

## Capítulo 6

### Implicações astrofísicas

#### 6.1

#### Presença do CH<sub>4</sub> no Universo

No Sistema Solar, o metano é encontrado em quantidades relativamente consideráveis (até 5%) em: Júpiter, Saturno, Urano, Netuno, Plutão, uma das luas de Saturno, Titã, e uma das luas de Netuno, Tritão. Em 2004, o metano foi identificado em Marte através da detecção da banda 3009 cm<sup>-1</sup> (ν<sub>3</sub>) [73 e 74], o que gerou a inclusão da procura de sua origem entre as tarefas da sonda Curiosity (que chegou ao seu destino em novembro de 2011). A Tabela 6.1 resume a detecção do CH<sub>4</sub> no sistema solar em fase gasosa, líquida ou sólida.

Tabela 6.1. Metano no Sistema Solar

Planeta / Satélite	Quantidade	Estado / Local	Referência
Vênus	-	gás / atmosfera	[82]
Terra	-	gás / atmosfera	
Lua	-	gás escapando do solo	[81]
Marte	10 nmol/mol	gás escapando do solo	[73, 74]
Júpiter	0,3 %	gás / atmosfera	[84]
Saturno	0,45 %	gás / atmosfera	[84]
Titã	1,6 – 5 %	gás - aerossol-líquido	[85]
Encelado	1,7 %	gás / atmosfera	[86]
Urano	2,3 %	aerossol - gelo	[87]
Oberon	-	gás / atmosfera	[84]
Titânia	-	gás / atmosfera	[87]
Umbriel	-	gás / atmosfera	[87]
Netuno	1,5 %	gás / atmosfera	[84]
Triton	-	gelo	[88]
Plutão	-	gelo	[89]
Caronte	-	gelo	[90]

Os cometas também contêm CH<sub>4</sub>, identificado na fase gasosa em suas comas através da banda ν<sub>3</sub>. Por exemplo, em relação à água, o conteúdo de metano nos cometas Halley e Hyakutake é de ~ 0,8 %, enquanto no cometa Hale-Bopp é de 1,8 %

[75]. Na Tabela 6.2 estes valores são comparados com a abundância dos únicos hidrocarbonetos detectados em cometas até agora, o  $C_2H_2$  e  $C_2H_6$ .

Tabela 6.2. Abundância relativa de  $CH_4$ ,  $C_2H_2$  e  $C_2H_6$  em alguns cometas. Os valores são expressos em relação à quantidade de água:  $100 \times N(CH_4) / N(H_2O)$  [75].

Cometa	$CH_4$	$C_2H_2$	$C_2H_6$
Halley	< 0,8	0,3	0,4
Hyakutake	0,8	< 0,5	0,6
Hale-Bopp	1,5	< 0,3	0,6
Lee	0,8	0,27	0,67
LINEAR	0,14	0,12	0,11
Ikeya-Zhang	0,5	0,18	0,62

Tabela 6.3. Metano galáctico calculado com  $A_v(v_4) = 7,3 \times 10^{-18}$  cm/molec [78].

	$N(CH_4)$ [ $10^{17}$ molec/cm <sup>2</sup> ]	$100 \times N(CH_4)$ / $N(H_2O)$
W3 IRS 5	< 0,67	< 1,3
† AFGL 490	< 0,15	< 2,4
Orion BN	< 0,42	< 1,7
Mon R2 IRS 3	< 2,4	< 12,8
AFGL 989	0,46	1,9
AFGL 2136	0,58	1,1
Elias 29	< 0,5	< 1,5
Sgr A	0,3	2,4
GCS 4	< 0,5	< 17
GCS 3I	< 0,3	< 6,4
W33A	1,7	1,5
AFGL 7009S	4,3	3,9
RCrA IRS 1	0,6	2,6
AFGL 2591	< 0,33	< 2,7
S140 IRS 1	0,17	0,92
NGC 7538 IRS 1	0,33	1,5
NGC 7538 IRS 9	1,05	1,5

† AFGL 490 contem traços de  $C_2H_2$ .

Como exemplo da observação do  $CH_4$  no ISM, a Figura 6.1 e Tabela 6.3 mostram os valores do fluxo de radiação infravermelha do objeto W33 A na faixa de 4166 a  $400 \text{ cm}^{-1}$  ( $2,5 - 25 \text{ }\mu\text{m}$ ). Note-se que o  $CH_4$  é identificado através da banda  $1300 \text{ cm}^{-1}$  ( $7,7 \text{ }\mu\text{m}$ ) e a água pelas bandas  $1600$  e  $3200 \text{ cm}^{-1}$  [79].

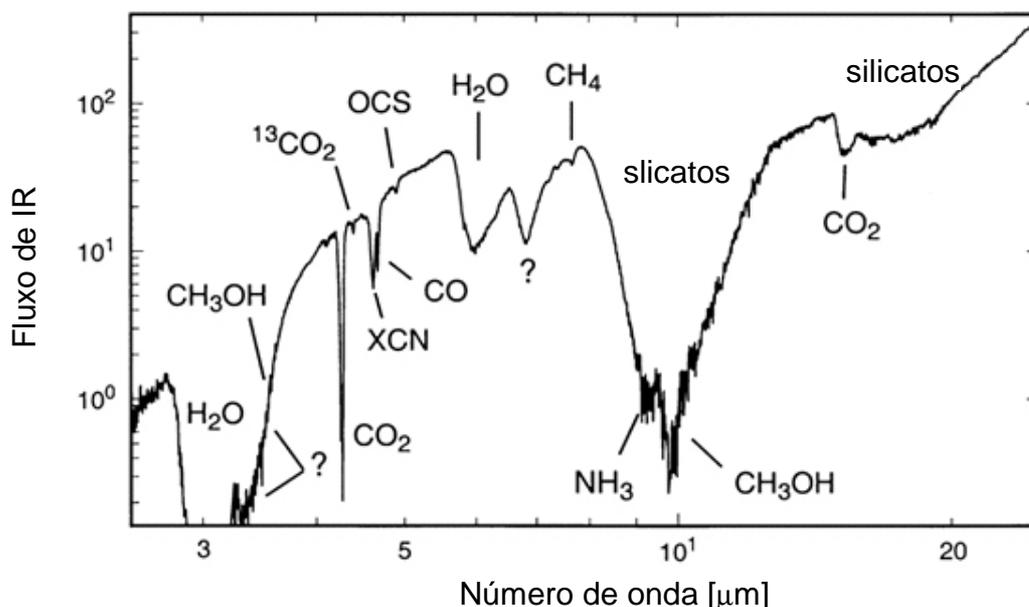


Figura 6.1. Fluxo da radiação infravermelha emitida pelo objeto W33 A na região de número de onda entre  $4166$  e  $400\text{ cm}^{-1}$  ( $2,5 - 25\ \mu\text{m}$ ) [79]. Os valores correspondem a absorções por nuvens situadas entre a fonte IR e o observador.

