayesian inference which are two independent methods.

#### 4.1.1. The molecular mapping on noisy data

The exposure time calculator (ETC- of SINFONI estimates a theoretical maximum  $S/N = 15.2$  from 2.1 to 2.15  $\mu\text{m}$  for the first night of observations. We measure a S/N of 9.7 on the extracted spectrum over a similar wavelength interval (see Appendix B). The difference may be due to wavelength-to-wavelength noise introduced by the extraction process. The data are read-out noise limited because of the short integration time used to avoid the persistence on the detector. This advocates the use of specific high-contrast modes on such medium-resolution IFUs (e.g., GTC/FRIDA, ELT/HARMONI; N’Diaye et al. 2018; Carlotti et al. 2018).

The observations of HIP 65426 b offer an interesting test-case of the molecular mapping method when applied in the low S/N regime. In this case, only the strongest molecular absorptions contribute to the correlation signal. The  $\text{H}_2\text{O}$  tend to produce a larger number of strong lines than  $^{12}\text{CO}$ . The  $^{12}\text{CO}$  lines are spread in a narrow range of wavelength where the theoretical S/N predicted by the ETC is lower (10.5 for wavelengths

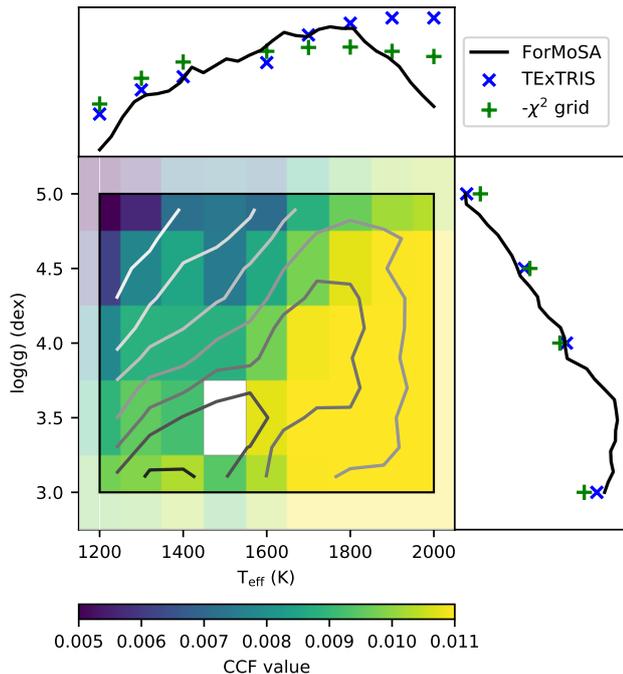


**Fig. 4.** Application of TEXTRIS on SINFONI data of HIP 65426 b using templates of molecules  $^{12}\text{CO}$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CH}_4$ , and  $\text{NH}_3$  and the full molecule template (*top to bottom*, respectively) at a velocity of  $20 \text{ km s}^{-1}$ . *Left*: cross-correlation maps. The star represents the position of the host star, which lies out of the field. We detect the companion with the full molecule template ( $S/N = 2.5$ ),  $\text{H}_2\text{O}$  ( $S/N = 2.2$ ) and possibly with the  $^{12}\text{CO}$  ( $S/N = 1.1$ ). *Center*: distribution of cross-correlation values in the integrated cross-correlation cube for each position. The correlation signal is significant for the full molecule template,  $\text{H}_2\text{O}$ , and  $^{12}\text{CO}$ , but not for  $\text{CH}_4$  and  $\text{NH}_3$ . *Right*: molecular template.

longward of  $2.29 \mu\text{m}$ ) because of the numerous telluric lines and the lower transmission of the  $K$ -band filter of the instrument. Conversely, the set of narrow water absorption is found as a set of partly blended features at the resolution of SINFONI and spread over the entire  $K$  band (Fig. 4). This explains why  $^{12}\text{CO}$  does not produce a strong correlation signal, as would naively be expected for a mid-L type exoplanet. We investigate the detection capability of the molecular mapping using the CO template further

in Appendix C by injecting simulated planets at different C/O ratio into our datacube. The tests reveal the ability of the method to recover a planet with a noiseless spectral signature close to that of HIP 65426b at a low S/N. We show in addition that the significance of the detection drops for synthetic planets with a low C/O ratio for which the strongest CO overtone is shallower.

We show in Fig. 7 the correlation signal between the extracted SINFONI spectrum of the planet (continuum



**Fig. 5.** Comparison of the correlation signal of each spectrum of the grid BT-SETTL15 obtained with TExTRIS (color map) and the 2D posterior obtained with ForMoSA (gray contours). We also compare the normalized 1D posterior obtained with ForMoSA on the  $K$  band without the continuum (black line) with the normalized 1D pseudo-posteriors extracted from the correlation signal map (blue cross) and a  $\chi^2$  map (green cross) for the  $T_{\text{eff}}$  and the  $\log(g)$  (top and right panel, respectively). The white rectangle corresponds to a nonconverged synthetic spectra.

subtracted) and the molecular templates. We confirm the conclusions from Fig. 4 and in particular the faintness of the correlation signal of  $^{12}\text{CO}$  with respect to  $\text{H}_2\text{O}$ . To conclude, the figure also reveals additional correlation and anticorrelation peaks over the velocity span. As noted by Hoeijmakers et al. (2018), some of these peaks are likely to be caused by the regular spacing of molecular absorption both in the template and exoplanet spectra (overtones). This was confirmed by computing the auto-correlation of the templates and justifies the use of the spatial distribution of CCF values for computing an S/N rather than the velocity dimension. The overtones appear at different velocities in the various molecules, and therefore the correlation of full synthetic spectra that combine all the molecular absorption offers to reduce these parasitic signals with respect to the main correlation peak in the velocity space.

These features are slightly reduced and the central correlation peak is enhanced when a full synthetic spectrum corresponding to the  $T_{\text{eff}}$ ,  $\log(g)$ , and composition assumed for the templates of individual molecules is used. For all these reasons, full synthetic spectra offer a more robust way of characterizing any object and achieving a convincing detection of new ones than templates of individual molecules.

#### 4.1.2. Comparison of the characterization approaches

We compare three different approaches to determine the physical parameters of HIP 65426 b: a standard  $\chi^2$  minimization, a Bayesian inference with the code ForMoSA, and the molecular mapping with the code TExTRIS. We show in the Figs. 5 and 6, and Table 2 that all three methods yield consistent results.

The coherency between the  $\chi^2$  minimization and the Bayesian inference stems from our assumption that the uncertainties on the observed spectra are Gaussian distributed and that the data-points are not correlated. The likelihood and the CCF are related assuming the same underlying hypothesis on the data (Brogi & Line 2019; Ruffio et al. 2019). This can explain the overall similar trends in the results from the Bayesian inference (and the  $\chi^2$  minimization) and the molecular mapping. The remaining differences, shown in Figs. 5 and 6, may have several origins. The likelihood and the CCF are related by the model variance and data variance. The model variances vary across the grid. The data variance is expected to be constant for a given spaxel, which might not be the case because the planet signal is sampled by different spaxels (with their own noise distribution) throughout the sequence because of the field rotation. The removal of the halo and the continuum-subtraction method is not performed at the same stage in TExTRIS and ForMoSA, which may introduce different correlated noises. The remaining differences may arise from correlations in the CCF signals. This can render molecular mapping for the characterization unsuitable. It further advocates the direct extraction of spectra of companions whenever they are detected or more robust approaches such as the forward-modeling of the joint speckles and planetary signals for objects blurred into the stellar halo (e.g., Ruffio et al. 2019).

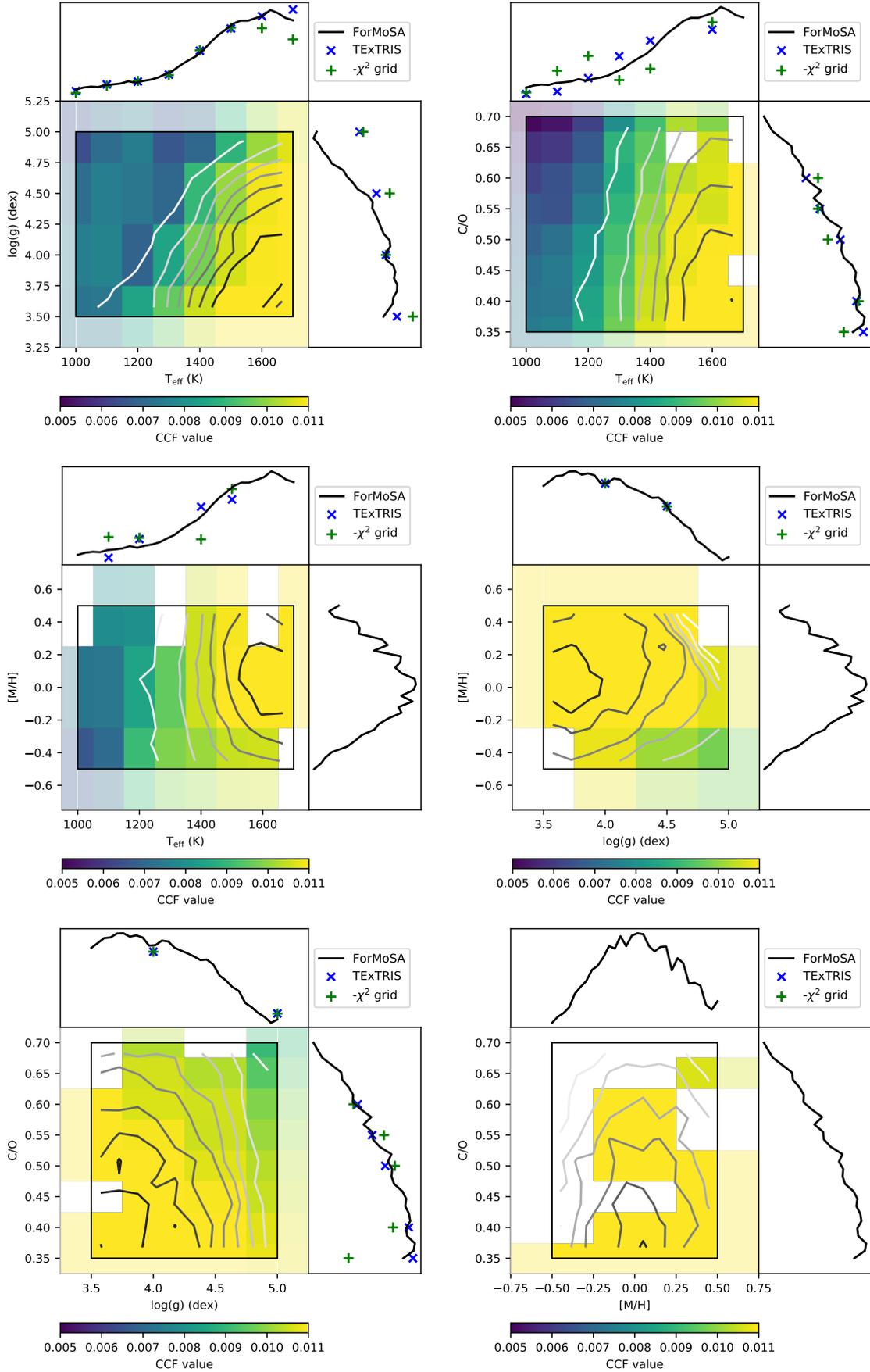
The evolution of the CCF across the grids remains very similar to the one of the  $\chi^2$  values, however, and the main differences with the posteriors (ForMoSA) appear at the grid edges. This may stem from the interpolation steps performed by ForMoSA. The grid generation can originally produce nonconverged synthetic spectra that will propagate at the interpolation steps and affect the posterior shape. Figure 8 shows the difference between the posteriors obtained with the original grid Exo-REM spectra and with a grid from which we removed all the obvious nonconverged models. When no cleaning of the grid is performed beforehand, local maxima of likelihood appear due to the non-converged models and produce patterns in the posteriors. We took particular care and removed any nonconverged models before running the code. However, it is still possible that some models may be slightly nonconverged at the edges of the grids, especially in the low-gravity range where dust is expected to play a prominent role in the atmospheric balance, or at high  $T_{\text{eff}}$ , where the Exo-REM models are less suitable.

These appear as inherent limitations of Bayesian inference with precomputed grids of forward models. These biases might be lifted when a fully integrated Bayesian scheme coupled to Exo-REM (retrieval) becomes available or when extended and input grids of models with a refined meshing are used.

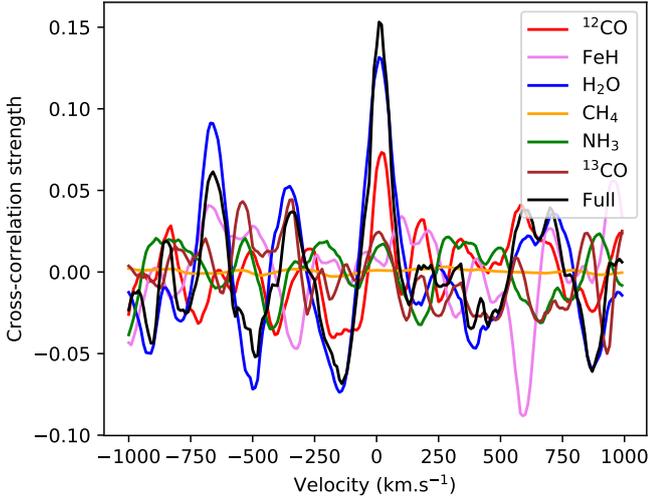
#### 4.1.3. Losing the pseudo-continuum information

The molecular mapping implies that information contained in the planet spectral continuum is removed. Figure 8 compares Bayesian posteriors obtained using the grid Exo-REM on the band  $K$  with and without the continuum (solid and dashed green lines, respectively), and Table 2 summarizes the values of the parameters extracted with error bars. The results of both approaches agree within the error bars ( $1\sigma$ ). Nevertheless, the subtraction of the continuum shifts and flattens the  $T_{\text{eff}}$  posterior (factor of  $\approx 2.0$  between the error bars). The constraint on the other physical parameters is less affected by the continuum removal, which indicates that the related information is encoded in the line intensities.

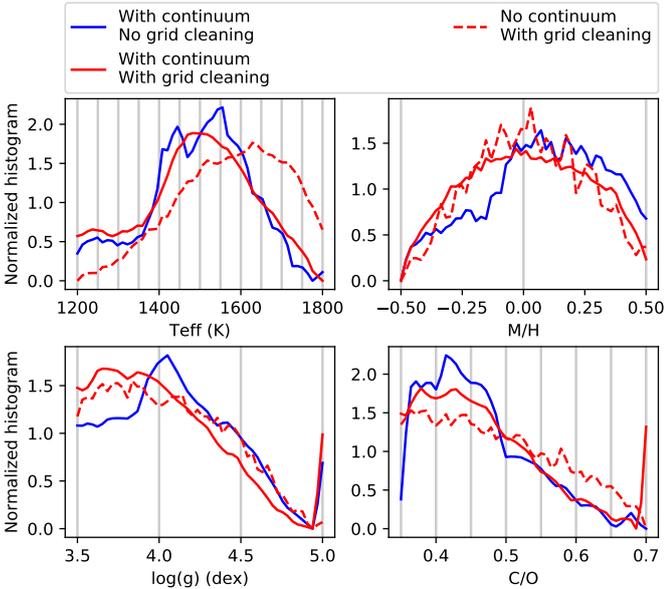
These differences clearly indicate the limitations of the molecular mapping in constraining the  $T_{\text{eff}}$  of objects in the



**Fig. 6.** Same as Fig. 5, but with the grid Exo-REM. We considered different layouts around the set of parameters that maximize the CCF in each direction of the parameter space. Models at  $T_{\text{eff}} = 1800$  K are unconverged at the given [M/H] and/or C/O, and/or  $\log(g)$  so that the corresponding CCF values and posteriors stop at  $T_{\text{eff}} = 1700$  K.



**Fig. 7.** Cross-correlation signals obtained when using the continuum-subtracted spectrum of HIP 65426 b and the molecular templates (color) or a full Exo-REM spectrum at  $T_{\text{eff}} = 1700$  K,  $\log(g) = 4.0$  and solar abundances (black).



**Fig. 8.** Comparison of posteriors from ForMoSA with different data and model configurations with the grid Exo-REM. We show in blue that the grid has been taken on the shelf and the continuum has been kept. In red (solid line) we show that the grid has been cleaned of its nonconverged models and the continuum has been kept. In red (dashed line) we plot the grid that has been cleaned of its nonconverged models and the continuum has been removed. We show in grey the grid steps for each parameter.

L-type regime from observations at  $K$  band. We still need to investigate whether the method, when it is applied to a different band ( $J$  or  $H$  band) or at higher spectral resolution (VLT/ERIS  $K$ -band mode at  $R \sim 8000$ , ELT/HARMONI), could retrieve this information.

#### 4.2. Interpreting the radial velocity of HIP 65426 b

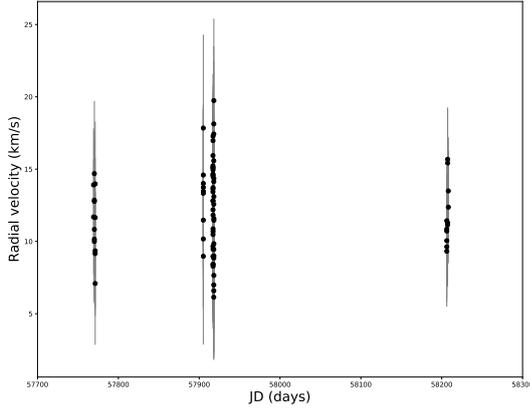
An interesting result from the SINFONI  $K$ -band spectrum of HIP 65426 b is the determination of the radial velocity of the planet itself. As described in Sect. 2, great care has been taken

to calibrate the wavelength dispersion of the cubes using the various telluric absorption lines, and we cross-checked it at the end with the solution found for the OH lines in the data (centered on zero  $\text{km s}^{-1}$ , see Fig. A.1). When the two independent approaches, the Bayesian inference and the molecular mapping, are used to measure the radial velocity of HIP 65426 b in the SINFONI datacubes, we find compatible values that give a radial velocity estimate of  $21 \pm 7 \text{ km s}^{-1}$ . Similar results are obtained with the molecular mapping approach using the observation acquired on May 25, 2018 ( $20 \pm 8 \text{ km s}^{-1}$ ). We used the molecular mapping technique to estimate the radial velocity on the set of observations acquired on May 26 2018, and we found  $31 \pm 8 \text{ km s}^{-1}$ . The radial velocity in both nights is consistent at  $2\sigma$  and we chose to define our final estimate of the radial velocity as  $26 \pm 15 \text{ km s}^{-1}$  to be the most conservative.

A direct application of this result is to verify the consistency with the expected Keplerian motion of a bound companion orbiting HIP 65426 A. Considering the orbital solution found for HIP 65426 b by Cheetham et al. (2019), we might expect a maximum difference of  $\pm 4.4 \text{ km s}^{-1}$  relative to the primary star absolute radial velocity. In the discovery paper of HIP 65426 b, Chauvin et al. (2017) reported for HIP 65426 A a value of  $5.2 \pm 1.3 \text{ km s}^{-1}$ , and a very high projected rotational velocity of  $v \sin i = 299 \pm 9 \text{ km s}^{-1}$ . They considered for this analysis a set of 14 HARPS spectra acquired during the nights of January 16, 17, and 18 2017, and a two sets of lines: (i) Six strong lines (Ca II K and five H lines from H $\beta$  to H9, excluding H $\epsilon$ ; using the rotationally broadened core of the lines), and (ii) 35 atomic metallic lines. More details can be found in Appendix B of Chauvin et al. (2017). Because of the primary spectral type and its rotational velocity, a precise measurement of the absolute radial velocity is challenging. This motivates us to revisit this first analysis, which mainly focused on the extraction of the stellar rotational velocity. This time, we used 78 HARPS spectra<sup>11</sup> obtained during ten nights between January 2017 to March 2018. We first followed a similar analysis to extract the radial and rotational velocities using the two line sets (i) and (ii). Although H lines are adapted for the extraction of rotational velocities and the search for variability given their strength, their extended wings makes them less reliable to derive absolute radial velocity as they are more sensitive on the continuum tracing. The revisited absolute radial velocity of HIP 65426 was therefore extracted using only the second set of lines (ii), that is, the weak metallic lines that are essentially only broadened by the atmospheric velocity field. The resulting radial velocity measurements are shown in Fig. 9. A mean radial velocity of  $12.2 \pm 0.3 \text{ km s}^{-1}$  ( $2.9 \text{ km s}^{-1}$  for the standard deviation of the radial velocity measurements) is derived, which is significantly different from the value derived by Chauvin et al. (2017), but more reliable because more spectra were used, because of the temporal baseline, and because the selection of metallic lines is more adapted for absolute radial velocity measurements. Moreover, high-frequency variation probably caused by pulsation are clearly identified. The average value of  $v \sin i$  is lower than originally derived with a value of  $261 \pm 2 \text{ km s}^{-1}$  ( $16 \text{ km s}^{-1}$  for the standard deviation of the radial velocity measurements) and no sign of a spectral binary 1 (SB1) or spectral binary 2 (SB2) binary is detected.

From this, we conclude that the difference of radial velocities between HIP 65426 b and A is compatible with a physical object in Keplerian motion (considering the uncertainties on the radial velocities of A and b, and the predicted Keplerian motion for b).

<sup>11</sup> Program IDs: 098.C-0739(A) and 099.C-0205(A).



**Fig. 9.** Radial velocity measurements of HIP 65426 using a total of 78 HARPS spectra obtained between 2017 and 2018 at the La Sill /3.6m telescope and weak metallic lines that are less sensitive to the continuum tracing.

We note that the new value for the radial velocity measurement of HIP 65426 A agrees better with a membership to the LCC subgroup considering the probability predictions of the BANYAN  $\Sigma$  code by Gagné et al. (2018). Finally, the direct determination of the radial velocity of imaged exoplanets with medium-resolution (to high-resolution) spectrographs, as already obtained for  $\beta$  Pic b (Snellen et al. 2014), HR 8799 b and c (Ruffio et al. 2019) and now HIP 65426 b, highlights the rich perspective of this technique when combined with astrometric monitoring to (i) test the companionship of the newly imaged exoplanetary candidates, (ii) refine their orbital parameters when confirmed, and (iii) measure their projected rotational velocity and potentially their spin with very high-resolution spectra.

#### 4.3. HIP 65426 b formation pathway

The broad constraints on the C/O ratio and metallicity of HIP 65426 b derived in Sect. 3 give the opportunity of discussing the planet formation mode. We caution that the C/O ratio estimate depends on the correct assumptions on the cloud prescriptions where grains are efficient oxygen carriers and can affect the composition of the gas phase from which the molecular lines arise (e.g., Helling et al. 2014).

The interpretation relies on several additional hypotheses. The original composition of the putative circumstellar disk where HIP 65426 b may have formed is obviously unknown and the C/O and metallicity of HIP 65426 A, which is a fast rotator (Chauvin et al. 2017), have not been determined either, to our knowledge. Kane et al. (1980) reported the C/O ratio of six bona fide members of LCC and UCL but these estimates show a strong dispersion and would need to be revised with the help of recent stellar model atmospheres. Bubar et al. (2011) reported a subsolar metallicity on average ( $[Fe/H] = -0.12$  dex, 0.10 dex rms) for a sample of UCL and LCC solar-type stars. Viana Almeida et al. (2009) reported metallicities of  $0.02 \pm 0.05$  dex and  $-0.02 \pm 0.09$  dex for six and ten stars from UCL and Upper Scorpius, respectively. Nissen (2013) reported a correlation between the C/O ratio and the Fe/H of stars with planets with a mean C/O = 0.58 at Fe/H = 0 (0.06 rms scatter). Therefore we can expect that the HIP 65426A metallicity and C/O are close to solar values. Knowing the host star composition would be important to strengthen the conclusions on the formation pathway based on the atmospheric composition of the exoplanet, however.

The Gravity Collaboration (2020) have proposed a simple analytical method for interpreting the C/O ratio measured for imaged exoplanets. From the relative abundances of CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, C (grains) and O (silicates) given in Öberg et al. (2011), they estimated the relative abundance of the C and O in the solid ( $n_{C,s}$ ,  $n_{O,s}$ ) and gaseous phases ( $n_{C,g}$ ,  $n_{O,g}$ ) and for two possible planet birth locations: within the water-ice line and between the water and CO<sub>2</sub> ice lines. We additionally considered the case of a formation between the CO<sub>2</sub> and CO ice lines given the projected physical separation of 92 au for HIP 65426 b. To calculate the C/O, we assumed  $M_{solid}$  and  $M_{gas}$  as the amount of solid and gas in the atmosphere of the planet and  $f_{s/g}$  the solid-to-gas ratio in the initial disk.

$$C/O = \frac{n_{C,s} f_{s/g}^{-1} M_{solid} + n_{C,g} (1 - f_{s/g})^{-1} M_{gas}}{n_{O,s} f_{s/g}^{-1} M_{solid} + n_{O,g} (1 - f_{s/g})^{-1} M_{gas}} \quad (1)$$

In the case of  $M_{solid} = f_{s/g} M_{planet}$  and  $M_{gas} = (1 - f_{s/g}) M_{planet}$  where  $M_{planet}$  is the total mass of the planet and  $f_{s/g}$  is assumed to be equal to the standard solid-to-gas ratio of circumstellar disks (0.01), Eq. (1) gives a C/O  $\sim 0.55$  corresponding to the solar value. During planet formation, this C/O ratio is modified by the accretion of solids and gas. In the case of the GI scenario, solids are accreted during the sudden collapse ( $M_{solid,ini}$ ) and later through planetesimal accretion ( $M_{accreted}$ ). When we assume that the total mass accreted during the collapse is  $M_{ini} \gg M_{accreted}$ , the total mass of solids in the planet is:

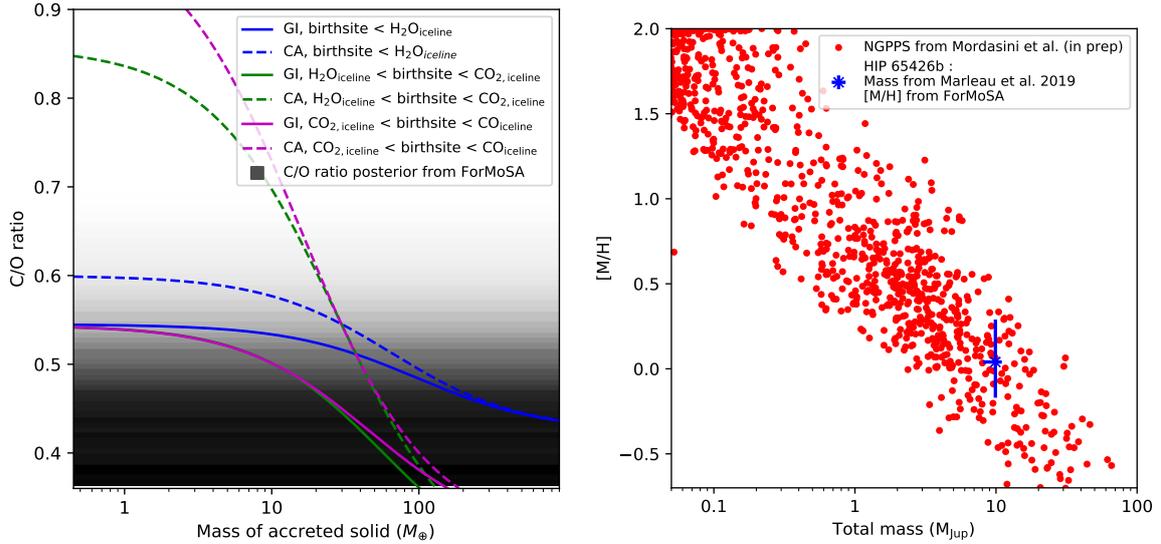
$$M_{solid} = f_{s/g} M_{planet} + M_{accreted} \quad (2)$$

When a formation follows CA,  $M_{solid}$  is collected through the slower CA process, while the gas is added mostly at the runaway accretion step ( $M_{solid} = M_{accreted}$ ). For both scenarii, the fraction of the gas mass in the planet is  $M_{gas} = (1 - f_{s/g}) M_{planet}$ . This mix is assumed to be representative of the atmospheric composition.

We show in Fig. 10 (left) the predictions of the C/O ratio for different values of  $M_{solid}$  and the two formation paradigms for a  $M_{planet} = 10 M_{Jup}$  (Marleau et al. 2019) planet and birth-sites within the water-ice line, between the water and CO<sub>2</sub> ice lines, and between CO<sub>2</sub> and CO ice lines. The predictions are compared with the estimate of HIP 65426 b C/O ratio. The two scenarii are consistent with our estimate of the C/O.

Kennedy & Kenyon (2008) estimated the water-ice line to be originally at  $\sim 7$  au around a  $\sim 2 M_{\odot}$  star before it moves inward to  $\sim 2.5$  au at 3 Myr. van der Marel et al. (2019) located the CO<sub>2</sub> ice line at  $\sim 10$  au in the midplane of the disks around the  $\sim 2 M_{\odot}$  young stars V1247 Ori and HD 163296. They also predicted CO ice lines at  $\sim 70$  au and  $\sim 140$  au for these two stars. Qi et al. (2015) reported observations of the CO snow line at 75 au around HD 163296 (we revised the published value using the Gaia-DR2 distance of the star), that is, at shorter separation than the projected physical separation of HIP 65426 b. Therefore, if it formed in situ, possibly beyond the CO snow line, the planet must have accreted a substantial amount of solids to lower its C/O ratio.

We caution that these conclusions remain based on a simple approach of planet formation processes and snow lines in disks. The  $f_{s/g}$  might be different than the interstellar value adopted here and is expected to decrease with age due to the growth from micron-sized particles to planetesimals and planets. The ionization process in the disk can drastically modify the chemical abundances of elements in the region between the H<sub>2</sub>O and CO<sub>2</sub> ice lines (Eistrup et al. 2018). Furthermore, our 1D approach neglects the variation in snow-line radii at different scale heights in the disk (e.g., Dullemond et al. 2020) and their



**Fig. 10.** Exploitation of our C/O and [M/H] to constrain the formation pathway. *Left*: comparison of the posterior of the C/O ratio given by ForMoSA (gradient; black: high likelihood) and different scenario of formation as a function of the accreted solid mass. The solid lines correspond to the GI scenario, and the dashed lines correspond to the CA scenario. The blue, green, and purple curves represent a formation within the water-ice line, between the water and CO<sub>2</sub> ice lines, and between CO<sub>2</sub> and CO ice lines, respectively. *Right*: comparison of the bulk enrichment of the NGPPS (red dots) and the estimated properties of HIP 65426 b (blue dot). We show here the NGPPS with a mass higher than 0.05  $M_{\text{Jup}}$  (approximately the mass of Neptune).

**Table 3.** Imaged planets around intermediate-mass stars with reported abundance measurements.

Planet	$a$ (au)	Mass ( $M_{\text{Jup}}$ )	[M/H] (dex)	C/O	Refs.
$\beta$ Pic b	$11^{+0.3}_{-0.4}$	$12.7 \pm 2.2$	$0.68^{+0.11}_{-0.08}$	$0.43^{+0.04}_{-0.03}$	1
HR 8799 e	$15.3^{+1.4}_{-1.1}$	$7.2^{+0.6}_{-0.7}$	$0.48^{+0.25}_{-0.29}$	$0.60^{+0.07}_{-0.08}$	2,3
HR 8799 c	$37.6^{+2.2}_{-1.7}$	$7.2^{+0.6}_{-0.7}$	...	$0.65^{+0.10}_{-0.05}$	2, 4
HR 8799 b	$69.5^{+9.3}_{-7.0}$	$5.8 \pm 0.5$	...	$0.61^{+0.09}_{-0.03}$	2, 5
HIP 65426 b	$110^{+90}_{-30}$	$9.9^{+1.1}_{-1.8}$	$0.05^{+0.24}_{-0.22}$	$\leq 0.55$	6, 7, 8

**References.** (1) Gravity Collaboration (2020), (2) Wang et al. (2018), (3) Mollière et al. (2020), (4) Konopacky et al. (2013), (5) Barman et al. (2015), (6) Cheetham et al. (2019), (7) Marleau et al. (2019), (8) this work.

complex evolution in time that is due to episodic accretion (e.g., Cieza et al. 2016).

The population synthesis approach offers to follow the subtle effects involved in planet formation. The new-generation planetary population synthesis (hereafter NGPPS) from the Bern group (Marleau et al. 2019; Schlecker et al. 2021) predicts that the bulk enrichment of planets is by CA. Marleau et al. (2019) account for type I and II migration and for the formation and dynamical interactions of multiple planet embryos per disk. The population has not yet been computed for a host star more massive than 1.5  $M_{\odot}$ . However, the predictions of bulk enrichment for the populations of planets around 1.0 and 1.5  $M_{\odot}$  show not significant change and we therefore assume here that it remains valid for a 2  $M_{\odot}$  star such as HIP 65426 A.

At an age of 10 Myr, the simulation contains  $\sim 24500$  bodies with masses up to 65.9  $M_{\text{Jup}}$  and semimajor axes out to  $\sim 800$  au. The solar metallicity of HIP 65426 b is well compatible with the bulk metallicity of the NGPPS planets in the same mass range (Fig. 10), but the simulated planets are found on much tighter orbits (semimajor axes from 0.57 to 11.16 au for planets in the same ranges of mass and metallicity as HIP 65426 b) than the

projected separation of HIP 65426 b (92 au). The conclusions remain unchanged at 20 Myr. This comparison of the atmospheric metallicity and bulk enrichment assumes that the metals acquired at formation become diluted in the planet envelope.

To conclude, the abundances of HIP 65426 b can be compared to those of imaged companions around intermediate-mass stars with similar measurements (Table 3)<sup>12</sup>. The C/O and mass of HIP 65426 b are reminiscent of those of  $\beta$  Pictoris b, which is located much closer to its host star at 11 au. This supports the above hypothesis that the planet is formed closer in and is then scattered at larger separation through planet-planet interactions (see Marleau et al. 2019). This hypothesis could also explain the different separations observed between HIP 65426 b and the NGPPS population at the same mass, age, and metallicity ranges. A future refinement of the orbital parameters with GRAVITY will help clarify the dynamical history of the planet and the interpretation of the planet composition derived here.

<sup>12</sup> We did not include 51 Eri b because of discrepancies between the published GPI and SPHERE data and the inferred atmospheric composition.

## 5. Summary and conclusions

We analyzed new  $K$ -band medium-resolution IFS data obtained with SINFONI at the VLT of the HIP 65426 b exoplanet, discovered by SPHERE, to further characterize its atmosphere. Our TExTRIS python analysis toolkit for IFS data was able to retrieve the star position outside the field of view and to optimize the data processing, which allowed us to extract the planet emission spectrum. We interpreted this spectrum following a Bayesian inference with self-consistent atmospheric forward models with the ForMoSA code (Petruš et al. 2020) and compared the inferred atmospheric properties of the planet to those obtained from the recent molecular mapping technique based on cross correlation between the IFS data elements and grid of models. We summarize the main results as follows:

1. We find a  $T_{\text{eff}} = 1560 \pm 100$  K,  $\log(g) \leq 4.40$  dex,  $[M/H] = 0.05^{+0.24}_{-0.22}$  dex, and  $C/O \leq 0.55$  from ForMoSA. The accuracy is limited by the systematic uncertainties induced by the use of different models and by the bimodal distribution of solutions found with the BT-SETTL15 models. This composition is consistent with a formation of HIP 65426 b closer to the host star by CA. We cannot exclude a formation by GI at large separation, but this would imply the accretion of a substantial amount of solids.
2. The molecular mapping as performed with TExTRIS yields results that are consistent with those from ForMoSA, which validates the ability of the molecular mapping to characterize atmospheres. Nevertheless, this alternative method is limited by the loss of the spectral continuum information in the data that can shift the estimates of  $T_{\text{eff}}$ , and it degrades the constraints on the other parameters ( $\log(g)$ ,  $[M/H]$ , and  $C/O$ ).
3. We estimated a radial velocity of  $26 \pm 15$  km s<sup>-1</sup> for the planet, which is compatible with the revised radial velocity of the host star. This highlights the usefulness of medium-resolution (to high-resolution) spectrographs to test companionship.

GRAVITY observations could soon drastically improve the knowledge of the orbital parameter of the planet and potentially draw a consistent picture of its formation. Observations with ERIS and CRIRES+ would also allow us to improve the knowledge of the radial velocity and consolidate the constraints on the atmospheric parameters derived from our  $K$ -band data.

A new generation of integral field spectrographs that succeed SINFONI (VLT-ERIS, GTC-FRIDA, JWST-NIRSpec and MIRI, ELT-HARMONI and METIS) will soon observe at high-Strehl ratios, higher spectral resolution (up to  $R_{\lambda} \sim 100\,000$  for METIS), and high contrast (GTC-FRIDA, HARMONI high-contrast arm; METIS). All these instruments belong to the same class of slicer-based IFS and present similar challenges in terms of data analysis. The techniques developed and explored as part of this study could be adapted to process these observations.

*Acknowledgements.* We dedicate this work to the memory of Dr. France Allard, a great source of inspiration for our community. We hope that this paper will honor her career, her research and her huge contribution in the domain of the physics of atmospheres of stars, brown dwarfs and exoplanets. S.Pe, M.Bo, G.Ch, B.Ch., A.-M.La, P.De and A.Bo, acknowledge support of the Programme National de Planétologie through project grants “ISEP” and “EXO-SPEC” and the Agence Nationale de la Recherche through grant ANR-14-CE33-0018. This research has benefited from the support of the IDEX cross-disciplinary project Origin of Life, and the visiting program of the French Chilean Lab for Astronomy (FCLA, UMI-3886). A.Vi and M.Ho acknowledge funding from the European Research Council (ERC) under the European Union’s Horizon 2020 research and innovation programme (grant agreement No. 757561). A.Wy acknowledges the financial support of the SNSF by grant number P400P2\_186765. G.-D. Ma acknowledges the support of the DFG priority program SPP 1992 “Exploring the

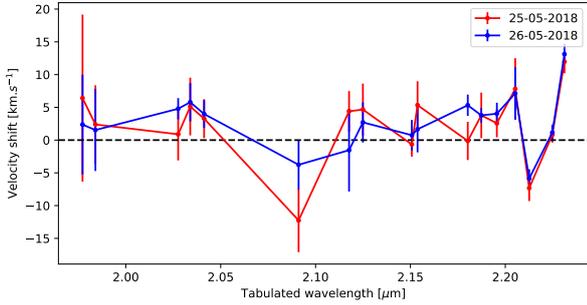
Diversity of Extrasolar Planets” (KU 2849/7-1) and from the Swiss National Science Foundation under grant BSSGI0\_155816 “PlanetsInTime”. Part of this work has been carried out within the framework of the National Centre of Competence in Research PlanetS supported by the Swiss National Science Foundation. F. Al acknowledges financial support from the “Programme National de Physique Stellaire” (PNPS) and the “Programme National de Planétologie” of CNRS/INSU, France. The computations of brown dwarf and exoplanet models were performed at the Pôle Scientifique de Modélisation Numérique (PSMN) at the École Normale Supérieure (ENS) in Lyon. The results presented in this research paper were obtained using the matplotlib and astropy libraries (Hunter 2007; Astropy Collaboration 2018).

## References

- Abuter, R., Schreiber, J., Eisenhauer, F., et al. 2006, *New Astron. Rev.*, **50**, 398
- Ackerman, A. S., & Marley, M. S. 2001, *ApJ*, **556**, 872
- Allard, F., Hauschildt, P. H., Alexander, D. R., Tamanai, A., & Schweitzer, A. 2001, *ApJ*, **556**, 357
- Allard, F., Homeier, D., & Freytag, B. 2012, *Philos. Trans. Roy. Soc. London Ser. A*, **370**, 2765
- Astropy Collaboration (Price-Whelan, A. M., et al.) 2018, *AJ*, **156**, 123
- Bailey, V., Meshkat, T., Reiter, M., et al. 2014, *ApJ*, **780**, L4
- Baraffe, I., Chabrier, G., Barman, T. S., Allard, F., & Hauschildt, P. H. 2003, *A&A*, **402**, 701
- Barman, T. S., Macintosh, B., Konopacky, Q. M., & Marois, C. 2011, *ApJ*, **733**, 65
- Barman, T. S., Konopacky, Q. M., Macintosh, B., & Marois, C. 2015, *ApJ*, **804**, 61
- Bayo, A., Rodrigo, C., Barrado Y Navascués, D., et al. 2008, *A&A*, **492**, 277
- Becklin, E. E., & Zuckerman, B. 1988, *Nature*, **336**, 656
- Beuzit, J. L., Vigan, A., Mouillet, D., et al. 2019, *A&A*, **631**, A155
- Boley, A. C., Helled, R., & Payne, M. J. 2011, *ApJ*, **735**, 30
- Bonnefoy, M., Boccaletti, A., Lagrange, A. M., et al. 2013, *A&A*, **555**, A107
- Bonnefoy, M., Chauvin, G., Lagrange, A. M., et al. 2014, *A&A*, **562**, A127
- Bonnefoy, M., Zurlo, A., Baudino, J. L., et al. 2016, *A&A*, **587**, A58
- Bonnet, H., Abuter, R., Baker, A., et al. 2004, *Messenger*, **117**, 17
- Bowler, B. P., & Hillenbrand, L. A. 2015, *ApJ*, **811**, L30
- Bowler, B. P., Liu, M. C., Dupuy, T. J., & Cushing, M. C. 2010, *ApJ*, **723**, 850
- Bowler, B. P., Liu, M. C., Kraus, A. L., Mann, A. W., & Ireland, M. J. 2011, *ApJ*, **743**, 148
- Bowler, B. P., Kraus, A. L., Bryan, M. L., et al. 2017, *AJ*, **154**, 165
- Brieche, K., & Hanebeck, U. D. 2001, in *Optical Pattern Recognition XII*, eds. D. P. Casasent, & T.-H. Chao, 4387, *International Society for Optics and Photonics (SPIE)*, **95**, 102
- Broggi, M., & Line, M. R. 2019, *AJ*, **157**, 114
- Bubar, E. J., Schaeuble, M., King, J. R., Mamajek, E. E., & Stauffer, J. R. 2011, *AJ*, **142**, 180
- Carlotti, A., Hénault, F., Dohlen, K., et al. 2018, in *Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference Series*, 10702, *Proc. SPIE*, **107029N**
- Chabrier, G., Baraffe, I., Allard, F., & Hauschildt, P. 2000, *ApJ*, **542**, 464
- Charnay, B., Bézard, B., Baudino, J. L., et al. 2018, *ApJ*, **854**, 172
- Chauvin, G., Lagrange, A. M., Zuckerman, B., et al. 2005, *A&A*, **438**, L29
- Chauvin, G., Desidera, S., Lagrange, A. M., et al. 2017, *A&A*, **605**, L9
- Chauvin, G., Gratton, R., Bonnefoy, M., et al. 2018, *A&A*, **617**, A76
- Cheetham, A. C., Samland, M., Brems, S. S., et al. 2019, *A&A*, **622**, A80
- Chilcote, J., Pueyo, L., De Rosa, R. J., et al. 2017, *AJ*, **153**, 182
- Christiaens, V., Cantalloube, F., Casassus, S., et al. 2019, *ApJ*, **877**, L33
- Cieza, L. A., Casassus, S., Tobin, J., et al. 2016, *Nature*, **535**, 258
- Cutri, R. M., Skrutskie, M. F., van Dyk, S., et al. 2003, *VizieR Online Data Catalog*, **II/246**
- Cutri, R. M., et al. 2012, *VizieR Online Data Catalog*, **II/311**
- Daemgen, S., Todorov, K., Quanz, S. P., et al. 2017, *A&A*, **608**, A71
- Davies, R. I. 2007, *MNRAS*, **375**, 1099
- De Rosa, R. J., Rameau, J., Patience, J., et al. 2016, *ApJ*, **824**, 121
- Delorme, P., Schmidt, T., Bonnefoy, M., et al. 2017, *A&A*, **608**, A79
- DENIS Consortium 2005, *VizieR Online Data Catalog*: **II/263**
- de Zeeuw, P. T., Hoogerwerf, R., de Bruijne, J. H. J., Brown, A. G. A., & Blaauw, A. 1999, *AJ*, **117**, 354
- Dullemond, C. P., Isella, A., Andrews, S. M., Skobleva, I., & Dzyurkevich, N. 2020, *A&A*, **633**, A137
- Eisenhauer, F., Abuter, R., Bickert, K., et al. 2003, *Proc. SPIE*, **4841**, 1548
- Eistrup, C., Walsh, C., & van Dishoeck, E. F. 2018, *A&A*, **613**, A14
- Freudling, W., Romaniello, M., Bramich, D. M., et al. 2013, *A&A*, **559**, A96
- Gagné, J., Mamajek, E. E., Malo, L., et al. 2018, *ApJ*, **856**, 23
- Gaia Collaboration (Brown, A. G. A., et al.) 2016, *A&A*, **595**, A2

- Gonzalez, C. A. G., Wertz, O., Absil, O., et al. 2017, *AJ*, 154, 7
- Gravity Collaboration (Nowak, M., et al.) 2020, *A&A*, 633, A110
- Greenbaum, A. Z., Pueyo, L., Ruffio, J.-B., et al. 2018, *AJ*, 155, 226
- Groff, T. D., Kasdin, N. J., Limbach, M. A., et al. 2015, *Proc. SPIE.*, 9605, 96051C
- Hauschildt, P. H., Baron, E., & Allard, F. 1997, *ApJ*, 483, 390
- Helling, C., Ackerman, A., Allard, F., et al. 2008, *MNRAS*, 391, 1854
- Helling, C., Woitke, P., Rimmer, P. B., et al. 2014, *Life*, 4, 142
- Hoeijmakers, H. J., Schwarz, H., Snellen, I. A. G., et al. 2018, *A&A*, 617, A144
- Høg, E., Fabricius, C., Makarov, V. V., et al. 2000, *A&A*, 355, L27
- Hubeny, I., & Burrows, A. 2007, *ApJ*, 669, 1248
- Hunter, J. D. 2007, *Comput. Sci. Eng.*, 9, 90
- Janson, M., Brandner, W., & Henning, T. 2008, *A&A*, 478, 597
- Janson, M., Bergfors, C., Goto, M., Brandner, W., & Lafrenière, D. 2010, *ApJ*, 710, L35
- Jones, A., Noll, S., Kausch, W., Szyszka, C., & Kimeswenger, S. 2013, *A&A*, 560, A91
- Jovanovic, N., Martinache, F., Guyon, O., et al. 2015, *PASP*, 127, 890
- Kane, L., McKeith, C. D., & Duffon, P. L. 1980, *A&A*, 84, 115
- Kanodia, S., & Wright, J. 2018a, *Res. Notes Am. Astron. Soc.*, 2, 4
- Kanodia, S., & Wright, J. T. 2018b, *Barycorrpy: Barycentric Velocity Calculation and Leap Second Management*
- Kennedy, G. M., & Kenyon, S. J. 2008, *ApJ*, 673, 502
- Konopacky, Q. M., Barman, T. S., Macintosh, B. A., & Marois, C. 2013, *Science*, 339, 1398
- Lafrenière, D., Jayawardhana, R., & van Kerkwijk, M. H. 2008, *ApJ*, 689, L153
- Lavie, B., Mendonça, J. M., Mordasini, C., et al. 2017, *AJ*, 154, 91
- Lavigne, J.-F., Doyon, R., Lafrenière, D., Marois, C., & Barman, T. 2009, *ApJ*, 704, 1098
- Lodders, K. 2010, *Astrophys. Space Sci. Proc.*, 16, 379
- Lodieu, N., Zapatero Osorio, M. R., Béjar, V. J. S., & Peña Ramírez, K. 2018, *MNRAS*, 473, 2020
- Macintosh, B., Graham, J., Palmer, D., et al. 2006, *Proc. SPIE*, 6272, 62720L
- Madhusudhan, N., Burrows, A., & Currie, T. 2011, *ApJ*, 737, 34
- Manjavacas, E., Bonnefoy, M., Schlieder, J. E., et al. 2014, *A&A*, 564, A55
- Marleau, G.-D., Coleman, G. A. L., Leleu, A., & Mordasini, C. 2019, *A&A*, 624, A20
- Marley, M. S., Saumon, D., Cushing, M., et al. 2012, *ApJ*, 754, 135
- Marois, C., Lafrenière, D., Doyon, R., Macintosh, B., & Nadeau, D. 2006, *ApJ*, 641, 556
- Marois, C., Macintosh, B., Barman, T., et al. 2008, *Science*, 322, 1348
- McElwain, M. W., Metchev, S. A., Larkin, J. E., et al. 2007, *ApJ*, 656, 505
- Mesa, D., Bonnefoy, M., Gratton, R., et al. 2019, *A&A*, 624, A4
- Mesa, D., D’Orazi, V., Vigan, A., et al. 2020, *MNRAS*, 495, 4279
- Meshkat, T., Bonnefoy, M., Mamajek, E. E., et al. 2015, *MNRAS*, 453, 2378
- Mohanty, S., Jayawardhana, R., Huélamo, N., & Mamajek, E. 2007, *ApJ*, 657, 1064
- Mollière, P., Wardenier, J. P., van Boekel, R., et al. 2019, *A&A*, 627, A67
- Mollière, P., Stolker, T., Lacour, S., et al. 2020, *A&A*, 640, A131
- Mordasini, C. 2013, *A&A*, 558, A113
- Mordasini, C., van Boekel, R., Mollière, P., Henning, T., & Benneke, B. 2016, *ApJ*, 832, 41
- Morley, C. V., Fortney, J. J., Marley, M. S., et al. 2012, *ApJ*, 756, 172
- Moses, J. I., Marley, M. S., Zahnle, K., et al. 2016, *ApJ*, 829, 66
- Nakajima, T., Oppenheimer, B. R., Kulkarni, S. R., et al. 1995, *Nature*, 378, 463
- N’Diaye, M., Cuevas, S., Sánchez, B., et al. 2018, *Proc. SPIE*, 10703, 107033E
- Nissen, P. E. 2013, *A&A*, 552, A73
- Noll, S., Kausch, W., Barden, M., et al. 2012, *A&A*, 543, A92
- Nowak, M., Lacour, S., Mollière, P., Wang, J., & Charnay, B. 2019, in *AAS/Division for Extreme Solar Systems Abstracts*, 51, *AAS/Division for Extreme Solar Systems Abstracts*, 404.07
- Öberg, K. I., & Bergin, E. A. 2016, *ApJ*, 831, L19
- Öberg, K. I., Murray-Clay, R., & Bergin, E. A. 2011, *ApJ*, 743, L16
- Patience, J., King, R. R., de Rosa, R. J., & Marois, C. 2010, *A&A*, 517, A76
- Petit dit de la Roche, D. J. M., Hoeijmakers, H. J., & Snellen, I. A. G. 2018, *A&A*, 616, A146
- Petrus, S., Bonnefoy, M., Chauvin, G., et al. 2020, *A&A*, 633, A124
- Qi, C., Öberg, K. I., Andrews, S. M., et al. 2015, *ApJ*, 813, 128
- Rajan, A., Rameau, J., De Rosa, R. J., et al. 2017, *AJ*, 154, 10
- Rajpurohit, A. S., Allard, F., Rajpurohit, S., et al. 2018, *A&A*, 620, A180
- Rizzuto, A. C., Ireland, M. J., & Robertson, J. G. 2011, *MNRAS*, 416, 3108
- Rousselot, P., Lidman, C., Cuby, J. G., Moreels, G., & Monnet, G. 2000, *A&A*, 354, 1134
- Ruffio, J.-B., Macintosh, B., Konopacky, Q. M., et al. 2019, *AJ*, 158, 200
- Samland, M., Mollière, P., Bonnefoy, M., et al. 2017, *A&A*, 603, A57
- Schlecker, M., Mordasini, C., Emsenhuber, A., et al. 2021, *A&A*, in press, <https://doi.org/10.1051/0004-6361/202038554>
- Schmidt, T. O. B., Neuhäuser, R., Seifahrt, A., et al. 2008, *A&A*, 491, 311
- Schmidt, T. O. B., Mugrauer, M., Neuhäuser, R., et al. 2014, *A&A*, 566, A85
- Seifahrt, A., Neuhäuser, R., & Hauschildt, P. H. 2007, *A&A*, 463, 309
- Skemer, A. J., Marley, M. S., Hinz, P. M., et al. 2014, *ApJ*, 792, 17
- Skilling, J. 2006, *Bayesian Anal.*, 1, 833
- Snellen, I. A. G., Brandl, B. R., de Kok, R. J., et al. 2014, *Nature*, 509, 63
- Sparks, W. B., & Ford, H. C. 2002, *ApJ*, 578, 543
- Stone, J. M., Eisner, J., Skemer, A., et al. 2016, *ApJ*, 829, 39
- Thatte, N., Abuter, R., Tecza, M., et al. 2007, *MNRAS*, 378, 1229
- Trotta, R. 2008, *Contemp. Phys.*, 49, 71
- Uyama, T., Currie, T., Hori, Y., et al. 2020, *AJ*, 159, 40
- Valletta, C., & Helled, R. 2018, ArXiv e-prints [arXiv:1811.10904]
- van der Marel, N., Dong, R., di Francesco, J., Williams, J. P., & Tobin, J. 2019, *ApJ*, 872, 112
- Viana Almeida, P., Santos, N. C., Melo, C., et al. 2009, *A&A*, 501, 965
- Wang, J. J., Graham, J. R., Dawson, R., et al. 2018, *AJ*, 156, 192

## Appendix A: Robustness of the wavelength solution at the location of the companion



**Fig. A.1.** Velocity shifts between the measured and tabulated positions (vacuum) of OH lines at the position of the companion in the stacked datacubes.

