

Universidade Federal do Rio de Janeiro
Centro de Ciências Matemáticas e da Natureza
Observatório do Valongo

Eduardo Monfardini Penteado

**EVOLUÇÃO DA ABUNDÂNCIA DE
BIOMOLÉCULAS NO MEIO INTERESTELAR NA
FASE GASOSA**

2009



Eduardo Monfardini Penteado

EVOLUÇÃO DA ABUNDÂNCIA DE BIOMOLÉCULAS NO MEIO INTERESTELAR NA FASE GASOSA

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Astronomia, Observatório do Valongo, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Astronomia.

Orientador: Prof. Dr. Hélio Jaques Rocha-Pinto

Rio de Janeiro
Setembro de 2009

Penteado, Eduardo M

Evolução da Abundância de Biomoléculas no Meio Interestelar na Fase Gasosa/
Eduardo Monfardini Penteado

- Rio de Janeiro: UFRJ/ OV, 2009

xvi, 63f.:il; 30 cm

Orientador: Hélio Jaques Rocha-Pinto.

Dissertação (mestrado) - UFRJ/ OV/ Programa de Pós-graduação
em Astronomia, 2009.

Referências Bibliográficas: f: 80-83.

1.Meio Interestelar 2.Astroquímica 3.Astrobiologia

Rocha-Pinto, Hélio Jaques.

II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, Observatório do Valongo,
Programa de Pós-graduação em Astronomia, 2009 III. Título.

Há mundos infinitos, tanto parecidos como diferentes deste nosso mundo (...) devemos acreditar que em todos esses outros mundos existem seres vivos e plantas e outras coisas que vemos neste mundo.

Epicuro - (341-270 a.C.), carta a Heródoto

Agradecimentos

Ao amigo e orientador **Dr. Hélio Jaques Rocha-Pinto**, sou muito grato pela qualidade da orientação, sempre atencioso e dedicado ao desenvolvimento acadêmico. Trabalhar sob a sua orientação foi muito gratificante. Muito obrigado pela oportunidade.

Ao também amigo e antigo orientador **Dr. Jorge Ricardo Ducati**, por ter aberto as portas da Astronomia, com sua sabedoria, calma e dedicação, orientando o aluno no caminho certo. Meu sincero agradecimento.

Aos meus pais, **José Cleve Penteado e Neuza Maria Monfardini Penteado** e toda a família, pela dedicação e apoio por todo o tempo. Meus mais sinceros agradecimentos.

À **FAPERJ** pelo apoio financeiro concedido através de uma bolsa de mestrado.

Aos colegas de mestrado **Marcelo, Felipe, Gustavo, Andres, Letícia, Nilo, Álvaro, Iker, Theo**, amigos incríveis, cuja amizade e companheirismo foi muito gratificante, e essencial, durante todo o percurso do mestrado.

A todos os **bons e velhos amigos dos tempos da graduação na UFRGS**, pela fantástica amizade e companheirismo, mesmo agora à distância, sempre prontos para ajudar no que fosse preciso. **Rafael, Maurício, Kelly e tantos outros**, minha gratidão.

À **comunidade do Observatório do Valongo**, um lugar acolhedor, com boas pessoas e bons profissionais. Foi um prazer poder compartilhar da companhia de todos.

Aos amigos **Jefferson e Rodrigo**. Amigos dos tempos da graduação, tive a felicidade de poder continuar na companhia de vocês durante o mestrado.

Aos **companheiros de república** pela amizade e agradável convivência por mais de dois anos, ajudando uns aos outros, sempre com bom humor. **Rafael, Ivan, Renan, Lorena, Marcus, Paulo e Renato**, muito obrigado.

Resumo

Diversas são as moléculas importantes para o surgimento da vida primordial produzidas e destruídas em nuvens moleculares. O colapso dessas nuvens pode dar origem a estrelas que abrigam sistemas planetários. Na composição desses sistemas, moléculas da nuvem molecular agregadas a grãos serão incorporadas aos protoplanetas, podendo influenciar a evolução físico-química de seu ambiente, eventualmente favorecendo o surgimento e o desenvolvimento da vida nos planetas rochosos que se encontrem na zona de habitabilidade estelar. Igualmente, pequenos corpos (cometas) que atingirão o planeta recém formado podem carregar moléculas originárias da nuvem molecular parental. Utilizando equações de astroquímica, procuramos descrever a evolução da abundância de moléculas importantes à Vida, como a conhecemos, a partir de composições químicas iniciais variáveis. A variação na composição química inicial considera a variação nas abundâncias elementais previstas pela Evolução Química da Galáxia. Um sistema de equações diferenciais de primeira ordem acopladas que descreve a variação das abundâncias de cada molécula na fase gasosa da nuvem molecular é resolvido numericamente, possibilitando o conhecimento de como a abundância dessas moléculas varia com o tempo e a composição química inicial.

Palavras-chave: ISM: moléculas, abundâncias; ISM: astroquímica, astrobiologia.

Abstract

Interstellar clouds are the sites where many molecules believed important for the early life are produced. The collapse of such clouds may give birth to stars hosting planetary systems. During the formation of such systems, molecules formed in the molecular cloud, aggregated into grains, will be incorporated to the protoplanets, influencing the chemical evolution of the environment, probably affecting the chances for life appearance on rocky planets located at the stellar habitable zones. Moreover, small bodies, like comets can carry some of these molecules to inner planets of their systems. Using astrochemical equations, we describe the evolution of the abundance of such molecules at the gas phase from several initial interstellar compositions. These varying initial chemical compositions consider the change of the elemental abundances predicted by a self-consistent model of the chemical evolution of the Galaxy. A system of first order differential equations that describes the variable abundances of each molecule is solved numerically, making possible the knowledge of how the abundance of such molecules change with time and initial chemical composition.

Keywords: ISM: molecules, abundances; ISM: astrochemistry, astrobiology.

Sumário

Introdução	12
1 Considerações sobre a Vida	14
1.1 A Vida e suas características	14
1.2 Biomoléculas	16
1.2.1 A molécula da água	17
Zona de habitabilidade estelar	18
1.2.2 Moléculas orgânicas	20
1.3 Origem da Vida	21
1.4 Evolução química da Galáxia	25
1.5 As nuvens moleculares	28
1.6 Planetas extrassolares	28
1.7 Considerações	29
2 Astroquímica	31
2.1 Transições moleculares	34
2.2 O meio interestelar	38
2.2.1 Moléculas no meio interestelar e circum-estelar	38
2.2.2 Ambientes do meio interestelar	40
2.3 Reações químicas no meio interestelar	42
2.4 Taxas das reações químicas	44
2.4.1 A dependência com a temperatura da constante da reação	45
2.4.2 Aproximação do estado estacionário	47
2.4.3 Energia de ativação	47
2.5 A formação da água na fase gasosa	48
2.6 A produção de moléculas complexas	49
2.7 Hidrocarbonetos aromáticos policíclicos	53
2.8 Síntese orgânica nos gelos interestelares	54
3 Simulações	55
3.1 Lista de reações químicas	56

3.2	A lista de moléculas	61
3.3	Metalicidade e abundâncias	61
3.4	O método utilizado	63
3.5	Condições iniciais	64
4	Resultados e conclusões	71
4.1	Resultados	71
4.2	Conclusões	100
A	Cálculo das abundâncias	110

Lista de Figuras

1.1	A molécula de água	17
1.2	Zona de habitabilidade estelar	19
1.3	Distribuição da abundância dos elementos químicos	27
1.4	Energia de ligação	27
2.1	Nuvem molecular Barnard 68	31
2.2	Absorção da radiação pela atmosfera	33
2.3	Nebulosa de Órion	41
3.1	[S/Fe] <i>versus</i> [Fe/H]	65
3.2	[F/O] <i>versus</i> [Fe/H]	68
3.3	Variação da abundância inicial dos elementos	70
4.1	Moléculas “fundamentais”	73
4.2	Abundâncias finais de moléculas “fundamentais”	74
4.3	Moléculas orgânicas	77
4.4	Abundâncias finais de moléculas orgânicas	78
4.5	Cianopolienos	80
4.6	Abundâncias finais de cianopolienos	81
4.7	Moléculas policarbonadas	83
4.8	Abundâncias finais de moléculas policarbonadas	84
4.9	Abundância por número de carbonos	86
4.10	Moléculas fosforadas	87
4.11	Abundâncias finais de moléculas fosforadas	88
4.12	Comparação entre as abundâncias das moléculas oxigenadas (primeiro grupo)	90
4.13	Comparação entre as abundâncias das moléculas oxigenadas (segundo grupo).	91
4.14	Estatísticas	93
4.15	Fração de moléculas destruídas.	95
4.16	Probabilidade de destruição das moléculas.	96

Lista de Tabelas

3.1	[X/Fe] <i>versus</i> [Fe/H]	66
3.2	[X/H] <i>versus</i> [Fe/H]	67
3.3	[F/H] <i>versus</i> [Fe/H]	67
3.4	Abundância solar	68
3.5	Condições iniciais	69
4.1	Comparação com observações — metalicidades baixas	97
4.2	Comparação com observações — metalicidades intermediárias e alta	98

Introdução

A origem da Vida sempre foi um tema que desperta um enorme interesse em todos nós. Desde tempos remotos, o Homem pergunta-se de onde vem e pra onde vai, o porquê da sua existência e se existe Vida em outros lugares além do planeta Terra. Hoje em dia, com o avanço extraordinário da Ciência e Tecnologia, temos, pela primeira vez, a possibilidade real de responder, mesmo que seja apenas parcialmente, algumas dessas questões. A Astrobiologia é a ciência que estuda a Vida como um evento universal, e seu desenvolvimento tem proporcionado grandes descobertas. De caráter interdisciplinar, vem atraindo a atenção desde profissionais especializados em diversas áreas até do público não especializado. Por tratar de temas tão variados, como a origem da Vida na Terra e a possibilidade da existência de Vida em outros lugares do Universo, o trabalho conjunto de pesquisadores de diversas áreas é crucial para o bom desenvolvimento dessa nova ciência.

Trataremos, aqui, da evolução da abundância das biomoléculas¹ no meio interestelar. A evolução de biomoléculas neste ambiente pode ter forte ligação com o surgimento da Vida na Terra pelo fato de o planeta poder ter sido semeado durante a sua formação, recebendo moléculas já formadas na nuvem que deu origem ao Sistema Solar. Uma vez depositadas na superfície do planeta, essas moléculas poderiam ter influenciado a evolução bioquímica que aqui ocorreu, exercendo o papel de precursoras de outras moléculas mais complexas que formariam os primeiros organismos vivos.

O presente trabalho divide-se em quatro capítulos. No primeiro, faremos um breve resumo das principais características da Vida como a conhecemos, o papel das biomoléculas na formação e manutenção dos organismos vivos e como o estudo das moléculas formadas no meio interestelar pode influenciar o surgimento e desenvolvimento da Vida na Terra. Falaremos, brevemente, da origem dos elementos químicos no Universo que compõem os organismos e sobre os planetas extrassolares. O segundo capítulo trata da química que ocorre no meio interestelar, das reações que formam a molécula de água e outras moléculas orgânicas complexas. Também tratamos das transições moleculares, processo que nos permite estudar os espectros moleculares e algumas características do meio interestelar. No terceiro capítulo, trataremos das simulações realizadas a fim de estudar a evolução da

¹Mais corretamente, estamos lidando com moléculas que atuam como precursoras das moléculas pré-bióticas, ou seja, aquelas que, conforme reagem com outras e aumentam a sua complexidade, dão origem às moléculas importantes para a Vida. Num sentido literal, uma biomolécula é aquela produzida por um organismo vivo, o que não é o caso das moléculas encontradas no meio interestelar.

abundância das biomoléculas no meio interestelar na fase gasosa, falando sobre a lista de reações químicas estudadas e da lista de moléculas consideradas no trabalho. Por fim, no quarto e último capítulo, apresentamos os nossos resultados e as conclusões.

Capítulo 1

Considerações sobre a Vida

Neste capítulo faz-se uma explanação sobre o porquê de se estudar as biomoléculas no meio interestelar. Para isso, faremos uma passagem por assuntos que permeiam, direta ou indiretamente, o estudo dessas moléculas. Muitos são os aspectos aqui tratados. Vamos começar por algumas reflexões sobre a Vida. São apresentadas algumas de suas principais características, como os elementos essenciais que a compõem, sua estrutura celular e a diversidade encontrada no planeta, bem como algumas reflexões sobre a possibilidade da existência de Vida fora da Terra. Não nos preocupamos em dar uma definição para a Vida, uma vez que isso é impossível, visto que mesmo pesquisadores das áreas biológicas têm dificuldade em defini-la. Mas tratamos da Vida como entendida pela Ciência, ou seja, organismos compostos por moléculas orgânicas estruturadas em células. Depois falamos a respeito das biomoléculas, procurando também apresentar suas principais características e o modo como atuam nos organismos vivos, possibilitando-lhes que sejam considerados vivos. Em seguida, vamos falar sobre a origem da Vida. Este assunto é bastante amplo e complexo. Ainda não existe uma resposta clara e definitiva para essa questão, e tampouco temos a pretensão de esgotar o assunto. Mais adiante, trataremos da Evolução Química da Galáxia. Abordaremos ligeiramente temas como a origem dos elementos químicos essenciais à Vida e como a evolução das abundâncias desses elementos possibilitou que a Vida surgisse aqui na Terra. Também vamos tratar das nuvens moleculares, que são as regiões onde as estrelas e seus sistemas planetários são formados. Por fim, falaremos a respeito dos planetas extrassolares.

1.1 A Vida e suas características

Todos já nos perguntamos o que é a Vida. Muitos poemas, músicas e livros tiveram a Vida como inspiração. Cada um de nós, cada povo, cada geração possui uma concepção diferente. Alguns procuram ser práticos, dizendo que a Vida é algo que nasce, cresce e morre. Outros são mais filosóficos, dizendo ser ela um mistério inconcebível pela inteligência humana. Outros, ainda, possuem definições religiosas, dizendo que a Vida é

uma dádiva divina. De certa forma, todos estão certos. O conceito de Vida é muito amplo e não podemos reduzi-la a uma simples definição. Muitas vezes, a ideia de Vida se confunde com a ideia de *viver*, onde cada um expõe suas posições conforme suas experiências, pessoais ou coletivas.

Neste trabalho, trataremos a Vida como ela é concebida pela Ciência, tendo características bioquímicas bem definidas. Em Biologia, uma das principais características de um ser vivo é o fato de ser formado por moléculas orgânicas organizadas em células. Repare que isto não é uma definição (Lazcano 2008), mas tão somente uma característica biológica. As células são as unidades estruturais e funcionais dos organismos vivos, responsáveis por todas as funções vitais realizadas através do metabolismo¹, possuindo a capacidade de autoreplicação², na tentativa de perpetuar a espécie. As características de cada espécie transmitidas aos descendentes são armazenadas nos chamados ácidos nucleicos³. Entretanto, a informação transmitida para a célula filha pode não ser exatamente igual a da célula parental, pois, durante o processo de replicação, podem ocorrer mutações gênicas⁴. As mutações geram mudanças no conjunto de genes herdados, o que pode ser favorável ou não para a espécie, dependendo de como essas novas características vão atuar no processo de Seleção Natural⁵. Isso permite que a espécie evolua. Mesmo desconhecendo a existência dos genes e, conseqüentemente, das mutações gênicas, *Charles Darwin* (1809-1882) conseguiu revolucionar a Biologia e todo o pensamento científico com a sua Teoria da Evolução das Espécies (1859), mostrando empiricamente que todas as espécies estão num constante processo evolutivo.

Após algum tempo, a célula se desgasta, perdendo sua vitalidade e, conseqüentemente, morrendo. O conceito de morte também é bastante discutido, mas não vamos entrar nesta questão. Todos os seres vivos encontrados na Terra são formados por moléculas orgânicas⁶. E essas moléculas são todas baseadas em combinações de dois ou mais entre quatro dos cinco elementos mais abundantes no Universo, que são o hidrogênio, o carbono, o nitrogênio e o oxigênio, também conhecidos como elementos CHON, podendo conter pequenas quantidades de elementos mais pesados, como o cálcio e magnésio, por exemplo.

¹Conjunto de reações químicas responsáveis pelos processos de síntese e degradação dos nutrientes na célula.

²Processo pelo qual toda informação genética é transmitida aos descendentes.

³Macromoléculas responsáveis pelo armazenamento, transmissão e tradução das informações genéticas. Existem dois tipos de ácidos nucleicos: o ADN — ácido desoxirribonucleico — e o ARN — ácido ribonucleico — cada qual com funções específicas no processo de transmissão das informações genéticas. O ADN é formado pelos nucleotídeos adenina, citosina, guanina e timina, enquanto que o ARN é formado pela uracila no lugar da timina e pelas outras bases que também compõem o ADN.

⁴Mudança na sequência de nucleotídeos na molécula de ADN, causada por exposição à radiação ionizante ou por processos químicos.

⁵Mecanismo proposto por Charles Darwin onde as características herdadas pelos organismos se mostram favoráveis ou não para a adaptação da espécie ao meio ambiente.

⁶Os vírus não são constituídos por células, embora dependam delas para a sua multiplicação. São formados por ácidos nucleicos (ADN ou ARN) envolvidos por uma cápsula proteica; autoreproduzem-se e são suscetíveis a mutações. Não há um consenso sobre se os vírus são ou não seres vivos.

Encontramos uma diversidade enorme de seres vivos no nosso planeta. Alguns são microscópicos, como as bactérias; outros são extremamente grandes e especializados, como as baleias. O Homem é um dos seres vivos mais complexos conhecidos até o momento. Seu desenvolvimento intelectual coloca-o como o ser dominante no planeta. O número de espécies que já passaram pela Terra é muito maior do que o número encontrado hoje em dia. Os seres vivos são encontrados em praticamente todos os ambientes da Terra. Numa grande faixa de temperatura, pressão, salinidade e outras características físico-químicas de diversos ambientes da Terra, é possível encontrar algum organismo vivo, simplesmente tentando sobreviver, consumindo energia fornecida pelo ambiente e reproduzindo-se, no instinto de preservar a espécie, sobrevivendo às adversidades da natureza e transmitindo informação genética para gerações subsequentes. Um grupo de seres vivos muito interessantes, descobertos há pouco mais de 40 anos, são os organismos extremófilos. A descoberta destes seres também foi um marco no estudo da origem da Vida. São capazes de viver em ambientes completamente inóspitos, desprovidos de luz solar ou submetidos a temperaturas que o homem seria incapaz de tolerar, além de outras condições extremas. É como se esses seres vivessem em outro planeta.

Somos, então, levados a pensar em vida extraterrestre. Para isso, basta um olhar sob um céu estrelado. Diante de um Universo espetacularmente grande e diversificado, com a descoberta de centenas de exoplanetas, inevitável é conjecturar sobre a existência de seres vivos em outros locais além da Terra. Essa é uma questão sempre presente no pensamento do Homem, desde tempos remotos. Mas as opiniões sobre o tema também são bastante variadas. Ironicamente, *Giordano Bruno* pagou com a vida por acreditar em ideias que confrontavam a Igreja como, por exemplo, a existência de Vida em outros planetas. O assunto já foi tratado com muita descrença e de forma até pejorativa. Mas hoje em dia, com a descoberta das *extremófilas* (Brock 1967) e de centenas de planetas extrassolares, a tese da existência de vida em algum outro planeta parece, cada vez mais, algo bastante plausível. Pesquisadores conjecturam que nas próximas décadas já seremos capazes de identificar planetas habitáveis. Talvez o Universo esteja fervilhando de vida. Esta será, sem dúvida, a maior de todas as descobertas.

1.2 Biomoléculas

As biomoléculas são as moléculas essenciais para a Vida, fazendo parte da estrutura do ser vivo ou possibilitando o seu funcionamento. Em sua maioria, são moléculas orgânicas, como os aminoácidos. Entende-se por molécula orgânica como sendo aquela molécula formada por carbono e hidrogênio, podendo diversas delas conter heteroátomos na cadeia carbônica, como O, N e S. No entanto, algumas outras também muito importantes são inorgânicas como, por exemplo, a água. Vamos ver um pouco mais a respeito dessas moléculas.

1.2.1 A molécula da água

A água, cuja fórmula molecular é H_2O (ver Fig. 1.1), é a substância mais abundante no corpo humano, respondendo por cerca de 75% de sua massa. Todas as formas de vida conhecidas precisam da água para sobreviver. Ela é responsável por inúmeras funções no organismo como, por exemplo, o controle da temperatura e a dissolução de substratos para serem utilizados pela célula.

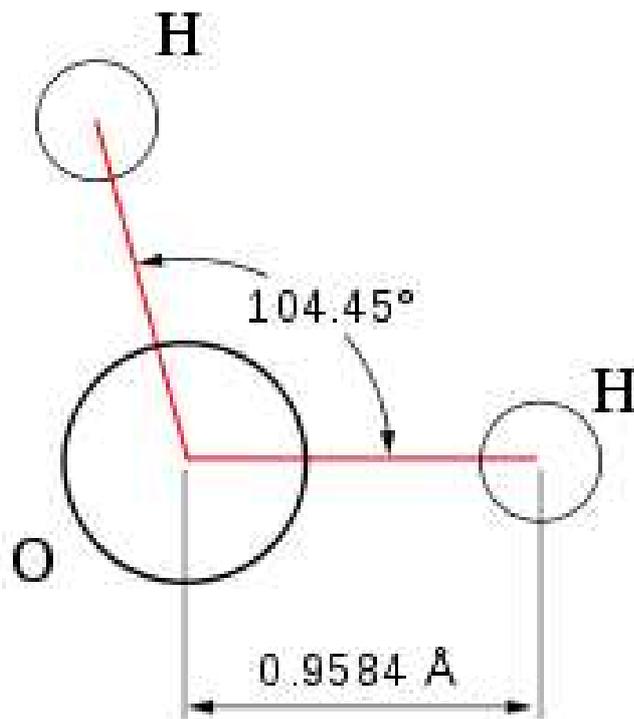


Figura 1.1: A estrutura molecular da água. A imagem mostra o ângulo de separação entre os dois átomos de hidrogênio e a pequena distância que separa os átomos de hidrogênio do átomo de oxigênio. Imagem retirada da internet http://pt.wikipedia.org/wiki/Geometria_molecular.

A molécula de água é polar, ou seja, apresenta uma diferença na distribuição de carga em sua estrutura devido à eletronegatividade entre os átomos de hidrogênio e oxigênio. Os átomos de hidrogênio ficam com uma carga positiva, enquanto que o de oxigênio fica com uma carga negativa. Dessa forma, os átomos de hidrogênio de uma molécula de água interagem através de ligações de hidrogênio com o átomo de oxigênio de outras moléculas de água, tornando possível a união de diversas moléculas de água entre si.

A água é uma substância bastante peculiar. Considerada o solvente universal, pode dissolver o maior número de solutos já testados. O interior celular é embebido em água para facilitar as interações químicas e o transporte de nutrientes. Cerca de 85% da massa celular é devido à água.

Suas propriedades de dilatação são muito importantes para a manutenção da vida marinha em regiões frias. A maioria dos líquidos se dilatam com o aumento da temperatura e se contraem com a redução da temperatura, mas a água constitui uma anomalia do comportamento geral entre 0 e 4 graus celsius, da seguinte maneira: ela se contrai conforme a temperatura cai; no entanto, a partir de 4 graus, expande-se, até que se solidifica quando atinge o ponto de fusão, quando volta a se contrair. Sendo assim, a água atinge um volume mínimo a 4 graus celsius e nesta temperatura a sua densidade é máxima. Esse fato faz com que a água da superfície se solidifique antes que toda a água abaixo também congele. Como também é um bom isolante térmico, essa camada de gelo mantém a temperatura da quantidade de água abaixo da camada de gelo acima do ponto de congelamento, permitindo que as espécies que vivem nessas regiões não morram durante o inverno.

O efeito estufa natural que existe na Terra mantém a temperatura num nível agradável aos seres vivos. Sem ele, a temperatura na Terra seria congelante. Os principais responsáveis pela manutenção do efeito estufa são as moléculas de dióxido de carbono, metano e ozônio. As moléculas presentes na atmosfera absorvem a radiação infravermelha do Sol, regulando assim a temperatura no planeta.

Zona de habitabilidade estelar

Apesar de a água ser uma das moléculas mais abundantes do Universo, ainda não foi encontrada na forma líquida em nenhum outro lugar além da Terra. Podemos definir uma Zona de Habitabilidade Estelar (Fig. 1.2) considerando a região em torno de uma estrela dentro da qual é possível encontrar água no estado líquido sobre a superfície dum planeta que oferecesse condições para tal. O que define onde começa e onde termina a Zona de Habitabilidade é a energia fornecida pela estrela. As estrelas são classificadas de acordo com a temperatura da fotosfera⁷ e com a luminosidade⁸. Dessa forma, estrelas muito quentes, como as estrelas dos tipos O e B⁹, possuem zonas habitabilidade muito distantes de sua superfície, uma vez que são extremamente energéticas e não permitem a formação molecular em regiões próximas enquanto que estrelas mais frias, como as dos tipos K e M, possuem zonas habitabilidade mais próximas de sua superfície. Estrelas medianas como o Sol, do tipo G, possuem zonas também em distâncias medianas. No caso do Sistema Solar, a Zona de Habitabilidade vai de 0.85 a 1.7 UA¹⁰, englobando o

⁷Camada da estrela de menor opacidade tal que a radiação consegue propagar-se.

⁸Energia irradiada por unidade de tempo.

