



Universiteit  
Leiden  
The Netherlands

## The sky is made of lava: how lava worlds reveal their interiors through their atmospheres

Buchem, C.P.A. van

### Citation

Buchem, C. P. A. van. (2025, September 5). *The sky is made of lava: how lava worlds reveal their interiors through their atmospheres*. Retrieved from <https://hdl.handle.net/1887/4259796>

Version: Publisher's Version

License: [Licence agreement concerning inclusion of doctoral thesis in the Institutional Repository of the University of Leiden](#)

Downloaded from: <https://hdl.handle.net/1887/4259796>

**Note:** To cite this publication please use the final published version (if applicable).

# NEDERLANDSE SAMENVATTING

In de afgelopen 30 jaar is de exoplaneetwetenschap exponentieel gegroeid. Sinds de ontdekking van de eerste exoplaneten in de jaren '90 van de vorige eeuw, zijn we geëvolueerd van louter detectie naar het karakteriseren van de fysische en chemische eigenschappen van deze verre werelden via observaties van hun spectra. Een veelbelovende niche binnen dit veld is die van "hete rotsachtige exoplaneten" (HREs), die mogelijk een unieke inkijk kunnen bieden op de inwendige samenstelling van rotsachtige planeten. Dankzij dit gegeven, kunnen deze planeten mogelijk waardevolle nieuwe informatie verschaffen over planeetvorming, interne differentiatie en de evolutie van atmosferen.

HREs zijn planeten met korte omlooptijden en een evenwichtstemperatuur op de dagzijde van meer dan 1500 K - warm genoeg voor het smelten van steen en het vormen van lava-oceanen, niet alleen op de dagzijde maar mogelijk ook op de nachtzijde. Deze lava-oceanen vormen een directe verbinding tussen het inwendige en de atmosfeer van de planeet, waardoor het in principe mogelijk wordt om de inwendige samenstelling van de planeet op afstand te achterhalen door de spectrale kenmerken van de atmosfeer te interpreteren die gevormd worden door chemische uitwisseling met het gesmolten oppervlak. Om dit potentieel te benutten zijn uitgebreide modelleringsbenaderingen nodig die de diverse fysische en chemische processen die binnen deze planeten plaatsvinden in detail nabootsen. Eén van die processen is de verdamping van lava aan het oppervlak en de invloed van veranderingen in de lavasamenstelling op de samenstelling van de atmosfeer, en dus ook op het spectrum van de planeet.

Het hoofddoel van dit proefschrift is het ontwikkelen van modellen die dit proces nabootsen om de dampatmosferen boven magma-ocean en onder verschillende fysisch-chemische omstandigheden te simuleren. Dit heeft geleid tot de ontwikkeling van LavAtmos, een open-source code die de chemische evenwichtssamenstelling van de damp boven een silicaatsmelt berekend bij een gegeven temperatuur, druk en samenstelling. Het combineren van deze code met een reeks andere codes die de atmosferische chemie en de emissie van straling berekenen, stelt ons in staat om zelf-consistente synthetische spectra van hete rotsachtige planeten te genereren. Het werk in dit proefschrift richt zich op de ontwikkeling van LavAtmos, de implementatie ervan in het bredere modelleringskader, en de implicaties daarvan voor HRE onderzoek.

Hoofdstuk 2 beschrijft de ontwikkeling en validatie van de eerste versie van LavAtmos, met de focus op "droge" systemen - dat wil zeggen systemen waarin gesmolten stenen verdampen zonder vluchtige elementen. LavAtmos berekent het chemisch evenwicht tussen een smelt en de dampkringfase door thermodynamische gegevens van de code MELTS te combineren met een intern consistente berekening van de partiële zuurstofdruk ( $P_{O_2}$ ), met de wet van massawerking en massabehoud als randvoorwaarden. Deze aanpak stelt ons in staat om op basis van een invoersamenstelling van de smelt en de thermodynamische toestand de gasfase-abundantie van meer dan 50 chemische soorten te bepalen. LavAtmos wordt gevalideerd door output te vergelijken met de (beperkte)

beschikbare experimentele gegevens en andere gepubliceerde verdampingsmodellen.

In Hoofdstuk 3 wordt LavAtmos geïntegreerd in een breder fysisch-chemisch modelleringskader, waarmee we kunnen onderzoeken hoe variaties in de bulksamenstelling van de magma-oceaan de waarneembare emissiespectra van HREs beïnvloeden. Dit is een cruciale stap voor de interpretatie van gegevens die verzameld worden met de recent gelanceerde James Webb Space Telescope (JWST), die actief bezig is met het observeren van deze werelden. In dit onderzoek kijken we specifiek hoe de concentraties van belangrijke oxiden in de smelt - zoals  $\text{TiO}_2$ ,  $\text{SiO}_2$ ,  $\text{Na}_2\text{O}$ , en  $\text{K}_2\text{O}$  - invloed hebben op de atmosferische chemie en stralingseigenschappen. Het modelkader omvat een gaschemisch evenwichtsmodel en een stralingstransportcode die gezamenlijk de temperatuur-drukprofielen en emissiespectra van de atmosfeer berekenen.

