使用 VLT-ESPRESSO 探测土卫六上的 C_3

R. Rianço-Silva,[1，2，3★] P. Machado,[2,3] P. Rannou,[4],J.Martins[5],A.E.Lynas-Gray[1,6,7],
G.Tinetti[8]
[1]伦敦大学学院物理与天文学系，*Gower Street，WC1E 6BT*，伦敦，英国
[2]天体物理与空间科学研究所，里斯本大学，*OAL，Edifício Leste，Tapada da Ajuda，PT1349-018*，里斯本，葡萄牙
[3]里斯本大学科学学院物理系，*Edifício C8，Campo Grande，PT1749-016*，里斯本，葡萄牙
[4]兰斯香槟-阿登大学，法国兰斯
[5]天体物理与空间科学研究所，波尔图大学，*CAUP，Rua das Estrelas，PT4150-762*，波尔图，葡萄牙
[6]牛津大学物理系，*Keble Road*，牛津 *OX1 3RH*，英国
[7]西开普大学物理与天文学系，*Bellville 7535*，南非
[8]伦敦国王学院 *NMES* 学院，*Strand Building，Strand，WC2R2LS*，伦敦，英国

arXiv:2603.05365v1 [astro-ph.EP] 5 Mar 2026

已接受 XXX。收到 YYY；原始版本为 ZZZ

摘要

土卫六被视为太阳系中的天然实验室，可用于研究寒冷小型系外行星上的大气光化学和有机分子的非生物生成。卡西尼-惠更斯任务结束后，望远镜观测在红外和亚毫米波段探测到越来越复杂的碳基分子，而光学波段则在很大程度上遭到忽视。近期，研究人员在存档的光学 VLT-UVES 光谱（R ≈ 60 000）中暂定探测到土卫六上 C_3 的 4050埃吸收带——它是芳香化学的一种光化学前体。本研究通过专门针对土卫六开展的超高分辨率 VLT-ESPRESSO 观测（R ≈ 190 000，这是迄今为止土卫六在光学波长上的最高光谱分辨率观测），报告了对土卫六上 C_3 4050埃吸收带的 8σ 探测。我们将 VLT-ESPRESSO光谱与土卫六模型光谱进行比较，并改变 C_3 丰度；绘制 χ^2 曲线，以评估非太阳光谱特征与 C_3吸收之间的一致性，同时改变 C_3 丰度；并对模型光谱和观测光谱进行贝叶斯蒙特卡洛马尔可夫链（MCMC）拟合。χ^2 曲线分析得出 8σ C_3 探测结果，与 C_3 柱密度为 $N = 1。5 \times 10^{13}\,\mathrm{cm}^{-2}$ 相符；而 MCMC拟合得到的土卫六大气层中 C_3 柱密度为 $N = (1。47 \pm 0。30) \times 10^{13}\,\mathrm{cm}^{-2}$，对应于 5σ。这一数量级与光化学模型预测的 C_3 丰度一致，其在土卫六中间层可达到 ppm 级。本研究展示了原本专为系外行星研究设计的仪器和技术应用于太阳系目标及科学案例时的价值。

关键词：行星与卫星：大气 – 行星与卫星：个别：土卫六 – 仪器：光谱仪 – 方法：观测 – 分子数据–《天体生物学》

1 引言

1.1 关于土卫六大气层

土卫六拥有浓密且化学成分丰富的大气，以及可能存在的冰下液态水海洋，在冰卫星中脱颖而出，是太阳系中研究最为广泛的天体之一（Hörst 2017）（MacKenzie等人2021）。土卫六独特环境的物理与化学特征所具有的多样性与独特性，激发了人们对这颗土星最大卫星经久不衰的兴趣，研究涵盖从大气化学到行星地质学乃至《天体生物学》的广泛科学领域Hörst 2017；MacKenzie等人2021。

土卫六独特性的一个重要原因，是作为一颗冰卫星，它拥有异常庞大且稠密的大气，在其对流层中达到类似地球的大气密度和压力（Sánchez-Lavega 2011），并且与地球大气共享相同的主要成分（N_2）。球（Hörst 2017）。土卫六高层大气中的大气成分 CH_4（以及在较小程度上 N_2）的光化学解离，会引发一系列复杂的光化学反应，产生种类多样且日益复杂的烃类、腈类和有机化合物（MacKenzie et al. 2021）。土卫六上有机化合物的大量光化学生成，为笼罩其大气的有机霾形成了前体物质；这一过程类似于人们认为曾发生在早期地球上的过程（Trainer etal.2006）。尽管其对地球生命出现的贡献程度尚不明确，但人们认为，在银河系中类似土卫六的系外行星上，可能也会发生光化学有机霾的生成（Arneyetal.2017）。

对土卫六大气层化学复杂性的认识，得益于观测和建模工作的协同贡献（Hörst 2017）。旅行者1号和地基望远镜早期的遥感观测已揭示土卫六大气层的化学复杂性，促使研究人员对大气中有机分子的生成开展初步研究（Yung 等，1984年）。卡西尼-惠更斯号太空任务使人们能够深入

★ 电子邮箱：rafael.silva@ucl.ac.uk（RRS）

© 2026 作者

研究土卫六的光化学过程及其产物，并刻画高阶烃和腈类的分布廓线（例如 C_2N_2, HCN、HC_3N、C_4H_2 和 C_3H_4, Teanby 等(2009）、Coustenis 等(2010）），还研究了苯（C_6H_6）等简单芳香族化合物（Vuitton 等，2008年）。

自2017年卡西尼任务结束以来，土卫六大气层的观测研究不断推进，并取得了多项新的分子发现，包括利用地面亚毫米波观测探测到 c-C_3H_2（使用 ALMA，Nixon 等人(2020年)），以及通过红外高分辨率观测探测到 CH_2CCH_2（使用 IRTF-TEXES）Lombardo 等人(2019年)）。JWST近期开展的近红外至中红外空间观测也为这项工作作出了贡献，直接探测到了甲基自由基 CH_3,，它是土卫六大气光化学中的主要参与者之一（Nixon等，2025）。

值得注意的是，尽管由于地球大气透明，土卫六可见光波段的地面高分辨率观测比红外观测更容易开展，但这类观测长期以来基本未受重视（Rianço-Silva等人（2024））。其中一个原因是，土卫六大气中大多数分子的最强分子吸收特征都位于近红外和中红外光谱区域（Nixon等，2025）。一个显著的例外恰好是本文的研究对象——丙二烯二亚基分子（C_3），也称为三碳（Lynas-Gray等，2024）。

1.2 关于 C_3 分子

首次在天体物理环境中对其进行描述的是Douglas(1951)，当时是在一颗彗星的活跃彗发中发现的。此后，丙二烯二亚基（也称三碳分子，以下简写为 C_3）已在多种富碳、高能环境中被发现，尤其是在星际暗云（Schmidt 等人 2014）和富碳恒星的大气中（Swings 等人 1953）。早期对 C_3 的天体物理探测依赖于其在可见光谱紫色区域 4050 埃处的强光谱特征；Gausset 等人(1965) 将其鉴定为 $\tilde{A}^1\Pi_u - \tilde{X}^1\Sigma_g^+$ 000-000 电子跃迁。随着超高分辨率光谱学的发展，对 C_3 (Tanabashi 等人 2005) 分子谱线表分辨率的持续改进，使得研究人员能够利用 VLT-UVES 等可见光高分辨率光谱仪探测星际介质中的 C$_3$ 4050埃吸收，其分辨本领为 R > 60 000 (例如Schmidt 等人 (2014)、Fan 等人 (2024）。

将土卫六高层大气视为富碳、高能且具有复杂光化学网络的环境，这一想法促使建模工作考虑高度不饱和C_3烃类对其光化学网络的影响。值得注意的是，Hébrard 等人（2013年）和Dobrijevic 等人（2016年）预测C_3 可能是土卫六高层大气中丰度最高的三碳物种之一，在400公里（中间层下部）摩尔比达到ppm量级，在800公里高度（中间层上部）达到数十 ppm（Hébrard 等人（2013））——相当于C_3 在土卫六大气层中的最大预测柱密度为 5×10^{13} cm^{-2}。这些相对丰度与已探测到的丰度最高的三碳烃类相当，例如丙烷（C_3H_8）在土卫六平流层和中间层中处于ppm水平（Dobrijevic 等人（2016））。

事实上，与化学性质更稳定的三碳烃类物种（C_3H_8,C_3H_6,CH_2CCH_2 和 CH_3CCH）不同，这些物种已在土卫六的平流层中观测到（Lombardo 等人（2019）），据预测，C_3 在土卫六平流层中的丰度会显著降低，在高度低于 300 km 时，其相对丰度会骤降至低于万亿分之一的水平（Hébrard 等人（2013年））。对于 c-C_3H_2 （Nixon 等人（2020年）和 Willacy 等人（2022年），也观测到了这一现象；迄今为止，它是土卫六上与 C_3 最相似的物种。导致 C_3 和 c-C_3H_2 在中间层上部相对丰度达到峰值、而在平流层中丰度降低的这种独特垂直廓线，可能是由于在中间层下部和平流层中与氢原子的反应增加，相关描述见（Dobrijevic 等人（2016年））和（Willacy等，2022）。

C_3 分子对于土卫六大气层中化学复杂性的演化尤其重要，因为人们认为它在土卫六芳香化学的生成过程中发挥作用（Loison等，2019），这是因为它与 CH_3 自由基的反应会显著影响 C_4H_2 （Mebel 等人 2023年）的生成。C_4H_2 随后成为苯和土卫六中其他芳香族化合物（包括多环芳烃）的直接前体（Loison等，2019），而众所周知，这些物质在生命起源前过程中发挥着关键作用（Ehrenfreund 等人 2006年）。因此，鉴于芳香族物种在大气中的生成对天体生物学具有浓厚的研究价值，深入了解诸多“缺失环节”至关重要，例如 C_3 + CH_3 的反应速率，而这些速率在实验上难以研究（Mebel 等人 2023年）。因此，探测并反演土卫六中 C_3 的大气丰度，将为尝试描述土卫六大气层中生命起源前分子生成过程的模型提供关键的观测约束（Loison等，2019）。

然而，尽管其在土卫六中间层中具有重要意义且预测丰度很高，迄今仍未报道对C_3 的直接且确凿探测。其原因可能与缺乏详细的C_3 红外线表有关——这一问题最近已由ExoMol 项目（Lynas-Gray等，2024）加以解决——以及土卫六的可见光谱在很大程度上被忽视，而 C_3 最强的光谱特征正出现在该波段（Rianço-Silva等人（2024））。土卫六中存在C_3 的唯一间接证据来自离子与中性粒子质谱仪在37 m/z处的峰，该峰被归因于C_3H^+（Vuitton等人，2007年），而这是 C_3 最可能的损耗机制（Dobrijevic 等人（2016））。

除此之外，最近一项利用VLT-UVES开展的研究声称，借助甚高分辨率可见光谱学，在土卫六大气中对C_3 4050埃波段作出了暂定探测（Rianço-Silva等人（2024））。尽管这一令人鼓舞的结果与C_3 在土卫六中的存在相一致，柱密度为 10^{13} cm^{-2}，但所探测到的C_3 光谱特征数量较少且信噪比较低，见Rianço-Silva等人（2024），因此需要在更高光谱分辨率和更高信噪比下开展进一步观测，以确认对C_3 在土卫六中的探测。本文的目的即在于此，结构如下：在第2 节，我们描述对土卫六的VLT-ESPRESSO观测及其数据处理。在第3 节，我们描述含有C_3 吸收的土卫六光谱模型。在第4 节，我们展示观测结果，并通过 χ^2 分析以及MCMC 贝叶斯反演，将其与土卫六的光谱模型进行比较；在第5节，我们进行讨论并得出结论。