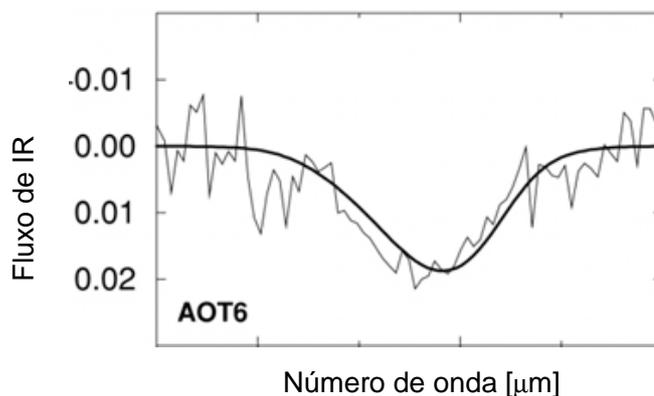


Figura 6.2. Banda  $\nu_4$  ( $1/7.7\ \mu\text{m} = 1300\text{ cm}^{-1}$ ) observada em Sgr A\* - AOT (*Astronomical Observing Template*) [80].

Na Figura 6.2 é mostrado segmento do espectro infravermelho proveniente da poeira no centro da galáxia, na direção de observação de Sgr A\* [80]. Note-se que a banda  $1300\text{ cm}^{-1}$  foi utilizada para calcular a densidade colunar, enquanto a banda  $3200\text{ cm}^{-1}$  dá a densidade colunar da água, a relação entre as quantidades de metano e água é  $\text{CH}_4:\text{H}_2\text{O} = 1:40$  a  $10\text{ K}$ .

Além disso, o telescópio de infravermelho SPITZER IRS observou metano sólido (até 8 % da água) em regiões próximas a estrelas jovens YSOs [81].

## 6.2

### Tempo de vida do gelo CH<sub>4</sub> no Sistema Solar e no ISM

Para determinar o tempo de vida médio da molécula CH<sub>4</sub> localizada em grãos de gelo ou em superfícies de gelos bombardeados por raios cósmicos, é necessário calcular primeiro a soma das taxas de destruição devidas a cada um dos íons constituintes dos raios cósmicos ou do vento solar [91]:

$$R = \sum_k R_k = \sum_k \int_0^\infty \int_0^{4\pi} \phi_k \sigma_{d,k}(E) d\Omega dE \quad 6.1$$

em que  $\phi_k$  é a densidade de fluxo dos constituintes  $k$ , correspondente a energias cinéticas entre  $E$  e  $E+dE$  e ao ângulo sólido  $\Omega$ ;  $\sigma_{d,k}(E)$  é a seção de choque de destruição do metano pela espécie  $k$  com energia  $E$ .

A integral em  $\Omega$  é relativamente simples, pois  $\sigma_{d,k}(E)$  não depende de  $\Omega$ . Raios cósmicos galácticos (GCR) podem ser considerados isotrópicos, de modo que também sem fluxo não depende de  $\Omega$ . Para pequenos grãos de gelos no ISM, os GCR os atravessam com pouca perda de energia e a integral em questão é  $\sim 4\pi$ ; para alvos muito espessos, a integral é  $2\pi$ . Para gelos bombardeados pelo vento solar (SW), numa região sem campo magnético, a integral deste ângulo sólido é:

$$\int_0^{4\pi} d\Omega = \pi (R_{Sol} / D_\Theta)^2 \quad 6.2$$

sendo  $R_{Sol}$  o raio do Sol e  $D_\Theta$  a distância média do Sol ao alvo.

Para integrar em  $E$ , é necessário conhecer as dependências da densidade de fluxo  $\phi_k$  e da seção de choque  $\sigma_{d,k}$  com a energia. No caso de ventos solares (SW), a distribuição em energia proposta por Mewaldt *et al.* [92] foi parametrizada por de Barros *et al.* [93] como:

$$\phi_{SW,k}(E) = A_1 e^{-\eta E} + \frac{A_2}{E^2} \quad 6.3$$

As constantes  $A_1$  e  $A_2$  dependem da espécie iônica  $k$  do vento solar (ver Tabela 9 em [93]). Com relação aos raios cósmicos no meio interestelar, a função empírica aqui considerada para  $\phi_k$  é a proposta por Shen *et al.* [94]:

$$\phi_{GCR,k}(E) = \frac{C_k E^{0,3}}{(E + E_0)^3} \quad 6.4$$

O parâmetro  $C_k$  é característico para cada espécie química [94].

Em princípio, a determinação de  $\sigma_{d,k}(E)$  é complexa: ela pode depender de diversos fatores como da temperatura e do estado cristalino do gelo (fase cristalina, amorfa, porosidade); da distribuição de espécies químicas no alvo e do estado de carga dos projéteis. Entretanto, para estimar a ordem de grandeza da vida média, necessitamos de aproximações razoáveis. A principal delas é considerar que a seção de choque de destruição  $\sigma_{d,k,M}(E)$  da espécie molecular  $M$  depende apenas do poder de freamento eletrônico  $S_{e,k,M}$  correspondente a cada espécie constituinte  $k$  dos raios cósmicos que atingem  $M$ . Apesar de ser uma aproximação drástica, ela se apóia nos resultados experimentais deste trabalho e nos disponíveis na literatura para alguns outros gelos [8, 66 e 93]. Empiricamente, tem-se verificado que para gelos puros formados pelas espécies moleculares  $\text{CH}_4$  (este trabalho), outros hidrocarbonetos [66],  $\text{CH}_3\text{OH}$  [43],  $\text{HCOOH}$  [95], e  $\text{CO}$  [8]:

$$\sigma_{d,k,M}(E) \approx a_M [S_{e,k,M}(E)]^{3/2} \quad 6.5$$

Os isótopos mais abundantes constituintes dos raios cósmicos são:  $^1\text{H}$ ,  $^2\text{H}$ ,  $^4\text{He}$ ,  $^{12}\text{C}$ ,  $^{14}\text{N}$ ,  $^{16}\text{O}$ ,  $^{20}\text{Ne}$ ,  $^{24}\text{Mg}$ ,  $^{28}\text{Si}$ ,  $^{32}\text{S}$ ,  $^{40}\text{Ar}$ ,  $^{40}\text{Ca}$ ,  $^{56}\text{Fe}$  e  $^{58}\text{Ni}$ . (J. Beringer *et al.* [3]). Uma simplificação adicional feita no presente cálculo de meia-vida foi reduzir o número de constituintes para  $k = 5$ , considerando apenas os projéteis iônicos mais representativos:  $^1\text{H}$ ,  $^4\text{He}$ ,  $^{12}\text{C}$ ,  $^{16}\text{O}$  e  $^{56}\text{Fe}$ .