We vinden dat veel veranderingen in de smeltsamenstelling slechts beperkte spectrale gevolgen hebben met enkele opvallende uitzonderingen. Een hoog  $\text{TiO}_2$ -gehalte in de smelt verhoogt de  $\text{TiO}$ -concentratie in de atmosfeer, wat vanwege zijn sterke kortegolfopaciteit grote invloed heeft op zowel de oppervlaktetemperatuur als het emissiespectrum. Dit creëert een degeneratie met de efficiëntie van warmtetransport, die mogelijk doorbroken kan worden door het waarnemen van een optisch  $\text{TiO}$ -emissiekenmerk. Een toename van het  $\text{SiO}_2$  gehalte in de lava laat ook duidelijk effecten zien, vooral door het versterken van de  $\text{SiO}$ - en  $\text{SiO}_2$ -spectrale lijnen. Concentraties van de alkalioxiden ( $\text{Na}_2\text{O}$  en  $\text{K}_2\text{O}$ ) beïnvloeden voornamelijk de oppervlaktedruk en secundaire gasfasen, maar hebben minder directe spectrale invloed.

Terwijl hoofdstuk 2 en 3 zich richten op modellering zonder vluchtige elementen, erkent Hoofdstuk 4 een belangrijke beperking van deze aanpak. Recente waarnemingen en theoretisch onderzoek wijzen er op dat HREs, ondanks hun hoge temperaturen, atmosferen kunnen bezitten die vluchtige elementen bevatten zoals waterstof, koolstof, stikstof, zwavel, en fosfor. Om hierop in te spelen, hebben we LavAtmos 2 ontwikkeld - een verbeterde versie van de oorspronkelijke code waarin deze vluchtige componenten worden meegenomen in de damp-smelt-evenwichtsberekening. Wederom gebruiken we de duale randvoorwaarden van massawerking en massabehoud om de partiële zuurstofdruk ( $P_{\text{O}_2}$ ) te bepalen in systemen die zowel smeltspecies als vluchtige elementen bevatten. Dankzij de integratie van de bestaande chemisch-evenwichtscode FastChem konden we het aantal beschouwde gasfasen uitbreiden tot 523.

Met dit uitgebreide model onderzochten we geïdealiseerde atmosferen met één enkele vluchtige element, meer realistische complexe atmosferen met alle vijf vluchtige elementen, en twee mogelijke atmosferische samenstellingen voor 55 Cancri e. We concludeerden dat het meenemen van vluchtige elementen in onze berekeningen leidt tot een aanzienlijke verhoging van de partiële drukken van belangrijke gassoorten zoals  $\text{SiO}$ ,  $\text{SiO}_2$ ,  $\text{Na}$ , en  $\text{K}$  ten opzichte van droge modellen. Ook neemt de zuurstofconcentratie in de atmosfeer sterk toe, wat op zijn beurt de abundantie verhoogt van belangrijke moleculen zoals  $\text{CO}_2$  en  $\text{H}_2\text{O}$ .

Deze veranderingen hebben directe gevolgen voor het waargenomen spectrum en kunnen dienen als diagnostische aanwijzingen voor de aanwezigheid van vluchtige stoffen en mogelijk zelfs een lava-ocean aan het oppervlak.

In het laatste hoofdstuk van dit proefschrift behandelen we de stralings-technische gevolgen van het opnemen van vluchtige elementen - met name waterstof - in de atmosferen van HREs. Eén van de belangrijkste bronnen van opaciteit in hete, waterstofrijke atmosferen is het  $H^-$ -ion. Dit ion domineert de continuümopaciteit in sterren en hete gasreuzen, en kan ook het thermische emissiespectrum van planeten ingrijpend veranderen wanneer vrije elektronen in voldoende mate aanwezig zijn. Met behulp van het modelkader uit Hoofdstuk 4, onderzochten we het effect van  $H^-$ -opaciteit in HREs bij verschillende atmosferische waterstofconcentraties.

We tonen aan dat zelfs bij waterstofvolumeverhoudingen van slechts  $10^{-5}$  planeten met oppervlaktetemperaturen boven 2500 K sterke  $H^-$ -continuümabsorptie vertonen. Dit is voldoende om de spectrale kenmerken van moleculen zoals  $H_2O$  en  $SiO$  te onderdrukken. Dit gebeurt doordat alkalimetalen bij hoge temperaturen ioniseren en zo de vrije elektronen leveren die nodig zijn voor  $H^-$ -vorming. Het gevolg is een spectrum met verzwakte of zelfs afwezige moleculaire lijnen, en een meer blackbody-achtig emissieprofiel. Deze verzwakking maakt het moeilijker om de samenstelling van de atmosfeer spectroscopisch te achterhalen. Toch kan een sterk  $H^-$ -continuüm zelf als aanwijzing dienen: de aanwezigheid ervan wijst op een overvloed aan vrije elektronen, wat op zijn beurt kan wijzen op een heet, gesmolten, metaalrijk oppervlak dat in contact staat met een waterstofhoudende atmosfeer.

Samenvattend biedt dit proefschrift een uitgebreid kader voor het begrijpen van het chemische en stralingstechnische gedrag van hete rotsachtige exoplaneten, van de fundamentele processen van lava-verdamping tot de observationele kenmerken die mogelijk detecteerbaar zijn met moderne ruimtetelescopen. Door de ontwikkeling en toepassing van LavAtmos — zowel voor droge atmosferen als voor atmosferen die vluchtige elementen bevattende — biedt dit werk nieuwe inzichten in hoe de samenstelling van het oppervlak en de atmosfeer met elkaar verbonden zijn, en hoe deze verbindingen zich uiten in het planetaire emissie spectrum. Deze modellen kunnen worden ingezet voor de interpretatie van aankomende gegevens van JWST en toekomstige missies, en bieden een routekaart om de inwendige eigenschappen van rotsachtige exoplaneten af te leiden via atmosferische karakterisering op afstand. Naarmate observaties steeds geavanceerder worden, zullen de hier ontwikkelde methodes en inzichten hopelijk van nut zijn bij het ontrafelen van de complexe processen die enkele van de meest extreme rotsachtige planeten in ons sterrenstelsel vormgeven.