⁹Classificação espectral de Harvard: as estrelas são classificadas de acordo com a temperatura superficial. Recebem, em ordem decrescente de temperatura, as seguintes letras: O, B, A, F, G, K, M. Assim, uma estrela de tipo espectral O possui temperatura superficial entre 30000 K e 60000 K, enquanto que uma estrela do tipo M possui temperatura superficial de 2000 K a 3500 K. O Sol é uma estrela do tipo G, com uma temperatura superficial de 6000 K.

¹⁰Unidade de distância astronômica. 1 UA corresponde à distância média entre a Terra e o Sol, cerca de 150 milhões de quilômetros.

planeta Terra. Vênus e Marte encontram-se fora dessa região. Entretanto, a luminosidade solar, e de todas as estrelas, não é constante no decorrer da vida estelar, tendo sido em torno de 30 % menor, no caso do Sol, no período em que os planetas estavam se formando. A variação da luminosidade estelar implica a variação do fluxo de energia emitido pela estrela, afetando diretamente a localização e tamanho da Zona de Habitabilidade, o que faz com que um planeta que esteja atualmente dentro dessa faixa, pode não estar mais no futuro, ou um planeta que hoje não esteja, pode entrar na Zona de Habitabilidade em algum momento futuro.

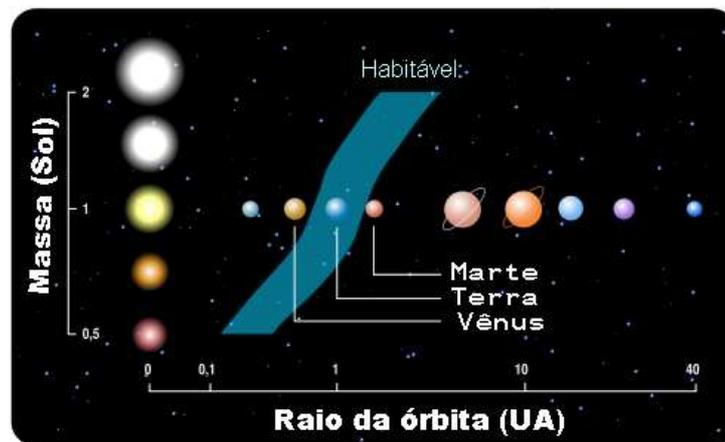


Figura 1.2: A zona de habitabilidade estelar.

Mas o fato de um planeta encontrar-se dentro da Zona de Habitabilidade não é garantia de que a Vida possa surgir e se desenvolver neste planeta. Muitos outros fatores também influenciam o processo de surgimento e desenvolvimento da Vida. Acredita-se que a Vida tenha surgido na Terra a cerca de 4 bilhões de anos, considerando os registros fósseis, ou seja, algo em torno de 500 milhões de anos após a formação do planeta. No entanto, foram precisos outros 500 milhões de anos para que a Vida se desenvolvesse substancialmente e outros bilhões de anos para que organismos complexos surgissem. Dessa forma, a estrela que hospeda um planeta sobre o qual a Vida tenha condições de desenvolver-se precisa durar pelo menos alguns bilhões de anos. Quanto maior a massa estelar, menor o seu tempo de vida. Dessa forma, estrelas do tipo O, que são extremamente massivas, possuem um tempo de vida muito curto, de apenas alguns milhões de anos, dificultando muito o desenvolvimento de Vida sobre um possível planeta que esteja em sua Zona de Habitabilidade. Por outro lado, uma estrela muito fraca, do tipo M, por exemplo, pode durar muitos bilhões de anos sendo, no entanto, tão fraca que não fornecerá energia suficiente ao desenvolvimento da Vida sobre um planeta que também se encontre em sua Zona de Habitabilidade. Estrelas que contém de 0.3 a 1.5 massas solares possuem energia em quantidade suficiente para abastecer um planeta como a Terra e vive por um tempo suficiente até que a Vida possa surgir e se desenvolver, caso possua um planeta

numa localização favorável. No entanto, apenas a localização não é o bastante. A órbita deste planeta precisa ser praticamente circular, para evitar mudanças bruscas e intensas de estações. Além disso, a sua gravidade deve ser suficiente para que possa reter uma atmosfera substancial, o que regula a temperatura e protege possíveis formas de vida em desenvolvimento.

1.2.2 Moléculas orgânicas

Moléculas orgânicas são aquelas dominadas pela química do carbono. São conhecidos milhares de compostos químicos diferentes, dos quais a maioria foi obtida de seres vivos, e os demais sintetizados em laboratório. Os compostos orgânicos mais simples são os hidrocarbonetos, que contêm apenas hidrogênio e carbono. O *metano*, CH_4 , é o hidrocarboneto mais simples, e o primeiro de uma série cuja fórmula geral é $\text{C}_n\text{H}_{2n+2}$. Os hidrocarbonetos seguintes são: o *etano*, C_2H_6 , o *propano*, C_3H_8 , o *butano*, C_4H_{10} , o *pentano*, C_5H_{12} e assim por diante. Esta série é chamada de *série dos alcanos*, que são caracterizadas por uma ligação simples entre os átomos de carbono. Quando os carbonos são unidos por uma ligação dupla, temos a *série dos alcenos* e quando são unidos por uma ligação tripla, temos a *série dos alcinos*. Algumas moléculas podem conter um anel de carbonos, sendo chamados de hidrocarbonetos cíclicos. O mais simples deles é o *ciclopropano*, cuja fórmula molecular é C_3H_6 . O *benzeno* é outro hidrocarboneto bastante importante. Sua fórmula molecular é C_6H_6 e também possui um anel de carbonos. No entanto, esse anel é formado por ligações simples e ligações duplas alternadas. O anel de benzeno também é chamado de anel aromático. Quando muitos *aromáticos* formam uma única molécula, temos os chamados *PAHs*, cuja sigla em inglês significa *hidrocarbonetos aromáticos policíclicos*.

Outras moléculas orgânicas bastante importantes são os álcoois e os éteres. Os álcoois são obtidos quando se substitui um átomo de hidrogênio de um hidrocarboneto por um radical *hidroxila*, $-\text{OH}$. Dessa forma, a partir do *metano* obtemos o *álcool metílico*, CH_3OH , e a partir do *etano* obtemos o *álcool etílico*, $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$. Os nomes dos álcoois terminam em *ol*, sendo que o nome oficial do *álcool metílico* é *metanol*, e o nome do *álcool etílico* é *etanol*. Quando um álcool é condensado com eliminação de água, obtemos os éteres. O mais importante deles é o *éter etílico*, $(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{O}$.

Os álcoois e os éteres representam o primeiro estágio de oxidação dos hidrocarbonetos. Com novas oxidações, obtemos os aldeídos e as cetonas. Nos aldeídos, um dos carbonos é ligado a um átomo de hidrogênio, por uma ligação simples, e a outro de oxigênio, por uma ligação dupla. O aldeído mais simples é o *formaldeído*, cuja fórmula estrutural é H_2CO . As cetonas possuem um dos carbonos ligados por uma ligação dupla com um oxigênio. Este grupo de carbono e oxigênio recebe o nome de *grupo carbonila*. A cetona mais simples é a *dimetilcetona*, $(\text{CH}_3)_2\text{CO}$, também conhecida por *acetona*. Oxidando ainda mais os hidrocarbonetos obtemos os *ácidos orgânicos*. Um ácido orgânico é aquela molécula que

contém um carbono ligado por uma ligação dupla a um oxigênio e, por uma ligação simples, a um radical hidroxila. A este grupo dá-se o nome de *grupo carboxila*. Exemplos de ácidos orgânicos são: o *ácido fórmico*, HCOOH , o *ácido acético*, CH_3COOH e o *ácido propiônico*, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COOH}$. Outros compostos orgânicos são as aminas. Substituindo-se um ou mais átomos de hidrogênio de um hidrocarboneto pelo *amoníaco*, NH_3 , obtemos as aminas. Como exemplos, temos: a *metilamina*, CH_3NH_2 , a *dimetilamina*, $(\text{CH}_3)_2\text{NH}$, e a *anilina*, que é um benzeno amino, $\text{C}_6\text{H}_5\text{NH}_2$. Quando ácidos carboxílicos e álcoois reagem entre si, obtém-se os *ésteres*. Por exemplo, álcool etílico e ácido acético reagem, com eliminação de água, produzindo *acetado de etila*, cuja fórmula molecular é $\text{CH}_3\text{COOC}_2\text{H}_5$.

Dentre todos os constituintes orgânicos de um organismo, os mais importantes são os aminoácidos e as proteínas. Talvez possamos dizer que são as proteínas, de fato, os mais importantes, uma vez que elas são formadas a partir da união de aminoácidos. As proteínas são moléculas muito grandes, de enorme massa molecular. Elas estão presentes nas estruturas das células, como as paredes celulares. O organismo humano possui uma enorme variedade de proteínas diferentes, cada uma delas especializada numa determinada função.

Os aminoácidos são o resultado do aquecimento das proteínas em soluções ácidas. São ácidos carboxílicos onde um átomo de hidrogênio foi substituído por um grupamento amino, $-\text{NH}_2$. Quando obtidos a partir das proteínas, recebem o nome de *alfa aminoácidos*. Nestes aminoácidos o grupo amino se acha ligado ao átomo de carbono adjacente ao grupo carboxílico. O mais simples dos aminoácidos é a *glicina*, $\text{CH}_2(\text{NH}_2)\text{COOH}$. Todas as proteínas são formadas por combinações de vinte e dois aminoácidos. Nem todos são produzidos pelo corpo humano, sendo necessário a sua ingestão para o bom funcionamento deste.

As proteínas possuem diversas funções. Uma delas é de caráter estrutural, onde participam da composição dos tecidos, proporcionando rigidez, consistência e elasticidade à célula. Outras possuem funções hormonais, como a insulina, e defensivas, como os anticorpos. Mas a principal função das proteínas é de catálise, realizada pelas enzimas, tal que reações químicas são aceleradas com a sua presença.

1.3 Origem da Vida

A origem da Vida na Terra sempre foi um tema que fascinou e ao mesmo tempo assombrou o ser humano. Devido aos seus mistérios e profundas consequências filosóficas, ficamos num estado de perplexidade ao contemplá-la. Esta é uma das questões mais antigas e complexas já formuladas. Desde tempos remotos, o ser humano pergunta-se sobre a sua origem e seu destino. E essa pergunta remete-nos a muitas outras, ainda mais profundas: se existe Vida na Terra, poderia existir também em algum outro planeta em algum outro lugar do Universo? E se existe Vida em outros planetas seria esta forma de

Vida semelhante à que encontramos aqui? Poderemos um dia detectar alguma forma de Vida fora do nosso planeta? Ainda não temos respostas para essas perguntas, e talvez nunca as tenhamos.

Existem diversas correntes de pensamento sobre a possível origem da Vida na Terra. Na Grécia antiga, filósofos já formulavam algumas ideias sobre este assunto. A mais antiga delas de que se tem notícia é a de que a Vida podia ser originada a partir de materiais inanimados — teoria conhecida como *geração espontânea*. *Anaximandro* (cerca de 610 - 547 a.C.) e *Demócrito* (cerca de 460 - 370 a.C.), entre outros, estão entre os filósofos que acreditavam na *geração espontânea*, embora tivessem algumas interpretações diferentes. O mais influente de todos foi *Aristóteles* (384 - 322 a.C.), cujas ideias permaneceram influentes por vários séculos. *Aristóteles* acreditava que a Terra fosse um lugar privilegiado, que não havia outros planetas no Universo e defendia a teoria da *geração espontânea*, também conhecida como *abiogênese*. Naquela época, pensava-se que, por exemplo, larvas de moscas surgiam a partir de carne em decomposição e que ratos surgiam a partir de trapos de roupas sujas. Os experimentos da época não eram realizados com o rigor científico necessário e, ao invés de refutar essas ideias, acabavam por reforçá-las. No entanto, a ideia da *geração espontânea* permaneceu forte por muito tempo. Apenas no século XVII é que experiências verdadeiramente científicas começaram a ser realizadas. Foi o médico e naturalista italiano *Francisco Redi* (1626-1698) quem primeiro demonstrou que as larvas de moscas só aparecem em carne em decomposição quando se deixa a carne exposta, permitindo que as moscas pousem sobre ela. Com o desenvolvimento do microscópio foi demonstrado que existem seres inacessíveis aos olhos humanos: os micróbios. A descoberta da existência dos micróbios presentes no ar mostrou que estes poderiam ser os responsáveis pela contaminação e decomposição dos alimentos. Mas o golpe final na teoria da *abiogênese* foi dado por *Louis Pasteur* (1822 - 1895), no século XIX. Através de seus experimentos, *Pasteur* demonstrou que a Vida se origina somente a partir de outra Vida, demonstrando definitivamente que a matéria bruta não pode gerar um ser vivo. Mas a pergunta sobre a origem da Vida não foi respondida por essa teoria, chamada de *biogênese*. Ela não foi capaz de explicar a origem da primeira forma de vida na Terra, mas apenas a continuidade dela. Com isso, outras ideias começaram a surgir.

Duas propostas surgiram para tentar explicar essa questão. Ou a Vida sempre existiu (desde que o Universo teve as condições necessárias e suficientes para tal) e foi trazida de alguma forma para a Terra (hipótese *exógena*), ou ela surgiu de alguma forma pela primeira vez, espontaneamente, a partir de materiais não vivos existentes na própria Terra (hipótese *endógena*). No caso de a Vida ter sempre existido, somos levados a pensar em conceitos pouco intuitivos à primeira vista. Por outro lado, se a primeira forma de vida originou-se a partir de materiais inanimados, também somos obrigados a rever conceitos que, por outras razões, já foram descartados. Vamos considerar, primeiro, a ideia de que a Vida tenha surgido na Terra. Essa ideia começou a se firmar a partir dos trabalhos

de *Aleksandr Ivanovich Oparin* (Oparin 1938), um renomado bioquímico russo, e depois reforçada pelos famosos experimentos de *Stanley Miller* (Miller 1953) na década de 1950. O objetivo dos experimentos de *Urey-Miller*, como ficaram conhecidos, era verificar se moléculas orgânicas simples poderiam ter sido formadas na atmosfera da Terra primitiva, conforme havia previsto Oparin no seu livro *A Origem da Vida*. Oparin sustentava a tese de que a atmosfera primitiva da Terra era fortemente redutora, contendo amônia, metano, vapor d'água e hidrogênio que, segundo ele, foram os elementos que sustentaram a origem e evolução da Vida. Num período onde os oceanos ainda estavam se formando e não existia a camada de ozônio, essas moléculas receberiam energia de radiações e descargas elétricas até que elas conseguissem se unir em moléculas maiores e mais complexas. Surgiriam assim as primeiras moléculas orgânicas. Uma vez formadas, elas seriam carregadas pelas chuvas até os mares primitivos. Esses mares foram chamados de *sopas orgânicas*. Essas sopas teriam sido o local onde a Vida teve origem. Ali, moléculas mais complexas teriam conseguido se formar, como alguns aminoácidos que, posteriormente, teriam originado as proteínas. Mais tarde, teriam aparecido os *proteínóides* e os *coacervados*, que ainda não são seres vivos, mas uma *pré-vida*. A partir disso, a Vida poderia ter origem, com esses elementos se organizando e aumentando em complexidade, até que uma forma de vida bastante primitiva surgisse. *Miller* tentou reproduzir em laboratório as condições propostas por *Oparin*. Foram feitas simulações da atmosfera primitiva, contendo os elementos que se imaginava presentes naquela época, e bombardeados por descargas elétricas até que pudessem se acumular numa *sopa orgânica*. Em seus experimentos, foram detectados alguns aminoácidos. Foi um marco no estudo da origem da Vida. Em princípio, a teoria da geração da primeira forma de vida a partir de compostos não vivos poderia realmente ter acontecido, uma vez que o material orgânico necessário à Vida poderia se formar na Terra primitiva. Esse é o tipo de teoria que não se pode provar experimentalmente. O surgimento da primeira forma de vida deve ter levado centenas de milhões de anos a partir da sintetização das moléculas orgânicas, inviabilizando experiências em laboratório que poderiam tentar reproduzir o surgimento dessas formas de vida iniciais. De qualquer forma, a idéia parecia correta e perfeitamente plausível. No entanto, muitos anos depois, cientistas começaram a questionar a validade destes experimentos. Acredita-se hoje que a atmosfera simulada por *Miller* não correspondia à atmosfera real que então existia no planeta. Pensa-se que a atmosfera primitiva não poderia ter sido tão redutora como se acreditava à época dos experimentos (Walker 1977; Kasting 1993). Com uma atmosfera rica em oxigênio livre, moléculas orgânicas complexas não conseguiriam se formar com a eficiência necessária. As atenções voltaram-se, então, para a hipótese *exógena* para a origem da Vida. Mesmo que moléculas importantes para Vida tenham sido formadas na Terra primitiva, já não se acredita mais que todas as moléculas importantes foram formadas, ou talvez não em quantidade suficiente. No entanto, a questão de como era a atmosfera primitiva da Terra ainda permanece em aberto. Alguns trabalhos voltaram a

sugerir que aminoácidos podem ser produzidos mesmo sob as condições de um ambiente neutro (Cleaves *et al.* 2008). A hipótese *exógena* leva em consideração a possibilidade de que as biomoléculas já estivessem formadas enquanto o próprio planeta ainda estava se formando. Essas moléculas teriam sido formadas na nuvem molecular que deu origem ao sistema solar e teriam sido transportadas para a Terra através de poeira ou cometas (Chyba *et al.* 1990). Uma vez depositadas no planeta, poderiam ter dado origem ao desenvolvimento químico que culminaria na vida.

Hoje sabe-se que a Terra encontra-se numa região seca do sistema solar. Toda a água existente aqui foi trazida de regiões mais geladas, além do cinturão de asteróides, onde os compostos voláteis conseguem manter sua estrutura. A água é um composto desse tipo. O vento solar empurrou os compostos voláteis para a região externa do sistema solar. No entanto, encontramos grande quantidade de água na Terra. Como esta água veio parar aqui? Os meteoritos devem ter sido os responsáveis por transportar a água até o nosso planeta (Morbidelli *et al.* 2000). À época dos grandes bombardeios, a Terra recebeu uma quantidade enorme desses elementos voláteis que tinham sido formados em outro lugar e que foram agregados aos cometas que existiam nessa região do Sistema Solar. O mesmo pode ter acontecido com as biomoléculas. É possível que elas tenham sido formadas na nuvem molecular que deu origem à Terra, antes mesmo do colapso gravitacional que originou o sistema solar. De fato, algumas biomoléculas são formadas nesses ambientes, como veremos no próximo capítulo. Em muitos meteoritos descobriu-se a existência de aminoácidos e outras moléculas orgânicas, como, por exemplo, no famoso meteorito Murchison (Botta & Bada (2002); Martins *et al.* (2008)). Recentemente, a glicina, o mais simples dos aminoácidos, foi descoberta no cometa Wild 2. No entanto, embora elas possam não ser usadas diretamente por organismos vivos, podem funcionar como moléculas precursoras de outras maiores e mais complexas. Mas, muito provavelmente, são as moléculas que deram início ao processo químico que culminou no surgimento da Vida. A partir dos estudos dos meteoritos outra ideia bastante intrigante começou a surgir. A vida poderia ter sido transportada de um planeta para outro. É a chamada *panspermia*. No ano de 1996, pesquisadores mostraram evidências de possíveis fósseis dentro de um meteorito marciano (McKay *et al.* 1996). E mais uma vez as opiniões se dividem. Alguns sustentam que esses fósseis são devidos à contaminação ocorrida aqui mesmo na Terra. Outros sustentam que eles viajaram junto com o meteorito até atingir a superfície do planeta. A despeito de qual seja a origem desses possíveis fósseis encontrados no meteorito marciano, a tese de que organismos simples, como as bactérias, poderiam viajar pelo espaço a salvo das condições interplanetárias extremas protegidas dentro de um meteorito vem ganhando bastante força (Horneck (1981); Nicholson *et al.* (2000)). A tese da panspermia é compartilhada por diversos pesquisadores, embora com algumas variações em suas hipóteses fundamentais. Estudos sobre a sobrevivência de material orgânico em meteoritos que viajam pelo espaço interplanetário e sofrem queda através da atmosfera terrestre vem sendo

realizados (Coulson & Wickramasinghe 2003). Alguns experimentos também estão sendo realizados nessa área, como o BIOPAN¹¹ (Demets *et al.* 2005) e o SSIUOX¹² (Rabbow *et al.* 2005). Hoje em dia, essa tese já não é mais considerada tão improvável.

1.4 Evolução química da Galáxia

Afinal, de onde vieram os elementos químicos que formam os organismos vivos?

O Universo está em constante transformação. O atual entendimento a respeito do Universo baseia-se na tese de que ele teve uma origem — a chamada teoria do *big bang*. Apesar do nome de origem pejorativa dado por *Fred Hoyle*, a teoria do *big bang* vem sobrevivendo a todo tipo de teste. De acordo com esta teoria, o tempo e o espaço teriam surgido a partir de uma grande explosão, bem como os elementos químicos mais leves e radiação.

Nos primeiros minutos após o *big bang*, a uma temperatura da ordem de 10^9K , todo o hidrogênio e o deutério foram criados, a maior parte do ^4He , algum ^3He , ^7Li e ^6Li . Alguns modelos também predizem a produção de uma fração de B. Naquele momento, a abundância química era de $X \cong 0.76$, $Y \cong 0.24$ e $Z = 0.00$, onde X corresponde à fração de hidrogênio, Y corresponde à fração de hélio e Z à fração de metais, entendendo aqui como metais todo e qualquer elemento mais pesado que o hélio.

Após os primeiros minutos, o Universo foi dominado pela chamada “Era das trevas”, que durou em torno de 10^5 anos. Até este momento, o Universo foi dominado pela radiação e a matéria bariônica formada quase inteiramente por hidrogênio e hélio estava ionizada e, conseqüentemente, opaca à radiação. Mas o Universo estava se expandindo e, com isso, se esfriando. Quando a temperatura chegou a alguns milhares de K, matéria e radiação se desacoplaram — o hidrogênio e o hélio se tornaram neutros por recombinação. O Universo se tornou transparente e a radiação de fundo foi emitida pela última vez. Após isso, a matéria teria começado a se condensar pela ação da gravidade, possibilitando a formação das galáxias e estrelas.

A época e o modo como as galáxias se formaram ainda são temas não muito bem compreendidos. A tese mais aceita diz que as galáxias se formaram a partir do colapso gravitacional do gás primordial com a subsequente formação das estrelas, apesar de alguns acreditarem que as primeiras estrelas se formaram antes de agruparem-se em galáxias. De qualquer forma, pode-se dividir as galáxias em diversos tipos morfológicos. Foi *Edwin Hubble* quem fez a primeira classificação. Esta descrevia as galáxias como elípticas, espirais e irregulares. O sistema de Hubble é bastante eficiente e poucas galáxias conhecidas não

¹¹“pan-shaped experiment container”, cápsula retornável que transporta experimentos biológicos até o espaço interplanetário.

¹²Space Simulation for Investigating Organics, Evolution and Exobiology, projeto da agência espacial europeia destinado a simular condições do espaço interplanetário em laboratórios e verificar como compostos orgânicos simples e comunidades microbianas respondem quando expostas a tais condições.

podem ser classificadas por este sistema. Parece haver uma correlação entre as idades das estrelas e a morfologia das galáxias (Sandage 1986). As elípticas possuem uma população estelar predominantemente velha, enquanto que as espirais possuem tanto estrelas velhas como jovens, mas com predominância das estrelas jovens, com formação estelar ainda a ocorrer.

A origem da matéria sempre intrigou os pesquisadores. A Nucleossíntese é o ramo do conhecimento que investiga a origem dos elementos químicos através da compreensão dos processos físicos que os montam a partir de partículas mais elementares. Os interiores estelares são o local onde os principais e mais abundantes elementos são produzidos, através da fusão nuclear (Hoyle *et al.* 1957). O desenvolvimento da Física Nuclear foi decisiva para o entendimento de como os elementos são sintetizados nas estrelas.

A distribuição de abundância dos elementos químicos na vizinhança solar, como mostrado na Fig. 1.3, é compreendida a partir dos estudos dos meteoritos, pois estes tiveram sua composição química inicial praticamente constante ao longo da história do sistema solar, refletindo diretamente a composição química inicial da nuvem molecular que deu origem ao sistema solar. Diversos são os processos físicos que levaram à produção dos elementos químicos.

O hidrogênio e o hélio são os elementos mais abundantes e foram formados quase na sua totalidade com o *big bang*. Percebemos pela Fig. 1.3 que a abundância dos elementos diminui exponencialmente com o aumento do número atômico Z . Mas há algumas exceções neste comportamento geral para alguns elementos. A curva apresenta uma depressão em $Z = 3, 4$ e 5 , correspondendo aos elementos lítio, berílio e boro, respectivamente. Estes elementos são muito instáveis e são facilmente destruídos no interior das estrelas antes que possam ser ejetados por elas. Em $Z = 26$, encontramos um pico correspondendo ao chamado grupo do ferro, cuja energia de ligação¹³ é a mais alta entre todos os elementos químicos, como pode ser visto na Fig. 1.4.

As reações termonucleares que envolvem o ferro absorvem energia ao invés de liberá-la, e a síntese dos elementos mais pesados torna-se impossível através da fusão nuclear. Começa, então, o processo de colapso gravitacional da estrela. Elementos de número atômico maior que 40 são, predominantemente, formados por captura de nêutrons¹⁴, durante o colapso da estrela ou durante a explosão de uma supernova¹⁵, onde o fluxo de

¹³Energia necessária para separar um núcleo em seus prótons e nêutrons.