We confirmed the accuracy of the correction we applied on the wavelength solution of the instrument using OH<sup>-</sup> emission lines. Seventeen lines from 1.977 to 2.23 μm are well detected in the stacked cubes (e.g., Fig. 1) on both nights. We were therefore able to determine the central wavelength at the location of the companion with an average accuracy of 3.5 km s<sup>-1</sup> using a Gaussian fit, and we compared it to reference values from Rousselot et al. (2000). The residual shifts are reported in Fig. A.1 and oscillate around means of 2.3 and 2.8 km s<sup>-1</sup> for the May 25 and 26 data, respectively. These values and the measurement accuracy indicate no significant residual wavelength shift and locally validate our recalibration based on telluric absorption.

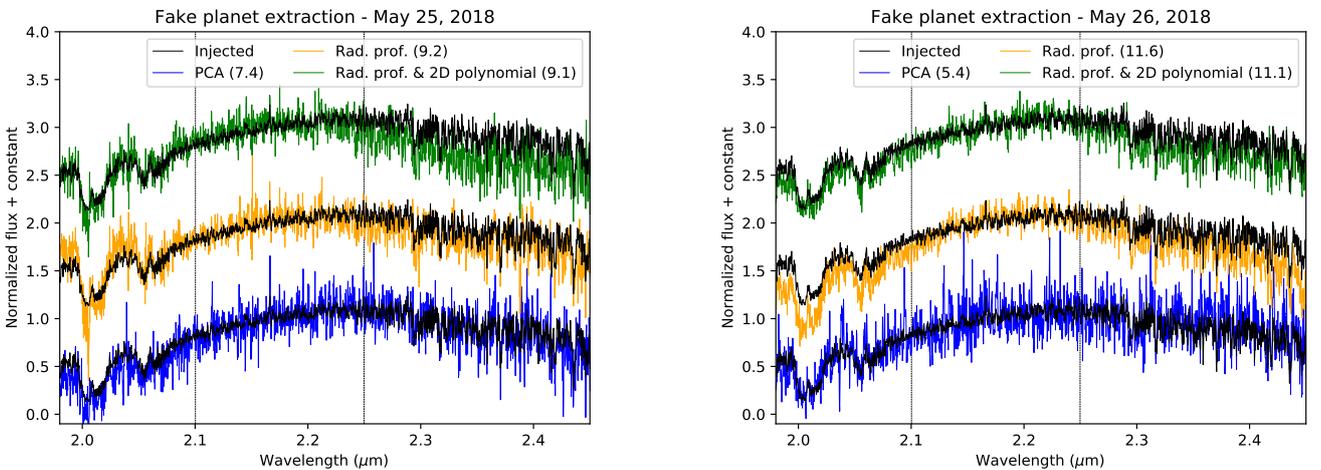
## Appendix B: Validating the extraction procedure

We tested the different extraction methods described in Sect. 2 by injecting a simulated planet with a *K*-band contrast of 10 magnitudes (corresponding to the values reported in Cheetham et al. 2019) and a position angle of 165.2°. The simulated planet spectrum was extracted within a 75 mas wide circular aperture and compared to the injected signal. The results are shown for both nights in Fig. B.1.

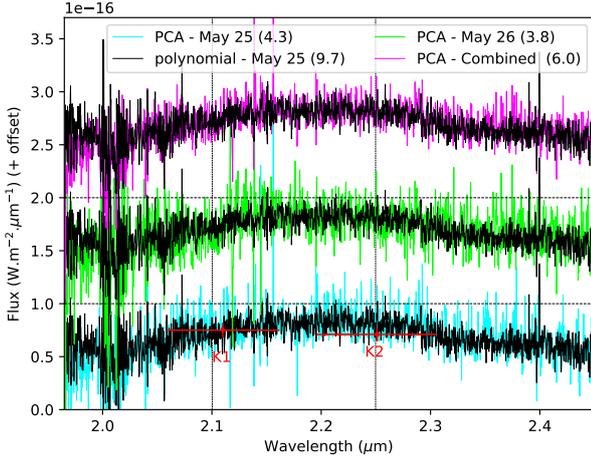
The test confirms the ability of the PCA to conserve the continuum shape. Conversely, the removal of the circular profile in the nADI cubes leaves large-scale flux halo residuals that introduce a bias of the continuum at the location of the simulated planet. The 2D polynomials applied on these cubes remove these residuals efficiently at shorter wavelengths, but bias the pseudo-continuum longward of 2.3 μm. We estimated the S/N from the difference of the normalized extracted and injected spectra. The S/N is systematically lower when the PCA is used. We therefore conclude that the PCA conserves the planet continuum information, but is not optimized for accessing the molecular lines.

We show in Fig. B.2 the flux-calibrated spectrum of HIP 65426b. The PCA-extracted spectra obtained from the May 25 and 26 datacubes and the spectrum extracted from the May 25 nADI cubes show identical continua. This confirms that the latter method works better at the planet position. The PCA spectrum is noisier than the nADI spectrum, in agreement with the conclusions based on simulated planets. The combination of the two PCA-extracted spectra of HIP 65426b does not reach the S/N obtained from the nADI/polynomial fit from the May 25 data. We therefore adopted the spectrum extracted from the nADI and polynomial fit. The final flux-calibrated spectrum of HIP 65426b appears to be consistent with the SPHERE *K*-band photometry.

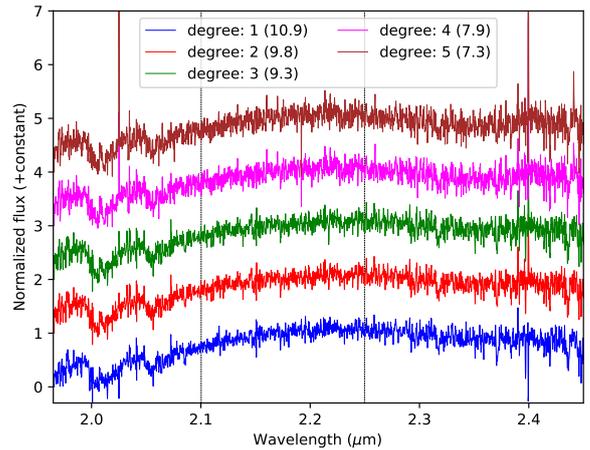
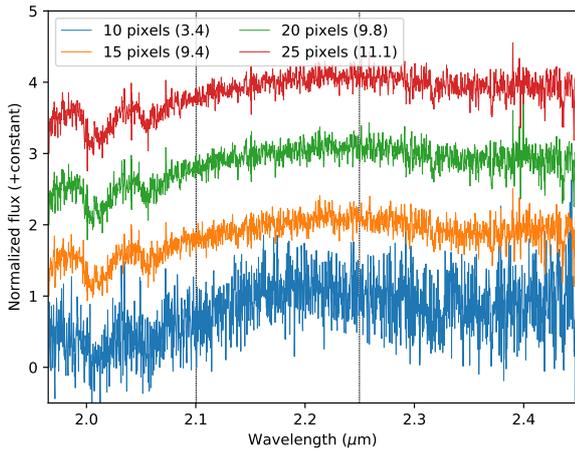
To conclude, we tested different square box sizes (widths of 10, 15, 20, and 25 pixels) as well as different degrees (1 to 5) of polynomials when we applied the background correction to the nADI cubes. The results are shown in Fig. B.3 for the May 25, 2018 observations. Boxes smaller than 15 pixels do not contain enough spaxels to evaluate the background and lead to noisier spectra. Boxes larger than 20 pixels encompass artifacts at the edges of the field of view of SINFONI and were discarded. Square boxes with a width of 15 and 20 pixels yield similar results. We chose the latter to be able to estimate the level of residuals within an annulus of 53mas width (e.g., a resolution element) centered on the planet. Polynomials of degree 2 to 5 produce spectra with identical continua. The S/N decreases when higher degrees are considered. Polynomials of degree 1 seem to optimize the S/N. However, it leaves a higher level of residuals around the planet and does not subtract the continuum properly at shorter wavelengths. We therefore conclude that a box size of 20 pixels and a polynomial of degree 2 is the best trade-off on these data.



**Fig. B.1.** Comparison of the injected (black lines) and extracted simulated planet spectra (color lines) using the methods described in Sect. 2: PCA (blue), the removal of a circular profile at each wavelength (orange), and the removal of a 2D polynomial at each wavelength at the position of the simulated planet (green). The S/N of the recovered spectra is computed from 2.1 to 2.25 μm (dashed vertical lines) and given in parentheses.



**Fig. B.2.** Flux-calibrated spectra of HIP 65426 b obtained with the PCA on both nights and compared to the spectrum extracted from the nADI reduction of the May 25 2018, data followed by a subtraction of a 2D polynomials. The S/N estimated from 2.1 to 2.25  $\mu\text{m}$  is given in parentheses. The red datapoints correspond to the SPHERE K1 and K2 photometry from Cheetham et al. (2019).

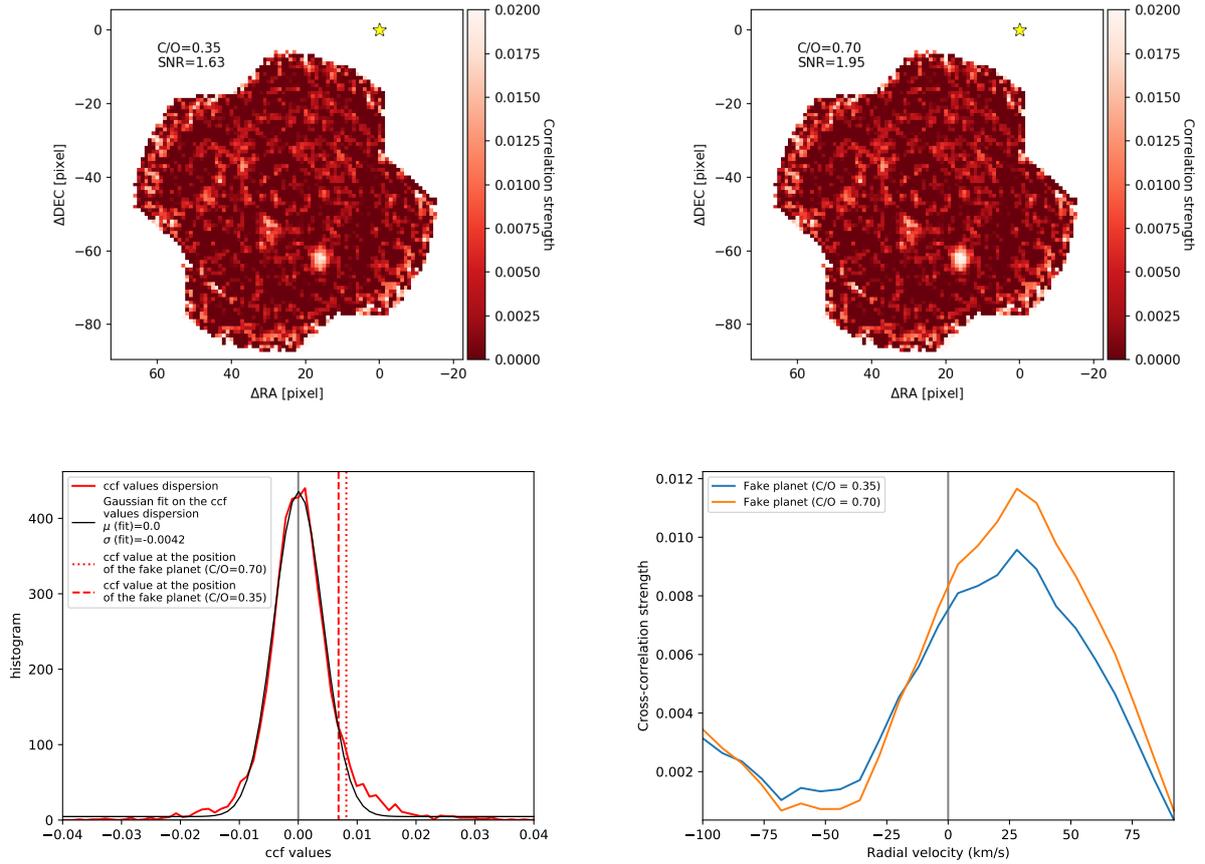


**Fig. B.3.** Extracted spectra (with telluric features) of HIP 65426 b for different box sizes (*left*) and degree (*right*) of the polynomial fit applied to the nADI data. The S/N of the spectra estimated from 2.1 to 2.25  $\mu\text{m}$  is given in parentheses.

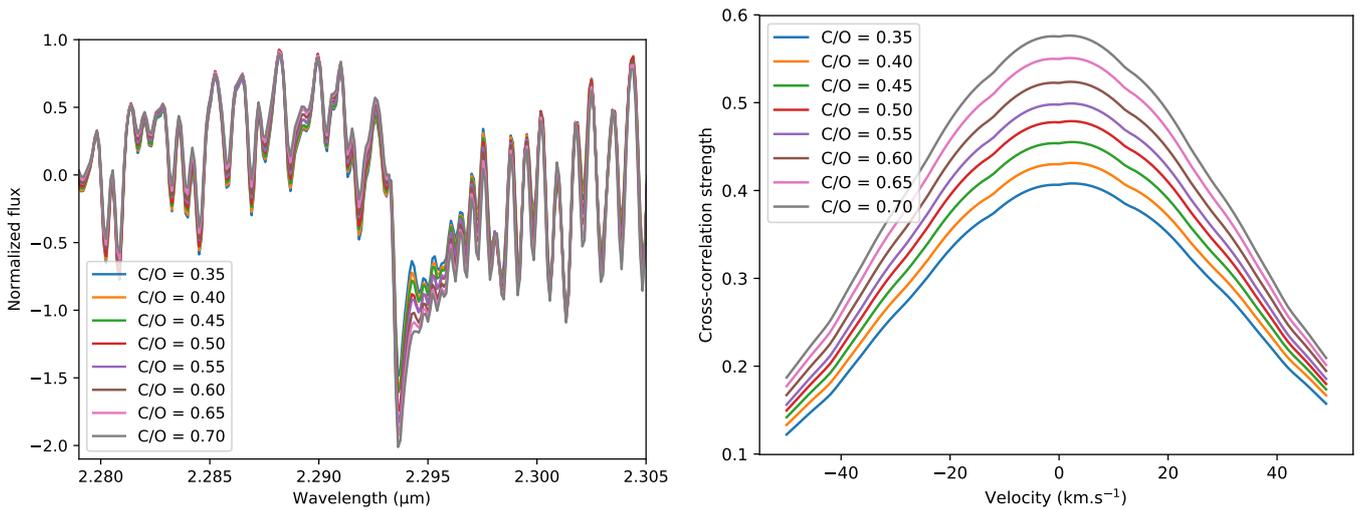
### Appendix C: Detection of planets with different C/O ratio with the CO molecular template

We investigate below the faint detection of HIP 65426b using the CO molecular template. We injected simulated planets into our datacube and compared the detection S/N in the CCF signal maps generated for each cases. The simulated planets were injected at  $\rho = 812$  mas, PA =  $165.2^\circ$ , a broadband contrast  $\Delta_K = 10$  mag, and a radial velocity of  $30 \text{ km s}^{-1}$ . We used a noiseless synthetic spectrum generated with the Exo-REM model corresponding to a  $T_{\text{eff}} = 1650 \text{ K}$ , a  $\log(g) = 4.0$  dex, an  $[M/H] = 0.0$ , and a C/O = 0.35 and 0.70 for each simulated planet.

Figure C.1 shows the CCF for each simulated planet obtained following the method described in Sect. 3.3.1. The signal is detected at a higher S/N than for the real planet which might be due to the lack of noise in the injected spectral signature. The comparison shows that planets with low C/O such as HIP 65426b are detected at a lower S/N than planets with supersolar C/O, however. The Exo-REM models predict a less pronounced  $\nu = 2-0$  overtone, which is the strongest spectroscopic signature of  $^{12}\text{CO}$  in the spectrum (see also Fig. 4). This translates into a reduced cross-correlation signal (Fig. C.2). This may therefore in part explain the marginal detection of HIP 65426b with the CO molecular template.



**Fig. C.1.** Investigations of the detection performances using the molecular mapping. *Upper left and right:* CO molecular maps obtained following the injection of a simulated planet at  $\rho = 812$  mas and PA =  $165.2^\circ$  in the original datacubes using Exo-REM models at  $T_{\text{eff}} = 1650$  K,  $\log(g) = 4.0$  dex,  $[M/H] = 0.0$ , and C/O = 0.35 and 0.70 at a velocity of  $30 \text{ km s}^{-1}$ . *Bottom left:* histograms of CCF values at a velocity of  $30 \text{ km s}^{-1}$ . *Bottom right:* CCF obtained at the position of the simulated planet.



**Fig. C.2.** Investigations of the characterization performances using the molecular mapping. *Left:* zoom into the  $\nu = 2-0$  CO overtone at  $2.29 \mu\text{m}$  of normalized continuum-subtracted Exo-REM models at different C/O ratios ( $T_{\text{eff}} = 1650$  K,  $\log(g) = 4.0$  dex,  $[M/H] = 0.0$  and C/O = 0.35–0.70). *Right:* CCF between the Exo-REM models and the CO template shown in Fig. 4.

## 3.4 Discussion & perspectives

### 3.4.1 Le potentiel du *molecular mapping*

Le *molecular mapping* est une alternative aux techniques d'imagerie à haute résolution spatiale et à haut contraste classiques comme l'ADI, le SDI ou le PDI qui sont limités à la détection des compagnons à large séparation. Avec le développement de TExTRIS, nous avons re-détecté HIP 65426 b à partir de données de l'instrument SINFONI (instrument d'ancienne génération qui n'a pas été conçu pour le haut contraste) et contraint ses paramètres atmosphériques (cohérents avec une caractérisation par *forward modelling*).

Néanmoins, cette méthode a ses limites. La résolution spectrale minimale et les gammes spectrales optimales (présence de signatures atomiques et moléculaires) pour l'application de cette méthode restent à définir. L'étape de soustraction du halo induit la perte de l'information à basse résolution, et bien que la corrélation croisée permette effectivement de supprimer la majorité des tavelures, des résidus subsistent dont l'impact est encore mal-estimé. De plus, le signal de corrélation dépend du modèle utilisé, il est donc nécessaire d'avoir une estimation des paramètres de la source a priori pour maximiser sa détection. Se pose alors la question d'une limite de détection définie par la résolution spectrale des données (besoin de résolution minimale), par la qualité des modèles utilisés pour la corrélation croisée, par les résidus de flux stellaires qui n'ont pas été filtrés ou par les propriétés spectrales des objets que l'on souhaite détecter.

C'est pourquoi cette méthode doit être développée, pour définir et repousser ces limites. La corrélation des données avec des grilles complètes de modèles permet déjà de s'affranchir du besoin de connaissances a priori des propriétés de la source, mais le couplage entre TExTRIS et ForMoSA reste à explorer pour augmenter le potentiel de détection du *molecular mapping*. La comparaison de cartes de corrélation issues de différentes grilles de modèles permet d'identifier les biais et erreurs systématiques de ces modèles qui peuvent influencer sur la corrélation, ainsi le développement de nouveaux modèles optimisés pour le *molecular mapping* (c'est à dire sans pseudo-continuum spectral) pourrait être un outil précieux pour booster ses performances. Le manque de spectrographe à intégrale de champ à haute résolution ( $R > 6000$ ) limite actuellement le potentiel du *molecular mapping*, mais il sera bientôt comblé.

### 3.4.2 Conséquences sur notre compréhension des mécanismes de formation

Deux scénarios de formation sont généralement invoqués pour expliquer la formation des planètes géantes. La modélisation de ces scénarios pointe vers une dichotomie des planètes formées. L'accrétion de cœur favorise la formation des planètes proches de leur étoile avec une surmétalllicité de leur atmosphère, tandis que la formation par instabilité du disque semble être plus probable à large séparation. Des mécanismes de migrations planétaires peuvent ensuite éloigner la planète de son lieu de formation. Avec cette étude, nous avons montré qu'il était possible avec le *molecular mapping* d'accéder à des observables clés, comme la métallicité et le rapport C/O, en analysant des spectres à moyenne résolution, et ainsi apporter des pistes pour expliquer l'histoire des planètes jeunes (formation et évolution). Dans le cas de HIP 65426 b, les valeurs de métallicité et de rapport C/O que nous avons déterminées pointent vers une formation par accrétion de cœur proche de l'étoile suivie par une migration à une séparation plus grande. Mais les barres d'erreurs sur ces paramètres ne permettent pas d'exclure complètement l'hypothèse d'une formation par instabilité gravitationnelle in situ. Cette conclusion traduit le fait que la quantité d'informations spectrales à notre disposition reste limitée. Il est actuellement compliqué d'obtenir des spectres à moyenne et haute résolution de compagnons de faible masse à courte séparation à cause de leur contraste élevé avec l'étoile. La caractérisation spectroscopique d'objets isolés (beaucoup plus simples à mettre en oeuvre), à des résolutions similaires, avec les mêmes outils et modèles est critique pour contextualiser les résultats obtenus sur HIP 65426 b (voir le Chapitre 4). De plus, la couverture spectrale des instruments ne permet pas d'atteindre des longueurs d'ondes supérieures à  $2.5 \mu\text{m}$ .

### 3.4.3 Perspectives du *molecular mapping*

La nouvelle génération de spectrographes à intégrale de champ en développement va permettre de repousser les limites du *molecular mapping* mais plus généralement de l'exploration des processus de formation planétaire.

Des mises à jour d'instruments, prévues dans les prochaines années, comme SPHERE+ ( $\lambda \sim 0.95\text{-}1.35 \mu\text{m}$ ,  $R \sim 5000$ ), le successeur de SPHERE et ERIS ( $\lambda \sim 1.1\text{-}2.45 \mu\text{m}$ ,  $R \sim 8000$ ), celui de SINFONI, vont augmenter la résolution dans l'infrarouge tout en gardant la haute résolution spatiale et le haut-contraste permis par leur prédécesseur, et l'arrivée des spectrographes à intégrale de champ fibrés, comme le projet HiRISE, vont apporter la très haute résolution spectrale ( $R \sim 100\,000$ ).

Le James Webb Space Telescope<sup>5</sup> (JWST), prévu pour 2021-2022, comptera MIRI parmi sa batterie d'instruments qui observera dans l'infrarouge moyen ( $5.0\text{-}28.3 \mu\text{m}$ ) à moyenne résolution ( $R \sim 100\text{-}3000$ ). Il permettra d'appliquer le *molecular mapping* sur une gamme de longueurs d'ondes jusque là inaccessible, enrichissant ainsi la diversité de l'information spectrale disponible avec, entre autres, l'accès aux bandes de l'ammoniaque ( $\text{NH}_3$  à  $10.65 \mu\text{m}$ ), mais aussi du méthane ( $\text{CH}_4$ ), du dioxyde de carbone ( $\text{CO}_2$ ) ou de l'hydruure de phosphore ( $\text{PH}_3$ ). Il embarquera également NIRSpec qui fournira des cubes de données dans l'infrarouge ( $0.6\text{-}5 \mu\text{m}$ ) à moyenne résolution ( $R \sim 100\text{-}2700$ ). Des observations simulées du système TYC-8998 que l'on pourra obtenir avec l'instrument NIRSpec IFU sont présentées dans la Figure 3.4. Cette simulation a été générée grâce à des cubes de données simulées contenant les deux planètes et à un modèle de diffraction, pour synthétiser le flux de l'étoile (située à  $0.5''$  en haut à gauche) entrant dans le champ. Les deux planètes sont re-détectées quelque soit la longueur d'onde avant même de soustraire le halo de l'étoile. NIRSpec permettra également d'avoir accès à la bande de méthane à  $3.3 \mu\text{m}$  (traceur de formation) et d'estimer précisément le rapport C/O grâce aux absorptions de CO ( $\sim 2.3\text{-}2.4 \mu\text{m}$ ), notamment pour fournir des pistes concernant la formation des systèmes planétaires observés.

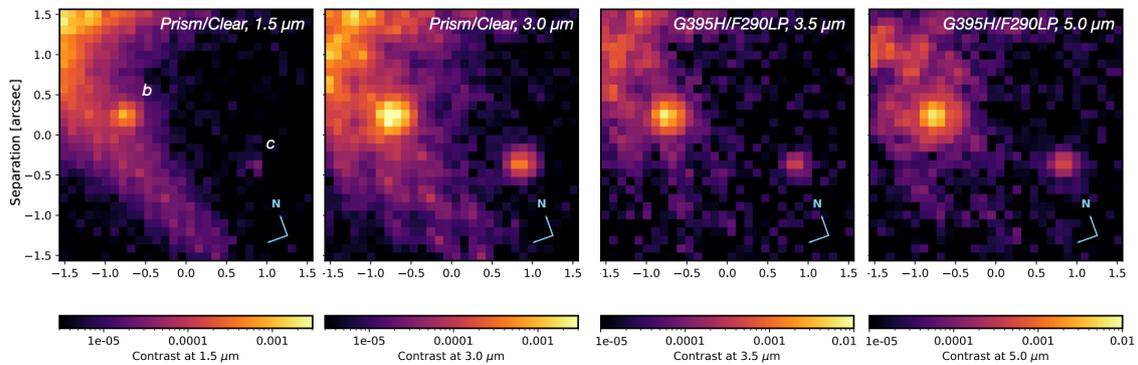


FIGURE 3.4 – Données simulées du système TYC-8998 observées avec l'instrument NIRSpec IFU. Le champ de vue est montré pour différentes longueurs d'ondes. Les deux compagnons sont clairement visibles. Image tirée de la demande de temps acceptée de Kielan Wilcomb (ID :02044).

Puis en 2027, l'Extremely Large Telescope<sup>6</sup> (ELT), développé par l'Europe et actuellement en construction au Cerro Armazones dans le désert d'Atacama au Chili apportera la haute résolution spectrale au *molecular mapping* ( $R \sim 18\,000$  dans le NIR), grâce aux données de HARMONI qui donnera accès aux caractéristiques spectrales de planètes jeunes ( $< 300$  millions d'années) et proches de leur étoile ( $a = 1\text{-}40$  ua) grâce à son mode haut contraste (Houllé et al., 2021). METIS comptera aussi dans les instruments phares de l'ELT avec son mode spectroscopie à intégrale de champ à très haute résolution ( $R \sim 100\,000$ ) dans l'infrarouge moyen ( $3\text{-}5 \mu\text{m}$ ). Snellen et al.

5. [www.cosmos.esa.int/web/jwst](http://www.cosmos.esa.int/web/jwst)

6. [elt.eso.org/](http://elt.eso.org/)

(2015) montrèrent (à l'aide de simulations) qu'en couplant les capacités de hautes résolutions spatiales de l'ELT et les capacités de hautes résolutions spectrales de METIS, il était possible de détecter des planètes rocheuses ( $R \sim 1.5 R_{\oplus}$ ) dans la zone habitable autour de  $\alpha$  Cen A (type G2V;  $d \sim 1.34$  pc), en observant à une longueur d'onde de  $4.8 \mu\text{m}$  avec un rapport signal à bruit de 5. Puis, viendront les instruments de deuxième génération ( $\sim 2028$ ) avec, entre autres, le Planetary camera and spectrograph (PCS, aussi appelé EPICS, [Kasper et al. 2013](#), [Kasper et al. 2021](#)), qui ambitionne d'imager des planètes de masse terrestre avec le développement de l'optique adaptative extrême, qui multiplie par 2.5 le nombre d'actuateurs. $\text{m}^{-2}$  des miroirs déformables par rapport à l'optique adaptative actuelle, passant de  $5\text{-}10.\text{m}^{-2}$  à  $12.5\text{-}25.\text{m}^{-2}$ .

Les futurs spectrographes à intégrale de champ vont produire des données d'une qualité jamais atteinte, qui permettront de repousser les limites du *molecular mapping*. Néanmoins, d'autres techniques sont en cours de développement pour exploiter les données des spectrographes à intégrale de champ, comme le calcul de métriques alternatives au signal de corrélation croisée (calcul de vraisemblance, [Ruffio et al. 2019](#)), ou comme le démixage spectral (ou "spectral unmixing", [Rameau et al. 2021](#)), qui propose une alternative à la corrélation croisée, en décomposant le cube de données en données hyperspectrales et en identifiant les spectres les plus distincts dans cet espace. Cela permet de s'affranchir totalement des modèles. Cette méthode est actuellement en cours de développement et testée sur des données simulées de HARMONI. Cependant, le *molecular mapping* reste une technique puissante pour détecter et caractériser les planètes proches de leur étoile, et la possibilité de comparer les modèles à travers la corrélation croisée en fait un outils idéal pour tester notre compréhension de la physique des atmosphères substellaires.



# 4

## Analyse d'une librairie de jeunes analogues planétaires

---

*Aujourd'hui, seule l'imagerie directe permet d'obtenir des spectres d'exoplanètes à large séparation. Ces dernières années, l'étude de ces spectres s'est révélée clé pour chercher des traceurs de formation dans l'atmosphère des planètes imagées. Cependant le faible échantillon de spectres de compagnons planétaires accessible ne nous permet pas de comprendre toute la complexité des différents scénarios de formation envisagés et nous pousse à nous tourner vers les naines brunes jeunes de faible masse.*

*Dans ce chapitre, je présenterai l'analyse d'un échantillon de 38 analogues planétaires jeunes et froids. Cette librairie de spectres, observés avec l'instrument X-Shooter ( $R \sim 6700-8100$ ) présente une grande quantité d'information que j'analyserai de manière empirique à travers la recherche de traceur de gravité dans les caractéristiques spectrales, et de manière synthétique en utilisant notre code d'inversion Bayésienne ForMoSA pour estimer les propriétés atmosphériques de nos objets grâce aux grilles de spectres synthétiques ATMO, BT-SETTL et Exo-REM. Cette analyse est toujours en cours et devrait faire l'objet d'une à plusieurs publications pour exploiter la richesse de ce relevé.*

---

---

## Sommaire

---

<b>4.1</b>	<b>X-Shyne : Un échantillon d’analogues planétaires unique</b>	<b>125</b>
<b>4.2</b>	<b>Description de l’échantillon</b>	<b>127</b>
4.2.1	Les associations jeunes sondées	127
4.2.2	La diversité de X-Shyne	129
4.2.3	Quatre compagnons dans X-Shyne	129
<b>4.3</b>	<b>Description des observations et bilan des spectres obtenus</b>	<b>132</b>
<b>4.4</b>	<b>Analyse empirique de la librairie X-Shyne</b>	<b>136</b>
4.4.1	Exploration des indices de gravité de surface des naines L aux naines T	136
4.4.2	Les objets isolés de X-Shyne comme analogues planétaires	143
<b>4.5</b>	<b>Analyse synthétique</b>	<b>146</b>
4.5.1	Entrées et configuration de ForMoSA	146
4.5.2	Analyse des distributions postérieures	148
4.5.3	Premiers résultats : utilisation de l’ensemble de l’intervalle spectral	151
4.5.4	Sélection de fenêtres spectrales pour les ajustements	154
4.5.5	Discussion des paramètres estimés	156
<b>4.6</b>	<b>Conclusion et perspectives de la librairie X-Shyne</b>	<b>160</b>
4.6.1	Analyse complète des raies d’absorption	160
4.6.2	Analyse des raies d’émission	160
4.6.3	Estimation des rapports isotopiques	160
4.6.4	Exploration des paramètres atmosphériques et dynamiques de X-Shyne	161

---

## 4.1 X-Shyne : Un échantillon d'analogues planétaires unique

Nous avons vu dans la Section 1.1 que la grande diversité des exoplanètes découvertes, en matière de propriétés physiques (masse, rayon, luminosité, composition, structure, etc.), d'architectures (période, excentricité, propriétés de l'étoile hôte, multiplicité, etc.) et d'environnements (densité stellaire) pose de nombreuses questions quant à leur formation et leur évolution.

Dans la Section 1.2, j'ai détaillé les deux principaux mécanismes de formation invoqués aujourd'hui, le modèle d'accrétion sur cœur et celui d'instabilité gravitationnelle, qui ne peuvent à ce jour expliquer seuls la richesse des 25 dernières années de découvertes exoplanétaires. J'ai aussi mentionné l'idée particulièrement intéressante mais complexe de rechercher des traces de l'histoire de formation des exoplanètes dans leur atmosphère en lien avec leur composition, l'étude des abondances chimiques et leur lieu de formation par rapport à l'étoile hôte. On peut citer plusieurs études pionnières dans ce sens étudiant la relation masse-métallicité dans le système solaire (Thorngren et al., 2016), motivant les recherches de tendances similaires pour les systèmes exoplanétaires multiples (Welbanks et al., 2019), la mesure de l'enrichissement en azote dans l'atmosphère de Jupiter suggérant une formation au delà de 30 ua (Bosman et al., 2019), les études d'isotopes de l'azote dans le Système Solaire (Mandt et al., 2015) ou plus récemment du carbone  $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$  dans l'atmosphère de jeunes Super-Jupiters à très longues périodes, suggérant une accrétion significative de carbone sous forme de glace au delà de 100 ua, permettant cette dissociation isotopique (Mollière & Snellen 2019, Zhang et al. 2021a, Miley et al. 2021).

L'obtention de spectres d'exoplanètes à haut signal à bruit, à moyenne et haute résolution spectrale et sur une gamme de longueurs d'ondes étendue, combiné avec le développement de nouvelles générations de modèles d'atmosphères reproduisant la diversité des observations, est une étape cruciale et nécessaire pour potentiellement retracer l'histoire des exoplanètes observées. Le Chapitre 2 montre la difficulté qu'ont les spectres synthétiques auto-consistants à reproduire les observations sur des larges gammes de longueurs d'ondes, ce qui constitue la principale limite à l'approche *forward modelling*; et la complexité d'obtenir des spectres à moyenne et haute résolution de compagnons planétaires est un réel frein au développement de ces modèles.

Aujourd'hui, l'imagerie directe, les techniques de corrélation croisée de spectres à haute résolution ou les transits (secondaires, transmissions, courbes de lumière) permettent tout juste une exploration de la richesse spectrale et spatiale des atmosphères exoplanétaires. Dans ce cadre, les jeunes naines brunes de masses planétaires isolées, ou les compagnons à grandes séparations, constituent un laboratoire de référence idéal pour tester les modèles dans une gamme de paramètres physiques étendue et en comparaison des premières études dédiées aux planètes géantes en transit et aux jeunes (super-)Jupiters imagés.

Très récemment, une série d'études a défriché les potentiels liens entre les propriétés spectrales observées et les traceurs de formation. On peut notamment citer celles portant sur l'étude des raies de Balmer  $H_\alpha$ ,  $H_\beta$  (signatures d'accrétion) pour les planètes PDS70 bc (Haffert et al., 2019) ou le Jupiter chaud KELT-9 b (Wyttenbach et al., 2020), celle de la métallicité et du rapport C/O (mode et lieu de formation) qui ont été utilisés pour dégager des modes de formation privilégiés pour les planètes  $\beta$ Pic b (Gravity Collaboration et al., 2020),  $\kappa$  And b (Wilcomb et al., 2020), TYC 8998 b (Zhang et al., 2021a), ou HIP 65426 b (Petrus et al., 2021). Ces traceurs sont détaillés dans la Section 1.6.

Ces quelques cas exoplanétaires emblématiques sont très intéressants mais limités en matière de diversité spectrale explorée. La possibilité de confronter les prédictions des modèles d'atmosphères sur une gamme large de paramètres physiques, comme la température effective, l'âge, la composition chimique (métallicité, C/O), motive l'étude de jeunes analogues exoplanétaires, beaucoup plus simples à observer avec les grands télescopes actuels et offrant un réservoir de cibles potentielles très important. Ces dernières années, plusieurs relevés ont permis de fournir à la communauté des bibliothèques de spectres de naines brunes jeunes à basse et moyenne résolution. Allers & Liu (2013) ont observé 73 naines brunes du champ (M5-L7) jeunes (10-300 Myr) à basse ( $R \sim 100$ )

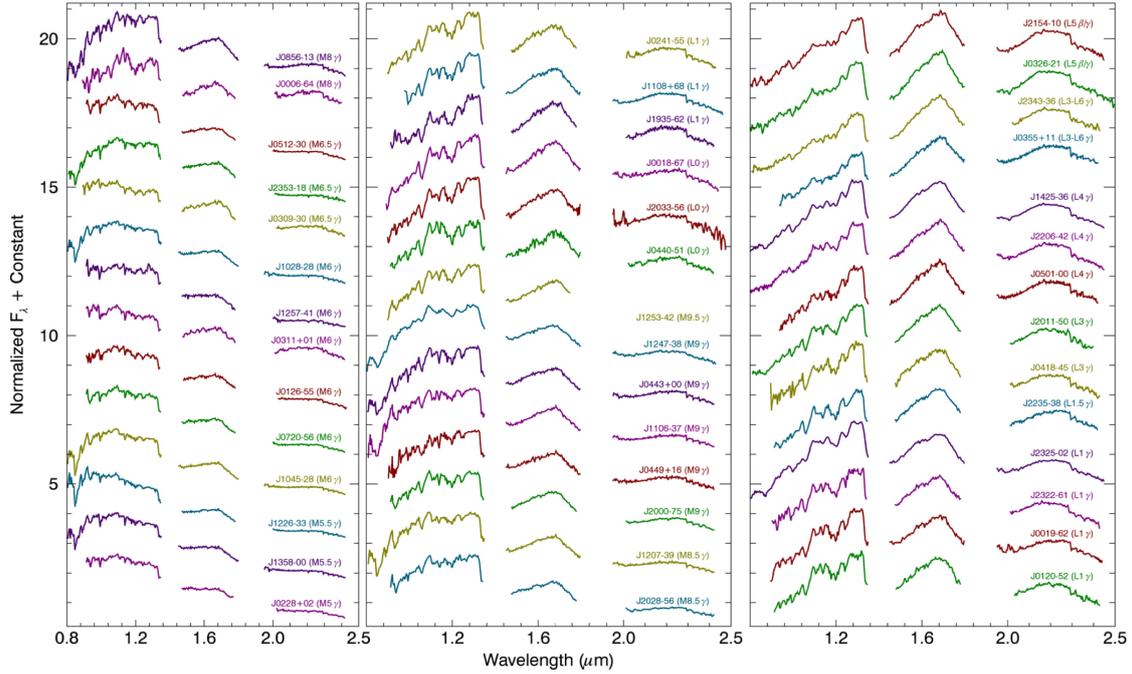


FIGURE 4.1 – Exemples de spectres de la librairie BASS. Les objets présentés ici montrent des signes de très faible gravité (indices  $\beta$  et  $\gamma$ ). Cette figure est tirée de [Gagné et al. \(2015a\)](#).

et moyenne ( $R \sim 750-2000$ ) résolutions entre  $0.9$  et  $2.4 \mu\text{m}$ . Le BANYAN All-Sky Survey (BASS, [Gagné et al. 2015b](#)) a fourni un catalogue de 184 candidats sous-stellaires (M4-L7) d'associations jeunes ( $< 300$  Myr) observés à basse résolution ( $R < 750$ ) entre  $0.8$  et  $0.9 \mu\text{m}$  ([Gagné et al., 2015a](#)). La Figure 4.1 montre quelques exemples de ces spectres. [Manjavacas et al. \(2020\)](#) a proposé les spectres X-Shooter ( $R \sim 2000-4000$ ) de 20 naines M tardives. Enfin, l'échantillon de [Martin et al. \(2017\)](#) comprend les spectres de 228 M, L et T observées à  $R \sim 2000$ .

Bien que ces librairies soient aujourd'hui au cœur de l'étude des propriétés spectrales des objets sous-stellaires et participent grandement au développement des modèles d'atmosphères comme spectres de comparaison ([Tremblin et al. 2017](#), [Charnay et al. 2018](#)), leur résolution spectrale ne permet pas d'obtenir des informations clés comme les profils de raies, ni d'estimer précisément les abondances chimiques dans l'atmosphère de leurs objets. Dans ce chapitre, je présenterai et analyserai le nouvel échantillon de spectres X-Shyne. Comme le montre la Figure 4.2, cette librairie unique rassemble des observations de 38 naines brunes couvrant la même gamme de luminosités, d'âges ( $\sim 8-150$  Myr) et de masses ( $\sim 10-25 M_{\text{Jup}}$ ) que les compagnons planétaires imagés. Elle couvre aussi une large gamme de types spectraux (L7-T5.5) et de  $T_{\text{eff}}$  ( $\sim 900-2300$  K), ce qui la place naturellement comme le prolongement de la librairie présentée dans le Chapitre 2 ([Petruș et al., 2020](#)). Cette diversité permettra une analyse comparative avec les exoplanètes imagées connues, mais aussi entre ces objets. Les observations ont été obtenues avec l'instrument X-Shooter du VLT ayant une couverture spectrale allant de  $0.3$  à  $2.5 \mu\text{m}$ , pour atteindre une résolution spectrale allant de  $R \sim 3300$  dans l'UVB à  $R \sim 8100$  dans le NIR. Dans une première partie, je décrirai l'échantillon de sources sélectionnées à travers un exposé des associations d'étoiles jeunes sondées et d'un bilan bibliographique des propriétés de ces objets. Dans une deuxième partie, je présenterai les observations obtenues en détaillant les informations spectrales accessibles aux résolutions de X-Shooter. La troisième partie sera consacrée à l'analyse empirique de la librairie. Je présenterai les propriétés atmosphériques issues de l'application du code ForMoSA sur les spectres de X-Shyne dans une quatrième partie. Je finirai par discuter ces résultats et les utiliserai pour apporter des pistes sur le mode de formation de ces objets.

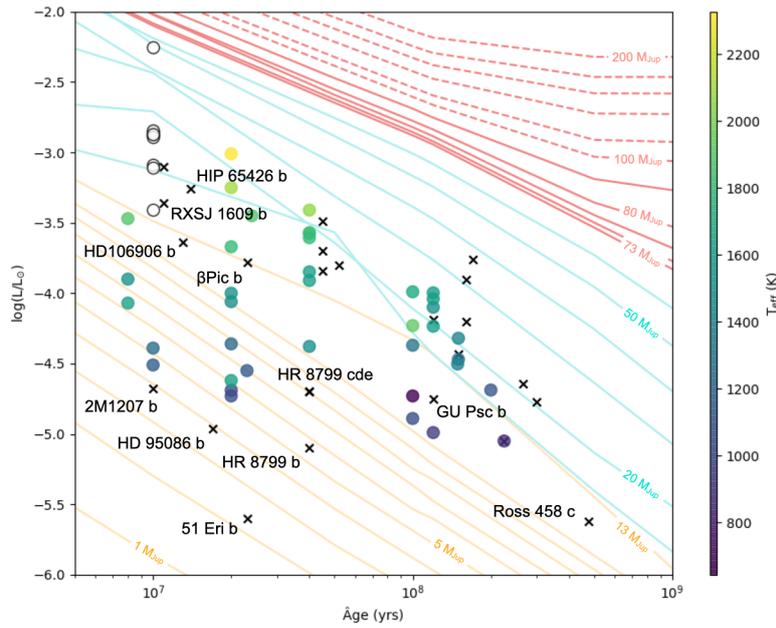


FIGURE 4.2 – Relation luminosité-âge. Les isochrones en masse sont représentées et ont été calculées avec les modèles évolutifs CONDO3 (Baraffe et al., 2003) pour les traits pleins et de Baraffe et al. (2015) pour les traits en pointillés. Les séparations entre les modèles jaunes-bleus et bleus-rouges marquent les limites de fusion du deutérium ( $M \sim 13 M_{\text{Jup}}$ ) et de l'hydrogène ( $M \sim 73 M_{\text{Jup}}$ ), respectivement. Les exoplanètes imagées sont représentées par des croix et l'échantillon X-Shyne est représenté par des points (leur  $T_{\text{eff}}$  est donnée par leur code couleur). Les neuf naines brunes de l'étude présentée dans le Chapitre 2 sont rappelées par des points blancs.

## 4.2 Description de l'échantillon

Dans cette section, je présenterai cette librairie en commençant par décrire les différentes associations d'étoiles jeunes explorées (définissant l'âge des objets de X-Shyne), puis je détaillerai les propriétés physiques et atmosphériques des objets sélectionnés déterminées dans de précédentes études.

### 4.2.1 Les associations jeunes sondées

Depuis une trentaine d'années, de nombreuses associations d'étoiles ont été identifiées. Ce travail s'appuie aujourd'hui sur l'étude des mouvements stellaires dans la galaxie avec des instruments dédiés à la mesure de la position de ces étoiles (Gaia) et de la vitesse radiale (spectrographes à haute résolution), combinés à des algorithmes s'appuyant sur l'analyse Bayésienne pour calculer la probabilité d'appartenance à tel ou tel groupe (utilisation de catalogue de points photométriques et de mouvements stellaires). Il s'appuie aussi sur différents diagnostics comme les diagrammes couleur-magnitude, l'abondance de lithium, de détections d'émissions  $H_{\alpha}$  ou de rayons X, l'activité UV, ou l'excès de flux dans l'infra-rouge. Il est apparu que certains de ces groupes étaient proches ( $d < 150$  pc) et jeunes ( $< 200$  Myr). Ils représentent donc une réelle opportunité d'étudier les propriétés des objets de masse planétaire jeunes pour contraindre les mécanismes physico-chimiques en jeu lors de leur formation. Bien que l'âge de ces groupes soit aujourd'hui relativement bien contraint, il s'agit d'une datation comparée entre les objets les composant. Sept de ces associations ont fourni des sources pour constituer la librairie X-Shyne. La Figure 4.3 illustre la couverture de X-Shyne en matière d'âge et de distance, les différentes associations explorées sont représentées.

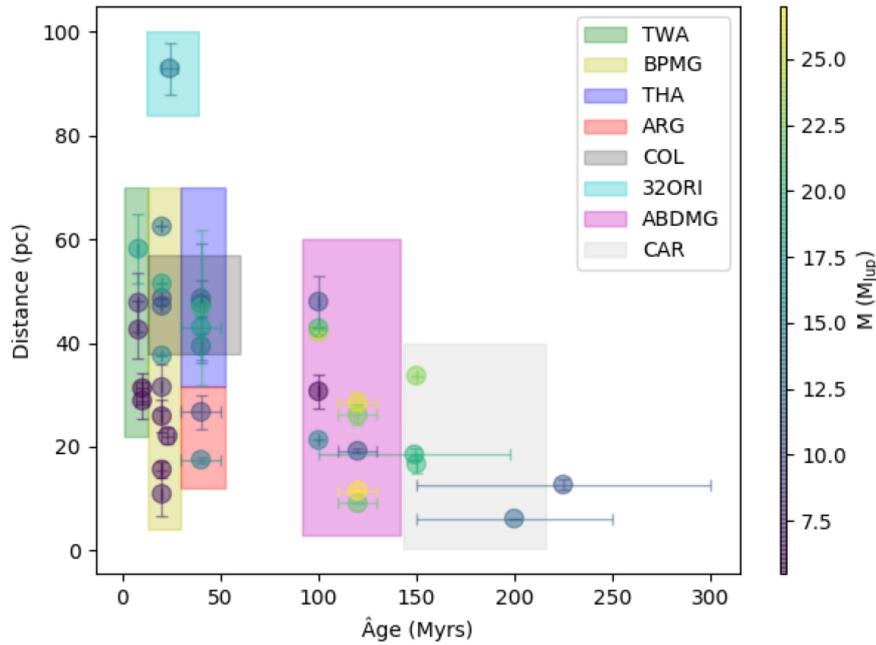


FIGURE 4.3 – Gammes de distances, d'âges et de masses couvertes par la librairie X-Shyne. Les associations jeunes dans lesquelles ont été sélectionnées les sources sont représentées par des rectangles de couleur.