Na Fig. 6.3a é mostrada, para cada um desses cinco projéteis, a dependência do seu poder de freamento com a energia cinética no gelo  $\text{CH}_4$ . Usando a expressão 6.5 pode-se calcular  $\sigma_{d,k,M}(E)$  para eles (Fig. 6.3b). As distribuições de fluxos  $\phi_{\text{SW},k}$  e  $\phi_{\text{GCR},k}$  são mostradas nas Figs. 6.3c e 6.3d respectivamente. Com estas informações, calculou-se o produto  $\phi_k(E) \sigma_k(E)$  para os raios cósmicos SW e os GCR, como apresentado nas Figs. 6.3e e 6.3f. Nota-se que a taxa de destruição é dominada pelo H em baixas energias, enquanto que a do Fe domina em altas energias. Por esta razão, no sistema solar, os íons H provenientes do Sol são os responsáveis pela taxa de destruição do metano. Ao contrário, no ISM, os íons Fe são os principais agentes da astroquímica.

Conhecida a função  $\phi_k(E)$   $\sigma_k(E)$ , sua integral em E pode ser efetuada para o cálculo da taxa de destruição parcial  $R_k$ . A vida média parcial  $\bar{\tau}_k$  da molécula alvo pelo constituinte k é dada pelo inverso de  $R_k$ . A meia-vida parcial  $\tau_{1/2,k}$  é dada por:

$$\tau_{1/2,k} = \ln 2 \bar{\tau}_k = \frac{\ln 2}{R_k} \tag{6.5}$$

A vida média total  $\tau = 1/\Sigma R_k$  é determinada a partir das eqs. 6.1 e 6.5:

$$\frac{1}{\tau} = \sum_k \frac{1}{\tau_k} \tag{6.6}$$

As meias-vidas no IMS são constantes, mas no sistema solar dependem da distância ao Sol como expresso na eq. 6.2. Os resultados de  $\tau_{1/2}$  para o CH<sub>4</sub> são resumidos na Fig. 6.4. Como o fluxo do vento solar decresce com  $(D_\odot)^2$ , a meia-vida aumenta com a mesma função, isto é:

$$\tau_{1/2} = \tau_{1/2}^T (D_\odot / D_T)^2 \tag{6.7}$$

onde  $\tau^T$  simboliza a vida média na órbita da Terra ( 1 AU = 1.5×10<sup>8</sup> Km) que é estimada em ~ 2×10<sup>10</sup> s (~ 600 anos). Ao se aproximar dos limites da heliosfera, a heliopausa, a energia dos ventos solares diminui consideravelmente passando aos GCR o domínio da destruição molecular.

Tabela 6.4. Constantes das funções empíricas do SW e do GCR

Íon	SW				GCR		Meia-vida parcial		
	SW	baixa energia	alta energia						
	abundância	A <sub>1</sub>	η	A <sub>1</sub>	C <sub>k</sub>	C <sub>0</sub>	τ <sub>1/2,k</sub> <sup>†</sup> (×10 <sup>10</sup> s)	τ <sub>1/2,k</sub> (×10 <sup>16</sup> s)	
H	3×10 <sup>8</sup>	2×10 <sup>13</sup>	2,6×10 <sup>3</sup>	4,6	94200	400	2,3	19	
He	3×10 <sup>7</sup>	2×10 <sup>12</sup>	2,6×10 <sup>3</sup>	4,6	34000	400	14	17,1	
C	1×10 <sup>5</sup>	1×10 <sup>10</sup>	2,4×10 <sup>3</sup>	5×10 <sup>-2</sup>	247	400	425	41	
O	2×10 <sup>5</sup>	2×10 <sup>10</sup>	2,4×10 <sup>3</sup>	1×10 <sup>-1</sup>	328	400	167	14	
Fe	9,5×10 <sup>3</sup>	5×10 <sup>8</sup>	2,6×10 <sup>3</sup>	2×10 <sup>-2</sup>	44	400	3883	4,5	
Meia-vida total (s):								2	2

As últimas duas colunas à direita mostram as meias-vidas parciais calculadas para o sistema solar e para o ISM [43].  $\tau_{1/2,k}^\dagger$  são tempos calculados para a órbita terrestre.