2 观测与数据处理

2.1 观测

本研究所使用的专门观测数据由欧洲南方天文台的甚大望远镜（VLT）ESPRESSO（岩质系外行星与稳定光谱观测阶梯光栅光谱仪）仪器获取。VLT-ESPRESSO 是一台位于甚大望远镜非相干联合库德实验室（ICCL）的可见光、高分辨率、光纤馈送、交叉色散阶梯光栅光谱仪，使该仪器能够接收来自四台 8 米级单元望远镜中任意一台的光（Pepe 等（2014））。尽管其最初的建造目的

是搜寻和表征系外行星，但 VLT-ESPRESSO 已经证明是太阳系科学领域非常有用的仪器，并已开展木星大气的多普勒测速研究（Machado 等（2023））。

作为欧洲南方天文台观测计划 114.277N 的一部分，土卫六于 2024年12月4日 协调世界时 00:17 开始接受 VLT-ESPRESSO 观测，时长为 2 小时 20 分钟，使用 VLT-ESPRESSO 的超高分辨率（UHR）模式（Pepe 等（2021））。这是 VLT-ESPRESSO 可用的光谱分辨率最高的模式，分辨本领达 190 000，使这次观测成为迄今在光学波长下以最高光谱分辨率完成的土卫六观测。观测期间，视宁度（半高全宽）低于 0.8 角秒，天空晴朗。观测当晚，土卫六固体本体（直径 = 5150km）的视角直径为 0.74 角秒。然而，由于其浓厚的不透明大气层，土卫六在 $\lambda = 400$nm 波长处的光学半径在大气中约高出 300 km（Lorenz 等（1999））。因此，土卫六在 $\lambda = 400$nm 波长处的光学直径为 5750 km，观测当晚对应的视角直径为 0.826 角秒。这意味着土卫六的视圆面完全覆盖了 VLT-ESPRESSO 的 0.5 角秒光纤——这对土卫六大气建模的影响见附录 B。当时，土卫六的视星等为 +8.62，表面亮度为 7.71 星等/角秒^2，受照比例为 99.73%。目标星历取自 NASA/JPL 的 Horizons System——太阳系动力学星历计算器（Giorgini 等（1996））。

这组对土卫六进行的 7 次曝光（每次持续 20 分钟）覆盖了土卫六整个可见后向散射光谱（波长范围为 378.2–788.7 nm），并使每次曝光在 405 nm 处的信噪比（SNR）达到 60。叠加这 7 次曝光后，总信噪比将接近 100。

2.2 数据处理

2.2.1 去除地球大气吸收效应并叠加曝光

数据采用 ESPRESSO 数据处理软件 3.3.0 版进行处理。在获得土卫六每次曝光的通量定标光谱后，我们去除了多次曝光中气团质量变化的影响，这种影响在图 A1 中清晰可见。为此，我们将每次曝光的土卫六光谱除以气团质量最低的那次曝光的光谱，并对所得结果进行三次多项式拟合（见图 A2）。随后，将每次曝光的光谱除以相应的归一化多项式拟合结果，以去除气团质量变化对光谱连续谱的影响（每个光谱波长区间的取值介于 0 和 1 之间）。与$\delta S_{\lambda,\,i}$相关的第 i次曝光的光谱通量测量值，$S_{\lambda,\,i}$，其光谱通量误差（$\delta S_{\lambda,\,i}$）也采用类似方法获得：将每次曝光的光谱通量误差除以相应的气团质量归一化多项式拟合结果（每个波长区间的取值介于 0 和 1 之间），从而在去除多次曝光间气团质量变化影响的同时，保持每次曝光的信噪比。之后，将校正了气团质量变化的土卫六光谱（如图 A3 所示）进行平均，以获得整个观测夜期间的单一土卫六光谱 S_λ（公式1）。

$$S_\lambda = \frac{1}{N}\sum_{i}^{N} S_{\lambda,i} \tag{1}$$

每次 i 曝光对应的光谱通量误差也被合并为每个波长区间的单一光谱通量误差，δS_λ，如方程2所示，该方程为均值标准误差的计算公式，它取决于两个项：第一项表示每次曝光中每个波长区间的本征光谱通量误差的平均值（$\delta S_{\lambda,\,i}$），即每次曝光中每次光谱通量测量对应的光谱通量误差。第二项取决于每次曝光、每个波长区间内的光谱通量值（$S_{\lambda,\,i}$）相对于其平均值的离散程度，该平均值由方程1得出，对应多个叠加曝光（s^2）之间的方差离散程度。方程2中将两项平方后相加，从而既能考虑每次曝光中的本征不确定性，也能考虑不同曝光之间的离散程度。叠加这些光谱提高了总信噪比，在 405 nm 处达到 ≈ 100，如图A4所示。

$$\delta S_\lambda = \sqrt{\frac{1}{N}\left(\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\delta S_{\lambda,i}^2 + s^2\right)},\ \text{where } s^2 = \frac{1}{N-1}\sum_{i=1}^{N}(S_{\lambda,i} - S_\lambda)^2 \tag{2}$$

数据处理中的另一个额外步骤，是用光谱连续谱对土卫六平均光谱进行归一化，使其能够直接与第3节所述的归一化太阳光谱进行比较。为此，我们使用 Savitzky-Golay 滤波器（Savitzky 和 Golay（1964年））获取光谱连续谱，如图A5所示。

值得注意的是，每次曝光的光谱通量误差主要由光子误差主导，这与 ESPRESSO 的曝光时间计算器（ETC）（Pepe 等（2021））的预期一致。对于这些观测的条件以及类似土卫六的目标，天空背景、暗电流和读出噪声对误差的合计贡献低于土卫六亮度所产生光子噪声的 2%。因此，由于这些观测受光子噪声限制，信噪比大致随观测时间的平方根变化。

从观测光谱中去除连续谱中的地球大气贡献后，我们仅关注对应于 C_3 $\tilde{A}^1\Pi_u - \tilde{X}^1\Sigma_g^+$ 000-000 波段的感兴趣光谱区域，即 4040 埃至 4060 埃之间的狭窄波长区域，如图A6所示。这使我们能够搜索可能污染对本分析至关重要的光谱部分的地球大气吸收或发射线。我们采用 Dias 等 (2022) 对其他太阳系目标进行高光谱分辨率观测时所用的方法，使用 NASA 的开放访问行星光谱生成器（PSG）辐射传输套件，模拟地球大气的透射情况（Villanueva 等（2018年）），针对甚大望远镜进行模拟。根据 ESPRESSO UHR 模式分辨率下模拟得到的地球大气透射光谱（图1中以灰色显示），在 4040 埃至 4060 埃的波长范围内，没有任何地球大气吸收线或发射线会导致超过 0.01% 的透射率变化；这一变化远低于这些高信噪比观测所能达到的灵敏度，因此无需进行额外的地球大气校正。

2.2.2 去除多普勒频移

处理太阳系天体的高光谱分辨率观测时，一个关键步骤是校正轨道多普勒频移。这种多普勒频移是观测者（位于地球上）与被观测天体之间相对运动的结果，会导致观测波长发生位移 $\Delta\lambda$ 给出为

$$\Delta\lambda = \lambda_0 \frac{v}{c} \tag{3}$$

其中 λ_0 是发生多普勒位移之前的静止系波长。我们旨在探测土卫六大气层中的吸收线

应当出现在土卫六的静止系中。因此，必须将观测光谱移至土卫六的静止系，方法是从每个波长区间中减去相应的多普勒位移，该位移由公式3给出。作为参考，在观测期间，土卫六相对于甚大望远镜处观测者的径向速度为 5.33 km/s，方向朝向观测者（参见 Giorgini 等人 (1996)），这相当于在 4050 埃处产生 0.072 埃的多普勒位移。

3 土卫六中 C_3 吸收的建模 N

分析观测光谱时，将其与土卫六在感兴趣波长区域的模型光谱直接比较是合理的。本文采用Rianço-Silva等人（2024）使用的方法，将土卫六光谱中这段极短的波长区间（宽 2 nm）建模为归一化的后向散射太阳光谱，其上叠加了 C_3 谱线吸收。这是一种有效的近似，因为

- 预计 C_3 吸收发生在土卫六大气层的上层（高度超过 400 km），明显高于土卫六在 405 nm 处的光学半径（低于 250 km，据 Lorenz 等人（1999），后向散射发生于此处。
- 土卫六在这段短波长区间内的光谱主要受连续谱霾吸收和散射的影响，不会产生高分辨率特征。 Rianço-Silva等人（2024）指出，在 400 nm 至 500 nm 区域内，土卫六的连续谱霾吸收每埃变化不到 0.04%，相对于观测光谱的波长范围和信噪比而言，这一变化可以忽略不计。
- 除了 C_3之外，目前已知土卫六大气层中没有其他吸收气体会在 4040 埃至 4060 埃的波长范围内呈现吸收线，这一点也见于Rianço-Silva等人(2024)的研究。

因此，我们将土卫六在 4040 埃至 4060 埃波长范围内的超高分辨率光谱建模为超高分辨率太阳光谱（分辨率降至 ESPRESSO 超高分辨率模式的 R = 500 000的 = 190 000Kurucz (2006年)太阳光谱）与建模得到的 C_3 透射光谱 $M(\lambda,\ T,\ N)$的乘积。

C_3 透射光谱 $M(\lambda,\ T,\ N)$基于 Fan 等人最新发布的 C_3 线表，该线表涵盖其$\tilde{A}^1\Pi_u - \tilde{X}^1\Sigma_g^+$ 000-000 带，由Fan 等人 (2024)整合多个早期线表编制而成，例如Tanabashi 等人(2005)和Schmidt 等人(2014)的线表。值得注意的是，这些线表是通过与 VLT-UVES 的观测数据进行比较而获得的，其光谱分辨率为 R ≈ 80 000 2000 (Dekker 等人)，不到甚大望远镜 ESPRESSO 的 UHR 模式分辨率的一半。这些线表仅包含每条 C_3 谱线的以下信息：波长、 λ_j对应的 P、Q 和 R 支跃迁（与其 J能级相关），以及振子强度， f_j (Fan 等（2024）)。

建立土卫六大气层中 C_3 透射光谱模型的第一步，是求出与振电子跃迁相关的多个分子能态（J）的配分函数。假设处于热平衡状态，该配分函数由玻尔兹曼分布给出，如公式4所示，其中 B = 0.431 cm^{-1}，数据来自Tanabashi 等人 (2005。公式4分母中的配分函数求和项， k 是对所有观测到的转动能级求和得出的，数据来自 Fan 等人 (2024)。

$$p(J,T) = \frac{(2J+1)\exp\left[-\frac{BJ(J+1)}{k_BT}\right]}{\sum_k\left((2k+1)\exp\left[-\frac{Bk(k+1)}{k_BT}\right]\right)} \tag{4}$$