- *TW Hydrae (TWA)* : Cette association est âgée de 5-15 Myr et distante de  $d \sim 50$  pc. Elle a été identifiée par [de la Reza et al. \(1989\)](#), qui ont découvert deux étoiles avec de fortes émissions  $H_{\alpha}$ , suggérant des phénomènes d'accrétion et donc des âges jeunes. Ces deux objets avaient des vitesses radiales similaires, et donc étaient potentiellement cinématiquement liés. Depuis, une cinquantaine d'objets appartenant à ce groupe ont été identifiés ([Kastner et al. 1997a](#), [Gagné et al. 2017a](#)).
- *$\beta$  Pictoris (BPMG)* : En comparant le mouvement de 17 jeunes étoiles par rapport à l'étoile  $\beta$  Pictoris, [Zuckerman et al. \(2001\)](#) identifièrent ce groupe, situé à une distance  $d \sim 20$  pc et âgé de 20–26 Myr ([Mamajek & Bell, 2014](#)). Son très jeune âge et sa proximité en font un laboratoire idéal pour l'étude de la formation planétaire. Une vingtaine de systèmes ont été identifiés, dont la plupart possède un disque circum-stellaire, comme par exemple le système  $\beta$  Pic, qui compte également un compagnon ([Lagrange et al., 2009](#)).
- *Tucana–Horologium (THA)* : Ce groupe d'étoiles ([Torres et al., 2000](#)) est l'un des plus peuplés du voisinage solaire ( $d \sim 50$  pc). Il est composé d'objets légèrement plus âgés (20–50 Myr) que TWA ou BPMG, permettant ainsi de suivre l'évolution des étoiles et des naines brunes jeunes lors de leurs 50 premiers millions d'années. Les centaines d'objets attribués à cette association ([Kraus et al., 2014](#)) offrent la possibilité de faire des études statistiques des systèmes jeunes (calcul de la fonction de masse initiale, fréquence des systèmes multiples, fréquence des disques, etc.).
- *Argus (ARG)* : [Makarov & Urban \(2000\)](#) analysèrent le mouvement propre de plus de 7000 étoiles et identifièrent un groupe d'étoiles en co-mouvement dans la constellation de la Carène-Voile. Avec le relevé SACY, [Torres et al. \(2003\)](#) et [Torres et al. \(2008\)](#) définirent l'association Argus, située à  $d \sim 20$  pc et âgée de 30–50 Myr.
- *Columba (COL)* : [Torres et al. \(2008\)](#) définirent également l'association Columba située à  $d \sim 50$  pc et âgée de 20–40 Myr, en calculant le mouvement propre des étoiles de leur relevé SACY. Certaines sources attribuées à d'autres associations ont été redéfinies dans COL, comme par exemple CD-52 381, initialement placée dans THA.

- *AB Doradus (ABDMG)* : [Zuckerman et al. \(2004\)](#) identifèrent une trentaine d'étoiles jeunes dont les mouvements propres étaient cohérents avec celui de l'étoile AB Doradus. Située à  $d = 20\text{-}50$  pc, cette association est âgée de 110-130 Myr, mais cet âge est encore débattu.
- *Near-Carina (CAR)* : Découverte et caractérisée par [Zuckerman et al. \(2006\)](#), l'association CAR ( $d \sim 20$  pc) inclut huit membres et dix autres probables candidats. Par comparaison des abondances de lithium de ces objets avec d'autres associations, [Zuckerman et al. \(2006\)](#) estimèrent l'âge de CAR à  $200 \pm 50$  Myr, ce qui permet ainsi l'étude des étoiles et naines brunes jeunes à un âge encore plus avancé que celles de ABDMG.
- *Le Groupe Local (LAG)* : Ce groupe rassemble différents sous groupes d'étoiles jeunes ( $< 300$  Myr [Eggen 1992](#)) comme les Pleiades (120 Myr),  $\alpha$  Persei (50-80 Myr), et IC 2602 (70 Myr). Le compagnon VHS1256 b a été attribué à ce groupe en raison de la non-détection de lithium dans le spectre de sa primaire, ce qui l'a exclu d'autres associations avec lesquelles il était en co-mouvement ([Gauza et al., 2015b](#)).
- *32 Ori* : Enfin, [Mamajek \(2007\)](#) identifèrent l'association 32 Ori. Ce groupe jeune ( $\sim 30$  Myr) est plus éloigné que les associations du même âge présentées précédemment ( $d \sim 100$  pc).

#### 4.2.2 La diversité de X-Shyne

Afin d'avoir un échantillon de spectres représentatif de ceux des exoplanètes imagées, les sources sélectionnées pour X-Shyne couvrent une large gamme de type-spectraux, d'âges, de  $T_{\text{eff}}$ , de masses, et de rayons. Les propriétés de ces objets sont résumées dans les Tables 4.1 et 4.2. L'un des objectifs du travail présenté dans ce Chapitre est de redéfinir ces propriétés à l'aide de la couverture spectrale à moyenne résolution permise par X-Shooter et de la nouvelle génération de modèles d'atmosphères.

#### 4.2.3 Quatre compagnons dans X-Shyne

Parmi les 38 sources que compte la librairie X-Shyne, 4 ont été identifiées comme compagnons d'étoiles. Les propriétés de ces systèmes sont résumées dans la Table 4.3.

*GuPsc b* a été identifié par [Naud et al. \(2014\)](#) comme compagnon de l'étoile M3 GUPsc A dans l'association ABDMG ( $d=20\text{-}50$  pc, 110-130 Myr). La formation de cet objet est aujourd'hui débattue et plusieurs scénarios sont proposés. Son orbite à large séparation ( $2000 \pm 200$  ua) rend peu probable une formation in situ, car cela demanderait une densité du disque trop grande à cette distance. En revanche, une formation plus près de l'étoile suivie par une migration dans les zones externes du système semble plausible. Il est aussi envisagé que GuPsc b se soit formé isolé par effondrement d'un nuage moléculaire, ou ait été éjecté d'un autre système pour être ensuite capturé par GuPsc A. Avec son type spectral  $T3 \pm 1$ , son jeune âge, et sa  $T_{\text{eff}}$  estimée à  $\sim 1050$  K, GUPsc b est un cas d'école pour l'étude des compagnons planétaires jeunes à la transition L-T. Notons aussi son rapport de masse  $M_b/M_A \sim 0.03$ , plus grand que la majorité des compagnons planétaires imagés.

*2MASS0219 b* a été identifié par [Artigau et al. \(2015\)](#) lors de l'analyse du relevé BASS. Son orbite relativement proche ( $\sim 160$  ua) et son rapport de masse avec la primaire de 0.122 peuvent laisser penser à une formation commune avec 2MASS0219 A, résultant à une binaire d'étoile "ratée". Sa masse de  $14 \pm 1 M_{\text{Jup}}$  est à la frontière entre les planètes et les naines brunes.

*2MASS0249 c*, découverte par [Dupuy et al. \(2018\)](#), orbite autour de la binaire d'étoiles 2MASS0249 AB, composée de deux M6 de faible masse ( $48 \pm 12 M_{\text{Jup}}$  et  $44 \pm 13 M_{\text{Jup}}$ ) à une distance de  $1950 \pm 200$  ua. Le système 2MASS 0249 pourrait être la limite basse en masse du processus de formation stellaire, ce compagnon serait donc formé par effondrement des restes du nuage de poussière et de gaz non-utilisés pour la formation de 2MASS0249 AB. La formation de 2MASS0249 c dans les zones internes par accrétion de cœur ou instabilité du disque n'est pas favorisée en raison

TABLEAU 4.1 – Bilan bibliographique des sources de l'échantillon X-Shyne : coordonnées, type spectral, association, distance, âge et luminosité. (1) *Gagné et al. (2015a)*, (2) *Faherty et al. (2016)*, (3) *López Martí & Zapatero Osorio (2014)*, (4) *Naud et al. (2014)*, (5) *Gagné et al. (2017b)*, (6) *Artigau et al. (2015)*, (7) *Dupuy et al. (2018)*, (8) *Gagné et al. (2014)*, (9) *Best et al. (2015)*, (10) *Gaia Collaboration et al. (2018)*, (11) *Gaia Collaboration (2018)*, (12) *Burgasser et al. (2016)*, (13) *Gagné et al. (2015c)*, (14) *Kellogg et al. (2016)*, (15) *Schneider et al. (2016b)*, (16) *Gagné et al. (2017a)*, (17) *Schmidt et al. (2007)*, (18) *Gauza et al. (2015a)*, (19) *Dieterich et al. (2014)*, (20) *Liu et al. (2013)*, (21) *Martin et al. (2017)*. Les valeurs entre parenthèses ont été déterminées à partir de l'âge et de la masse connus en utilisant les modèles évolutifs COND03 (*Baraffe et al., 2003*).

Nom	$\alpha$ (J2000)	$\delta$ (J2000)	Type spectral	Assoc.	d (pc)	Age (Myr)	$\log(L/L_{\odot})$	Ref.
2MASS0030	00 30 30.1	-14 50 03.3	L7 $\beta$	ARG	26.72 $\pm$ 3.21	30-50	-4.378 $\pm$ 0.105	1, 2
2MASS0045	00 45 21.4	+16 34 44.6	L2 $\gamma$	ARG	17.5 $\pm$ 0.6	30-50	-3.41 $\pm$ 0.03	2, 3
2MASS0046	00 46 48.4	+07 15 17.7	L0	BPMG	37.6	20	(-3.25)	1
2MASS0103	01 03 32.0	+19 35 36.1	L6	ABDMG	21.3	100	(-4.37)	1
GUPscb	01 12 36.4	+17 04 31.8	T3.5 $\beta$	ABDMG	48 $\pm$ 5	100	(-4.89)	4
SIMPJ0136	01 36 56.5	+09 33 47.3	T2.5 $\beta$	CAR	6.14 $\pm$ 0.04	200 $\pm$ 50	-4.688 $\pm$ 0.005	5
2MASS0153	01 53 14.6	-67 44 18.1	L3 $\beta$	THA	47.6 $\pm$ 11.5	40	-3.91 $\pm$ 0.29	2
2MASS0219 b	02 19 22.1	-39 25 22.5	L4 $\gamma$	THA	39.4 $\pm$ 2.6	40	(-3.57)	6
2MASS0249 c	02 49 54.3	-05 58 01.6	L2	BPMG	48.7	20	-4.00 $\pm$ 0.09	7
2MASS0326	03 26 42.2	-21 02 05.7	L5 $\beta$	ABDMG	26.1 $\pm$ 2.0	110-130	-4.235 $\pm$ 0.022	2, 8
2MASS0342	03 42 16.2	-68 17 32.1	L4 $\gamma$	THA	48.6 $\pm$ 3.6	40	-3.848 $\pm$ 0.372	1, 2
PSOJ057	03 49 09.4	+15 14 36.0	L7	BPMG	31.5 $\pm$ 4.4	20	-4.36 $\pm$ 0.13	9
2MASS0355	03 55 23.4	+11 33 43.7	L5 $\gamma$	ABDMG	9.12 $\pm$ 0.06	110-130	-4.10 $\pm$ 0.034	2, 10
PSOJ071	04 47 30.3	-12 16 15.5	T2	BPMG	25.9 $\pm$ 3.1	20	-4.69 $\pm$ 0.14	9
2MASS0508	05 08 16.5	-14 13 47.9	L2	ABDMG	42.1	100	(-3.99)	11
2MASS0512	05 12 06.3	-29 49 54.0	L5 $\beta$	BPMG	10.9 $\pm$ 4.4	20	(-4.62)	1
2MASS0518	05 18 46.1	-27 56 45.7	L1 $\gamma$	COL	46.8 $\pm$ 15.0	40	-3.575 $\pm$ 0.28	2, 8
WISE0528	05 28 57.6	+09 01 04.2	L1 $\beta$	32ORI	93 $\pm$ 5	24 $\pm$ 4	(-3.45)	12
2MASS0616	06 16 56.2	-25 43 55.7	L1	COL	51.5	20	(-3.01)	11
2MASS0723	07 23 52.6	-33 09 44.6	L5	CAR	33.7	150	(-4.32)	11
2MASS1021	10 21 25.7	-28 30 42.7	L4 $\gamma$	TWA	42.6 $\pm$ 5.6	8	(-4.07)	1
SDSSJ1110	11 10 10.0	+01 16 13.1	T5.5	ABDMG	19.2 $\pm$ 0.44	110-130	-4.99 $\pm$ 0.02	13
2MASS1119	11 19 32.5	-11 37 46.6	L7 $\gamma$	TWA	28.9 $\pm$ 3.6	10 $\pm$ 3	-4.39 $\pm$ 0.14	14
2MASS1147	11 47 24.1	-20 40 21.3	L7 $\gamma$	TWA	31.3 $\pm$ 3.0	10 $\pm$ 3	-4.51 $\pm$ 0.07	15, 16
2MASS1148	11 48 01.0	-28 36 48.8	L1 $\beta$	TWA	47.8 $\pm$ 5.6	8	-3.9 $\pm$ 0.1	16
2MASS1207	12 07 48.4	-39 00 04.3	L1 $\gamma$	TWA	58.2 $\pm$ 6.8	8	-3.47 $\pm$ 0.08	16
2MASS1213	12 13 02.9	-04 32 44.3	L5	CAR	16.70 $\pm$ 1.80	150	(-4.47)	17
VHS1256 b	12 56 01.6	-12 57 30.3	L7 $\gamma$	LAG	12.7 $\pm$ 1.0	150-300	-5.05 $\pm$ 0.22	18
2MASS1425	14 25 28.0	-36 50 22.9	L4 $\gamma$	ABDMG	11.56 $\pm$ 0.11	110-130	-4.04 $\pm$ 0.01	2, 19
2MASS1826	18 26 46.8	-46 02 24.5	L1	-	62.5	20	(-3.67)	11
2MASS2104	21 04 31.4	-09 39 22.7	L3	-	47.2	20	(-4.06)	11
PSO318	21 14 08.0	-22 51 35.8	L7 $\gamma$	BPMG	22.1 $\pm$ 1.6	20-26	-4.55 $\pm$ 0.06	8, 20
PSO319	21 17 14.3	-29 40 03.4	T0 $\gamma$	BPMG	15.6 $\pm$ 1.6	20	(-4.73)	9
2MASS2206	22 06 45.0	-42 17 20.8	L3 $\gamma$	ABDMG	28.6 $\pm$ 1.6	110-130	-3.997 $\pm$ 0.009	2, 8
2MASS2216	22 16 28.6	+19 52 47.0	T3	BPMG	30.7 $\pm$ 3.2	100	-4.73 $\pm$ 0.13	9
2MASS2244	22 44 31.7	+20 43 43.3	L7 $\gamma$	ABDMG	18.5 $\pm$ 1.2	149 $\pm$ 49	-4.503 $\pm$ 0.007	2, 8, 21
2MASS2322	23 22 53.0	-61 51 27.5	L3 $\gamma$	TUC	43.0 $\pm$ 2.4	20-40	-3.606 $\pm$ 0.04	2, 8
2MASS2354	23 54 12.5	+22 08 22.8	L3	ABDMG	42.9	100	(-4.23)	11

TABLEAU 4.2 – Bilan bibliographique des sources de la librairie X-Shyue : masse, rayon, température effective, gravité de surface, vitesse radiale et vitesse de rotation. (1) *Gagné et al. (2015a)*, (2) *Faherty et al. (2016)*, (3) *Filippazzo et al. (2015)*,(4) *Blake et al. (2010)*, (5) *Shkolnik et al. (2017)*,(6) *Gaia Collaboration (2018)*,(7) *Naud et al. (2014)*,(8) *Gagné et al. (2017b)*,(9) *Dupuy et al. (2018)*, (10) *Best et al. (2015)*,(11) *Gagné et al. (2014)*,(12) *Burgasser et al. (2016)*, (13) *Gagné et al. (2017a)*, (14) *Kellogg et al. (2016)*, (15) *Schneider et al. (2016b)*, (16) *Gagné et al. (2017a)*, (17) *Gauza et al. (2015b)*,(18) *Allers et al. (2016)*,(19) *Vos et al. (2018)*,(20) *Aller et al. (2016)*. Les valeurs entre parenthèses ont été déterminées à partir de l'âge et de la masse connus en utilisant les modèles évolutifs COND03 (*Baraffe et al., 2003*).

Nom	Masse ( $M_{\text{Jup}}$ )	Rayon ( $R_{\text{Jup}}$ )	$T_{\text{eff}}$ (K)	$\log(g)$ (dex)	RV ( $\text{km.s}^{-1}$ )	$v.\sin(i)$ ( $\text{km.s}^{-1}$ )	Ref.
2MASS0030	$10.4\pm 0.6$	$1.33\pm 0.01$	$1500\pm 100$	$5.0\pm 0.5$	-	-	1
2MASS0045	$14.7\pm 0.01$	$1.14\pm 0.1$	$2059\pm 45$	$4.35\pm 0.22$	$3.16\pm 0.83$	$32.82\pm 0.17$	1, 2, 3, 4
2MASS0046	$15\pm 5$	$1.79\pm 0.02$	$2100\pm 100$	$5.5\pm 0.5$	$-2.8\pm 0.3$	-	1, 5
2MASS0103	$15\pm 3$	(1.25)	(1316)	(4.40)	-	-	6
GUPscb	$11\pm 2$	(1.22)	1000-1100	4.5-5.0	-	-	7
SIMPJ0136	$12.7\pm 1.0$	$1.22\pm 0.01$	$1098\pm 6$	$4.31\pm 0.03$	$11.5\pm 0.4$	$50.9\pm 0.8$	8
2MASS0153	$12.9\pm 0.5$	$1.49\pm 0.02$	$1600\pm 100$	$5.0\pm 0.5$	$10.41\pm 2.71$	-	1, 2
2MASS0219 b	$14\pm 1$	(1.54)	(1881)	(4.19)	-	-	6
2MASS0249 c	$11\pm 2$	(1.40)	(1488)	(4.16)	-	-	9
2MASS0326	$22.4\pm 1.0$	$1.20\pm 0.01$	$1600\pm 100$	$4.39\pm 0.21$	$22.91\pm 2.07$	-	1, 2, 3
2MASS0342	$12.38\pm 6.11$	(1.35)	$1590\pm 349$	(4.23)	$13.87\pm 2.62$	-	2
PSOJ057	$8.1\pm 1.8$	(1.37)	(1219)	(4.04)	$17.3\pm 3$	-	10
2MASS0355	$21.62\pm 6.14$	$1.20\pm 0.04$	$1478\pm 57$	$4.67\pm 0.05$	$11.92\pm 0.22$	$12.31\pm 0.15$	1, 2, 4
PSOJ071	$6.1\pm 0.7$	(1.35)	(1031)	(3.9)	$12\pm 3$	-	10
2MASS0508	$25\pm 2$	(1.21)	(1659)	(4.64)	-	-	6
2MASS0512	$6.7\pm 1$	$1.36\pm 0.01$	$1600\pm 100$	$4.0\pm 0.5$	$19.7\pm 1.5$	-	1, 11
2MASS0518	$19.94\pm 9.23$	(1.42)	$1808\pm 301$	(4.41)	$24.15\pm 0.19$	-	2
WISE0528	$14\pm 4$	(1.61)	$1880\pm 150$	$3.8\pm 0.2$	$18\pm 4$	-	12
2MASS0616	$18\pm 3$	(1.91)	(2327)	(4.11)	-	-	6
2MASS0723	$23\pm 4$	(1.16)	(1413)	(4.65)	-	-	6
2MASS1021	$7\pm 2$	$1.51\pm 0.04$	$1600\pm 200$	$5.0\pm 1.0$	$13.5\pm 1.7$	-	1, 13
SDSSJ1110	$11\pm 1$	$1.18\pm 0.02$	$940\pm 20$	$4.28\pm 0.04$	$7.5\pm 3.8$	-	1
2MASS1119	4.3-7.6	(1.43)	(1244)	(3.88)	-	-	14
2MASS1147	5-6	$1.40\pm 0.03$	$1140\pm 50$	$4.0\pm 0.5$	$7\pm 3$	-	15, 16
2MASS1148	$8.5\pm 1.6$	$1.56\pm 0.03$	$1500\pm 100$	$3.5\pm 0.5$	$6\pm 3$	-	1, 13
2MASS1207	$17.28\pm 4.59$	$1.67\pm 0.04$	$1890\pm 90$	$4.16\pm 0.10$	$6\pm 3$	-	1, 3, 13
2MASS1213	$20\pm 6$	(1.16)	(1293)	(4.59)	-	-	6
VHS1256 b	$11.2\pm 10$	(1.16)	$880\pm 140$	$4.25\pm 0.35$	-	-	17
2MASS1425	25-29	$1.23\pm 0.01$	$1590\pm 10$	$4.64\pm 0.04$	$5.37\pm 0.25$	$32.37\pm 0.66$	1, 4
2MASS1826	$13\pm 2$	(1.51)	(1794)	(4.17)	-	-	6
2MASS2104	$11\pm 2$	(1.40)	(1489)	(4.16)	-	-	6
PSO318	$6.5\pm 1.2$	$1.464\pm 0.009$	$1127\pm 26$	$4.01\pm 0.03$	$-6.0\pm 1.1$	$17.5\pm 2.8$	9, 18
PSO319	$6\pm 2$	(1.35)	(1032)	(3.93)	-	-	6
2MASS2206	$26.1\pm 1.0$	$1.21\pm 0.01$	$1588\pm 62$	$5.0\pm 0.5$	$7.6\pm 2.0$	-	1, 11
2MASS2216	$5.9\pm 0.7$	(1.23)	(644)	(4.01)	-	-	6
2MASS2244	$19.0\pm 1.5$	$1.28\pm 0.02$	$1380\pm 150$	$4.48\pm 0.05$	$-16.0\pm 0.9$	$14.3\pm 1.5$	19, 20
2MASS2322	$17.35\pm 5.44$	$1.56\pm 0.02$	$1793\pm 53$	$5.0\pm 0.5$	$4.8\pm 2.5$	-	1, 11
2MASS2354	$20\pm 3$	(1.21)	$1930\pm 170$	(4.55)	-	-	6, 20

TABLEAU 4.3 – Propriétés des quatre systèmes planétaires contenant un objet de X-Shyne. La référence donnée ici est celle de la découverte.

	Type spectral	Masse ( $M_{\odot}$ )	Distance (pc)	Age (Myr)	Séparation (ua)	$M_b/M_A$	Ref.
GUPsc b	M3	0.35	48.0±5	100	2000±200	0.03	Naud et al. (2014)
2MASS0219 b	M6 $_{\gamma}$	0.11±0.01	39.4±2.6	40	156±10	0.122	Artigau et al. (2015)
2MASS0249 c	M6 $_{\gamma}$ +M6 $_{\gamma}$	0.046+0.042	48.9±5	22±6	1950±200	0.13	Dupuy et al. (2018)
VHS1256 b	M7.5	0.073±0.02	12.7±1.0	~200	102±9	~0.15	Gauza et al. (2015b)

de l'insuffisance de masse disponible pour enclencher ces processus (la masse étant utilisée pour la formation de 2MASS0249 AB). 2MASS J02490557 c est le premier compagnon à large séparation à avoir les mêmes propriétés qu'un compagnon plus proche dans la même association ( $\beta$ Pic b), ce qui en fait un objet de comparaison idéal.

VHS1256 b a été découverte par Gauza et al. (2015b). La spécificité de cet objet est qu'avec une distance estimée à 12.7 pc, il est le compagnon de masse planétaire le plus proche imagé. Il est aussi l'un des objets les plus vieux de la librairie X-Shyne, ce qui permet de suivre l'évolution des propriétés des compagnons planétaires dans leurs premières centaines de millions d'années. Les différences de  $T_{\text{eff}}$  estimées via la comparaison avec des modèles d'atmosphères et via les modèles évolutifs pointent vers une atmosphère complexe, potentiellement riche en nuages.

### 4.3 Description des observations et bilan des spectres obtenus

Pour cette étude, nous avons utilisé l'instrument X-Shooter (voir la description détaillée de l'instrument dans la Section 2.1). Les fentes 1.6", 1.2" et 0.6" ont été choisies afin d'atteindre une résolution spectrale de  $R \sim 3300$ ,  $\sim 6700$  et  $\sim 8100$  pour les bras UVB, VIS et NIR respectivement. À ces résolutions, de nombreuses absorptions atomiques et moléculaires clés sont détectées (exemples : K I, Na I, CO, CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>O, FeH) et peuvent être utilisées pour contraindre les propriétés atmosphériques des sources observées.

Les observations des sources de la librairie X-Shyne se sont déroulées entre 28/04/2018 et le 06/02/2020, pour un total de 76 h d'observation. Certaines sources faiblement lumineuses ont nécessité plusieurs séquences afin d'atteindre l'objectif de signal à bruit  $S/N=50$  à 1.282  $\mu\text{m}$ . Le bilan de ces observations est disponible dans les Tables A.1 et A.2. Les conditions d'observations étaient plutôt bonnes, avec un *seeing*<sup>1</sup> médian de 0.69" (min=0.34", max=1.57") et une masse d'air<sup>2</sup> médiane de 1.2 (min=1.01, max=1.62). La Figure 4.6 présente les valeurs de *seeing* et de masse d'air lors de l'observation des objets de X-Shyne. Les données ont ensuite été réduites selon la méthode décrite dans la Section 2.1. Notons que la renormalisation des spectres a été faite en bande K, en utilisant des mesures photométriques 2MASS de chaque objet.

Les Figures 4.4 et 4.5 montrent les spectres obtenus entre 0.32 et 2.5  $\mu\text{m}$ . Lors de l'extrac-

1. Mesure la turbulence atmosphérique. Correspond à la valeur de la largeur à mi-hauteur de la fonction d'étalement du point. Dans l'espace le *seeing*=0", il est satisfaisant quand il est <1".

2. Rapport entre la longueur du trajet dans l'atmosphère des rayons lumineux provenant de la source sur la longueur de ce trajet au zénith au niveau de la mer.

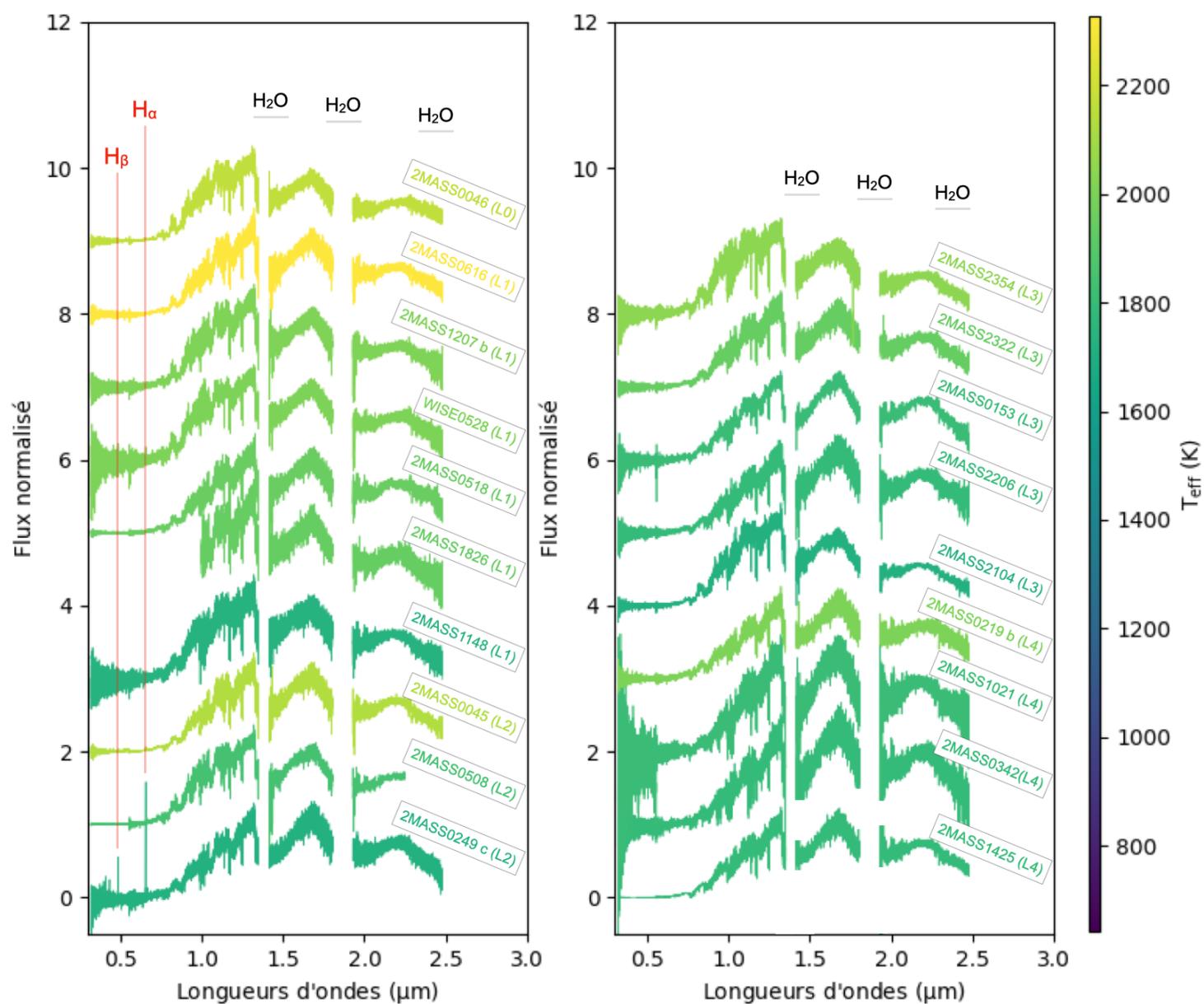


FIGURE 4.4 – Présentation des spectres X-Shyne (L0-L4).

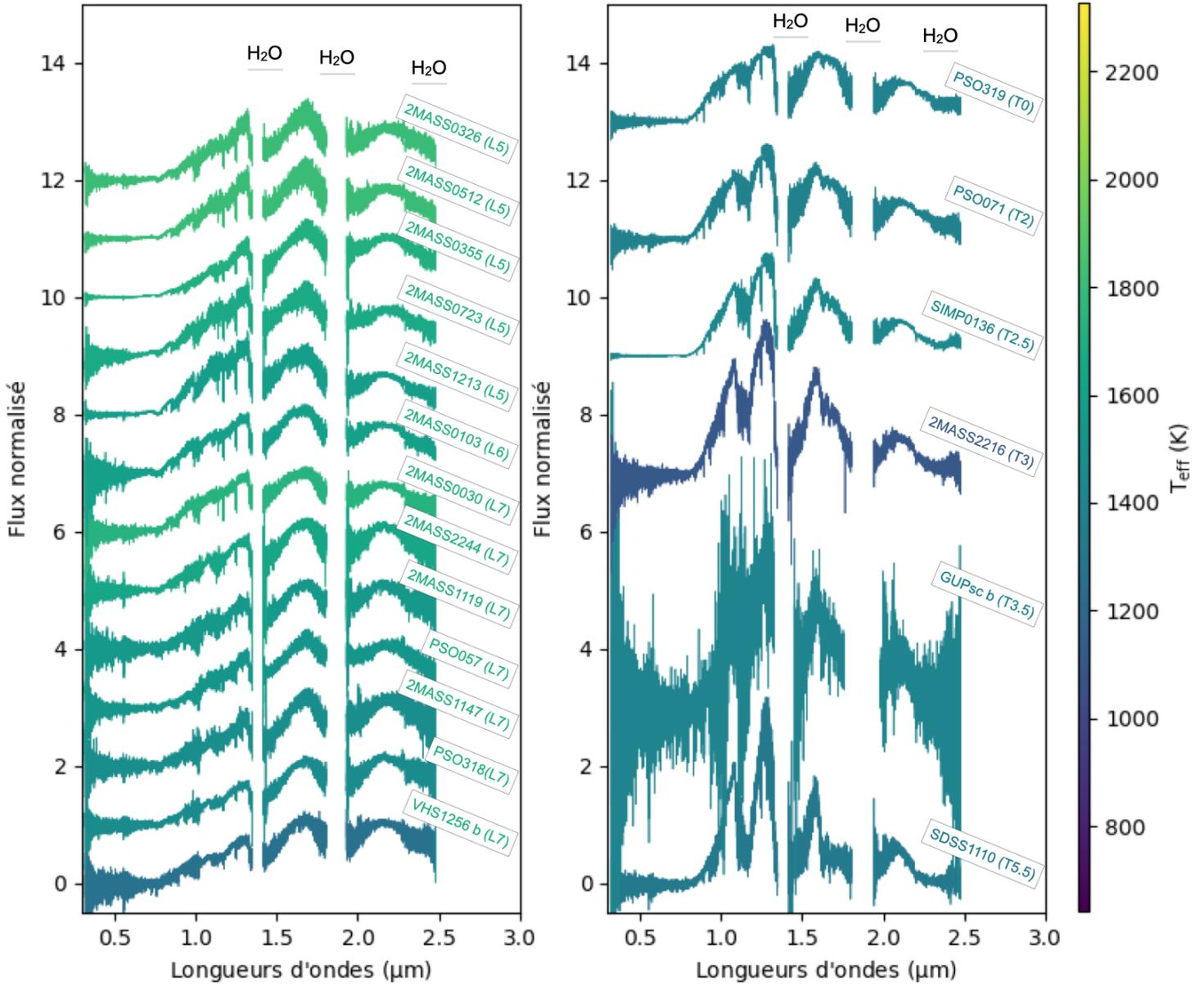


FIGURE 4.5 – Présentation des spectres X-Shyne (L5-T5.5).

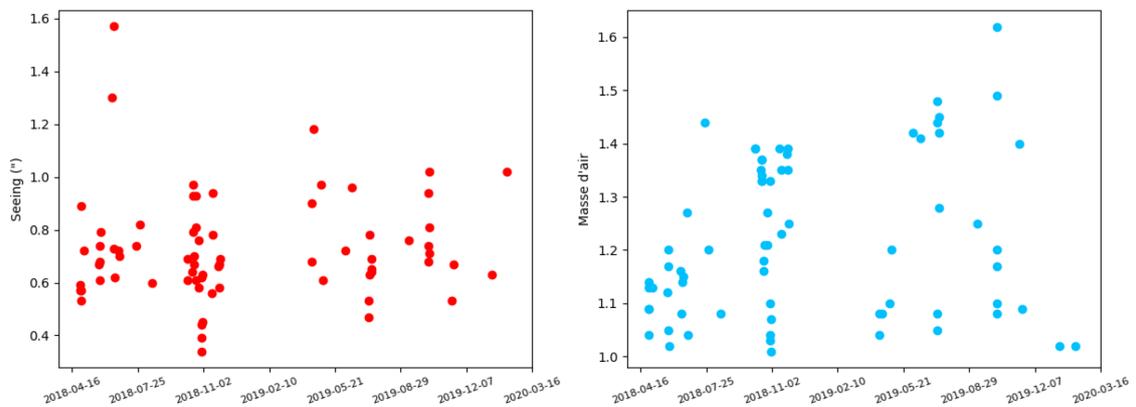


FIGURE 4.6 – Valeurs de seeing (à gauche) et de masse d'air (à droite) lors des observations des objets de la librairie X-Shyne.

tion avec la routine ESOflex, des problèmes sont apparus pour les sources 2MASS1826 et 2MASS0508, probablement dus à un mauvais traitement des ordres (identification et correction de la courbure). C'est pourquoi le spectre de 2MASS1826 est limité de 1.0 à 2.5  $\mu\text{m}$  et celui de 2MASS0508 est limité de 0.32 à 2.25  $\mu\text{m}$ . La grande majorité des mauvais pixels a bien été filtrée par ESOflex puis par la routine d'extraction développée pendant cette thèse, permettant l'acquisition de spectres de grande qualité. À des longueurs d'ondes  $< 0.55 \mu\text{m}$  (bras UVB de X-Shooter), le type spectral de nos objets engendre un flux quasi-nul et donc un rapport signal-bruit (SNR) proche de 0. En revanche, les SNR moyens des données recueillies avec le bras VIS (0.55-1.0  $\mu\text{m}$ ), et le bras NIR en bande J (1.0-1.36  $\mu\text{m}$ ), H (1.41-1.85  $\mu\text{m}$ ) et K (1.95-2.48  $\mu\text{m}$ ) sont de  $\sim 13$ ,  $\sim 89$ ,  $\sim 44$  et  $\sim 39$ , respectivement. Nos objets étant jeunes, la bande H présente une forme triangulaire typique sur tous les spectres et la forme du pseudo-continuum évolue avec le type spectral en raison de la modification de la couverture nuageuse en particulier à la transition L-T. Notons aussi que la raie d'émission  $H\alpha$  est détectée pour les objets 2MASS0249 c, 2MASS0045 et potentiellement pour 2MASS2354.

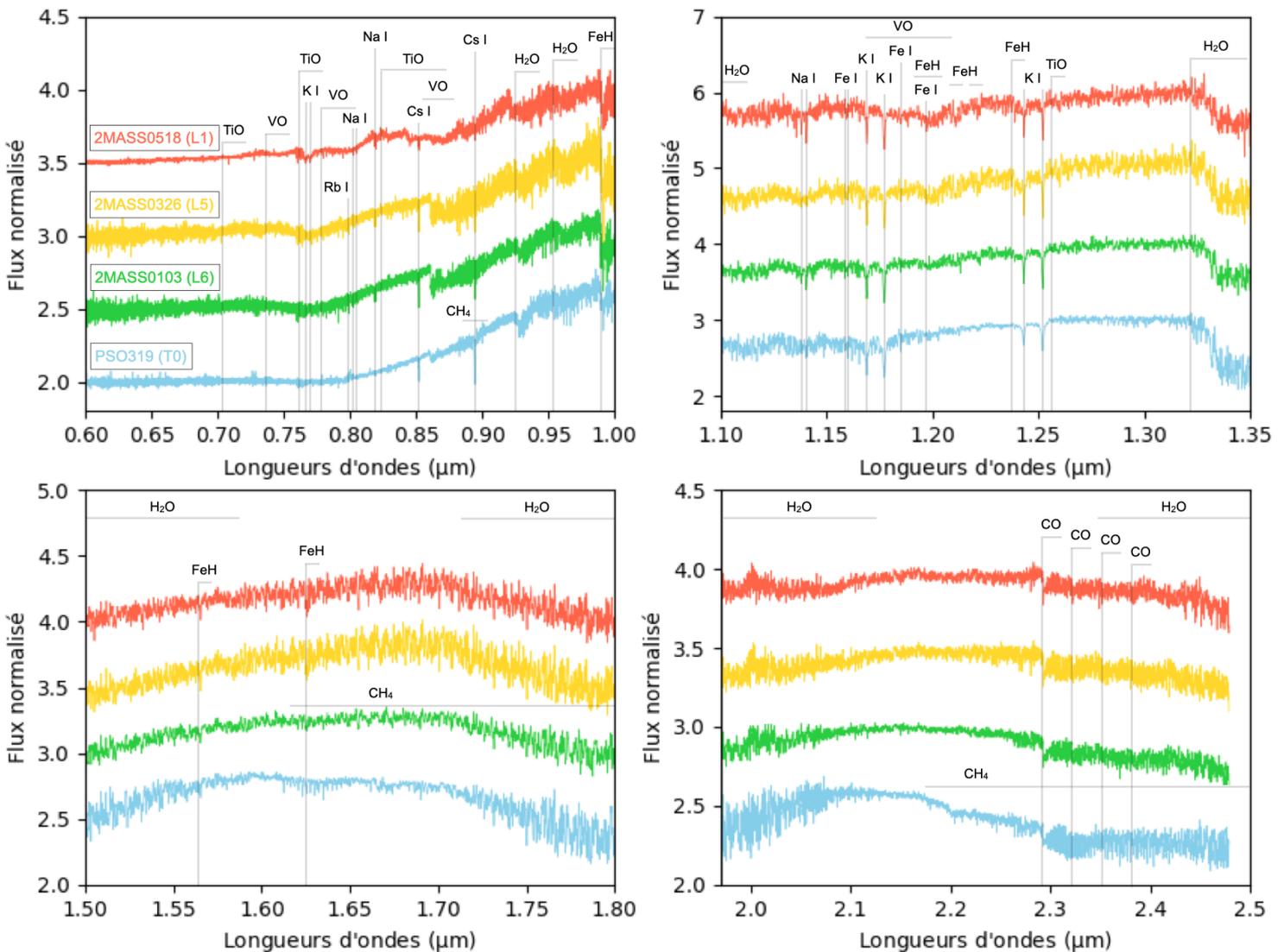


FIGURE 4.7 – Présentation des spectres X-Shyene. Des zooms ont été appliqués sur les spectres dans l'optique et les bandes J, H et K pour montrer leur richesse en matière d'absorptions atomiques et moléculaires.

Les Figures 4.7 et 4.8 illustrent une partie de la richesse des spectres permise à la résolution

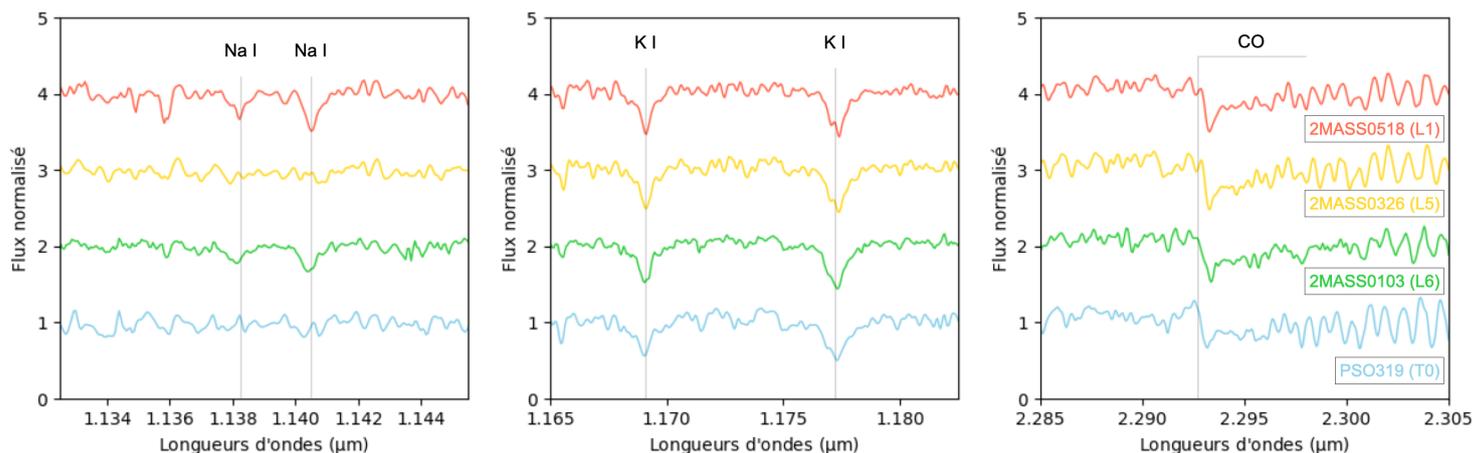


FIGURE 4.8 – *Présentation des spectres X-Shyne. Des zooms ont été appliqués sur les raies d’absorptions atomiques et moléculaires pour montrer que le profil des raies commence à être résolu aux résolutions de X-Shooter.*

de X-Shooter. De nombreuses raies d’absorption sont détectées (Rb I, Na I, Cs I, K I), ainsi que les absorptions moléculaires CO utilisées pour déterminer le rapport C/O. Nous retrouvons les tendances des propriétés spectrales en fonction du type spectral décrites dans la Section 1.3.2. Dans l’optique, le Sodium (Na I) disparaît après le type L8, tandis que le Rubidium (Rb I) et le Césium (Cs I) sont de plus en plus visibles pour les types spectraux les plus tardifs. Les absorptions de CO semblent aussi être plus profondes pour la T0 PSO319. La Figure 4.8 montre que le profil des raies d’absorption est accessible aux résolutions de X-Shooter. On peut voir le doublet fin du Potassium à  $\sim 1.178 \mu\text{m}$ , qui commence à être résolu.

## 4.4 Analyse empirique de la librairie X-Shyne

Comme nous l’avons vu dans le Chapitre 2, une première caractérisation classique de la librairie X-Shyne peut se faire empiriquement pour revisiter de manière homogène les types spectraux et les indices de gravité (indicateurs d’âge) des 38 sources du relevé. Ce travail permettra même d’étendre cette classification pour les types spectraux les plus tardifs aux âges jeunes. Dans un second temps, nous illustrerons l’intérêt de la librairie X-Shyne lors d’une étude comparative au premier ordre avec les jeunes exoplanètes imagées, motivant une analyse fine des propriétés physiques et de la composition atmosphérique à partir de modèles d’atmosphères.

### 4.4.1 Exploration des indices de gravité de surface des naines L aux naines T

Martin et al. (1996), Luhman et al. (1997) et Gorlova et al. (2003) montrèrent que certaines propriétés spectrales de l’infrarouge, comme CaH, K I, Na I et VO étaient fortement liées à la gravité de surface des naines M et L-précoces. McGovern et al. (2004) poursuivirent ce travail en identifiant de nouvelles raies d’absorption, dans l’optique, sensibles à la gravité, comme K I, Na I, Rb I et Cs I.

Dans leur étude de référence, Allers & Liu (2013) quantifièrent ces caractéristiques spectrales de l’optique et du proche infrarouge pour une gamme de types spectraux de M5 à L7. En comparant les spectres de naines brunes appartenant à des associations jeunes et des naines brunes du champ, ils observèrent à leur tour que les bandes du FeH (0.99, 1.20 et  $1.55 \mu\text{m}$ ), les raies Na I

(1.14 et 2.21  $\mu\text{m}$ ) et les raies du K I (1.17 et 1.25  $\mu\text{m}$ ) étaient plus faibles aux âges jeunes, tandis que la bande du VO (1.06  $\mu\text{m}$ ) était plus forte. Notons que ces molécules induisent également des absorptions à d'autres longueurs d'ondes, mais celles-ci sont mélangées avec d'autres absorptions moléculaires, ce qui biaise la pertinence de l'indice. Ils confirmèrent également la forme triangulaire de la bande H, typique des objets jeunes (Lucas et al., 2001). Ils développèrent ainsi des méthodes afin de calculer des indices représentatifs de ces propriétés, pouvant ensuite être comparés entre différents objets. La méthode de Allers & Liu (2013) est un puissant outil, il est donc normal que de nombreuses études l'aient utilisée pour estimer la gravité de surface des sources de leur librairie (Gagné et al. 2015a, Martin et al. 2017, Manjavacas et al. 2020). Cependant, pour les objets jeunes, ces échantillons sont limités aux naines L7 jeunes. Nous proposons donc ici une extension de cette classification empirique dans le domaine des jeunes naines L aux naines T précoces (<T5).

### Les indices de gravité de surface

Allers & Liu (2013) définirent quatre indices fondés sur les bandes d'absorption du VO à 1.06  $\mu\text{m}$  (noté VO<sub>Z</sub>), du doublet du K I à 1.25  $\mu\text{m}$  (noté K I<sub>J</sub>) et du FeH, pour lequel les deux bandes à 0.99  $\mu\text{m}$  (noté FeH<sub>Z</sub>) et 1.20  $\mu\text{m}$  (noté FeH<sub>J</sub>) ont été sondées. Ils les calculèrent selon la formule :

$$indice = \left( \frac{\lambda_{line} - \lambda_{cont1}}{\lambda_{cont2} - \lambda_{cont1}} \langle F_{con2} \rangle + \frac{\lambda_{cont2} - \lambda_{line}}{\lambda_{cont2} - \lambda_{cont1}} \langle F_{con1} \rangle \right) / \langle F_{line} \rangle \quad (4.1)$$

où  $\lambda_{line}$ ,  $\lambda_{cont1}$  et  $\lambda_{cont2}$  sont les longueurs d'ondes centrales des fenêtres spectrales définies pour la bande d'absorption, le continuum à gauche et le continuum à droite, respectivement.  $\langle F_{line} \rangle$ ,  $\langle F_{con1} \rangle$  et  $\langle F_{con2} \rangle$  sont les moyennes de flux dans ces fenêtres. Les erreurs de ces flux moyennés ont été calculées comme la différence entre le flux moyenné et le flux soustrait des erreurs moyennées. Les longueurs d'ondes centrales, ainsi que les largeurs des fenêtres choisies pour les différents indices, ont été optimisées pour des données à faible et moyenne résolution spectrale ( $R > 75$ ) et sont rappelées dans la Table 4.4.

TABLEAU 4.4 – Définition des fenêtres spectrales utilisées pour le calcul des indices de gravité. Issu de Allers & Liu (2013).

Indice	$\lambda_{raie}$ ( $\mu\text{m}$ )	$\lambda_{contgauche}$ ( $\mu\text{m}$ )	$\lambda_{contdroite}$ ( $\mu\text{m}$ )	Largeur ( $\mu\text{m}$ )
FeH <sub>Z</sub>	0.998	0.980	1.022	0.0133
VO <sub>Z</sub>	1.058	1.035	1.087	0.0141
FeH <sub>J</sub>	1.200	1.192	1.208	0.0024
K I <sub>J</sub>	1.244	1.220	1.270	0.0166
H <sub>cont</sub>	1.560	1.470	1.670	0.0208

La Figure 4.9 compare ces quatre indices calculés pour les objets de X-Shyne et ceux calculés pour un échantillon de naines du champ issues de la Montreal Spectral Library<sup>3</sup> (Gagné et al., 2015a). Cette librairie de référence regroupe des naines M5-T7 observées à moyenne résolution ( $R \sim 100-800$ ). Pour éclaircir cette figure et parce que les indices peuvent avoir de grandes barres d'erreur, nous avons choisi de ne montrer ici que les valeurs d'indices de la Montreal Spectral

3. [jgagneastro.com/the-montreal-spectral-library/](http://jgagneastro.com/the-montreal-spectral-library/)

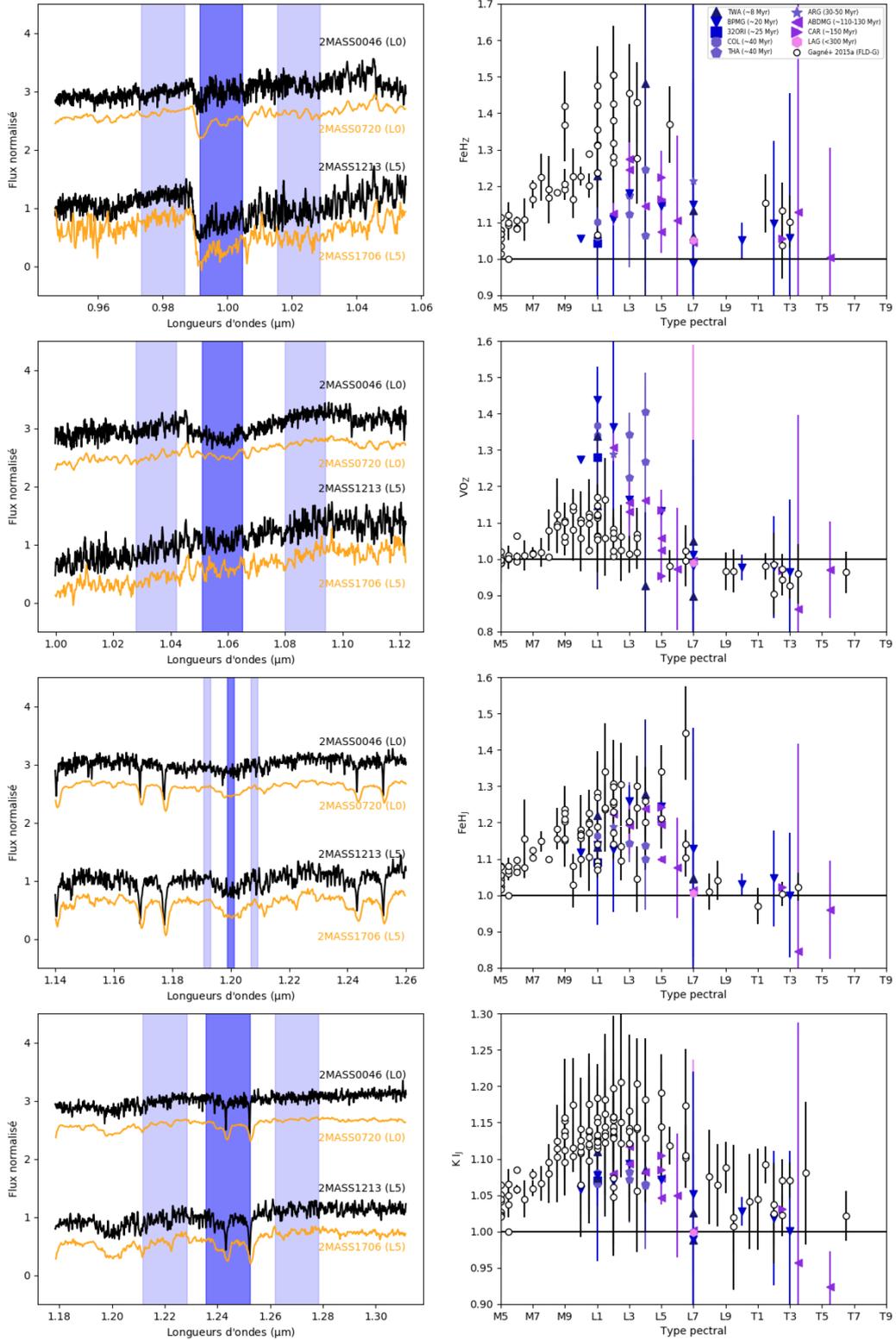


FIGURE 4.9 – À gauche : Fenêtres spectrales de la bande d'absorption moléculaire (bleu foncé) et du continuum (bleu clair) utilisées pour le calcul des indices de gravité. Des exemples de spectres X-Shyne sont donnés (en noir), ainsi que des spectres d'objets du champ (en orange) issus de la Montreal Spectral Library ( $R \sim 750$ ). À droite : Comparaison des indices de gravité calculés pour les objets de X-Shyne et de la Montreal Spectral Library. La ligne noire horizontale marque une valeur d'indice à 1, signifiant une absence de détection. De haut en bas : Indices  $FeH_Z$ ,  $VO_Z$ ,  $FeH_J$  et  $K_{I,J}$ .