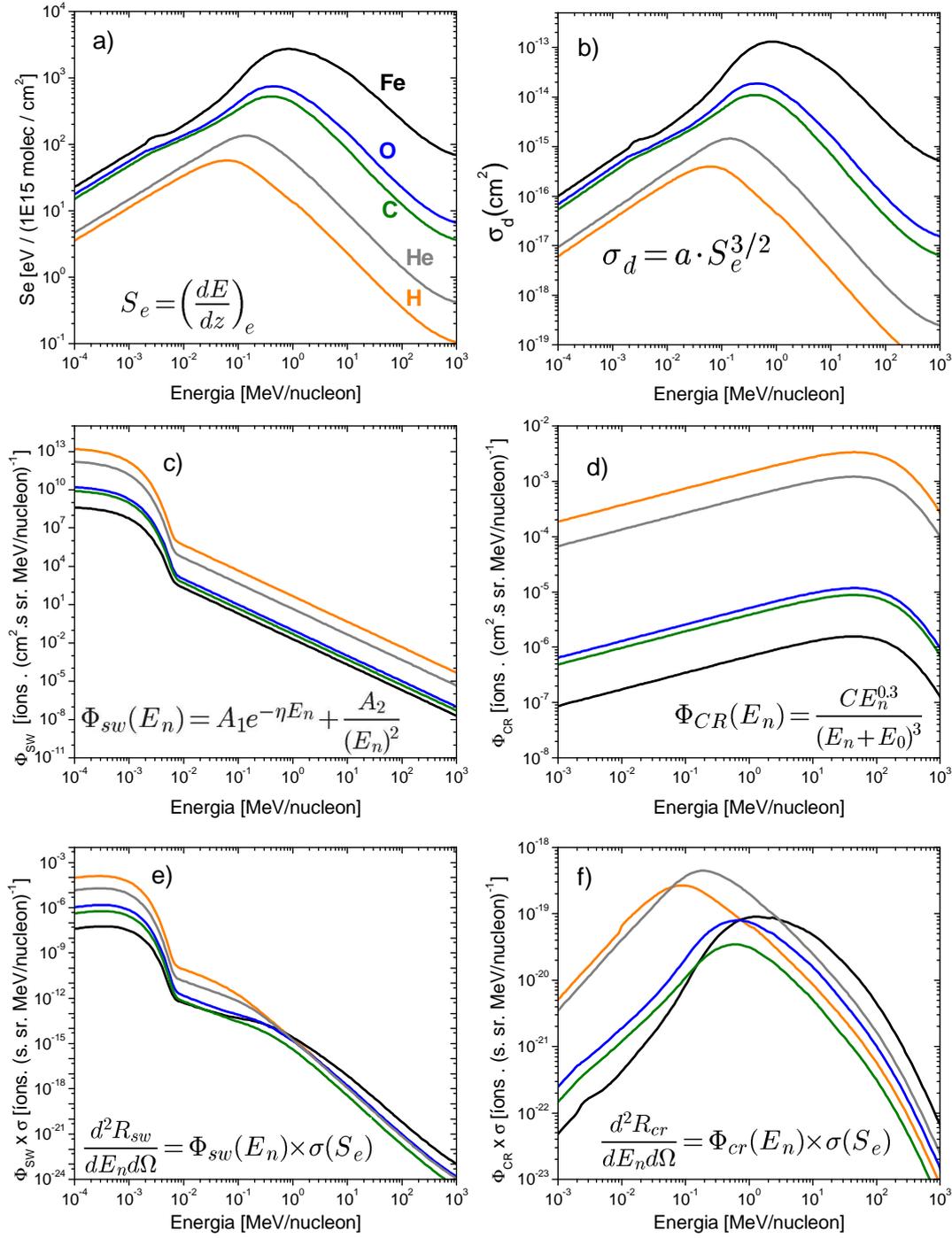


Figura 6.3: Dependência das funções abaixo com a energia cinética de raios cósmicos: a) Poder de freamento eletrônico dos íons H, He, C, O e Fe; b) seção de choque obtida pela relação  $\sigma_d = a \cdot S_e^{3/2}$ ; c) fluxo do vento solar; d) fluxo dos raios cósmicos galácticos (GCR); e,f) produto  $\Phi_k \sigma_{d,k}$  para o vento solar (e) e para os GCR (f).

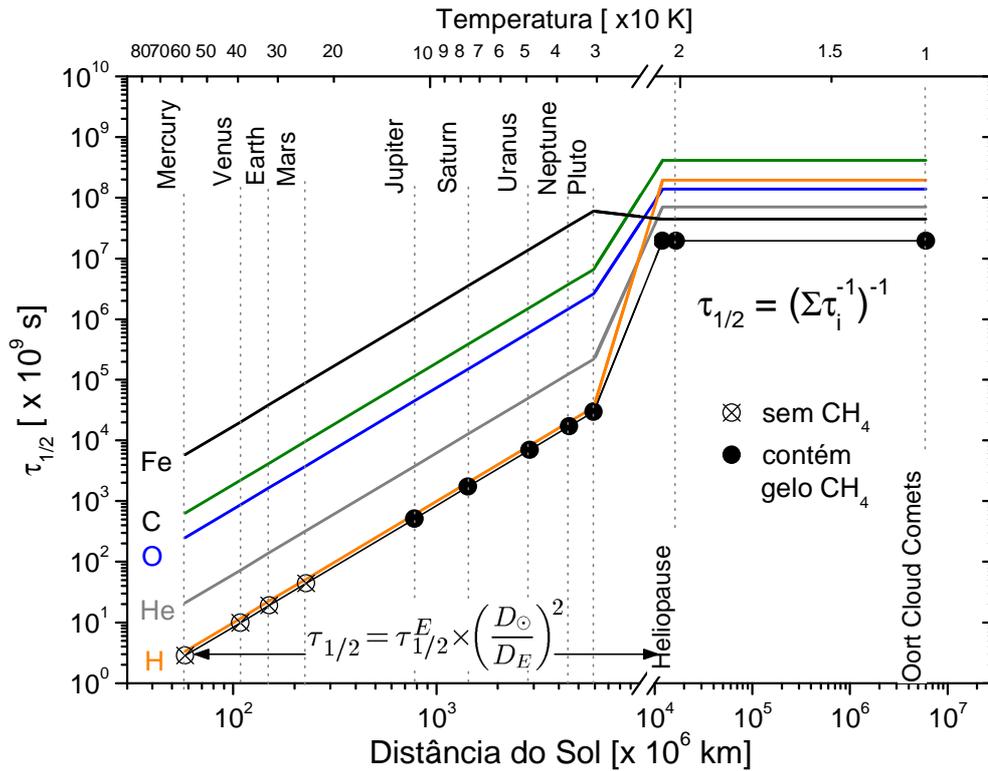


Figure 6.4: Previsão da meia-vida da molécula  $\text{CH}_4$  em gelo puro bombardeado por raios cósmicos. A distância do sol ao gelo é mostrada como abscissa inferior. A temperatura média estimada para o gelo é apresentada como abscissa superior que foram calculadas usando a expressão de Stefan Boltzmann:  $T_m(\text{K}) \sim 279 (D_T/D_\odot)^2$ .

As previsões da Figura 6.3b mostram que, para energias entre  $10^{-4}$  e  $10^{-2}$  MeV/nucleon quando o fluxo de raios cósmicos é máximo, a seção de choque de destruição do  $\text{H}^+$  é aproximadamente 10 vezes menor do que as dos íons C e O. Considerando que o fluxo dos íons H é  $10^3$  vezes maior do que os dos íons C e O,  $R_H$  é cerca de  $10^2$  vezes maior do que  $R_C$  ou  $R_O$ , o que gera os valores das meias-vidas mostrados na Figura 6.4. Já no meio interestelar, a taxa de destruição dos gelos é governada pelos íons pesados. Resultados da Fig. 6.4 mostram que a ação dos íons leves H e He é próxima da dos de C e O. Estes cálculos foram feitos utilizando a relação 6.5. Se o expoente de Se fosse 1, a taxa de destruição dos íons leves aumentaria. Para um expoente 2, os raios cósmicos de íons pesados dominariam totalmente a destruição molecular [95].

### 6.3

#### Penetração dos CR em gelos puros de CH<sub>4</sub>

Quando os raios cósmicos atravessam um meio material, transferem energia aos átomos do meio e sua energia cinética decresce gradualmente. Se a espessura do alvo for suficientemente grande, o projétil transfere toda sua energia cinética  $E$  e implanta-se nele. A profundidade máxima da implantação depende, além da energia do projétil, da densidade volumétrica  $\delta_v$  do material, dos números atômicos do projétil e dos átomos do alvo. A distância média  $\bar{z}$  percorrida pelo projétil é determinada a partir do poder de freamento  $S = dE/ds$ :

$$\bar{z}(E) = \int_0^{\bar{R}} ds = \int_0^E \frac{dE}{S} \tag{6.8}$$

Os cálculos de alcance de implantação foram feitos através do programa SRIM [12].