¹⁴Há dois processos principais para a formação de elementos de $Z > 40$. São os chamados processo s (do inglês, slow) e processo r (do inglês, rapid). O processo s consiste na lenta, porém sucessiva, captura de nêutrons pelos elementos já formados antes do colapso. A escala de tempo para a captura dos nêutrons é maior que a escala de tempo para o decaimento beta. A produção de núcleons pelo processo s depende da existência de núcleons metálicos mais leves, chamados de sementes. O processo r consiste na rápida captura de nêutrons, de forma que a escala de tempo para a captura é menor que a escala de tempo para o decaimento beta.

¹⁵Explosões de estrelas com mais de 10 massas solares são chamadas de supernovas. Durante o processo de explosão, a estrela pode expelir parte (ou algumas vezes o total) de sua matéria ao meio interestelar, semeando o meio com os elementos que foram produzidos em seu caroço e permitindo que novos elementos

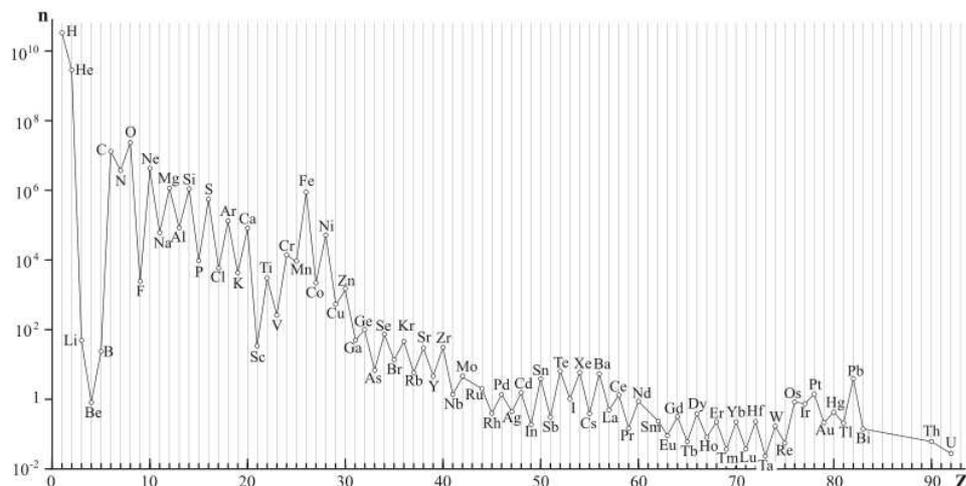


Figura 1.3: Distribuição da abundância dos elementos químicos na vizinhança solar. Imagem retirada da internet: <http://commons.wikimedia.org/wiki/File:ElementsAbundance.svg>

nêutrons é bastante intenso.

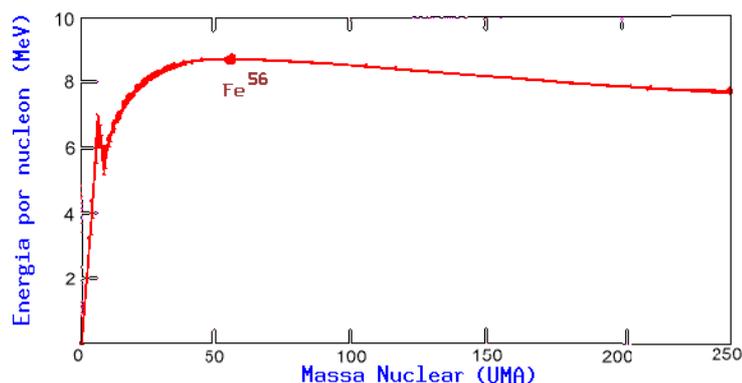


Figura 1.4: O gráfico mostra a energia nuclear de ligação por núcleon, ou seja, a energia de ligação dividida pelo número de prótons e nêutrons. Imagem retirada da internet: <http://astro.if.ufrgs.br/estrelas/node12.htm>

Há uma complexa interação entre as estrelas e o meio interestelar. As estrelas fornecem energia por forma de radiação, reciclam o gás e enriquecem o meio com os elementos por elas produzidos. Assim, as gerações seguintes de estrelas sempre serão mais ricas em metais. E ao final da vida dessas gerações, mais rico também fica o meio interestelar. Mas a troca de matéria não se dá apenas entre estrelas e o meio interestelar. Ocorre também entre galáxias. Uma interação gravitacional entre duas galáxias pode fazer com que material de uma delas seja transferido para a outra.

A troca de material entre estrelas, meio interestelar e galáxias é incessante; isso é, de se formem no material em expulsão ao fornecer um fluxo intenso de nêutrons a serem capturados por outros elementos pré-formados.

fato, a evolução química da Galáxia.

Os principais elementos que formam os organismos vivos são os mais abundantes do Universo e foram todos produzidos em eventos violentos. Com exceção do hidrogênio, foram todos produzidos pelas estrelas. Um processo de vida e morte destes astros permite que estejamos todos aqui.

1.5 As nuvens moleculares

Acredita-se que toda estrela e seus planetas hospedeiros nasçam a partir do colapso gravitacional de uma nuvem molecular. Essas nuvens são regiões do espaço dominadas por gases, predominantemente o H_2 , e pequenos grãos formados de silicatos. O meio interestelar contém incontáveis nuvens moleculares. Existem, basicamente, dois tipos delas: as nuvens difusas e as densas. As nuvens difusas caracterizam-se pelas altas temperaturas e baixas densidades. São nuvens constantemente irradiadas por fontes próximas. Nessa região não é possível o surgimento de moléculas complexas, uma vez que elas são facilmente dissociadas pela radiação. Já as nuvens densas caracterizam-se pela baixa temperatura e alta densidade, tornando-se opacas à radiação. Em regiões mais internas dessas nuvens, moléculas complexas conseguem se formar, pois a radiação das estrelas não consegue penetrar em regiões muito profundas. Elas são barradas pela alta densidade de hidrogênio e pelos grãos porventura existentes nas bordas. Apenas os raios cósmicos conseguem penetrar mais fundo nas nuvens, sendo eles os iniciadores das reações químicas que ali ocorrem. No interior dessas nuvens, escudadas contra qualquer ameaça externa, moléculas se formam com facilidade. Essas nuvens também são berçários estelares. Podem dar origem a centenas de estrelas e, possivelmente, sistemas planetários. Quando em formação, esses planetas podem receber material interplanetário que já tenha sido formado na nuvem de origem. Esse material entregue ao planeta pode influenciar sua evolução físico-química, podendo promover o surgimento da Vida num planeta que esteja na zona de habitabilidade estelar, como a Terra. Falaremos mais a respeito das nuvens moleculares no próximo capítulo.

1.6 Planetas extrassolares

Por muito tempo especulou-se sobre a existência de planetas em órbita ao redor doutras estrelas. *Giordano Bruno* já acreditava na existência de outros sistemas planetários e na possibilidade de existir vida inteligente nestes outros mundos. A descoberta de um planeta extrassolar traria novos rumos ao estudo da Vida e foi exatamente o que aconteceu em meados da década de 90. O ano era 1995 quando uma equipe de pesquisadores confirmou e anunciou a descoberta do primeiro planeta extrassolar (Mayor & Queloz 1995). A

partir deste momento, a descoberta de outros sistemas planetários não parou mais. Até o momento, mais de 300 planetas já foram descobertos¹⁶.

Uma verdadeira corrida vem sendo realizada por equipes de pesquisadores de diversos países na busca por planetas que orbitam outras estrelas. Por ora, apenas planetas gigantes têm sido descobertos. São planetas maiores que Júpiter — os chamados Júpiteres quentes — situados em regiões muito próximas da estrela hospedeira. No entanto, a descoberta de planetas gigantes é um efeito observacional, o que significa que conforme a tecnologia vai avançando, planetas do tipo terrestre poderão ser detectados (Hinze 2009). Este é o objetivo dos cientistas que trabalham com o satélite Corot, que já está em órbita a procura de planetas semelhantes à Terra, além de realizar pesquisas em asterossismologia (Michel *et al.* 2008). Mas a descoberta dos planetas tipo Júpiter, além de trazer novos rumos ao estudo da Vida no Universo, obrigaram os astrônomos a rever suas teorias a respeito da formação planetária (Burrows 2005). Não se esperava encontrar planetas tão grandes orbitando regiões tão próximas às estrelas. Além disso, foi descoberta uma relação entre a metalicidade das estrelas hospedeiras e a presença dos planetas (Gonzalez (1997); Lineweaver & Grether (2006); Haywood (2009)). Descobriu-se que as estrelas que possuem planetas orbitando ao seu redor são quimicamente mais ricas. Mas isso é válido para os planetas do tipo Júpiter. Ainda não podemos dizer que essa correlação exista também entre as estrelas que possuem planetas menores, uma vez que não há estatísticas a respeito pelo fato de não conhecermos, ainda, planetas rochosos do tipo terrestre. No entanto, os chamados “super Terras”¹⁷ têm sido descobertos em torno de uma estrela do tipo M, chamada Gliese 581, e a habitabilidade desses planetas vem sendo investigada (von Bloh *et al.* 2007, Zollinger & Armstrong 2009). Novas gerações de telescópios estão sendo desenvolvidos com o intuito de descobrir planetas do tipo terrestre e, talvez, detectar traços de vida nestes planetas (Cockell *et al.* 2009).

1.7 Considerações

Neste capítulo, passamos por assuntos aparentemente tão distintos como a origem da Vida na Terra e as nuvens moleculares. No entanto, fatores terrestres e extraterrestres atuaram de tal forma que a Vida pudesse surgir na Terra. Se antes se acreditava que a Vida surgisse a partir de material inanimado, hoje se acredita que o material que deu origem ao processo químico que culminaria no surgimento da Vida pode ter tido origem extraterrestre. As moléculas precursoras da Vida são formadas no meio interestelar e são facilmente entregues a um planeta em formação, o que pode influenciar no desenvolvimento posterior deste planeta, como também pode determinar, juntamente com suas

¹⁶Uma lista atualizada dos exoplanetas descobertos pode ser encontrada em <http://exoplanet.eu/catalog.php>.

¹⁷Planetas com massa maior que a da Terra e menor que a dos planetas gasosos, como Urano e Netuno.

características físicas, se a Vida teria potencial de ali se desenvolver. Fica justificada, então, a necessidade de se estudar as biomoléculas no meio interestelar. Elas podem ser a chave para o entendimento de como a Vida se originou ou, ao menos, um conhecimento a mais no vasto e complexo tema que é a origem da Vida.

Capítulo 2

Astroquímica

Em lugares longínquos do espaço, onde a temperatura e a densidade são extremamente baixas, moléculas são lentamente, porém incessantemente, formadas. Estes ambientes inóspitos são as nuvens moleculares (Fig. 2.1).



Figura 2.1: A “Nuvem Negra”, conhecida como Barnard 68. Essa pequena nuvem é suficientemente densa para extinguir quase toda a luz das estrelas localizadas atrás dela. Imagem retirada da internet <http://antwrp.gsfc.nasa.gov/apod/ap990511.html>.

No interior dessas nuvens, numa mistura de gás e poeira, moléculas pequenas e outras mais complexas são formadas uma a uma, num processo que pode levar milhões de anos. As reações químicas entre moléculas dispersas na nuvem são chamadas de *reações na fase gasosa*. Ocasionalmente, as moléculas do gás podem se chocar com os grãos, onde elas

podem ser transformadas em moléculas ainda mais complexas até serem liberadas novamente ao gás. Quando moléculas agregadas aos grãos interestelares reagem, dizemos que essas reações aconteceram na *fase sólida*. Eventualmente, num dado momento, a nuvem começará a colapsar-se. A temperatura da nuvem colapsante aumentará, a composição química local mudará e, finalmente, nascerão estrelas. Ao colapsar-se, a nuvem poderá dar origem não só a estrelas, mas também a sistemas planetários em torno destas. As moléculas produzidas nas nuvens podem ser incorporadas a pequenos corpos, como os cometas e, então, ser entregues a planetas rochosos que se encontrem nas zonas de habitabilidade estelar. Uma vez depositadas nesses planetas, as moléculas formadas na nuvem podem influenciar diretamente a evolução bioquímica que porventura ocorrerá neles.

Este processo ocorre a todo tempo. Mas as condições em que ocorrem são tão extremas que sua observação não é uma tarefa trivial. Apesar dessas dificuldades, avanços tecnológicos têm possibilitado um entendimento detalhado do complexo processo de evolução das nuvens moleculares.

Ao findar a vida de uma estrela, o material que foi produzido no interior estelar é lançado ao meio interestelar, enriquecendo-o. Cerca de 99% da massa de uma nuvem molecular é composta por átomos na fase gasosa, e o restante está sob a forma de partículas de poeira. O hidrogênio é, de longe, o elemento mais abundante, seguido de hélio, oxigênio, carbono e nitrogênio.

As nuvens não são uniformes; possuem regiões mais frias e escuras, pelo fato de as partículas de poeira absorverem a radiação das estrelas. A única radiação que consegue penetrar eficientemente as nuvens são os raios cósmicos¹. Mesmo assim, essas são as regiões cuja química é mais rica. Ao absorver a radiação, as partículas de poeira protegem as moléculas ali existentes da destruição imediata, permitindo que elas tenham tempo de reagir e formar outras moléculas mais complexas. Além disso, as partículas de poeira funcionam como catalizadoras de moléculas complexas, oferecendo um local apropriado para a sua formação, algo que seria muito difícil, ou até impossível, de ocorrer na fase gasosa.

A evolução química de uma nuvem molecular leva um longo tempo. As densidades lá são tão baixas — um vácuo muito superior ao que é possível obter em laboratório — que a probabilidade de uma colisão entre os átomos é extremamente pequena. Mesmo assim, as nuvens dispõem de tempo suficiente para que as reações ocorram, até que moléculas complexas possam ser formadas. No entanto, o equilíbrio químico pode não ser atingido antes do tempo de colapso da nuvem.

Evidências espectroscópicas confirmam a presença de uma variedade enorme de moléculas, tanto na fase gasosa, como nos mantos que cobrem as superfícies dos grãos de poeira. Algo em torno de 170 espécies moleculares já foram identificadas na fase gasosa, algu-

¹Partículas altamente energéticas provenientes de todas as direções do espaço; também interagem com a alta atmosfera. São os principais causadores das mutações gênicas.

mas contendo até treze átomos. Cerca de metade dessas moléculas são orgânicas, das quais muitas também são encontradas na Terra, tais como nitrilas, aldeídos, cetonas, álcoois, éteres, aminos e amidos, bem como hidrocarbonetos de longas cadeias de carbono. Além disso, estudos no infravermelho sugerem a presença de hidrocarbonetos aromáticos policíclicos contendo 100 ou mais átomos de carbono. De todas as moléculas já detectadas, apenas cerca de quarenta não possuem carbono presente em sua estrutura.

É mais fácil fazer espectroscopia de moléculas na fase gasosa do que na fase sólida. Informações sobre a fase gasosa são fornecidas, principalmente, pela espectroscopia rotacional. Assim como um átomo, uma molécula possui diferentes estados eletrônicos. No entanto, seus espectros são mais complexos, uma vez que uma molécula pode ter diferentes tipos de excitação. Falaremos mais sobre isso adiante. De qualquer forma, a radiação emitida por uma molécula, ao mudar seu estado rotacional, encontra-se na região das microondas, que é mais fácil de observar da superfície terrestre, uma vez que essa radiação não é absorvida pelo vapor d'água presente na atmosfera. O estudo dos grãos, ao contrário, deve ser feito a partir de telescópios situados fora da atmosfera. A Fig. 2.2 ilustra bem esse fato, mostrando esquematicamente as radiações que conseguem penetrar a atmosfera terrestre, chegando à superfície, e as que são retidas pela atmosfera, devido à absorção de algumas determinadas moléculas.

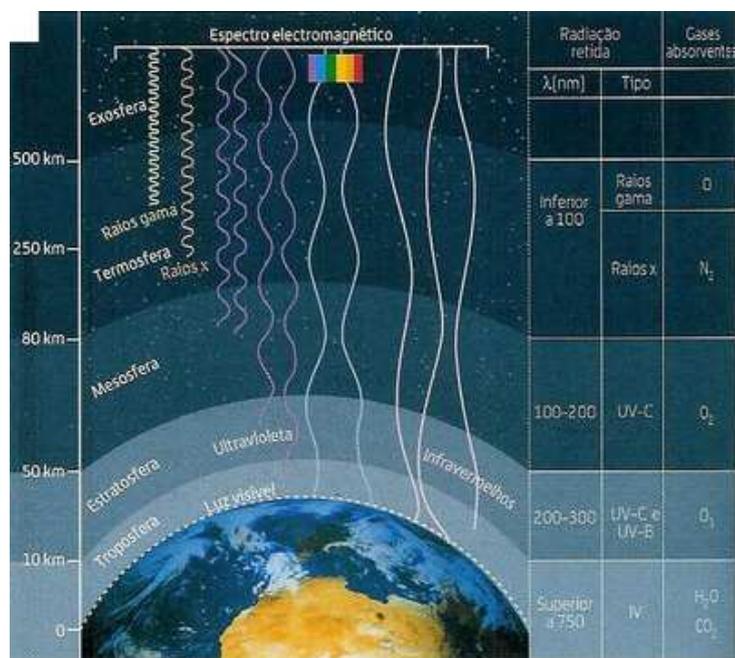


Figura 2.2: A radiação proveniente do espaço pode ser parcial ou totalmente absorvida pela atmosfera terrestre, dependendo de quão energética ela é. Imagem retirada da internet: <http://jjsteixeira.blogspot.com/2008/01/atmosfera-como-filtro-da-radiao-solar.html>.

A química da fase gasosa é dominada por reações do tipo íon-molécula. A radiação cósmica produz íons com energia para iniciar essas reações. Como o H₂ e o He são as

espécies mais abundantes, os principais íons formados inicialmente são H_2^+ , H^+ e He^+ . Como essas reações requerem pouca, ou nenhuma energia de ativação, podem ocorrer mesmo a temperaturas muito baixas, da ordem de 10 K.

Embora a química da fase gasosa seja muito importante, as reações que acontecem sobre as superfícies dos grãos também o são. A molécula mais abundante do universo, H_2 , não seria tão abundante se fosse formada apenas na fase gasosa. Dois átomos de hidrogênio em colisão carregam tanta energia que é necessária a presença de um terceiro corpo para absorver essa energia, possibilitando que a molécula se forme. Desta forma, a combinação de hidrogênio formando H_2 deve ser favorecida na superfície dos grãos.

Vejamos, com mais detalhes, a química do meio interestelar.

2.1 Transições moleculares

A identificação de moléculas no espaço é uma tarefa bastante complexa. A interação entre os estudos de laboratório e as observações astronômicas é crucial para a correta identificação das moléculas astronômicas. Espectroscopia de alta-resolução é a principal ferramenta da astronomia molecular. Existem diferentes tipos de técnicas espectroscópicas, algumas melhores que outras. A mais importante é a espectroscopia de microondas — referente ao movimento rotacional das moléculas, e infravermelha — referente aos movimentos vibracionais. As dificuldades para a identificação de uma molécula aumentam conforme o número de átomos que a constituem. Para as moléculas diatômicas, as técnicas espectroscópicas funcionam bem, mas para moléculas com três ou mais átomos a identificação se torna bastante complexa. Espectroscopia infravermelha é bastante usada para a identificação dos grupos funcionais das moléculas orgânicas, apesar de não ser suficiente para a identificação das moléculas propriamente ditas, já que muitas podem ser formadas pelos mesmos grupos funcionais. Os grupos funcionais são o conjunto de átomos presentes em determinados tipos de moléculas como, por exemplo, o grupo amino $-\text{NH}_2$, que caracteriza os aminoácidos, e o grupo $-\text{COOH}$, que caracteriza os ácidos.

Uma outra técnica bastante usada é a espectroscopia ultravioleta. A alta energia dos fótons associada à radiação ultravioleta leva a um rearranjo dos elétrons nas moléculas. Algumas moléculas, quando estão em estados eletrônicos excitados, tornam-se mais reativas, aumentando a possibilidade de uma reação ocorrer.

O movimento de rotação de uma molécula está associado à pequena separação entre os níveis quânticos de energia de todas as moléculas isoladas. Elas possuem estados rotacionais específicos, não podendo realizar arbitrariamente esse tipo de movimento. A escala de tempo de rotação de uma molécula é, tipicamente, de nanosegundo. Os fótons emitidos numa transição rotacional possuem grandes comprimentos de onda e, obviamente, frequências muito baixas, da ordem de GHz, que correspondem aos comprimentos de onda na faixa das microondas e milimétricas.

Podemos associar um número N , chamado *número quântico rotacional* aos níveis de energia rotacional de uma molécula diatômica. O número quântico rotacional N pode admitir apenas valores inteiros ≥ 0 . Para as moléculas poliatômicas temos que os momentos angulares de cada par de átomos se somam resultando num momento angular total J . No caso de uma molécula diatômica, temos que $J = N$. Os níveis de energia de uma molécula diatômica, E_j , são dados por

$$E_j = \frac{h}{8\pi^2 I} J(J+1) - DJ^2(J+1)^2, \quad (2.1)$$

onde definimos

$$\frac{h}{8\pi^2 I} \equiv B, \quad (2.2)$$

tal que J é o número quântico rotacional, que pode admitir os mesmos valores estabelecidos para N , B é a chamada constante rotacional, D é a constante de distorção centrífuga, h é a constante de Planck e I é o momento de inércia, tal que

$$I = \mu \langle r^2 \rangle, \quad (2.3)$$

onde r é a separação entre os átomos, e μ é a massa reduzida do sistema.

O movimento de rotação das moléculas pode ser tratado, numa primeira aproximação, como um corpo rígido em rotação, ou seja, um rotor rígido, onde se adota que a constante de distorção centrífuga, D , é igual a zero. Essa aproximação funciona bem quando os números quânticos J envolvidos na transição são baixos, como normalmente acontece para as moléculas no meio interestelar. Os termos de ordem mais alta devem ser adicionados conforme a molécula começa a rotacionar mais rapidamente. Levando em consideração a equação 2.1, a separação entre os níveis de energia $J = 0 \rightarrow J = 1$, $J = 1 \rightarrow J = 2$, etc, é dada por

$$\nu = 2B(J+1), \quad (2.4)$$

tal que a separação entre os níveis de energia seja $2B$. Cálculos da constante rotacional mostram que B é da ordem de 30 GHz para moléculas pequenas, o que corresponde à região de microondas média. Ao absorver um fóton com comprimento de onda na região das microondas, a energia do fóton também é absorvida, ou seja, o momento angular do fóton é absorvido pela molécula, que agora começa a rotacionar mais rapidamente. Neste processo, o fóton é aniquilado. A Lei da Conservação do momento angular faz com que

surja uma regra de seleção, tal que J pode mudar apenas de ± 1 unidade de momento angular — momento angular do fóton absorvido — de forma que

$$\Delta J = \pm 1. \quad (2.5)$$

A separação entre as transições no espectro de microondas é dada pela equação 2.4. Assim, se o espaço entre os níveis de energia for conhecido, pode-se determinar a constante rotacional e o momento de inércia, além da distância média entre os núcleos de dois átomos ligados de uma molécula.

Uma outra forma de uma molécula alterar o seu estado de energia é através de movimentos de vibração. O espectro vibracional de uma molécula é determinado pelo espaçamento entre os seus níveis de energia vibracional. Resolvendo a equação de Schrödinger para uma mola simples como modelo de uma ligação química numa molécula diatômica, chegamos à seguinte expressão para os níveis de energia vibracional:

$$E(\nu) = h\nu_e \left(\nu + \frac{1}{2} \right) - \nu_e x_e \left(\nu + \frac{1}{2} \right)^2. \quad (2.6)$$

O primeiro termo da equação corresponde à aproximação de um oscilador harmônico, tal que ν , o número quântico vibracional, admite valores inteiros maiores que, ou igual a, zero, e ν_e é a frequência fundamental. O segundo termo da equação permite a quebra da ligação química e descreve os movimentos não harmônicos da mola quando esticada, sendo x_e a constante do movimento não harmônico. Se ela for esticada demais, pode quebrar-se. O mesmo vale para uma ligação química. Não há uma grande diferença entre os movimentos de rotação e vibração de uma molécula, a não ser o ponto de energia zero. O número quântico vibracional pode ser zero; no entanto, a energia correspondente a este estado é não nula, tendo o valor $\frac{1}{2}h\nu_e$, tal que para todas as temperaturas, mesmo no zero absoluto, a ligação química estará sempre vibrando. A frequência fundamental de vibração, ν_e , na aproximação de um oscilador harmônico simples, é dada por:

$$\nu_e = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\kappa}{\mu}}, \quad (2.7)$$

onde κ é a constante da força para a ligação química em questão, e μ é a massa reduzida da molécula. As transições entre os níveis de energia vibracional estão no infravermelho e a radiação correspondente atravessa a atmosfera terrestre sem grandes dificuldades. Em geral, se uma molécula possui um espectro vibracional é por que há uma mudança no momento de dipolo ocasionada pela vibração, mas não há uma regra clara para a mudança do número quântico vibracional devido aos termos não harmônicos. A regra de seleção torna-se, então, tendenciosa, com transições a envolver $\Delta\nu = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$

observadas rotineiramente, apesar de a intensidade da transição decrescer com o aumento da mudança do número quântico.