Library ayant un rapport indice/erreur  $>10$ , en revanche tous les indices de X-Shyne sont représentés. Nous retrouvons les tendances identifiées dans les études précédentes. Les objets jeunes présentent des absorptions plus faibles de  $\text{FeH}_Z$  (pas de tendance claire pour le  $\text{FeH}_J$ ) et de  $\text{K I}_J$  que les objets du champ. Mais ces absorptions diminuent avec le type spectral (condensation en nuages) et finissent par disparaître après la transition L-T pour  $\text{K I}_J$  ( $\text{K I}_J = 1$ ). De faibles détections de  $\text{FeH}_Z$  sont encore permises pour les T-précoces. Comme attendu, le VO est un très bon indicateur de gravité jusqu'aux L4-L5 où il finit par disparaître ( $\text{VO}_Z = 1$ ).

En appliquant la méthode de Allers & Liu (2013) sur les objets de X-Shyne, nous avons confirmé le potentiel des indices atomiques et moléculaires pour tracer l'âge des objets sous-stellaires jusqu'aux L-tardives. Nous voyons, en revanche, que la sensibilité de ces indices à l'âge devient moins significative dans le domaine des naines T.

### La forme de la bande H

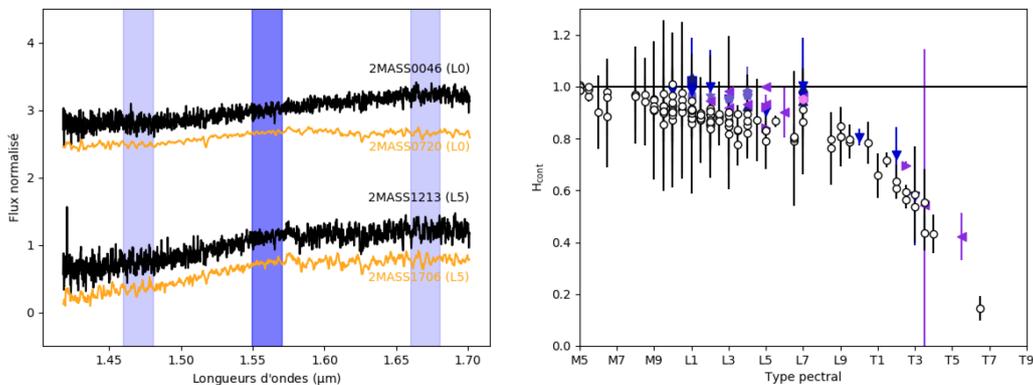


FIGURE 4.10 – Suite de la Figure 4.9 pour l'indice  $H_{cont}$ . La ligne noire horizontale marque une valeur d'indice à 1, signifiant, cette fois, que la pente côté bleu est parfaitement droite, et ainsi, que la forme de la bande H est triangulaire.

Un autre indice défini par Allers & Liu (2013) et couramment utilisé exploite la morphologie de la bande H. Aux âges jeunes, elle présente une forme triangulaire caractéristique, tandis que pour les objets plus âgés, son sommet s'aplatit et forme un plateau sous l'effet d'absorptions induites par collisions (collision induced absorption, CIA) de  $\text{FeH}$  et de  $\text{H}_2$ . Cet indice (noté  $H_{cont}$ ) est calculé de la même manière que pour les absorptions moléculaires. Les limites des différentes fenêtres sont détaillées dans la Table 4.4. À la différence des indices de gravité, celui-ci ne mesure pas la profondeur d'absorption mais bien la forme de la bande H, et en particulier si la pente du côté bleu est droite ( $H_{cont}=1$ ) ou coudée ( $H_{cont} < 1$ ).

La Figure 4.10 montre l'écart entre la valeur de cet indice pour les objets X-Shyne et celle pour les naines du champ de la Montreal Spectral Library (seuls les objets avec  $H_{cont}/\text{erreur} > 3$  sont montrés). Pour les objets du champ de types spectraux  $< \text{M6}$ ,  $H_{cont}=1$  puis diminue, traduisant la modification de la forme de la bande H, alors que pour les objets de X-Shyne, la diminution de  $H_{cont}$  n'arrive qu'à la transition L-T. Le "coude" à  $\sim 1.56 \mu\text{m}$ , caractéristique des objets du champ, est bien visible sur la Figure 4.10 (à gauche). Ainsi, nous confirmons que cet indice peut être utilisé pour distinguer les objets jeunes des objets du champ dans cette gamme de types spectraux. Cependant, la différence est moins marquée que pour les indices  $\text{FeH}_Z$  et  $\text{VO}_Z$ . Après la transition L-T, il semble que les objets jeunes aient un indice  $H_{cont}$  plus grand que les objets du champ, mais il est difficile de l'affirmer avec notre faible échantillon de T.

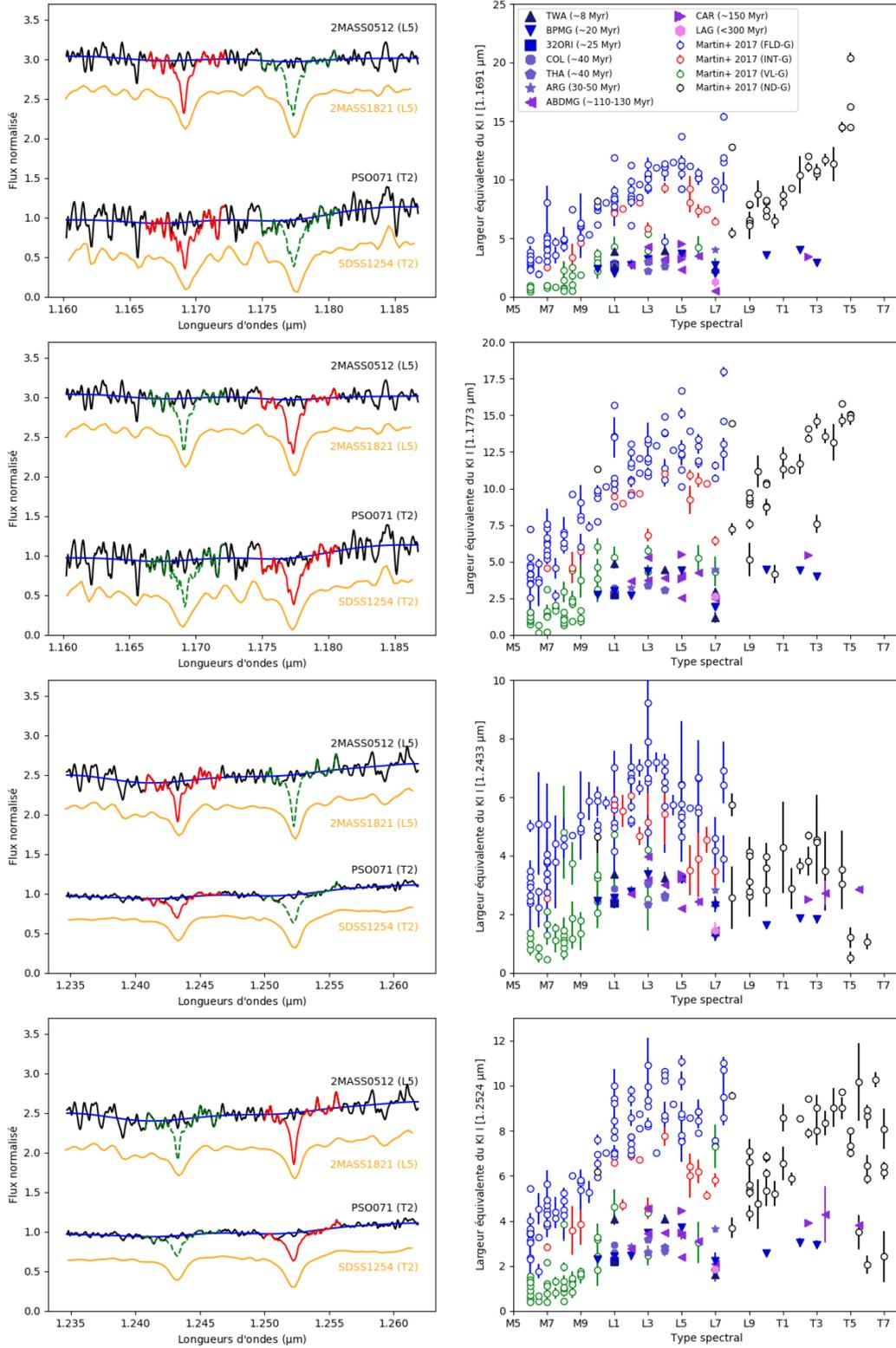


FIGURE 4.11 – À gauche : Illustration des étapes de calcul des largeurs équivalentes. Un ajustement Lorentzien sur les raies d'intérêt (en rouge) et voisines (en vert) est soustrait, pour ne garder que le pseudo-continuum (en noir), dont la résolution est ensuite réduite (en bleu) pour être utilisée lors du calcul des largeurs équivalentes. Des exemples de spectres X-Shyne sont donnés, ainsi que des spectres d'objets du champ (en orange) pour comparaison. À droite : Comparaison des largeurs équivalentes calculées pour les objets de X-Shyne et celles reportées de *Martin et al. (2017)*. Les points verts, rouges et bleus représentent les objets présentant des signes de faibles gravité (VL-G), ceux de gravité intermédiaires (INT-G) et les objets du champ (FLD-G), respectivement. De haut en bas : Raie du K I à 1.1692, 1.1778, 1.2437 et 1.2529  $\mu\text{m}$ .

### Les largeurs équivalentes des raies du potassium

Il a été montré que la gravité de surface était également corrélée avec la largeur équivalente de raies alcalines dans le NIR (Steele et al. 1995, Gorlova et al. 2003, Cushing et al. 2005, Allers & Liu 2013, Bonnefoy et al. 2014a, Manjavacas et al. 2020). La résolution de X-Shooter nous a permis de calculer les largeurs équivalentes des raies du potassium de l'échantillon X-Shyne que nous avons comparé aux largeurs équivalentes calculées pour les objets de l'échantillon de Martin et al. (2017) comprenant des naines brunes du champ, mais aussi des objets jeunes (faible gravité et gravité intermédiaire).

Pour calculer ces largeurs équivalentes, nous avons exploité la résolution de X-Shooter en suivant la procédure suivante. Les panneaux de gauche de la Figure 4.11 illustrent certaines étapes de ce calcul.

- La raie d'intérêt (en rouges dans les panneaux de gauche) est ajustée par une Lorentzienne, qui permet une meilleure reproduction des ailes de raies qu'une Gaussienne. Si le pic de cette Lorentzienne est inférieur à la déviation standard du continuum (défini par des fenêtres à droite et à gauche de la raie), la raie n'est pas détectée et la largeur équivalente n'est pas calculée. Dans le cas contraire, la position et l'écart-type de la Lorentzienne sont stockés.
- Afin de propager efficacement les erreurs du spectre à la largeur équivalente, celle-ci est calculée pour cent spectres, dont le flux à chaque longueur d'onde est généré aléatoirement avec une loi Gaussienne de moyenne la valeur du flux initial et d'écart-type son erreur.
- Pour chacun de ces spectres, une Lorentzienne est ajustée à la position de la raie (sa position et son écart-type sont fixés aux valeurs stockées plus haut). Si une autre raie se trouve dans le voisinage proche, ce qui est le cas pour les doublets du potassium (courbe verte), une autre Lorentzienne est ajustée sur cette raie voisine.
- Ces Lorentziennes sont soustraites au spectre (courbe noire), puis celui-ci est dégradé à une résolution  $R=250$ , ce qui est une bonne approximation du pseudo-continuum (courbe bleue).
- La largeur équivalente est ensuite calculée par :

$$\text{largeur équivalente} = \sum_{i=1}^n \left[ 1 - \frac{f(\lambda_i)}{f_c(\lambda_i)} \right] \Delta\lambda_i \quad (4.2)$$

avec  $f(\lambda_i)$  et  $f_c(\lambda_i)$  le flux de la raie (courbe rouge) et du pseudo-continuum (courbe bleue) pour chaque longueurs d'ondes  $i$ .  $\Delta\lambda_i$  est le pas en longueur d'onde.

- Une fois que la largeur équivalente a été estimée pour chacun des cent spectres, la moyenne et l'écart-type sont calculés pour donner la valeur finale, ainsi que son erreur.

Nous avons ainsi calculé les largeurs équivalentes des raies du K I à 1.1692, 1.1778, 1.2437 et 1.2529  $\mu\text{m}$  et les avons comparées dans les panneaux de droite de la Figure 4.11 à celles de Martin et al. (2017) ayant utilisé la méthode de Allers & Liu (2013) (optimisée pour des résolutions spectrales plus basses, ici  $R \sim 2000$ ). Notons que seules les valeurs de Martin et al. (2017), ayant un rapport largeur équivalente sur erreur  $> 2$  sont affichées.

Nous confirmons ici que les raies du K I sont d'excellents indicateurs de gravité. Les objets du champ semblent avoir des absorptions plus larges que les objets de faible gravité et de gravité intermédiaire (voir la courbe orange des panneaux de gauche). Les points X-Shyne, cohérents avec les objets de faible gravité de Martin et al. (2017), étendent cette tendance aux naines L-tardives et T, où la dichotomie persiste. L'évolution de ces largeurs équivalentes pour une gravité donnée augmente entre les M5 et les L4, puis diminue. Elle semble ensuite "rebondir" à la transition L-T, pour ré-augmenter le long de la séquence des T. Les objets du champ, comme les objets jeunes, suivent ce "rebond". Une interprétation possible est que l'apparition de bandes d'absorption du méthane entre 1.1 et 1.3  $\mu\text{m}$  après cette transition L-T biaise l'estimation de la profondeur des raies de K I, en la surestimant. Notons que certaines naines T de l'échantillon de Martin et al.

(2017) semblent présenter des largeurs équivalentes cohérentes avec celles de X-Shyne pour les raies du K I à 1.2524 et 1.2433  $\mu\text{m}$ , indiquant potentiellement un âge jeune pour ces objets de type T5-T7. Elles seraient très intéressantes à caractériser plus en détail pour confirmation.

### Les largeurs équivalentes des raies dans l'optique

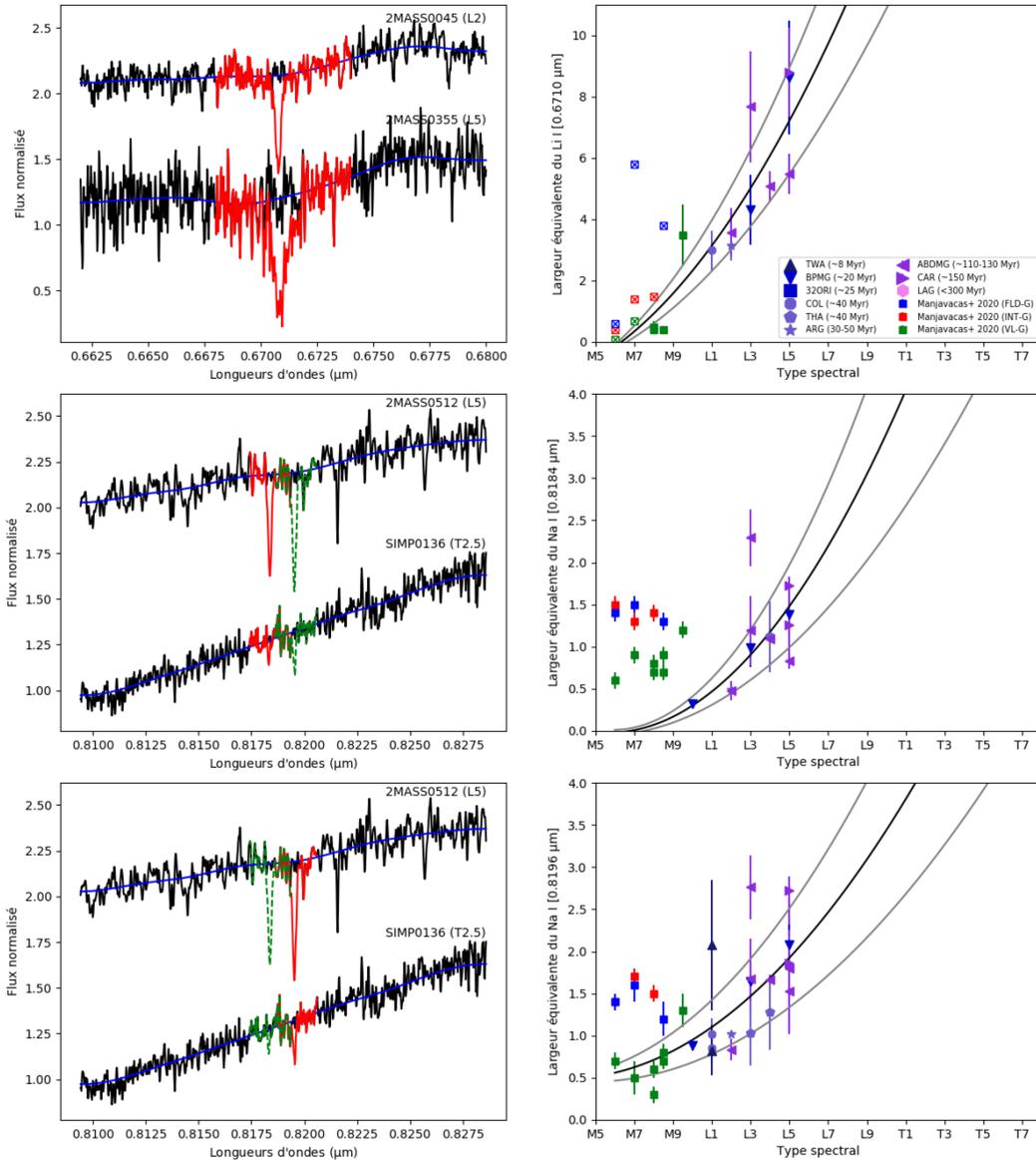


FIGURE 4.12 – Suite de la Figure 4.11. Les largeurs équivalentes reportées dans les figures de droite sont issues de [Manjavacas et al. \(2020\)](#). Les coefficients des ajustements de Legendre (lignes noires et grises à droite) sont donnés dans la Table 4.5. De haut en bas : Largeurs équivalentes des raies du Li I à 0.6710  $\mu\text{m}$ , Na I à 0.8184  $\mu\text{m}$ , Na I à 0.8196  $\mu\text{m}$ .

D'autres largeurs équivalentes peuvent être accessibles à plus basses longueurs d'ondes et ont été explorées dans les travaux de [Manjavacas et al. \(2020\)](#). En utilisant notre méthode, nous avons calculé les largeurs équivalentes des raies d'absorption Li I à 0.6710  $\mu\text{m}$ , Rb I à 0.7949  $\mu\text{m}$ , le doublet Na I à 0.8184 et 0.8196  $\mu\text{m}$  et Cs I à 0.8522  $\mu\text{m}$ . Les Figures 4.12 et 4.13 montrent ces largeurs équivalentes en fonction du type spectral, ainsi que celles calculées par [Manjavacas et al. \(2020\)](#) (<L0). Chacune de ces raies semble être dépendante du type spectral, nous avons ainsi cherché des relations empiriques décrivant ces tendances. Pour les raies Li I et le doublet du

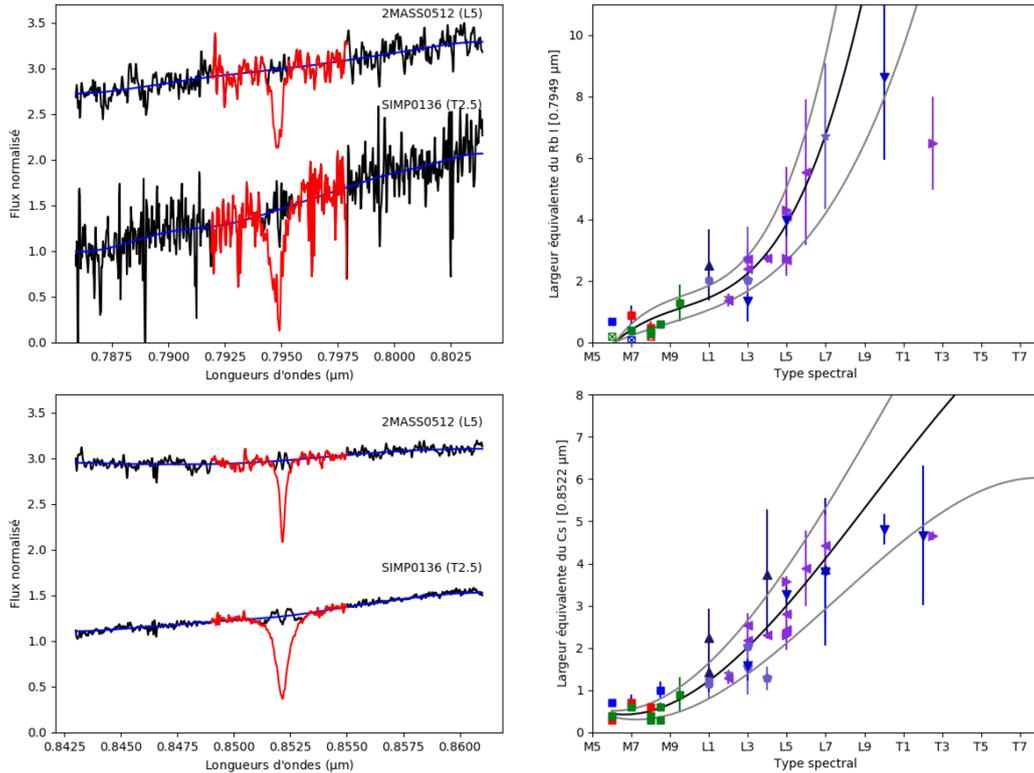


FIGURE 4.13 – Suite de la Figure 4.12. De haut en bas : Largeurs équivalentes des raies du Rb I à 0.7949  $\mu\text{m}$ , Cs I à 0.8522  $\mu\text{m}$ .

Na I, aucune détection n'a été faite au delà des L5, en raison d'un trop faible signal à bruit. En ajoutant à cet échantillon les valeurs de [Manjavacas et al. \(2020\)](#) (seulement les objets de faible gravité), nous avons ajusté sur ces points une série de Legendre d'ordre 2, qui semble bien décrire nos données, excepté pour la raie Na I à 0.8184  $\mu\text{m}$  pour laquelle il rentre en conflit avec les points de [Manjavacas et al. \(2020\)](#). Pour les raies du Cs I et du Rb I, des détections sont permises pour les naines T, et une série de Legendre d'ordre 3 a été ajusté pour reproduire la tendance entre leur largeur équivalente et le type spectral. La série de Legendre est rappelée par la Formule 4.3 où  $c_n$  et  $L_n$  sont le coefficients et le polynôme de Legendre à l'ordre  $n$  respectivement. Les coefficients utilisés sont reportés dans la Table 4.5. L'erreur sur ces coefficients correspond à la déviation standard des coefficients de mille ajustements avec des largeurs équivalentes, générées aléatoirement par une loi Gaussienne de moyenne la valeur des largeurs équivalentes initiales et d'écart-type leur erreur.

$$p(x) = \sum_n c_n \times L_n(x) \quad (4.3)$$

Ces raies semblent être des marqueurs de type spectral pour les naines M et L jeunes, mais le même exercice doit être fait pour les naines M et L du champ, pour savoir si elles sont aussi sensibles à la gravité (cela n'est pas observé avec l'échantillon X-Shyne). Des observations à plus grand signal à bruit permettraient également de fournir de nouvelles largeurs équivalentes pour affiner les ajustements dans les gammes des L-tardives et T.

#### 4.4.2 Les objets isolés de X-Shyne comme analogues planétaires

L'un des principaux atouts de la librairie X-Shyne est qu'elle couvre les propriétés physiques et atmosphériques (masse, température, âge) des planètes imagées (objets jeunes non-irradiés). On

TABLEAU 4.5 – Coefficients des ajustements de Legendre des largeurs équivalentes des raies de l'optique.

Raie	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	$c_0$	$c_1$	$c_2$	$c_3$
Li I	0.6710	$-1.47681 \pm 0.29074$	$-0.01749 \pm 0.01045$	$0.02657 \pm 0.00554$	-
Rb I	0.7949	$-9.74385 \pm 6.01739$	$2.95582 \pm 1.88469$	$-0.19049 \pm 0.12463$	$0.00398 \pm 0.00249$
Na I	0.8184	$0.54727 \pm 0.30458$	$-0.19741 \pm 0.08340$	$0.01155 \pm 0.00426$	-
Na I	0.8196	$0.62709 \pm 0.02261$	$-0.07556 \pm 0.00559$	$0.00721 \pm 0.00156$	-
Cs I	0.8522	$2.89457 \pm 0.06791$	$-0.79252 \pm 0.00145$	$0.04801 \pm 0.00217$	$-0.0005 \pm 2e-05$

peut donc s'attendre à ce que les objets de X-Shyne partagent des propriétés spectrales avec ces exoplanètes. Nous avons ainsi comparé nos spectres de naines brunes isolées avec les spectres à moyenne résolution obtenus pour HR 8799 c (OSIRIS,  $R \sim 4000$ ), AB Pic b (SINFONI,  $R \sim 5500$ ), HIP 65426 b (SINFONI,  $R \sim 5500$ ) et TYC 8998 b (SINFONI,  $R \sim 5500$ ), dont les propriétés sont résumées dans la Table 4.6.

TABLEAU 4.6 – Propriétés des compagnons planétaires imagés, comparés aux objets de X-Shyne. [1] Soummer et al. (2011), [2] Rajan et al. (2015), [3] Bonnefoy et al. (2016), [4] Nielsen et al. (2019), [5] Chauvin et al. (2005), [6] Bonnefoy et al. (2010), [7] Chauvin et al. (2017), [8] Petrus et al. (2021), [9] Bohn et al. (2020a), [10] Zhang et al. (2021a).

Nom	Assoc.	Type spec.	Masse ( $M_{\text{Jup}}$ )	$T_{\text{eff}}$ (K)	$\log(g)$ (dex)	C/O	Séparation (ua)	Ref.
HR 8799 b	COL	>L7	$8.3 \pm 0.6$	$1250 \pm 150$	$3.7 \pm 0.2$	-	$\sim 42.9$	1, 2, 3, 4
AB Pic b	BPMG	L1	$10 \pm 0.5$	$2000 \pm 150$	$4.0 \pm 0.5$	-	$\sim 275$	5, 6
HIP 65426 b	LCC	L6	$9.9 \pm 1.5$	$1560 \pm 100$	$< 4.40$	$< 0.55$	$110 \pm 50$	7, 8
TYC 8998 b	LCC	L0	$14.0 \pm 3$	$1727 \pm 150$	$3.91 \pm 1.0$	$0.52 \pm 0.04$	$\sim 162$	9, 10

Ces planètes étant jeunes ( $< 30$  Myr), nous avons sélectionné les objets jeunes ( $< 40$  Myr) de X-Shyne. Après avoir réduit la résolution des spectres X-SHYNE pour la faire correspondre aux spectres SINFONI, nous avons pu identifier le spectre X-Shyne le plus proche en utilisant une minimisation de  $\chi^2$ . Le spectre donnant le  $\chi^2$  réduit le plus faible pour chaque compagnon est montré dans la Figure 4.14. Les types spectraux des naines isolées sélectionnées sont cohérents avec celui de chaque planète. En effet, 2MASS0616 (L1) minimise le  $\chi^2$  pour les L0-L1 TYC 8998 b et AB Pic b, VHS1256 b (L7) minimise le  $\chi^2$  pour la L7 HR 8799 c et 2MASS0355 (L5) minimise le  $\chi^2$  pour la L6 HIP 65426 b.

La capacité des spectres X-Shyne à imiter les spectres de compagnons confirme qu'ils constituent de véritables analogues planétaires et motive leur comparaison systématique avec les spectres de compagnons planétaires.

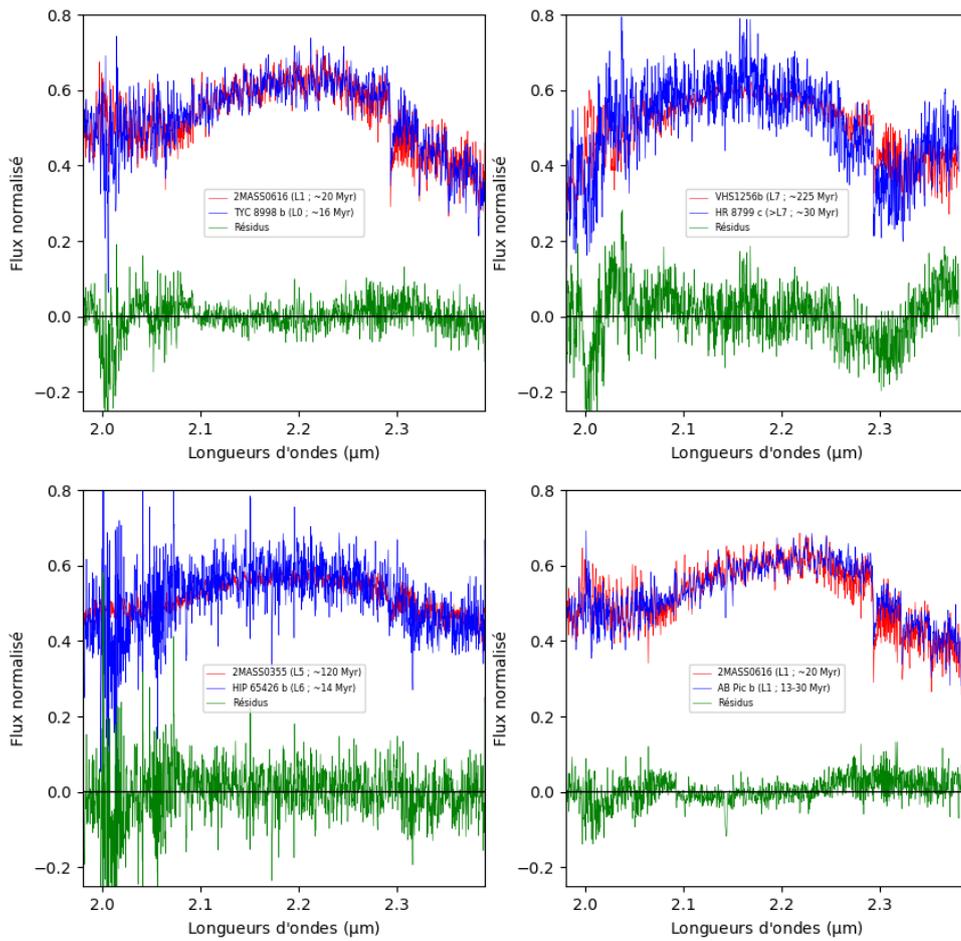


FIGURE 4.14 – Comparaison entre les spectres en bande K de TYC 8998 b (en haut à gauche), HR 8799 c (en haut à droite), HIP 65426 b (en bas à gauche) et AB Pic b (en bas à droite) et le spectre de X-Shyne qui minimise le  $\chi^2$ . La courbe verte représente les résidus entre ces deux spectres.

## 4.5 Analyse synthétique

L'utilisation de spectres synthétiques issus de modèles auto-consistants est, aujourd'hui, l'une des approches utilisées pour contraindre les propriétés atmosphériques des objets sous-stellaires jeunes (voir le Chapitre 2). Ces modèles calculent des grilles de spectres synthétiques dont le flux lumineux est généré, pour chaque jeu de paramètres défini par la grille, à l'aide d'hypothèses vraisemblables sur les processus physiques et chimiques en action dans ces atmosphères (équilibres chimiques, équilibre radiatif-convectif, physique gouvernant la formation de nuages, etc. Voir la Section 1.5.1). En premier lieu, la comparaison de ces grilles avec des observations s'est faite par minimisation de  $\chi^2$ , ou des approches similaires (Cushing et al. 2008, Manjavacas et al. 2014, Gagné et al. 2015a). Des méthodes statistiques, fondées sur l'analyse Bayésienne, ont ensuite été mises au point pour permettre d'identifier les corrélations entre les paramètres sondés par les grilles et obtenir des distributions statistiques de ces paramètres, afin de définir leurs erreurs (Rice et al., 2010), qui sont définies par le pas des grilles dans le cas d'une analyse par minimisation de  $\chi^2$ .

Dans cette section, nous appliquerons notre code de *forward modelling* ForMoSA (détaillé dans le Chapitre 2) sur chaque objet de la librairie X-Shyne. Nous verrons les limites, les premiers résultats et les perspectives de cette analyse, toujours en cours.

### 4.5.1 Entrées et configuration de ForMoSA

#### Les espaces de paramètres sondés

TABLEAU 4.7 – Dimensions des grilles de spectres synthétiques utilisées.  $\epsilon$  représente l'indice adiabatique.

Nom	$\lambda$ ( $\mu\text{m}$ )	$T_{eff}$ (K)	$\log(g)$ (dex)	[M/H] (dex)	C/O	$\epsilon$
BT-SETTL	[0.3, 15.0]	[1400, 2200]	[2.5, 5.0]	0.0 (fixe)	[0.2754, 1.096]	-
Exo-REM	[0.67, 251.6]	[400, 2000]	[3.0, 5.0]	[-0.5, 1.0]	[0.1, 0.8]	-
ATMO	[0.83, 1980.2]	[800, 3000]	[2.5, 5.5]	[-0.6, 0.6]	[0.3, 0.7]	[1.01, 1.05]

Dans cette étude, nous utiliserons trois grilles de spectres synthétiques. La physique et les hypothèses qu'ils utilisent sont détaillées dans la Section 1.5.1. Leurs dimensions et leurs couvertures spectrales sont données dans la Table 4.7. Notons que les modèles ATMO et Exo-REM ne couvrent pas entièrement la gamme de longueurs d'ondes des spectres X-Shyne dans l'optique. La résolution spectrale de ces grilles est représentée dans la Figure 4.15. Les modèles BT-SETTL ont une résolution spectrale supérieure à X-Shyne, ce qui permettra d'exploiter toute la diversité de ces spectres, alors que les Exo-REM ont une résolution légèrement inférieure à X-Shyne pour  $\lambda > 1.25 \mu\text{m}$ . En revanche, les modèles ATMO sont à basse résolution ( $R \sim 200-600$ ), ce qui ne permettra pas de sonder l'information à moyenne résolution spectrale (raies d'absorption atomiques et moléculaires). Bien que les dernières versions de ces modèles aient été utilisées pour l'analyse présentée ici, des versions à plus haute résolution des Exo-REM et des ATMO sont en cours de développement et seront disponibles pour l'analyse finale de la librairie X-Shyne.

Nous avons aussi contraint certaines propriétés physiques et dynamiques, dont les intervalles de valeurs explorées et les fonctions utilisées pour les calculer sont résumés dans la Table 4.8 (voir la Section 2.2.6 pour plus de détails).

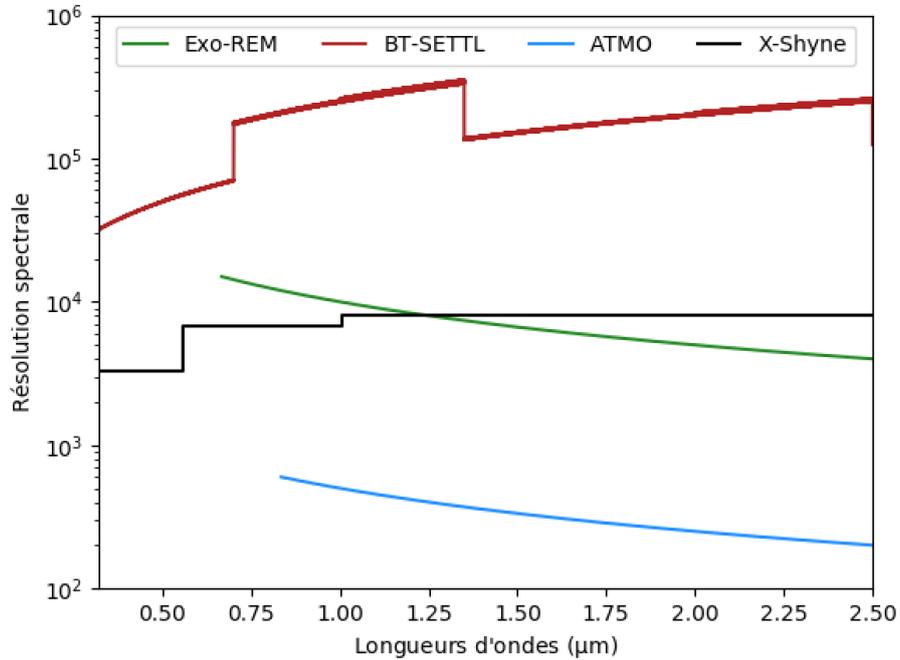


FIGURE 4.15 – Résolution spectrale des différentes grilles de spectres synthétiques en fonction de la longueur d'onde. La résolution des spectres X-Shooter utilisée est représentée en noir.

TABLEAU 4.8 – Paramètres hors-grilles explorés.

Nom	Notation	Intervalle	Fonction utilisée
Extinction	$A_V$ (mag)	-5.0 à 5.0	extinction.fm07
Rayon	R ( $R_{Jup}$ )	0.5 à 30.0	$C_K=(R/d)^2$ (avec d la distance)
Vitesse radiale	RV ( $km.s^{-1}$ )	-100.0 à 100.0	PyAstronomy.dopplerShift
Vitesse de rotation projetée	$v.\sin(i)$ ( $km.s^{-1}$ )	0.0 à 100.0	PyAstronomy.fastRotBroad
Assombrissement centre bord	$\epsilon$	0.01 à 0.99	PyAstronomy.fastRotBroad

### Configuration du *nested sampling*

Après avoir supprimé les spectres synthétiques déviant des grilles en suivant la procédure décrite dans la Section 2.2.2 nous avons appliqué ForMoSA à chacun des spectres de la librairie X-Shyue. Par souci de temps de calcul, nous avons limité le nombre de points vivants dans le *nested sampling* à  $n_{points}=150$  (la Figure 2.9 prévoit une qualité de distribution postérieure suffisante pour cette pré-analyse) et nous avons utilisé le critère d'arrêt *decline factor*=0.1, stoppant l'inversion lorsque, pour  $decline\ factor \times n_{points} = 0.1 \times 150 = 15$  itérations successives, l'augmentation de la vraisemblance est plus faible que la réduction du volume de *prior*.

### 4.5.2 Analyse des distributions postérieures

#### Commentaires sur les corrélations observées

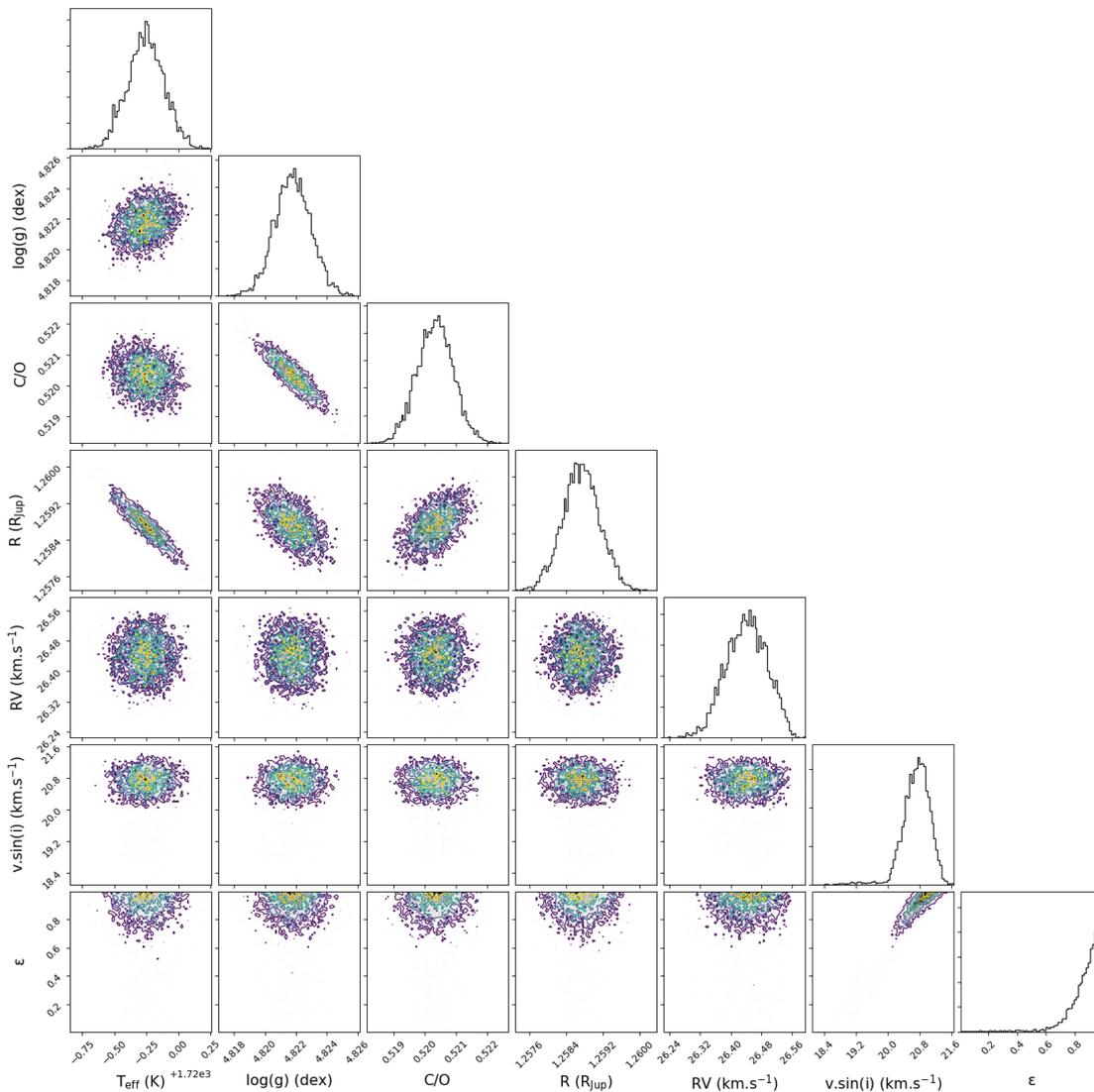


FIGURE 4.16 – Exemple de distributions postérieures pour tous les paramètres obtenus avec les modèles BT-SETTL. La source sélectionnée pour cet exemple est 2MASS0723.

Les Figures 4.16 et 4.17 donnent des exemples de distributions postérieures obtenues avec les grilles BT-SETTL et Exo-REM sur la naine L5 jeune 2MASS0723. L'un des intérêts de l'inversion Bayésienne est qu'il est possible de visualiser les corrélations entre les paramètres très facilement.

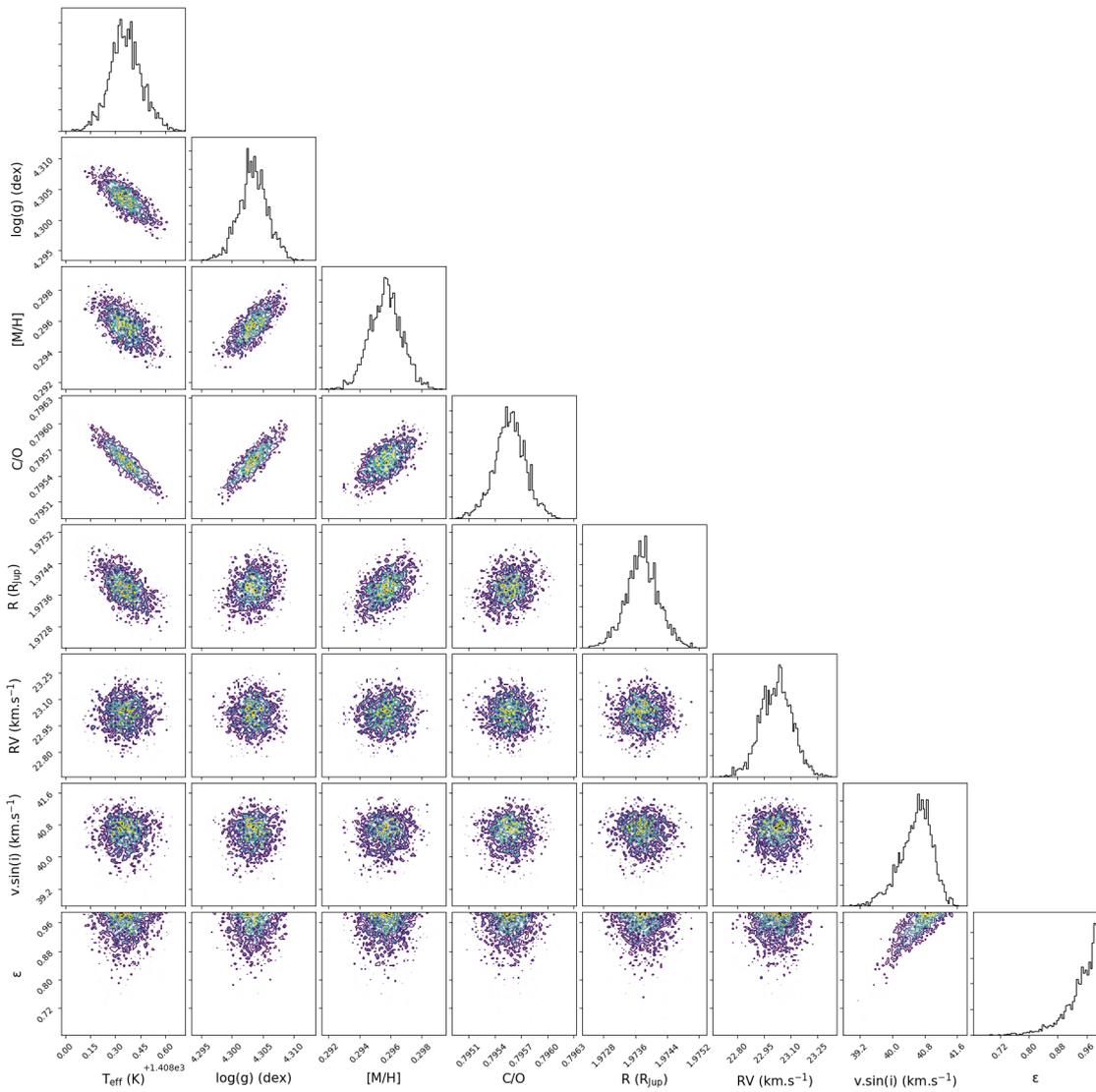


FIGURE 4.17 – Exemple de distributions postérieures pour tous les paramètres obtenus avec les modèles Exo-REM. La source sélectionnée pour cet exemple est 2MASS0723.

Dans le cas de la grille BT-SETTL (Figure 4.16), une forte anti-corrélation est visible entre la  $T_{\text{eff}}$  et le rayon, du fait de leur lien dans la loi de Stefan-Boltzmann. La luminosité étant constante, si la  $T_{\text{eff}}$  augmente, le rayon diminue. Cette diminution du rayon implique une augmentation du  $\log(g)$  (anti-corrélation visible). Avec la diminution de la gravité de surface, l'opacité de  $\text{H}_2\text{O}$  décroît plus vite que celle du CO (Mohanty et al., 2007). Ainsi, les bandes du CO apparaissent plus profondes à faible gravité, ce qui explique l'anti-corrélation  $\log(g)$ -C/O.

Contrairement aux modèles BT-SETTL, les modèles Exo-REM permettent d'explorer la métallicité au-delà des valeurs solaires (Figure 4.17). On voit alors apparaître une forte anti-corrélation  $[\text{M}/\text{H}]-T_{\text{eff}}$ , ainsi qu'une forte corrélation  $[\text{M}/\text{H}]-\log(g)$ , expliquées par la dégénérescence entre l'impact de la métallicité sur la pression atmosphérique (une faible  $[\text{M}/\text{H}]$  implique moins de condensats, donc une altitude sondée plus basse, et ainsi, une plus forte pression) et celle de la gravité de surface (une faible gravité implique une pression plus basse). La pression impactant l'opacité de  $\text{H}_2\text{O}$  et des absorptions par collisions de  $\text{H}_2$  qui sculptent la forme des bandes H et K (Mohanty et al., 2007), il est normal de détecter cette corrélation entre ces deux paramètres.

Pour l'ensemble des objets de X-Shyne, la distribution postérieure de l'assombrissement centre-bord  $\varepsilon$  n'est pas contrainte (ou est à la limite de la gamme de valeurs explorées). Pour cette analyse, nous avons choisi de le laisser libre, mais il serait intéressant de le fixer pour voir son impact sur la vitesse de rotation  $v \cdot \sin(i)$  et sur les autres paramètres. L'assombrissement centre-bord est de 1-2%, dans l'optique, pour le Soleil (Neckel & Labs, 1994).

### Estimation des propriétés physiques

Dans le cas de distributions mono-modales, comme c'est le cas de cette étude, l'estimation des propriétés physiques de nos objets à partir des distributions postérieures peut se faire en utilisant les quantiles statistiques (zones contenant un certain nombre de points). Nous avons choisi d'être le plus conservatif possible, en définissant les quantiles  $Q_1$  à 0.15%,  $Q_2$  à 0.5% et  $Q_3$  à 99.85%. Ainsi, la zone entre  $Q_1$  et  $Q_3$  contient 99.7% des points générés par le *nested sampling* (la valeur du paramètre considéré pour cette source a 99.7% de chances de se trouver dans cette zone, en faisant l'hypothèse que le modèle reproduit parfaitement le spectre). À partir de ces quantiles, nous avons défini la barre d'erreur inférieure  $\sigma_{\text{inf}}$  comme  $Q_2-Q_1$  et supérieure  $\sigma_{\text{sup}}$  comme  $Q_3-Q_2$ .