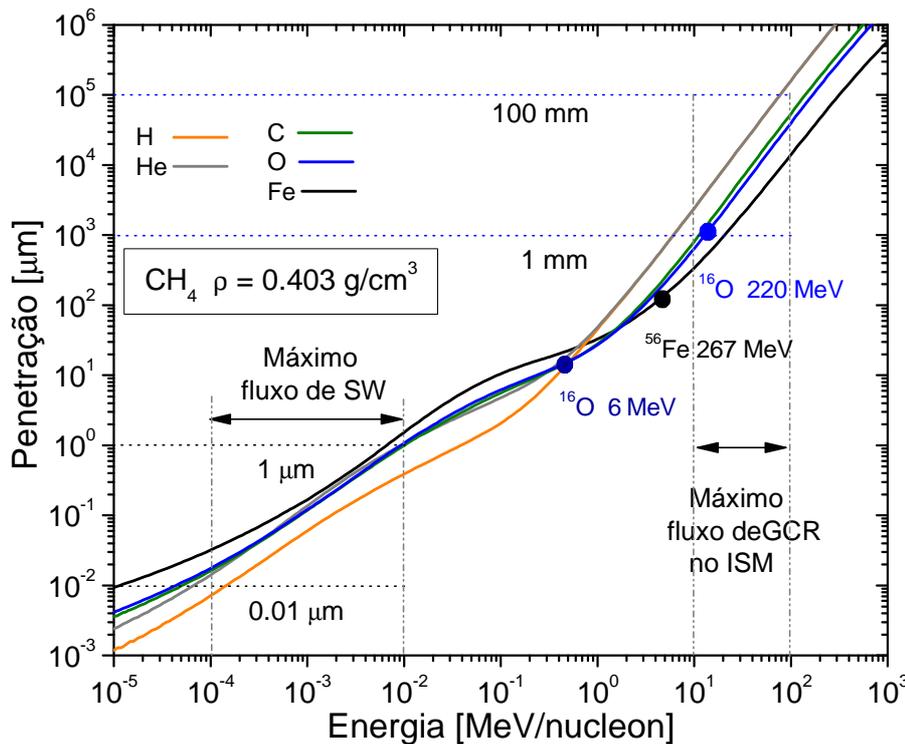


Fig. 6.5. Profundidade máxima de penetração dos íons H, He, C, O e Fe, no gelo CH<sub>4</sub>, em função da energia inicial do projétil. Valores calculados por SRIM [12].

A Fig. 6.5 mostra os resultados para os projéteis H, He, C, O e Fe, com estados de carga de equilíbrio, penetrando em gelo CH<sub>4</sub> de densidade ρ = 0,403 g/cm<sup>3</sup>. Observa-se que para valores de  $E/m$  da ordem de 10<sup>-4</sup> a 10<sup>-2</sup> MeV/u, para os

quais o fluxo do vento solar é máximo, o hidrogênio é implantado nas camadas mais próximas à superfície do gelo, enquanto os íons de C, O e Fe penetram mais profundamente para os mesmos valores de energia por nucleon no intervalo de penetração de  $10^{-2}$  a  $1 \mu\text{m}$ .

No ISM, o fluxo máximo de raios cósmicos galácticos (GCR) ocorre para energias da ordem de  $10$  a  $10^2$  MeV/u, as quais correspondem a uma penetração de  $10^3$  a  $10^5 \mu\text{m}$ . Neste intervalo de energia a penetração máxima dos GCR é maior para H e He, enquanto os íons de C, O e Fe penetram menos (Fig. 6.5).

A partir das funções  $\phi_k(E)$ ,  $S(E)$  e  $\bar{z}(E)$  pode-se determinar o perfil da concentração relativa  $C_k(z)$  dos elementos constituintes dos raios cósmicos implantados no gelo metano, tanto para o vento solar quanto para os GCR. No caso simples de um feixe perpendicular à superfície do gelo, após um tempo de irradiação  $\Delta t$ , o número total de átomos da espécie  $k$ ,  $dn_k$ , implantada na região de profundidade entre  $z$  e  $z + dz$  será:

$$dn_k = C_k(z) \Delta t dz = \frac{dn_k}{A dz} \Delta t dz = \frac{dn_k}{A dE} \Delta t dE = \phi_k \Delta t dE \quad 6.9$$

em que  $C_k(z)$  aparece como sendo a taxa de implantação por unidade de volume  $A dz$ , que é proporcional à concentração relativa de cada espécie em dada profundidade de deposição.

A taxa de implantação em função da profundidade é então:

$$C_k(z) = \phi_k \frac{dE}{dz} = \phi_k(E) S(E) = \phi_k(\bar{z}(E)) S(\bar{z}(E)) \quad 6.10$$

A Fig. 6.6 ilustra estes resultados para determinados elementos do SW. Existe uma região da penetração na faixa de  $0,1$  a  $1 \mu\text{m}$ , onde a quantidade de íons H, C, O e Fe coincidem. Isto sugere que para períodos longos a probabilidade de ter compostos do tipo  $H_x C_y O_z Fe_w$  é maior do que em outras profundidades do sólido.

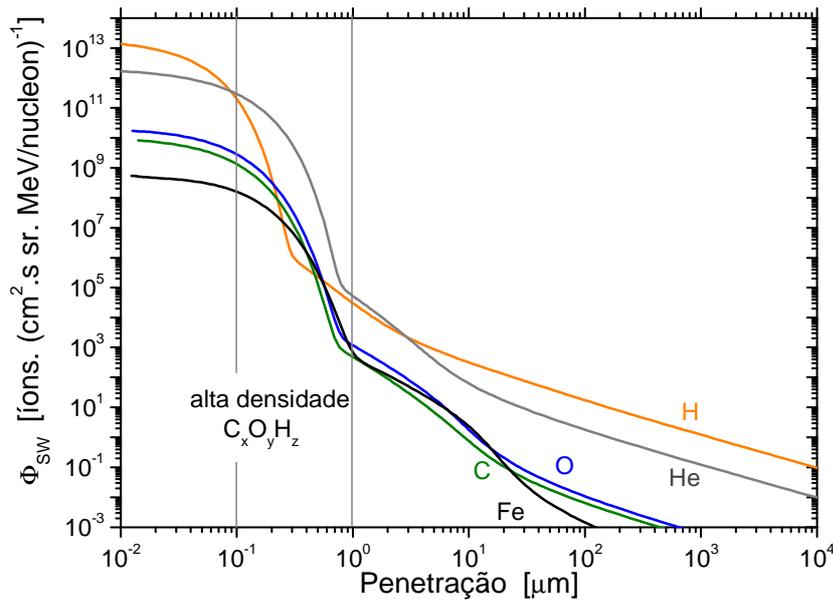


Fig. 6.6. No SW, fluxo dos elementos H, He, C, O e Fe implantados em gelo  $\text{CH}_4$ . Em profundidades entre 0,1 e 1  $\mu\text{m}$  há mistura de íons implantados.