A molécula pode realizar vários movimentos ao mesmo tempo. Ela pode rotacionar e vibrar simultaneamente. Cada nível vibracional tem associados níveis rotacionais, cada qual podendo estar ou não povoado. O espectro produzido por uma molécula por transições rotacionais e vibracionais é chamado de espectro ro-vibracional. Em laboratório pode-se obter espectros ro-vibracionais bem definidos, mostrando as transições entre o nível ro-vibracional mais baixo e o nível vibracional mais alto. Este espectro pode ser comparado com o espectro obtido de uma pequena molécula astronômica. Mas dificuldades surgem quando se trata de moléculas poliatômicas. Conforme o tamanho da molécula aumenta, seu momento de inércia também aumenta, permitindo mais níveis de energia dentro de cada banda vibracional. As bandas vibracionais são dadas pelo número $3\mathcal{N} - 6$ — \mathcal{N} é o número de átomos de uma molécula — e este número pode ser bastante grande mesmo para moléculas de tamanhos razoáveis. Por exemplo, para a molécula de água, temos que $\mathcal{N} = 3$, tal que temos, então, três modos vibracionais. Neste caso, o perfil das bandas vibracionais ainda pode ser resolvido. O mesmo não acontece com diversas outras moléculas, que apresentam vários modos vibracionais.

No caso da glicina, o aminoácido mais simples, a situação complica-se bastante. Este aminoácido possui 10 átomos, logo, 24 modos vibracionais. A análise do espectro vibracional se reduz à identificação dos grupos funcionais associados às ligações químicas com vibrações particulares em frequências características. Assim, no caso da glicina, o espectro vibracional associado aos grupos $-\text{NH}_2$ e $-\text{COOH}$ pode ser visto e estes grupos podem ser identificados. No entanto, a própria molécula da glicina não pode ser inequivocadamente identificada por este método, pois diversas são as moléculas que possuem esses grupos funcionais. Todos os modos vibracionais dos grupos funcionais ocorrem no infravermelho.

Espectroscopia no visível envolve transições entre níveis de energia eletrônicos das moléculas associados a diferentes configurações eletrônicas e diferentes estruturas das ligações químicas. Cada nível eletrônico possui uma diversidade de níveis de energia vibracional, que por sua vez possui uma variedade de níveis de energia rotacional. O espaçamento entre os níveis rotacionais é agora uma medida da diferença das constantes rotacionais para os estados de mais alta e mais baixa energia, o que pode ter um valor muito pequeno. A separação entre os estados eletrônicos de uma molécula está na faixa do visível, tipicamente com um comprimento de onda da ordem de 500 nm, na região da cor verde. Convertendo a frequência de transição do visível para comprimento de onda, encontramos 20000 cm^{-1} . Esta transição é perceptível ao olho humano, que consegue captar radiação com comprimentos de onda de 300 a 800 nm.

2.2 O meio interestelar

A maior parte da radiação na região do visível que recebemos da Galáxia provém das estrelas. No entanto, a existência de regiões frias pode ser inferida através das linhas de absorção e espalhamento que observamos nos espectros gerados pela radiação no visível, bem como linhas de emissão em grandes comprimentos de onda. Observações em rádio e infravermelho têm ajudado a revelar a existência de vastas nuvens interestelares, formadas por gases e material particulado. A maior parte da matéria interestelar encontra-se no estado gasoso (cerca de 99%), enquanto que o restante é formado por partículas de poeira. Nas regiões mais densas do meio interestelar, cerca de 170 espécies moleculares já foram descobertas na fase gasosa. O estudo dessas moléculas e seus espectros permite um amplo conhecimento das condições físico-químicas das densas nuvens interestelares. Por exemplo, sabemos que a temperatura nelas se encontra na faixa de 10 a 70 K e a densidade total do gás está entre 10^4 a 10^8 cm^{-3} . São regiões muito extensas, podendo chegar a 100 pc de diâmetro, com uma massa total de 10^6 massas solares. Todo o material que compõe as nuvens está num constante processo de colapso, dando origem às estrelas. O material circum-estelar é mais denso e mais quente do que o material pré-colapso e pode ser estudado separadamente. A fase sólida das nuvens densas consiste de pequenas partículas de poeira ($0.1 \mu\text{m}$) e são formadas por núcleos de silicados encobertos por um manto de gelos condensados do gás.

2.2.1 Moléculas no meio interestelar e circum-estelar

As primeiras moléculas detectadas no espaço foram CH, CN e CH^+ (Swings & Rosenfeld (1937); McKellar (1940); Douglas & Herzberg (1941)), e desde então cerca de 170 moléculas e íons moleculares foram detectados². Os elementos encontrados nessas moléculas são H, C, N, O, S, Si, P, F, Cl, Al, Na e Mg, sendo H, C, N e O — conhecidos como “CHON” — os mais abundantes. Há muitos radicais como, por exemplo, a hidroxila, detectada em 1963 (Weinreb *et al.* 1963) por observações em rádio (espectro rotacional) e isômeros entre as espécies neutras, como o isocianeto de hidrogênio, HNC, descoberto em 1973 (Snyder & Buhl 1973), além das moléculas iônicas como, por exemplo, a molécula HCS^+ (Thaddeus *et al.* 1981), detectada na década de 1980.

Há um alto grau de insaturação³ entre os compostos que contêm carbono, mas poucas cadeias ramificadas e alguns compostos cíclicos. As espécies são pouco oxidadas e algumas possuem mais de um átomo mais pesado que o hidrogênio que não seja o carbono. Tendo em vista tanta variedade de espécies nas nuvens moleculares, poderíamos cogitar se essas moléculas não seriam a base para a construção das biomoléculas. A Vida teria sido

²Uma lista atualizada das moléculas interestelares descobertas pode ser encontrada no site <http://www.astrochymist.org/>.

³Ligações duplas ou triplas entre os átomos de carbono.

semeada por moléculas produzidas nas regiões frias e escuras das nuvens moleculares?

Pensando na origem da Vida, concentremo-nos nas moléculas orgânicas que talvez possam atuar como precursoras de outras moléculas importantes para a Vida e verifiquemos quais moléculas estão presentes nas nuvens moleculares e como elas são formadas.

O único alcano detectado diretamente no meio interestelar, até o momento, é o metano (Lacy *et al.* 1991), mas isso se deve às dificuldades técnicas para a identificação dessas moléculas. Todos os alcanos são moléculas não polares e, portanto, não possuem um espectro puro de rotação. Entretanto, há uma vibração permitida para o metano que emite no infravermelho e, com o pequeno momento de inércia, o seu espectro vibracional-rotacional pode ser observado, e a molécula pôde ser identificada com confiança.

Dos alcenos, apenas o etileno, cuja fórmula é C_2H_4 , foi detectado (Betz 1981), e dos aromáticos, apenas o benzeno foi detectado inequivocadamente (Cernicharo *et al.* 2001). O cianeto de hidrogênio, HCN, é de interesse especial para a questão da origem da Vida. A polimerização⁴ do HCN pode dar origem a moléculas que propagam informação, condição necessária para a auto-replicação. A questão de se as nucleobases podem ser sintetizadas no meio interestelar é fundamental quando consideramos a problema da origem da Vida. É possível que a química da fase gasosa no meio interestelar possa sintetizar adenina a partir da polimerização do HCN (Glaser *et al.* 2007). A sobrevivência dessas espécies na atmosfera planetária vai depender das características do planeta: oxidação de moléculas orgânicas como o HCN seria rápida numa atmosfera como a da Terra atual, mas não se sabe exatamente como seria na atmosfera da Terra primitiva, que hoje se acredita não ter sido tão redutora, como se acreditava à época dos experimentos de Miller, ou num ambiente baseado em alcanos, como Titã.

A oxidação dos alcanos introduz polaridade na molécula, produzindo álcoois, aldeídos e cetonas. Essas moléculas são essenciais para a formação da maioria das biomoléculas, tais como açúcares e ácidos. Entretanto, a presença de ácidos carboxílicos e aminoácidos no meio interestelar é algo ainda controverso devido às incertezas nas observações dessas espécies e dificuldades de interpretação dos complexos espectros moleculares. No entanto, pesquisadores têm conseguido bons resultados experimentais sobre a formação de ácidos carboxílicos e aminoácidos na fase gasosa (Blagojevic *et al.* 2003). A complexidade do espectro de microondas da glicina, apesar de bem conhecida, dificulta a sua detecção no meio interestelar. No entanto, alguns relatos de sua detecção, ainda que inconclusivos, têm sido feitos (Ohishi 2008), e diversas pesquisas têm sido direcionadas para a busca de moléculas pré-bióticas no meio interestelar (Cunningham 2007; Jones 2007; Rmijan 2004; Wirstrom 2007).

A composição química das nuvens moleculares varia conforme elas vão evoluindo no tempo, de nuvens escuras, como a TMC-1, a nuvens moleculares gigantes, como a nuvem

⁴Reações químicas que dão origem às macromoléculas, como os cianopolíenios, que são complexas moléculas formadas por monômeros de HCN

de Órion. A nuvem de Órion contém várias espécies saturadas como o etanol (Zuckerman *et al.* 1975), $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$, e o seu análogo contendo CN, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CN}$ (Johnson *et al.* 1977), o ácido acético (Mehringer *et al.* 1997), e a metilamina, CH_3NH_2 (Kaifu *et al.* 1974).

Mas é improvável que todas as moléculas orgânicas possam ser formadas apenas na fase gasosa. Muitas devem ser formadas sobre as superfícies dos grãos, provavelmente nos mantos de gelo, apesar de que as moléculas mais exóticas devam requerir fotoquímica ou fotoprocessamento para serem sintetizadas. Assim, moléculas complexas devem passar pelas duas fases durante a sua formação. Isso justifica a necessidade de um melhor entendimento da química do meio interestelar, como reações na fase gasosa podem resultar na síntese orgânica e quais moléculas sobreviverão e quais não reagirão ante distintas condições físico-químicas iniciais para as nuvens. O desenvolvimento da química do meio interestelar e o seu entendimento segue os seguintes passos:

- 1 Detecção das moléculas na nuvem;
- 2 Determinação da abundância molecular na nuvem;
- 3 Estimativa das condições físicas da nuvem;
- 4 Extinção óptica e avaliação do papel das partículas de poeira;
- 5 Desenvolvimento de uma rede de reações químicas de todos os possíveis caminhos relevantes que possibilitam a síntese de uma molécula;
- 6 Resolução das equações da cinética química e comparação dos resultados com a abundância molecular observada;

Conhecendo as características físicas das nuvens e tendo identificado as moléculas que se encontrem em seu interior, bem como o papel dos grãos de poeira, podemos desenvolver um modelo de cinética química e simular a evolução da abundância dessas moléculas com o tempo e, depois, comparar os resultados simulados com os observados. Esses passos dão-nos uma direção para que possamos estudar a química do meio interestelar, mas também servem para o entendimento da química dos cometas, das atmosferas planetárias e da química pré-biótica.

2.2.2 Ambientes do meio interestelar

Existem quatro tipos de ambientes (também chamadas “fases”) do meio interestelar cujas condições locais são bem conhecidas:

- 1 Nuvens difusas;
- 2 Nuvens moleculares gigantes;
- 3 Meio circum-estelar;
- 4 Regiões fotoionizadas;

Vamos ver algumas características desses ambientes.

Nuvens difusas: não possuem morfologia definida e são semitransparentes à radiação no espectro visível. Suas temperaturas são muito altas devido à exposição à radiação estelar, estando, prioritariamente, na forma atômica. Podem conter algumas moléculas mais simples nas regiões mais internas.

Nuvens moleculares gigantes: possuem um tempo de vida⁵ da ordem de 10^6 - 10^8 anos antes que colapsem e são o local de nascimento das estrelas. A Nebulosa de Órion (Fig. 2.3), como exemplo, está localizada a cerca de 500 pc de distância da Terra e possui um diâmetro de cerca de 15.3 pc. A temperatura no interior da nuvem é da ordem de 10 K e a densidade atômica de 10^4 - 10^8 cm^{-3} . A composição química é bastante diversificada, possuindo desde pequenas moléculas diatômicas, até grandes moléculas poliatômicas e partículas de poeira encobertas por um manto de gelo.



Figura 2.3: Imagem em cores falsas da Nebulosa de Órion. Imagem retirada da internet: <http://hubblesite.org/gallery/album/entire/pr2006001i/>.

Meio circum-estelar: é a região ao redor das estrelas. Suas características dependerão do tipo da estrela e do modo como ela vai evoluir. Protoestrelas e estrelas muito jovens possuem um alto fluxo de fótons no ultravioleta e qualquer molécula presente nessa

⁵Alguns autores sugerem um tempo máximo de vida para uma nuvem molecular da ordem de 10^7 (Blitz & Shu 1980) ou até 10^9 anos (Xiang *et al.* 1984). Entretanto, estudos mais recentes de astroquímica usam tempos entre 10^6 (Wakelan *et al.* 2005) e 10^8 anos (Quan & Herbst 2007), mostrando que este ainda é um assunto em discussão e que a expectativa de vida considerada nos cálculos é um tanto arbitrária.

região, também chamada de HII, será fotodissociada ou fotoionizada. A química na superfície dos grãos pode ser bastante rica, pois as estrelas podem ejetar grãos durante o seu colapso e, uma vez que a molécula consiga se abrigar na superfície dos grãos, ela pode sobreviver ao fluxo de fótons da estrela.

Regiões fotoionizadas: são regiões ao redor de estrelas onde o intenso campo de radiação destrói todas as moléculas, deixando apenas átomos, dos quais alguns são ionizados.

Essas características devem ser bem determinadas antes que se possa entender o balanço de energia e a química presentes nessas regiões. Fluxos de fótons muito intensos quebram todas as ligações químicas, impossibilitam a formação de moléculas e ionizam os átomos. Mas, conforme a densidade aumenta, os fótons muito energéticos são absorvidos e as moléculas começam a se formar. Na fase gasosa, as reações químicas são, em geral, muito lentas devido às baixas temperaturas. As moléculas que se condensam sobre a superfície das partículas de poeira continuam a ser fotoprocessadas pela luz das estrelas e também continuam a ser bombardeadas pelos raios cósmicos, mas dificilmente são destruídas.

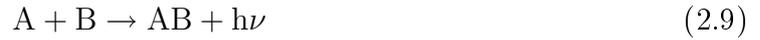
2.3 Reações químicas no meio interestelar

Existem muitas possibilidades de ocorrência de reações químicas entre moléculas no meio interestelar. A simples colisão entre dois átomos pode resultar numa nova ligação química. O inverso também pode ocorrer, ou seja, uma molécula pode dissociar-se se absorver energia suficiente para que suas ligações químicas sejam quebradas. Normalmente, a formação de uma molécula libera energia, ou seja, é exotérmica, e quando uma molécula é dissociada, há perda de energia. A seguir, veremos alguns exemplos de reações químicas que ocorrem no meio interestelar na fase gasosa. Maiores detalhes e exemplos de cada reação são apresentados no próximo capítulo. Nos exemplos a seguir, A, B e D representam diferentes moléculas reagindo entre si, r_c é o raio cósmico e $h\nu$ representa a energia de um fóton de frequência ν .

Ionização pelos raios cósmicos — os átomos e moléculas dispersos no espaço estão sujeitas ao fluxo constante de raios cósmicos. Quando uma partícula de alta energia ioniza um átomo ou uma molécula, um elétron é ejetado fazendo, desse tipo de reação, uma importante fonte de moléculas iônicas e de elétrons os quais poderão ionizar outras espécies:



Associação radiativa — quando dois átomos colidem, o excesso de energia gerada pela colisão precisa ser liberado para que a molécula consiga formar-se. Uma maneira de remover a energia de uma ligação química é através da liberação de radiação, tendo como resultado uma molécula radiativamente estável:



Fotodissociação — este processo é o inverso da reação exemplificada anteriormente, onde uma molécula absorve um fóton com energia suficiente para quebrar a ligação química, dissociando a molécula:



Reações neutro-neutro — esse tipo de reação ocorre muito lentamente, não tendo muita importância na química de uma nuvem molecular, sofrendo restrições por causa da energia de ativação:



Reações íon-molécula — reações desse tipo dominam a química das nuvens moleculares, sendo a principal maneira pela qual as moléculas se formam:



Fotoionização — moléculas expostas a um intenso campo de radiação podem ter um ou mais elétrons removidos de seu orbital molecular. O processo de ionização pode ser escrito da seguinte forma:



Transferência de carga — reações de transferência de carga possuem muitas variações, mas todas requerem a presença de íons e elétrons formados, tanto por fotoionização, como por colisões com raios cósmicos energéticos (eq. 2.8):



Recombinação radiativa — um elétron livre e um íon atômico recombina-se emitindo um fóton:



Recombinação dissociativa — ocorre quando uma molécula neutra ou iônica, ao recombinar-se com um elétron tem quebrada a ligação entre partes da molécula, formando duas espécies mais simples:



2.4 Taxas das reações químicas

A química do meio interestelar depende das condições físicas e das moléculas presentes na nuvem em questão, tal que todas as reações são controladas pelas suas respectivas taxas sob as condições físicas locais. Vamos considerar uma reação hipotética: suponhamos que dois reagentes, A e B, reagem dando origem a dois produtos C e D:



Essa reação ocorre a uma determinada taxa k , que aqui chamaremos de k_1 . A reação seguinte dá-se entre os produtos da reação anterior, que agora serão os reagentes, e produzirão dois outros produtos quaisquer, assim:



tal que a taxa com que essa reação ocorre é dada por k_2 .

Podemos escrever uma equação para a variação da concentração de uma molécula qualquer com o tempo. Por exemplo, vamos escrever a equação para a molécula C. Na primeira reação, a molécula C está sendo formada, enquanto que na segunda ela está sendo destruída. Sua equação terá, então, dois termos: um positivo e outro negativo. Assim, a equação para a evolução temporal da concentração da molécula C fica da seguinte forma:

$$\frac{d[C]}{dt} = k_1[A][B] - k_2[C][D] \quad (2.20)$$

O símbolo $[]$ na equação acima refere-se à abundância molecular. Percebemos que a molécula C é criada na primeira reação a uma taxa k_1 e destruída na reação seguinte a uma taxa k_2 , daí os sinais positivo e negativo na equação. Uma equação análoga pode ser escrita para as outras moléculas. Temos, assim, um sistema de equações diferenciais que descreve a evolução da abundância das moléculas no tempo para todas as moléculas envolvidas. Essas equações são acopladas, ou seja, precisam ser resolvidas simultaneamente, pois a evolução da abundância de uma molécula depende da evolução da abundância de outras. Quando muitas moléculas participam das reações, teremos um sistema de equações diferenciais tão grande quanto o número de moléculas presentes, e uma equação pode ter tantos termos quanto o número de moléculas que participam diretamente da formação ou destruição dessa determinada molécula.

2.4.1 A dependência com a temperatura da constante da reação

Normalmente, a taxa com a qual uma reação ocorre aumenta com a temperatura. Um exemplo disso é a hidrólise da sacarose, a qual ocorre 4.13 vezes mais rapidamente à temperatura corporal (35°C) do que à temperatura ambiente (25°C). Se para uma diferença de temperatura não muito grande a diferença da taxa da reação é considerável, podemos esperar, então, que a uma temperatura de 10 K, nas nuvens moleculares, as taxas serão extremamente baixas.

Medidas das taxas das reações em laboratório mostram que as taxas seguem uma lei empírica. Essa lei é dada pela equação de Arrhenius e mostra a dependência com a temperatura:

$$k(T) = A \exp \left[-\frac{E_a(T)}{RT} \right]. \quad (2.21)$$

onde A [s^{-1}] é o fator pré-exponencial, que leva em conta a seção de choque das moléculas, T é a temperatura [K], E_a é a energia de ativação da reação [$J \text{ mol}^{-1}$], e R é a constante universal dos gases ideais [$J \text{ mol}^{-1}K^{-1}$].

Como exemplo, vamos considerar a reação



Para esta reação, A possui um valor de $8.0 \times 10^{10} s^{-1}$, que é um valor aproximado para a taxa de colisão à temperatura ambiente, e $E_a = 42 \text{ kJ mol}^{-1}$, que possui a mesma ordem

de magnitude da energia requerida para se quebrar uma ligação química fraca. Algumas considerações sobre a dinâmica das colisões dão-nos um maior entendimento sobre a forma da equação de Arrhenius, especialmente a dependência à temperatura. A colisão de dois reagentes, dando origem a produtos, é um tema que envolve teoria quântica, tal que não vamos entrar em detalhes disso aqui.

Nem todas as colisões resultam em reação química. Considerando moléculas polares, se uma colisão ocorrer entre as partes não reativas das moléculas, a reação não vai ocorrer. Apenas algumas colisões são favorecidas para a formação de uma ligação química numa geometria tridimensional. Precisamos incluir um fator, P , que leve esse fato em consideração na equação da constante da reação. Mas também é preciso haver energia suficiente para quebrar uma ligação e formar uma nova, respeitando o balanço energético exigido pela Termodinâmica. A energia requerida é o termo exponencial que envolve a energia de ativação na Eq. 2.21. Combinando o número de colisões com o fator de correção P e a energia de ativação, temos uma expressão para a constante da reação com a correta dependência com respeito à temperatura:

$$k(T) = P\sigma_{AB} \left(\frac{8kT}{\pi\mu} \right)^{\frac{1}{2}} N_B N_A \exp \left[-\frac{E_A}{RT} \right]. \quad (2.23)$$

onde N_A e N_B são as densidades numéricas das moléculas A e B, respectivamente, σ_{AB} é a seção de choque da colisão entre as moléculas, T é a temperatura e μ é a massa reduzida do sistema de moléculas. A unidade da constante da reação é $[\text{cm}^3\text{s}^{-1}]$. A equação 2.23 pode ser simplificada para

$$k(T) = \alpha \left(\frac{T}{300} \right)^\beta \exp \left[-\frac{\gamma}{T} \right], \quad (2.24)$$

onde α , β e γ são parâmetros obtidos experimentalmente ou, algumas vezes, apenas mediante cálculos teóricos.

Mas existem diferentes tipos de reações. Para as reações de ionização por raios cósmicos, a constante é dada da seguinte forma:

$$k(T) = \alpha [\text{s}^{-1}], \quad (2.25)$$

e, para reações fotoinduzidas:

$$k(T) = \alpha \exp [-\gamma A_\nu] [\text{s}^{-1}], \quad (2.26)$$

onde A_ν é a extinção da radiação nos comprimentos de onda do visível devido à absorção

da radiação das estrelas por parte dos grãos presentes na nuvem. As constantes das reações que ocorrem nas superfícies dos grãos ainda não são bem conhecidas.

Em princípio, é possível agora construir uma rede completa de reações químicas interconectadas, e um modelo cinético de uma nuvem molecular pode ser desenvolvido.

2.4.2 Aproximação do estado estacionário

Uma estratégia útil para a resolução de um modelo complexo de cinética química é a chamada *aproximação do estado estacionário*. O sistema de equações diferenciais para as reações químicas deve ser resolvido com respeito ao tempo para que se possa compreender a variação temporal das concentrações das espécies químicas. Essas equações podem ser resolvidas numericamente, e a solução depende apenas do poder computacional. No entanto, pode ser útil considerar um tempo no qual todas as reações já se equilibraram e as concentrações de todas as espécies atingiram um valor constante. Esse equilíbrio químico pode nunca acontecer antes do colapso da nuvem, mas serve para algumas análises.

A aproximação do estado estacionário permite que as concentrações das espécies moleculares sejam determinadas considerando que nada mais muda significativamente com o tempo.

Voltemos à reação hipotética mostrada antes. Quando a aproximação do estado estacionário é considerada, a equação 2.20 fica da seguinte forma:

$$\frac{d[C]}{dt} = k_1[A][B] - k_2[C][D] = 0 \quad (2.27)$$

e a concentração da molécula C pode ser dada por:

$$[C] = \frac{k_1[A][B]}{k_2[D]}. \quad (2.28)$$

A concentração do estado estacionário pode ser comparada com as concentrações observadas. Fazendo-se essa aproximação, transformamos o sistema de equações diferenciais acopladas num sistema de equações algébricas, facilitando sua resolução. No entanto, estudos mostram que as nuvens moleculares colapsam antes de atingir esse equilíbrio químico.

2.4.3 Energia de ativação

A energia de ativação é uma medida da quantidade de energia que uma reação precisa adquirir do ambiente para que ela possa começar. É uma barreira energética.

A barreira de energia é uma medida de quantas ligações químicas precisam ser quebradas ou formadas a partir da quantidade de energia disponível para, saindo do estado inicial dos reagentes, chegar ao estado final dos produtos. A energia de ativação pode ser

alterada com a introdução de um catalisador, que pode ser a superfície de um grão de poeira, no contexto astroquímico. A energia interna de um gás a uma dada temperatura é dada pela expressão:

$$\varepsilon(T) = \frac{3}{2}RT, \quad (2.29)$$

onde R é a constante do gás [kJ mol^{-1}] e T é a temperatura [K]. Ligações químicas não são quebradas facilmente por colisões entre moléculas na fase gasosa e, geralmente, são quimicamente estáveis. Ligações mais fracas, como as ligações de hidrogênio, precisam de uma energia de 40 kJ mol^{-1} , sendo mais vulneráveis. Quando consideramos reações químicas, uma ligação precisa, antes, ser quebrada para que depois novas ligações possam ser formadas, tal que a energia de ativação pode ser mais alta. Abaixo de uma temperatura de 50 K , todas as reações entre espécies neutras cessam. Mas duas importantes classes de reações conseguem sobreviver: as reações entre radicais e entre um íon e uma molécula neutra. A importância dessas reações torna-se aparente com a construção dos modelos de cinética química das nuvens moleculares.