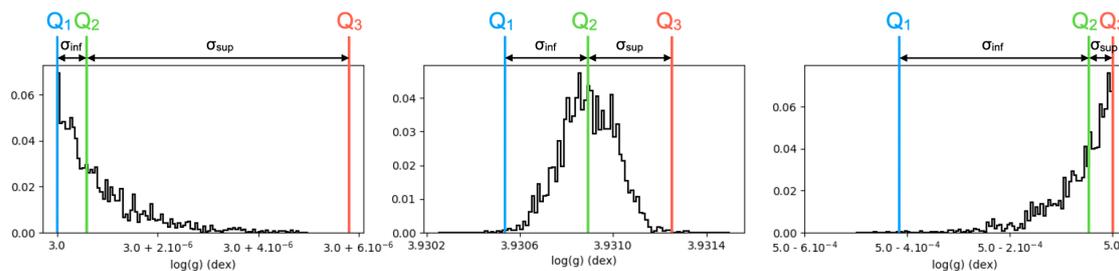


FIGURE 4.18 – Exemples de distributions postérieures de la gravité de surface obtenues avec la grille Exo-REM. Les quantiles à 0.15%, 0.5% et 99.85% calculés pour ces distributions sont représentés par les lignes verticales bleues, vertes et rouges respectivement.

La Figure 4.18 montre trois distributions postérieures types obtenues avec ForMoSA. Les lignes verticales bleue, verte et rouge représentent les valeurs des quantiles  $Q_1$ ,  $Q_2$  et  $Q_3$  respectivement, calculées pour ces distributions. L'espace des paramètres étant limité par le choix des distributions a priori, il peut arriver que des distributions postérieures soient en bord de grille, comme c'est le cas à gauche et à droite de la Figure 4.18. Les quantiles deviennent alors inutilisables pour définir une valeur moyenne ou des barres d'erreur. Pour faire face à cette situation, nous avons mis en place un test :

- SI  $Q_2 - \sigma_{\text{sup}}$  est plus petit que la limite inférieure de la distribution a priori définie pour ce

paramètre, alors une borne supérieure correspondant à cette limite inférieure sera attribuée au paramètre (fenêtre de gauche de la Figure 4.18).

- SI  $Q_2 + \sigma_{inf}$  est plus grand que la limite supérieure de la distribution a priori définie pour ce paramètre, alors une borne inférieure correspondant à cette limite supérieure sera attribuée au paramètre (fenêtre de droite de la Figure 4.18).
- SINON, la valeur du paramètre sera définie comme  $Q_2 \begin{smallmatrix} +\sigma_{sup} \\ -\sigma_{inf} \end{smallmatrix}$  (fenêtre centrale de la Figure 4.18).

Comme le montre la Figure 4.18, qui concerne ici des distributions postérieures de la gravité de surface pour trois objets X-Shyne, les barres d'erreur sont très petites. Cela résulte du haut signal à bruit de l'instrument X-Shooter, qui permet de définir de petites barres d'erreur sur nos spectres, qui sont ensuite propagées à travers l'inversion Bayésienne (erreurs statistiques). Mais cela ne vaut que si les modèles reproduisent parfaitement les spectres. Nous verrons dans la suite de cette section que ce n'est pas le cas, et que cette méthode pour estimer les barres d'erreur n'est pas réaliste.

### 4.5.3 Premiers résultats : utilisation de l'ensemble de l'intervalle spectral

Les Figures 4.19 et 4.20 montrent les ajustements de WISE0528 (L1), 2MASS2322 (L3 $\gamma$ ), 2MASS0355 (L5 $\gamma$ ) et PSO071 (T2) avec les trois grilles de spectres synthétiques ATMO (en bleu), Exo-REM (en vert) et BT-SETTL (en rouge). Des zooms du doublet du K I à  $\sim 1.25 \mu\text{m}$  et de l'absorption du CO à  $\sim 2.3 \mu\text{m}$  sont également représentés pour visualiser l'ajustement sur ces zones qui impactent fortement l'estimation de la gravité de surface et du rapport C/O.

Plusieurs observations peuvent être faites avec ces quatre exemples, représentatifs des types spectraux de l'échantillon X-Shyne.

- Des absorptions moléculaires dans l'optique et la bande J ne sont pas bien reproduites (TiO à  $0.8432 \mu\text{m}$ , FeH à  $0.8692 \mu\text{m}$ , VO à  $0.74$  et  $0.79 \mu\text{m}$ ) pour ces trois modèles.
- L'information à basse résolution semble être correctement reproduite par les modèles ATMO, qui peinent cependant à donner des  $T_{\text{eff}}$  cohérentes avec le type spectral après la transition L-T (difficulté à reproduire les absorptions de méthane pour PSO071).
- Les modèles Exo-REM ne reproduisent pas les spectres des L précoces (limite de la grille à 2000 K). Les L intermédiaires et tardives sont en revanche mieux reproduites, bien que la forme des bandes H et K présente des problèmes, notamment avec les absorptions de  $\text{H}_2$  et  $\text{H}_2\text{O}$ , qui ne sculptent pas correctement les pentes de ces bandes. Les T ne sont pas bien reproduites, en particulier les absorptions de méthane dans les bandes H et K.
- Pour les L précoces, les modèles BT-SETTL présentent le même effet de pente que celui décrit dans Petrus et al. (2020) (naines M-tardives). L'ajustement est principalement piloté par le spectre à  $\lambda < 1.3 \mu\text{m}$  (plus de points dans le spectre, donc plus de poids dans le calcul de la vraisemblance), et un décrochage est visible entre le modèle et le spectre observé en bande K. De même que pour les Exo-REM, ils décrivent bien le pseudo-continuum des L intermédiaires et tardives (L4-L7 dans notre échantillon), mais peinent à reproduire les absorptions de méthane propres aux objets T (limites de la grille à 1400 K).
- Bien que les modèles BT-SETTL et Exo-REM semblent reproduire correctement le pseudo-continuum des naines L intermédiaires et tardives, les  $T_{\text{eff}}$  qu'ils permettent d'estimer diffèrent de plusieurs centaines de degrés Kelvin.
- Les raies du K I et les absorptions de CO ne sont généralement pas bien reproduites, et induisent des valeurs de gravité de surface et de rapport C/O très différentes entre modèles et généralement non-physiques par rapport aux prédictions des modèles de structure.

Ces quatre exemples illustrent la difficulté qu'ont les modèles à reproduire la complexité des spectres observés sur une large gamme de longueurs d'ondes. Les paramètres estimés ne sont

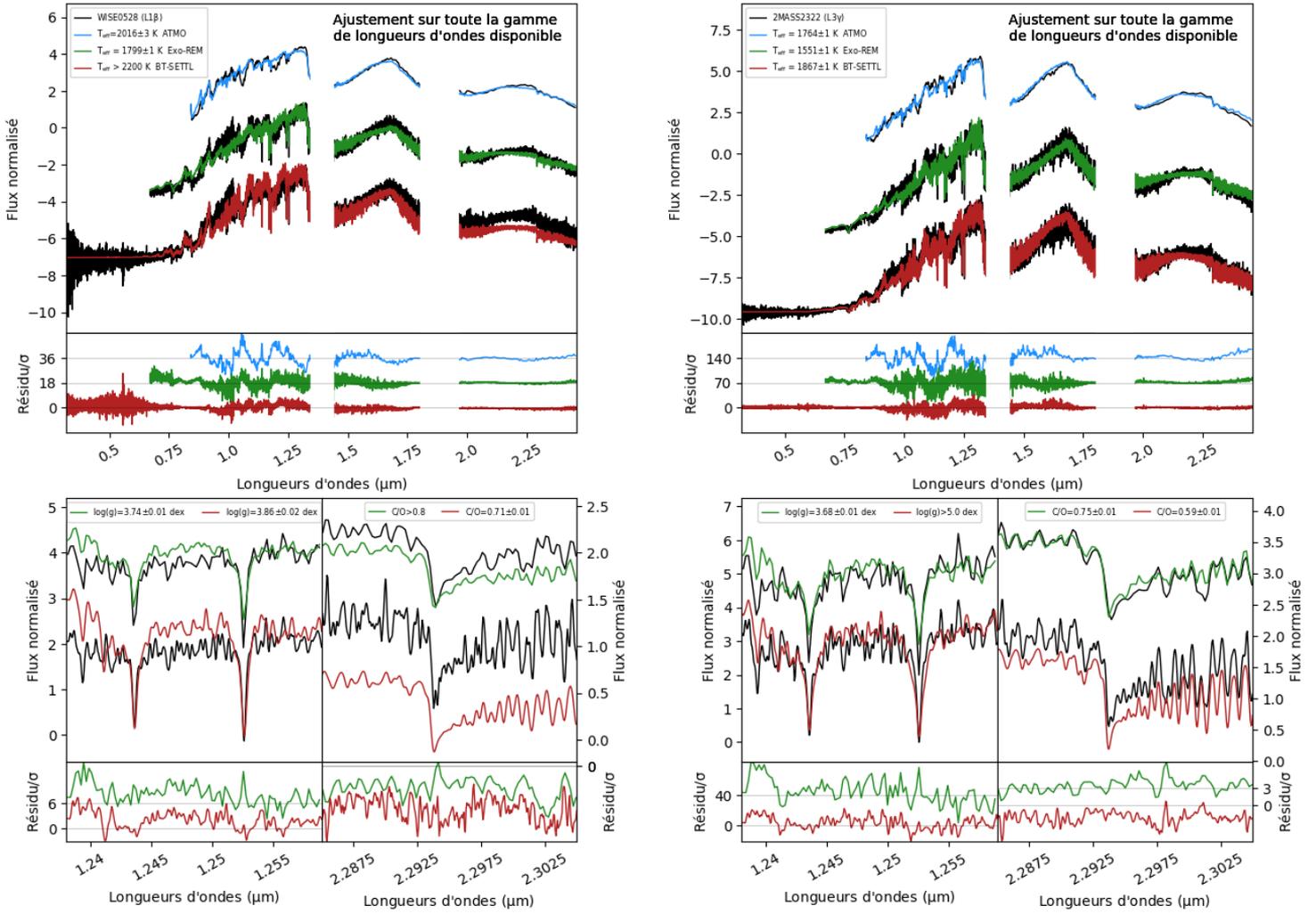


FIGURE 4.19 – Comparaison des ajustements avec les modèles ATMO (bleu), Exo-REM (vert) et BT-SETTL (rouge) sur la L1β WISE0528 (à gauche) et la L3γ 2MASS 2322 (à droite), en utilisant l'ensemble de la couverture spectrale de X-Shooter. Des zooms, centrés sur le doublet du K I ( $\sim 1.25 \mu\text{m}$ ) et sur l'absorption du CO ( $\sim 2.3 \mu\text{m}$ ), sont présentés (en bas) pour montrer la difficulté qu'ont les modèles à reproduire l'ensemble de l'information spectrale.

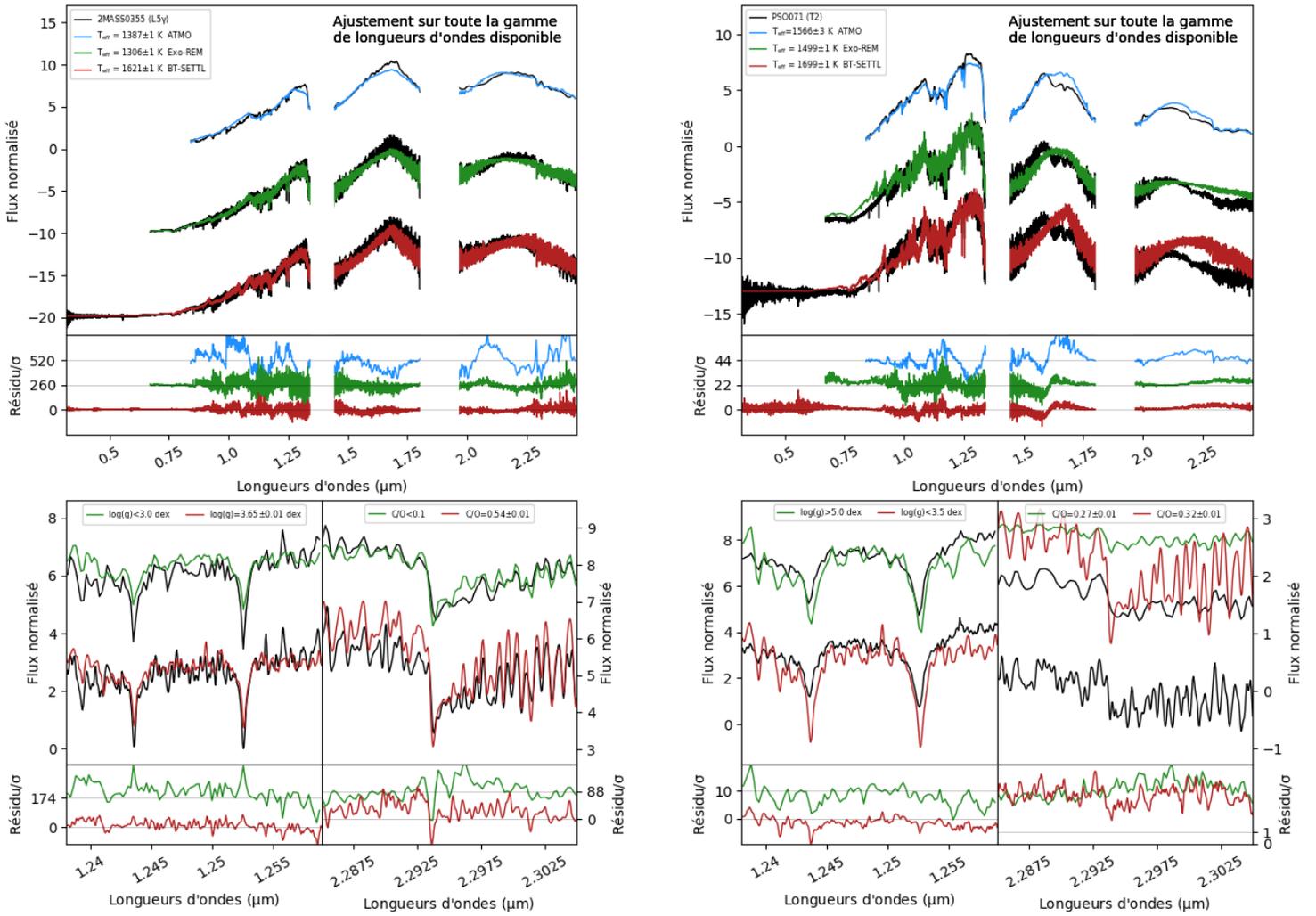


FIGURE 4.20 – Suite de la Figure 4.19 pour la L5 $\gamma$  2MASS0355 (à gauche) et la T2 PSO071 (à droite).

pas cohérents d'un modèle à l'autre et bien que les ajustements semblent visuellement bons, ces paramètres sont souvent non-physiques (exemples avec 2MASS2322, où de l'absorption de CO est bien reproduite par les Exo-REM mais donne un rapport C/O=0.75 ; ou le doublet de KI bien reproduit par les BT-SETTL pour un  $\log(g)>5$  dex). Des problèmes similaires avaient déjà été identifiés pour les objets L précoces dans les versions 2010 et 2013 des BT-SETTL (Manjavacas et al., 2014) et pour les M tardives (Bayo et al. 2017, Petrus et al. 2020).

Cet examen nous a poussé à revoir notre stratégie d'analyse synthétique, afin de limiter les erreurs systématiques des modèles apparaissant lors de l'utilisation d'un grand intervalle spectral pour l'ajustement.

#### 4.5.4 Sélection de fenêtres spectrales pour les ajustements

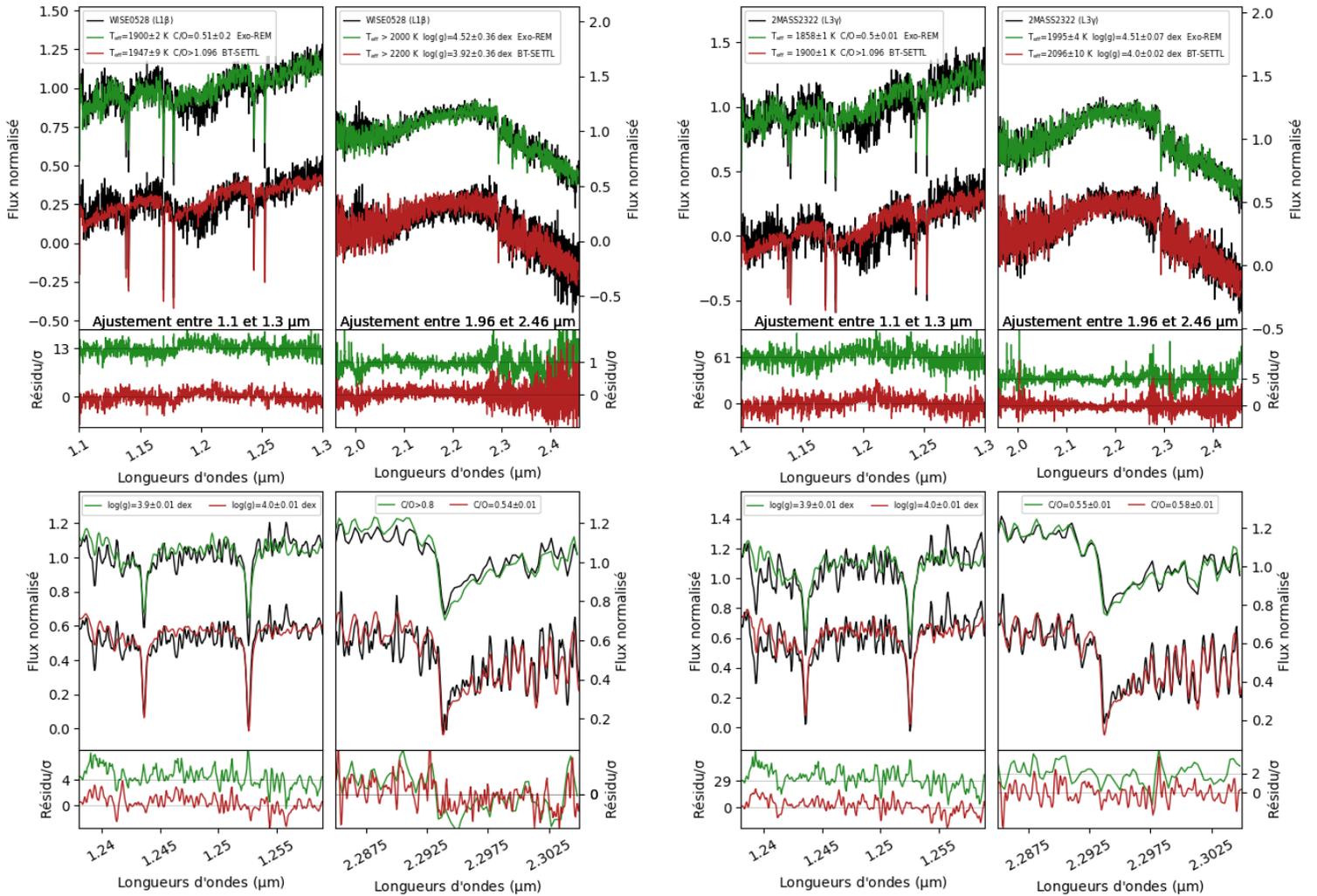


FIGURE 4.21 – Suite de la Figure 4.19. Deux ajustements sont présentés ici, l'un (à gauche), centré sur les absorptions du K I et du Na I (1.1-1.3 μm) et l'autre (à droite), centré sur les absorptions du CO (2.0-2.5 μm).

Nous avons suivi la méthode décrite dans Petrus et al. (2020) en sélectionnant des bandes spectrales sensibles à un ou plusieurs paramètres visés.

D'une part, les doublets du K I et celui de Na I comptent parmi les absorptions atomiques les mieux détectées. La Figure 4.8 montre que certains doublets plus fins commencent même à être résolus à la résolution de X-Shooter. Comme le montre la Section 4.4.1 et plus particulièrement la

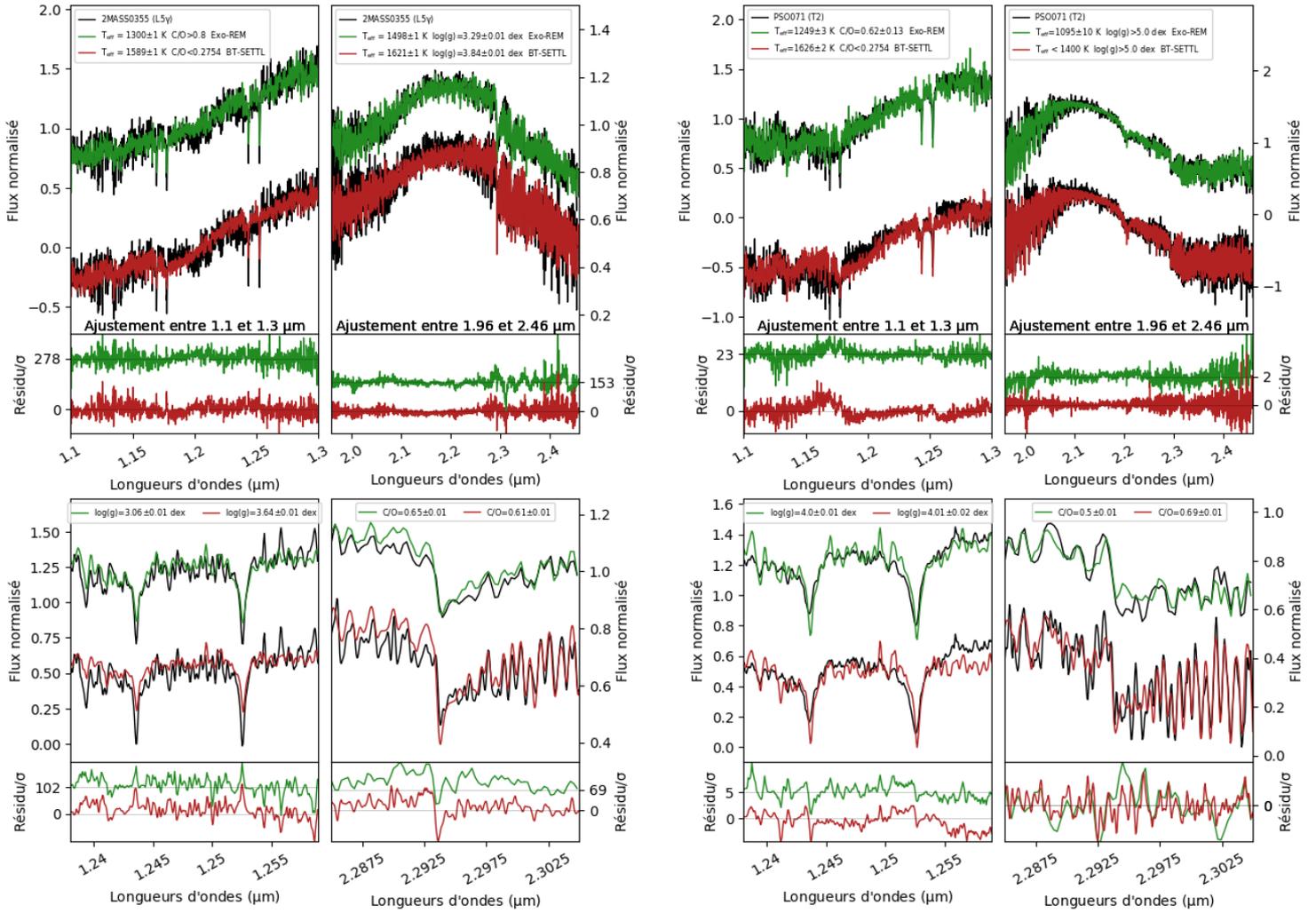


FIGURE 4.22 – Suite de la Figure 4.21 pour la L5 $\gamma$  2MASS0355 (à gauche) et la T2 PSO071 (à droite).

Figure 4.11, ces raies sont fortement corrélées avec la gravité (l'âge). Elles semblent donc toutes indiquées pour estimer le  $\log(g)$  et la métallicité, qui est anti-corrélée avec le  $\log(g)$ , par inversion Bayésienne des modèles d'atmosphères.

D'autre part, la bande K rassemble de nombreuses absorptions du CO (voir la Figure 4.7), qui est une observable clé pour estimer le rapport C/O. La métallicité et le  $\log(g)$  influencent tous deux la forme de la bande K en pilotant la force des larges absorptions de H<sub>2</sub>O, de H<sub>2</sub>, et de CH<sub>4</sub> pour les naines T.

Nous avons ainsi défini deux fenêtres spectrales entre 1.1 et 1.3  $\mu\text{m}$  pour ajuster les propriétés des raies de KI et du Na I, et entre 2.0 et 2.5  $\mu\text{m}$  pour ajuster celles des absorptions de CO. Lors du calcul de la vraisemblance, seules les longueurs d'ondes à l'intérieur de ces fenêtres sont considérées. Les modèles ATMO, à faible résolution, n'ont pas été utilisés ici. Les Figures 4.21 et 4.22 présentent ces ajustements pour les mêmes objets et les mêmes encarts (panneaux en bas) que ceux des Figures 4.19 et 4.20. En se limitant à des fenêtres de longueurs d'ondes plus restreintes, les ajustements semblent de bien meilleure qualité. Les raies du K I sont mieux reproduites, mais dans certains cas, les modèles échouent à reproduire complètement la profondeur de ces raies, biaisant ainsi l'estimation de la gravité de surface. La bande K, en revanche, est mieux reproduite, ainsi que l'absorption de CO à 2.3  $\mu\text{m}$ .

#### 4.5.5 Discussion des paramètres estimés

Nous avons appliqué ForMoSA en utilisant chacune des configurations spectrales définies à la section précédente (spectre complet, fenêtre centrée sur les absorptions de K I et Na I, et fenêtre centrée sur les absorptions de CO) pour tous les objets X-Shyne. De plus, afin d'explorer l'impact de l'information à basse résolution (pseudo-continuum, larges absorptions moléculaires, etc.), nous avons estimé les propriétés physiques des objets pour chaque configuration, après avoir soustrait le continuum selon la méthode décrite dans la Section 2.2.3. Les résultats de ces ajustements sont tous décrits dans l'Annexe B. Ce travail est actuellement en cours. Certaines inversions n'ayant pas encore convergé et la richesse des paramètres estimés exigeant une analyse poussée, seuls quelques résultats préliminaires seront présentés ici.

#### Température effective

En utilisant des données spectroscopiques et photométriques dans l'optique, le NIR et le MIR de 53 jeunes naines M tardives, L et T ainsi que 145 objets du champ de types spectraux équivalents, [Filippazzo et al. \(2015\)](#) proposèrent une méthode semi-empirique pour estimer les paramètres atmosphériques de ces objets en s'affranchissant des modèles d'atmosphères. Ils calculèrent la luminosité bolométrique de leur échantillon, puis utilisèrent des modèles évolutifs (SMHC08 [Saumon & Marley 2008](#), DUSTY00 [Chabrier et al. 2000](#), COND03 [Baraffe et al. 2003](#)) pour estimer le rayon et la masse. À partir de leur luminosité bolométrique et de leur rayon, ils calculèrent la  $T_{\text{eff}}$  pour tous leurs objets, à l'aide de la loi de Stefan-Boltzmann.

La Figure 4.23 est issue de leurs travaux et montre l'évolution de la  $T_{\text{eff}}$  avec le type spectral. La ligne noire représente l'ajustement de leur échantillon de naines du champ avec un polynôme d'ordre 6. Ils observèrent que les naines jeunes semblent plus froides que les naines plus âgées de types spectraux équivalents. Nous avons rapporté sur cette figure les valeurs de  $T_{\text{eff}}$  estimées pour X-Shyne avec ForMoSA, en utilisant les grilles de modèles ATMO, Exo-REM et BT-SETTL. Nous avons également ajouté l'extinction  $A_V$  comme paramètre libre en utilisant les BT-SETTL lors d'un ajustement à part, afin de tenter de corriger artificiellement les problèmes de pentes, soupçonnés d'être causés par une mauvaise reproduction de la poussière dans l'atmosphère. Les valeurs de  $T_{\text{eff}}$  ainsi estimées avec ces grilles de modèles sont cohérentes avec la relation de [Filippazzo et al. \(2015\)](#). Mais cette comparaison présente des limites. En effet, les résultats de [Filippazzo et al. \(2015\)](#), bien qu'indépendants des modèles d'atmosphères, sont directement obtenus via les modèles évolutifs. Le choix du modèle utilisé peut induire des différences de rayons allant jusqu'à

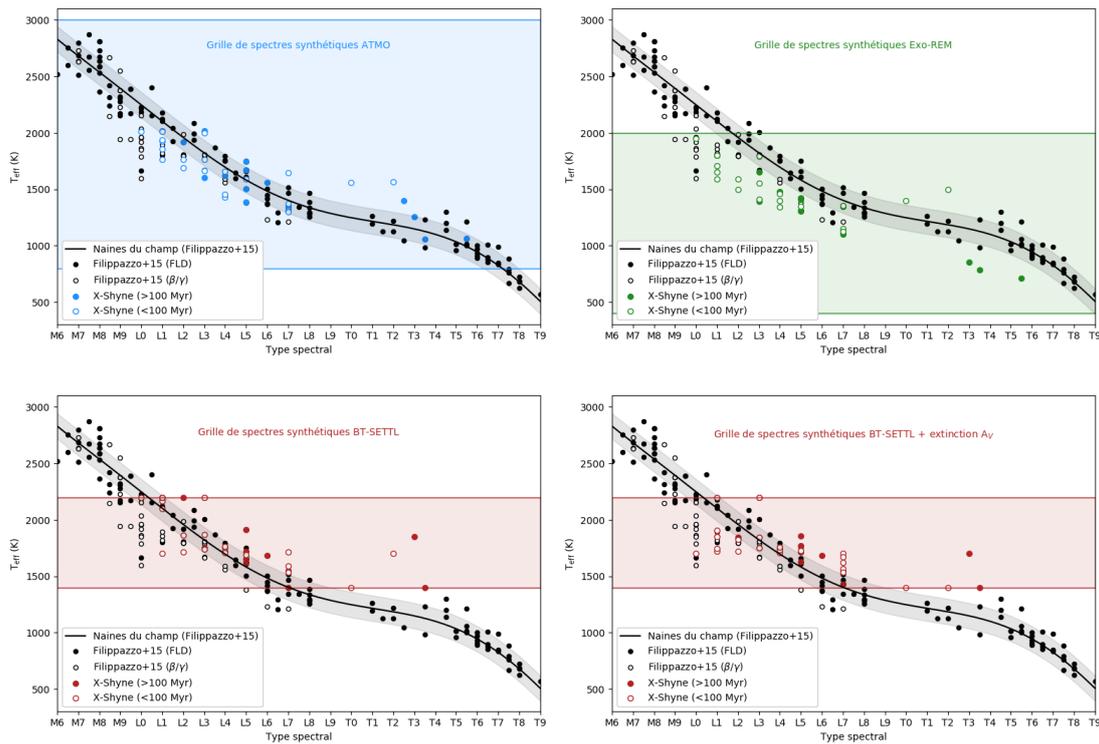


FIGURE 4.23 – Relation entre la  $T_{\text{eff}}$  et le type spectral. Les valeurs calculées par *Filippazzo et al. (2015)* sont représentées par les points noirs (pleins pour les objets du champ et vides pour les objets jeunes). La ligne noire correspond à la séquence des naines du champ ajustée par un polynôme de degré 6. Les  $T_{\text{eff}}$  estimées pour les objets de X-Shyne par *ForMoSA* sont représentées par des points bleus (grille ATMO), verts (grille Exo-REM) et rouges (grille BT-SETTL). La fenêtre en bas à droite montre la  $T_{\text{eff}}$  ajustée avec la grille BT-SETTL et l'ajout d'un paramètre libre d'extinction  $A_V$ . Les rectangles de couleur marquent les limites en  $T_{\text{eff}}$  des grilles.

10% selon leurs hypothèses admises (chimie du gaz, opacités moléculaires, modèles de nuages, conditions aux limites de l’atmosphère, etc.). De plus, l’âge des objets doit être connu (déterminé grâce à l’association jeune dans laquelle il se trouve) et les modèles doivent être interpolés pour estimer les paramètres, ce qui peut conduire à des estimations biaisées. Enfin, la classification des naines, dépend grandement de la couverture spectrale utilisée (Cruz et al., 2018).

D’autres relations  $T_{\text{eff}}$ -type spectral pour les objets du champ ont aussi été proposées, comme celle de Testi (2009), qui ajusta des spectres synthétiques issus de modèles d’atmosphères sur des spectres à basse résolution de naines M, L et T, ou celle Bonnefoy et al. (2014a) qui observèrent un décrochage entre les objets jeunes et ceux du champ à la transition M-L (confirmé ensuite par Filippazzo et al. 2015). Grâce à la librairie X-Shyne, il est possible d’explorer à la fois l’approche synthétique, en comparant nos données avec des modèles d’atmosphères (pré-analyse présentée ici), et à la fois l’approche semi-empirique (travail en cours), tout en cherchant une méthode fiable pour estimer les types spectraux des objets à la transition L-T. Cela permettra d’affiner les relations entre le type spectral et les propriétés atmosphériques des analogues planétaires.

Comme le montre la Figure 4.23, l’estimation de la  $T_{\text{eff}}$  varie en fonction du modèle d’atmosphères utilisé. Nous observons que les Exo-REM semblent la sous-estimer, tandis que les BT-SETTL semblent la sur-estimer. L’application du facteur d’extinction lors de l’utilisation de la grille BT-SETTL corrige cette sur-estimation pour les naines L précoces et doit être testée lors de l’utilisation des grilles Exo-REM et ATMO. Afin d’exploiter au maximum l’information dans les modèles et identifier leurs erreurs systématiques, il serait aussi possible d’ajouter au calcul de la vraisemblance des points photométriques (points WISE déjà disponibles pour la majorité de nos objets), ainsi que des spectres dans le MIR (voir Morley et al. 2018). D’autres modèles sont aussi en cours d’implémentation, comme les modèles SONORA (Marley et al., 2021).

## Rapport C/O

Après notre examen des différentes configurations d’ajustement (voir la Section 4.5.4), il est apparu que l’utilisation de la bande K permettait des estimations des rapports C/O réalistes et cohérentes entre les grilles. La Figure 4.24 montre les valeurs de rapports C/O estimées pour l’échantillon X-Shyne en fonction du type spectral avec la grille BT-SETTL et la grille Exo-REM.

Nous observons que le C/O semble augmenter après la transition L/T. Cette tendance est difficilement explicable physiquement. De telles valeurs de C/O ont été mesurées pour des naines T du champ par Madhusudhan et al. (2016). Ils proposèrent deux interprétations. Premièrement, les premières générations d’étoiles étant connues pour avoir une faible métallicité mais de hauts rapports C/O, leurs sources étaient peut-être des représentants de ces étoiles très âgées. Cette interprétation n’est pas cohérente pour les objets de X-Shyne, qui sont jeunes. Deuxièmement, leurs sources étaient peut-être issues d’une formation par accrétion de cœur, suivie d’une éjection gravitationnelle. Cependant, de récentes études ont prédit que le rapport C/O de Jupiters chauds, probablement formés par accrétion, devait être sous-solaire (Espinoza et al., 2017). Line et al. (2017) mesurèrent, eux aussi, des rapports C/O sur-solaires pour leur échantillon de 11 naines T du champ. Il interprétèrent ce résultat comme une perte d’oxygène, piégé dans des condensats à plus basse altitude. Cette idée est appuyée par Helling et al. (2014), qui calculèrent le rapport C/O dans différentes couches de l’atmosphère, grâce à leur modèle DRIFT-PHOENIX. Ces résultats sont rappelés dans la Figure 4.25, qui montre bien l’impact des nuages à basse altitude sur le rapport C/O.

Dans le cas de X-Shyne, plusieurs tests sont en cours pour identifier l’origine de ces rapports C/O sur-solaires, comme l’utilisation de nouvelles grilles de modèles Exo-REM prenant en compte une plus grande diversité de nuages (sulfures,  $\text{Na}_2\text{S}$ ), ou l’exploitation des absorptions de  $\text{CH}_4$  en bande H, qui apparaissent à la transition L/T. Se pose aussi la question d’utiliser des modèles d’atmosphères 3D, pour prendre en compte la déplétion d’éléments chimiques clés à basse altitude.

Les panneaux centraux de la Figure 4.24 illustrent les distributions des rapports C/O estimés

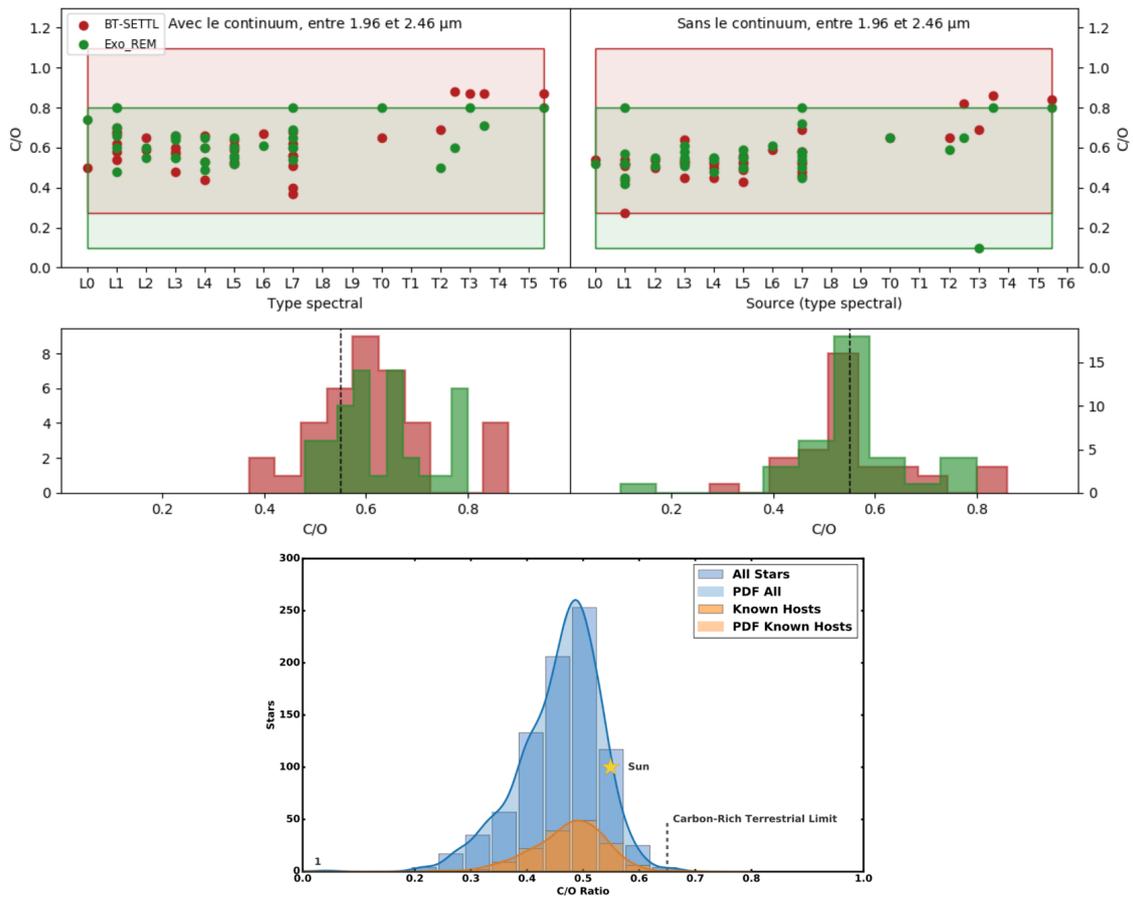


FIGURE 4.24 – En haut : Valeurs des rapports C/O estimées pour les objets X-Shyne avec ForMoSA en utilisant les grilles de modèles Exo-REM (points verts) et BT-SETTL (points rouges). Seule la bande K a été utilisée pour l’ajustement, avec le continuum (à gauche) et sans le continuum (à droite). Au milieu : Distribution des valeurs de C/O estimées. En bas : Distribution des valeurs de C/O calculées pour les étoiles de la séquence principale (figure issue de [Brewer & Fischer 2016](#)).

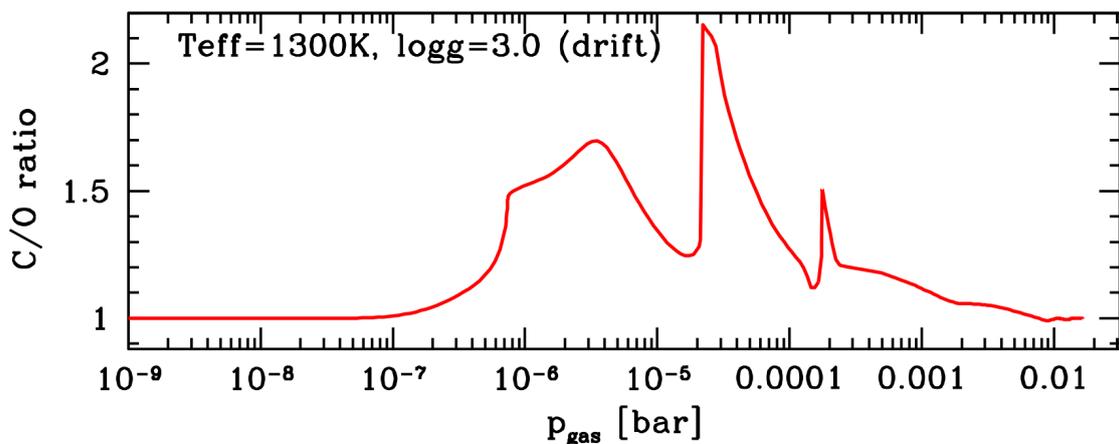


FIGURE 4.25 – Variation du rapport C/O en fonction de l’altitude. Dans les couches inférieures de l’atmosphère, une partie de l’oxygène est piégé par les poussières et les nuages, faisant augmenter le rapport C/O. Figure issue de [Helling et al. \(2014\)](#).

pour X-Shyne. Dans le cas où le pseudo-continuum est maintenu, cette distribution pointe vers un C/O légèrement sur-solaire, tandis que lorsque le continuum est soustrait, elle pointe vers un C/O solaire. Cette différence entre les deux configurations d'ajustement montre que les informations à basse résolution, c'est à dire majoritairement les larges absorptions moléculaires qui sculptent la forme de la bande K, influencent l'estimation du C/O. Il est difficile aujourd'hui de favoriser l'une des deux approches pour estimer le C/O, car des erreurs systématiques de non-reproduction de la bande K par les modèles pourraient biaiser cette estimation, et car la soustraction du continuum a aussi un impact (comme montré dans [Petrus et al. 2021](#)). Dans les deux cas, les valeurs de C/O issues de X-Shyne sont légèrement plus grandes que celles mesurées pour les étoiles de la séquence principale ([Brewer & Fischer, 2016](#)), comme attendu pour des objets plus jeunes. Elles restent compatibles avec un mécanisme de formation stellaire (fragmentation gravo-turbulente par exemple), conservant le rapport C/O du nuage moléculaire initial.

## 4.6 Conclusion et perspectives de la librairie X-Shyne

Le but premier de la librairie X-Shyne est de fournir un échantillon de spectres à moyenne résolution d'objets de faible masse, jeunes et froids. Grâce à l'instrument X-Shooter, il a été possible d'obtenir ces spectres avec un excellent rapport signal à bruit, dont la comparaison avec les spectres d'exoplanètes jeunes imagées a prouvé le véritable potentiel de ces objets à être considérés comme analogues planétaires. L'analyse de cette librairie est en cours, et à travers ce chapitre, j'ai souhaité donner un aperçu de la richesse des premiers résultats. Cependant, de nombreuses pistes sont actuellement explorées.

### 4.6.1 Analyse complète des raies d'absorption

L'analyse empirique présentée dans la Section 4.4 a ré-examiné les relations connues entre les propriétés spectrales des objets sous-stellaires et leur âge ou leur type spectral, et a étendu ces relations aux naines L tardives et T. Cependant, les méthodes employées ici sont optimisées pour l'analyse de spectre à  $R < 2000$ . La résolution spectrale de X-Shooter nous donne la possibilité d'exploiter d'autres caractéristiques et d'explorer d'autres approches. La grande diversité des raies détectées pose la question des corrélations qu'elles peuvent avoir entre elles et, comme le montre la Figure 4.8, le profil des raies est partiellement accessible à la résolution de X-Shooter.

### 4.6.2 Analyse des raies d'émission

Nous avons détecté des raies d'émission de l'hydrogène pour trois des sources de X-Shyne. Ces traceurs d'accrétion sont au cœur de l'étude des modes de formation des objets sous-stellaires ([Aoyama et al., 2021b](#)). Une étude poussée de ces raies est en cours, afin d'identifier leur origine (activité chromosphérique ou accrétion) et contraindre les propriétés d'accrétion (caractéristiques du choc d'accrétion, masse accrétée, profils de raies, etc.), pour tenter de comprendre l'histoire de ces objets.

### 4.6.3 Estimation des rapports isotopiques

Avec des spectres à moyenne résolution ( $R \sim 4500$ ), en bande K, [Zhang et al. \(2021a\)](#) ont pu estimer le rapport isotopique  $^{12}\text{CO}/^{13}\text{CO}$  de la jeune super-Jupiter TYC 8998 b. Ce rapport est de  $\sim 89$  dans notre système solaire, mais peut varier jusqu'à 68 dans notre environnement interstellaire proche. Ils mesurèrent  $^{12}\text{CO}/^{13}\text{CO} = 31 \pm 15$ , indiquant une formation au-delà de la

ligne des glaces du CO (là où le  $^{13}\text{CO}$  est plus abondant). Nos spectres ayant une résolution supérieure ( $R \sim 8100$ ), il serait intéressant de mesurer le rapport  $^{12}\text{CO}/^{13}\text{CO}$  pour nos analogues planétaires isolés et de vérifier que nous retrouvons une valeur solaire typique, qui confirmerait aussi une formation par fragmentation gravo-turbulente d'un nuage moléculaire.

#### 4.6.4 Exploration des paramètres atmosphériques et dynamiques de X-Shyne

Comme nous l'avons vu dans la Section 4.5.3, l'utilisation de modèles d'atmosphères nécessite de définir des fenêtres spectrales stratégiques pour estimer les paramètres atmosphériques. Deux fenêtres spectrales ont été testées ici, et bien qu'elles nous aient permis d'estimer les propriétés atmosphériques des objets de X-Shyne, la question de la robustesse de ces estimations se pose. Pour exploiter au mieux les prédictions des modèles d'atmosphères en évitant de surinterpréter des résultats potentiellement biaisés par des erreurs systématiques, il est nécessaire de, premièrement, tester et quantifier les limitations des modèles de nuages utilisés, et deuxièmement, proposer des méthodes d'utilisation en matière de résolutions, couvertures spectrales ou encore quantités d'informations (avec ou sans le continuum). Pour cela, nous définirons d'autres fenêtres spectrales plus ou moins larges (bande H, raies et bandes d'absorption) à utiliser lors des ajustements. Nous quantifierons également la sensibilité de l'estimation des paramètres physiques à la variabilité des sources, en utilisant des données HST obtenues sur PSO318 (objets de X-Shyne variable, [Billier et al. 2018](#)). Nous ferons l'inventaire des propriétés spectrales à moyenne résolution, reproduites par les modèles, pour aider leur futurs développement. La redéfinition du calcul de la vraisemblance pour réduire l'impact des erreurs systématiques des modèles, comme présentée dans [Czekala et al. \(2015\)](#), est aussi à envisager. Enfin, la détermination semi-empirique, pour chacune de nos sources, avec la méthode de [Filippazzo et al. \(2015\)](#) est actuellement en cours, pour comparer, source à source, les propriétés atmosphériques estimées via cette méthode et via les modèles d'atmosphères.

Cette prise de recul sur les méthodes d'analyse des spectres actuels est nécessaire pour préparer l'interprétation de futures données de jeunes naines brunes plus tardives, mais aussi de spectres exoplanétaires à moyenne résolution. Notons particulièrement le cas de la jeune naine brune VHS1256 b (qui fait partie de la librairie X-Shyne) sélectionnée dans le contexte de la ERS (Early Release Science) du JWST (comme la jeune exoplanète HIP 65426 b)<sup>4</sup>. De récente découvertes de jeunes naines T ([Zhang et al., 2021b](#)) nous offre aussi l'opportunité d'étendre la librairie X-Shyne, particulièrement dans la gamme de types spectraux L8-T5 encore peu explorées, et tester les modèles d'atmosphères à ces températures plus froides.