## 6.4

### Espécies moleculares dessorvidas do gelo $\text{CH}_4$ no espaço

No espaço ocorrem dessorção térmica, fotodessorção, dessorção estimulada por elétrons e dessorção iônica. Um caso particular é o  $\text{H}_2$  que, por permanecer gasoso acima de 4 K, difunde-se continuamente nos sólidos até dessorver.

Encontrou-se que o rendimento de dessorção induzida pelos raios cósmicos está relacionado com o poder de freamento eletrônico,  $Y \sim S_e^2$ , tanto para íons leves [15, 16 e 98] quanto para íons pesados [66, 93 e 95].

#### 6.4.1

### Espécies moleculares iônicas dessorvidas do gelo $\text{CH}_4$ no espaço

Os íons  $\text{H}_m^+$  são importantes nos processos astroquímicos porque participam na produção de muitas espécies químicas complexas que são observadas nas atmosferas de planetas e satélites, assim como no ISM [100 e 101]. Os íons negativos  $\text{H}^-$  são menos abundantes, mas ao reagirem com espécies positivas produzem espécies neutras.

Os íons desorvidos de uma superfície podem colidir com moléculas em fase gasosa formando novas moléculas. A Figura 6.7 ilustra processos que podem ocorrer em nuvens moleculares densas [102]. Os raios cósmicos são os ativadores dos processos de ionização, já que a radiação ultravioleta é fortemente atenuada na parte externa da nuvem. Neste esquema, o  $\text{CH}_3^+$  é o centro gerador de moléculas complexas do tipo  $\text{H}_x\text{C}_y\text{O}_z\text{N}_w$ . Outros possíveis esquemas químicos para o ISM são descritos em [102]; aqueles envolvendo espécies iônicas e moléculas neutras da atmosfera de Titã são detalhados em [103 e 104]. Alguns dos íons moleculares positivos produzidos pelo impacto dos fragmentos de fissão do  $^{252}\text{Cf}$  coincidem com os observados em Titã e listados na Tabela 6.6.

Tabela 6.6. Moléculas neutras e iônicas encontradas na atmosfera de Titã entre 1000 e 1100 Km de altitude [85].

Espécies neutras	Íons positivos
$\text{CH}_4, \text{C}_2\text{H}_2, \text{C}_2\text{H}_4, \text{C}_2\text{H}_6,$	$\text{CH}_5^+, \text{C}_2\text{H}_5^+, \text{C}_3\text{H}_3^+, \text{C}_4\text{H}_3^+, \text{C}_4\text{H}_5^+,$
$\text{CH}_3\text{CCH}, \text{C}_3\text{H}_6, \text{C}_3\text{H}_8,$	$\text{C}_6\text{H}_5^+, \text{C}_6\text{H}_7^+, \text{C}_7\text{H}_7^+, \text{C}_8\text{H}_7^+, \text{C}_9\text{H}_9^+,$
$\text{C}_4\text{H}_2, \text{C}_6\text{H}_2, \text{C}_6\text{H}_6, \text{C}_7\text{H}_4,$	$\text{C}_{10}\text{H}_8^+, \text{C}_{11}\text{H}_9^+, \text{C}_{12}\text{H}_9^+, \text{C}_{13}\text{H}_9^+, \text{C}_{10}\text{H}_2^+,$
$\text{C}_7\text{H}_8, \text{C}_8\text{H}_2$	$\text{C}_{12}\text{H}_2^+, \text{C}_{14}\text{H}_2^+$

Os íons positivos mais abundantes têm número ímpar de átomos de hidrogênio (mas um número par de elétrons). Uma ressalva deve ser feita com relação ao rendimento de desorção do íon  $\text{CH}_5^+$  (metanium), que se encontra superestimado por contribuição do  $\text{OH}^+$  proveniente de contaminação por água.

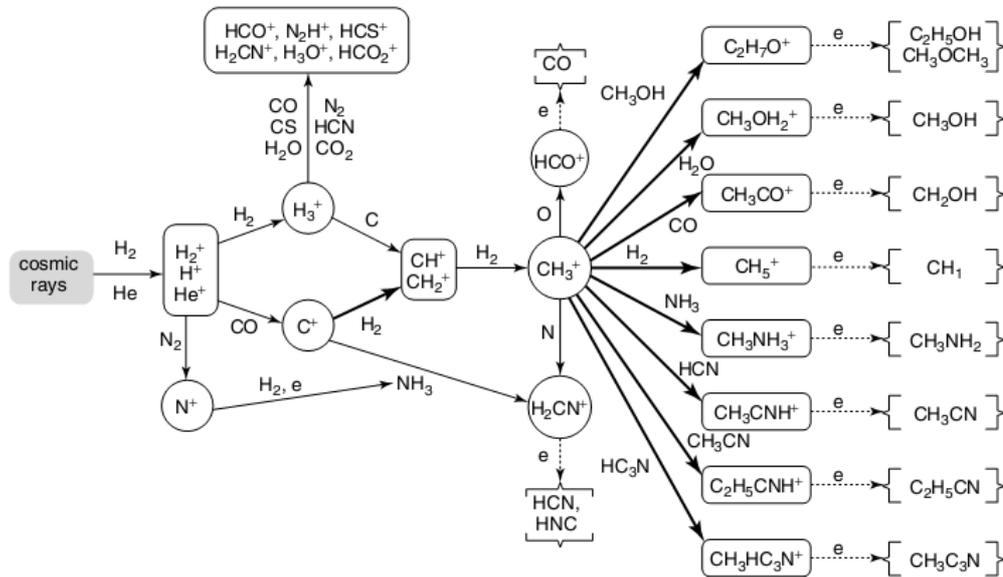


Fig. 6.7. Esquema de rotas possíveis de reações químicas em nuvens moleculares densas [102].

### 6.4.2

#### Espécies moleculares neutras dessorvidas do gelo CH<sub>4</sub> no espaço

As espécies moleculares neutras dessorvidas por impacto de íons são ordens de grandeza mais abundantes do que as espécies com carga. O rendimento de dessorção de moléculas, átomos ou íons a uma dada temperatura do gelo depende do tipo de projétil, sua carga, massa atômica, ângulo de incidência e velocidade. Na Seção 5.3 foi mostrada que a expressão  $Y = c_n S_n + c_e S_e^2$  descreve razoavelmente a dependência do rendimento de dessorção com o poder de freamento eletrônico e nuclear. Para os raios cósmicos altamente energéticos, apenas a dessorção eletrônica importa. O número de moléculas dessorvidas pelo constituinte  $k$  após um tempo  $t$  é:

$$N_k(t) = \int_0^t dt \int_0^{2\pi} d\Omega \int_0^\infty \phi_k(E, \Omega) Y_k(E, \theta) dE \quad 6.10$$

onde  $\theta$  é o ângulo de incidência no gelo.