利用气体分子在多个状态（J）间的这种分布，可根据 C S_j 线表中提供的波长 λ_j和振子强度 f_j，计算每个跃迁的线强度 $_3$，如公式 5 (Sánchez-Lavega 2011 所示）。考虑热平衡时，C_3 各个吸收线的线型为高斯型，表示为 $G_j(\lambda,\ T)$，如公式 6所述，其中多普勒展宽系数 $\gamma_{j,\ D}(T)$由公式 7给出，它取决于 m_{C_3}，即 C_3 分子的质量。

$$S_j = \frac{e^2\lambda_j^2}{4m_ec^2\varepsilon_0}p(J,T).f_j \tag{5}$$

$$G_j(\lambda,T) = \frac{S_j}{\gamma_{j,D}(T).\sqrt{\pi}}.\exp\left[-\left(\frac{\lambda-\lambda_j}{\gamma_{j,D}(T)}\right)^2\right] \tag{6}$$

$$\gamma_{j,D}(T) = \frac{\lambda_j}{c}\sqrt{\frac{2k_BT}{m_{C_3}}} \tag{7}$$

最后，每条吸收线的光学深度轮廓τ_j（$\lambda,\ T,\ N$）由谱线轮廓 G_j（$\lambda,\ T$）与土卫六大气层中的 C_3 柱密度的乘积 N 以及因式$\tilde{A} \simeq 20.2155$ 共同给出，该因式用于在公式 8 中计入土卫六大气层的球形几何效应。通过采用 $\tilde{A} \simeq 20.2155$ 的有效路径长度增强因子，对受照圆盘上光子的不同斜向路径进行处理；该因子通过积分观测圆盘上变化的气团质量效应获得，相对于视圆面中心的垂直双程路径而言，能够反映这一差异。该因子是朗伯球体的近似，其中靠近行星边缘的光子会穿过更长的大气柱（Palmer 等人 2001）。

$$\tau_j(\lambda,T,N) \approx \tilde{A}G_j(\lambda,T)N \tag{8}$$

为了获得土卫六上 C_3吸收带的完整模型透射光谱 M（$\lambda,\ T,\ N$），我们将所有单条谱线（即 Fan 等人（2024）中识别出的所有吸收线）的透射轮廓 M_j（$\lambda,\ T,\ N$）相乘。这些轮廓由比尔-朗伯定律得到，其中考虑了光线向下到达假定发生后向散射的光学厚层的双程路径（有效气团质量为 $\tilde{A} \simeq 20.2155$，如上所述），如公式 9所示。

$$M(\lambda,T,N) = \prod_j M_j(\lambda,T,N) = \prod_j e^{-\tau_j(\lambda,T,N)} \approx \prod_j e^{-\tilde{A}G_j(\lambda,T)N} \tag{9}$$

最后，将土卫六的透射光谱与C_3 的归一化太阳光谱相乘，再与半峰全宽（FWHM）等于VLT-ESPRESSO光谱分辨率的高斯轮廓进行卷积，从而使土卫六的合成光谱与观测数据具有相同的光谱分辨率——这一过程仍遵循Rianço-Silva等人(2024)。

4 结果与讨论

4.1 模型光谱与观测的比较

为了将观测到的土卫六VLT-ESPRESSO光谱与含有C_3 吸收的合成模型光谱进行比较，我们通过改变C_3的柱密度 N（从0到 3×10^{13} cm^{-2}，步长为 2×10^{12} cm^{-2} ）生成了一组模型光谱，并假设

T = 200K——土卫六大气层在400 km高度处的温度（Hörst2017）。该比较如图1所示。

尽管该光谱区域最显著的特征是后向散射太阳吸收线，但值得注意的是，土卫六的 VLT-ESPRESSO光谱中有若干特征与模拟的土卫六光谱中的特征相吻合，后者包含建模的 C_3 吸收线。建模光谱特征与观测光谱特征的比较见附录表 D1。这些特征偏离了归一化太阳光谱；该光谱代表土卫六不含任何 C_3 吸收时的基线光谱。在 4052.27 埃、4052.77 埃和 4053.19 埃处的光谱特征尤其明显。不过，也可以看出，在某些情况下，模型光谱中的 C_3 吸收线相较于偏离归一化太阳光谱的观测光谱特征，发生了数百分之一埃的位移。4051.60 埃、4051.90 埃、4052.11 埃和 4052.67 埃处的光谱特征尤其明显。

对此的一种可能解释是，用于模拟 C_3 吸收光谱的 C_3 线表存在不确定性；这些线表引自 Tanabashi 等人（2005）、Schmidt 等人（2014）和 Fan 等人（2024）。这是因为 C_3 线表是通过使用甚大望远镜-VLT-UVES 的观测数据观测星际 C_3 吸收线，并据此以经验方式编制和验证的，其分辨本领为 R ≈ 80 000 （Fan 等（2024））。这意味着以往甚大望远镜-VLT-UVES 观测的光谱分辨率不高于 $\Delta\lambda = R/\lambda$，即在 λ = 4050埃处为 $\Delta\lambda$ = 0.05埃；相比之下，VLT-ESPRESSO 在 UHR模式下的光谱分辨率为 $\Delta\lambda$ = 0.02埃。与以往的研究相比（Tanabashi 等人（2005）、Schmidt 等人（2014）、Fan 等人（2024）），这次分辨本领有所提高的观测可能需要修正与部分 C_3 谱线中心相关的一些波长。

4.2 $\Delta\chi^2$分析

为评估模型中的 C_3 吸收的非零取值是否确实能提升对VLT-ESPRESSO数据的模型拟合质量，我们计算了 $\Delta\chi^2$ 随吸收性 C 柱密度变化的模型拟合3曲线，

N C_3 2020 ()

N C_3 2020 ()。此分析采用了Nixon 等人（ ）的方法，其中 χ^2 由式10定义， S_λ 对应于甚大望远镜-ESPRESSO测得的土卫六光谱通量， $M_\lambda(N)$ 对应于土卫六通量模型，其随 C_3 柱密度变化， N，而δS_λ 对应于甚大望远镜-ESPRESSO测得的不确定度（即在波长 λ 处，甚大望远镜-ESPRESSO测得的光谱通量为 $S_\lambda \pm \delta S_\lambda$）。

$$\chi^2(N) = \sum_\lambda \left(\frac{S_\lambda - M_\lambda(N)}{\delta S_\lambda} \right)^2, \quad \Delta\chi^2(N) = \chi^2(N) - \chi^2(N=0) \tag{10}$$

基于Nixon等（2020）的框架，我们通过从每个计算得到的 $\chi^2(N)$ 中减去 $\chi^2(N=0)$（即无 C_3 情况下的 χ^2 值），计算 $\chi^2, \Delta\chi^2(N)$。如果在模型中加入 C_3 吸收后光谱拟合有所改善，我们预计 $\Delta\chi^2(N)$ 会持续下降，直至达到一个明显的极小值——这应当表示获得最佳模型拟合时对应的 $N(C_3)$。还应注意，与标准的 χ^2 分析不同，Nixon 等（2020）所采用的方法表明，当 $\chi^2 \sim n$ 时光谱拟合良好；其中 n 是拟合所用的数据点数量，设为 n = 1000。

在图2 中，我们展示了通过计算 $\Delta\chi^2(N)$ 曲线所得的结果

对于一组包含 50 个 N值的集合，其在$N = 10^{11}$ cm^{-2} 至 $N = 10^{14}$ c m^{-2}之间按对数间隔分布，我们计算了 $\Delta\chi^2(N)$。该分布中的 $\chi^2(N=0)$ 为 1080，这确保了光谱模型拟合良好。正如 C_3 探测所预期的那样，随着 N 增加，我们观察到 $\Delta\chi^2(N)$曲线中出现一个明显的极小值，这表明在光谱模型中加入 C_3 吸收能够提高光谱拟合的质量（直到该趋势的反转点，即 χ^2 极小值）。在 $N(C_3) = 1.5 \times 10^{13}$ cm^{-2}处观察到 $\Delta\chi^2(N)$的明显极小值；该柱密度与过去对土卫六高层大气中 C_3 丰度的暂定估计一致（Rianço-Silva等人（2024））。

此外， $\Delta\chi^2$ 中的局部极小值深度为 -64.2。同样，按照 Nixon 等人 (2020年的方法，我们将该结果的显著性计算为 $\sqrt{64}$。2，因此土卫六上 C_3 的探测显著性为 8。0σ。

4.3 对光谱进行 MCMC似然拟合

为了进一步独立地确认在土卫六上探测到 C_3，并以更稳健的方式反演 C_3 的大气丰度，我们采用贝叶斯统计。这是基于行星光谱进行大气反演时的标准做法，尤其适用于系外行星光谱的大气反演（例如 Waldmann等 (2015年)、Taylor 等人 (2023年)、Xue 等人 (2024)）。虽然贝叶斯统计分析在太阳系目标研究中并不常用，因为这类目标的信噪比通常足够高，能够明确探测到单条谱线，但它仍是考察此类情况的有用工具：吸收特征的量级与误差棒相当（Waldmann 等（2015年）），本研究正是如此。

以土卫六的简单模型光谱作为起点，$M_\lambda(T,\ N)$该模型考虑了一个 C_3, 我们旨在从光谱中反演的两个自由变量是 C_3的柱密度， $N(C_3)$，以及它的温度 T。为了对光谱数据中多个模型拟合的概率分布进行采样和评估，我们使用基于 `emcee` Python 软件包（Foreman-Mackey等（2013））的马尔可夫链蒙特卡罗（MCMC）集成采样器。

对于一个马尔可夫链蒙特卡罗集成采样器，光谱数据点由 λ、S_λ和 δS_λ 描述（分别为波长、测得的光谱通量及相应的光谱通量误差），拟合变量为 N 和 T时，光谱拟合的贝叶斯论证由公式 11

$$p(N,T|\lambda,S_\lambda,\delta S_\lambda) \propto p(N,T).p(S_\lambda|\lambda,\delta S_\lambda,N,T) \tag{11}$$

根据公式 11 可知，反演变量 N,T 应用于光谱数据集时，其概率分布函数正比于先验函数 $p(N,T)$ 和似然函数 $p(S_\lambda|\lambda, \delta S_\lambda, N, T)$，遵循 Foreman-Mackey等（2013）和 Waldmann等人（2015）。 N和 T的先验定义为均匀先验，范围分别为 0 至 10^{14} cm^{-2}，以及 0 至 500 K。这些宽先验范围使马尔可夫链蒙特卡罗采样器能够探索这些变量参数空间中广泛的合理取值。同样遵循 Foreman-Mackey等（2013）和Waldmann等人（2015），似然函数可定义为对数似然函数，如公式 12 所示，我们旨在将其最大化。

$$\log(\mathcal{L}) = -\frac{1}{2}\sum_\lambda \left[\frac{(S_\lambda - M_\lambda(N,T))^2}{(\delta S_\lambda)^2} \right] - \log\left(\sqrt{2\pi(\delta S_\lambda)^2}\right) \tag{12}$$

该MCMC似然拟合针对土卫六的VLT-ESPRESSO光谱运行了5000次迭代，并返回了图3 中的后验图。不同于第χ^2 节所示的4.2曲线，反演后验图并不以噪声标准差为单位展示光谱拟合的质量

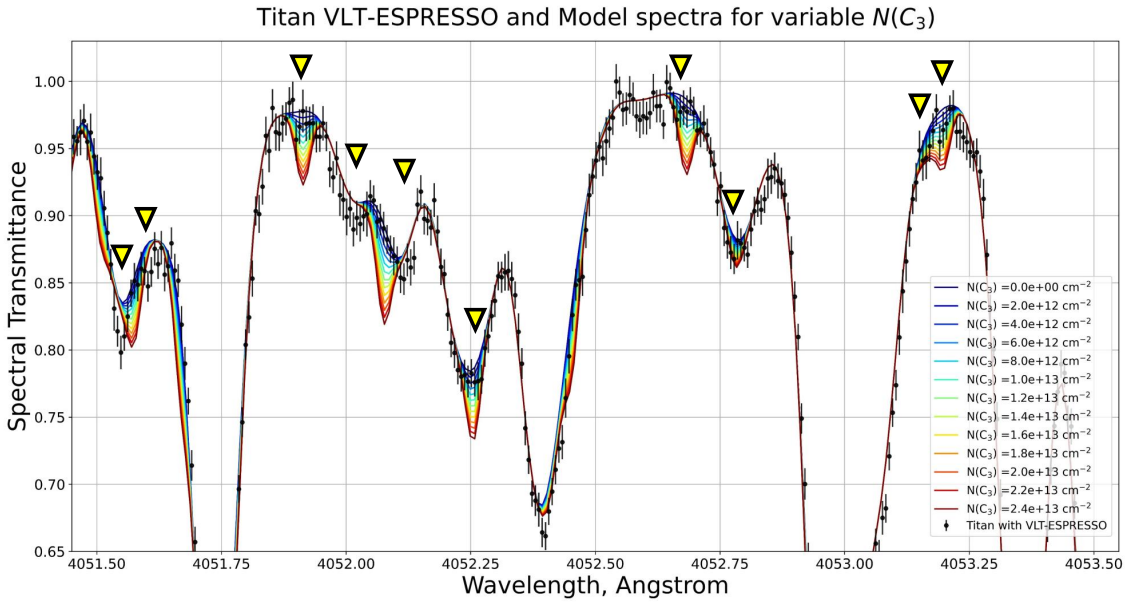

图 1. VLT-ESPRESSO 对土卫六的归一化光谱（黑色数据点），展示了感兴趣的光谱区域中 $\tilde{A}^1\Pi_u - \tilde{X}^1\Sigma_g^+$ 000-000 波段的 C_3，并与一组 C 柱密度各异的土卫六光谱模型进行比较$_3$ (N)。光谱模型基于 Fan 等人 (2024) 的 C_3 线表。地球大气透射率由行星光谱生成器生成，并向上平移 1%，以便清晰显示 Villanueva 等人 (2018年)。黄色三角形标出了我们确认并归因于 C 的光谱特征$_3$ 吸收特征，详见表 D1。