2.5 A formação da água na fase gasosa

Como vimos anteriormente, os raios cósmicos são os responsáveis pela produção dos primeiros íons no meio interestelar, dando início a todo o processo químico que venha a ocorrer no interior das nuvens moleculares. Como a molécula H_2 é a mais abundante, o processo de ionização dominante é



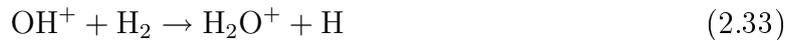
o qual produz hidrogênio molecular ionizado bem como elétrons livres capazes de ionizar outras moléculas. Essa reação não é rápida; ocorre a uma taxa $\zeta = 10^{-17} \text{ s}^{-1}$, considerando que o fluxo de raios cósmicos através da nuvem seja similar ao fluxo observado sobre a Terra. No entanto, dada a enorme abundância do hidrogênio molecular, essa reação produz vários íons a cada segundo, e estes promovem o enriquecimento da variedade química da nuvem molecular.

Uma vez que H_2^+ esteja formado, ele reage imediatamente com outra molécula de H_2 produzindo a mais simples molécula poliátômica⁶, H_3^+ , através da seguinte reação:



⁶Moléculas com mais de dois átomos.

O íon H_3^+ pode reagir com um grande número de espécies neutras. A sua reação com átomos de oxigênio dispara uma série de reações que eventualmente leva à produção da água. Vamos considerar essa síntese com mais detalhes como um exemplo de reações íon-molécula produzindo complexas moléculas interestelares. A sequência seguinte de reações íon-molécula produz o íon molecular H_3O^+ :



Os produtos dessas reações, OH^+ e H_2O^+ , reagem rapidamente com o H_2 , mas o mesmo não ocorre com o H_3O^+ que é, então, destruído por recombinação dissociativa com elétrons. Várias são as possibilidades de resultados dessas reações:



A sequência de reações mostrada é o caminho mais fácil para a produção da água interestelar. Outros caminhos mais complexos também existem, tal que a produção de água depende de reações que envolvem muitas outras moléculas, tornando-se uma das espécies mais abundantes encontradas nas nuvens moleculares.

2.6 A produção de moléculas complexas

A seguir, apresentamos algumas possíveis reações que levam à produção de moléculas complexas. Como o meio interestelar é muito rico e o completo entendimento da química que ocorre nesse ambiente é algo bastante complexo, preocupamo-nos em apresentar apenas os processos mais simples e diretos para a formação de algumas moléculas.

A produção de moléculas complexas via reações íon-molécula tem sido discutida na literatura (Leung *et al.* 1984). O primeiro passo para se obter moléculas mais complexas é através da produção do íon CH^+ , que é sintetizado por reações do tipo

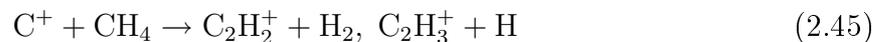


A reação 2.39 é um exemplo de associação radiativa. Para colisões entre espécies moleculares mais complexas do que moléculas diatômicas, reações do tipo associação radiativa são mais eficientes, com o aumento da eficiência acompanhando o aumento da complexidade dos produtos das reações (Herbst *et al.* 1988). Uma vez que CH^+ esteja formado, a produção do metano, CH_4 , dá-se via a seguinte sequência de reações:



O metano é uma molécula simples, porém, muito importante do ponto de vista astrobiológico. Além de ser precursora de outras moléculas orgânicas mais complexas, sua alta concentração na atmosfera terrestre é devido a processos biológicos e a sua detecção na atmosfera de um exoplaneta poderia, em princípio, ser um indício de que lá também a Vida possa ter se desenvolvido.

Hidrocarbonetos mais complexos são sintetizados via três principais tipos de reações. Uma delas é a chamada inserção de carbonos, que são reações que envolvem C^+ ou C e hidrocarbonetos neutros ou iônicos, produzindo moléculas iônicas mais complexas. Alguns exemplos dessas reações são dados a seguir:



As espécies iônicas produzidas vão reagir predominantemente com o H_2 , no caso dessa reação poder ocorrer; caso contrário, elas podem ser destruídas via recombinação dissociativa com elétrons. O acetileno, C_2H_2 , pode ser formado dessa maneira, como mostra a reação seguinte:



Com o acetileno agora à disposição, hidrocarbonetos com três carbonos podem começar a ser formados via reação com o C^+ :

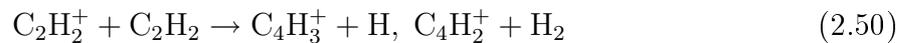


A complexidade das reações vai, dessa forma, aumentando gradativamente. A molécula formada na reação anterior, C_3H^+ pode reagir com o hidrogênio molecular como na reação seguinte:



cujo produto, a molécula $C_3H_3^+$, é precursora de moléculas de estrutura de anel, como o C_3H_2 (Adams & Smith 1987).

Outro tipo de reação é a chamada Condensação, onde um hidrocarboneto ionizado reage com uma espécie neutra, tendo como produtos moléculas mais complexas. Como exemplos, temos a seguinte reação:



que, por sua vez, leva à formação do radical C_4H , descoberto na década de 1979 (Guelin *et al.* 1978) através do espectro, na região de comprimento de onda milimétrica produzido por transições rotacionais.

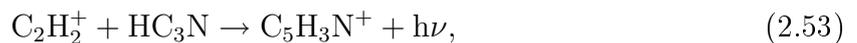
Finalmente, um terceiro caminho possível para a formação de hidrocarbonetos complexos é quando um hidrocarboneto iônico reage associativamente com uma espécie neutra, tendo como produto um hidrocarboneto mais complexo e liberando radiação, como exemplificado na reação seguinte:



A síntese de outros tipos de moléculas orgânicas está ligada à a produção dos hidrocarbonetos (Herbst & Leung 1990). Vamos considerar o caso dos cianopolienos, que são moléculas derivados do HCN e têm fórmula molecular HC_{2n+1}N . Apesar de uma variedade de possíveis reações íon-molécula terem sido propostas para a formação dos cianopolienos (Bohme *et al.* 1987), as mais eficientes envolvem reações entre os átomos de nitrogênio com hidrocarbonetos iônicos, como no exemplo a seguir,

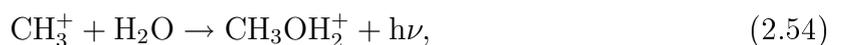


que produz as espécies precursoras das moléculas orgânicas nitrogenadas. Outro mecanismo para a produção de cianopolienos complexos, embora menos eficiente, envolve associação radiativa entre hidrocarbonetos ionizados e cianoacetilenos mais simples, como exemplifica a reação

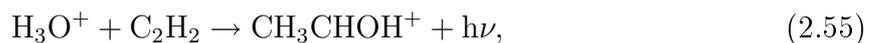


seguida de recombinação dissociativa. Um mapa detalhado dos vários caminhos possíveis para a formação do HC_9N pode ser encontrado em Herbst & Leung (1989).

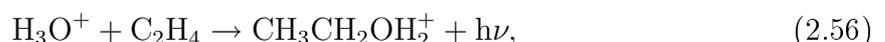
Vamos considerar, agora, a síntese de moléculas orgânicas que contém oxigênio, como os álcoois. As reações do tipo associação radiativa exercem um papel essencial na produção dessas moléculas na fase gasosa. O metanol, cuja fórmula estrutural é CH_3OH , pode ser produzido inicialmente via reação do tipo associação radiativa entre CH_3^+ com H_2O ,



seguida por uma reação de recombinação dissociativa. O mesmo ocorre com o acetaldeído, CH_3CHO , onde H_3O^+ reage através de associação radiativa com o C_2H_2 , como mostra a reação

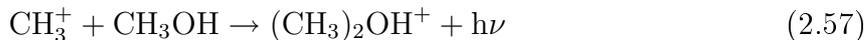


seguida por uma nova reação de recombinação dissociativa. O etanol, $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$, é sintetizado via



também seguida por dissociação radiativa. E, por fim, o éter dimetil, CH_3OCH_3 é pro-

duzido pelas reações



seguidas de recombinação dissociativa. Muitas outras reações foram sugeridas para a formação de outras moléculas orgânicas complexas, como o formiato de metila, HCOOCH_3 e acetona, CH_3COCH_3 (Combes *et al.* 1987).

Estes exemplos ilustram o rico processo químico que ocorre no meio interestelar, mostrando como diversos tipos de moléculas orgânicas complexas podem ser formadas. Tantas outras reações existem que seria impossível descrevê-las todas. No entanto, começamos a entender a complexa rede de reações químicas responsável pela produção de diversas moléculas orgânicas que, um dia, poderão semear um planeta em formação.

2.7 Hidrocarbonetos aromáticos policíclicos

O processo de inserção de carbono em hidrocarbonetos pode levar a uma grande quantidade de espécies orgânicas e estimulou a hipótese da formação dos hidrocarbonetos aromáticos policíclicos, os PAHs, da sigla em inglês. Os PAHs são moléculas bastante estáveis e resistem bem à dissociação ao absorver radiação ultravioleta. Muitos PAHs foram descobertos em meteoritos (Becker *et al.* 1997) e são observados no espectro infravermelho de diversos objetos astronômicos, como nebulosas de reflexão (Uchida *et al.* 2000) e nuvens moleculares densas (Verstraete *et al.* 2001). Experimentos em laboratório mostram que também podem ser formados na fase gasosa (Jager *et al.* 2009).

Os PAHs são comumente encontrados na Terra devido à combustão de material orgânico, o que remete à hipótese de que os PAHs encontrados em meteoritos possam ter origem biológica. Seja como for, os PAHs produzidos nas nuvens moleculares densas por reações químicas nada tem a ver com processos biológicos. Quanto aos PAHs encontrados em meteoritos, muitas dúvidas quanto a sua origem ainda permanecem (Zolotov & Shock 1999).

O processo de inserção de carbonos em hidrocarbonetos dá início à formação dos PAHs no meio interestelar e na superfície dos grãos. A formação de cadeias de carbono parece ser uma consequência natural das reações íon-molécula, e espera-se que tenham baixa energia de ativação. Reações entre radicais neutro-neutro também podem dar origem a grandes cadeias de carbono.

Apesar de ainda incertos, os processos de formação dos PAHs parecem envolver o anel benzeno como molécula precursora, seguida da formação de novos anéis a partir da adição

das moléculas C_2H_2 ou C_2H .

2.8 Síntese orgânica nos gelos interestelares

Apesar de não consideramos as reações na fase sólida neste trabalho, sabemos da importância dos gelos interestelares na química do meio interestelar e na produção de moléculas pré-bióticas, como os aminoácidos (Elsila *et al.* 2007) e outras moléculas orgânicas, como o glicolaldeído ($HCOCH_2OH$) (Bennett & Kaiser 2007). Muitas das moléculas do meio interestelar são insaturadas e subvalentes⁷ e a absorção na superfície dos grãos resultaria na imediata hidrogenização dessas espécies. O aquecimento térmico do grão de poeira por uma fonte de radiação pode aumentar as taxas de reações na superfície, mas ainda não se conhece muito bem como esse processo funciona. A química da superfície dos grãos aumenta a diversidade molecular no meio interestelar, reforçada pela presença de radiação ultravioleta. A penetração da radiação nos grãos é controlada pela espessura do manto de gelo que cobre a superfície, o que acaba protegendo muitas moléculas maiores e mais complexas da foto destruição. Percebemos que os grãos de gelos astrofísicos são um local propício para a formação de moléculas orgânicas complexas, e um entendimento mais completo sobre as reações químicas que ocorrem na superfície trará uma melhor concepção a respeito da produção dessas importantes moléculas.

⁷Não possuem todas as suas quatro ligações químicas.

Capítulo 3

Simulações

Neste capítulo, falaremos do estudo das simulações da síntese molecular nas nuvens interestelares na fase gasosa. Estamos interessados em descrever a variação temporal da abundância molecular de acordo com certas condições iniciais referentes às abundâncias de alguns elementos primordialmente encontrados na nuvem. Para isso, precisamos de informações a respeito das condições físicas de uma nuvem molecular, bem como das reações químicas que ali devem ocorrer e das espécies moleculares envolvidas nessas reações.

Desde o anúncio da primeira molécula identificada no meio interestelar (Swings & Rosenfeld 1937) na década de 1930, muitas outras já foram identificadas até então, numa enorme variedade de moléculas, desde diatômicas e iônicas, até complexas moléculas orgânicas, como a amino-acetonitrila (Belloche *et al.* 2008), cuja fórmula molecular é $\text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOH}$. Estas descobertas têm inspirado inúmeros estudos sobre a formação e destruição de moléculas no meio interestelar (Herbst & Klemperer 1973; Henning 1981; Prasad & Huntress 1980; Solomon & Klemperer 1972). Cada um destes modelos foi feito de acordo com os conhecimentos existentes em sua época quanto ao número de reações químicas usadas, espécies moleculares descobertas e métodos computacionais disponíveis. Pioneiros na década de 1970, Herbst & Klemperer (1973) utilizaram uma lista de 100 reações e cerca de 50 espécies moleculares para verificar como se dava a variação da abundância dessas moléculas na fase gasosa, enquanto que Prasad & Huntress (1980) tinham uma lista de 1400 reações e 137 espécies na década de 1980. Conforme os estudos avançam, modelos mais complexos e completos vão se tornando possíveis de ser construídos. No presente trabalho, estamos lidando com mais de 6000 reações que ocorrem na fase gasosa e cerca de 470 espécies moleculares, o que nos permite realizar estudos mais completos a respeito da química das nuvens moleculares. No entanto, estes números tendem a mudar com o tempo e novos trabalhos sempre serão necessários para aprimorar o conhecimento da evolução de moléculas no meio interestelar.

3.1 Lista de reações químicas

Para entendermos como a abundância de uma molécula varia com o tempo no interior das nuvens moleculares precisamos, antes, saber quais reações químicas ocorrem neste ambiente. Em laboratório, pesquisadores simulam as condições físicas de uma nuvem e estudam as reações químicas que se acredita ali ocorrerem. Não é uma tarefa fácil identificar uma molécula. Seu espectro pode ser bastante complexo devido aos diversos tipos de transições que uma molécula pode sofrer (como discutimos na seção 2.1). Não obstante as dificuldades, pesquisadores estão sempre tentando encontrar novas moléculas no meio interestelar e em laboratório (Augundez 2008; Brunken 2009). Dessa forma, é muito importante que as observações sejam acompanhadas por experiências em laboratório. Quando um espectro desconhecido é obtido do meio interestelar, este precisa ser comparado aos espectros obtidos em laboratório para tentar identificar qual molécula o tenha produzido. Tendo conhecimento de quais moléculas estão presentes nas nuvens, é possível, então, desenvolver uma rede de reações químicas que supostamente ocorrem neste ambiente. Uma vez criada a rede de reações, podemos desenvolver um sistema de equações diferenciais de primeira ordem que descreve a evolução da abundância dessas moléculas ao longo do tempo de vida da nuvem molecular. Cada equação descreve a variação temporal da abundância de uma determinada espécie (ver seção 2.4). Neste trabalho, usamos a lista de reações compilada por Eric Herbst¹, chamada OSU2009. Outras listas também existem como, por exemplo, a lista UMIST², mas utilizamos a lista OSU2009 por ser mais completa e atualizada, contendo 6046 reações e 468 espécies moleculares diferentes envolvidas. Diversos são os tipos de reações presentes nessa base de dados, da mesma forma que diversos tipos de reações podem ocorrer no interior das nuvens moleculares. Na lista OSU2009 temos os seguintes tipos:

¹A lista pode ser encontrada em http://www.physics.ohio-state.edu/~eric/research_files/osu_01_2009.

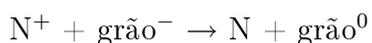
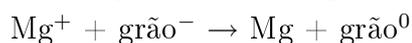
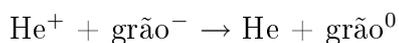
²A base de dados UMIST pode ser encontrada em <http://www.udfa.net/>.

- 0 interação gás – grão, recombinação elétron – grão
- 1 ionização por raios cósmicos (processo direto)
fotorreações induzidas por raios cósmicos (processo indireto)
- 2 reação íon–molécula, reações de troca de carga
- 3 reações íon negativo–molécula neutra
- 4 associação radiativa
- 5 ejeção associativa
- 6 neutro + neutro → íon + elétron
- 7 reações neutro–neutro
- 8 associação radiativa neutro–neutro
- 9 recombinação dissociativa
- 10 recombinação radiativa
- 11 recombinação íon positivo–íon negativo
- 12 captura de elétrons
- 13 fotoionização, fotodissociação

A maior parte dessas reações são do tipo íon–molécula e troca de carga, correspondendo a 49,45% do total. As reações de recombinação íon positivo–íon negativo respondem por 23,75%. O restante está dividido entre todos os outros tipos.

Vamos mostrar alguns exemplos e algumas características de cada tipo:

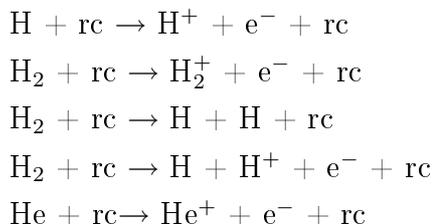
Interação gás – grão, recombinação elétron – grão: essas são as reações em que o gás interage com os grãos. Neste trabalho, as reações que ocorrem na superfície dos grãos não são tratadas. Dessa forma, o grão funciona como um receptor e fonte de partículas carregadas, neutralizando algumas espécies moleculares. Abaixo são dados alguns exemplos:



Repare que temos dois tipos de grãos, um carregado, grão^- , e outro neutro, grão^0 . O carregado é responsável por neutralizar os elementos, dando origem ao grão neutro, juntamente com o elemento.

Ionização pelos raios cósmicos: os raios cósmicos são partículas carregadas de alta energia — da ordem de MeV e GeV — capazes de penetrar até regiões muito profundas

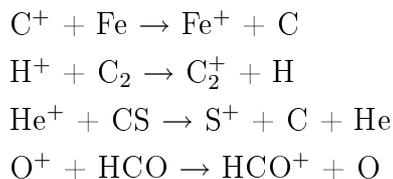
das nuvens moleculares. Essas partículas são prótons, partículas α e núcleos de átomos pesados. Como as espécies H_2 e He são as mais abundantes no meio interestelar, é de se esperar que sejam as primeiras a serem ionizadas ou dissociadas (como pode ocorrer com o H_2) pelos raios cósmicos (aqui representados por rc). Abaixo são apresentadas algumas reações de interação com os raios cósmicos:



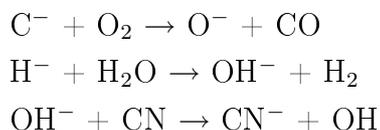
A taxa da reação que ioniza o H_2 é maior que as taxas das reações que o dissociam. Dessa forma, o H_2^+ torna-se o íon mais abundante e reage facilmente com outra molécula de H_2 , produzindo H_3^+ e H.

O raio cósmico perde apenas uma pequena fração de sua energia durante o processo de ionização de uma espécie molecular e consegue penetrar em profundas regiões das densas nuvens moleculares, o que faz deste tipo de reação ser a responsável pelo início de todo o processo químico que ocorre no interior das nuvens moleculares.

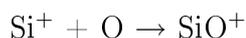
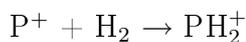
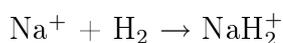
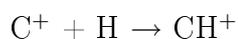
Reação íon–molécula, reações de troca de carga: experiências em laboratório mostram que muitas reações íon–molécula não dependem da temperatura. Esse tipo de reação explica bem a abundância de muitas espécies moleculares e são responsáveis pelo início da formação dos PAHs que, conforme vão agregando mais carbonos, começam a ser sintetizados nas superfícies dos grãos.



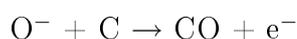
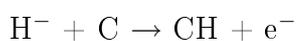
Reações íon negativo–molécula neutra: neste tipo de reação, uma espécie negativamente ionizada reage com uma espécie neutra, tal que os produtos são uma mistura dos elementos que compunham os reagentes, sendo que uma das espécies produzidas permanece negativamente ionizada.



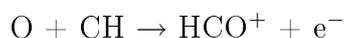
Associação radiativa: são reações em que uma espécie positivamente ionizada reage com outra neutra, produzindo apenas um produto e liberando radiação.



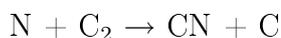
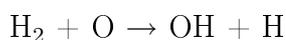
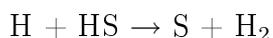
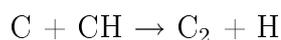
Ejeção associativa: neste tipo de reação, uma molécula ionizada reage com uma molécula neutra tal que os produtos são uma molécula neutra contendo todos os elementos que compunham os reagentes e um elétron livre.



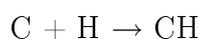
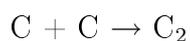
Neutro + neutro → íon + elétron: aqui, duas espécies neutras reagem entre si resultando em uma espécie ionizada possuindo todos os elementos então presentes nos reagentes e mais um elétron livre. Este tipo de reação possui apenas um exemplar na amostra de reações, mostrado abaixo:



Reações neutro–neutro: são reações das mais abundantes na amostra.

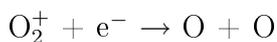
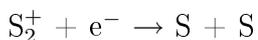
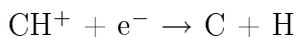
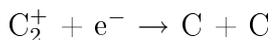


Associação radiativa neutro–neutro: estas reações estão presentes em pequeno número.



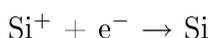
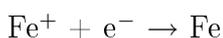
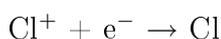
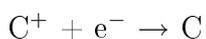
Recombinação dissociativa: recombinação dissociativa ocorre quando uma espécie ionizada recombina-se com um elétron, quebrando-se em duas espécies mais simples. A

seguir são mostrados alguns exemplos:

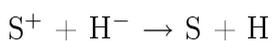
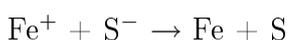
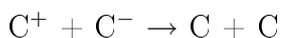


Reações desse tipo estão presentes em grande quantidade na amostra.

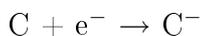
Recombinação radiativa: presentes em pequeno número, são reações onde uma espécie positivamente ionizada se recombina com um elétron livre, neutralizando a espécie e liberando um fóton.



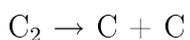
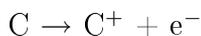
Recombinação íon positivo–íon negativo: neste tipo de reação, os reagentes são duas espécies ionizadas, positiva e negativamente, respectivamente, tendo como produtos duas espécies neutras.



Captura de elétrons: esse tipo de reação possui poucas reações na amostra.



Fotoionização, fotodissociação: ao ser atingido por um fóton, uma espécie pode ionizar-se ou dissociar-se, dependendo da energia do fóton incidente.



Todas as reações ocorrem com apenas dois reagentes. No ambiente de uma nuvem molecular, a densidade não é alta o suficiente para que ocorram reações com mais de dois reagentes, sendo a probabilidade desse tipo de reação muito baixa – reações com três reagentes se tornam importantes em regiões de densidade da ordem de 10^{11}cm^{-3} . No entanto, há reações com mais de dois produtos, e algumas podendo ter até quatro produtos. Essas reações correspondem a 54,82% do total. Para que uma reação ocorra a uma taxa considerável, é necessário que ocorram com o mínimo ou sem energia de ativação. As reações íon–molécula exotérmicas obedecem a esses requerimentos e são as reações mais abundantes neste ambiente (Gioumousis & Stevenson 1958).

3.2 A lista de moléculas

A lista de moléculas³ que estamos usando, desenvolvida pelo mesmo grupo que desenvolveu a lista de reações OSU2009, contém 468 espécies moleculares. São elas de diversos tipos. Temos moléculas neutras e ionizadas (tanto negativa como positivamente), espécies atômicas, até espécies com catorze átomos, como o C_9H_5^+ . Há uma variedade enorme de moléculas orgânicas, como o éter metilmetílico, CH_3OCH_3 , o cianeto de hidrogênio, HCN, também conhecido como ácido cianídrico, e um dos principais precursores dos aminoácidos, e o álcool etílico, $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$. Algumas espécies podem ser encontradas na forma de isômeros⁴, como o HNC, que é o isômero do HCN. Também encontramos alguns hidrocarbonetos aromáticos policíclicos, como o benzeno, C_6H_6 .

Todas elas são constituídas pelos elementos mais abundantes do Universo, os elementos CHON e algumas podem conter algum outro elemento em sua composição, de forma que os elementos constituintes das moléculas são: H, He, C, N, O, Na, Mg, Cl, F, S, Si, P e Fe. Esta lista foi construída a partir de experiências em laboratório que tentam simular o ambiente de uma nuvem molecular, reproduzindo as reações químicas que devem acontecer neste ambiente e verificando quais moléculas são formadas. Muitas dessas espécies já foram descobertas no meio interestelar, outras ainda aguardam confirmação.

3.3 Metalicidade e abundâncias

Antes de verificarmos como foram feitas as simulações, vamos revisar mais algumas informações importantes referentes a alguns conceitos astrofísicos necessários para realizar-se as simulações. Trataremos aqui a respeito da metalicidade de um objeto astronômico e de sua abundância química.

³Pode ser encontrada em http://www.physics.ohio-state.edu/~eric/research_files/List_species_01_2009.dat

⁴Moléculas com a mesma fórmula molecular, ou seja, possuem os mesmos átomos nas mesmas quantidades, porém possuem fórmula estrutural diferente.

A metalicidade de um objeto astronômico, seja ele uma estrela ou uma nuvem molecular, refere-se à proporção, em massa, entre o hidrogênio e todos os outros elementos mais pesados que este e o hélio. Diferente de outras áreas da ciência, em astronomia, todos os elementos mais pesados que o hidrogênio e o hélio são chamados de “metais”. Dessa forma, se um objeto astronômico possui grande quantidade desses elementos, ele é tido como rico em metais; do contrário, pobre em metais.