---

4. Instruments utilisés pour VHS1256 b : MIRI/NIRCam/NIRSpec. Instruments utilisés pour HIP 65426 b : MIRI/NIRCam/NIRISS



# Bibliographie

- ALMA Partnership et al., 2015, *The 2014 ALMA Long Baseline Campaign : First Results from High Angular Resolution Observations toward the HL Tau Region*, *ApJ*, **808**, L3
- Ackerman A. S., Marley M. S., 2001, *Precipitating Condensation Clouds in Substellar Atmospheres*, *ApJ*, **556**, 872
- Adams F. C., Lada C. J., Shu F. H., 1987, *Spectral Evolution of Young Stellar Objects*, *ApJ*, **312**, 788
- Alcalá J. M., et al., 2017, *X-shooter spectroscopy of young stellar objects in Lupus. Accretion properties of class II and transitional objects*, *A&A*, **600**, A20
- Alderson L., et al., 2020, *LRG-BEASTS : ground-based detection of sodium and a steep optical slope in the atmosphere of the highly inflated hot-saturn WASP-21b*, *MNRAS*, **497**, 5182
- Alexander R. D., Pascucci I., 2012, *Deserts and pile-ups in the distribution of exoplanets due to photoevaporative disc clearing*, *MNRAS*, **422**, L82
- Alibert Y., Mordasini C., Benz W., 2004, *Migration and giant planet formation*, *A&A*, **417**, L25
- Alibert Y., Mordasini C., Benz W., Winisdoerffer C., 2005, *Models of giant planet formation with migration and disc evolution*, *A&A*, **434**, 343
- Alibert Y., et al., 2006, *Formation and structure of the three Neptune-mass planets system around HD 69830*, *A&A*, **455**, L25
- Alibert Y., Carron F., Fortier A., Pfyffer S., Benz W., Mordasini C., Swoboda D., 2013, *Theoretical models of planetary system formation : mass vs. semi-major axis*, *A&A*, **558**, A109
- Allard F., Hauschildt P. H., Alexander D. R., Tamanai A., Schweitzer A., 2001, *The Limiting Effects of Dust in Brown Dwarf Model Atmospheres*, *ApJ*, **556**, 357
- Allard F., Homeier D., Freytag B., 2012, *Models of very-low-mass stars, brown dwarfs and exoplanets*, *Philosophical Transactions of the Royal Society of London Series A*, **370**, 2765
- Aller K. M., et al., 2016, *Brown Dwarfs in Young Moving Groups from Pan-STARRS1. I. AB Doradus*, *ApJ*, **821**, 120
- Allers K. N., Liu M. C., 2013, *A Near-infrared Spectroscopic Study of Young Field Ultracool Dwarfs*, *ApJ*, **772**, 79
- Allers K. N., et al., 2007, *Characterizing Young Brown Dwarfs Using Low-Resolution Near-Infrared Spectra*, *ApJ*, **657**, 511
- Allers K. N., Liu M. C., Dupuy T. J., Cushing M. C., 2010, *Discovery of A Young L Dwarf Binary, SDSS J224953.47+004404.6AB*, *ApJ*, **715**, 561

- 
- Allers K. N., Gallimore J. F., Liu M. C., Dupuy T. J., 2016, *The Radial and Rotational Velocities of PSO J318.5338-22.8603, a Newly Confirmed Planetary-mass Member of the  $\beta$  Pictoris Moving Group*, *ApJ*, **819**, 133
- Allers K. N., Vos J. M., Biller B. A., Williams P. K. G., 2020, *A measurement of the wind speed on a brown dwarf*, *Science*, **368**, 169
- Andre P., Ward-Thompson D., Barsony M., 1993, *Submillimeter Continuum Observations of rho Ophiuchi A : The Candidate Protostar VLA 1623 and Prestellar Clumps*, *ApJ*, **406**, 122
- Andrews S. M., Williams J. P., 2005, *Circumstellar Dust Disks in Taurus-Auriga : The Submillimeter Perspective*, *ApJ*, **631**, 1134
- Anglada-Escudé G., et al., 2016, *A terrestrial planet candidate in a temperate orbit around Proxima Centauri*, *Nature*, **536**, 437
- Antichi J., et al., 2009, *BIGRE : A Low Cross-Talk Integral Field Unit Tailored for Extrasolar Planets Imaging Spectroscopy*, *ApJ*, **695**, 1042
- Aoyama Y., Ikoma M., Tanigawa T., 2018, *Theoretical Model of Hydrogen Line Emission from Accreting Gas Giants*, *ApJ*, **866**, 84
- Aoyama Y., Marleau G.-D., Ikoma M., Mordasini C., 2021a, *Comparison of planetary H $\alpha$ -emission models : A new correlation with accretion luminosity*, arXiv e-prints, p. [arXiv:2108.01277](https://arxiv.org/abs/2108.01277)
- Aoyama Y., Marleau G.-D., Ikoma M., Mordasini C., 2021b, *Comparison of Planetary H $\alpha$ -emission Models : A New Correlation with Accretion Luminosity*, *ApJ*, **917**, L30
- Apai D., Radigan J., Buenzli E., Burrows A., Reid I. N., Jayawardhana R., 2013, *HST Spectral Mapping of L/T Transition Brown Dwarfs Reveals Cloud Thickness Variations*, *ApJ*, **768**, 121
- Apai D., Schneider G., Grady C. A., Wyatt M. C., Lagrange A.-M., Kuchner M. J., Stark C. J., Lubow S. H., 2015, *The Inner Disk Structure, Disk-Planet Interactions, and Temporal Evolution in the  $\beta$  Pictoris System : A Two-epoch HST/STIS Coronagraphic Study*, *ApJ*, **800**, 136
- Artigau É., Bouchard S., Doyon R., Lafrenière D., 2009, *Photometric Variability of the T2.5 Brown Dwarf SIMP J013656.5+093347 : Evidence for Evolving Weather Patterns*, *ApJ*, **701**, 1534
- Artigau É., et al., 2014, in Ramsay S. K., McLean I. S., Takami H., eds, Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference Series Vol. 9147, Ground-based and Airborne Instrumentation for Astronomy V. p. 914715 ([arXiv:1406.6992](https://arxiv.org/abs/1406.6992)), [doi:10.1117/12.2055663](https://doi.org/10.1117/12.2055663)
- Artigau É., Gagné J., Faherty J., Malo L., Naud M.-E., Doyon R., Lafrenière D., Beletsky Y., 2015, *BANYAN. VI. Discovery of a Companion at the Brown Dwarf/Planet-Mass Limit to a Tucana-Horologium M Dwarf*, *ApJ*, **806**, 254
- Aumann H. H., et al., 1984, *Discovery of a shell around alpha Lyrae.*, *ApJ*, **278**, L23
- Baglin A., Auvergne M., Barge P., Deleuil M., Catala C., Michel E., Weiss W., COROT Team 2006, in Fridlund M., Baglin A., Lochard J., Conroy L., eds, ESA Special Publication Vol. 1306, The CoRoT Mission Pre-Launch Status - Stellar Seismology and Planet Finding. p. 33
- Bailes M., et al., 2011, *Transformation of a Star into a Planet in a Millisecond Pulsar Binary*, *Science*, **333**, 1717
- Bailey V., et al., 2014, *HD 106906 b : A Planetary-mass Companion Outside a Massive Debris Disk*, *ApJ*, **780**, L4
-

- 
- Bakos G. Á., et al., 2010, *HAT-P-11b : A Super-Neptune Planet Transiting a Bright K Star in the Kepler Field*, *ApJ*, **710**, 1724
- Ballard S., et al., 2011, *The Kepler-19 System : A Transiting 2.2  $R_{\oplus}$  Planet and a Second Planet Detected via Transit Timing Variations*, *ApJ*, **743**, 200
- Baraffe I., Chabrier G., Allard F., Hauschildt P. H., 1998, *Evolutionary models for solar metallicity low-mass stars : mass-magnitude relationships and color-magnitude diagrams*, *A&A*, **337**, 403
- Baraffe I., Chabrier G., Barman T. S., Allard F., Hauschildt P. H., 2003, *Evolutionary models for cool brown dwarfs and extrasolar giant planets. The case of HD 209458*, *A&A*, **402**, 701
- Baraffe I., Homeier D., Allard F., Chabrier G., 2015, *New evolutionary models for pre-main sequence and main sequence low-mass stars down to the hydrogen-burning limit*, *A&A*, **577**, A42
- Baran A. S., Zola S., Blokesz A., Østensen R. H., Silvotti R., 2015, *Detection of a planet in the sdB + M dwarf binary system 2M 1938+4603*, *A&A*, **577**, A146
- Baranne A., et al., 1996, *ELODIE : A spectrograph for accurate radial velocity measurements.*, *A&AS*, **119**, 373
- Bardalez Gagliuffi D. C., et al., 2020, *WISEA J083011.95+283716.0 : A Missing Link Planetary-mass Object*, *ApJ*, **895**, 145
- Barman T. S., Macintosh B., Konopacky Q. M., Marois C., 2011, *Clouds and Chemistry in the Atmosphere of Extrasolar Planet HR8799b*, *ApJ*, **733**, 65
- Barman T. S., Konopacky Q. M., Macintosh B., Marois C., 2015, *Simultaneous Detection of Water, Methane, and Carbon Monoxide in the Atmosphere of Exoplanet HR8799b*, *ApJ*, **804**, 61
- Baron F., Lafrenière D., Artigau É., Gagné J., Rameau J., Delorme P., Naud M.-E., 2019, *Constraints on the Occurrence and Distribution of 1-20  $M_{Jup}$  Companions to Stars at Separations of 5-5000 au from a Compilation of Direct Imaging Surveys*, *AJ*, **158**, 187
- Baruteau C., Bai X., Mordasini C., Mollière P., 2016, *Formation, Orbital and Internal Evolutions of Young Planetary Systems*, *Space Sci. Rev.*, **205**, 77
- Bashi D., Zucker S., Adibekyan V., Santos N. C., Tal-Or L., Trifonov T., Mazeh T., 2020, *Occurrence rates of small planets from HARPS. Focus on the Galactic context*, *A&A*, **643**, A106
- Bate M. R., 2005, *The dependence of the initial mass function on metallicity and the opacity limit for fragmentation*, *MNRAS*, **363**, 363
- Bate M. R., Bonnell I. A., Bromm V., 2002, *The formation mechanism of brown dwarfs*, *MNRAS*, **332**, L65
- Bayo A., et al., 2017, *Physical parameters of late M-type members of Chamaeleon I and TW Hydrae Association : dust settling, age dispersion and activity*, *MNRAS*, **465**, 760
- Bean J. L., Benedict G. F., Endl M., 2006, *Metallicities of M Dwarf Planet Hosts from Spectral Synthesis*, *ApJ*, **653**, L65
- Becklin E. E., Zuckerman B., 1988, *A low-temperature companion to a white dwarf star*, *Nature*, **336**, 656
- Beer R., Taylor F. W., 1973, *The Abundance of CH<sub>3</sub>D and the D/h Ratio in Jupiter*, *ApJ*, **179**, 309
-

- 
- Béjar V. J. S., Zapatero Osorio M. R., Pérez-Garrido A., Álvarez C., Martín E. L., Rebolo R., Villó-Pérez I., Díaz-Sánchez A., 2008, *Discovery of a Wide Companion near the Deuterium-burning Mass Limit in the Upper Scorpius Association*, *ApJ*, **673**, L185
- Benisty M., et al., 2021, *A Circumplanetary Disk around PDS70c*, *ApJ*, **916**, L2
- Benneke B., 2015, *Strict Upper Limits on the Carbon-to-Oxygen Ratios of Eight Hot Jupiters from Self-Consistent Atmospheric Retrieval*, arXiv e-prints, p. [arXiv:1504.07655](https://arxiv.org/abs/1504.07655)
- Benneke B., Seager S., 2012, *Atmospheric Retrieval for Super-Earths : Uniquely Constraining the Atmospheric Composition with Transmission Spectroscopy*, *ApJ*, **753**, 100
- Benneke B., Seager S., 2013, *How to Distinguish between Cloudy Mini-Neptunes and Water/Volatile-dominated Super-Earths*, *ApJ*, **778**, 153
- Bennett D. P., et al., 2018, *A Planetary Microlensing Event with an Unusually Red Source Star : MOA-2011-BLG-291*, *AJ*, **156**, 113
- Best W. M. J., et al., 2015, *A Search for L/T Transition Dwarfs with Pan-STARRS1 and WISE. II. L/T Transition Atmospheres and Young Discoveries*, *ApJ*, **814**, 118
- Béthune W., Lesur G., Ferreira J., 2017, *Global simulations of protoplanetary disks with net magnetic flux. I. Non-ideal MHD case*, *A&A*, **600**, A75
- Beuermann K., et al., 2011, *The giant planet orbiting the cataclysmic binary DP Leonis*, *A&A*, **526**, A53
- Beuzit J. L., Mouillet D., Lagrange A. M., Paufigue J., 1997, *A stellar coronagraph for the COMEON-PLUS adaptive optics system*, *A&AS*, **125**, 175
- Beuzit J.-L., et al., 2008, in McLean I. S., Casali M. M., eds, *Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference Series Vol. 7014, Ground-based and Airborne Instrumentation for Astronomy II*. p. 701418, [doi:10.1117/12.790120](https://doi.org/10.1117/12.790120)
- Beuzit J. L., et al., 2019, *SPHERE : the exoplanet imager for the Very Large Telescope*, *A&A*, **631**, A155
- Biller B. A., et al., 2018, *Simultaneous Multiwavelength Variability Characterization of the Free-floating Planetary-mass Object PSO J318.5-22*, *AJ*, **155**, 95
- Birkby J. L., 2018, *Exoplanet Atmospheres at High Spectral Resolution*, arXiv e-prints, p. [arXiv:1806.04617](https://arxiv.org/abs/1806.04617)
- Birkby J. L., de Kok R. J., Brogi M., de Mooij E. J. W., Schwarz H., Albrecht S., Snellen I. A. G., 2013, *Detection of water absorption in the day side atmosphere of HD 189733 b using ground-based high-resolution spectroscopy at 3.2 $\mu$ m.*, *MNRAS*, **436**, L35
- Birkby J. L., de Kok R. J., Brogi M., Schwarz H., Snellen I. A. G., 2017, *Discovery of Water at High Spectral Resolution in the Atmosphere of 51 Peg b*, *AJ*, **153**, 138
- Bitsch B., Johansen A., Lambrechts M., Morbidelli A., 2015a, *The structure of protoplanetary discs around evolving young stars*, *A&A*, **575**, A28
- Bitsch B., Lambrechts M., Johansen A., 2015b, *The growth of planets by pebble accretion in evolving protoplanetary discs*, *A&A*, **582**, A112
- Blake C. H., Charbonneau D., White R. J., 2010, *The NIRSPEC Ultracool Dwarf Radial Velocity Survey*, *ApJ*, **723**, 684
-

- 
- Blum J., Wurm G., 2008, *The growth mechanisms of macroscopic bodies in protoplanetary disks.*, [ARA&A](#), **46**, 21
- Bohn A. J., et al., 2020a, *The Young Suns Exoplanet Survey : Detection of a wide-orbit planetary-mass companion to a solar-type Sco-Cen member*, [MNRAS](#), **492**, 431
- Bohn A. J., et al., 2020b, *Two Directly Imaged, Wide-orbit Giant Planets around the Young, Solar Analog TYC 8998-760-1*, [ApJ](#), **898**, L16
- Boisse I., et al., 2012, *The SOPHIE search for northern extrasolar planets. V. Follow-up of ELO-DIE candidates : Jupiter-analogs around Sun-like stars*, [A&A](#), **545**, A55
- Boley A. C., 2009, *The Two Modes of Gas Giant Planet Formation*, [ApJ](#), **695**, L53
- Boley A. C., Helled R., Payne M. J., 2011, *The Heavy-element Composition of Disk Instability Planets Can Range from Sub- to Super-nebular*, [ApJ](#), **735**, 30
- Bond I. A., et al., 2004, *OGLE 2003-BLG-235/MOA 2003-BLG-53 : A Planetary Microlensing Event*, [ApJ](#), **606**, L155
- Bonfils X., et al., 2013, *The HARPS search for southern extra-solar planets. XXXI. The M-dwarf sample*, [A&A](#), **549**, A109
- Bonnefoy M., Chauvin G., Rojo P., Allard F., Lagrange A. M., Homeier D., Dumas C., Beuzit J. L., 2010, *Near-infrared integral-field spectra of the planet/brown dwarf companion AB Pictoris b*, [A&A](#), **512**, A52
- Bonnefoy M., Chauvin G., Lagrange A. M., Rojo P., Allard F., Pinte C., Dumas C., Homeier D., 2014a, *A library of near-infrared integral field spectra of young M-L dwarfs*, [A&A](#), **562**, A127
- Bonnefoy M., et al., 2014b, *Physical and orbital properties of  $\beta$  Pictoris b*, [A&A](#), **567**, L9
- Bonnefoy M., et al., 2016, *First light of the VLT planet finder SPHERE. IV. Physical and chemical properties of the planets around HR8799*, [A&A](#), **587**, A58
- Bonnefoy M., et al., 2018, *The GJ 504 system revisited. Combining interferometric, radial velocity, and high contrast imaging data*, [A&A](#), **618**, A63
- Bonnet H., et al., 2004, *First light of SINFONI at the VLT*, *The Messenger*, **117**, 17
- Borucki W. J., Caldwell D., Koch D. G., Webster L. D., Jenkins J. M., Ninkov Z., Showen R., 2001, *The Vulcan Photometer : A Dedicated Photometer for Extrasolar Planet Searches*, [PASP](#), **113**, 439
- Borucki W. J., et al., 2010, *Kepler Planet-Detection Mission : Introduction and First Results*, [Science](#), **327**, 977
- Bosman A. D., Cridland A. J., Miguel Y., 2019, *Jupiter formed as a pebble pile around the N<sub>2</sub> ice line*, [A&A](#), **632**, L11
- Boss A. P., 2000, *Possible Rapid Gas Giant Planet Formation in the Solar Nebula and Other Protoplanetary Disks*, [ApJ](#), **536**, L101
- Boss A. P., 2019, *The Effect of the Approach to Gas Disk Gravitational Instability on the Rapid Formation of Gas Giant Planets*, [ApJ](#), **884**, 56
- Boucher A., Lafrenière D., Gagné J., Malo L., Faherty J. K., Doyon R., Chen C. H., 2016, *BA-NYAN. VIII. New Low-mass Stars and Brown Dwarfs with Candidate Circumstellar Disks*, [ApJ](#), **832**, 50
-

- 
- Bouy H., et al., 2009, *A deep look into the cores of young clusters. I.  $\sigma$ -Orionis*, *A&A*, **493**, 931
- Bowler B. P., Liu M. C., Kraus A. L., Mann A. W., Ireland M. J., 2011, *A Disk around the Planetary-mass Companion GSC 06214-00210 b : Clues about the Formation of Gas Giants on Wide Orbits*, *ApJ*, **743**, 148
- Bowler B. P., Liu M. C., Kraus A. L., Mann A. W., 2014, *Spectroscopic Confirmation of Young Planetary-mass Companions on Wide Orbits*, *ApJ*, **784**, 65
- Bowler B. P., Blunt S. C., Nielsen E. L., 2020, *Population-level Eccentricity Distributions of Imaged Exoplanets and Brown Dwarf Companions : Dynamical Evidence for Distinct Formation Channels*, *AJ*, **159**, 63
- Brandt G. M., Brandt T. D., Dupuy T. J., Li Y., Michalik D., 2021a, *Precise Dynamical Masses and Orbital Fits for beta Pic  $\beta$  and  $\beta$  Pic c*, *AJ*, **161**, 179
- Brandt G. M., Brandt T. D., Dupuy T. J., Michalik D., Marleau G.-D., 2021b, *The First Dynamical Mass Measurement in the HR 8799 System*, *ApJ*, **915**, L16
- Brewer J. M., Fischer D. A., 2016, *C/O and Mg/Si Ratios of Stars in the Solar Neighborhood*, *ApJ*, **831**, 20
- Broeg C., et al., 2013, in *European Physical Journal Web of Conferences*. p. 03005 ([arXiv:1305.2270](https://arxiv.org/abs/1305.2270)), [doi:10.1051/epjconf/20134703005](https://doi.org/10.1051/epjconf/20134703005)
- Broggi M., Snellen I. A. G., de Kok R. J., Albrecht S., Birkby J., de Mooij E. J. W., 2012, *The signature of orbital motion from the dayside of the planet  $\tau$  Boötis b*, *Nature*, **486**, 502
- Brott I., Hauschildt P. H., 2005, in Turon C., O’Flaherty K. S., Perryman M. A. C., eds, *ESA Special Publication Vol. 576, The Three-Dimensional Universe with Gaia*. p. 565 ([arXiv:astro-ph/0503395](https://arxiv.org/abs/astro-ph/0503395))
- Brown R. A., 2014, *Faint Detection of Exoplanets in Microlensing Surveys*, *ApJ*, **788**, 192
- Brown T. M., Charbonneau D., 2000, in Garzón G., Eiroa C., de Winter D., Mahoney T. J., eds, *Astronomical Society of the Pacific Conference Series Vol. 219, Disks, Planetesimals, and Planets*. p. 584 ([arXiv:astro-ph/0005009](https://arxiv.org/abs/astro-ph/0005009))
- Bryan M. L., et al., 2016, *Statistics of Long Period Gas Giant Planets in Known Planetary Systems*, *ApJ*, **821**, 89
- Buchner J., et al., 2014, *X-ray spectral modelling of the AGN obscuring region in the CDFS : Bayesian model selection and catalogue*, *A&A*, **564**, A125
- Buenzli E., Apai D., Radigan J., Reid I. N., Flateau D., 2014, *Brown Dwarf Photospheres are Patchy : A Hubble Space Telescope Near-infrared Spectroscopic Survey Finds Frequent Low-level Variability*, *ApJ*, **782**, 77
- Burgasser A. J., 2014, in *Astronomical Society of India Conference Series*. pp 7–16 ([arXiv:1406.4887](https://arxiv.org/abs/1406.4887))
- Burgasser A. J., Marley M. S., Ackerman A. S., Saumon D., Lodders K., Dahn C. C., Harris H. C., Kirkpatrick J. D., 2002, *Evidence of Cloud Disruption in the L/T Dwarf Transition*, *ApJ*, **571**, L151
- Burgasser A. J., Kirkpatrick J. D., Liebert J., Burrows A., 2003, *The Spectra of T Dwarfs. II. Red Optical Data*, *ApJ*, **594**, 510
-

- 
- Burgasser A. J., et al., 2015, *The Brown Dwarf Kinematics Project (BDKP). IV. Radial Velocities of 85 Late-M and L Dwarfs with MagE*, [ApJS](#), **220**, 18
- Burgasser A. J., et al., 2016, *The First Brown Dwarf/Planetary-mass Object in the 32 Orionis Group*, [ApJ](#), **820**, 32
- Burke C. J., Gaudi B. S., DePoy D. L., Pogge R. W., 2006, *Survey for Transiting Extrasolar Planets in Stellar Systems. III. A Limit on the Fraction of Stars with Planets in the Open Cluster NGC 1245*, [AJ](#), **132**, 210
- Burke C. J., et al., 2015, *Terrestrial Planet Occurrence Rates for the Kepler GK Dwarf Sample*, [ApJ](#), **809**, 8
- Burrows A., et al., 1997, *A Nongray Theory of Extrasolar Giant Planets and Brown Dwarfs*, [ApJ](#), **491**, 856
- Burrows A., Sudarsky D., Lunine J. I., 2003, *Beyond the T Dwarfs : Theoretical Spectra, Colors, and Detectability of the Coolest Brown Dwarfs*, [ApJ](#), **596**, 587
- Burrows A., Sudarsky D., Hubeny I., 2006, *L and T Dwarf Models and the L to T Transition*, [ApJ](#), **640**, 1063
- Burrows A., Hubeny I., Budaj J., Hubbard W. B., 2007, *Possible Solutions to the Radius Anomalies of Transiting Giant Planets*, [ApJ](#), **661**, 502
- Cabot S. H. C., Madhusudhan N., Hawker G. A., Gandhi S., 2019, *On the robustness of analysis techniques for molecular detections using high-resolution exoplanet spectroscopy*, [MNRAS](#), **482**, 4422
- Cadman J., Rice K., Hall C., Haworth T. J., Biller B., 2020, *Fragmentation favoured in discs around higher mass stars*, [MNRAS](#), **492**, 5041
- Cameron A. G. W., 1978, *Physics of the Primitive Solar Accretion Disk*, [Moon and Planets](#), **18**, 5
- Campbell B., Walker G. A. H., Yang S., 1988, *A Search for Substellar Companions to Solar-type Stars*, [ApJ](#), **331**, 902
- Casassus S., Pérez S., 2019, *Kinematic Detections of Protoplanets : A Doppler Flip in the Disk of HD 100546*, [ApJ](#), **883**, L41
- Cassan A., et al., 2012, *One or more bound planets per Milky Way star from microlensing observations*, [Nature](#), **481**, 167
- Chabrier G., Baraffe I., Allard F., Hauschildt P., 2000, *Evolutionary Models for Very Low-Mass Stars and Brown Dwarfs with Dusty Atmospheres*, [ApJ](#), **542**, 464
- Chabrier G., Baraffe I., Allard F., Hauschildt P. H., 2005, *Review on low-mass stars and brown dwarfs*, arXiv e-prints, [pp astro-ph/0509798](#)
- Chambers K. C., et al., 2016, *The Pan-STARRS1 Surveys*, arXiv e-prints, [p. arXiv:1612.05560](#)
- Charbonneau D., Brown T. M., Latham D. W., Mayor M., 2000, *Detection of Planetary Transits Across a Sun-like Star*, [ApJ](#), **529**, L45
- Charbonneau D., Brown T. M., Noyes R. W., Gilliland R. L., 2002, *Detection of an Extrasolar Planet Atmosphere*, [ApJ](#), **568**, 377

- 
- Charnay B., Bézard B., Baudino J. L., Bonnefoy M., Boccaletti A., Galicher R., 2018, *A Self-consistent Cloud Model for Brown Dwarfs and Young Giant Exoplanets : Comparison with Photometric and Spectroscopic Observations*, *ApJ*, **854**, 172
- Charpinet S., et al., 2011, *A compact system of small planets around a former red-giant star*, *Nature*, **480**, 496
- Chauvin G., 2018, in Close L. M., Schreiber L., Schmidt D., eds, Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference Series Vol. 10703, Adaptive Optics Systems VI. p. 1070305 ([arXiv:1808.02454](https://arxiv.org/abs/1808.02454)), [doi:10.1117/12.2314273](https://doi.org/10.1117/12.2314273)
- Chauvin G., Lagrange A. M., Dumas C., Zuckerman B., Mouillet D., Song I., Beuzit J. L., Lovrance P., 2004, *A giant planet candidate near a young brown dwarf. Direct VLT/NACO observations using IR wavefront sensing*, *A&A*, **425**, L29
- Chauvin G., et al., 2005, *A companion to AB Pic at the planet/brown dwarf boundary*, *A&A*, **438**, L29
- Chauvin G., et al., 2017, *Discovery of a warm, dusty giant planet around HIP 65426*, *A&A*, **605**, L9
- Chauvin G., et al., 2018, *Investigating the young solar system analog HD 95086. A combined HARPS and SPHERE exploration*, *A&A*, **617**, A76
- Chavez-Dagostino M., et al., 2016, *Early science with the Large Millimetre Telescope : Deep LMT/AzTEC millimetre observations of  $\epsilon$  Eridani and its surroundings*, *MNRAS*, **462**, 2285
- Cheetham A. C., et al., 2019, *Spectral and orbital characterisation of the directly imaged giant planet HIP 65426 b*, *A&A*, **622**, A80
- Chen J., Kipping D., 2017, *Probabilistic Forecasting of the Masses and Radii of Other Worlds*, *ApJ*, **834**, 17
- Chen G., et al., 2018, *The GTC exoplanet transit spectroscopy survey. IX. Detection of haze, Na, K, and Li in the super-Neptune WASP-127b*, *A&A*, **616**, A145
- Chiang E., Kite E., Kalas P., Graham J. R., Clampin M., 2009, *Fomalhaut's Debris Disk and Planet : Constraining the Mass of Fomalhaut b from disk Morphology*, *ApJ*, **693**, 734
- Chinchilla P., et al., 2020, *USco1621 B and USco1556 B : Two wide companions at the deuterium-burning mass limit in Upper Scorpius*, *A&A*, **633**, A152
- Chinchilla P., Béjar V. J. S., Lodieu N., Zapatero Osorio M. R., Gauza B., 2021, *Strong H $\alpha$  emission in the young planetary mass companion 2MASS J0249-0557 c*, *A&A*, **645**, A17
- Choquet É., Pueyo L., Soummer R., Perrin M. D., Hagan J. B., Gofas-Salas E., Rajan A., Aguilar J., 2015, in Shaklan S., ed., Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference Series Vol. 9605, Techniques and Instrumentation for Detection of Exoplanets VII. p. 96051P ([arXiv:1509.07880](https://arxiv.org/abs/1509.07880)), [doi:10.1117/12.2188536](https://doi.org/10.1117/12.2188536)
- Choquet É., et al., 2016, *First Images of Debris Disks around TWA 7, TWA 25, HD 35650, and HD 377*, *ApJ*, **817**, L2
- Christiaens V., et al., 2019a, *Separating extended disc features from the protoplanet in PDS 70 using VLT/SINFONI*, *MNRAS*, **486**, 5819
- Christiaens V., Cantalloube F., Casassus S., Price D. J., Absil O., Pinte C., Girard J., Montesinos M., 2019b, *Evidence for a Circumplanetary Disk around Protoplanet PDS 70 b*, *ApJ*, **877**, L33
-

- 
- Courtin R., Gautier D., Marten A., Bezaud B., Hanel R., 1984, *The composition of Saturn's atmosphere at northern temperate latitudes from Voyager IRIS spectra - NH<sub>3</sub>, PH<sub>3</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>, CH<sub>3</sub>D, CH<sub>4</sub>, and the Saturnian D/H isotopic ratio*, *ApJ*, **287**, 899
- Crossfield I. J. M., 2014, *Doppler imaging of exoplanets and brown dwarfs*, *A&A*, **566**, A130
- Crossfield I. J. M., Knutson H., Fortney J., Showman A. P., Cowan N. B., Deming D., 2012, *Spitzer/MIPS 24  $\mu$ m Observations of HD 209458b : Three Eclipses, Two and a Half Transits, and a Phase Curve Corrupted by Instrumental Sensitivity Variations*, *ApJ*, **752**, 81
- Cruz K., Gagné J., 2014, *The Ultracool RIZzo Spectral Library*, doi:10.5281/zenodo.11313, <https://doi.org/10.5281/zenodo.11313>
- Cruz K. L., Reid I. N., Liebert J., Kirkpatrick J. D., Lowrance P. J., 2003, *Meeting the Cool Neighbors. V. A 2MASS-Selected Sample of Ultracool Dwarfs*, *AJ*, **126**, 2421
- Cruz K. L., et al., 2007, *Meeting the Cool Neighbors. IX. The Luminosity Function of M7-L8 Ultracool Dwarfs in the Field*, *AJ*, **133**, 439
- Cruz K. L., Kirkpatrick J. D., Burgasser A. J., 2009, *Young L Dwarfs Identified in the Field : A Preliminary Low-Gravity, Optical Spectral Sequence from L0 to L5*, *AJ*, **137**, 3345
- Cruz K. L., Núñez A., Burgasser A. J., Abrahams E., Rice E. L., Reid I. N.,Looper D., 2018, *Meeting the Cool Neighbors. XII. An Optically Anchored Analysis of the Near-infrared Spectra of L Dwarfs*, *AJ*, **155**, 34
- Cugno G., et al., 2021, *Molecular mapping of the PDS70 system : No molecular absorption signatures from the forming planet PDS70 b*, arXiv e-prints, p. arXiv:2106.03615
- Cumming A., Butler R. P., Marcy G. W., Vogt S. S., Wright J. T., Fischer D. A., 2008, *The Keck Planet Search : Detectability and the Minimum Mass and Orbital Period Distribution of Extrasolar Planets*, *PASP*, **120**, 531
- Cumming A., Helled R., Venturini J., 2018, *The primordial entropy of Jupiter*, *MNRAS*, **477**, 4817
- Currie T., et al., 2018, *SCEXAO/CHARIS Near-infrared Direct Imaging, Spectroscopy, and Forward-Modeling of  $\kappa$  And b : A Likely Young, Low-gravity Superjovian Companion*, *AJ*, **156**, 291
- Cushing M. C., Rayner J. T., Vacca W. D., 2005, *An Infrared Spectroscopic Sequence of M, L, and T Dwarfs*, *ApJ*, **623**, 1115
- Cushing M. C., et al., 2006, *A Spitzer Infrared Spectrograph Spectral Sequence of M, L, and T Dwarfs*, *ApJ*, **648**, 614
- Cushing M. C., et al., 2008, *Atmospheric Parameters of Field L and T Dwarfs*, *ApJ*, **678**, 1372
- Cutri R. M., et al., 2003, *VizieR Online Data Catalog : 2MASS All-Sky Catalog of Point Sources (Cutri+ 2003)*, VizieR Online Data Catalog, p. II/246
- Czekala I., Andrews S. M., Mandel K. S., Hogg D. W., Green G. M., 2015, *Constructing a Flexible Likelihood Function for Spectroscopic Inference*, *ApJ*, **812**, 128
- D'Angelo G., Durisen R. H., Lissauer J. J., 2010, *Giant Planet Formation*. pp 319–346
- D'Antona F., Mazzitelli I., 1994, *New Pre–Main-Sequence Tracks for  $M \leq 2.5 M_{\text{sun}}$  as Tests of Opacities and Convection Model*, *ApJS*, **90**, 467
-

- 
- Daemgen S., Todorov K., Quanz S. P., Meyer M. R., Mordasini C., Marleau G.-D., Fortney J. J., 2017, *High signal-to-noise spectral characterization of the planetary-mass object HD 106906 b*, *A&A*, **608**, [A71](#)
- David T. J., Hillenbrand L. A., Gillen E., Cody A. M., Howell S. B., Isaacson H. T., Livingston J. H., 2019, *Age Determination in Upper Scorpius with Eclipsing Binaries*, *ApJ*, **872**, [161](#)
- Dawson R. I., Murray-Clay R. A., Fabrycky D. C., 2011, *On the Misalignment of the Directly Imaged Planet  $\beta$  Pictoris b with the System's Warped Inner Disk*, *ApJ*, **743**, [L17](#)
- Dawson P., Scholz A., Ray T. P., Marsh K. A., Wood K., Natta A., Padgett D., Ressler M. E., 2013, *New brown dwarf discs in Upper Scorpius observed with WISE*, *MNRAS*, **429**, [903](#)
- De Rosa R. J., et al., 2016, *Spectroscopic Characterization of HD 95086 b with the Gemini Planet Imager*, *ApJ*, **824**, [121](#)
- Deleuil M., et al., 2008, *Transiting exoplanets from the CoRoT space mission . VI. CoRoT-Exo-3b : the first secure inhabitant of the brown-dwarf desert*, *A&A*, **491**, [889](#)
- Delfosse X., et al., 1997, *Field brown dwarfs found by DENIS*, *A&A*, **327**, [L25](#)
- Delisle J. B., et al., 2018, *The HARPS search for southern extra-solar planets. XLIII. A compact system of four super-Earth planets orbiting HD 215152*, *A&A*, **614**, [A133](#)
- Deming D., et al., 2013, *Infrared Transmission Spectroscopy of the Exoplanets HD 209458b and XO-1b Using the Wide Field Camera-3 on the Hubble Space Telescope*, *ApJ*, **774**, [95](#)
- Dent W. R. F., et al., 2014, *Molecular Gas Clumps from the Destruction of Icy Bodies in the  $\beta$  Pictoris Debris Disk*, *Science*, **343**, [1490](#)
- Des Marais D. J., et al., 2002, *Remote Sensing of Planetary Properties and Biosignatures on Extrasolar Terrestrial Planets*, *Astrobiology*, **2**, [153](#)
- Dieterich S. B., Henry T. J., Jao W.-C., Winters J. G., Hoseney A. D., Riedel A. R., Subasavage J. P., 2014, *The Solar Neighborhood. XXXII. The Hydrogen Burning Limit*, *AJ*, **147**, [94](#)
- Dong S., Zhu Z., 2013, *Fast Rise of “Neptune-size” Planets ( $4-8 R_{\oplus}$ ) from  $P \sim 10$  to  $\sim 250$  Days—Statistics of Kepler Planet Candidates up to  $\sim 0.75$  AU*, *ApJ*, **778**, [53](#)
- Ducourant C., Teixeira R., Chauvin G., Daigne G., Le Campion J. F., Song I., Zuckerman B., 2008, *An accurate distance to 2M1207Ab*, *A&A*, **477**, [L1](#)
- Dumusque X., et al., 2014, *The Kepler-10 Planetary System Revisited by HARPS-N : A Hot Rocky World and a Solid Neptune-Mass Planet*, *ApJ*, **789**, [154](#)
- Dupuy T. J., et al., 2018, *The Hawaii Infrared Parallax Program. III. 2MASS J0249-0557 c : A Wide Planetary-mass Companion to a Low-mass Binary in the  $\beta$  Pic Moving Group*, *AJ*, **156**, [57](#)
- Eggen O. J., 1992, *The Kinematics of Young Disk Population Supercluster Members*, *AJ*, **104**, [2141](#)
- Eisenhauer F., et al., 2003, in Iye M., Moorwood A. F. M., eds, Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference Series Vol. 4841, Instrument Design and Performance for Optical/Infrared Ground-based Telescopes. pp 1548–1561 ([arXiv:astro-ph/0306191](#)), [doi:10.1117/12.459468](#)
- Eisner J. A., 2015, *Spectral Energy Distributions of Accreting Protoplanets*, *ApJ*, **803**, [L4](#)
-

- 
- Enoch M. L., Brown M. E., Burgasser A. J., 2003, *Photometric Variability at the L/T Dwarf Boundary*, *AJ*, **126**, 1006
- Epchtein N., et al., 1997, *The deep near-infrared southern sky survey (DENIS)*, *The Messenger*, **87**, 27
- Ercolano B., Rosotti G., 2015, *The link between disc dispersal by photoevaporation and the semi-major axis distribution of exoplanets*, *MNRAS*, **450**, 3008
- Espaillet C., et al., 2014, in Beuther H., Klessen R. S., Dullemond C. P., Henning T., eds, *Protostars and Planets VI*. p. 497 ([arXiv:1402.7103](https://arxiv.org/abs/1402.7103)), [doi:10.2458/azu\\_uapress\\_9780816531240-ch022](https://doi.org/10.2458/azu_uapress_9780816531240-ch022)
- Espinoza N., Fortney J. J., Miguel Y., Thorngren D., Murray-Clay R., 2017, *Metal Enrichment Leads to Low Atmospheric C/O Ratios in Transiting Giant Exoplanets*, *ApJ*, **838**, L9
- Esplin T. L., Luhman K. L., Miller E. B., Mamajek E. E., 2018, *A WISE Survey of Circumstellar Disks in the Upper Scorpius Association*, *AJ*, **156**, 75
- Evans T. M., et al., 2017, *An ultrahot gas-giant exoplanet with a stratosphere*, *Nature*, **548**, 58
- Faherty J. K., Burgasser A. J., Cruz K. L., Shara M. M., Walter F. M., Gelino C. R., 2009, *The Brown Dwarf Kinematics Project I. Proper Motions and Tangential Velocities for a Large Sample of Late-Type M, L, and T Dwarfs*, *AJ*, **137**, 1
- Faherty J. K., et al., 2012, *The Brown Dwarf Kinematics Project (BDKP). III. Parallaxes for 70 Ultracool Dwarfs*, *ApJ*, **752**, 56
- Faherty J. K., et al., 2016, *Population Properties of Brown Dwarf Analogs to Exoplanets*, *ApJS*, **225**, 10
- Faherty J. K., et al., 2020, *WISE 2150-7520AB : A Very Low-mass, Wide Comoving Brown Dwarf System Discovered through the Citizen Science Project Backyard Worlds : Planet 9*, *ApJ*, **889**, 176
- Fernandes R. B., Mulders G. D., Pascucci I., Mordasini C., Emsenhuber A., 2019, *Hints for a Turnover at the Snow Line in the Giant Planet Occurrence Rate*, *ApJ*, **874**, 81
- Feuchtgruber H., Lellouch E., Bézard B., Encrenaz T., de Graauw T., Davis G. R., 1999, *Detection of HD in the atmospheres of Uranus and Neptune : a new determination of the D/H ratio*, *A&A*, **341**, L17
- Filippazzo J. C., Rice E. L., Faherty J., Cruz K. L., Van Gordon M. M.,Looper D. L., 2015, *Fundamental Parameters and Spectral Energy Distributions of Young and Field Age Objects with Masses Spanning the Stellar to Planetary Regime*, *ApJ*, **810**, 158
- Fischer D. A., Valenti J., 2005, *The Planet-Metallicity Correlation*, *ApJ*, **622**, 1102
- Fitzpatrick E. L., Massa D., 2007, *An Analysis of the Shapes of Interstellar Extinction Curves. V. The IR-through-UV Curve Morphology*, *ApJ*, **663**, 320
- Follert R., et al., 2014, in Ramsay S. K., McLean I. S., Takami H., eds, *Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference Series Vol. 9147, Ground-based and Airborne Instrumentation for Astronomy V*. p. 914719, [doi:10.1117/12.2054197](https://doi.org/10.1117/12.2054197)
- Forgan D., Rice K., 2013, *Towards a population synthesis model of objects formed by self-gravitating disc fragmentation and tidal downsizing*, *MNRAS*, **432**, 3168

- 
- Fortier A., Beck T., Benz W., Broeg C., Cessa V., Ehrenreich D., Thomas N., 2014, in Oschmann Jacobus M. J., Clampin M., Fazio G. G., MacEwen H. A., eds, Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference Series Vol. 9143, Space Telescopes and Instrumentation 2014 : Optical, Infrared, and Millimeter Wave. p. 91432J, [doi:10.1117/12.2056687](https://doi.org/10.1117/12.2056687)
- Fortney J. J., Marley M. S., Saumon D., Lodders K., 2008, *Synthetic Spectra and Colors of Young Giant Planet Atmospheres : Effects of Initial Conditions and Atmospheric Metallicity*, *ApJ*, **683**, 1104
- Fossati L., et al., 2010, *Metals in the Exosphere of the Highly Irradiated Planet WASP-12b*, *ApJ*, **714**, L222
- Frantseva K., Mueller M., Pokorný P., van der Tak F. F. S., ten Kate I. L., 2020, *Enrichment of the HR 8799 planets by minor bodies and dust*, *A&A*, **638**, A50
- Fulton B. J., Petigura E. A., 2018, *The California-Kepler Survey. VII. Precise Planet Radii Leveraging Gaia DR2 Reveal the Stellar Mass Dependence of the Planet Radius Gap*, *AJ*, **156**, 264
- Fulton B. J., et al., 2017, *The California-Kepler Survey. III. A Gap in the Radius Distribution of Small Planets*, *AJ*, **154**, 109
- Fulton B., Rosenthal L., Howard A., Hirsch L., Isaacson H., 2019, in AAS/Division for Extreme Solar Systems Abstracts. p. 401.01
- Gagné J., Lafrenière D., Doyon R., Malo L., Artigau É., 2014, *BANYAN. II. Very Low Mass and Substellar Candidate Members to Nearby, Young Kinematic Groups with Previously Known Signs of Youth*, *ApJ*, **783**, 121
- Gagné J., et al., 2015a, *BANYAN. VII. A New Population of Young Substellar Candidate Members of Nearby Moving Groups from the BASS Survey*, *ApJS*, **219**, 33
- Gagné J., Lafrenière D., Doyon R., Malo L., Artigau É., 2015b, *BANYAN. V. A Systematic All-sky Survey for New Very Late-type Low-mass Stars and Brown Dwarfs in Nearby Young Moving Groups*, *ApJ*, **798**, 73
- Gagné J., Burgasser A. J., Faherty J. K., Lafrenière D., Doyon R., Filippazzo J. C., Bowsher E., Nicholls C. P., 2015c, *SDSS J111010.01+011613.1 : A New Planetary-mass T Dwarf Member of the AB Doradus Moving Group*, *ApJ*, **808**, L20
- Gagné J., et al., 2016, in Kastner J. H., Stelzer B., Metchev S. A., eds, Vol. 314, Young Stars & Planets Near the Sun. pp 49–53 ([arXiv:1506.04193](https://arxiv.org/abs/1506.04193)), [doi:10.1017/S1743921315006134](https://doi.org/10.1017/S1743921315006134)
- Gagné J., et al., 2017a, *BANYAN. IX. The Initial Mass Function and Planetary-mass Object Space Density of the TW HYA Association*, *ApJS*, **228**, 18
- Gagné J., et al., 2017b, *SIMP J013656.5+093347 Is Likely a Planetary-mass Object in the Carina-Near Moving Group*, *ApJ*, **841**, L1
- Gaia Collaboration 2018, *VizieR Online Data Catalog : Gaia DR2 (Gaia Collaboration, 2018)*, VizieR Online Data Catalog, p. I/345
- Gaia Collaboration et al., 2016, *Gaia Data Release 1. Summary of the astrometric, photometric, and survey properties*, *A&A*, **595**, A2
- Gaia Collaboration et al., 2018, *Gaia Data Release 2. Summary of the contents and survey properties*, *A&A*, **616**, A1

- 
- Gandhi S., Madhusudhan N., 2017, *GENESIS : new self-consistent models of exoplanetary spectra*, *MNRAS*, **472**, 2334
- Gandhi S., Madhusudhan N., 2018, *Retrieval of exoplanet emission spectra with HyDRA*, *MNRAS*, **474**, 271
- Gaudi B. S., et al., 2002, *Microlensing Constraints on the Frequency of Jupiter-Mass Companions : Analysis of 5 Years of PLANET Photometry*, *ApJ*, **566**, 463
- Gauza B., et al., 2015a, *Constraints on the substellar companions in wide orbits around the Barnard's Star from CanariCam mid-infrared imaging*, *MNRAS*, **452**, 1677
- Gauza B., Béjar V. J. S., Pérez-Garrido A., Zapatero Osorio M. R., Lodieu N., Rebolo R., Pallé E., Nowak G., 2015b, *Discovery of a Young Planetary Mass Companion to the Nearby M Dwarf VHS J125601.92-125723.9*, *ApJ*, **804**, 96
- Geballe T. R., et al., 2002, *Toward Spectral Classification of L and T Dwarfs : Infrared and Optical Spectroscopy and Analysis*, *ApJ*, **564**, 466
- Getley A. K., Carter B., King R., O'Toole S., 2017, *Evidence for a planetary mass third body orbiting the binary star KIC 5095269*, *MNRAS*, **468**, 2932
- Gilbertson C., Ford E. B., Jones D. E., Stenning D. C., 2020, *Toward Extremely Precise Radial Velocities. II. A Tool for Using Multivariate Gaussian Processes to Model Stellar Activity*, *ApJ*, **905**, 155
- Giles H. A. C., et al., 2018, *Transiting planet candidate from K2 with the longest period*, *A&A*, **615**, L13
- Gilliland R. L., et al., 2000, *A Lack of Planets in 47 Tucanae from a Hubble Space Telescope Search*, *ApJ*, **545**, L47
- Gillon M., et al., 2017a, *Two massive rocky planets transiting a K-dwarf 6.5 parsecs away*, *Nature Astronomy*, **1**, 0056
- Gillon M., et al., 2017b, *Seven temperate terrestrial planets around the nearby ultracool dwarf star TRAPPIST-1*, *Nature*, **542**, 456
- Gizis J. E., Reid I. N., Hawley S. L., 2002, *The Palomar/MSU Nearby Star Spectroscopic Survey. III. Chromospheric Activity, M Dwarf Ages, and the Local Star Formation History*, *AJ*, **123**, 3356
- Gizis J. E., et al., 2012, *Discovery of an Unusually Red L-type Brown Dwarf*, *AJ*, **144**, 94
- Goldreich P., Ward W. R., 1973, *The Formation of Planetesimals*, *ApJ*, **183**, 1051
- Goldreich P., Lithwick Y., Sari R., 2004, *Planet Formation by Coagulation : A Focus on Uranus and Neptune*, *ARA&A*, **42**, 549
- Gorlova N. I., Meyer M. R., Rieke G. H., Liebert J., 2003, *Gravity Indicators in the Near-Infrared Spectra of Brown Dwarfs*, *ApJ*, **593**, 1074
- Gould A., et al., 2020, *KMT-2018-BLG-0029Lb : A Very Low Mass-Ratio Spitzer Microlens Planet*, *Journal of Korean Astronomical Society*, **53**, 9
- Goździewski K., Migaszewski C., 2014, *Multiple mean motion resonances in the HR 8799 planetary system*, *MNRAS*, **440**, 3140

- 
- Gravity Collaboration et al., 2019, *First direct detection of an exoplanet by optical interferometry. Astrometry and K-band spectroscopy of HR 8799 e*, *A&A*, **623**, L11
- Gravity Collaboration et al., 2020, *Peering into the formation history of  $\beta$  Pictoris b with VLTI/GRAVITY long-baseline interferometry*, *A&A*, **633**, A110
- Gray D. F., 2008, *The Observation and Analysis of Stellar Photospheres*
- Gressel O., Nelson R. P., Turner N. J., Ziegler U., 2013, *Global Hydromagnetic Simulations of a Planet Embedded in a Dead Zone : Gap Opening, Gas Accretion, and Formation of a Protoplanetary Jet*, *ApJ*, **779**, 59
- Grillmair C. J., Charbonneau D., Burrows A., Armus L., Stauffer J., Meadows V., Van Cleve J., Levine D., 2007, *A Spitzer Spectrum of the Exoplanet HD 189733b*, *ApJ*, **658**, L115
- Hadden S., Lithwick Y., 2017, *Kepler Planet Masses and Eccentricities from TTV Analysis*, *AJ*, **154**, 5
- Haffert S. Y., Bohn A. J., de Boer J., Snellen I. A. G., Brinchmann J., Girard J. H., Keller C. U., Bacon R., 2019, *Two accreting protoplanets around the young star PDS 70*, *Nature Astronomy*, **3**, 749
- Han C., et al., 2021, *KMT-2019-BLG-1715 : planetary microlensing event with three lens masses and two source stars*, arXiv e-prints, p. [arXiv:2104.00293](https://arxiv.org/abs/2104.00293)
- Harrington J., et al., 2019, in EPSC-DPS Joint Meeting 2019. pp EPSC–DPS2019–1238
- Hartman J. D., et al., 2009, *Deep MMT Transit Survey of the Open Cluster M37 IV : Limit on the Fraction of Stars with Planets as Small as  $0.3R_J$* , *ApJ*, **695**, 336
- Hashimoto J., et al., 2011, *Direct Imaging of Fine Structures in Giant Planet-forming Regions of the Protoplanetary Disk Around AB Aurigae*, *ApJ*, **729**, L17
- Hashimoto J., Aoyama Y., Konishi M., Uyama T., Takasao S., Ikoma M., Tanigawa T., 2020, *Accretion Properties of PDS 70b with MUSE*, *AJ*, **159**, 222
- Hauschildt P. H., Baron E., Allard F., 1997, *Parallel Implementation of the PHOENIX Generalized Stellar Atmosphere Program*, *ApJ*, **483**, 390
- Hauschildt P. H., Allard F., Ferguson J., Baron E., Alexander D. R., 1999, *The NEXTGEN Model Atmosphere Grid. II. Spherically Symmetric Model Atmospheres for Giant Stars with Effective Temperatures between 3000 and 6800 K*, *ApJ*, **525**, 871
- Hayashi C., Nakano T., 1963, *Evolution of Stars of Small Masses in the Pre-Main-Sequence Stages*, *Progress of Theoretical Physics*, **30**, 460
- Helled R., Podolak M., Kovetz A., 2006, *Planetesimal capture in the disk instability model*, *Icarus*, **185**, 64
- Helling C., Dehn M., Woitke P., Hauschildt P. H., 2008, *Consistent Simulations of Substellar Atmospheres and Nonequilibrium Dust Cloud Formation*, *ApJ*, **675**, L105
- Helling C., Woitke P., Rimmer P. B., Kamp I., Thi W.-F., Meijerink R., 2014, *Disk Evolution, Element Abundances and Cloud Properties of Young Gas Giant Planets*, *Life*, **4**, 142
- Heng K., 2016, *A Cloudiness Index for Transiting Exoplanets Based on the Sodium and Potassium Lines : Tentative Evidence for Hotter Atmospheres Being Less Cloudy at Visible Wavelengths*, *ApJ*, **826**, L16
-