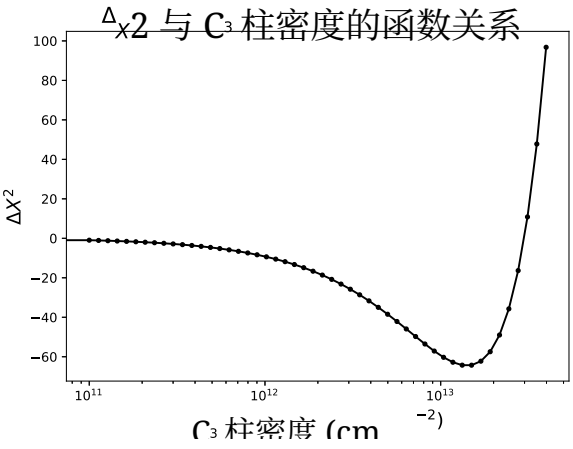

图 2. $\Delta\chi^2$ 曲线随 C 柱密度的变化$_3$，$N(C_3)$，采用（Nixon等（2020））的方法。该图显示，随着柱密度接近 $N(C_3) = 1.5 \times 10^{13}\,\mathrm{cm}^{-2}$，光谱质量有所提高$_3$，这表明在土卫六上探测到了 C。

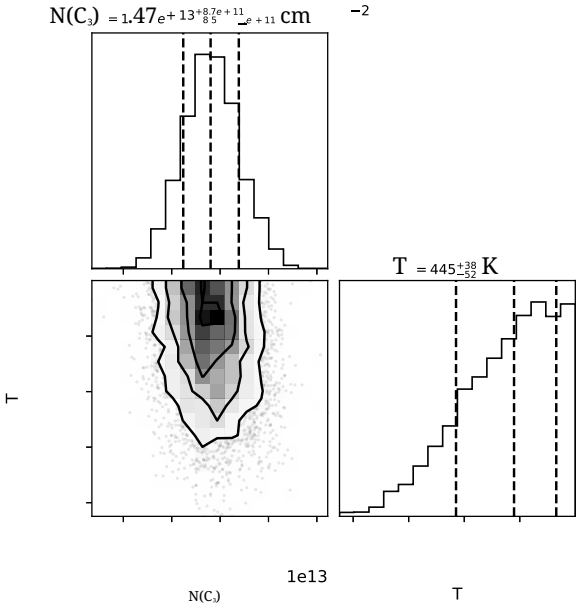

图3. 对土卫六的VLT-ESPRESSO光谱进行MCMC拟合得到的后验图。对C_3, (N)的柱密度和温度（T）进行拟合。反演值以 1σ 误差棒展示。二维直方图上的等高线图对应于二维高斯分布的（0.5、1、1.5、2）倍σ置信区域。直方图纵轴对应于反演得到的概率分布，无量纲。

相反，这些图对应于概率分布直方图，展示了使光谱拟合对数似然函数最大化的变量（N和T）的取值。正是这些变量关于所评估自由参数（N 和 T）的分布，给出了这些变量最可能的值（直方图中位数），以及反演值的误差棒（基于概率分布的标准差）。（Waldmann等

2015年）。这些后验图显示，模型对土卫六 C_3 柱密度的VLT-ESPRESSO光谱拟合结果一致性良好，从而能够对 C_3的丰度加以约束。根据 MCMC拟合的后验概率分布，并使用原始的 Fan 等人 (2024) C_3 线表，我们推得土卫六上 C_3 的柱密度为 $N = (1.47 \pm 0.09) \times 10^{13}\,\mathrm{cm}^{-2}$，对应温度为 $T = 445^{+38}_{-52}\,\mathrm{K}$；误差范围为 1σ，如图 3的直方图所示。

对于 3σ $N = \left(1\ 47^{+0\ 25}_{-0\ 26}\right) \times$误差范 10^{13} $^{-2}$ 围，推得的数值为...cm，对应温度为 $T = 445^{+57}_{-134}\,\mathrm{K}$。对于 5σ 误差范围，我们得到 $N = (1.47 \pm 0.30) \times 10^{13}\,\mathrm{cm}^{-2}$，对应温度为 $T = 445^{+58}_{-171}\,\mathrm{K}$。后验图中的直方图显示，反演 C_3 柱密度所得的误差棒近乎对称，并且有充分把握排除了 $N = 0$ 情形（即土卫六上不存在 C_3 ）。这进一步表明，以高于 5σ 的置信度探测到土卫六高层大气中的 C_3；这是宣称一项新探测的标准。

关于反演结果的直方图 T 并不对称，分布呈现较长的高温值尾部，表明此次反演对温度的约束颇具挑战。加上温度的相对不确定性较大（反演得到的 T 在 5σ处，不确定性接近 50%），这种偏斜分布说明此次拟合对温度的敏感性较低。这可能是模型所采用的近似处理造成的，尤其是热平衡假设，以及假定整个 C_3 吸收层的温度恒定；这一假设与土卫六观测到的温度廓线不符（Willacy等，2022）。此外，Fan 等人提出的某些 C 3 谱线位置可能存在前文所述的误差，这些误差在如此前所未有的光谱分辨率下会更加明显。 Fan 等人(2024)鉴于此次反演允许 T 的参数范围很广（0K 至 500K），可以认为，反演结果可能偏向较高温度，以产生显著的谱线展宽，从而使模型拟合更接近那些略有偏移的光谱特征。在附录E 中，我们检验基于原始Fan 等人(2024线表略作改编后得到的 C_3, 线表，是否能为 T提供约束更好的后验图。这一点可通过后验图验证

图 E1 ——指向一种可能的改进方案：改进现有的 C_3 线表。其依据是，C_3 通过独立方法也得到了明确探测，正如使用原始线表得到的 χ^2 曲线所示。我们建议对原始Fan 等人（2024）C_3 线表进行的这些微小位移列于表D1的最后一列。尽管如此，反演得到的温度不确定性较大，但总体上与预测 C 丰度最高处高度所对应的最大预期温度相符$_3$ ——预测高度为 400 千米（ Hébrard 等人（2013））（Dobrijevic 等人（2016）），温度约为 200 K（Hörst 2017）。

尽管如此，这些贝叶斯反演也使我们能够将 T 拟合到更具物理依据的数值（在我们的案例中，T = 200K，取自 Hörst（2017）），这有助于检验：即使反演中不启用前述非物理的谱线展宽，拟合是否仍能明确探测到 C_3。此类拟合的结果展示于图 4 中。结果还表明，对$N(C_3)$的反演约束良好，其中 $N(C_3) = (1.38 \pm 0.09) \times 10^{13}$厘米$^{-2}$，对应 1σ； $N(C_3) = \left(1.38^{+0}_{-0}{}^{26}_{.27}\right) \times 10^{13}$厘米$^{-2}$，对应 3σ；以及 $N(C_3) = \left(1.38^{+0}_{-0}{}^{36}_{.35}\right) \times 10^{13}$厘米$^{-2}$，对应 5σ；其中 T固定为 200 K。该反演值与 χ^2 拟合以及针对 N 和 T的MCMC反演所得结果一致；这进一步证实了上述探测结果。固定温度值时， $N(C_3) = 0$ 情形在 5σ处被排除。

一幅展示从最佳拟合参数值获得的土卫六VLT-ESPRESSO光谱最佳拟合模型的图

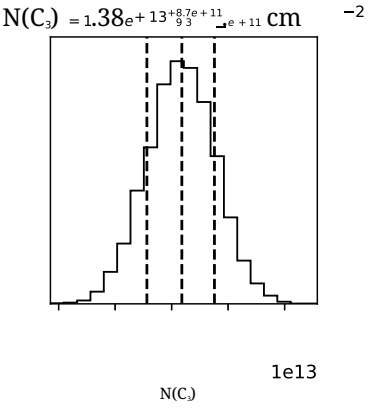

图 4. 对土卫六的 VLT-ESPRESSO 光谱进行 MCMC拟合所得的后验图。假设温度固定为 T = 200K，拟合 C_3, (N) 的柱密度。所得数值以 1σ 误差棒表示。直方图的纵轴对应所得的概率分布，无单位。

对于 N（C_3）和 T， 3σ 相应的不确定性，并与后向散射太阳光谱（这是土卫六光谱在不含C_3 吸收情况下的替代光谱）进行比较，结果如图5所示。该带有相应不确定性的最佳拟合图进一步凸显了观测光谱在受C_3 吸收影响的波长处偏离太阳光谱的现象，从而进一步证实了土卫六上C_3 的探测。在附录C中，尤其是在图C1中，我们展示了相对于观测光谱和马尔可夫链蒙特卡洛最佳拟合光谱模型的残差图，以及一幅相对于不含C_3的光谱模型的残差图。正如预期，最佳拟合马尔可夫链蒙特卡洛光谱模型（含C_3）改善了拟合效果，使残差偏差减小并更接近于零。

有趣的是，所得的土卫六上 C_3 柱密度与首次尝试探测土卫六上 C_3 时估算的柱密度值相符；该探测由甚大望远镜上的 VLT-UVES 于 Rianço-Silva等人(2024) 报道，且该值处于 $N(C_3)$ 根据 Dobrijevic等人(2016年) 的预测上下限之内。该研究预测土卫六中间层的 C_3 柱密度介于 $5 \times 10^{12}\,\mathrm{cm}^{-2}$ 至 $5 \times 10^{13}\,\mathrm{cm}^{-2}$之间。

5 结论

在本研究中，我们获取并分析了土卫六的 VLT-ESPRESSO 高分辨率可见光谱；这是迄今获得的土卫六光谱中光谱分辨率最高的可见光谱。如此空前的光谱分辨率提高了在用于搜寻 C_3 吸收特征的短波长范围内的灵敏度；与先前对土卫六开展的高分辨率观测相比（Rianço-Silva等人（2024）），这一范围主要为 4050埃至 4055埃。最重要的是，VLT-ESPRESSO 带来的光谱分辨率和灵敏度提升，使我们能够更有效地将土卫六光谱中底层且更强的太阳光谱特征与可能存在的 C_3 吸收特征区分开来；在较低分辨率下，这一直是一个重大问题（Rianço-Silva等人（2024））。

因此，尽管太阳光谱特征明显更深，但通过比较一组土卫六大气层模型光谱（其中 C_3 的丰度逐渐增加），我们得以识别出与 Kurucz (2006年) 太阳光谱相比发生偏移的匹配特征。我们识别出 10 个相较于太阳光谱偏移超过 1σ 、且深度和位置与 C_3 吸收特征相匹配的吸收特征。尽管观测到的部分非太阳光谱特征似乎与预测值略有偏差