A metalicidade pode dar um indício da idade do objeto astronômico. A nucleossíntese primordial ocorrida com o big bang forneceu apenas os elementos mais leves, como o hidrogênio e o hélio e pequenas frações de outros elementos, como o lítio e o berílio. Os elementos mais pesados são sintetizados pelas estrelas, que os ejetam quando terminam as suas vidas, enriquecendo o meio interestelar e fornecendo novos materiais para futuras gerações de estrelas, como descrito no primeiro capítulo. Dessa forma, as estrelas mais velhas tendem a ser mais pobres em metais, e as estrelas mais jovens, formadas após a reciclagem da matéria pelas estrelas mais antigas, são mais ricas em metais.

A metalicidade é normalmente representada por $[\text{Fe}/\text{H}]$, que expressa a diferença entre os logaritmos da razão entre a abundância do ferro e a abundância do hidrogênio de um objeto astronômico qualquer e da razão entre a abundância do ferro e a abundância do hidrogênio no Sol. Na nossa notação, os subíndices nm e \odot referem-se à nuvem molecular e ao Sol, respectivamente, de forma que a metalicidade é dada por:

$$[\text{Fe}/\text{H}] = \log_{10} \left(\frac{\epsilon_{\text{Fe}}}{\epsilon_{\text{H}}} \right)_{\text{nm}} - \log_{10} \left(\frac{\epsilon_{\text{Fe}}}{\epsilon_{\text{H}}} \right)_{\odot}, \quad (3.1)$$

onde ϵ_{Fe} e ϵ_{H} são as densidades de Fe e H, em número de átomos por volume. Generalizando a notação, para um elemento qualquer representado por X, temos que:

$$[\text{X}/\text{Fe}] = \log_{10} \left(\frac{\epsilon_{\text{X}}}{\epsilon_{\text{Fe}}} \right)_{\text{nm}} - \log_{10} \left(\frac{\epsilon_{\text{X}}}{\epsilon_{\text{Fe}}} \right)_{\odot}, \quad (3.2)$$

de forma que $[\text{X}/\text{Fe}]$ é chamado de razão de abundância. De acordo com esta formulação, um objeto astronômico mais rico em metais do que o Sol possui metalicidade positiva, $[\text{Fe}/\text{H}] > 0$, enquanto que se for mais pobre em metais do que o Sol, então dizemos que a metalicidade é negativa, $[\text{Fe}/\text{H}] < 0$. Dessa forma, a metalicidade solar é dada por $[\text{Fe}/\text{H}] = 0$. Como o logaritmo está na base 10, se a metalicidade de um objeto astronômico for $+1$, então este objeto possui uma metalicidade dez vezes maior que a do Sol, enquanto que se a sua metalicidade for -1 , então a sua metalicidade será dez vezes menor. De uma forma geral, se a metalicidade for igual a n , então será 10^n vezes a metalicidade solar.

Este mesmo tipo de notação pode ser usado para expressar a diferença entre a abundância de um outro elemento qualquer com relação ao outro e comparar com a mesma razão

de abundâncias no Sol. Por exemplo, $[O/Fe]$ representa a diferença entre o logaritmo da abundância de oxigênio num objeto astronômico comparado ao Sol e o logaritmo da abundância de ferro do mesmo objeto comparado com o logaritmo da abundância de ferro no Sol. Esta relação é escrita da forma

$$[O/Fe] = \left(\log_{10} \left(\frac{\epsilon_O}{\epsilon_H} \right)_{\text{nm}} - \log_{10} \left(\frac{\epsilon_O}{\epsilon_H} \right)_{\odot} \right) - \left(\log_{10} \left(\frac{\epsilon_{Fe}}{\epsilon_H} \right)_{\text{nm}} - \log_{10} \left(\frac{\epsilon_{Fe}}{\epsilon_H} \right)_{\odot} \right). \quad (3.3)$$

Novamente, generalizamos a notação da seguinte forma:

$$[X/Fe] = \left(\log_{10} \left(\frac{\epsilon_X}{\epsilon_H} \right)_{\text{nm}} - \log_{10} \left(\frac{\epsilon_X}{\epsilon_H} \right)_{\odot} \right) - \left(\log_{10} \left(\frac{\epsilon_{Fe}}{\epsilon_H} \right)_{\text{nm}} - \log_{10} \left(\frac{\epsilon_{Fe}}{\epsilon_H} \right)_{\odot} \right). \quad (3.4)$$

Essa relação pode ser simplificada para:

$$[X/Fe] = [X/H] - [Fe/H], \quad (3.5)$$

tal que $[X/H]$ é chamado de abundância.

Agora temos as notações matemáticas necessárias para fazermos os cálculos das abundâncias das espécies atômicas e moleculares a fim de estudarmos a variação dessas abundâncias no decorrer do tempo de vida de uma nuvem molecular conforme variamos a composição química inicial.

3.4 O método utilizado

A partir da lista de reações químicas, é preciso desenvolver e resolver um sistema de equações diferenciais que descreve a evolução da abundância das moléculas com o tempo.

Num primeiro momento, tentamos reproduzir os resultados obtidos por Herbst & Klemperer (1973), cujo trabalho descreve a evolução das abundâncias de algumas dezenas de espécies moleculares de acordo com certas condições iniciais preestabelecidas e invariáveis com o tempo. Para tal, construímos um sistema de equações, como descrito na seção 2.4, tal que cada molécula possuía uma equação representando a variação temporal de sua abundância. Percebemos que a equação da variação da abundância de uma molécula apresentava dependência com a abundância de diversas outras. Esse tipo de sistema de equações costuma ser chamado de *sistema acoplado*, e não possui solução analítica. Procuramos, então, um modo de resolvê-lo numericamente. Esse problema foi resolvido através da rotina DLSODE⁵, disponível para o uso público e destinada a resolver sistemas de equações diferenciais. Além de serem acopladas, essas equações também são do tipo

⁵Esta rotina pode ser encontrada no site https://computation.llnl.gov/casc/odepack/odepack_home.html.

“stiff”, ou seja, um sistema de equações tal que uma variável, no caso a abundância de algumas moléculas, pode variar de uma forma muito diferente com o tempo em comparação à variação das abundâncias das demais moléculas, em função das diferentes escalas de tempo envolvidas na evolução dessas espécies. Além do sistema de equações, também tínhamos que fornecer ao código DLSODE a chamada matriz jacobiano, que é uma matriz cujas entradas são as derivadas de cada uma das equações com respeito às abundâncias de cada uma das moléculas, que é necessária para se resolver o sistema⁶. Em Herbst & Klemperer (1973) há uma variedade de 49 espécies moleculares e 100 reações químicas. Construímos, então, um sistema de 49 equações e um Jacobiano com cerca de 300 termos. Muitas dificuldades surgiram devido à complexidade envolvida em se desenvolver um número tão grande de equações. Apesar disso, conseguimos reproduzir parcialmente os resultados; no entanto, não conseguimos reproduzir as abundâncias encontradas para algumas moléculas importantes.

Entramos em contato com o autor, Eric Herbst, a fim de tentar descobrir o que estava errado com nossas equações. Ele, por sua vez, sugeriu que procurássemos pelos seus trabalhos mais recentes, passando-nos sua página na internet⁷, onde poderíamos encontrar uma lista de reações químicas mais atualizada e um código, chamado NAHOON⁸, que constrói o sistema de equações, bastando fornecer apenas as reações químicas desejadas, as características físicas de uma nuvem molecular, as abundâncias elementares iniciais, além da lista de moléculas que participarão das reações. Este código foi desenvolvido apenas para estudos na fase gasosa, e não permite a variação das condições físicas e das abundâncias iniciais uma vez estabelecidas, o que quer dizer que a compilação do programa não pode ser interrompida para alterar-se algum parâmetro. Utilizando o código citado anteriormente, DLSODE, o novo programa também resolve o sistema de equações automaticamente, tendo como resultado, as abundâncias calculadas para os tempos desejados de todas as 468 moléculas. Assim, passamos a trabalhar com uma nova lista de reações químicas contendo 6046 reações, com 468 espécies moleculares diferentes, o que nos possibilitou fazer um estudo muito mais completo acerca dos processos químicos que ocorrem no interior das nuvens moleculares.

3.5 Condições iniciais

A escolha das condições iniciais pode influenciar consideravelmente os resultados obtidos. Essa é a parte mais complexa do trabalho. Temos que fornecer as abundâncias iniciais de cada elemento e espécie molecular a fim de darmos as condições químicas com

⁶Um estudo sobre os diversos métodos de resolução de um sistema de equações diferenciais do tipo “stiff” aplicado à Astroquímica pode ser encontrado em Nejad (2005).

⁷<http://www.physics.ohio-state.edu/eric/>

⁸O programa pode ser encontrado no site <http://www.obs.u-bordeaux1.fr/amor/VWakelam/ValentineWakelam/Downloads.html>.

que uma nuvem molecular inicia a sua evolução. Consideramos que todo o hidrogênio está presente na forma de H_2 (observações mostram que a concentração de H é muito pequena; Heiles 1971). Também supomos que o carbono está presente inicialmente apenas sob a forma de monóxido de carbono, o que está de acordo com resultados observacionais (Penzias *et al.* 1972) e teóricos (Solomon & Klemperer 1972).

A composição elemental do gás foi escolhida de forma a representar a evolução química da Galáxia, que está em constante evolução. No passado, a Galáxia era mais pobre em metais do que é hoje em dia. Seguimos o modelo de evolução química da Galáxia de Timmes *et al.* (1995). Através do estudo de supernovas do tipo II e do tipo Ia, estes autores calcularam a evolução química de 76 isótopos estáveis, do hidrogênio ao zinco, através de um modelo dinâmico simples para a Galáxia, apresentando gráficos da evolução de diversos elementos, aqui representados por X, com relação à metalicidade, $[Fe/H]$, ou seja, $[X/Fe]$ versus $[Fe/H]$. A Fig. 3.1 mostra, como exemplo, o gráfico da evolução de $[S/Fe]$ com a metalicidade $[Fe/H]$.

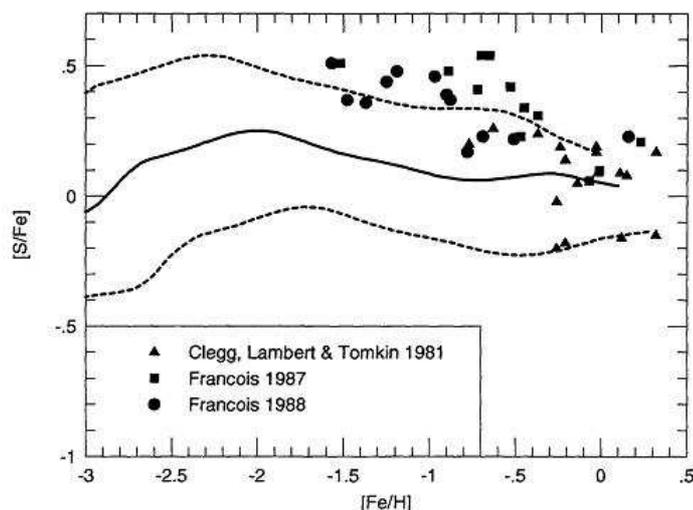


Figura 3.1: $[S/Fe]$ versus $[Fe/H]$
Evolução da razão de enxofre por hidrogênio $[S/Fe]$ em função da metalicidade, $[Fe/H]$.
Imagem reproduzida de Timmes *et al.* (1995)

Estes gráficos apresentam a curva que descreve a variação da abundância de um determinado elemento conforme a variação da abundância de Fe. A relação $[Fe/H]$ é um indicativo de metalicidade — quanto menor o seu valor, mais pobre em metais é o meio. Sua escala vai de aproximadamente -3.0 a 0.0 , sendo este último o valor que representa a metalicidade solar. No entanto, o que precisamos são os valores da abundância cósmica de um determinado elemento com relação ao hidrogênio, pois estes são os dados de entrada para o programa NAHOON. Escolhemos, então, trabalhar com os seguintes valores de $[Fe/H]$: -2.5 , -2.0 , -1.5 , -1.0 , -0.5 , e 0.0 , ou seja, uma escala crescente de metalicidade representando a evolução química da Galáxia. Os valores correspondentes a $[X/Fe]$, para

cada $[\text{Fe}/\text{H}]$ escolhido, foram obtidos a partir dos gráficos de Timmes *et al.* (1995) por interpolação.

Através da ferramenta DEXTER⁹, pudemos obter alguns pontos dos gráficos em Timmes *et al.* (1995) correspondente aos elementos desejados. As abundâncias desses elementos com relação ao hidrogênio são os parâmetros de entrada do programa NAHOON. A tabela 3.1 mostra os valores de $[\text{X}/\text{Fe}]$ para cada um dos valores escolhidos de $[\text{Fe}/\text{H}]$.

	$[\text{Fe}/\text{H}]$					
	-2.5	-2.0	-1.5	-1.0	-0.5	0.0
$[\text{C}/\text{Fe}]$	-0.120	-0.150	-0.210	-0.131	0.054	0.005
$[\text{Cl}/\text{Fe}]$	-0.275	-0.103	-0.136	-0.132	0.007	0.172
$[\text{Mg}/\text{Fe}]$	0.182	0.102	-0.039	-0.088	-0.081	-0.140
$[\text{Na}/\text{Fe}]$	-0.450	-0.587	-0.707	-0.648	-0.357	-0.109
$[\text{N}/\text{Fe}]$	-3.200	-2.400	-0.861	-0.091	0.179	0.162
$[\text{O}/\text{Fe}]$	0.336	0.277	0.155	0.100	0.087	-0.007
$[\text{P}/\text{Fe}]$	-0.317	-0.244	-0.304	-0.291	-0.079	0.135
$[\text{S}/\text{Fe}]$	0.165	0.250	0.161	0.090	0.072	0.056
$[\text{Si}/\text{Fe}]$	0.300	0.347	0.252	0.179	0.172	0.142
$[\text{F}/\text{O}]$	-0.520	-0.600	-0.601	-0.417	-0.255	-0.101

Tabela 3.1: $[\text{X}/\text{Fe}]$ versus $[\text{Fe}/\text{H}]$
Valores de $[\text{X}/\text{Fe}]$ relativos a valores específicos de $[\text{Fe}/\text{H}]$.

A partir dessas tabelas, interpolamos os dados utilizando um programa de interpolação escrito em Fortran construído a partir das rotinas “splint” e “spline” (Press *et al.* 1992).

Uma vez que possuímos os valores de $[\text{X}/\text{Fe}]$, podemos encontrar $[\text{X}/\text{H}]$, a metalicidade, condição necessária para podermos encontrar a abundância dos elementos com respeito ao H. Procedemos da seguinte forma: com uma pequena álgebra, rearrumamos a Eq. 3.5 de forma a obtermos:

$$[\text{X}/\text{H}] = [\text{X}/\text{Fe}] + [\text{Fe}/\text{H}]. \quad (3.6)$$

Podemos, agora, facilmente encontrar os valores de $[\text{X}/\text{H}]$, uma vez que já definimos os valores de $[\text{Fe}/\text{H}]$ e $[\text{X}/\text{Fe}]$, que foram obtidos por interpolação. Isso é feito para todos os elementos com os quais estamos trabalhando, com exceção do F. A tabela 3.2 mostra os valores calculados de $[\text{X}/\text{H}]$, com exceção do F.

O flúor é uma exceção pelo fato de que o gráfico que mostra a sua evolução, em Timmes *et al.* (1995), é dado de forma diferente. Este gráfico é do tipo $[\text{F}/\text{O}]$ versus $[\text{Fe}/\text{H}]$, como mostra a Fig. 3.2.

⁹Disponível na Internet via WWW. URL: http://adsabs.harvard.edu/abstract_service.html

	[Fe/H]					
	-2.5	-2.0	-1.5	-1.0	-0.5	0.0
[C/H]	-2.620	-2.150	-1.710	-1.131	-0.445	0.005
[Cl/H]	-2.775	-2.103	-1.636	-1.132	-0.492	0.172
[Mg/H]	-2.317	-1.897	-1.539	-1.088	-0.581	-0.140
[Na/H]	-2.950	-2.587	-2.207	-1.648	-0.857	-0.109
[N/H]	-5.700	-4.400	-2.361	-1.091	-0.320	0.162
[O/H]	-2.163	-1.722	-1.344	-0.899	-0.412	-0.007
[P/H]	-2.817	-2.244	-1.344	-0.899	-0.412	-0.007
[S/H]	-2.334	-1.749	-1.804	-1.291	-0.579	0.056
[Si/H]	-2.199	-1.652	-1.338	-0.909	-0.427	0.142

Tabela 3.2: [X/H] *versus* [Fe/H]
Valores de [X/H] relativos a valores específicos de [Fe/H].

Por este motivo, temos que procurar outra relação para encontrarmos os valores de [F/H], o que, felizmente, é bastante simples. De acordo com a Eq. 3.6, podemos escrever, para o F:

$$[F/H] = [F/Fe] + [Fe/H]. \quad (3.7)$$

tal que o termo [F/H] é o que queremos. O que ainda nos falta é uma expressão para [F/Fe], que também podemos encontrar facilmente através da relação:

$$[F/O] = [F/Fe] - [O/Fe], \quad (3.8)$$

Podemos rearrumar os termos dessa relação, e inserir [F/Fe] na Eq. 3.7, obtendo

$$[F/H] = [F/O] + [O/Fe] + [Fe/H]. \quad (3.9)$$

Agora já podemos encontrar [F/H], pois já temos todos os outros termos. A tabela 3.3 mostra os valores encontrados de [F/H].

	[Fe/H]					
	-2.5	-2.0	-1.5	-1.0	-0.5	0.0
[F/H]	-2.684	-2.322	-1.946	-1.316	-0.668	-0.108

Tabela 3.3: [F/H] *versus* [Fe/H]
Valores de [F/H] relativos a valores específicos de [Fe/H].

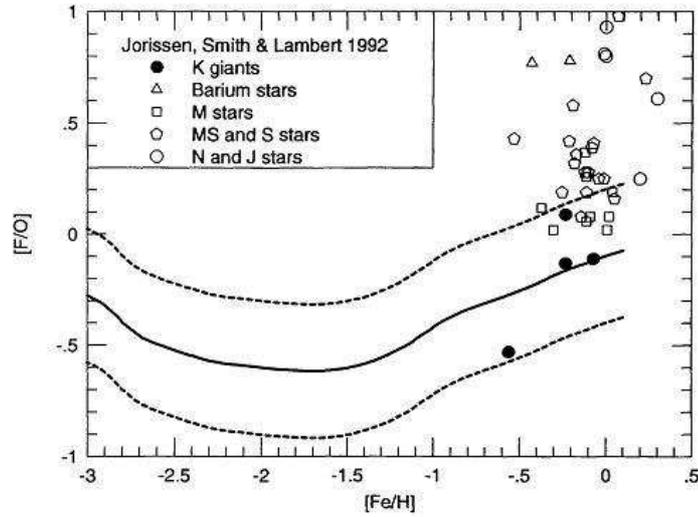


Figura 3.2: $[F/O]$ versus $[Fe/H]$
 Evolução da razão de flúor por oxigênio $[F/O]$ em função da metalicidade, $[Fe/H]$.
 Imagem reproduzida de Timmes *et al.* (1995)

Agora que temos todos os valores de $[X/H]$, podemos encontrar os valores das abundâncias cósmicas $\epsilon(X)_{\text{nm}}$ com relação ao hidrogênio. Fazemos da seguinte forma: o indicador de metalicidade $[X/H]$ é dado pela equação

$$[X/H] = \log \left[\frac{\epsilon(X)}{\epsilon(H)} \right]_{\text{nm}} - \log \left[\frac{\epsilon(X)}{\epsilon(H)} \right]_{\odot}. \quad (3.10)$$

Convencionou-se usar $\log \epsilon(H)_{\text{nm}} = \log \epsilon(H)_{\odot} = 12$. Os valores de $\epsilon(X)_{\odot}$ foram retirados de Asplund *et al.* (2005), e estão reproduzidos na tabela 3.4.

\bar{X}	$\log \epsilon(\bar{X})_{\odot}$
H	12
C	8.39
N	7.78
O	8.66
F	4.56
Na	6.17
Mg	7.53
Si	7.51
P	5.36
S	7.14
Cl	5.50
Fe	7.45

Tabela 3.4: Abundância solar. Tabela reproduzida de Asplund *et al.* (2005)

Assim, só precisamos obter $\epsilon(X)_{\text{nm}}$ utilizando a equação 3.10, e normalizando o resultado para $\log \epsilon(\text{H})_{\odot} = 12$. Os cálculos podem ser encontrados no anexo A.

Finalmente, as abundâncias elementares iniciais são apresentadas na tabela 3.5.

	[Fe/H]					
	-2.5	-2.0	-1.5	-1.0	-0.5	0.0
$\epsilon(\text{N})$	1.200×10^{-10}	2.000×10^{-9}	2.618×10^{-7}	4.885×10^{-6}	2.878×10^{-5}	8.750×10^{-5}
$\epsilon(\text{O})$	2.547×10^{-7}	6.917×10^{-6}	1.587×10^{-5}	3.951×10^{-5}	8.872×10^{-5}	2.007×10^{-4}
$\epsilon(\text{F})$	7.512×10^{-11}	1.726×10^{-10}	4.107×10^{-10}	1.753×10^{-9}	7.796×10^{-9}	2.827×10^{-8}
$\epsilon(\text{Na})$	1.657×10^{-9}	3.820×10^{-9}	9.173×10^{-9}	3.325×10^{-8}	2.052×10^{-7}	1.149×10^{-6}
$\epsilon(\text{Mg})$	1.632×10^{-7}	4.286×10^{-7}	9.784×10^{-7}	2.763×10^{-6}	8.879×10^{-6}	2.453×10^{-5}
$\epsilon(\text{Si})$	2.045×10^{-7}	7.203×10^{-7}	1.829×10^{-6}	4.896×10^{-6}	1.523×10^{-5}	4.492×10^{-5}
$\epsilon(\text{P})$	3.488×10^{-10}	1.304×10^{-9}	3.594×10^{-9}	1.170×10^{-8}	6.027×10^{-8}	1.677×10^{-7}
$\epsilon(\text{S})$	6.387×10^{-8}	2.454×10^{-7}	6.336×10^{-7}	1.699×10^{-6}	5.154×10^{-6}	1.573×10^{-5}
$\epsilon(\text{Cl})$	5.302×10^{-10}	2.490×10^{-9}	7.302×10^{-9}	2.331×10^{-8}	1.017×10^{-7}	4.707×10^{-7}
$\epsilon(\text{Fe})$	8.912×10^{-8}	2.818×10^{-7}	8.912×10^{-7}	2.818×10^{-6}	8.912×10^{-6}	2.818×10^{-5}
$\epsilon(\text{CO})$	5.883×10^{-7}	1.737×10^{-6}	4.783×10^{-6}	1.814×10^{-5}	8.809×10^{-5}	2.485×10^{-4}
C/O	1.87×10^{-1}	2.0×10^{-1}	2.3×10^{-1}	3.1×10^{-1}	5.0×10^{-1}	5.5×10^{-1}

Tabela 3.5: Condições iniciais: abundâncias elementares como parâmetros de entrada das simulações.

Estes são os valores colocados no programa NAHOON que representam as abundâncias iniciais de cada um dos elementos.

Podemos verificar mais facilmente, observando a Fig 3.3, como se dá a variação dos elementos conforme variamos a metalicidade.

O monóxido de carbono é a segunda molécula mais abundante no Universo, perdendo apenas para o H_2 e, como vemos na Fig 3.3, é a espécie mais abundante entre todas as consideradas, independente da metalicidade. Em seguida, os elementos mais abundantes são O e N, como esperávamos, já que os elementos CHON são os mais abundantes. Assumimos, também que a abundância de hélio não varia com a metalicidade, sendo igual a $1.4 \times 10^{-1} \text{ cm}^{-3}$. Para todas as simulações, a abundância total de hidrogênio é de $2 \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$ e temperatura assumida é de 10 K, representativa de uma densa nuvem molecular e o tempo de vida da nuvem simulada é de 10^6 anos.

No próximo capítulo, apresentamos os resultados das simulações realizadas, apresentando diversos gráficos com o comportamento das abundâncias moleculares no decorrer da vida de uma nuvem molecular até atingir 10^6 anos, além da variação da metalicidade assumida para a nuvem.

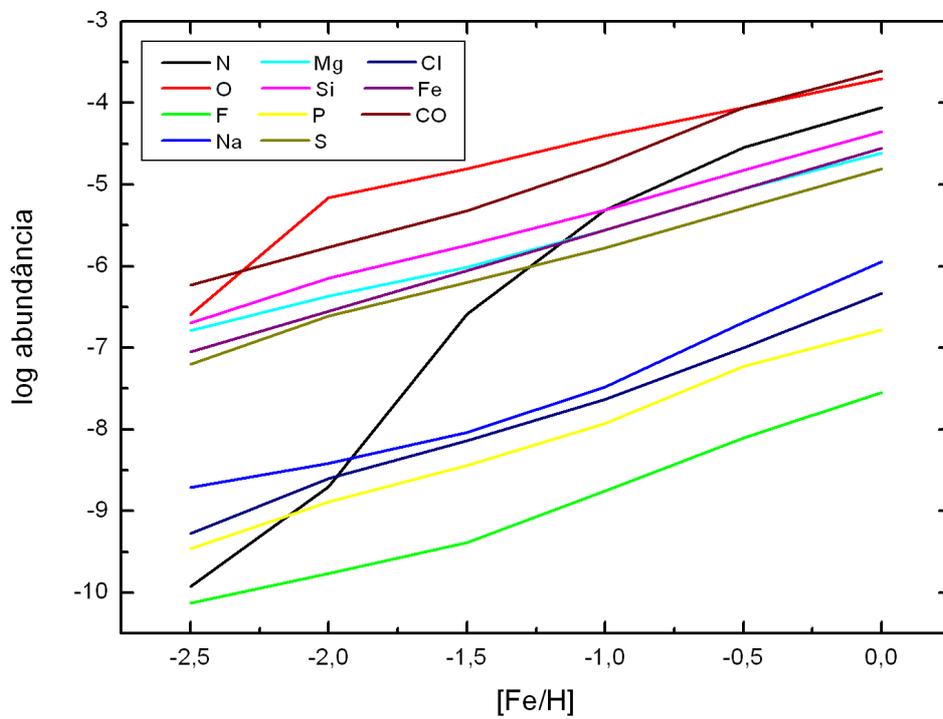


Figura 3.3: Variação da abundância inicial dos elementos de acordo com a metalicidade.