Admitindo que  $Y_k(E, \theta) = Y_k(E) / \cos^{-gk}(\theta)$  [34], esta integral se reduz para:

$$N_k(t) = t \, 2\pi \int_0^\pi d\theta \int_0^\infty \phi_k(E, \Omega) Y_k(E) \cos(\theta)^{-gk} dE \quad 6.11$$

com  $g_k = 1,3 + 0,13 \cdot \ln(m_k)$  para cada íon incidente de peso atômico  $m_k$  [15]. Considerando incidência normal para o caso de vento solar,  $\theta$  é o semi-ângulo do cone de visão ao Sol e o ângulo sólido das partículas incidentes é  $\pi(R_{\text{Sol}}/D_{\odot})^2$

A integral da energia e do ângulo é substituída por  $J_k$ , que é função do ângulo de incidência em temperatura menor do que 40 K,

$$J_k(\theta) = \int_0^{\infty} \Phi_k(E_n) Y_e(E_n) dE_n \int \text{sen}(\theta) \cos(\theta)^{-g_k} d\Omega \quad 6.12$$

a integral  $\int d\Omega$  para o sistema solar é aproximadamente  $\pi(R_{\text{sun}}/D_{\odot})^2$  para ângulos pequenos de  $\theta$ . O número de moléculas desorvidas por unidade de área é  $N_k^Y(t) = J_k \Delta t$ .

Para estimar a desorção, é necessário simplificar o problema para um caso específico, onde o impacto dos íons é perpendicular a superfície irradiada. Nesta condição, a função  $\cos^{-g_k}(\theta) = 1$ . A Tabela 6.7 mostra os valores calculados com estas restrições.

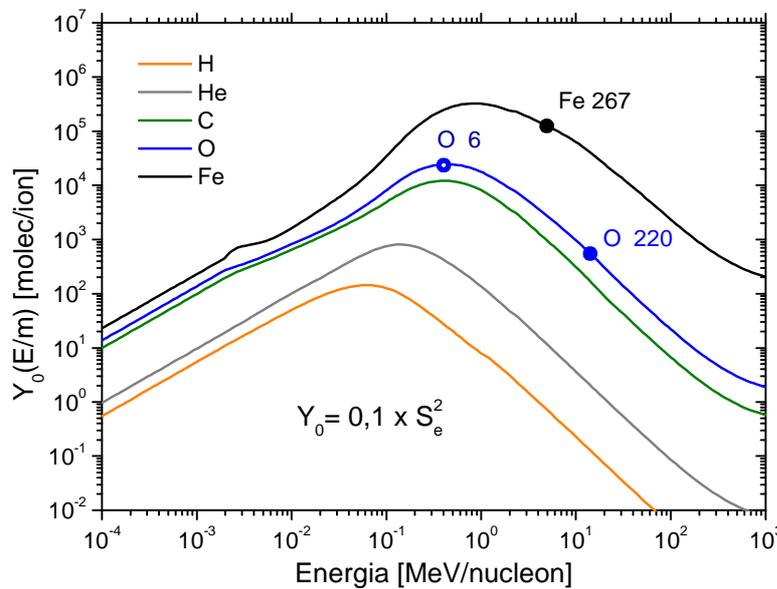


Fig. 6.8. Previsão do rendimento de desorção para os raios cósmicos. Resultados obtidos a partir de  $Y_0 = 0.1 \times S_e^2$  para uma incidência normal do feixe com a superfície do gelo

O número de moléculas desorvidas de um grão de raio 0,1µm (tamanho típico no ISM) por segundo é

$$Y_{GCR} = 2\pi a^2 N_k^Y = 3.2 \times 10^{-8} [\text{molec/s}] = 1,2 \text{ molec/ano} \quad 6.13$$

O fator 2 indica que há desorção na entrada e na saída do íon [24]. Um cálculo muito mais completo deve incluir os diferentes ângulos de incidência  $\theta$  do íon na superfície do gelo, a distribuição dos grãos e a densidade granular no ISM; este cálculo pode ser feito, mas está fora do escopo desta tese.

Tabela 6.7. Valores de  $J_k$  para cada íon com incidência perpendicular à superfície.

$J_k = \int_0^\infty \Phi_k(E_n) dE_n \int d\Omega$		
	SW	GCR
$\int d\Omega$	$\pi(R_{sun}/D_\odot)^2$	$4\pi$ ( $\theta = 90^\circ$ )
H	$1,1 \times 10^6$	0,83
He	$1,9 \times 10^5$	4,1
C	$1,14 \times 10^4$	1,7
O	$3,16 \times 10^4$	5,9
Fe	$1,60 \times 10^3$	38,8
Total	$1,31 \times 10^6$	51,3

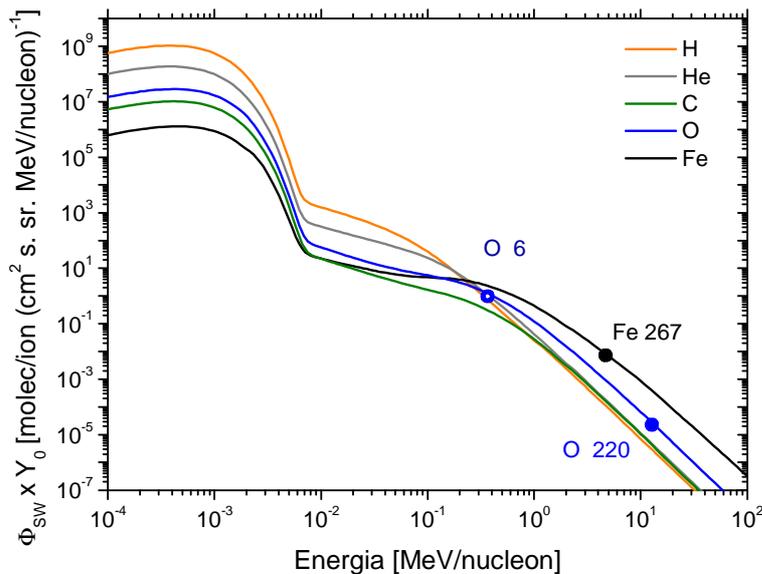


Fig. 6.9. Rendimento de desorção vezes o fluxo do vento solar.