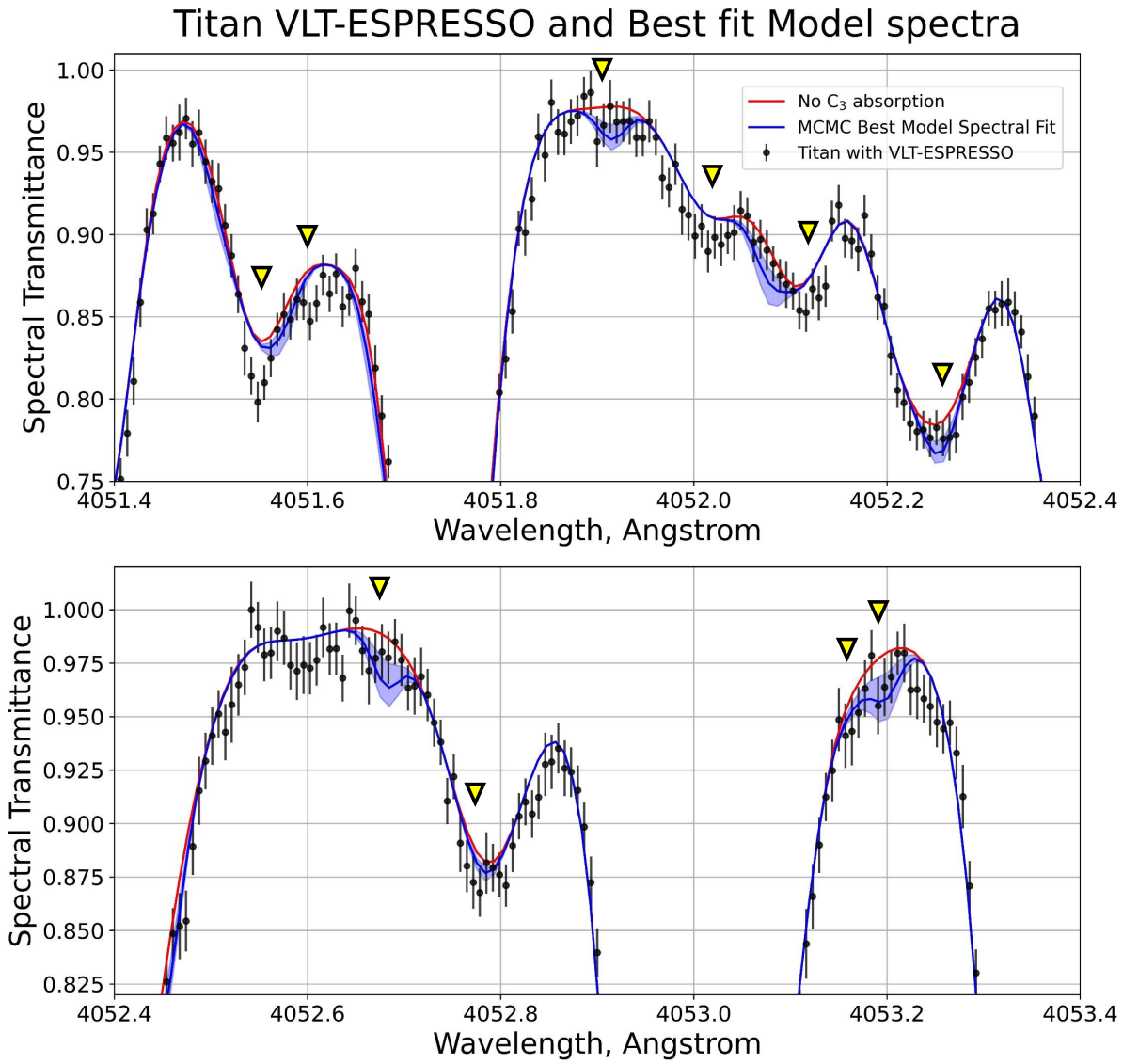

图 5. 土卫六的 VLT-ESPRESSO 归一化光谱（黑色数据点），位于感兴趣的光谱区域，涵盖 C $\tilde{A}^1\Pi_u - \tilde{X}^1\Sigma_g^+$ 000-000 带；将其与后向散射太阳光谱（作为土卫六无 C_3 吸收时光谱的替代，红色）以及通过 MCMC 似然拟合得到的最佳拟合模型（蓝色）进行比较，该模型对应于反演得到的 $N(C_3)$ 和 T 值。蓝色阴影区域表示最佳拟合模型的不确定性，该不确定性基于反演得到的 $N(C_3)$ 和 T 值及其 3σ 误差棒。黄色三角形标出了我们认定与 C_3 吸收特征相关的光谱特征，详见表 D1。

C_3 吸收谱线位置相较于 Fan 等人 (2024) 给出的位置的偏差，在所有情况下均处于线表误差条 0.05 埃以内——见表D1。

尽管上述 10 个匹配的吸收特征有力地支持了在土卫六上探测到 C_3，但所有单个可能的 C_3 特征相对于 $N = 0$光谱的偏差都未达到 5σ，因此无法仅凭观测单条谱线宣称探测到该物质。为此，我们进行了两项独立的

对 VLT-ESPRESSO 光谱的模型拟合进行统计分析。第一种方法是计算 χ^2 模型拟合曲线随 C_3 柱密度变化的情况（采用Nixon 等人（2020年）所用的方法）。这得到了一个明显的极小值，位于 $N = 1_{\text{。}}5\times10^{13}\,\text{cm}^{-2}$，与 C_3 的探测相符。第二种方法是应用简单的贝叶斯MCMC反演（Waldmann 等（2015））（Foreman-Mackey 等（2013）），将光谱模型拟合到

观测光谱。通过这种方法，可以反演出能够为观测光谱提供最佳模型拟合的总 C_3 柱密度 N 和温度 T。至关重要的是，此次拟合反演得到 C_3 柱密度为 $N = \left(1.38^{+0.36}_{-0.35}\right) \times 10^{13}\,\mathrm{cm}^{-2}$（位于 5σ），从而排除了 $N = 0$情景（土卫六上不存在 C_3）的可能性，得以探测到土卫六上的 C_3。尽管相对误差棒较大且后验分布约束较弱（没有明显峰值），反演得到的 C_3 吸收层温度 $T = 422^{+58}_{-171}$ K 总体上与土卫六中间层的预期温度（$T \sim 200$K）一致；Dobrijevic 等（2016）预测 C_3 在该处更为丰富。

本研究反演得到的土卫六上层大气中 C_3 柱密度，可与此前关于土卫六大气化学的建模研究（Hébrard 等人（2013）；Dobrijevic 等人（2016））所预测的 C_3 丰度廓线进行比较。我们采用 Hébrard 等人（2013）的图 4 中预测的 C_3 混合比垂直廓线，并利用（Teanby 等人（2009））的大气密度廓线，对多个高度层进行积分，从而获得了 C_3 柱密度随高度变化的等效预测，最低延伸至 400 km 高度，如图 6 所示。值得一提的是，（Hébrard 等人（2013））的垂直丰度廓线来源于光化学模型的 900 次马尔可夫链蒙特卡洛运行，并据此获得了中位数廓线和 20% 分位数廓线。根据（Hébrard 等人（2013））光化学模型预测的、延伸至 400 km 高度的 C_3 柱密度中位数为 $7.8\times10^{14}\,\mathrm{cm}^{-2}$（柱密度垂直廓线以红色表示），比我们利用 VLT-ESPRESSO 测得的 C_3 柱密度高 50 倍。然而，对于预测 C_3 分布的第一个 20% 分位数（柱密度垂直廓线以绿色表示），C_3 延伸至 400 km 高度的预测柱密度为 $6.5 \times 10^{13}\mathrm{cm}^{-2}$，比我们的 VLT-ESPRESSO 测量值高 3 倍。我们的观测值与（Hébrard 等人（2013））光化学模型预测下限之间存在的差异约为 3 倍，明显小于预测的不确定性范围（模型中位数廓线与第一个 20% 分位数廓线之比），后者跨越了 12 倍的范围。不过，这一轻微差异可能指向尚未纳入模型的化学过程

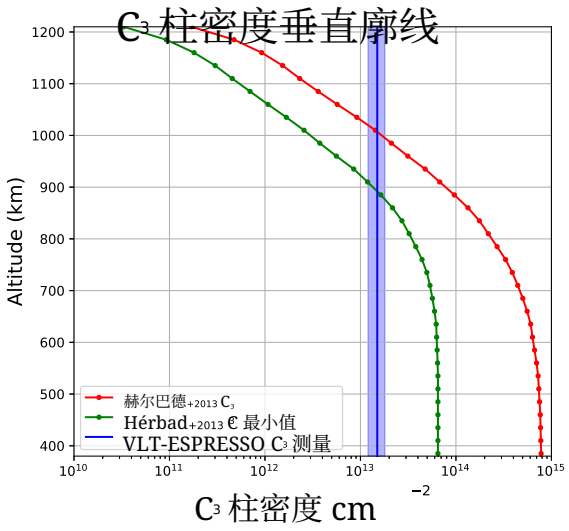

图6. C的垂直廓线$_3$ 柱密度（从大气层顶向下至 y 轴所示高度），由对 Hébrard 等人(2013年) 预测的 C 垂直廓线进行高度积分得到$_3$,，分别对应 C 不确定性传播研究所得的中位数廓线$_3$（红色）和第一个 20 分位数分布（绿色，表示 C 的最小预测廓线）。蓝线及误差棒对应于本研究反演得到的 C_3 柱密度及其 5σ 相应的误差棒。

在（Hébrard 等人（2013））中，可能导致土卫六高层大气中的 C_3 轻微亏损。近年来，土卫六烃化学的更新得到了进一步探讨（Loison等，2019）、（Willacy等，2022），但自（Hébrard 等人（2013））以来，尚未发表更新的 C 垂直廓线，因此我们建议未来的建模工作探讨土卫六 C 光化学方面的更新。$_{3\,3}$

为了进一步约束土卫六中间层中 C_3 的垂直廓线，并将其观测到的垂直廓线与其他光化学物种及光化学模型预测直接比较，我们建议采用更全面的土卫六大气辐射传输模型，并具备垂直分辨率，而不是像本研究那样采用简单的单层模型。这个单层模型可以视为对谱线形成过程的过度简化，将其视作光谱上的一层“屏幕”，仅在固定高度吸收。然而，要实现这种与高度相关的光谱，还需要关于 C_3 电子跃迁的更多信息，相较于现有的 4050 埃吸收带资料（Fan 等（2024））（例如：空气展宽线宽以及谱线位置的压力位移）。尽管如此，C_3 在土卫六大气层高处（300 km 以上）、低压环境中的吸收会使多普勒展宽主导线型，因此采用高斯线型是合理的假设（Tennyson 等，2014）。最近，ExoMol 发布了完整的 C_3 谱线表（Lynas-Gray等，2024），涵盖 C_3 中红外波长大于 5μ米的红外跃迁。因此，我们建议进一步利用覆盖中红外波长的观测数据，搜寻并建模土卫六上的 C_3 吸收，例如近期基于 JWST-MIRI 发布的数据（Nixon 等人，2025）。

最后，我们进一步强调，最初为系外行星研究设计的仪器（例如甚大望远镜-ESPRESSO（Pepe 等（2021））），乃至为应对系外行星光谱低信噪比特性而开发的技术（例如贝叶斯 MCMC似然光谱反演（Waldmann 等（2015））），在应用于太阳系目标和科学案例时都大有裨益。随着系外行星研究迎来技术与科学发展的黄金时代（例如，未来的望远镜和仪器，如 Ariel（Tinetti等，2018）和 ELT-ANDES（Palle等，2025）），我们也不妨回望自己的宇宙近邻，借助这些新知识重新探寻其中诸多尚未解开的未解之谜。

致谢

本研究得到葡萄牙科学技术基金会（FCT）项目 PTDC/FIS-AST/29942/2017 的资助，资金来源为国家资金；同时还获得欧洲区域发展基金通过 COMPETE 2020 提供的项目 POCI-01-0145-FEDER-007672 资助，并获得研究资助项目 UIDB/04434/2020、UIDP/04434/2020 和 UID/04434/2025 的支持。RRS 感谢 FCT 博士奖学金 2024.02527.BD 提供的资助。本研究基于在欧洲南方天文台（ESO）计划 114.277N 下，于南半球欧洲天文研究组织开展的观测所得数据。

