

## APPLE-Kompot

Atmospheric Photochemistry for exoPLanetary spEctra using the Kompot code

<b>Programm / Ausschreibung</b>	Weltraum, Weltraum, ASAP Ausschreibung 2023	<b>Status</b>	laufend
<b>Projektstart</b>	07.10.2024	<b>Projektende</b>	06.10.2027
<b>Zeitraum</b>	2024 - 2027	<b>Projektlaufzeit</b>	37 Monate
<b>Keywords</b>	exoplanet atmospheric photochemistry, exoplanet atmospheric loss, exoplanet transmission spectra		

### Projektbeschreibung

**Motivation:** Das Verhältnis von flüchtigen zu feuerfesten Bestandteilen in der Atmosphäre (z. B. das Verhältnis von Kohlenstoff zu Schwefel) hat das Potenzial, Entartungen zwischen den beiden konkurrierenden Theorien im Standardmodell der Riesenplanetentstehung aufzulösen. Das James Webb Space Telescope (JWST) hat zum ersten Mal schwefelhaltige Spezies (SO<sub>2</sub>) in zwei Gasriesen nachgewiesen, was uns der Antwort auf die Frage "Wo und wie bilden sich riesige Exoplaneten?" einen Schritt näher bringt. Photochemische Modelle zeigen, dass die beobachteten SO<sub>2</sub>-Signaturen in den JWST-Daten durch die Photolyse von H<sub>2</sub>O und H<sub>2</sub>S in der oberen Atmosphäre eines Exoplaneten erklärt werden können. Allerdings berücksichtigen diese Modelle derzeit nicht die Ungleichgewichtsprozesse, welche die, für die SO<sub>2</sub>-Bildung essentiellen, Elemente verarmen lassen, wie beispielsweise sterngetriebene atmosphärische Ionisations- und Verlustprozesse, und die Bildung von Aerosolen.

**Ziele:** In diesem Projekt werden wir untersuchen, wie sich der Abbau von atmosphärischen Spezies aufgrund von Photochemie, Ionisation, Jeans- und hydrodynamischem Verlust auf die SO<sub>2</sub>-Häufigkeit der von JWST beobachteten riesigen Exoplaneten auswirkt. Wir werden den thermo-chemischen Code Kompot auf einem Netzwerk von Modellen der oberen Atmosphäre von Exoplaneten anwenden. Wir werden die Strahlungstransfer-Gleichung lösen, um synthetische Transmissionsspektren für unser Netzwerk von Kompot-Modellen zu erzeugen und sie mit JWST-Daten zu überprüfen.

**Innovationsgehalt:** Kompot berechnet das Druck-Temperatur-Profil, löst ein photochemisches und chemisches Gleichgewichtsnetzwerk und bestimmt atmosphärische Jeans- und hydrodynamische Verluste in der oberen Atmosphäre eines Planeten. In unserem Modellnetzwerk werden wir also in der Lage sein, die Auswirkungen der atmosphärischen Verarmung auf die photochemische Produktion von SO<sub>2</sub>, die bisher noch nicht untersucht wurde, selbstkonsistent zu untersuchen. Die im Rahmen dieses Projekts bereitgestellten Mittel werden es uns auch ermöglichen, einer Code-Entwicklung vorzunehmen, die notwendig ist, um die Erzeugung synthetischer Transmissionsspektren zu erleichtern. Dadurch können wir die Kompot-Simulationen direkt mit den Beobachtungen von JWST und in Zukunft auch von Ariel vergleichen, ohne einen anderen Strahlungstransportcode eines Drittanbieters zu verwenden.

Gewünschte Ergebnisse: Das wissenschaftliche Ergebnis wird ein Netzwerk von Atmosphärensimulationen sein, welche zeigen, wie Photochemie und atmosphärischer Verlust die Häufigkeit von SO<sub>2</sub> und anderen chemischen Spezies wie CO<sub>2</sub> in den oberen Atmosphären von Gasriesen, die verschiedene Sterne umkreisen, beeinflussen. Im Rahmen dieses Projekts wird Kompot auch zu einem einzigartigen Code für den thermo-chemischen Strahlungstransfer weiterentwickelt, der selbstkonsistent atmosphärische Transmissionsspektren aus einer Kompot-Simulation eines beliebigen Planeten erzeugen kann. Die Ergebnisse werden für künftige JWST-Proposals zur Beobachtung riesiger Exoplaneten verwendet. Der Code wird auch bei der Vorbereitung der Ariel-Mission der Europäischen Weltraumorganisation (ESA) eingesetzt werden, die eine statistische Untersuchung der Atmosphären riesiger Exoplaneten durchführen wird. Die Projektleiterin koordiniert die Arbeitsgruppe für Stern-Planeten-Interaktion innerhalb des Ariel-Konsortiums, wodurch dieses Projekt in der Mitte der Ariel-Vorbereitungen und der Zielauswahl steht.

## Abstract

Motivation: The atmospheric volatile to refractory ratio (e.g., carbon-to-sulfur ratio) has the potential to break degeneracies between the two competing theories in the standard model of giant planet formation; pebble and planetesimal accretion. The James Webb Space Telescope (JWST) has, for the first time, detected sulfur bearing species (SO<sub>2</sub>) in two gas giants, bringing us a step closer to answering the question "where and how do giant exoplanets form?" 1D photochemical kinetics models show that the observed SO<sub>2</sub> features in JWST data can be explained through the photolysis of H<sub>2</sub>O and H<sub>2</sub>S in an exoplanet's upper atmosphere. However, kinetics models don't account for disequilibrium processes that deplete the elements essential for SO<sub>2</sub> formation, two key examples of which are stellar driven atmospheric ionization and loss, and aerosol formation.

Goals: In this project we will investigate how photochemistry, ionization, Jeans and hydrodynamic loss impact SO<sub>2</sub> abundances for the giant exoplanets observed by JWST. We will use the 1D thermo-chemical code Kompot on a grid of exoplanet upper atmospheric models. We will solve the radiative-transfer equation to generate synthetic transmission spectra for our grid of Kompot models and constrain them using JWST observations.

Innovation content: Kompot calculates the pressure-temperature profile, solves a photochemical and chemical equilibrium network, and determines atmospheric Jeans and hydrodynamic loss in the upper atmosphere of a planet. Hence, in our grid of models will be able to self-consistently study the impact of stellar driven atmospheric depletion in the photochemical production of SO<sub>2</sub>, which has not be studied yet. The funding provided in this project will also allow us to carry out the code development necessary to facilitate synthetic transmission spectra generation from Kompot models. This will allow us to compare Kompot simulations directly with observations taken by JWST and in the future by the Ariel mission without using any other third-party radiative transfer code.

Desired results/findings: The scientific outcome will be a grid of atmospheric simulations to show how photochemistry, ionization, and atmospheric loss impact the abundances of SO<sub>2</sub> and other chemical species such as CO<sub>2</sub> in the upper atmospheres of gas giants orbiting different stellar hosts. This project will also update Kompot to a one-of-a-kind thermo-chemical-radiative transfer code that can self-consistently generate atmospheric transmission spectra from an underlying

Kompot simulation of any given planet. The results will be applied to inform future JWST proposals to observe giant exoplanets. The code will be also applied in the preparation of the European Space Agency's Ariel mission, which will carry out a statistical survey of giant exoplanet atmospheres. The principal investigator of this project coordinates the star-planet interaction working group within the Ariel consortium, thus placing this project at the middle of Ariel preparation and target selection.

## **Projektpartner**

- Universität Wien