- 
- Hennebelle P., Commerçon B., Joos M., Klessen R. S., Krumholz M., Tan J. C., Teyssier R., 2011, *Collapse, outflows and fragmentation of massive, turbulent and magnetized prestellar barotropic cores*, *A&A*, **528**, A72
- Henry G. W., Marcy G., Butler R. P., Vogt S. S., 1999, *HD 209458*, *IAU Circ.*, **7307**, 1
- Hester J. J., et al., 1996, *Hubble Space Telescope WFPC2 Imaging of M16 : Photoevaporation and Emerging Young Stellar Objects*, *AJ*, **111**, 2349
- Hoeijmakers H. J., et al., 2018a, *Atomic iron and titanium in the atmosphere of the exoplanet KELT-9b*, *Nature*, **560**, 453
- Hoeijmakers H. J., Schwarz H., Snellen I. A. G., de Kok R. J., Bonnefoy M., Chauvin G., Lagrange A. M., Girard J. H., 2018b, *Medium-resolution integral-field spectroscopy for high-contrast exoplanet imaging. Molecule maps of the  $\beta$  Pictoris system with SINFONI*, *A&A*, **617**, A144
- Hoeijmakers H. J., et al., 2019, *A spectral survey of an ultra-hot Jupiter. Detection of metals in the transmission spectrum of KELT-9 b*, *A&A*, **627**, A165
- Holman M. J., Murray N. W., 2005, *The Use of Transit Timing to Detect Terrestrial-Mass Extrasolar Planets*, *Science*, **307**, 1288
- Houllé M., et al., 2021, *Direct imaging and spectroscopy of exoplanets with the ELT/HARMONI high-contrast module*, arXiv e-prints, p. [arXiv:2104.11251](https://arxiv.org/abs/2104.11251)
- Howard A. W., et al., 2010, *The Occurrence and Mass Distribution of Close-in Super-Earths, Neptunes, and Jupiters*, *Science*, **330**, 653
- Hsu D. C., Ford E. B., Ragozzine D., Ashby K., 2019, *Occurrence Rates of Planets Orbiting FGK Stars : Combining Kepler DR25, Gaia DR2, and Bayesian Inference*, *AJ*, **158**, 109
- Hubeny I., 2017, *Model atmospheres of sub-stellar mass objects*, *MNRAS*, **469**, 841
- Hubickyj O., Bodenheimer P., Lissauer J. J., 2005, *Accretion of the gaseous envelope of Jupiter around a 5-10 Earth-mass core*, *Icarus*, **179**, 415
- Hughes A. M., Duchêne G., Matthews B. C., 2018, *Debris Disks : Structure, Composition, and Variability*, *ARA&A*, **56**, 541
- Huitson C. M., et al., 2013, *An HST optical-to-near-IR transmission spectrum of the hot Jupiter WASP-19b : detection of atmospheric water and likely absence of TiO*, *MNRAS*, **434**, 3252
- Hunziker S., et al., 2020, *RefPlanets : Search for reflected light from extrasolar planets with SPHERE/ZIMPOL*, *A&A*, **634**, A69
- Ida S., Lin D. N. C., 2004, *Toward a Deterministic Model of Planetary Formation. I. A Desert in the Mass and Semimajor Axis Distributions of Extrasolar Planets*, *ApJ*, **604**, 388
- Ida S., Lin D. N. C., 2008, *Toward a Deterministic Model of Planetary Formation. IV. Effects of Type I Migration*, *ApJ*, **673**, 487
- Ida S., Lin D. N. C., 2010, *Toward a Deterministic Model of Planetary Formation. VI. Dynamical Interaction and Coagulation of Multiple Rocky Embryos and Super-Earth Systems around Solar-type Stars*, *ApJ*, **719**, 810
- Ida S., Lin D. N. C., Nagasawa M., 2013, *Toward a Deterministic Model of Planetary Formation. VII. Eccentricity Distribution of Gas Giants*, *ApJ*, **775**, 42
-

- 
- Ida S., Tanaka H., Johansen A., Kanagawa K. D., Tanigawa T., 2018, *Slowing Down Type II Migration of Gas Giants to Match Observational Data*, *ApJ*, **864**, 77
- Inaba S., Tanaka H., Nakazawa K., Wetherill G. W., Kokubo E., 2001, *High-Accuracy Statistical Simulation of Planetary Accretion : II. Comparison with N-Body Simulation*, *Icarus*, **149**, 235
- Ireland M. J., Kraus A., Martinache F., Law N., Hillenbrand L. A., 2011, *Two Wide Planetary-mass Companions to Solar-type Stars in Upper Scorpius*, *ApJ*, **726**, 113
- Itoh Y., et al., 2005, *A Young Brown Dwarf Companion to DH Tauri*, *ApJ*, **620**, 984
- Jayawardhana R., Mohanty S., Basri G., 2003, *Evidence for a T Tauri Phase in Young Brown Dwarfs*, *ApJ*, **592**, 282
- Jenkins J. S., et al., 2019, *Proxima Centauri b is not a transiting exoplanet*, *MNRAS*, **487**, 268
- Jensen A. G., Redfield S., Endl M., Cochran W. D., Koesterke L., Barman T. S., 2011, *A Survey of Alkali Line Absorption in Exoplanetary Atmospheres*, *ApJ*, **743**, 203
- Jin S., Mordasini C., Parmentier V., van Boekel R., Henning T., Ji J., 2014, *Planetary Population Synthesis Coupled with Atmospheric Escape : A Statistical View of Evaporation*, *ApJ*, **795**, 65
- Johnson J. A., Butler R. P., Marcy G. W., Fischer D. A., Vogt S. S., Wright J. T., Peek K. M. G., 2007, *A New Planet around an M Dwarf : Revealing a Correlation between Exoplanets and Stellar Mass*, *ApJ*, **670**, 833
- Johnson J. A., Aller K. M., Howard A. W., Crepp J. R., 2010, *Giant Planet Occurrence in the Stellar Mass-Metallicity Plane*, *PASP*, **122**, 905
- Jovanovic N., et al., 2016, in Marchetti E., Close L. M., Véran J.-P., eds, Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference Series Vol. 9909, Adaptive Optics Systems V. p. 99090W, doi:10.1117/12.2234294
- Jung Y. K., et al., 2015, *OGLE-2013-BLG-0102LA,B : Microlensing Binary with Components at Star/Brown Dwarf and Brown Dwarf/Planet Boundaries*, *ApJ*, **798**, 123
- Kalas P., et al., 2008, *Optical Images of an Exosolar Planet 25 Light-Years from Earth*, *Science*, **322**, 1345
- Kalas P. G., et al., 2015, *Direct Imaging of an Asymmetric Debris Disk in the HD 106906 Planetary System*, *ApJ*, **814**, 32
- Kasper M., Verinaud C., Mawet D., 2013, in Esposito S., Fini L., eds, Proceedings of the Third AO4ELT Conference. p. 8, doi:10.12839/AO4ELT3.12804
- Kasper M., et al., 2021, *PCS — A Roadmap for Exoearth Imaging with the ELT*, *The Messenger*, **182**, 38
- Kass R. E., Raftery A. E., 1995, *Bayes Factors*, *Journal of the American Statistical Association*, **90**, 773
- Kastner J. H., Huenemoerder D. P., Schulz N., Zuckerman B., Weintraub D. A., Gaidos E. J., Negoro H., 1997a, in American Astronomical Society Meeting Abstracts. p. 92.06
- Kastner J. H., Zuckerman B., Weintraub D. A., Forveille T., 1997b, *X-ray and molecular emission from the nearest region of recent star formation.*, *Science*, **277**, 67
-

- Kellogg K., Metchev S., Gagné J., Faherty J., 2016, *The Nearest Isolated Member of the TW Hydrae Association is a Giant Planet Analog*, *ApJ*, **821**, L15
- Kirkpatrick J. D., 2005, *New Spectral Types L and T*, *ARA&A*, **43**, 195
- Kirkpatrick J. D., Henry T. J., Irwin M. J., 1997, *Ultra-Cool M Dwarfs Discovered by QSO Surveys.I : The APM Objects*, *AJ*, **113**, 1421
- Kirkpatrick J. D., et al., 1999a, *Dwarfs Cooler than “M” : The Definition of Spectral Type “L” Using Discoveries from the 2 Micron All-Sky Survey (2MASS)*, *ApJ*, **519**, 802
- Kirkpatrick J. D., Allard F., Bida T., Zuckerman B., Becklin E. E., Chabrier G., Baraffe I., 1999b, *An Improved Optical Spectrum and New Model FITS of the Likely Brown Dwarf GD 165B*, *ApJ*, **519**, 834
- Kirkpatrick J. D., et al., 2000, *67 Additional L Dwarfs Discovered by the Two Micron All Sky Survey*, *AJ*, **120**, 447
- Kirkpatrick J. D., Dahn C. C., Monet D. G., Reid I. N., Gizis J. E., Liebert J., Burgasser A. J., 2001, *Brown Dwarf Companions to G-Type Stars. I. Gliese 417B and Gliese 584C*, *AJ*, **121**, 3235
- Kirkpatrick J. D., et al., 2010, *Discoveries from a Near-infrared Proper Motion Survey Using Multi-epoch Two Micron All-Sky Survey Data*, *ApJS*, **190**, 100
- Kirkpatrick J. D., et al., 2012, *Further Defining Spectral Type “Y” and Exploring the Low-mass End of the Field Brown Dwarf Mass Function*, *ApJ*, **753**, 156
- Klahr H., Bodenheimer P., 2006, *Formation of Giant Planets by Concurrent Accretion of Solids and Gas inside an Anticyclonic Vortex*, *ApJ*, **639**, 432
- Knapp G. R., et al., 2004, *Near-Infrared Photometry and Spectroscopy of L and T Dwarfs : The Effects of Temperature, Clouds, and Gravity*, *AJ*, **127**, 3553
- Knutson H. A., et al., 2007, *A map of the day-night contrast of the extrasolar planet HD 189733b*, *Nature*, **447**, 183
- Kokubo E., Ida S., 1998, *Oligarchic Growth of Protoplanets*, *Icarus*, **131**, 171
- Konacki M., Wolszczan A., 2003, *Masses and Orbital Inclinations of Planets in the PSR B1257+12 System*, *ApJ*, **591**, L147
- Konishi M., et al., 2016, *Discovery of an Inner Disk Component around HD 141569 A*, *ApJ*, **818**, L23
- Konopacky Q. M., Barman T. S., Macintosh B. A., Marois C., 2013, *Detection of Carbon Monoxide and Water Absorption Lines in an Exoplanet Atmosphere*, *Science*, **339**, 1398
- Konopacky Q. M., et al., 2016, *Discovery of a Substellar Companion to the Nearby Debris Disk Host HR 2562*, *ApJ*, **829**, L4
- Kraus A. L., Shkolnik E. L., Allers K. N., Liu M. C., 2014, *A Stellar Census of the Tucana-Horologium Moving Group*, *AJ*, **147**, 146
- Kreidberg L., 2015, *batman : BAsic Transit Model cAlculation in Python*, *PASP*, **127**, 1161
- Kreidberg L., et al., 2014, *A Precise Water Abundance Measurement for the Hot Jupiter WASP-43b*, *ApJ*, **793**, L27

- 
- Kreidberg L., et al., 2015, *A Detection of Water in the Transmission Spectrum of the Hot Jupiter WASP-12b and Implications for Its Atmospheric Composition*, *ApJ*, **814**, 66
- Kretke K. A., Levison H. F., 2014, *Challenges in Forming the Solar System's Giant Planet Cores via Pebble Accretion*, *AJ*, **148**, 109
- Krivov A. V., Löhne T., Sremčević M., 2006, *Dust distributions in debris disks : effects of gravity, radiation pressure and collisions*, *A&A*, **455**, 509
- Kuhn J. R., Potter D., Parise B., 2001, *Imaging Polarimetric Observations of a New Circumstellar Disk System*, *ApJ*, **553**, L189
- Kumar S. S., 1962, *Models for Stars of Very Low Mass*, Institute for Space Studies Report Number X-644-62-78 (1962)
- Lachapelle F.-R., Lafrenière D., Gagné J., Jayawardhana R., Janson M., Helling C., Witte S., 2015, *Characterization of Low-mass, Wide-separation Substellar Companions to Stars in Upper Scorpius : Near-infrared Photometry and Spectroscopy*, *ApJ*, **802**, 61
- Lafrenière D., Marois C., Doyon R., Nadeau D., Artigau É., 2007, *A New Algorithm for Point-Spread Function Subtraction in High-Contrast Imaging : A Demonstration with Angular Differential Imaging*, *ApJ*, **660**, 770
- Lafrenière D., Jayawardhana R., van Kerkwijk M. H., 2008, *Direct Imaging and Spectroscopy of a Planetary-Mass Candidate Companion to a Young Solar Analog*, *ApJ*, **689**, L153
- Lafrenière D., Jayawardhana R., van Kerkwijk M. H., 2010, *The Directly Imaged Planet Around the Young Solar Analog IRXS J160929.1 - 210524 : Confirmation of Common Proper Motion, Temperature, and Mass*, *ApJ*, **719**, 497
- Lagrange A. M., et al., 2009, *A probable giant planet imaged in the  $\beta$  Pictoris disk. VLT/NaCo deep L'-band imaging*, *A&A*, **493**, L21
- Lagrange A. M., et al., 2019, *Post-conjunction detection of  $\beta$  Pictoris b with VLT/SPHERE*, *A&A*, **621**, L8
- Lambrechts M., Johansen A., 2012, *Rapid growth of gas-giant cores by pebble accretion*, *A&A*, **544**, A32
- Latham D. W., Mazeh T., Stefanik R. P., Mayor M., Burki G., 1989, *The unseen companion of HD114762 : a probable brown dwarf*, *Nature*, **339**, 38
- Lavie B., et al., 2017, *HELIOS-RETRIEVAL : An Open-source, Nested Sampling Atmospheric Retrieval Code ; Application to the HR 8799 Exoplanets and Inferred Constraints for Planet Formation*, *AJ*, **154**, 91
- Lee J. M., Fletcher L. N., Irwin P. G. J., 2012, *Optimal estimation retrievals of the atmospheric structure and composition of HD 189733b from secondary eclipse spectroscopy*, *MNRAS*, **420**, 170
- Lee J.-M., Heng K., Irwin P. G. J., 2013, *Atmospheric Retrieval Analysis of the Directly Imaged Exoplanet HR 8799b*, *ApJ*, **778**, 97
- Lee J.-M., Irwin P. G. J., Fletcher L. N., Heng K., Barstow J. K., 2014, *Constraining the Atmospheric Composition of the Day-Night Terminators of HD 189733b : Atmospheric Retrieval with Aerosols*, *ApJ*, **789**, 14

- 
- Léger A., et al., 2009, *Transiting exoplanets from the CoRoT space mission. VIII. CoRoT-7b : the first super-Earth with measured radius*, *A&A*, **506**, 287
- Leggett S. K., 1992, *Infrared Colors of Low-Mass Stars*, *ApJS*, **82**, 351
- Leggett S. K., Allard F., Geballe T. R., Hauschildt P. H., Schweitzer A., 2001, *Infrared Spectra and Spectral Energy Distributions of Late M and L Dwarfs*, *ApJ*, **548**, 908
- Leggett S. K., et al., 2002, *Infrared Photometry of Late-M, L, and T Dwarfs*, *ApJ*, **564**, 452
- Leggett S. K., Liu M. C., Dupuy T. J., Morley C. V., Marley M. S., Saumon D., 2014, *Resolved Spectroscopy of the T8.5 and Y0-0.5 Binary WISEPC J121756.91+162640.2AB*, *ApJ*, **780**, 62
- Leggett S. K., Tremblin P., Esplin T. L., Luhman K. L., Morley C. V., 2017, *The Y-type Brown Dwarfs : Estimates of Mass and Age from New Astrometry, Homogenized Photometry, and Near-infrared Spectroscopy*, *ApJ*, **842**, 118
- Lellouch E., Bézard B., Fouchet T., Feuchtgruber H., Encrenaz T., de Graauw T., 2001, *The deuterium abundance in Jupiter and Saturn from ISO-SWS observations*, *A&A*, **370**, 610
- Lenzen R., Hofmann R., Bizenberger P., Tusche A., 1998, in Fowler A. M., ed., *Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference Series Vol. 3354, Infrared Astronomical Instrumentation*. pp 606–614, doi:10.1117/12.317287
- Lestrade J. F., et al., 2012, *A DEBRIS disk around the planet hosting M-star GJ 581 spatially resolved with Herschel*, *A&A*, **548**, A86
- Line M. R., Parmentier V., 2016, *The Influence of Nonuniform Cloud Cover on Transit Transmission Spectra*, *ApJ*, **820**, 78
- Line M. R., et al., 2013, *A Systematic Retrieval Analysis of Secondary Eclipse Spectra. I. A Comparison of Atmospheric Retrieval Techniques*, *ApJ*, **775**, 137
- Line M. R., Teske J., Burningham B., Fortney J. J., Marley M. S., 2015, *Uniform Atmospheric Retrieval Analysis of Ultracool Dwarfs. I. Characterizing Benchmarks, Gl 570D and HD 3651B*, *ApJ*, **807**, 183
- Line M. R., et al., 2017, *Uniform Atmospheric Retrieval Analysis of Ultracool Dwarfs. II. Properties of 11 T dwarfs*, *ApJ*, **848**, 83
- Liseau R., et al., 2010, *Resolving the cold debris disc around a planet-hosting star . PACS photometric imaging observations of  $q^1$  Eridani (HD 10647, HR 506)*, *A&A*, **518**, L132
- Liu M. C., et al., 2011, *CFBDSIR J1458+1013B : A Very Cold ( $>T10$ ) Brown Dwarf in a Binary System*, *ApJ*, **740**, 108
- Liu M. C., et al., 2013, *The Extremely Red, Young L Dwarf PSO J318.5338-22.8603 : A Free-floating Planetary-mass Analog to Directly Imaged Young Gas-giant Planets*, *ApJ*, **777**, L20
- Liu M. C., Dupuy T. J., Allers K. N., 2016, *The Hawaii Infrared Parallax Program. II. Young Ultracool Field Dwarfs*, *ApJ*, **833**, 96
- Liu S.-F., Hori Y., Müller S., Zheng X., Helled R., Lin D., Isella A., 2019, *The formation of Jupiter’s diluted core by a giant impact*, *Nature*, **572**, 355
- Lockwood A. C., Johnson J. A., Bender C. F., Carr J. S., Barman T., Richert A. J. W., Blake G. A., 2014, *Near-IR Direct Detection of Water Vapor in Tau Boötis b*, *ApJ*, **783**, L29
-

- Lodieu N., Hambly N. C., Jameson R. F., Hodgkin S. T., 2008, *Near-infrared cross-dispersed spectroscopy of brown dwarf candidates in the UpperSco association*, *MNRAS*, **383**, 1385
- Lodieu N., Zapatero Osorio M. R., Béjar V. J. S., Peña Ramírez K., 2018, *The optical + infrared L dwarf spectral sequence of young planetary-mass objects in the Upper Scorpius association*, *MNRAS*, **473**, 2020
- López Martí B., Zapatero Osorio M. R., 2014, *Long-term Ks-band photometric monitoring of L dwarfs*, *A&A*, **568**, A87
- Lucas P. W., Roche P. F., 2000, *A population of very young brown dwarfs and free-floating planets in Orion*, *MNRAS*, **314**, 858
- Lucas P. W., Roche P. F., Allard F., Hauschildt P. H., 2001, *Infrared spectroscopy of substellar objects in Orion*, *MNRAS*, **326**, 695
- Luhman K. L., Liebert J., Rieke G. H., 1997, *Spectroscopy of a Young Brown Dwarf in the rho Ophiuchi Cluster I*, *ApJ*, **489**, L165
- Lupu R. E., Marley M. S., Lewis N., Line M., Traub W. A., Zahnle K., 2016, *Developing Atmospheric Retrieval Methods for Direct Imaging Spectroscopy of Gas Giants in Reflected Light. I. Methane Abundances and Basic Cloud Properties*, *AJ*, **152**, 217
- MacDonald R. J., Madhusudhan N., 2017a, *HD 209458b in new light : evidence of nitrogen chemistry, patchy clouds and sub-solar water*, *MNRAS*, **469**, 1979
- MacDonald R. J., Madhusudhan N., 2017b, *Signatures of Nitrogen Chemistry in Hot Jupiter Atmospheres*, *ApJ*, **850**, L15
- Macías E., Guerra-Alvarado O., Carrasco-González C., Ribas Á., Espaillat C. C., Huang J., Andrews S. M., 2021, *Characterizing the dust content of disk substructures in TW Hydrae*, *A&A*, **648**, A33
- Macintosh B., et al., 2014, *First light of the Gemini Planet Imager*, *Proceedings of the National Academy of Science*, **111**, 12661
- Macintosh B., et al., 2015, *Discovery and spectroscopy of the young jovian planet 51 Eri b with the Gemini Planet Imager*, *Science*, **350**, 64
- Madhusudhan N., 2012, *C/O Ratio as a Dimension for Characterizing Exoplanetary Atmospheres*, *ApJ*, **758**, 36
- Madhusudhan N., 2018, *Atmospheric Retrieval of Exoplanets*. p. 104, [doi:10.1007/978-3-319-55333-7\\_104](https://doi.org/10.1007/978-3-319-55333-7_104)
- Madhusudhan N., 2019, *Exoplanetary Atmospheres : Key Insights, Challenges, and Prospects*, *ARA&A*, **57**, 617
- Madhusudhan N., Seager S., 2009, *A Temperature and Abundance Retrieval Method for Exoplanet Atmospheres*, *ApJ*, **707**, 24
- Madhusudhan N., Seager S., 2010, *On the Inference of Thermal Inversions in Hot Jupiter Atmospheres*, *ApJ*, **725**, 261
- Madhusudhan N., Seager S., 2011, *High Metallicity and Non-equilibrium Chemistry in the Day-side Atmosphere of hot-Neptune GJ 436b*, *ApJ*, **729**, 41

- 
- Madhusudhan N., et al., 2011a, *A high C/O ratio and weak thermal inversion in the atmosphere of exoplanet WASP-12b*, *Nature*, **469**, 64
- Madhusudhan N., Burrows A., Currie T., 2011b, *Model Atmospheres for Massive Gas Giants with Thick Clouds : Application to the HR 8799 Planets and Predictions for Future Detections*, *ApJ*, **737**, 34
- Madhusudhan N., Crouzet N., McCullough P. R., Deming D., Hedges C., 2014, *H<sub>2</sub>O Abundances in the Atmospheres of Three Hot Jupiters*, *ApJ*, **791**, L9
- Madhusudhan N., Apai D., Gandhi S., 2016, *Atmospheric Compositions of Three Brown Dwarfs and Implications for their Formation Conditions*, arXiv e-prints, p. [arXiv:1612.03174](https://arxiv.org/abs/1612.03174)
- Majeau C., Agol E., Cowan N. B., 2012, *A Two-dimensional Infrared Map of the Extrasolar Planet HD 189733b*, *ApJ*, **747**, L20
- Makarov V. V., Urban S., 2000, *A moving group of young stars in Carina-Vela*, *MNRAS*, **317**, 289
- Malfait K., Waelkens C., Waters L. B. F. M., Vandebussche B., Huygen E., de Graauw M. S., 1998, *The spectrum of the young star HD 100546 observed with the Infrared Space Observatory*, *A&A*, **332**, L25
- Malik M., et al., 2017, *HELIOS : An Open-source, GPU-accelerated Radiative Transfer Code for Self-consistent Exoplanetary Atmospheres*, *AJ*, **153**, 56
- Mallén-Ornelas G., Seager S., Yee H. K. C., Minniti D., Gladders M. D., Mallén-Fullerton G. M., Brown T. M., 2003, *The EXPLORE Project. I. A Deep Search for Transiting Extrasolar Planets*, *ApJ*, **582**, 1123
- Mamajek E. E., 2007, in Elmegreen B. G., Palous J., eds, Vol. 237, *Triggered Star Formation in a Turbulent ISM*. pp 442–442, [doi:10.1017/S174392130700230X](https://doi.org/10.1017/S174392130700230X)
- Mamajek E. E., Bell C. P. M., 2014, *On the age of the  $\beta$  Pictoris moving group*, *MNRAS*, **445**, 2169
- Manara C. F., et al., 2013, *X-shooter spectroscopy of young stellar objects. II. Impact of chromospheric emission on accretion rate estimates*, *A&A*, **551**, A107
- Mandt K., Mousis O., Chassefière E., 2015, *Comparative planetology of the history of nitrogen isotopes in the atmospheres of Titan and Mars*, *Icarus*, **254**, 259
- Manjavacas E., et al., 2014, *New constraints on the formation and settling of dust in the atmospheres of young M and L dwarfs*, *A&A*, **564**, A55
- Manjavacas E., et al., 2016, *Hunting for brown dwarf binaries and testing atmospheric models with X-Shooter*, *MNRAS*, **455**, 1341
- Manjavacas E., Lodieu N., Béjar V. J. S., Zapatero-Osorio M. R., Boudreault S., Bonnefoy M., 2020, *Spectral library of age-benchmark low-mass stars and brown dwarfs*, *MNRAS*, **491**, 5925
- Mao S., Paczynski B., 1991, *Gravitational Microlensing by Double Stars and Planetary Systems*, *ApJ*, **374**, L37
- Marconi A., et al., 2021, *HIRES, the High-resolution Spectrograph for the ELT*, *The Messenger*, **182**, 27
-

- 
- Marino S., et al., 2018, *A gap in the planetesimal disc around HD 107146 and asymmetric warm dust emission revealed by ALMA*, *MNRAS*, **479**, 5423
- Marleau G. D., Cumming A., 2014, *Constraining the initial entropy of directly detected exoplanets*, *MNRAS*, **437**, 1378
- Marley M. S., Fortney J. J., Hubickyj O., Bodenheimer P., Lissauer J. J., 2007, *On the Luminosity of Young Jupiters*, *ApJ*, **655**, 541
- Marley M. S., Saumon D., Goldblatt C., 2010, *A Patchy Cloud Model for the L to T Dwarf Transition*, *ApJ*, **723**, L117
- Marley M. S., et al., 2021, *The Sonora Brown Dwarf Atmosphere and Evolution Models I. Model Description and Application to Cloudless Atmospheres in Rainout Chemical Equilibrium*, arXiv e-prints, p. [arXiv:2107.07434](https://arxiv.org/abs/2107.07434)
- Marois C., Doyon R., Racine R., Nadeau D., 2000, *Efficient Speckle Noise Attenuation in Faint Companion Imaging*, *PASP*, **112**, 91
- Marois C., Lafrenière D., Doyon R., Macintosh B., Nadeau D., 2006, *Angular Differential Imaging : A Powerful High-Contrast Imaging Technique*, *ApJ*, **641**, 556
- Marois C., Macintosh B., Barman T., Zuckerman B., Song I., Patience J., Lafrenière D., Doyon R., 2008, *Direct Imaging of Multiple Planets Orbiting the Star HR 8799*, *Science*, **322**, 1348
- Marois C., Zuckerman B., Konopacky Q. M., Macintosh B., Barman T., 2010, *Images of a fourth planet orbiting HR 8799*, *Nature*, **468**, 1080
- Márquez-Neila P., Fisher C., Sznitman R., Heng K., 2018, *Supervised machine learning for analysing spectra of exoplanetary atmospheres*, *Nature Astronomy*, **2**, 719
- Martin E. L., Rebolo R., Zapatero-Osorio M. R., 1996, *Spectroscopy of New Substellar Candidates in the Pleiades : Toward a Spectral Sequence for Young Brown Dwarfs*, *ApJ*, **469**, 706
- Martin E. C., et al., 2017, *Surface Gravities for 228 M, L, and T Dwarfs in the NIRSPEC Brown Dwarf Spectroscopic Survey*, *ApJ*, **838**, 73
- Masciadri E., Mundt R., Henning T., Alvarez C., Barrado y Navascués D., 2005, *A Search for Hot Massive Extrasolar Planets around Nearby Young Stars with the Adaptive Optics System NACO*, *ApJ*, **625**, 1004
- Masuda K., 2017, *Eccentric Companions to Kepler-448b and Kepler-693b : Clues to the Formation of Warm Jupiters*, *AJ*, **154**, 64
- Matsumoto T., Hanawa T., 2003, *Fragmentation of a Molecular Cloud Core versus Fragmentation of the Massive Protoplanetary Disk in the Main Accretion Phase*, *ApJ*, **595**, 913
- Mawet D., et al., 2017, in *Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference Series*. p. 1040029, [doi:10.1117/12.2274891](https://doi.org/10.1117/12.2274891)
- Mayor M., Queloz D., 1995, *A Jupiter-mass companion to a solar-type star*, *Nature*, **378**, 355
- Mayor M., et al., 2009, *The HARPS search for southern extra-solar planets. XVIII. An Earth-mass planet in the GJ 581 planetary system*, *A&A*, **507**, 487
- Mayor M., et al., 2011, *The HARPS search for southern extra-solar planets XXXIV. Occurrence, mass distribution and orbital properties of super-Earths and Neptune-mass planets*, arXiv e-prints, p. [arXiv:1109.2497](https://arxiv.org/abs/1109.2497)
-

- 
- Mazeh T., et al., 2000, *The Spectroscopic Orbit of the Planetary Companion Transiting HD 209458*, *ApJ*, **532**, L55
- Mazeh T., Holczer T., Faigler S., 2016, *Dearth of short-period Neptunian exoplanets : A desert in period-mass and period-radius planes*, *A&A*, **589**, A75
- Mazzalay X., et al., 2013, *Molecular gas in the centre of nearby galaxies from VLT/SINFONI integral field spectroscopy - I. Morphology and mass inventory*, *MNRAS*, **428**, 2389
- McGovern M. R., Kirkpatrick J. D., McLean I. S., Burgasser A. J., Prato L., Lowrance P. J., 2004, *Identifying Young Brown Dwarfs Using Gravity-Sensitive Spectral Features*, *ApJ*, **600**, 1020
- McLean I. S., McGovern M. R., Burgasser A. J., Kirkpatrick J. D., Prato L., Kim S. S., 2003, *The NIRSPEC Brown Dwarf Spectroscopic Survey. I. Low-Resolution Near-Infrared Spectra*, *ApJ*, **596**, 561
- McLeod A. F., et al., 2019, *Optical IFU spectroscopy of a bipolar microquasar jet in NGC 300*, *MNRAS*, **485**, 3476
- McMahon R. G., Banerji M., Gonzalez E., Koposov S. E., Bejar V. J., Lodieu N., Rebolo R., VHS Collaboration 2013, *First Scientific Results from the VISTA Hemisphere Survey (VHS)*, *The Messenger*, **154**, 35
- Meech K., Raymond S. N., 2019, *Origin of Earth's water : sources and constraints*, arXiv e-prints, p. [arXiv:1912.04361](https://arxiv.org/abs/1912.04361)
- Ment K., Fischer D. A., Bakos G., Howard A. W., Isaacson H., 2018, *Radial Velocities from the N2K Project : Six New Cold Gas Giant Planets Orbiting HD 55696, HD 98736, HD 148164, HD 203473, and HD 211810*, *AJ*, **156**, 213
- Mercer A., Stamatellos D., 2020, *Planet formation around M dwarfs via disc instability. Fragmentation conditions and protoplanet properties*, *A&A*, **633**, A116
- Mesa D., et al., 2019, *VLT/SPHERE exploration of the young multiplanetary system PDS70*, *A&A*, **632**, A25
- Meshkat T., Kenworthy M. A., Quanz S. P., Amara A., 2014, *Optimized Principal Component Analysis on Coronagraphic Images of the Fomalhaut System*, *ApJ*, **780**, 17
- Metchev S. A., Hillenbrand L. A., 2009, *The Palomar/Keck Adaptive Optics Survey of Young Solar Analogs : Evidence for a Universal Companion Mass Function*, *ApJS*, **181**, 62
- Miles B. E., et al., 2020, *Observations of Disequilibrium CO Chemistry in the Coldest Brown Dwarfs*, *AJ*, **160**, 63
- Miley J. M., Panić O., Booth R. A., Ilee J. D., Ida S., Kunitomo M., 2021, *The impact of pre-main sequence stellar evolution on mid-plane snowline locations and C/O in planet forming discs*, *MNRAS*, **500**, 4658
- Milli J., Mouillet D., Mawet D., Schmid H. M., Bazzon A., Girard J. H., Dohlen K., Roelfsema R., 2013, *Prospects of detecting the polarimetric signature of the Earth-mass planet  $\alpha$  Centauri B b with SPHERE/ZIMPOL*, *A&A*, **556**, A64
- Milli J., et al., 2017a, *Discovery of a low-mass companion inside the debris ring surrounding the F5V star HD 206893*, *A&A*, **597**, L2
- Milli J., et al., 2017b, *Near-infrared scattered light properties of the HR 4796 A dust ring. A measured scattering phase function from 13.6° to 166.6°*, *A&A*, **599**, A108
-

- 
- Miyazaki S., et al., 2018, *MOA-2015-BLG-337 : A Planetary System with a Low-mass Brown Dwarf/Planetary Boundary Host, or a Brown Dwarf Binary*, *AJ*, **156**, 136
- Mochejska B. J., Stanek K. Z., Sasselov D. D., Szentgyorgyi A. H., 2002, *Planets in Stellar Clusters Extensive Search. I. Discovery of 47 Low-Amplitude Variables in the Metal-rich Cluster NGC 6791 with Millimagitude Image Subtraction Photometry*, *AJ*, **123**, 3460
- Mohanty S., Jayawardhana R., Huélamo N., Mamajek E., 2007, *The Planetary Mass Companion 2MASS 1207-3932B : Temperature, Mass, and Evidence for an Edge-on Disk*, *ApJ*, **657**, 1064
- Mollière P., Snellen I. A. G., 2019, *Detecting isotopologues in exoplanet atmospheres using ground-based high-dispersion spectroscopy*, *A&A*, **622**, A139
- Mollière P., van Boekel R., Bouwman J., Henning T., Lagage P. O., Min M., 2017, *Observing transiting planets with JWST. Prime targets and their synthetic spectral observations*, *A&A*, **600**, A10
- Monnier J. D., et al., 2019, *Multiple Spiral Arms in the Disk around Intermediate-mass Binary HD 34700A*, *ApJ*, **872**, 122
- Morbidelli A., Bottke W. F., Nesvorný D., Levison H. F., 2009, *Asteroids were born big*, *Icarus*, **204**, 558
- Mordasini C., 2018, *Planetary Population Synthesis*. p. 143, doi:10.1007/978-3-319-55333-7\_143
- Mordasini C., Klahr H., Alibert Y., Benz W., Dittkrist K.-M., 2010, *Theory of planet formation*, arXiv e-prints, p. arXiv:1012.5281
- Mordasini C., Alibert Y., Benz W., Klahr H., Henning T., 2012a, *Extrasolar planet population synthesis . IV. Correlations with disk metallicity, mass, and lifetime*, *A&A*, **541**, A97
- Mordasini C., Alibert Y., Klahr H., Henning T., 2012b, *Characterization of exoplanets from their formation. I. Models of combined planet formation and evolution*, *A&A*, **547**, A111
- Mordasini C., Marleau G. D., Mollière P., 2017, *Characterization of exoplanets from their formation. III. The statistics of planetary luminosities*, *A&A*, **608**, A72
- Morley C. V., Fortney J. J., Marley M. S., Visscher C., Saumon D., Leggett S. K., 2012, *Neglected Clouds in T and Y Dwarf Atmospheres*, *ApJ*, **756**, 172
- Morley C. V., et al., 2018, *An L Band Spectrum of the Coldest Brown Dwarf*, *ApJ*, **858**, 97
- Morley C. V., Skemer A. J., Miles B. E., Line M. R., Lopez E. D., Brogi M., Freedman R. S., Marley M. S., 2019, *Measuring the D/H Ratios of Exoplanets and Brown Dwarfs*, *ApJ*, **882**, L29
- Morton T. D., Bryson S. T., Coughlin J. L., Rowe J. F., Ravichandran G., Petigura E. A., Haas M. R., Batalha N. M., 2016, *False Positive Probabilities for all Kepler Objects of Interest : 1284 Newly Validated Planets and 428 Likely False Positives*, *ApJ*, **822**, 86
- Moses J. I., Madhusudhan N., Visscher C., Freedman R. S., 2013, *Chemical Consequences of the C/O Ratio on Hot Jupiters : Examples from WASP-12b, CoRoT-2b, XO-1b, and HD 189733b*, *ApJ*, **763**, 25
- Mróz P., et al., 2019, *Two new free-floating or wide-orbit planets from microlensing*, *A&A*, **622**, A201

- 
- Mukherjee S., Batalha N. E., Marley M. S., 2021, *Cloud Parameterizations and their Effect on Retrievals of Exoplanet Reflection Spectroscopy*, arXiv e-prints, p. [arXiv:2102.05305](https://arxiv.org/abs/2102.05305)
- Müller A., et al., 2018a, *Orbital and atmospheric characterization of the planet within the gap of the PDS 70 transition disk*, *A&A*, **617**, L2
- Müller S., Helled R., Mayer L., 2018b, *On the Diversity in Mass and Orbital Radius of Giant Planets Formed via Disk Instability*, *ApJ*, **854**, 112
- Murphy S. J., Bedding T. R., Shibahashi H., 2016, *A Planet in an 840 Day Orbit around a Kepler Main-sequence A Star Found from Phase Modulation of Its Pulsations*, *ApJ*, **827**, L17
- Muto T., et al., 2012, *Discovery of Small-scale Spiral Structures in the Disk of SAO 206462 (HD 135344B) : Implications for the Physical State of the Disk from Spiral Density Wave Theory*, *ApJ*, **748**, L22
- Nakajima T., Oppenheimer B. R., Kulkarni S. R., Golimowski D. A., Matthews K., Durrance S. T., 1995, *Discovery of a cool brown dwarf*, *Nature*, **378**, 463
- Natta A., Testi L., Muzerolle J., Randich S., Comerón F., Persi P., 2004, *Accretion in brown dwarfs : An infrared view*, *A&A*, **424**, 603
- Naud M.-E., et al., 2014, *Discovery of a Wide Planetary-mass Companion to the Young M3 Star GU Psc*, *ApJ*, **787**, 5
- Nayakshin S., 2010, *Formation of planets by tidal downsizing of giant planet embryos*, *MNRAS*, **408**, L36
- Nayakshin S., 2017, *Dawes Review 7 : The Tidal Downsizing Hypothesis of Planet Formation*, *PASA*, **34**, e002
- Nayakshin S., Fletcher M., 2015, *Tidal Downsizing model - III. Planets from sub-Earths to brown dwarfs : structure and metallicity preferences*, *MNRAS*, **452**, 1654
- Ndugu N., Bitsch B., Jurua E., 2018, *Planet population synthesis driven by pebble accretion in cluster environments*, *MNRAS*, **474**, 886
- Neckel H., Labs D., 1994, *Solar Limb Darkening 1986-1990 Lambda 303-NANOMETERS to 1099-NANOMETERS*, *Sol. Phys.*, **153**, 91
- Neuhäuser R., Guenther E. W., Petr M. G., Brandner W., Huélamo N., Alves J., 2000, *Spectrum and proper motion of a brown dwarf companion of the T Tauri star CoD-337795*, *A&A*, **360**, L39
- Newton M. A., Raftery A. E., 1994, *Approximate Bayesian Inference with the Weighted Likelihood Bootstrap*, *Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Methodological)*, **56**, 3
- Niedzielski A., Nowak G., Adamów M., Wolszczan A., 2009, *Substellar-mass Companions to the K-dwarf BD+14 4559 and the K-giants HD 240210 and BD+20 2457*, *ApJ*, **707**, 768
- Nielsen E. L., et al., 2019, *The Gemini Planet Imager Exoplanet Survey : Giant Planet and Brown Dwarf Demographics from 10 to 100 au*, *AJ*, **158**, 13
- Nikolov N., Sing D. K., Gibson N. P., Fortney J. J., Evans T. M., Barstow J. K., Kataria T., Wilson P. A., 2016, *VLT FORS2 Comparative Transmission Spectroscopy : Detection of Na in the Atmosphere of WASP-39b from the Ground*, *ApJ*, **832**, 191

- 
- Nowak M., et al., 2020, *Direct confirmation of the radial-velocity planet  $\beta$  Pictoris c*, *A&A*, **642**, L2
- Nugroho S. K., Kawahara H., Masuda K., Hirano T., Kotani T., Tajitsu A., 2017, *High-resolution Spectroscopic Detection of TiO and a Stratosphere in the Day-side of WASP-33b*, *AJ*, **154**, 221
- Öberg K. I., Murray-Clay R., Bergin E. A., 2011, *The Effects of Snowlines on C/O in Planetary Atmospheres*, *ApJ*, **743**, L16
- Oklopčić A., Silva M., Montero-Camacho P., Hirata C. M., 2020, *Detecting Magnetic Fields in Exoplanets with Spectropolarimetry of the Helium Line at 1083 nm*, *ApJ*, **890**, 88
- Oppenheimer B. R., Kulkarni S. R., Matthews K., van Kerkwijk M. H., 1998, *The Spectrum of the Brown Dwarf Gliese 229B*, *ApJ*, **502**, 932
- Oppenheimer B. R., et al., 2008, *The Solar-System-Scale Disk around AB Aurigae*, *ApJ*, **679**, 1574
- Ormel C. W., Klahr H. H., 2010, *The effect of gas drag on the growth of protoplanets. Analytical expressions for the accretion of small bodies in laminar disks*, *A&A*, **520**, A43
- Ormel C. W., Dullemond C. P., Spaans M., 2010, *Accretion among preplanetary bodies : The many faces of runaway growth*, *Icarus*, **210**, 507
- Orosz J. A., et al., 2012, *Kepler-47 : A Transiting Circumbinary Multiplanet System*, *Science*, **337**, 1511
- Otten G. P. P. L., et al., 2021, *Direct characterization of young giant exoplanets at high spectral resolution by coupling SPHERE and CRIRES+*, *A&A*, **646**, A150
- Palla F., Stahler S. W., 1999, *Star Formation in the Orion Nebula Cluster*, *ApJ*, **525**, 772
- Papaloizou J. C. B., Terquem C., 1999, *Critical Protoplanetary Core Masses in Protoplanetary Disks and the Formation of Short-Period Giant Planets*, *ApJ*, **521**, 823
- Patience J., King R. R., de Rosa R. J., Marois C., 2010, *The highest resolution near infrared spectrum of the imaged planetary mass companion 2M1207 b*, *A&A*, **517**, A76
- Patience J., King R. R., De Rosa R. J., Vigan A., Witte S., Rice E., Helling C., Hauschildt P., 2012, *Spectroscopy across the brown dwarf/planetary mass boundary. I. Near-infrared JHK spectra*, *A&A*, **540**, A85
- Peña Ramírez K., Béjar V. J. S., Zapatero Osorio M. R., Petr-Gotzens M. G., Martín E. L., 2012, *New Isolated Planetary-mass Objects and the Stellar and Substellar Mass Function of the  $\sigma$  Orionis Cluster*, *ApJ*, **754**, 30
- Pearson K. A., 2019, *A Search for Multiplanet Systems with TESS Using a Bayesian N-body Retrieval and Machine Learning*, *AJ*, **158**, 243
- Pecaut M. J., Mamajek E. E., Bubar E. J., 2012, *A Revised Age for Upper Scorpius and the Star Formation History among the F-type Members of the Scorpius-Centaurus OB Association*, *ApJ*, **746**, 154
- Penny M. T., Gaudi B. S., Kerins E., Rattenbury N. J., Mao S., Robin A. C., Calchi Novati S., 2019, *Predictions of the WFIRST Microlensing Survey. I. Bound Planet Detection Rates*, *ApJS*, **241**, 3
-

- 
- Pepe F., et al., 2011, *The HARPS search for Earth-like planets in the habitable zone. I. Very low-mass planets around <ASTROBJ>HD 20794</ASTROBJ>, <ASTROBJ>HD 85512</ASTROBJ>, and <ASTROBJ>HD 192310</ASTROBJ>*, *A&A*, **534**, A58
- Pepe F., et al., 2021, *ESPRESSO at VLT. On-sky performance and first results*, *A&A*, **645**, A96
- Perryman M., Hartman J., Bakos G. Á., Lindegren L., 2014, *Astrometric Exoplanet Detection with Gaia*, *ApJ*, **797**, 14
- Petersburg R. R., et al., 2020, *An Extreme-precision Radial-velocity Pipeline : First Radial Velocities from EXPRES*, *AJ*, **159**, 187
- Petigura E. A., et al., 2018, *The California-Kepler Survey. IV. Metal-rich Stars Host a Greater Diversity of Planets*, *AJ*, **155**, 89
- Petit dit de la Roche D. J. M., Hoeijmakers H. J., Snellen I. A. G., 2018, *Molecule mapping of HR8799b using OSIRIS on Keck. Strong detection of water and carbon monoxide, but no methane*, *A&A*, **616**, A146
- Petrus S., et al., 2020, *A new take on the low-mass brown dwarf companions on wide orbits in Upper-Scorpius*, *A&A*, **633**, A124
- Petrus S., et al., 2021, *Medium-resolution spectrum of the exoplanet HIP 65426 b*, *A&A*, **648**, A59
- Pinte C., et al., 2018, *Kinematic Evidence for an Embedded Protoplanet in a Circumstellar Disk*, *ApJ*, **860**, L13
- Pinte C., et al., 2019, *Kinematic detection of a planet carving a gap in a protoplanetary disk*, *Nature Astronomy*, **3**, 1109
- Pinte C., et al., 2020, *Nine Localized Deviations from Keplerian Rotation in the DSHARP Circumstellar Disks : Kinematic Evidence for Protoplanets Carving the Gaps*, *ApJ*, **890**, L9
- Piskorz D., et al., 2016, *Evidence for the Direct Detection of the Thermal Spectrum of the Non-Transiting Hot Gas Giant HD 88133 b*, *ApJ*, **832**, 131
- Poleski R., et al., 2014, *Triple Microlens OGLE-2008-BLG-092L : Binary Stellar System with a Circumprimary Uranus-type Planet*, *ApJ*, **795**, 42
- Pollack J. B., Hubickyj O., Bodenheimer P., Lissauer J. J., Podolak M., Greenzweig Y., 1996, *Formation of the Giant Planets by Concurrent Accretion of Solids and Gas*, *Icarus*, **124**, 62
- Preibisch T., Mamajek E., 2008, *The Nearest OB Association : Scorpius-Centaurus (Sco OB2)*. p. 235
- Qian S. B., Liao W. P., Zhu L. Y., Dai Z. B., 2010, *Detection of a Giant Extrasolar Planet Orbiting the Eclipsing Polar DP Leo*, *ApJ*, **708**, L66
- Qian S. B., Liu L., Zhu L. Y., Dai Z. B., Fernández Lajús E., Baume G. L., 2012, *A circumbinary planet in orbit around the short-period white dwarf eclipsing binary RR Cae*, *MNRAS*, **422**, L24
- Quanz S. P., Amara A., Meyer M. R., Girard J. H., Kenworthy M. A., Kasper M., 2015, *Confirmation and Characterization of the Protoplanet HD 100546 b—Direct Evidence for Gas Giant Planet Formation at 50 AU*, *ApJ*, **807**, 64

- 
- Quirrenbach A., et al., 2014, in Ramsay S. K., McLean I. S., Takami H., eds, Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference Series Vol. 9147, Ground-based and Airborne Instrumentation for Astronomy V. p. 91471F, [doi:10.1117/12.2056453](https://doi.org/10.1117/12.2056453)
- Racine R., Walker G. A. H., Nadeau D., Doyon R., Marois C., 1999, *Speckle Noise and the Detection of Faint Companions*, *PASP*, **111**, 587
- Radigan J., Jayawardhana R., Lafrenière D., Artigau É., Marley M., Saumon D., 2012, *Large-amplitude Variations of an L/T Transition Brown Dwarf : Multi-wavelength Observations of Patchy, High-contrast Cloud Features*, *ApJ*, **750**, 105
- Rajan A., et al., 2015, *Characterizing the Atmospheres of the HR8799 Planets with HST/WFC3*, *ApJ*, **809**, L33
- Rameau J., et al., 2013a, *A survey of young, nearby, and dusty stars conducted to understand the formation of wide-orbit giant planets. VLT/NaCo adaptive optics thermal and angular differential imaging*, *A&A*, **553**, A60
- Rameau J., et al., 2013b, *Confirmation of the Planet around HD 95086 by Direct Imaging*, *ApJ*, **779**, L26
- Rameau J., Chanussot J., Carlotti A., Bonnefoy M., Delorme P., 2021, *Spectral unmixing for exoplanet direct detection in hyperspectral data*, *A&A*, **649**, A143
- Rauer H., et al., 2014, *The PLATO 2.0 mission*, *Experimental Astronomy*, **38**, 249
- Raymond S. N., Morbidelli A., 2014, in Complex Planetary Systems, Proceedings of the International Astronomical Union. pp 194–203 ([arXiv:1409.6340](https://arxiv.org/abs/1409.6340)), [doi:10.1017/S1743921314008254](https://doi.org/10.1017/S1743921314008254)
- Raymond S. N., Morbidelli A., 2020, *Planet formation : key mechanisms and global models*, arXiv e-prints, p. [arXiv:2002.05756](https://arxiv.org/abs/2002.05756)
- Raymond S. N., Armitage P. J., Gorelick N., 2010, *Planet-Planet Scattering in Planetesimal Disks. II. Predictions for Outer Extrasolar Planetary Systems*, *ApJ*, **711**, 772
- Raymond S. N., et al., 2012, *Debris disks as signposts of terrestrial planet formation. II. Dependence of exoplanet architectures on giant planet and disk properties*, *A&A*, **541**, A11
- Rebolo R., Zapatero Osorio M. R., Martín E. L., 1995, *Discovery of a brown dwarf in the Pleiades star cluster*, *Nature*, **377**, 129
- Redfield S., Endl M., Cochran W. D., Koesterke L., 2008, *Sodium Absorption from the Exoplanetary Atmosphere of HD 189733b Detected in the Optical Transmission Spectrum*, *ApJ*, **673**, L87
- Reid I. N., Cruz K. L., Kirkpatrick J. D., Allen P. R., Mungall F., Liebert J., Lowrance P., Sweet A., 2008, *Meeting the Cool Neighbors. X. Ultracool Dwarfs from the 2MASS All-Sky Data Release*, *AJ*, **136**, 1290
- Ricci L., et al., 2017, *ALMA Observations of the Young Substellar Binary System 2M1207*, *AJ*, **154**, 24
- Rice E. L., Barman T., Mclean I. S., Prato L., Kirkpatrick J. D., 2010, *Physical Properties of Young Brown Dwarfs and Very Low Mass Stars Inferred from High-resolution Model Spectra*, *ApJS*, **186**, 63

- 
- Ricker G. R., et al., 2015, *Transiting Exoplanet Survey Satellite (TESS)*, *Journal of Astronomical Telescopes, Instruments, and Systems*, **1**, 014003
- Rigliaco E., Natta A., Testi L., Randich S., Alcalà J. M., Covino E., Stelzer B., 2012, *X-shooter spectroscopy of young stellar objects. I. Mass accretion rates of low-mass T Tauri stars in  $\sigma$  Orionis*, *A&A*, **548**, A56
- Robertson P., 2018, *Aliasing in the Radial Velocities of YZ Ceti : An Ultra-short Period for YZ Ceti c ?*, *ApJ*, **864**, L28
- Robertson P., Mahadevan S., 2014, *Disentangling Planets and Stellar Activity for Gliese 667C*, *ApJ*, **793**, L24
- Rodriguez D. R., Zuckerman B., Melis C., Song I., 2011, *The Ultra Cool Brown Dwarf Companion of WD 0806-661B : Age, Mass, and Formation Mechanism*, *ApJ*, **732**, L29
- Romero G. E., del Valle M. V., Martí J., Luque-Escamilla P., 2011, *High-energy radiation from T Tauri stars*, arXiv e-prints, p. [arXiv:1104.2916](https://arxiv.org/abs/1104.2916)
- Rousset G., et al., 2003, in Wizinowich P. L., Bonaccini D., eds, Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference Series Vol. 4839, Adaptive Optical System Technologies II. pp 140–149, [doi:10.1117/12.459332](https://doi.org/10.1117/12.459332)
- Rowan D., et al., 2016, *The Lick-Carnegie Exoplanet Survey : HD 32963—A New Jupiter Analog Orbiting a Sun-like Star*, *ApJ*, **817**, 104
- Ruffio J.-B., et al., 2019, *Radial Velocity Measurements of HR 8799 b and c with Medium Resolution Spectroscopy*, *AJ*, **158**, 200
- Sahlmann J., Lazorenko P. F., Ségransan D., Martín E. L., Queloz D., Mayor M., Udry S., 2013, *Astrometric orbit of a low-mass companion to an ultracool dwarf*, *A&A*, **556**, A133
- Samland M., et al., 2017, *Spectral and atmospheric characterization of 51 Eridani b using VLT/SPHERE*, *A&A*, **603**, A57
- Santamaría-Miranda A., Cáceres C., Schreiber M. R., Hardy A., Bayo A., Parsons S. G., Gromadzki M., Aguayo Villegas A. B., 2018, *Accretion signatures in the X-shooter spectrum of the substellar companion to SR12*, *MNRAS*, **475**, 2994
- Santerne A., et al., 2016, *SOPHIE velocimetry of Kepler transit candidates. XVII. The physical properties of giant exoplanets within 400 days of period*, *A&A*, **587**, A64
- Santos N. C., et al., 2004, *The HARPS survey for southern extra-solar planets. II. A 14 Earth-masses exoplanet around  $\mu$  Arae*, *A&A*, **426**, L19
- Santos N. C., et al., 2014, *The HARPS search for southern extra-solar planets. XXXV. The interesting case of HD 41248 : stellar activity, no planets ?*, *A&A*, **566**, A35
- Sato B., et al., 2005, *The N2K Consortium. II. A Transiting Hot Saturn around HD 149026 with a Large Dense Core*, *ApJ*, **633**, 465
- Saumon D., Marley M. S., 2008, *The Evolution of L and T Dwarfs in Color-Magnitude Diagrams*, *ApJ*, **689**, 1327
- Saumon D., Chabrier G., van Horn H. M., 1995, *An Equation of State for Low-Mass Stars and Giant Planets*, *ApJS*, **99**, 713
-