Capítulo 4

Resultados e conclusões

4.1 Resultados

A seguir, apresentamos os resultados das simulações realizadas com o programa NA-HOON mostrando, primeiramente, os gráficos da evolução temporal das abundâncias de diversas moléculas com respeito à variação da composição química inicial que adotamos para a nuvem molecular. O tempo de vida da nuvem simulada é de 10^6 anos, representativo para a expectativa de vida de uma nuvem molecular real. Mais adiante, apresentamos estudos estatísticos realizados levando em consideração toda a amostra de moléculas.

Para esta discussão, destacamos seis grupos arbitrários de moléculas, a saber:

- **moléculas “fundamentais”:** CO_2 , H_2O , HCN , HNC , NH_3 e CH_4 .
- **moléculas orgânicas diversas:** H_2CO , CH_2O_2 , CH_4O , HCOOCH_3 , $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ e CH_3OCH_3 .
- **cianopolienos:** HC_3N , HC_5N , HC_7N e HC_9N .
- **moléculas policarbonadas:** $\text{CH}_3\text{C}_4\text{H}$, C_8H_2 , C_9H_2 , $\text{CH}_3\text{C}_6\text{H}$, $\text{CH}_3\text{C}_7\text{N}$ e C_6H_6 .
- **moléculas fosforadas:** PN , PO , HCP , HPO , PH_2 e CH_2PH .
- **moléculas oxigenadas:** CO , NO , HNO , HCO , OCN , OCS , C_3O , H_2O_2 , NH_2CHO , $\text{C}_2\text{H}_2\text{O}$, $\text{C}_2\text{H}_4\text{O}$, e $\text{C}_2\text{H}_6\text{CO}$.

Procuramos escolher diversos tipos de moléculas que possam ser interessantes do ponto de vista biológico. O primeiro grupo é formado por moléculas cuja importância refere-se ao fato de serem algumas das mais abundantes moléculas encontradas no meio interestelar, ou por serem as principais moléculas formadoras dos mantos que recobrem os gelos astrofísicos, como o CO_2 e o H_2O . Além disso, o HCN é uma molécula precursora das bases nitrogenadas, encontradas no ADN. Temos, também, o grupo das moléculas orgânicas, cuja importância já foi tratada no seção 1.2.2. Exemplos deste grupo são o formaldeído, H_2CO , e o éter dimetil, CH_3OCH_3 . Outro grupo é o dos cianopolienos, que

também são moléculas orgânicas nitrogenadas, de estrutura linear, podendo conter um enorme número de carbonos. Um exemplo deste grupo é o cianoacetileno, de estrutura molecular HC_3N . As moléculas policarbonadas formam um outro grupo de moléculas, que também são moléculas orgânicas, mas que possuem um grande número de átomos de carbono em sua composição. As moléculas fosforadas também são importantes, pelo fato de o fósforo participar ativamente da bioquímica dos organismos, como, por exemplo, no armazenamento e transmissão de informação, através dos ácidos nucleicos e na estrutura das membranas, através dos fosfolipídios, formando mais um dos grupos estudados. Por último, temos o grupo das moléculas oxigenadas, sendo a maioria orgânicas.

Apresentamos dois tipos de gráficos para cada um dos grupos: o primeiro gráfico mostra a simulação da evolução temporal das abundâncias das moléculas do grupo em nuvens de seis diferentes composições químicas iniciais até o momento de pré-colapso, de 10^6 anos. Cabe lembrar que a composição química inicial será apresentada nos gráficos pelo valor de $[\text{Fe}/\text{H}]$ correspondente; contudo, cada valor de $[\text{Fe}/\text{H}]$ corresponde a composições iniciais distintas (ver Tab. 3.5). O segundo gráfico mostra a comparação entre as abundâncias finais calculadas para cada uma das diferentes nuvens moleculares, onde podemos verificar mais facilmente como a abundância final das moléculas varia com a metalicidade e composição química inicial adotadas para a nuvem.

Em seguida, apresentamos os estudos estatísticos realizados com toda a amostra. Com este estudo, procuramos verificar se a nuvem molecular atinge o seu equilíbrio químico antes de se colapsar. Para isso, verificamos o comportamento da curva de variação da abundância molecular através do seu coeficiente angular, que mostra a taxa com que uma molécula continua sendo produzida ou destruída após 10 % do tempo de vida total da nuvem, i.e., 10^5 anos.

Por último, mostramos duas tabelas que comparam as abundâncias por nós calculadas e resultados observacionais para diversas moléculas.

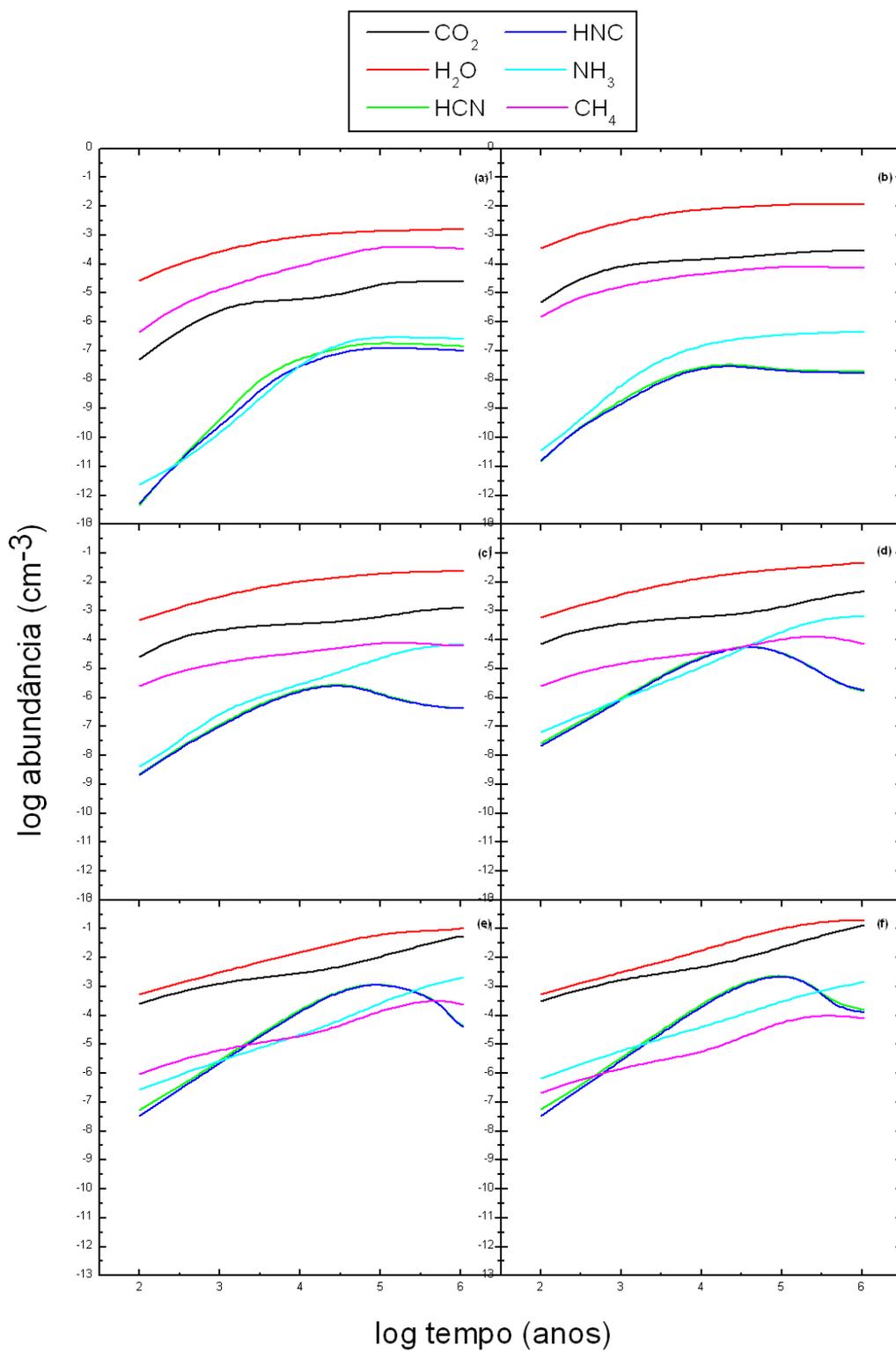


Figura 4.1: Evolução temporal das abundâncias de diversas moléculas fundamentais para diversas composições químicas iniciais: (a) $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.5$, (b) $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.0$, (c) $[\text{Fe}/\text{H}] = -1.5$, (d) $[\text{Fe}/\text{H}] = -1.0$, (e) $[\text{Fe}/\text{H}] = -0.5$, (f) $[\text{Fe}/\text{H}] = 0.0$.

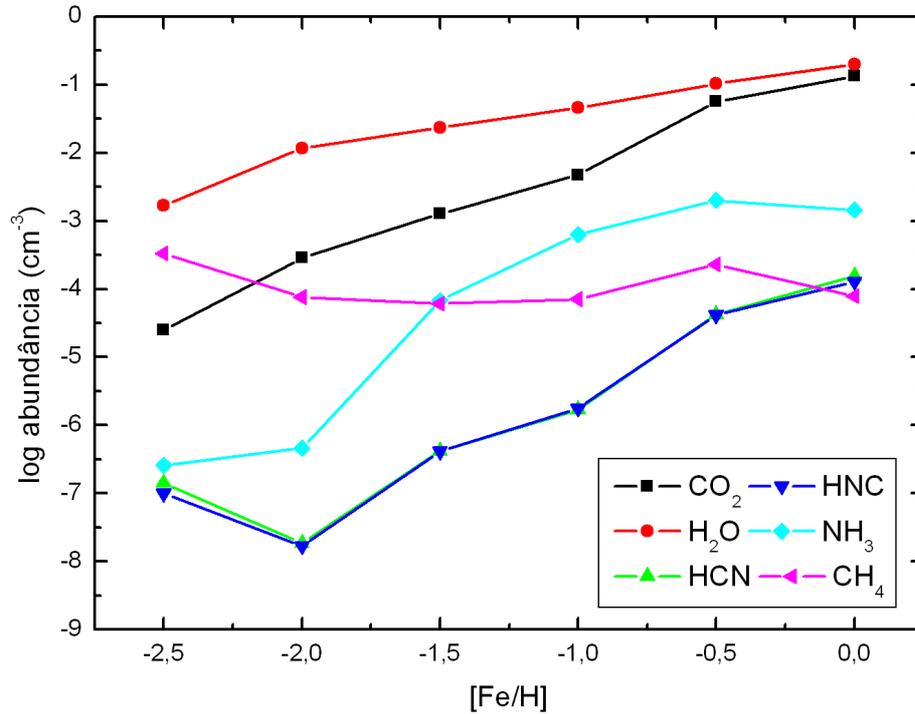


Figura 4.2: Comparação entre as abundâncias finais de diversas moléculas fundamentais calculadas ao final de 10^6 anos para as diversas composições químicas iniciais consideradas, representadas por $[Fe/H]$.

A Fig. 4.1 mostra a variação das abundâncias de algumas das moléculas mais importantes no meio interestelar, seja pela sua alta abundância tanto no meio interestelar como também na Terra, seja pelas suas funções pré-bióticas.

Os painéis mostram a variação da abundância molecular para nuvens de composições químicas iniciais distintas ao longo da vida da nuvem (10^6 anos). No painel (a), que representa a evolução química de uma nuvem pobre, com $[Fe/H] = -2.5$, percebemos que as moléculas HCN e HNC são as menos abundantes deste grupo. Essa situação permanece praticamente a mesma quando consideramos uma nuvem mais rica, como no painel (f), onde podemos perceber, claramente, que apenas o metano se torna menos abundante passados 10^6 anos. Estes dois isômeros possuem comportamentos muito semelhantes, e suas abundâncias evoluem praticamente da mesma forma. A evolução das abundâncias dessas duas moléculas é bastante peculiar. Suas abundâncias possuem um comportamento acentuado de crescimento até um tempo em torno de 10^5 anos e, então, caem fortemente. Esse comportamento é mais visível em nuvens de metalicidades altas, como podemos ver nos painéis (d), (e) e (f). Já a molécula de água e o dióxido de carbono são as mais abundantes, independentemente da metalicidade da nuvem. Essas duas moléculas são

essenciais para a manutenção da Vida na Terra, como visto na seção 1.2.1 sobre a molécula de água. O dióxido de carbono é uma molécula utilizada por plantas para a realização da fotossíntese, e um dos reguladores da temperatura terrestre, uma vez que participa da composição química da atmosfera. Atualmente, acredita-se que uma quantidade maior de dióxido de carbono estava presente na atmosfera primitiva da Terra, diferente do que se acreditava à época dos experimentos de Miller, juntamente com água, N_2 e pequenas quantidades de CO e H_2 . Apenas pequenas quantidades de aminoácidos são formadas com esta mistura, e experimentos mostram que nenhum composto orgânico é formado quando se reproduz os efeitos de impactos com a atmosfera, como o que ocorreu à Terra durante o período pré-biótico (McKay & Borucki 1997), no caso da atmosfera primitiva da Terra ter realmente sido rica em CO_2 .

Estes comportamentos são mais fáceis de serem percebidos se considerarmos a Fig. 4.2, que mostra uma comparação entre as abundâncias finais de cada molécula passados 10^6 anos de vida da nuvem molecular em nuvens de diferentes metalicidades. Podemos perceber que, com exceção do CH_4 , todas as moléculas têm suas abundâncias finais mais elevadas em nuvens quimicamente ricas. Entretanto, para uma nuvem de metalicidade $[Fe/H] = -2.0$, as moléculas HCN e HNC possuem abundâncias menores se comparadas às outras nuvens.

Apesar de a água ser a molécula mais abundante em todas as nuvens simuladas, percebemos que o dióxido de carbono, CO_2 , possui um crescimento mais acentuado. Podemos analisar este fato levando em consideração os elementos constituintes destas moléculas. Como visto na seção 1.4, todos os elementos mais pesados que o H e o He são chamados de metais, e referenciados pela letra Z . A abundância da molécula CO_2 deveria ser proporcional à Z na terceira potência em primeira aproximação, ou seja, $CO_2 \propto Z^3$, já que é composto por três metais. O metano, por sua vez, é formado por apenas um metal, logo, $CH_4 \propto Z^1$. Dessa forma, à medida que a metalicidade cresce, a abundância do CO_2 tende a crescer mais rapidamente que a do CH_4 . Além disso, a taxa de crescimento da abundância de CO_2 é maior que a da molécula de água, mesmo sendo esta mais abundante. Como a água é formada por apenas um metal, sua taxa de crescimento é proporcional a Z na primeira potência apenas, $H_2O \propto Z^1$. Por outro lado, moléculas contendo nitrogênio, como os isômeros HCN e HNC , parecem não seguir esta tendência durante toda a vida da nuvem, uma vez que suas abundâncias caem a partir de 10^5 anos em nuvens mais ricas, mesmo sendo proporcionais a Z à segunda potência.

Os gelos astrofísicos são importantes constituintes do meio interestelar. São pequenos grãos formados por um núcleo de silicados e um manto de moléculas condensadas do meio interestelar. H_2O , NH_3 e CO_2 estão entre as principais moléculas condensadas nas superfícies dos grãos, formando uma camada de gelo onde novas moléculas podem ser formadas, quando lá se depositam, de forma que conseguem se abrigar das radiações provindas de fontes energéticas próximas, sobrevivendo à dissociação e podendo reagir

umas com as outras formando moléculas mais complexas.

Essas moléculas são simples e muito abundantes independentemente das metalicidades das nuvens e suas composições químicas, mostrando que são facilmente formadas no meio interestelar. Além disso, são moléculas pré-bióticas e, como a água, por exemplo, essenciais para a manutenção da Vida na Terra.

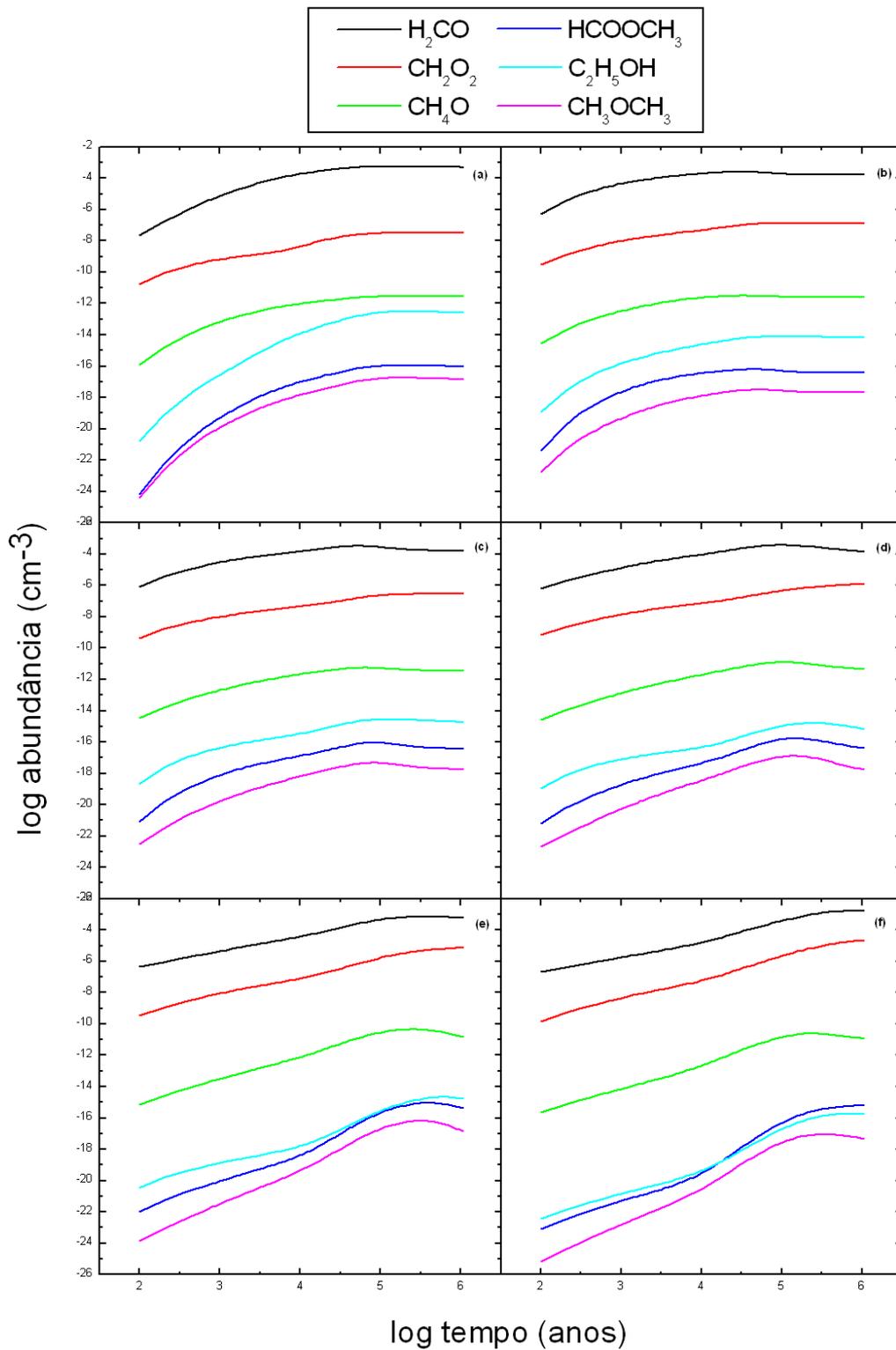


Figura 4.3: Evolução temporal das abundâncias de diversas moléculas orgânicas para diversas composições químicas iniciais: (a) $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.5$, (b) $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.0$, (c) $[\text{Fe}/\text{H}] = -1.5$, (d) $[\text{Fe}/\text{H}] = -1.0$, (e) $[\text{Fe}/\text{H}] = -0.5$, (f) $[\text{Fe}/\text{H}] = 0.0$.

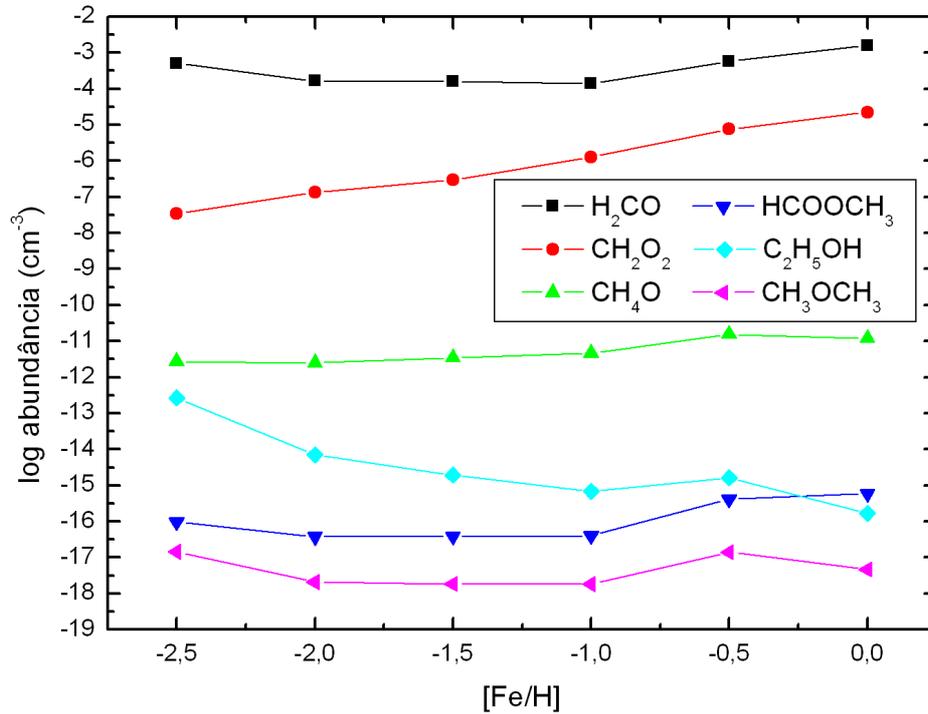


Figura 4.4: Comparação entre as abundâncias finais de diversas moléculas orgânicas calculadas ao final de 10^6 anos para para as diversas composições químicas iniciais consideradas, representadas por $[Fe/H]$.

A Fig. 4.3 mostra a evolução da abundância de diversas moléculas orgânicas, entre elas o formaldeído, H_2CO . Todas apresentam comportamento semelhante para as nuvens mais pobres, como podemos ver nos painéis (a), (b) e (c). No entanto, considerando nuvens ricas, as abundâncias crescem consideravelmente, em especial as abundâncias das moléculas $HCOOCH_3$, C_2H_5OH e CH_3OCH_3 . Observando a Fig. 4.4, percebemos que a abundância final de cada uma delas não muda consideravelmente, com exceção do C_2H_5OH , que possui uma queda um pouco mais acentuada se compararmos a sua abundância final para uma nuvem rica e uma nuvem pobre em metais. Entretanto, o comportamento de todas as demais é de crescimento suave para cada uma das composições químicas iniciais, mas podendo apresentar uma queda suave entre $[Fe/H] = -2,0$ e $[Fe/H] = -1,5$ para as moléculas H_2CO , $HCOOCH_3$ e CH_3OCH_3 .

A ordem de moléculas que possuem abundâncias mais altas é mantida praticamente constante neste grupo, havendo apenas um momento em que duas delas se alternam; entre $[Fe/H] = -0,5$ e $[Fe/H] = 0,0$, o $HCOOCH_3$ passa a ser a quarta molécula mais abundante deste grupo, invertendo a posição com o C_2H_5OH que vem de um comportamento contínuo de queda. Ainda, podemos ver que a diferença entre as abundâncias finais entre as

moléculas mais e menos abundantes, para qualquer $[\text{Fe}/\text{H}]$ inicial, é muito grande, sendo as mais complexas as menos abundantes.

Vale notar que nenhuma das moléculas deste grupo possui nitrogênio e, também, nenhuma possui um comportamento de queda brusca de suas respectivas abundâncias ao fim da vida de uma nuvem molecular, passados 10^6 anos.