数据可用性

本研究所使用的观测数据可在 ESO科学档案中公开获取，与观测计划 114.277N 相关联。此外，作为本文的补充材料，我们还提供了本研究使用的光谱数据（土卫六的光谱以及本分析中使用的模型光谱）。

参考文献

Arney G., Meadows V., Domagal-Goldman S., Deming D., Robinson T., Tovar G., Wolf E., Schwieterman E., 2017, 《天体物理学杂志》, 836, 49 Coustenis A., Jennings D., Nixon C., Achterberg R., Lavvas P., et al 2010, 《伊卡洛斯》, 207, 461 Dekker H., D'Odorico S., Kaufer A., B.Delabre Kotzlowski H., 2000, Proc. SPIE 4008, 光学与红外望远镜仪器及探测器, 4008 Dias J., Machado P., Ribeiro J., 2022, 大气, 13, 461 Dobrijevic M., Loison J., Hickson K., Gronoff G., 2016, 《伊卡洛斯》, 268, 313 Douglas A., 1951, 《天体物理学杂志》, 114, 466 Ehrenfreund P., Rasmussen S., Cleaves J., Chen L., 2006, 《天体生物学》, 6, 3 Fan H., Rocha C., Cordiner M., H. Linnartz N. C., Farhang A., et al 2024, 《天文学与天体物理学》, 681, A6 Foreman-Mackey D., Hogg D., Lang D., Goodman J., 2013, 《太平洋天文学会刊》, 125, 306–312 Gausset L., Herzberg G., Lagerqvist A., Rosen B., 1965, 《天体物理学杂志》, 142, 45 Giorgini J., Yeomans D., Chamberlin A., et al 1996, 《美国天文学会公报》, 28, 1158 Hébrard E., Dobrijevic M., Loison J., Bergeat A., Hickson K., Caralp F., 2013, 《天文学与天体物理学》, 552, A132 Hörst S. M., 2017, 《地球物理研究杂志：行星》, 122, 432–482 Kasten F., Young A., 1989, 《应用光学》, 28, 22 Kurucz R., 2006, 发表在 arXiv, 0, 3 Loison J., Dobrijevic M., Hickson K., 2019, 《伊卡洛斯》, 329, 55 Lombardo N., Nixon C., Greathouse T., Bézard B., Jolly A., et al 2019, 《天体物理学杂志快报》, 881, L33 Lorenz R., Lemmon M., Smith P., Lockwood G., 1999, 《伊卡洛斯》, 142, 391–401 Lynas-Gray A., Polyansky O., Tennyson J., Yurchenko S., Zobov N., 2024, 皇家天文学会月刊, 535, 1439–1448 MacKenzie S., Birch S., Hörst S., Sotin C., Barth E., Lora J., et al 2021, 《行星科学杂志》, 2, 112 Machado P., Silva J., Brasil F., Ribeiro J., Gonçalves R., Silva M., 2023, 《宇宙》, 9, 491 Mebel A., Agúndez M., Cernicharo J., Kaiser R., 2023, 《天体物理学杂志快报》, 945, L40 Nixon C., Thelen A., Cordiner M., Kisiel Z., Charnley S., et al 2020, 《天文学杂志》, 160, 205 Nixon C., Bézard B., Cornet T., Coy B., dePater M. Es-Sayeh I., et al 2025, 《自然·天文学》, 9, 969–981 Palle E., Biazzo K., Bolmont E., et al 2025, 《实验天文学》, 59, 29 Palmer P., Jacob D., Chance K., Martin R., R.J.D.Spur et al 2001, 《地球物理研究杂志》, 106 Pepe F., et al., 2014, Astron. Nachr, 335, 10 Pepe F., et al., 2021, 《天文学与天体物理学》, 645, A96 Riançо-Silva R., Machado P., Martins Z., Lellouch E., Loison J.-C., Dobrije- vic M., Dias J., Ribeiro J., 2024, Planet. Space Sci., 240, p. 105836 Savitzky A., Golay M., 1964, 《分析化学》, 36, 8 Schmidt M. R., Krełowski J., Galazutdinov G. A., Zhao D., Haddad M. A., Ubachs W., Linnartz H., 2014, 皇家天文学会月刊, 441, 1134–1146 Swings P., McKellar A., Rao K. N., 1953, 皇家天文学会月刊, 113, 571–581 Sánchez-Lavega A., 2011, 博卡拉顿，佛罗里达州，美国，CRC出版社 Tanabashi A., Hirao T., Amano T., Bernath P., 2005, 《天体物理学杂志》, 624, 1116–1120 Taylor J., et al., 2023, 皇家天文学会月刊, 524, 817–834 Teanby N., Irwin P., de Kok R., Jolly A., Bézard B., Nixon C., Calcutt S., 2009, 《伊卡洛斯》, 202, 2 Tennyson J., Bernath P., Campargue A., Csaszar A., Daumont L., et al 2014, Pure Applied Chemistry, 86, 1931 Tinetti G., Drossart P., Eccleston P., et al 2018, 《实验天文学》, 46, 135–209 Trainer M., Pavlov A., DeWitt H., Jimenez J., McKay C., Toon O., Tolbert M., 2006年, 《美国国家科学院院刊》, 103, 48 Villanueva G., Smith M., Protopapa S., Faggi S., Mandell A., 2018年, J.Quant. Spectrosc. Radiat. Transf., 217, 86–104 Vuitton V., Yelle R. V., McEwan M., 2007年, 《伊卡洛斯》, 191, 722 Vuitton V., Yelle R. V., Cui J., 2008年, 《地球物理研究杂志：行星》, 113, E5 Waldmann I. P., Tinetti G., Rocchetto M., Barton E. J., Yurchenko S. N., Tennyson J., 2015年, 《天体物理学杂志》, 802, 107 Willacy K., Chen S., Adams D., Y.L.Yung 2022年, 《天体物理学杂志》, 933,230 Xue Q., Bean J., Zhang M., Welbanks L., Lunine J., August P., 2024, 《天体物理学杂志快报》, 963, L5 Yung Y. L., Allen M., Pinto J., 1984年, 《天体物理学杂志增刊系列》, 55, 465

附录A：光谱数据处理

此处详细介绍了对甚大望远镜-ESPRESSO观测所获得的光谱数据进行数据处理的步骤。如第 2 节所述，我们获得了土卫六的7次光谱曝光，每次持续20分钟，总观测时间为2小时20分钟。在此期间，土卫六的观测气团质量介于1.15和1.80之间，导致夜间观测到的光谱出现不同程度的地球大气消光。图 A1 展示了7次曝光所产生的不同光谱之间的比较，突出显示了在不同气团质量下观测土卫六时各次曝光中连续谱的差异。

为进行校正，将每次光谱曝光除以气团质量最低时的光谱曝光（第3次曝光），并用三次多项式对整个光谱范围内的比值进行拟合，如图 A2 所示。该图放大显示了与图 A1相同的短波长范围。随后，将每次光谱曝光除以其相对于气团质量最低时曝光所得比值的多项式拟合，从而校正不同光谱曝光之间的连续谱差异，使各次光谱曝光具有相同的连续谱，如图 A3。

在具有相似的光谱连续谱之后，这些曝光被平均为土卫六的单一光谱，信噪比有所提高，如图A4中黑色曲线所示。在图A5中，我们展示了使用Savitzky-Golay滤波器（Savitzky & Golay 1964年）获取光谱连续谱的过程——为清晰起见，跨越更大的光谱区域——该连续谱用于对土卫六的平均光谱进行归一化。最后，在图A6的联合图中，我们在上方展示了土卫六最终经平均并归一化的光谱，位于搜寻C_3的感兴趣区域（4040埃至4060埃）。在图A6 的底部，我们绘制了本图上方所示平均归一化光谱的光谱通量误差。我们观察到，尽管存在一些反映光谱通量调制的变化（表明不确定度主要由光子误差主导），但在本研究所用的光谱区段上，光谱误差随波长的变化并不显著。

附录 B：土卫六可见视圆面上气团质量积分的推导

此处我们推导双向气团质量在土卫六整个观测圆盘上的积分表达式及其数值。

我们将土卫六视为一个完全受光照的球体，并将其观测为一个分辨开的圆盘。考虑土卫六的球坐标。我们将极角 θ 定义为土卫六观测球面上某一位置与土卫六地心点之间的夹角。土卫六观测球面上的一个表面元表示为 dS in

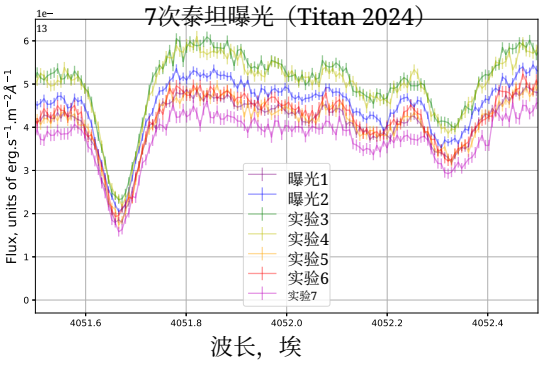

图 A1. 使用 VLT-ESPRESSO 获得的土卫六光谱曝光，共 7 次，每次 20 分钟（为清晰起见，放大显示一个狭窄的光谱区域）。

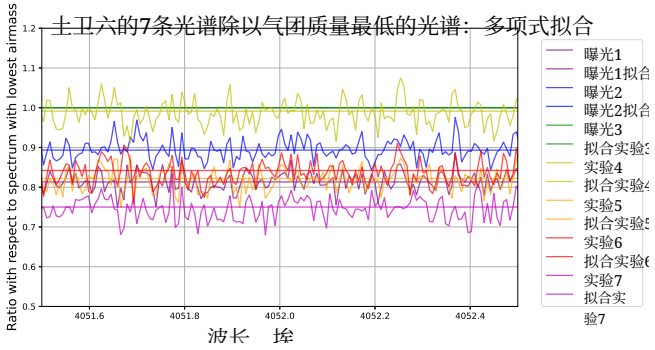

图 A2. 使用 VLT-ESPRESSO 获得的土卫六光谱曝光，共 7 次，均除以气团质量最低时观测到的光谱曝光（第 3 次曝光），以及各自的三次多项式拟合（为清晰起见，放大显示与图 A1 相同的光谱区域）。

方程 B1，而由于球形几何的影响，球体投影到观测圆盘上的视表面元表示为 $dS_{APP} =$ 余弦$(\theta)dS$，或者表示为方程B2。

$$dS = R^2 \sin(\theta) d\theta d\phi \tag{B1}$$

$$dS_{APP} = R^2 \sin(\theta) \cos(\theta) d\theta d\phi \tag{B2}$$

将土卫六视为朗伯反射体，而非理想反射体时，我们将在 dS_{APP} 上进一步加入一个 $\cos(\theta)$ 项，以计入朗伯散射，如下所示：

$$dS_{APP} = R^2 \sin(\theta) \cos^2(\theta) d\theta d\phi \tag{B3}$$

我们将“气团质量”定义为，$A(\theta)$：相对于土卫六地心点处的最小大气路径长度，土卫六观测圆盘上某一位置沿朝向地球的直线所经过的大气路径长度的放大因子，其中 $A(\theta = 0) = 1$。该气团质量取决于土卫六球面上的极角θ，根据平行平面大气近似，由式B4 给出。

$$A(\theta) = \frac{1}{\cos(\theta)} \tag{B4}$$

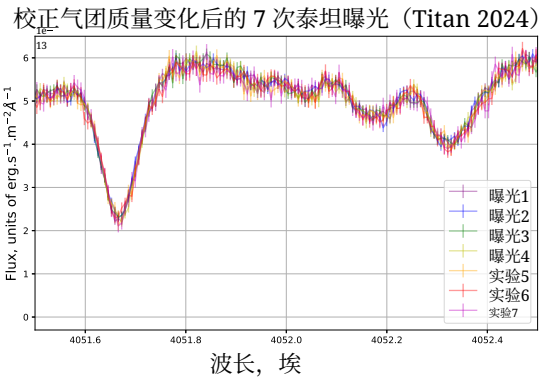

图 A3. VLT-ESPRESSO获取的7次土卫六光谱曝光，经不同气团质量消光校正（为清晰起见，放大显示与图 A1相同的光谱区域）。

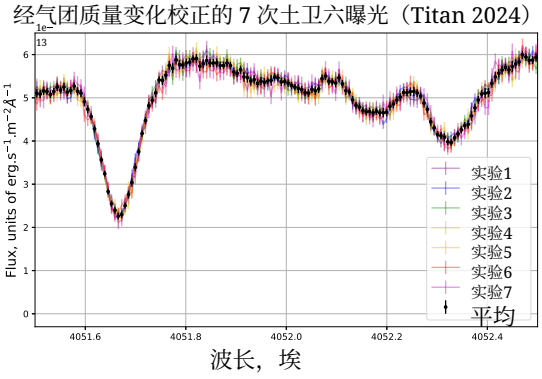

图 A4. VLT-ESPRESSO获取的7次土卫六光谱曝光，经不同气团质量消光校正，并显示光谱平均值及相应误差棒（为清晰起见，放大显示与图 A1相同的光谱区域）。