- 
- Saumon D., Geballe T. R., Leggett S. K., Marley M. S., Freedman R. S., Lodders K., Fegley B. J., Sengupta S. K., 2000, *Molecular Abundances in the Atmosphere of the T Dwarf GL 229B*, *ApJ*, **541**, 374
- Schmidt S. J., Cruz K. L., Bongiorno B. J., Liebert J., Reid I. N., 2007, *Activity and Kinematics of Ultracool Dwarfs, Including an Amazing Flare Observation*, *AJ*, **133**, 2258
- Schmidt T. O. B., Neuhäuser R., Seifahrt A., Vogt N., Bedalov A., Helling C., Witte S., Hauschildt P. H., 2008, *Direct evidence of a sub-stellar companion around CT Chamaeleontis*, *A&A*, **491**, 311
- Schmidt S. J., Hawley S. L., West A. A., Bochanski J. J., Davenport J. R. A., Ge J., Schneider D. P., 2015, *BOSS Ultracool Dwarfs. I. Colors and Magnetic Activity of M and L Dwarfs*, *AJ*, **149**, 158
- Schneider G., et al., 2014, *Probing for Exoplanets Hiding in Dusty Debris Disks : Disk Imaging, Characterization, and Exploration with HST/STIS Multi-roll Coronagraphy*, *AJ*, **148**, 59
- Schneider A. C., et al., 2015, *Hubble Space Telescope Spectroscopy of Brown Dwarfs Discovered with the Wide-field Infrared Survey Explorer*, *ApJ*, **804**, 92
- Schneider G., et al., 2016a, *Deep HST/STIS Visible-light Imaging of Debris Systems around Solar Analog Hosts*, *AJ*, **152**, 64
- Schneider A. C., Windsor J., Cushing M. C., Kirkpatrick J. D., Wright E. L., 2016b, *WISEA J114724.10-204021.3 : A Free-floating Planetary Mass Member of the TW Hya Association*, *ApJ*, **822**, L1
- Schwarz H., Brogi M., de Kok R., Birkby J., Snellen I., 2015, *Evidence against a strong thermal inversion in HD 209458b from high-dispersion spectroscopy*, *A&A*, **576**, A111
- Seager S., Sasselov D. D., 1998, *Extrasolar Giant Planets under Strong Stellar Irradiation*, *ApJ*, **502**, L157
- Seager S., Sasselov D. D., 2000, *Theoretical Transmission Spectra during Extrasolar Giant Planet Transits*, *ApJ*, **537**, 916
- Ségransan D., et al., 2011, *The HARPS search for southern extra-solar planets. XXIX. Four new planets in orbit around the moderately active dwarfs <ASTROBJ>HD 63765</ASTROBJ>, <ASTROBJ>HD 104067</ASTROBJ>, <ASTROBJ>HD 125595</ASTROBJ>, and <ASTROBJ>HIP 70849</ASTROBJ>*, *A&A*, **535**, A54
- Seifahrt A., Neuhäuser R., Hauschildt P. H., 2007, *Near-infrared integral-field spectroscopy of the companion to GQ Lupi*, *A&A*, **463**, 309
- Shallue C. J., Vanderburg A., 2018, *Identifying Exoplanets with Deep Learning : A Five-planet Resonant Chain around Kepler-80 and an Eighth Planet around Kepler-90*, *AJ*, **155**, 94
- Shin I. G., et al., 2016, *A Super-Jupiter Microlens Planet Characterized by High-Cadence KMT-NeT Microlensing Survey Observations of OGLE-2015-BLG-0954*, *Journal of Korean Astronomical Society*, **49**, 73
- Shkolnik E. L., Allers K. N., Kraus A. L., Liu M. C., Flagg L., 2017, *All-sky Co-moving Recovery Of Nearby Young Members (ACRONYM). II. The  $\beta$  Pictoris Moving Group*, *AJ*, **154**, 69
- Shporer A., Hu R., 2015, *Studying Atmosphere-dominated Hot Jupiter Kepler Phase Curves : Evidence that Inhomogeneous Atmospheric Reflection Is Common*, *AJ*, **150**, 112
-

- 
- Sigurdsson S., Richer H. B., Hansen B. M., Stairs I. H., Thorsett S. E., 2003, *A Young White Dwarf Companion to Pulsar B1620-26 : Evidence for Early Planet Formation*, *Science*, **301**, 193
- Silvotti R., et al., 2007a, in Napiwotzki R., Burleigh M. R., eds, *Astronomical Society of the Pacific Conference Series Vol. 372, 15th European Workshop on White Dwarfs*. p. 369 ([arXiv:astro-ph/0703753](https://arxiv.org/abs/astro-ph/0703753))
- Silvotti R., et al., 2007b, *A giant planet orbiting the 'extreme horizontal branch' star V391 Pegasi*, *Nature*, **449**, 189
- Silvotti R., et al., 2014, *Kepler detection of a new extreme planetary system orbiting the subdwarf-B pulsator KIC 10001893*, *A&A*, **570**, A130
- Skilling J., 2004, in *American Institute of Physics Conference Series*.
- Skrutskie M. F., et al., 1997, *The Two Micron All Sky Survey (2MASS) : Overview and Status..* p. 25, [doi:10.1007/978-94-011-5784-1\\_4](https://doi.org/10.1007/978-94-011-5784-1_4)
- Smette A., et al., 2015, *Molecfit : A general tool for telluric absorption correction. I. Method and application to ESO instruments*, *A&A*, **576**, A77
- Snellen I. A. G., Brown A. G. A., 2018, *The mass of the young planet Beta Pictoris b through the astrometric motion of its host star*, *Nature Astronomy*, **2**, 883
- Snellen I. A. G., de Kok R. J., de Mooij E. J. W., Albrecht S., 2010, *The orbital motion, absolute mass and high-altitude winds of exoplanet HD209458b*, *Nature*, **465**, 1049
- Snellen I., Brandl B., de Kok R., Brogi M., Birkby J., Schwarz H., 2014a, *The fast spin-rotation of a young extrasolar planet*, arXiv e-prints, p. [arXiv:1404.7506](https://arxiv.org/abs/1404.7506)
- Snellen I. A. G., Brandl B. R., de Kok R. J., Brogi M., Birkby J., Schwarz H., 2014b, *Fast spin of the young extrasolar planet  $\beta$  Pictoris b*, *Nature*, **509**, 63
- Snellen I., et al., 2015, *Combining high-dispersion spectroscopy with high contrast imaging : Probing rocky planets around our nearest neighbors*, *A&A*, **576**, A59
- Soummer R., Hagan J. B., Pueyo L., Thormann A., Rajan A., Marois C., 2011, *Orbital Motion of HR 8799 b, c, d Using Hubble Space Telescope Data from 1998 : Constraints on Inclination, Eccentricity, and Stability*, *ApJ*, **741**, 55
- Southworth J., 2010, *Homogeneous studies of transiting extrasolar planets - III. Additional planets and stellar models*, *MNRAS*, **408**, 1689
- Spake J. J., et al., 2021, *Abundance measurements of H<sub>2</sub>O and carbon-bearing species in the atmosphere of WASP-127b confirm its supersolar metallicity*, *MNRAS*, **500**, 4042
- Speagle J. S., 2020, *DYNesty : a dynamic nested sampling package for estimating Bayesian posteriors and evidences*, *MNRAS*, **493**, 3132
- Spiegel D. S., Burrows A., 2012, *Spectral and Photometric Diagnostics of Giant Planet Formation Scenarios*, *ApJ*, **745**, 174
- Spiegel D. S., Burrows A., Milsom J. A., 2011, *The Deuterium-burning Mass Limit for Brown Dwarfs and Giant Planets*, *ApJ*, **727**, 57
- Spiewak R., et al., 2018, *PSR J2322-2650 - a low-luminosity millisecond pulsar with a planetary-mass companion*, *MNRAS*, **475**, 469

- 
- Stassun K. G., Collins K. A., Gaudi B. S., 2017, *Accurate Empirical Radii and Masses of Planets and Their Host Stars with Gaia Parallaxes*, *AJ*, **153**, 136
- Steele I. A., Jameson R. F., Hodgkin S. T., Hambly N. C., 1995, *Infrared Spectroscopy of Low-Mass Stars and Brown Dwarfs in the Pleiades*, *MNRAS*, **275**, 841
- Stevenson K. B., et al., 2014, *Thermal structure of an exoplanet atmosphere from phase-resolved emission spectroscopy*, *Science*, **346**, 838
- Stone J. M., et al., 2020, *High-contrast Thermal Infrared Spectroscopy with ALES : The 3-4  $\mu$ m Spectrum of  $\kappa$  Andromedae b*, *AJ*, **160**, 262
- Su K. Y. L., et al., 2009, *The Debris Disk Around HR 8799*, *ApJ*, **705**, 314
- Su K. Y. L., Morrison S., Malhotra R., Smith P. S., Balog Z., Rieke G. H., 2015, *Debris Distribution in HD 95086—A Young Analog of HR 8799*, *ApJ*, **799**, 146
- Suárez Mascareño A., et al., 2020, *Revisiting Proxima with ESPRESSO*, *A&A*, **639**, A77
- Sun L., Ioannidis P., Gu S., Schmitt J. H. M. M., Wang X., Kouwenhoven M. B. N., 2019, *Kepler-411 : a four-planet system with an active host star*, *A&A*, **624**, A15
- Suzuki D., et al., 2016, *The Exoplanet Mass-ratio Function from the MOA-II Survey : Discovery of a Break and Likely Peak at a Neptune Mass*, *ApJ*, **833**, 145
- Szulágyi J., Mordasini C., 2017, *Thermodynamics of giant planet formation : shocking hot surfaces on circumplanetary discs*, *MNRAS*, **465**, L64
- Szulágyi J., Dullemond C. P., Pohl A., Quanz S. P., 2019, *Observability of forming planets and their circumplanetary discs II. - SEDs and near-infrared fluxes*, *MNRAS*, **487**, 1248
- Tabachnik S., Tremaine S., 2002, *Maximum-likelihood method for estimating the mass and period distributions of extrasolar planets*, *MNRAS*, **335**, 151
- Tanaka H., Takeuchi T., Ward W. R., 2002, *Three-Dimensional Interaction between a Planet and an Isothermal Gaseous Disk. I. Corotation and Lindblad Torques and Planet Migration*, *ApJ*, **565**, 1257
- Terquem C., Papaloizou J. C. B., 2007, *Migration and the Formation of Systems of Hot Super-Earths and Neptunes*, *ApJ*, **654**, 1110
- Testi L., 2009, *A low-resolution near-infrared spectral library of M-, L-, and T-dwarfs*, *A&A*, **503**, 639
- Thanathibodee T., Calvet N., Bae J., Muzerolle J., Hernández R. F., 2019, *Magnetospheric Accretion as a Source of H $\alpha$  Emission from Protoplanets around PDS 70*, *ApJ*, **885**, 94
- Thompson M. A., et al., 2013, *Nearby M, L, and T Dwarfs Discovered by the Wide-field Infrared Survey Explorer (WISE)*, *PASP*, **125**, 809
- Thorngren D. P., Fortney J. J., Murray-Clay R. A., Lopez E. D., 2016, *The Mass-Metallicity Relation for Giant Planets*, *ApJ*, **831**, 64
- Tinetti G., Deroo P., Swain M. R., Griffith C. A., Vasisht G., Brown L. R., Burke C., McCullough P., 2010, *Probing the Terminator Region Atmosphere of the Hot-Jupiter XO-1b with Transmission Spectroscopy*, *ApJ*, **712**, L139

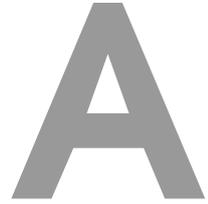
- 
- Todorov K. O., Line M. R., Pineda J. E., Meyer M. R., Quanz S. P., Hinkley S., Fortney J. J., 2016, *The Water Abundance of the Directly Imaged Substellar Companion  $\kappa$  And b Retrieved from a Near Infrared Spectrum*, *ApJ*, **823**, 14
- Toomre A., 1981, in Fall S. M., Lynden-Bell D., eds, *Structure and Evolution of Normal Galaxies*. pp 111–136
- Torres C. A. O., da Silva L., Quast G. R., de la Reza R., Jilinski E., 2000, *A New Association of Post-T Tauri Stars near the Sun*, *AJ*, **120**, 1410
- Torres C. A. O., Quast G. R., de La Reza R., da Silva L., Melo C. H. F., Sterzik M., 2003, *SACY - a Search for Associations Containing Young stars*. p. 83, doi:10.1007/1-4020-2600-5\_9
- Torres C. A. O., Quast G. R., Melo C. H. F., Sterzik M. F., 2008, *Young Nearby Loose Associations*. p. 757
- Tremblin P., Amundsen D. S., Mourier P., Baraffe I., Chabrier G., Drummond B., Homeier D., Venot O., 2015, *Fingering Convection and Cloudless Models for Cool Brown Dwarf Atmospheres*, *ApJ*, **804**, L17
- Tremblin P., et al., 2017, *Cloudless Atmospheres for Young Low-gravity Substellar Objects*, *ApJ*, **850**, 46
- Trotta R., 2008, *Bayes in the sky : Bayesian inference and model selection in cosmology*, *Contemporary Physics*, **49**, 71
- Tsuji T., 2002, *Dust in the Photospheric Environment : Unified Cloudy Models of M, L, and T Dwarfs*, *ApJ*, **575**, 264
- Udalski A., et al., 2002, *The Optical Gravitational Lensing Experiment. Search for Planetary and Low-Luminosity Object Transits in the Galactic Disk. Results of 2001 Campaign*, *Acta Astron.*, **52**, 1
- Udry S., Mayor M., 2008, in Fischer D., Rasio F. A., Thorsett S. E., Wolszczan A., eds, *Astronomical Society of the Pacific Conference Series Vol. 398, Extreme Solar Systems*. p. 13
- Van Eylen V., Albrecht S., 2015, *Eccentricity from Transit Photometry : Small Planets in Kepler Multi-planet Systems Have Low Eccentricities*, *ApJ*, **808**, 126
- Vandal T., Rameau J., Doyon R., 2020, *Dynamical Mass Estimates of the  $\beta$  Pictoris Planetary System through Gaussian Process Stellar Activity Modeling*, *AJ*, **160**, 243
- Vazan A., Sari R., Kessel R., 2020, *A new perspective on interiors of ice-rich planets : Ice-rock mixture rather than a layered structure*, arXiv e-prints, p. arXiv:2011.00602
- Vidal-Madjar A., Lecavelier des Etangs A., Désert J. M., Ballester G. E., Ferlet R., Hébrard G., Mayor M., 2003, *An extended upper atmosphere around the extrasolar planet HD209458b*, *Nature*, **422**, 143
- Vidal-Madjar A., et al., 2004, *Detection of Oxygen and Carbon in the Hydrodynamically Escaping Atmosphere of the Extrasolar Planet HD 209458b*, *ApJ*, **604**, L69
- Vigan A., et al., 2020, *The SPHERE infrared survey for exoplanets (SHINE). III. The demographics of young giant exoplanets below 300 au with SPHERE*, arXiv e-prints, p. arXiv:2007.06573
- Vigan A., et al., 2021, *The SPHERE infrared survey for exoplanets (SHINE). III. The demographics of young giant exoplanets below 300 au with SPHERE*, *A&A*, **651**, A72
-

- 
- Vogt S. S., et al., 1994, in Crawford D. L., Craine E. R., eds, Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference Series Vol. 2198, Instrumentation in Astronomy VIII. p. 362, doi:10.1117/12.176725
- Vos J. M., Allers K. N., Biller B. A., Liu M. C., Dupuy T. J., Gallimore J. F., Adenuga I. J., Best W. M. J., 2018, *Variability of the lowest mass objects in the AB Doradus moving group*, *MNRAS*, **474**, 1041
- Vrba F. J., et al., 2004, *Preliminary Parallaxes of 40 L and T Dwarfs from the US Naval Observatory Infrared Astrometry Program*, *AJ*, **127**, 2948
- Wagner K., et al., 2018, *Magellan Adaptive Optics Imaging of PDS 70 : Measuring the Mass Accretion Rate of a Young Giant Planet within a Gapped Disk*, *ApJ*, **863**, L8
- Wahhaj Z., et al., 2021, *A search for a fifth planet around HR 8799 using the star-hopping RDI technique at VLT/SPHERE*, *A&A*, **648**, A26
- Wakeford H. R., Sing D. K., 2015, *Transmission spectral properties of clouds for hot Jupiter exoplanets*, *A&A*, **573**, A122
- Wakeford H. R., Sing D. K., Evans T., Deming D., Mandell A., 2016, *Marginalizing Instrument Systematics in HST WFC3 Transit Light Curves*, *ApJ*, **819**, 10
- Waldmann I. P., Tinetti G., Rocchetto M., Barton E. J., Yurchenko S. N., Tennyson J., 2015a, *Tau-REx I : A Next Generation Retrieval Code for Exoplanetary Atmospheres*, *ApJ*, **802**, 107
- Waldmann I. P., Rocchetto M., Tinetti G., Barton E. J., Yurchenko S. N., Tennyson J., 2015b, *Tau-REx II : Retrieval of Emission Spectra*, *ApJ*, **813**, 13
- Wang J. J., et al., 2021a, *Detection and Bulk Properties of the HR 8799 Planets with High Resolution Spectroscopy*, arXiv e-prints, p. arXiv:2107.06949
- Wang J. J., et al., 2021b, *Constraining the Nature of the PDS 70 Protoplanets with VLTI/GRAVITY*, *AJ*, **161**, 148
- Weinberg M. D., 2009, *Computing the Bayesian Factor from a Markov chain Monte Carlo Simulation of the Posterior Distribution*, arXiv e-prints, p. arXiv:0911.1777
- Weinberger A. J., Becklin E. E., Schneider G., Smith B. A., Lowrance P. J., Silverstone M. D., Zuckerman B., Terri R. J., 1999, *The Circumstellar Disk of HD 141569 Imaged with NICMOS*, *ApJ*, **525**, L53
- Welbanks L., Madhusudhan N., 2021, *Aurora : A Generalized Retrieval Framework for Exoplanetary Transmission Spectra*, *ApJ*, **913**, 114
- Welbanks L., Madhusudhan N., Allard N. F., Hubeny I., Spiegelman F., Leininger T., 2019, *Mass-Metallicity Trends in Transiting Exoplanets from Atmospheric Abundances of H<sub>2</sub>O, Na, and K*, *ApJ*, **887**, L20
- Wheatley P. J., et al., 2018, *The Next Generation Transit Survey (NGTS)*, *MNRAS*, **475**, 4476
- White R. J., Basri G., 2003, *Very Low Mass Stars and Brown Dwarfs in Taurus-Auriga*, *ApJ*, **582**, 1109
- Whitworth A., Bate M. R., Nordlund Å., Reipurth B., Zinnecker H., 2007, in Reipurth B., Jewitt D., Keil K., eds, Protostars and Planets V. p. 459

- 
- Wilcomb K. K., Konopacky Q. M., Barman T. S., Theissen C. A., Ruffio J.-B., Brock L., Macintosh B., Marois C., 2020, *Moderate-resolution K-band Spectroscopy of Substellar Companion  $\kappa$  Andromedae b*, *AJ*, **160**, 207
- Wilson P. A., et al., 2015, *GTC OSIRIS transiting exoplanet atmospheric survey : detection of potassium in HAT-P-1b from narrow-band spectrophotometry*, *MNRAS*, **450**, 192
- Winters J. G., et al., 2019, *Three Red Suns in the Sky : A Transiting, Terrestrial Planet in a Triple M-dwarf System at 6.9 pc*, *AJ*, **158**, 152
- Wittenmyer R. A., et al., 2016, *The Anglo-Australian Planet Search XXIV : The Frequency of Jupiter Analogs*, *ApJ*, **819**, 28
- Wittenmyer R. A., et al., 2020, *Cool Jupiters greatly outnumber their toasty siblings : occurrence rates from the Anglo-Australian Planet Search*, *MNRAS*, **492**, 377
- Wolszczan A., Frail D. A., 1992, *A planetary system around the millisecond pulsar PSR1257 + 12*, *Nature*, **355**, 145
- Wright E. L., et al., 2010, *The Wide-field Infrared Survey Explorer (WISE) : Mission Description and Initial On-orbit Performance*, *AJ*, **140**, 1868
- Wyatt M. C., Panić O., Kennedy G. M., Matrà L., 2015, *Five steps in the evolution from protoplanetary to debris disk*, *Ap&SS*, **357**, 103
- Wytenbach A., et al., 2020, *Mass-loss rate and local thermodynamic state of the KELT-9 b thermosphere from the hydrogen Balmer series*, *A&A*, **638**, A87
- York D. G., et al., 2000, *The Sloan Digital Sky Survey : Technical Summary*, *AJ*, **120**, 1579
- Youdin A. N., Goodman J., 2005, *Streaming Instabilities in Protoplanetary Disks*, *ApJ*, **620**, 459
- Zapatero Osorio M. R., et al., 2008, *New constraints on the membership of the T dwarf S Ori 70 in the  $\sigma$  Orionis cluster*, *A&A*, **477**, 895
- Zellem R. T., et al., 2014, *The 4.5  $\mu$ m Full-orbit Phase Curve of the Hot Jupiter HD 209458b*, *ApJ*, **790**, 53
- Zhang Y., et al., 2021a, *The  $^{13}\text{CO}$ -rich atmosphere of a young accreting super-Jupiter*, *Nature*, **595**, 370
- Zhang Z., Liu M. C., Best W. M. J., Dupuy T. J., Siverd R. J., 2021b, *The Hawaii Infrared Parallax Program. V. New T-dwarf Members and Candidate Members of Nearby Young Moving Groups*, *ApJ*, **911**, 7
- Zhou Y., Apai D., Schneider G. H., Marley M. S., Showman A. P., 2016, *Discovery of Rotational Modulations in the Planetary-mass Companion 2M1207b : Intermediate Rotation Period and Heterogeneous Clouds in a Low Gravity Atmosphere*, *ApJ*, **818**, 176
- Zhou Y., Bowler B. P., Morley C. V., Apai D., Kataria T., Bryan M. L., Benneke B., 2020, *Spectral Variability of VHS J1256-1257b from 1 to 5  $\mu$ m*, *AJ*, **160**, 77
- Zhu L.-Y., Qian S.-B., Fernández Lajús E., Wang Z.-H., Li L.-J., 2019, *A close-in substellar object orbiting the sdOB-type eclipsing-binary system NSVS 14256825*, *Research in Astronomy and Astrophysics*, **19**, 134
- Zuckerman B., Webb R. A., 2000, *Identification of a Nearby Stellar Association in the Hipparcos Catalog : Implications for Recent, Local Star Formation*, *ApJ*, **535**, 959
-

- Zuckerman B., Song I., Bessell M. S., Webb R. A., 2001, *The  $\beta$  Pictoris Moving Group*, *ApJ*, **562**, L87
- Zuckerman B., Song I., Bessell M. S., 2004, *The AB Doradus Moving Group*, *ApJ*, **613**, L65
- Zuckerman B., Bessell M. S., Song I., Kim S., 2006, *The Carina-Near Moving Group*, *ApJ*, **649**, L115
- Zurlo A., et al., 2016, *First light of the VLT planet finder SPHERE. III. New spectrophotometry and astrometry of the HR 8799 exoplanetary system*, *A&A*, **587**, A57
- de Bergh C., Lutz B. L., Owen T., Brault J., Chauville J., 1986, *Monodeuterated Methane in the Outer Solar System. II. Its Detection on Uranus at 1.6 Microns*, *ApJ*, **311**, 501
- de Kok R. J., Brogi M., Snellen I. A. G., Birkby J., Albrecht S., de Mooij E. J. W., 2013, *Detection of carbon monoxide in the high-resolution day-side spectrum of the exoplanet HD 189733b*, *A&A*, **554**, A82
- de Wit J., Gillon M., Demory B. O., Seager S., 2012, *Towards consistent mapping of distant worlds : secondary-eclipse scanning of the exoplanet HD 189733b*, *A&A*, **548**, A128
- de Zeeuw P. T., Hoogerwerf R., de Bruijne J. H. J., Brown A. G. A., Blaauw A., 1999, *A HIPPARCOS Census of the Nearby OB Associations*, *AJ*, **117**, 354
- de la Reza R., Torres C. A. O., Quast G., Castilho B. V., Vieira G. L., 1989, *Discovery of New Isolated T Tauri Stars*, *ApJ*, **343**, L61
- van Holstein R. G., et al., 2021, *A survey of the linear polarization of directly imaged exoplanets and brown dwarf companions with SPHERE-IRDIS. First polarimetric detections revealing disks around DH Tau B and GSC 6214-210 B*, *A&A*, **647**, A21
- van Leeuwen F., 2007, *Validation of the new Hipparcos reduction*, *A&A*, **474**, 653





Annexe 1 : Résumé des conditions d'observations  
de la librairie X-Shyne

TABLEAU A.1 – *Bilan des observations des sources de la librairie X-Shyne.*

Target	Date (yyyy-mm-dd)	UT Start-Time (hh :mm)	DIT (s)	NDIT	NEXP	〈 Seeing 〉 (")	Airmass
2MASS0030	2018-07-28	06 :04	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.82	1.20
-	2018-08-16	05 :38	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.60	1.08
2MASS0045	2018-10-17	03 :30	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.97	1.34
2MASS0046	2019-07-15	08 :05	480/480/175	1/1/3	12/12/12	0.65	1.28
2MASS0103	2019-10-10	05 :42	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.68	1.62
-	2019-11-14	00 :24	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.53	1.40
GUPscB	2018-10-16	03 :14	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.64	1.35
-	2018-11-14	02 :22	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.56	1.39
-	2018-11-16	01 :21	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.78	1.35
-	2018-11-25	00 :58	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.66	1.38
-	2018-11-26	00 :33	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.58	1.35
-	2018-11-26	01 :42	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.67	1.39
SIMPJ01365	2018-11-16	02 :29	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.94	1.23
2MASS0153	2018-10-17	04 :37	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.79	1.37
-	2018-10-18	04 :30	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.67	1.37
2MASS0219 b	2018-10-21	02 :22	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.93	1.16
2MASS0249 c	2019-10-10	06 :44	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.74	1.10
-	2019-10-10	07 :41	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.94	1.20
-	2019-10-11	06 :24	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.71	1.08
-	2019-10-11	07 :25	670/670/234	1/1/3	12/12/12	1.02	1.17
2MASS0326	2018-10-21	03 :23	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.81	1.18
2MASS0342	2018-10-08	06 :15	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.69	1.39
-	2018-10-08	07 :17	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.61	1.39
PSO057	2018-10-17	05 :35	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.93	1.33
-	2018-10-18	05 :27	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.70	1.33
-	2018-10-30	04 :38	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.44	1.33
2MASS0355	2019-09-10	08 :26	480/480/175	1/1/3	12/12/12	0.76	1.25
PSO071	2018-10-30	05 :44	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.34	1.04
-	2018-10-30	06 :45	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.39	1.03
-	2018-10-30	07 :46	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.62	1.10
-	2018-10-31	05 :08	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.63	1.07
2MASS0508	2020-01-14	01 :57	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.63	1.02
2MASS0512	2018-10-31	06 :38	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.45	1.01
2MASS0518	2018-11-27	02 :24	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.69	1.25

TABLEAU A.2 – Bilan des observations des sources de la librairie X-Shyne. Suite.

Target	Date (yyyy-mm-dd)	UT Start-Time (hh :mm)	DIT (s)	NDIT	NEXP	⟨ Seeing ⟩ (")	Airmass
WISE0528	2018-10-22	07 :19	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.61	1.21
-	2018-10-26	06 :08	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.76	1.27
-	2018-10-26	07 :12	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.58	1.21
2MASS0616	2019-11-17	05 :03	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.67	1.09
2MASS0723	2020-02-06	03 :04	670/670/234	1/1/3	12/12/12	1.02	1.02
2MASS1021	2018-04-28	01 :30	870/870/250	1/1/3	12/12/12	0.59	1.09
-	2018-05-04	01 :41	870/870/250	1/1/3	12/12/12	0.72	1.13
SDSSJ1110	2018-04-29	00 :00	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.89	1.13
-	2018-05-27	23 :17	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.67	1.12
-	2018-05-28	00 :22	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.61	1.20
2MASS1119	2019-04-15	01 :59	900/900/300	1/1/3	12/12/12	0.90	1.04
-	2019-07-11	04 :40	900/900/300	1/1/3	12/12/12	0.47	1.08
2MASS1147	2018-06-16	00 :16	870/870/300	1/1/3	12/12/12	1.30	1.16
2MASS1148	2018-04-29	02 :33	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.57	1.04
-	2018-04-29	03 :33	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.53	1.14
2MASS1207	2018-04-28	00 :28	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.57	1.09
2MASS1213	2019-04-15	03 :12	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.68	1.08
VHS1256 b	2018-05-28	01 :36	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.68	1.05
-	2018-05-28	02 :36	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.74	1.17
2MASS1425	2018-06-19	02 :40	670/670/234	1/1/3	12/12/12	1.57	1.14
2MASS1826	2019-04-18	09 :17	670/670/234	1/1/3	12/12/12	1.18	1.08
-	2019-04-30	07 :16	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.97	1.10
2MASS2104	2019-05-03	08 :35	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.61	1.20
-	2019-07-12	05 :38	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.63	1.05
PSO318	2018-06-20	05 :17	870/870/300	1/1/3	12/12/12	0.62	1.15
-	2018-06-27	07 :56	870/870/300	1/1/3	12/12/12	0.70	1.04
PSO319	2018-05-30	08 :39	750/750/250	1/1/3	18/18/18	0.79	1.02
2MASS2206	2018-06-18	08 :35	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.73	1.08
2MASS2216	2019-06-05	09 :03	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.72	1.42
-	2019-06-16	08 :27	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.96	1.41
-	2019-07-11	06 :05	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.53	1.48
-	2019-07-12	06 :27	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.78	1.44
-	2019-07-15	06 :05	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.69	1.45
-	2019-07-15	07 :06	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.64	1.42
2MASS2244	2018-07-23	06 :24	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.74	1.44
2MASS2322	2018-06-26	08 :27	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.72	1.27
2MASS2354	2019-10-11	02 :03	670/670/234	1/1/3	12/12/12	0.81	1.49



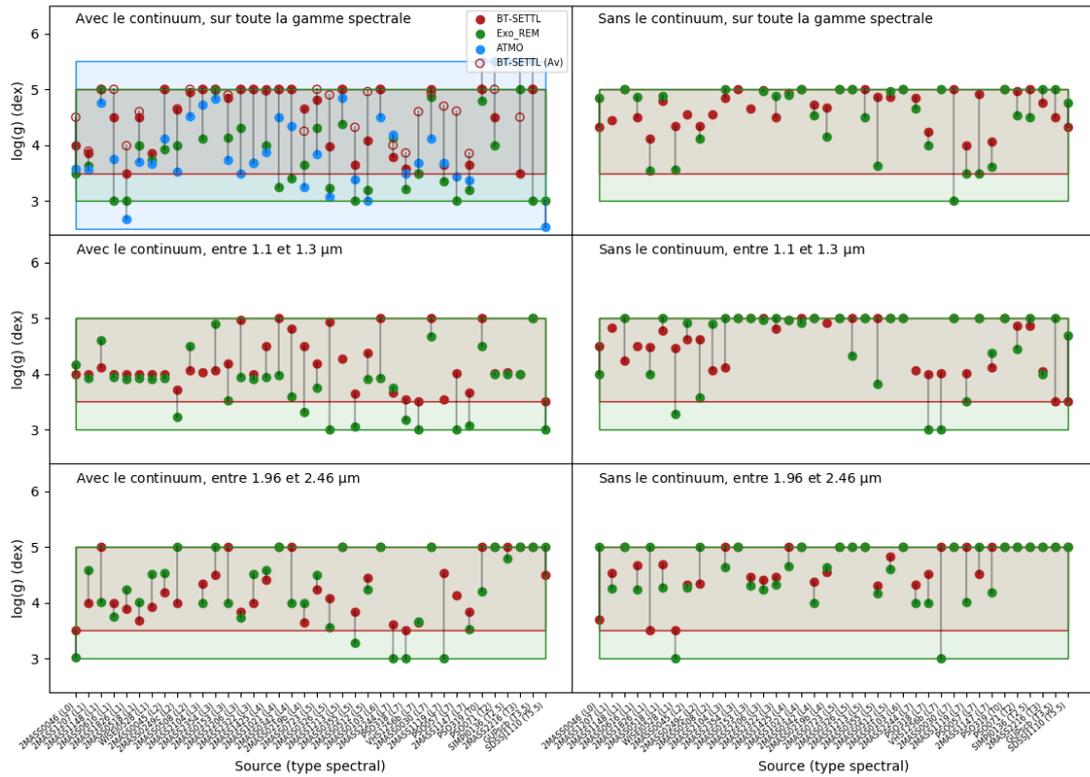


FIGURE B.2 – Suite de la Figure B.1 pour la gravité de surface.

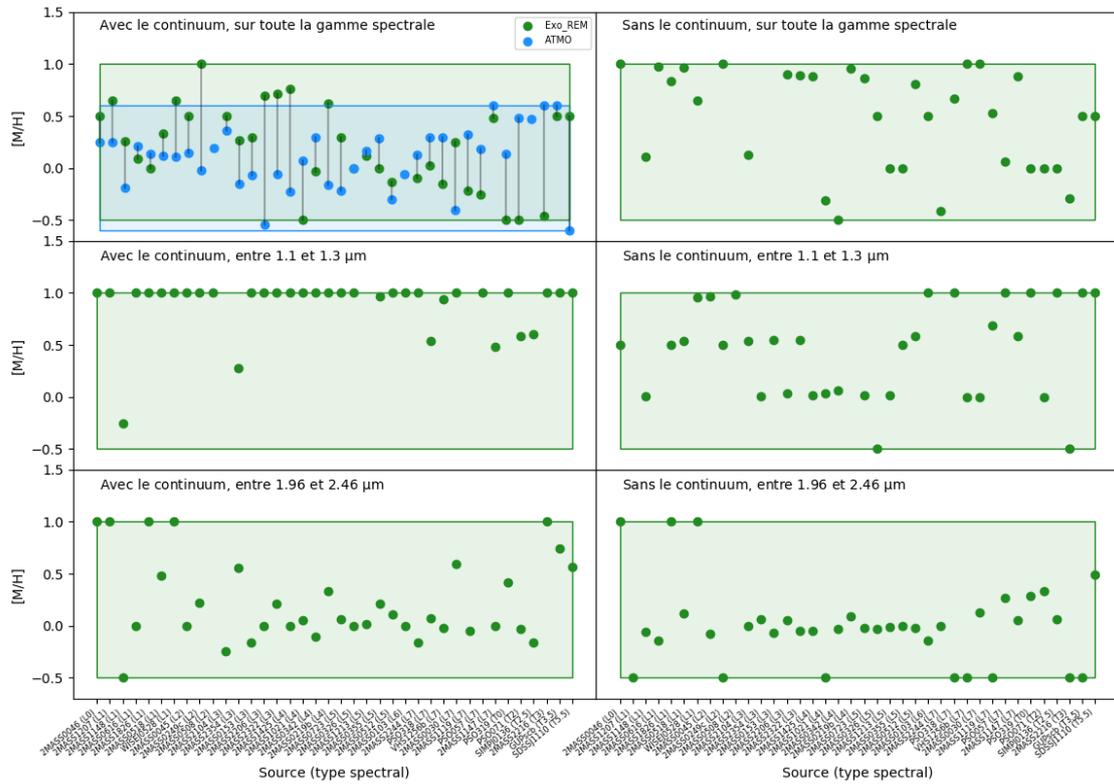


FIGURE B.3 – Suite de la Figure B.1 pour la métallicité.

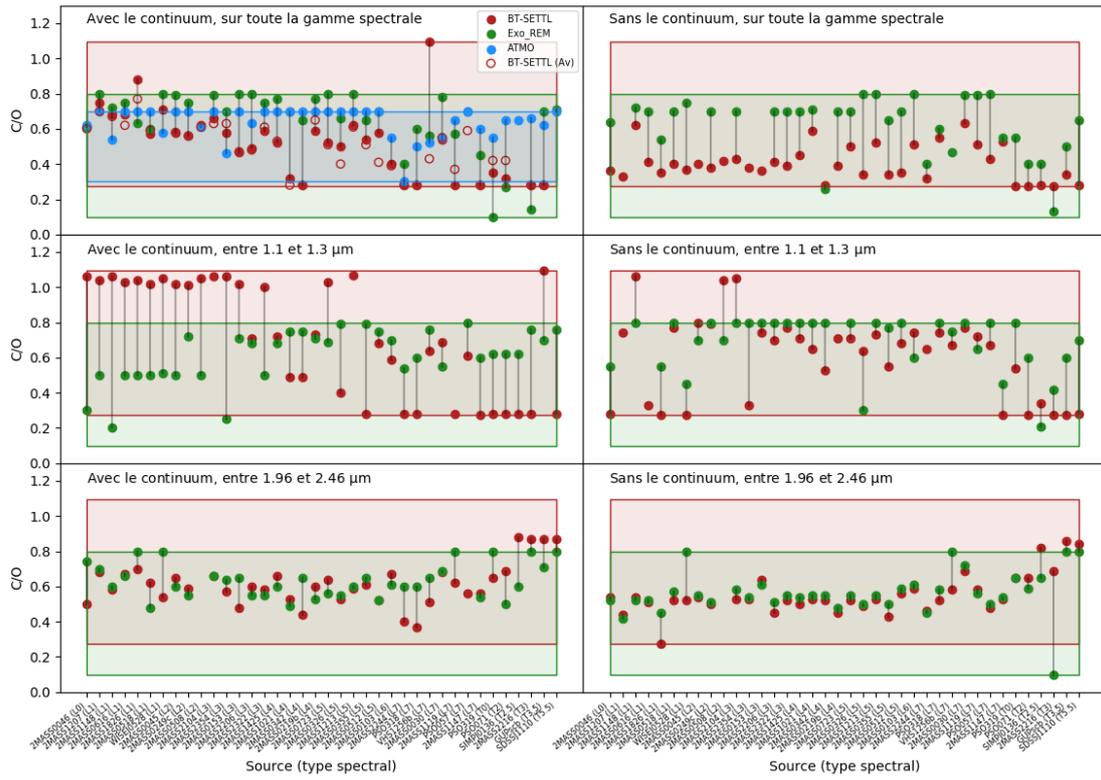


FIGURE B.4 – Suite de la Figure B.1 pour le rapport C/O.

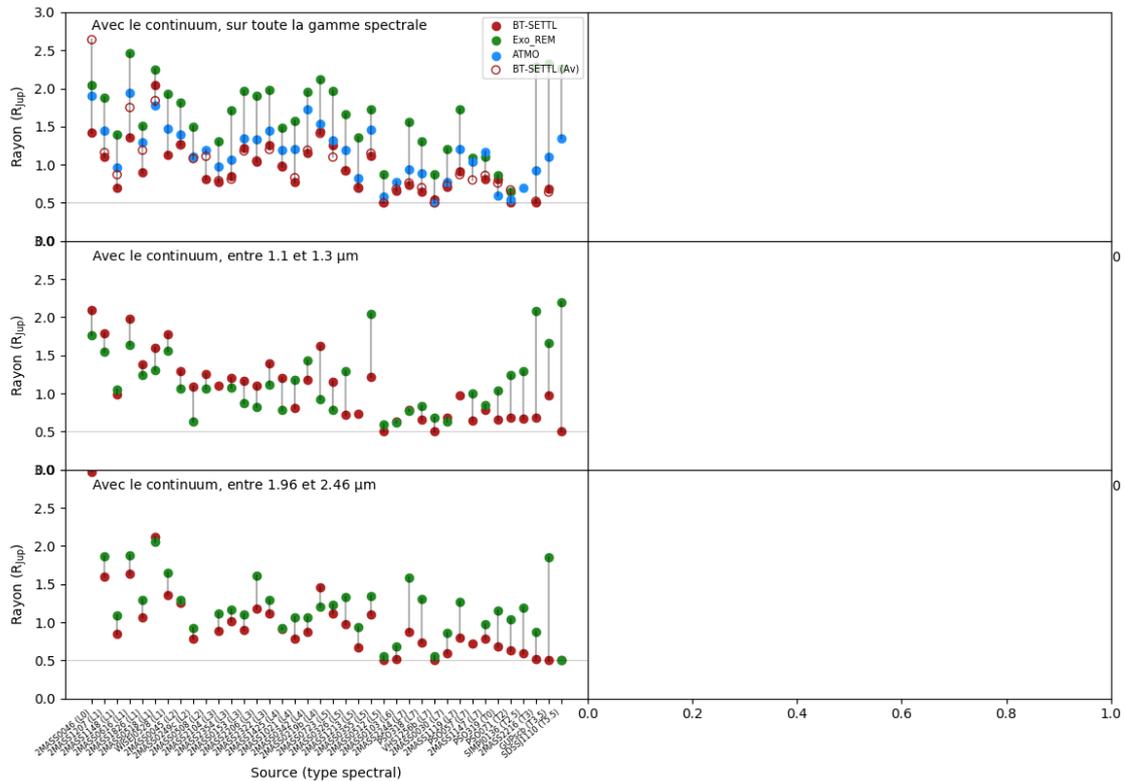


FIGURE B.5 – Suite de la Figure B.1 pour le rayon. Notons qu'ici la configuration sans le continuum n'a pas été testée.

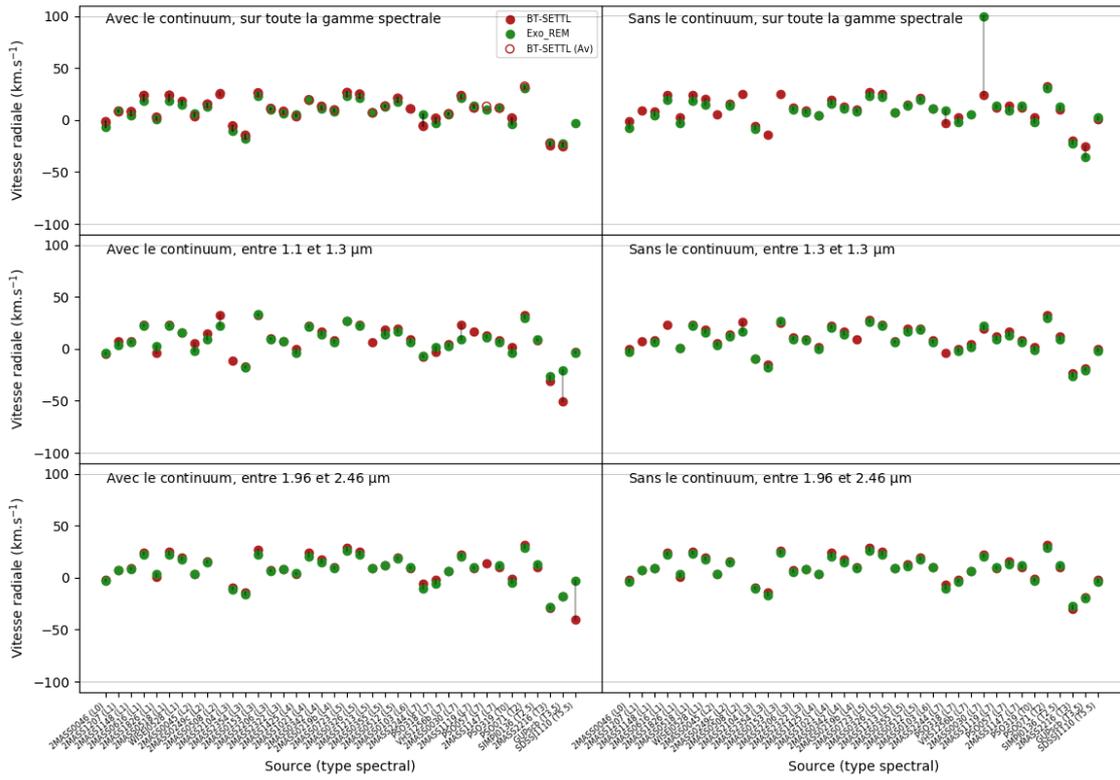


FIGURE B.6 – Suite de la Figure B.1 pour la vitesse radiale.

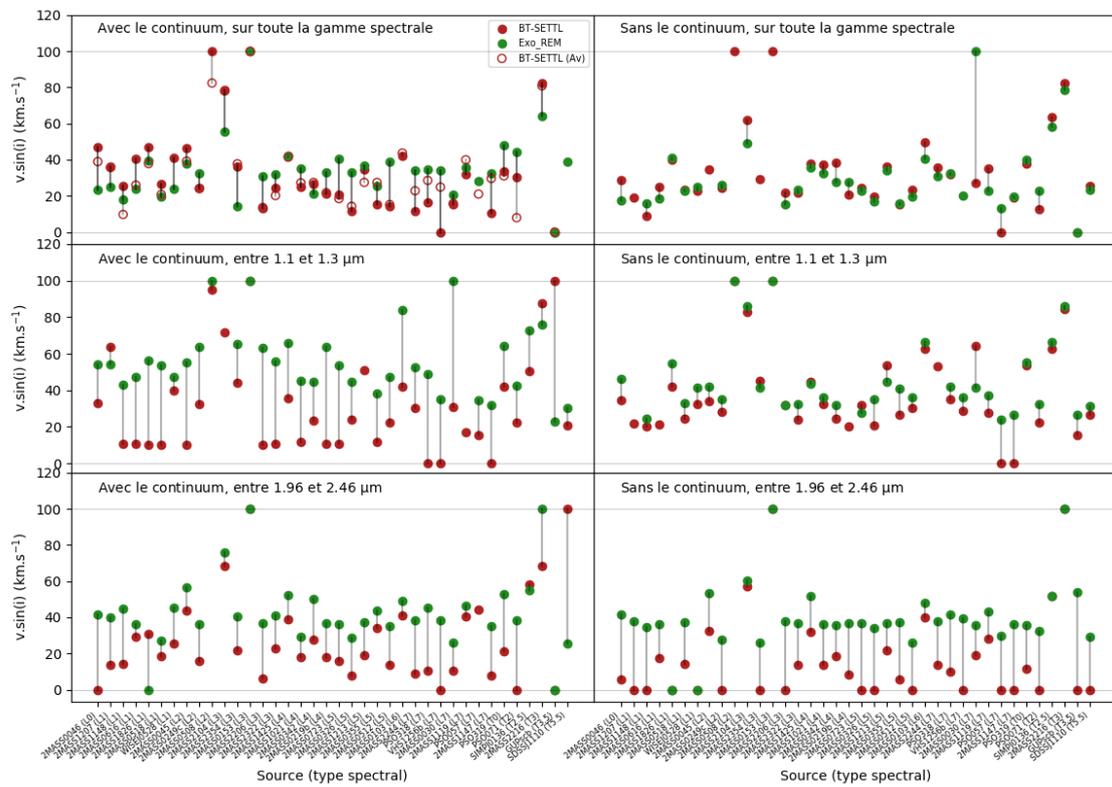


FIGURE B.7 – Suite de la Figure B.1 pour la vitesse de rotation projetée.



---

## Résumé

La découverte de la première exoplanète, 51 Pegasi b en 1995, marque un jalon dans l'histoire de l'astronomie moderne. Depuis, plus de 4300 nouvelles planètes ont été détectées, à l'aide de méthodes de détection indirectes (vitesses radiales, transits planétaires, micro-lentilles gravitationnelles) ou directes (imagerie, astrométrie). La diversité de ces exoplanètes en matière de séparations, masses, rayons ou multiplicités, a totalement bouleversé nos connaissances sur la physique et l'architecture des systèmes planétaires, jusque là limitées à notre propre système solaire, et pose les questions de leur formation et de leur évolution. Y a-t-il un mécanisme de formation universel ou des modes de formation propres à chaque type de planète ? C'est dans ce contexte dynamique et en constante évolution que mon travail se place. Ces trois dernières années, j'ai développé et appliqué un outil d'analyse Bayésienne, fondé sur l'algorithme du *nested sampling*, pour estimer les propriétés atmosphériques et physiques d'exoplanètes et de jeunes naines brunes de faible masse. Certaines de ces propriétés sont connues pour être des traceurs des mécanismes physiques en jeu lors de la formation des objets sous-stellaires, comme la métallicité ou le rapport C/O.

La première partie de ce manuscrit se focalise sur la caractérisation atmosphérique de neuf jeunes naines brunes de faible masse, en utilisant une grille de spectres synthétiques générée avec les modèles BT-SETTL. Puis, nous nous intéresserons à la méthode du *molecular mapping*, qui tire profit de l'information spectrale et spatiale permise par les spectrographes à intégrale de champ, pour détecter et caractériser des compagnons planétaires. Enfin, une troisième partie présentera les résultats préliminaires de l'analyse de la librairie X-Shyne, composée de trente-huit analogues planétaires isolés, jeunes et froids, à l'aide de trois modèles d'atmosphères : ATMO, BT-SETTL et Exo-REM.

Ces études ont permis, entre autres, de caractériser l'atmosphère d'analogues planétaires en apportant des indices sur leur mode de formation (les rapports C/O estimés pointent vers des mécanismes de formation stellaires pour les objets de X-Shyne.), de confirmer et étendre aux naines froides les relations empiriques entre les propriétés physiques de ces objets (âge, température effective, gravité) et leurs propriétés spectrales, de mettre en évidence les limites d'utilisation des modèles d'atmosphères, et d'explorer le potentiel de détection et de caractérisation du *molecular mapping*. La librairie unique X-Shyne fournira dans l'avenir des objets de comparaison aux observations de compagnons planétaires ; proposera des gabarits pour la génération de données simulées, afin de préparer l'arrivée de la nouvelle génération d'instruments ; et sera utilisée pour développer de nouvelles versions de modèles d'atmosphères.

**Mots-clés :** Atmosphères, Observations, Exoplanètes, Formation, Spectroscopie à moyenne et haute résolution

---