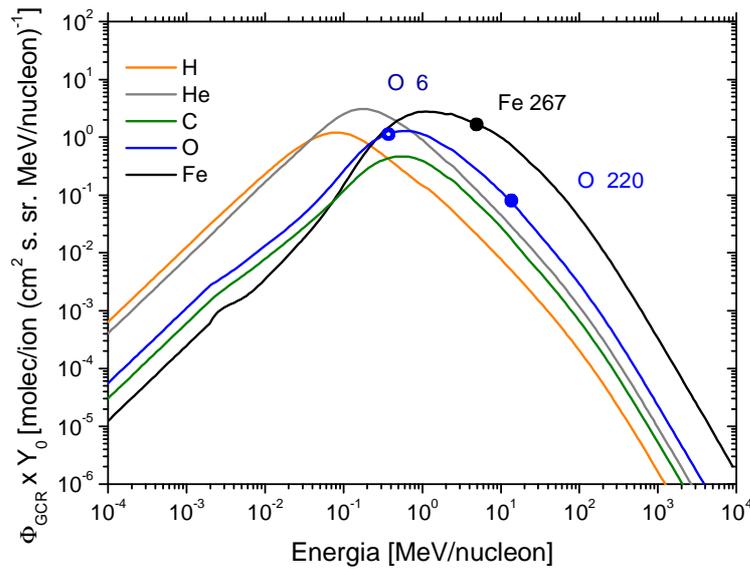


Fig. 6.10. Rendimento de dessorção vezes o fluxo dos raios cósmicos galácticos no ISM.

Das Figuras 6.8, 9 e 10 algumas observações importantes podem ser mencionadas:

- a. Para energias menores do que 0,1 MeV/nucleon, a razão entre os rendimentos de dessorção do Fe e do H é de aproximadamente 40.
- b. Na Figura 6.8 é mostrado que para energias maiores do que 1 MeV/nucleon, os íons pesados são muito mais eficientes do que os íons leves, a eficiência do Fe é até cinco ordens de grandeza maior do que a do H.
- c. A taxa de dessorção da Figura 6.9 mostra que os gelos no sistema solar são dessorvidos principalmente pelo fluxo de H e He, sendo a taxa do H 100 vezes maior do que a do C e 700 vezes maior do que a do Fe; essas grandezas são vistas na Tabela 6.7.
- d. Em energias maiores do que 0,2 MeV/nucleon, o Fe toma a liderança na taxa de dessorção no sistema solar, como é visto na Figura 6.9. Isto significa que a dessorção é importante em planetas ou luas com uma atmosfera já que o Fe tem a mesma penetração que o H na faixa de energia entre 0,2 e 1 MeV/nucleon.

Para ISM

- e. A Figura 6.10 mostra que para energias menores do que 0,3 MeV/nucleon a taxa de dessorção dos íons leves são maiores do que as dos íons pesados.
- f. Para energias maiores do que 0,3 MeV/nucleon o Fe governa completamente a taxa de dessorção, enquanto o H contribui com menos do que 0,5 % .
- g. Para qualquer ângulo de incidência, pode-se estimar que o Fe é responsável por 87% da dessorção total. Isto mostra o seu grande poder de destruir grãos nos mantos frios do ISM.

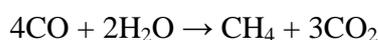
## 6.5

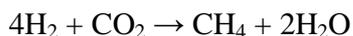
### O metano na astrobiologia

*Marte*

A superfície de Marte perde atmosfera continuamente, porém observações recentes mostram que o metano gasoso é constantemente repostado. Este fato sugere que nas profundezas da superfície marciana existe uma fonte de dessorção de metano [73]. Entre as possíveis origens desse composto, há contribuições devidas a meteoritos ou cometas ricos em metano que tenham colidido com Marte; entretanto, estimativas apontam que este aporte não é suficiente para explicar as observações [74]. Outra possível fonte de CH<sub>4</sub> seria a atividade vulcânica, mas estima-se que Marte não tem tido erupções vulcânicas nos últimos 10 milhões de anos. Estas considerações induzem à pergunta se o metano não estaria sendo criado pela decomposição de matéria orgânica ou se ele não viria de imensos depósitos armazenados em cavidades subterrâneas por milhões de anos. Esse material teria se formado no passado, quando o planeta possuía uma densa atmosfera ideal para a proliferação de alguns tipos de microrganismos simples ou mesmo de seres mais complexos.

Um processo de formação de metano é o metabolismo de ecossistemas microbianos quimiolitotróficos que necessitam de CO ou H<sub>2</sub> para a produção de CH<sub>4</sub> [74]





A atmosfera marciana contém quantidades consideráveis de CO e H<sub>2</sub>. Neste contexto, a hipótese mais plausível sugere a geração do metano por microrganismos subterrâneos que residem junto à água retida em porosidades ou gretas de superfícies sólidas [36], que seriam oásis para a biota marciana prosperar [73].

### Titã

A lua de saturno, Titã, possui grandes concentrações de metano. A sonda Cassini-Huygens, enviada pela NASA para estudar Saturno e suas luas, confirmou as observações terrestres com telescópios da composição atmosférica destes satélites. A sonda Huygens pousou na superfície de Titã em 2005 e fez uma análise química da sua atmosfera e superfície. Os hidrocarbonetos detectados, Tabela 6.6, mostraram uma dependência da região e altitude na atmosfera [85].

Em estudos complementares, simulações feitas em laboratórios sobre gases e gelos de metano e nitrogênio irradiados puderam fazer previsões sobre a composição química de Titã [85]. Certos hidrocarbonetos não foram detectados em Titã, mas são previstos pela irradiação com íons pesados em gelo metano: CH<sub>3</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>3</sub> e C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>, e os compostos com quatro carbonos C<sub>4</sub>H<sub>6</sub>, C<sub>4</sub>H<sub>8</sub> e C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>.

Em simulações de ambientes astrofísicos, hidrocarbonetos com até 4 carbonos são formados pela irradiação de gelo metano, já os íons dessorvidos podem ter até uma dezena de carbonos (como foi visto nos espectros PDMS do CH<sub>4</sub>). Isto deve acontecer em Titã, onde o CH<sub>4</sub> é relativamente abundante [84]. Além disto, na atmosfera de Titã têm sido detectadas moléculas de H<sub>2</sub>O, H<sub>2</sub>, N<sub>2</sub> e CH<sub>4</sub>, CO e NH<sub>3</sub> que contêm os elementos C H O N - essenciais para a estrutura e funcionamento da matéria viva.

A mistura desses compostos exposta a irradiação (fótons UV ou CR) produz grande quantidade de espécies moleculares do tipo H<sub>x</sub>C<sub>y</sub>N<sub>z</sub>O<sub>w</sub> que foram identificadas *in situ* pela sonda Cassini-Huygens [85], junto com a grande variedade de hidrocarbonetos espera-se que haja ainda moléculas com estruturas mais complexas.