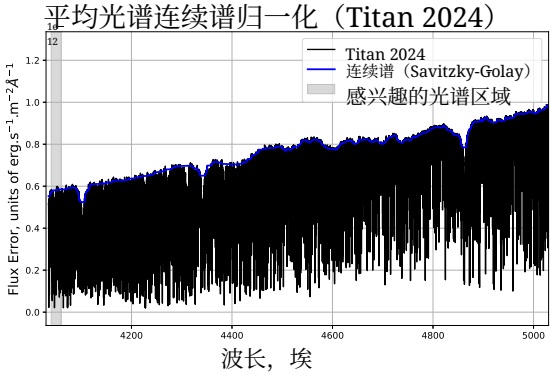

图 A5. 使用Savitzky-Golay滤波器从土卫六平均光谱中提取连续谱，以便对光谱进行归一化；为清晰起见，展示了更大的光谱区域。本研究的感兴趣光谱区域（4040埃至4060埃）以灰色显示。

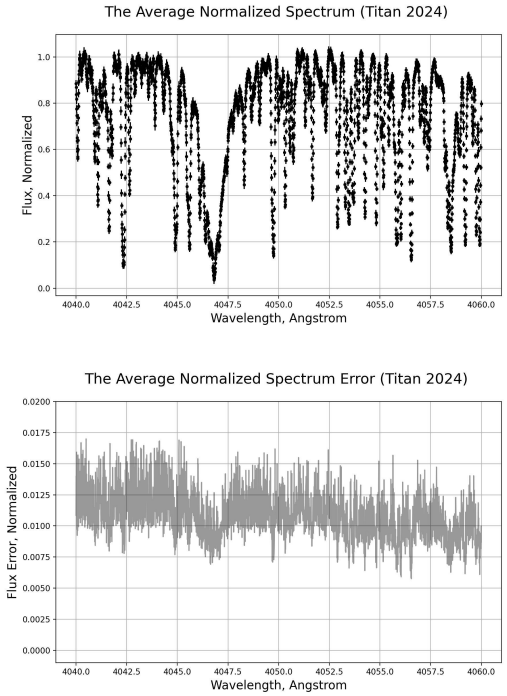

图 A6。 上图：用于搜索 C_3 （4040埃至4060 埃）的感兴趣光谱区域内土卫六的平均归一化光谱。下图：在用于搜索 C_3的感兴趣光谱区域内，平均归一化光谱的光谱通量误差随波长的变化。

我们希望计算我们观测到的土卫六视圆面上的积分大气质量 $< A >$。这需要对整个土卫六观测视圆面上的气团质量 $A(\theta)$ 进行积分。鉴于我们观测时土卫六位于其视圆面中心，我们将对圆盘中心的极角 $\theta = 0$ 积分，直到观测到的最大极角 $\theta = \alpha$。该角度由甚大望远镜-ESPRESSO 的光纤相对于观测当晚土卫六视大小的比例确定（分别为 0.5” 和 0.826”），即

$$\alpha = \arcsin\left(\frac{0.5''}{0.826''}\right) \approx 37.25 \tag{B5}$$

因此，将 $A(\theta)$ 在土卫六表观观测圆盘上的积分（以表观表面积积分元素归一化）表示为

$$< A >= \frac{\int\int A(\theta) dS_{APP}}{\int\int dS_{APP}} = \frac{\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\alpha} A(\theta) R^2 \cos^2(\theta) \sin(\theta) d\theta}{\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\alpha} R^2 \cos^2(\theta) \sin(\theta) d\theta} \tag{B6}$$

将 $A(\theta)$ 替换为公式 B4，可得

$$< A >= \frac{\int_0^{\alpha} \cos(\theta) \sin(\theta) d\theta}{\int_0^{\alpha} \cos^2(\theta) \sin(\theta) d\theta} = \frac{3}{2} \cdot \frac{1 - \cos^2(\alpha)}{1 - \cos^3(\alpha)} \tag{B7}$$

对于土卫六，我们必须考虑双向大气质量，因为辐射会与 C_3 吸收气体柱相互作用两次：到达土卫六时一路向下，直至土卫六的光学半径；以及在向上反向散射后，离开土卫六大气层时，会经过距土卫六光学半径约 300km 的高度处（对于 400nm 光子）。因此，土卫六观测圆盘上的积分双向大气质量 $\tilde{A}$ 可由公式 B8 给出。

$$\tilde{A} = 3 \cdot \frac{1 - \cos^2(\alpha)}{1 - \cos^3(\alpha)} \tag{B8}$$

如果我们观测到了土卫六的整个视圆面， $\alpha = \pi/2$，则会得到积分双向大气质量 3。然而，VLT-ESPRESSO 光纤对土卫六视圆面的不完整覆盖，阻止了土卫六边缘对气团质量产生更强的贡献。对于 α 由公式 B5给出，在此次观测中，土卫六的积分双向大气质量为 $\tilde{A} \simeq 2$。2155。

为评估对于土卫六这样大气延展范围很大的天体，平行平面大气近似是否有效，我们检查在球形大气中，C α'吸收峰值所在高度处的最大观测极角 $_3$（预计出现在海拔500km以下，Dobrijevic 等人(2016年) Rianço-Silva等人(2024)），与平行平面 α 近似下光学半径高度（300km）处得到的最大观测极角相差多少。修正后的最大观测极角 α' 由公式 B9 得出：

$$\alpha' = \arccos\left[\sqrt{1 - \left(\frac{R}{R+H}\sin(\alpha)\right)^2}\right] \tag{B9}$$

其中 R 为土卫六的光学半径（等于土卫六固体本体的半径 + 300 km，位于 λ = 400nm处（Lorenz 等（1999））），而 H 为感兴趣层相对于 R 的高度（即 C_3 吸收最大值的预期高度为500 km，因此 H = 200 km 高于土卫六的光学半径），而 α 为光学半径处的最大观测极角，由公式 B 5 α' 给出。 = 34.36 利用此值，我们得出 。o。将这个新角度代入积分气团质量公式（公式 B8），得到 $\tilde{A}'$ = 2.1845；与平行平面近似得到的 $\tilde{A}$ = 2.2155 积分大气质量相比，两者偏差小于 1.5%。

球形几何对大气的影响还有另一个例子：平行平面近似未能考虑在内的一个效应，是给定天顶角下气团质量的正确表达式。平行平面大气近似用方程B4描述气团质量，但当 $\theta = 90$ 时，该表达式会发散。针对这一效应，一种常用的球形修正见（Kasten & Young 1989）。采用他们的公式，我们对表观行星视圆面上的气团质量进行了数值积分，积分至最大角度 α。我们注意到，当最大积分角（观测到的最大极角）低于 40o 时，平行平面公式与（Kasten & Young 1989）中的球形几何公式相差不超过 0.1%。据此，我们得出结论：对于这次观测而言，当探测范围仅限于土卫六表观视圆面的中心区域时，平行平面近似所给出的积分大气质量相对于球形几何下“真实”值的最大偏差小于 1.5%，因此是有效的近似。

附录 C：光谱残差

这里展示了两个光谱模型拟合所得到的残差图，其中一个模型不含 C_3，另一个模型对应于对数据进行 MCMC 最佳拟合的结果，并将其与土卫六的 VLT-ESPRESSO数据进行比较。这是与图5 的直接比较，图中将光谱模型与观测光谱进行了对比。在这些残差中，我们用观测光谱减去模型，以评估二者的差异

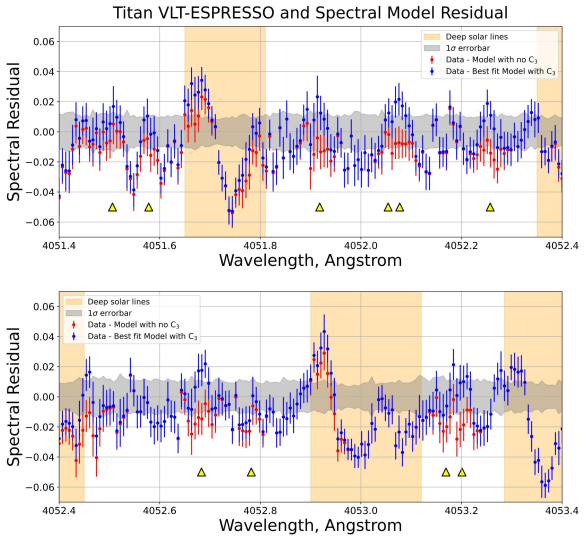

图 C1。 相对于土卫六的 VLT- ESPRESSO 光谱，两种不同光谱模型的残差图。该图与图 5直接进行比较，其中红色展示了从土卫六观测光谱中减去不含 C_3的光谱模型后得到的残差，蓝色展示了从土卫六观测光谱中减去 MCMC-最佳拟合模型（含 C_3）后得到的残差。灰色阴影区域对应于残差小于土卫六观测光谱 $=0$ 误差棒的区域 1σ——即模型与观测结果在其不确定度范围内一致的区域。橙色阴影区域对应于由较深太阳吸收线主导的光谱区域（> 30% 的相对深度）。黄色标记显示了根据（Fan 等（2024））确定的 C_3 谱线的中心波长。

对于不含 C_3 的情况，相对于需要存在 C 的 MCMC反演最佳拟合模型，其残差$_3$ 如第4.3节所述。灰色阴影区域对应于残差小于观测光谱不确定性的范围，这意味着在这些波长处模型与观测结果一致。

正如预期，我们观察到，两条残差存在差异的光谱区域与 C_3 模型化的谱线相一致。有趣的是，在这些区域中，MCMC最佳拟合模型（含 C_3）的残差总体上更接近或处于对应观测结果的阴影区域内——也就是说，如上文 χ^2 分析和 MCMC拟合所示，包含 C_3 的光谱模型比不含 C_3的光谱模型能更好地拟合土卫六的观测光谱。

附录 D：C_3 线表与谱线探测

此处展示表 D1，其中包含用于模拟 C_3 吸收光谱的线表$_3$ 。该表还包括探测到的谱线波长、相对于太阳光谱的谱线深度，以及探测显著性（即谱线深度与谱线中心处甚大望远镜-ESPRESSO 误差棒之比）。

表 D1：基于 Fan 等人的 C_3 $\tilde{A}-\tilde{X}$ 000-000 波段线表，依据 Fan 等人 (2024)，展示每个已识别的跃迁（P(J)、Q(J)、R(J)）、原始波长 λ_j（单位：埃）、振子强度 f_j，以及观测到的匹配特征的波长、观测相对谱线深度和探测显著性。“O.D.S.L.”表示与深层太阳谱线重叠（深度 >10%），因而无法识别。** 表示 C_3 谱线可能与附近的跃迁合并。最后一列显示了附录 E中改编后的线表测试所使用的波长位移。

转动 Line	原始 λ_j (埃)	f_j (x10^3)	观测 λ_j (埃)	观测谱线深度 (%)	Line 显著性	改编后的谱线列表 位移 $\Delta\lambda_j$ (埃)
R(20)	4049.808	4.29	O.D.S.L.	-	-	-
R(18)	4049.861	4.32	O.D.S.L.	-	-	-
R(16)	4049.962	4.36	O.D.S.L.	-	-	-
R(14)	4050.075	3.49	O.D.S.L.	-	-	-
R(12)	4050.191	3.58	O.D.S.L.	-	-	-
R(10)	4050.327	3.73	O.D.S.L.	-	-	-
R(6)*	4050.401	0.58	O.D.S.L.	-	-	-
R(8)	4050.484	3.95	O.D.S.L.	-	-	-
R(4)*	4050.567	0.49	O.D.S.L.	-	-	-
R(6)	4050.661	4.21	O.D.S.L.	-	-	-
Q(2)*	4050.746	0.45	O.D.S.L.	-	-	-
R(4)	4050.857	4.44	O.D.S.L.	-	-	-
R(2)	4051.055	3.78	O.D.S.L.	-	-	-
R(2)*	4051.190	2.08	O.D.S.L.	-	-	-
R(0)	4051.255	4.22	O.D.S.L.	-	-	-
R(0)*	4051.396	10.58	O.D.S.L.	-	-	-
Q(2)	4051.448	6.87	O.D.S.L.	-	-	-
Q(4)	4051.506	7.70	4051.54	4.3	3.2 σ	+ 0.04
Q(6)	4051.578	7.89	4051.60	3.1	2.6 σ	+0.03
Q(8)	4051.670	7.95	O.D.S.L.	-	-	-
Q(10)	4051.782	7.96	O.D.S.L.	-	-	-
P(2)	4051.820	1.06	O.D.S.L.	-	-	-
Q(12)	4051.918	7.97	4051.90	2.7	2.1 σ	-0.01
P(4)	4052.054	1.57	4052.02	2.4	2.2 σ	-0.03
Q(14)	4052.077	7.98	4052.11**	2.0	2.4 σ	+0.04
Q(6)*	4052.122	0.28	无匹配**	-	-	-
P(4)*	4052.180	0.86	无匹配**	-	-	-
Q(16)	4052.257	7.98	4052.27	1.9	1.6 σ	+0.01
P(6)	4052.412	2.56	O.D.S.L.	-	-	-
Q(18)	4052.459	7.99	O.D.S.L.	-	-	-
P(8)*	4052.521	0.39	O.D.S.L.	-	-	-
Q(20)	4052.683	7.99	4052.67	3.2	2.2 σ	-0.01
P(8)	4052.782	2.82	4052.77	2.3	2.4 σ	-
Q(22)	4052.938	7.99	O.D.S.L.	-	-	-
P(10)	4053.169	2.87	4053.15	2.3	1.8 σ	-
Q(24)	4053.201	7.99	4053.19	3.5	2.7 σ	-
Q(26)	4053.479	7.99	O.D.S.L.	-	-	-
P(12)	4053.577	2.87	O.D.S.L.	-	-	-
Q(28)	4053.783	8.00	O.D.S.L.	-	-	-
P(14)	4054.005	2.86	O.D.S.L.	-	-	-
Q(30)	4054.108	8.00	O.D.S.L.	-	-	-
P(16)	4054.447	3.64	O.D.S.L.	-	-	-
P(18)	4054.902	3.68	O.D.S.L.	-	-	-
P(20)	4055.369	3.71	O.D.S.L.	-	-	-

附录 E：改编后的 C_3 谱线列表与反演

MCMC反演提供了一种有趣的方法，可比较针对同一数据集拟合的不同模型（Waldmann 等（2015））。注意到土卫六的VLT-ESPRESSO光谱中一些已识别的光谱特征与预期的 C_3 谱线位置略有不符后，我们提出，这些差异可能源于（Fan 等（2024））线表的经验性质；该线表是在比这些 VLT-ESPRESSO观测更低的光谱分辨率下获得的。因此，在表 D1 中，我们提出一些小幅位移（小于（Fan 等（2024））所给出的典型谱线波长不确定度0.05埃），预计这些位移可以改善整体数据拟合效果。我们通过应用第 4.3 节所述的相同 MCMC反演测试对此进行了检验，比较使用原始（Fan 等（2024））线表与改编后的谱线列表得到的后验分布，如图 E1 所示；最佳拟合图见图E2，残差图见图 E3。

正如预期，改编后的线表角图和直方图显示，其温度约束（蓝色，分布在允许的先验范围内更接近高斯曲线）优于原始线表（黑色）。根据边缘化直方图，使用改编后的线表检索得到的 C_3 丰度略高于原始线表；原始线表对应的丰度为 $N(C_3)$，$N(C_3) = (1.61 \pm 0.09) \times 10^{13}\,\mathrm{cm}^{-2}$ at 1σ，$N(C_3) = \left(1.61^{+0.29}_{-0.28}\right) \times 10^{13}\mathrm{cm}^{-2}$ at 3σ，以及 $N(C_3) = \left(1.61^{+0.34}_{-0.36}\right) \times 10^{13}\,\mathrm{cm}^{-2}$ at 5σ——仍处于使用原始线表得到的预期误差棒范围内。尽管如此，检索得到的温度值有所不同，这是因为这一替代线表带来了更强的约束：$T = (390^{+58}_{-50})K$ at 1σ，$T =$ K 3σ $T =$ K 5σ (390^{+110}_{-126}) at，以及 (390^{+110}_{-157}) at。一种可能的解释是，使用改编后的线表使光谱拟合得到改进，因此检索结果不再那么偏向较高温度；较高温度往往会拓宽模型光谱，使其更接近数据中略有位移的光谱特征。

通过结合使用原始（$_3$Fan 等（2024）线表，对土卫六大气层中的 C χ^2 方法（第 4.2节）进行 MCMC反演，确认了 C 的探测后，所示的反演结果对比表明，在超高分辨率下对 C的405纳米波段进行建模时，改编后的线表可能确实更合适。$_3$

本文由作者准备的 TEX/LATEX 文件排版而成。

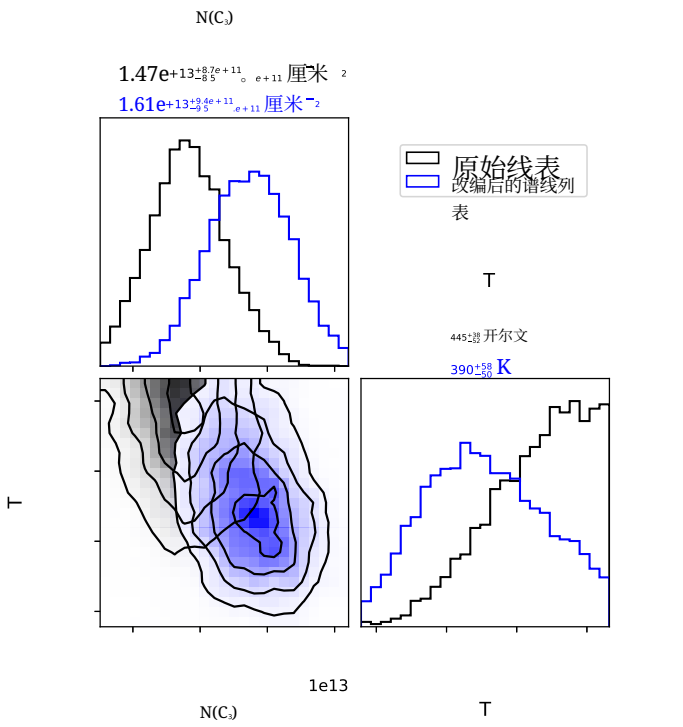

图 E1。土卫六的 VLT-ESPRESSO 光谱进行 MCMC拟合得到的后验图——分别采用原始（Fan 等（2024））C_3（黑色）和我们建议的改编后的谱线列表；后者改善了光谱模型与观测光谱特征的匹配（蓝色）。对 C_3，（N）的柱密度以及温度（T）进行拟合。提取的数值以 1σ 误差棒表示。二维直方图上的等高线图对应于二维高斯分布的（0.5、1、1.5、2）σ置信区域。

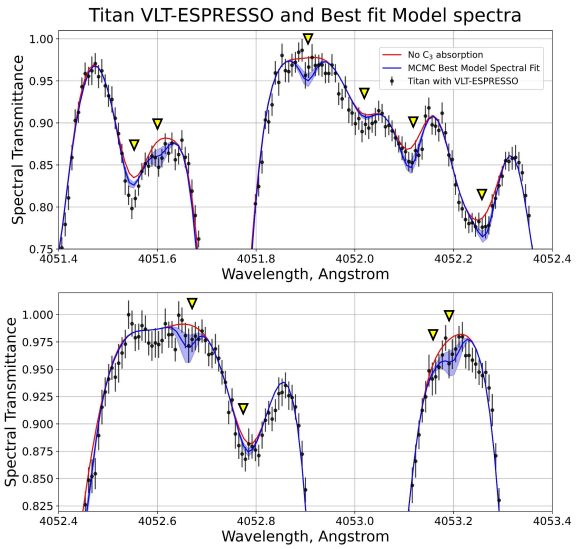

图 E2. 土卫六的 VLT-ESPRESSO 归一化光谱（黑色数据点），显示了感兴趣的光谱区域内 $\tilde{A}^1\Pi_u - \tilde{X}^1\Sigma_g^+$ 000-000 带的 C_3，与后向散射太阳光谱（作为不含 C_3 吸收的土卫六光谱的替代指标，以红色表示）以及使用改编后的 C_3 线表进行 MCMC 似然拟合得到的最佳拟合模型进行比较。该线表见 D1，并与反演得到的 $N(C_3)$ 和 T 值相关，以蓝色表示。蓝色阴影区域表示基于反演得到的 $N(C_3)$ 和 T 值及其 3σ 误差棒确定的最佳拟合模型不确定性。黄色三角形标出已识别的光谱特征，我们将其与 C_3 吸收特征相关联，详见表 D1。

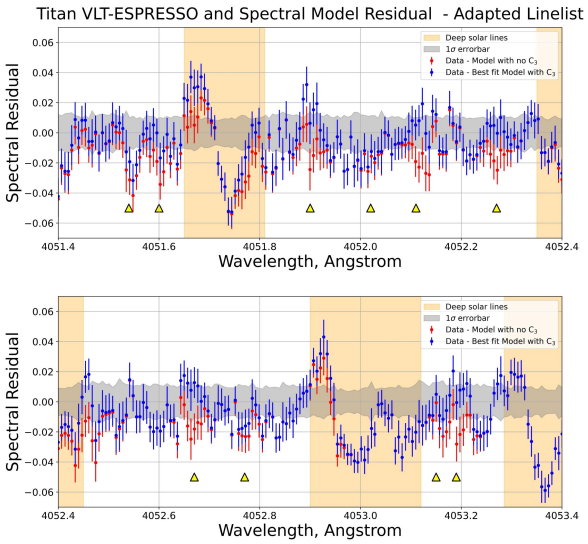

图 E3. 相对于土卫六 VLT-ESPRESSO 光谱，两种不同光谱模型的残差图。此图直接对应图 C1，但使用的是改编后的 C_3 线表，而非（Fan 等（2024））提供的原始线表。红色显示从土卫六观测光谱中减去不含 C_3 光谱模型后得到的残差；蓝色显示从土卫六观测光谱中减去 MCMC 最佳拟合模型（含 C_3）后得到的残差。灰色阴影区域对应于残差 $=0$ 小于土卫六观测光谱的 1σ 误差棒的区域，即模型与观测在其不确定度范围内一致的区域。橙色阴影区域对应于由较深太阳吸收线主导的光谱区域（相对深度的 $>30\%$）。黄色标记表示根据改编后的线表确定的 C_3 谱线的中心波长。