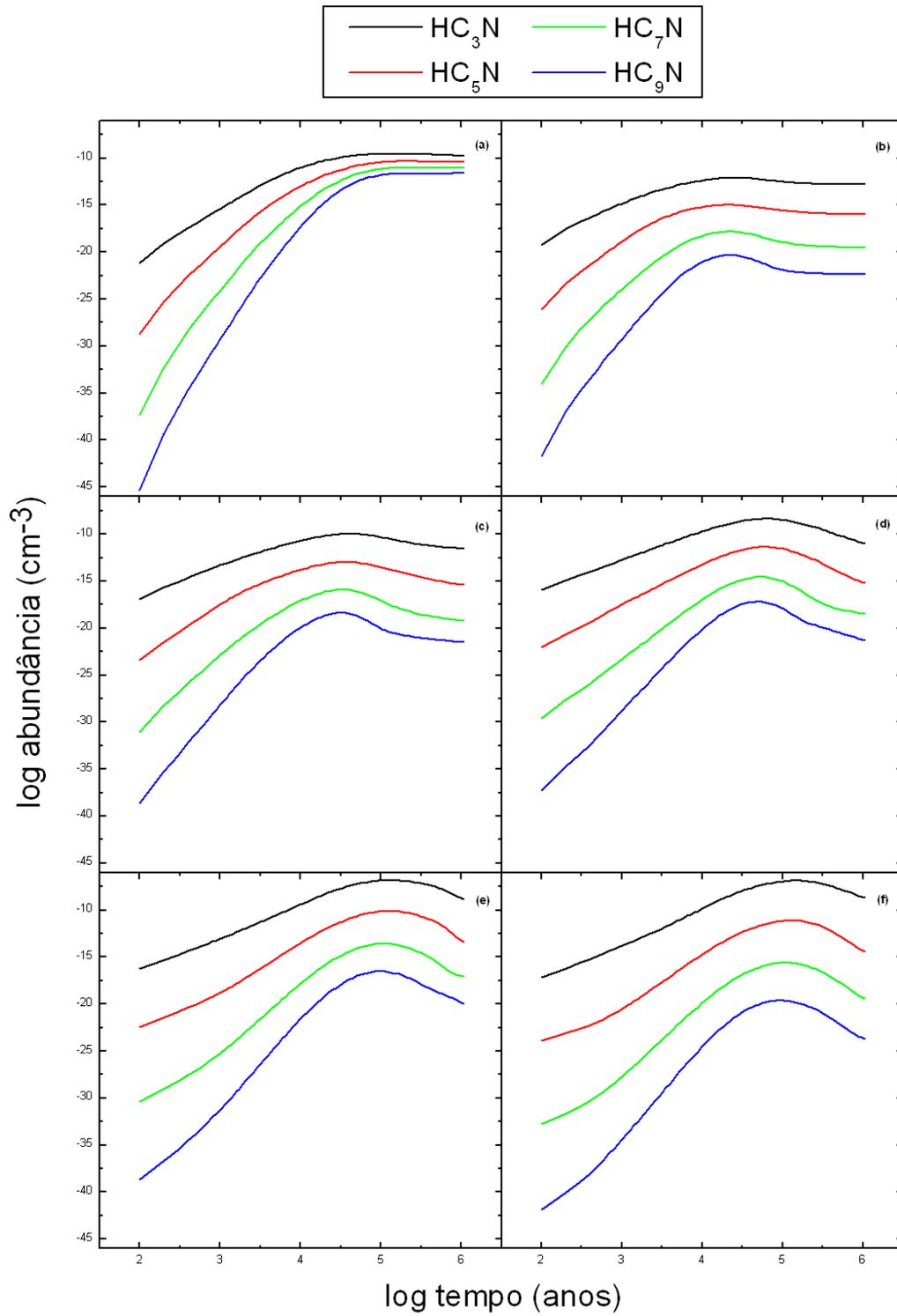


Figura 4.5: Evolução temporal das abundâncias de cianopolíenios para diversas composições químicas iniciais: (a) $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.5$, (b) $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.0$, (c) $[\text{Fe}/\text{H}] = -1.5$, (d) $[\text{Fe}/\text{H}] = -1.0$, (e) $[\text{Fe}/\text{H}] = -0.5$, (f) $[\text{Fe}/\text{H}] = 0.0$.

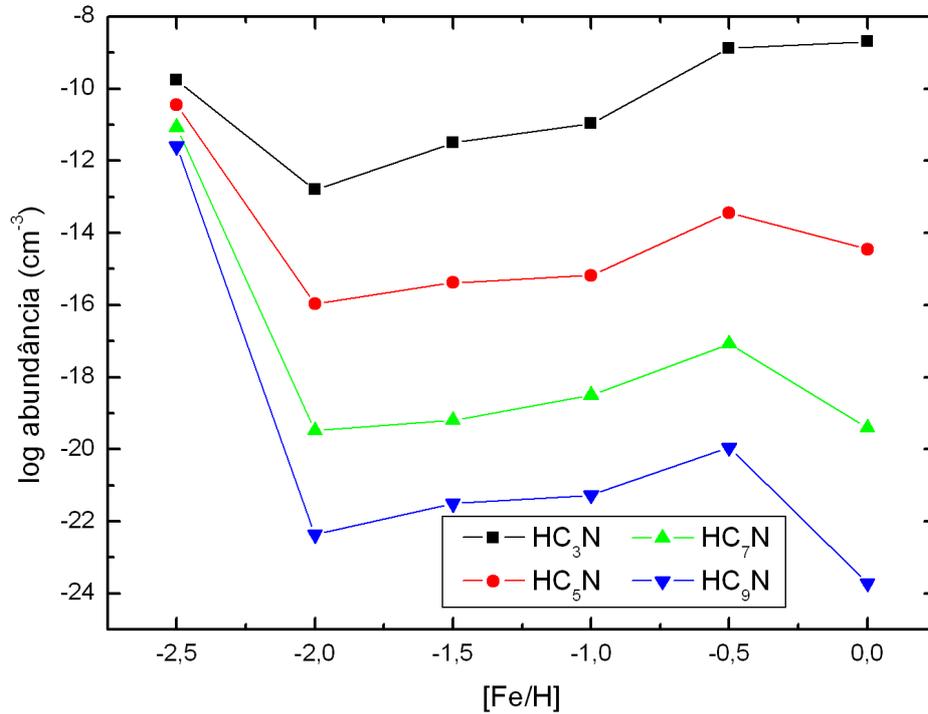


Figura 4.6: Comparação entre as abundâncias finais de diversos cianopolíenios calculadas ao final de 10^6 anos para as diversas composições químicas iniciais consideradas, representadas por $[Fe/H]$.

Apresentamos agora o comportamento de algumas moléculas pertencentes ao grupo chamado cianopolíenios, que são moléculas lineares podendo possuir uma longa cadeia de carbonos e um átomo de hidrogênio ligado a uma extremidade da cadeia carbônica e outro de nitrogênio ligado a outra extremidade.

Percebemos, pela Fig. 4.5, que o comportamento dessas moléculas é bastante semelhante, tal que, não importa a metalicidade, a ordenação das moléculas em abundância permanece constante. O comportamento dessas moléculas é de forte crescimento até um período de cerca de 10^5 anos, permanecendo estável a partir daí em nuvens pobres, como mostram os painéis (a) e (b), ou apresentando queda em nuvens mais ricas, como mostram os painéis (e) e (f). Vemos, também, que quão maior for a quantidade de carbonos na molécula, menos abundante ela é ao final do tempo de vida da nuvem. No entanto, considerando a evolução dessas moléculas em qualquer uma das nuvens, percebe-se que suas abundâncias aumentam consideravelmente com o tempo. A diferença entre a mais abundante, HC_3N , e a menos abundante, HC_9N , aumenta conforme também aumentamos a metalicidade, de forma que a diferença entre as abundâncias dessas moléculas se torna enorme ao fim da evolução química de 10^6 anos para uma nuvem de $[Fe/H]=0.0$, como

mostra a Fig. 4.6. Entretanto, a abundância final das moléculas após 10^6 anos é praticamente constante entre as metalicidades $[\text{Fe}/\text{H}] = -1.5$ e $[\text{Fe}/\text{H}] = -0.5$, apresentando um aumento suave nesta faixa. Nas outras faixas de metalicidade, todas as abundâncias caem mais rapidamente.

De uma forma geral, as abundâncias dessas moléculas diminui com o aumento da cadeia carbônica, de forma que os cianopolienos maiores e mais complexos possuem abundâncias inferiores aos mais simples, fato confirmado pela abundância final do HCN, como mostrado na Fig. 4.2, que é bastante superior às abundâncias dos cianopolienos, comportamento esse que acontece para todas as metalicidades. Este comportamento é bastante curioso e peculiar. Aparentemente, moléculas que possuem nitrogênio em sua estrutura possuem comportamentos semelhantes, como veremos nos gráficos a seguir.

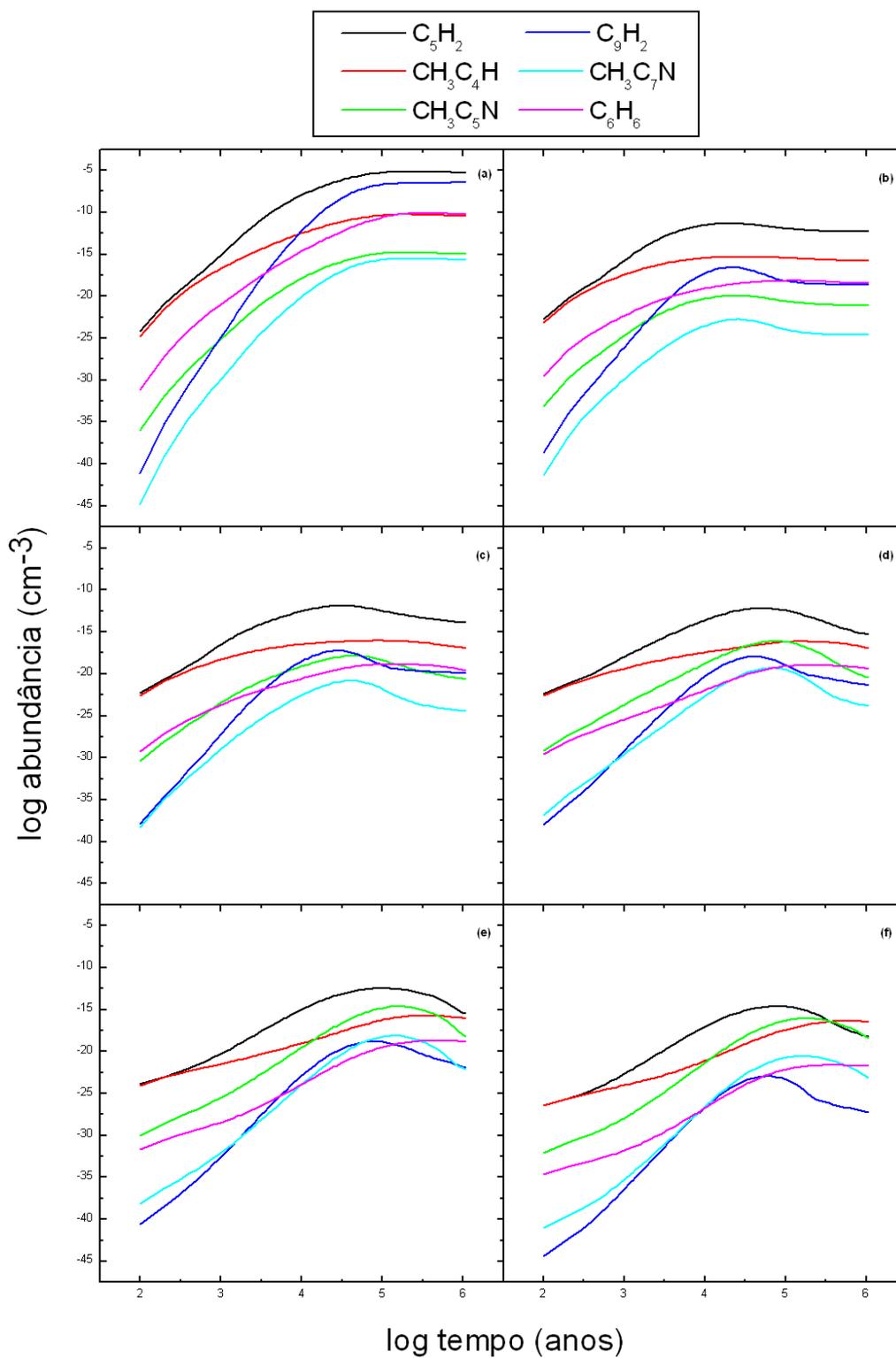


Figura 4.7: Evolução temporal das abundâncias de diversas moléculas policarbonadas para diversas composições químicas iniciais: (a) $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.5$, (b) $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.0$, (c) $[\text{Fe}/\text{H}] = -1.5$, (d) $[\text{Fe}/\text{H}] = -1.0$, (e) $[\text{Fe}/\text{H}] = -0.5$, (f) $[\text{Fe}/\text{H}] = 0.0$.

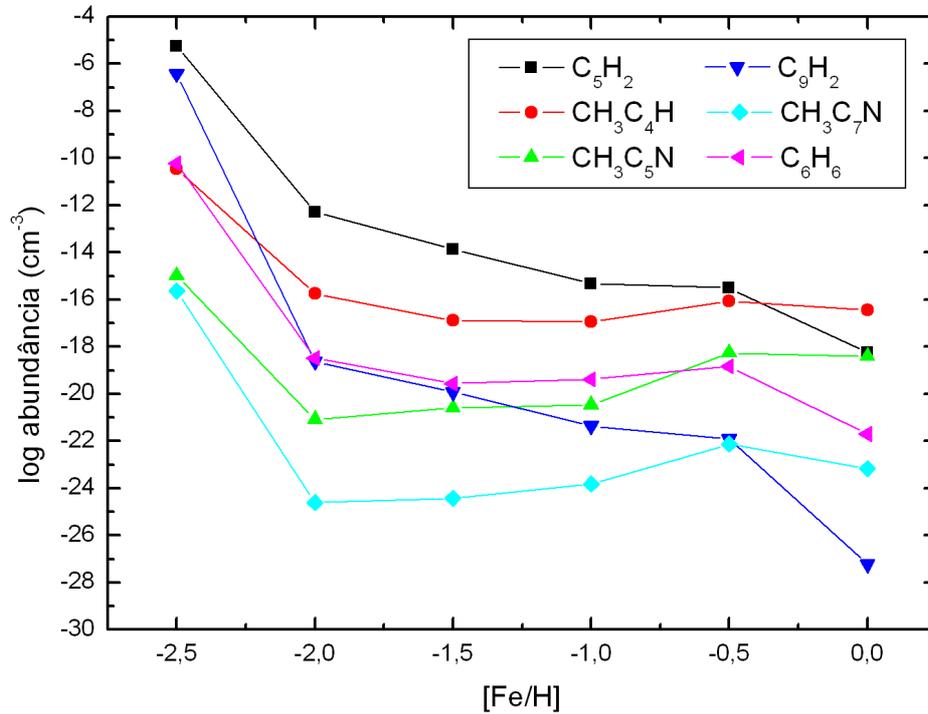


Figura 4.8: Comparação entre as abundâncias finais de diversas moléculas policarbonadas calculadas ao final de 10^6 anos para as diversas composições químicas iniciais, representadas por $[Fe/H]$.

O comportamento geral das abundâncias dessas moléculas é de crescimento, considerando o decorrer da vida de uma nuvem com qualquer uma das metalicidades, como mostra a Fig. ???. No entanto, ao observarmos a Fig. 4.8, vemos que as abundâncias finais comparadas para um tempo de 10^6 anos caem consideravelmente, ou seja, quanto mais rica a nuvem, menor a abundância de moléculas contendo muitos carbonos. Esse é um comportamento geral compartilhado com os cianopolienos mais complexos, como mostra a Fig. 4.6.

Possivelmente, com o aumento da metalicidade e, conseqüentemente, a disponibilidade de átomos de carbono, as espécies moleculares começam a disputar esses átomos, aumentando a variedade de moléculas formadas capazes de reagir com o carbono. Como temos mais moléculas em disputa pelos mesmos átomos, espera-se que suas abundâncias finais sejam, de fato, menores pelo aumento na abundância final de uma maior variedade de moléculas (não apresentadas na figura).

Ainda observando a Fig. 4.8, vemos que a ordem entre as moléculas mais e menos abundantes, ao final de 10^6 anos, para as diversas metalicidades, muda inúmeras vezes, de forma que, por exemplo, uma nuvem mais pobre produz uma menor quantidade de

$\text{CH}_3\text{C}_7\text{N}$ e uma quantidade maior de C_5H_2 . Já uma nuvem rica, com $[\text{Fe}/\text{H}]=0.0$, ao final de sua vida, produz uma quantidade maior de $\text{CH}_3\text{C}_4\text{N}$ e menor de C_9H_2 . Curioso notar que, para uma nuvem rica, a ordenação em abundância das moléculas segue a mesma ordem da quantidade de carbonos nelas presentes, ou seja, quanto mais carbonos, menos abundante a molécula é ao final do tempo de vida de uma nuvem rica, como pode ser verificado, também, pela Fig. 4.9, que mostra a abundância final de diversas moléculas com relação à quantidade de átomos de carbono contidos em sua estrutura. Em nossa amostra, existe um maior número de moléculas que contém menos carbonos, podendo deixar esta análise um tanto tendenciosa. No entanto, como veremos mais adiante, através de estudos estatísticos de toda a amostra, moléculas policarbonadas são preferencialmente destruídas após 10% do tempo de vida da nuvem, mostrando que, de fato, elas possuem um pico de abundância não muito alto que é atingido muito antes de outras moléculas, o que faz com que, uma vez atingido o máximo de abundância, as reações pelas quais começam a participar são, preferencialmente, de destruição.

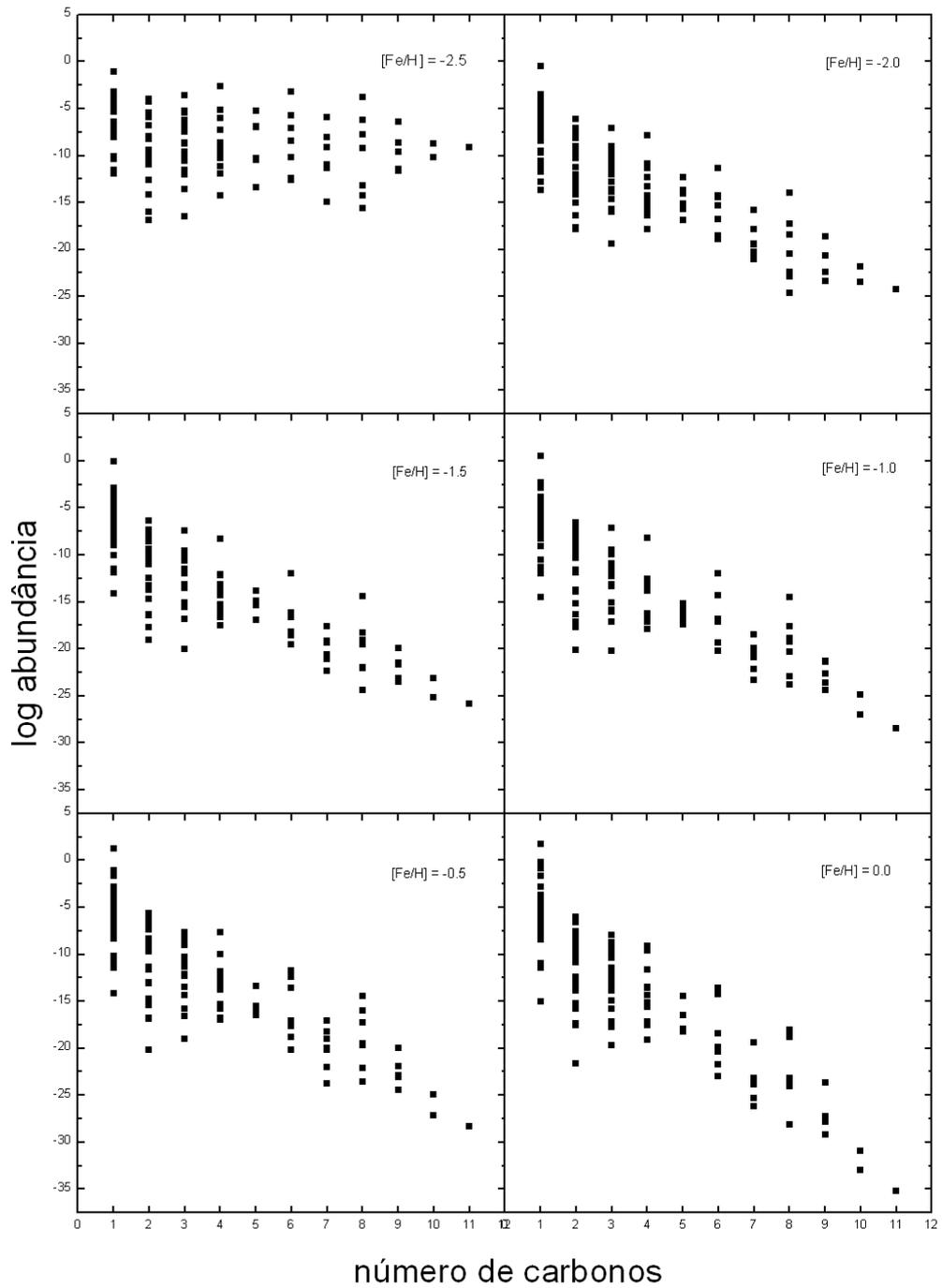


Figura 4.9: A abundância final das moléculas contendo carbonos é maior para moléculas simples. As moléculas policarbonadas tendem a ter abundâncias finais significativamente menores que as mais simples.

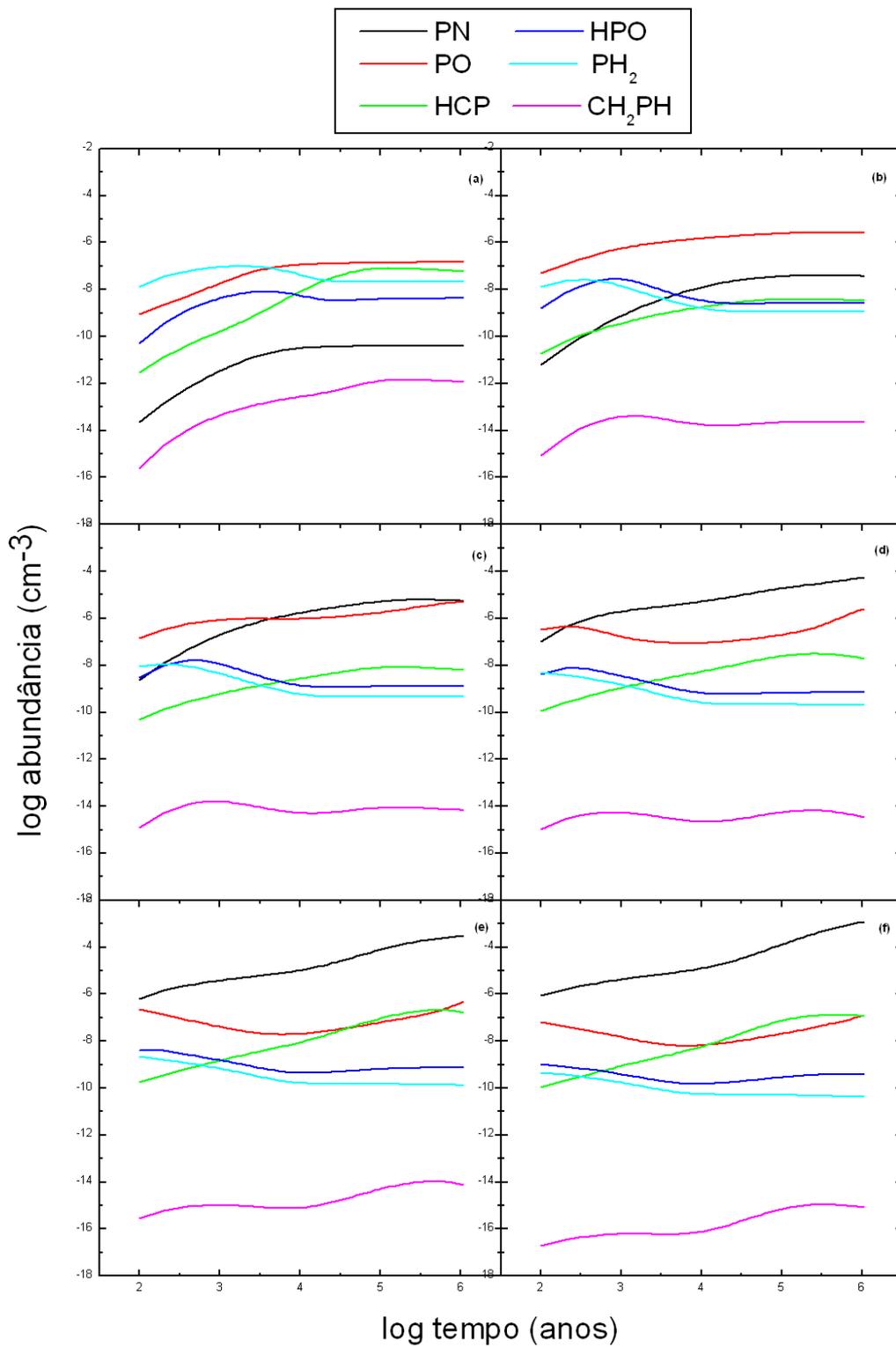


Figura 4.10: Evolução temporal das abundâncias de diversas moléculas fosforadas para diversas composições químicas iniciais: (a) $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.5$, (b) $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.0$, (c) $[\text{Fe}/\text{H}] = -1.5$, (d) $[\text{Fe}/\text{H}] = -1.0$, (e) $[\text{Fe}/\text{H}] = -0.5$, (f) $[\text{Fe}/\text{H}] = 0.0$.

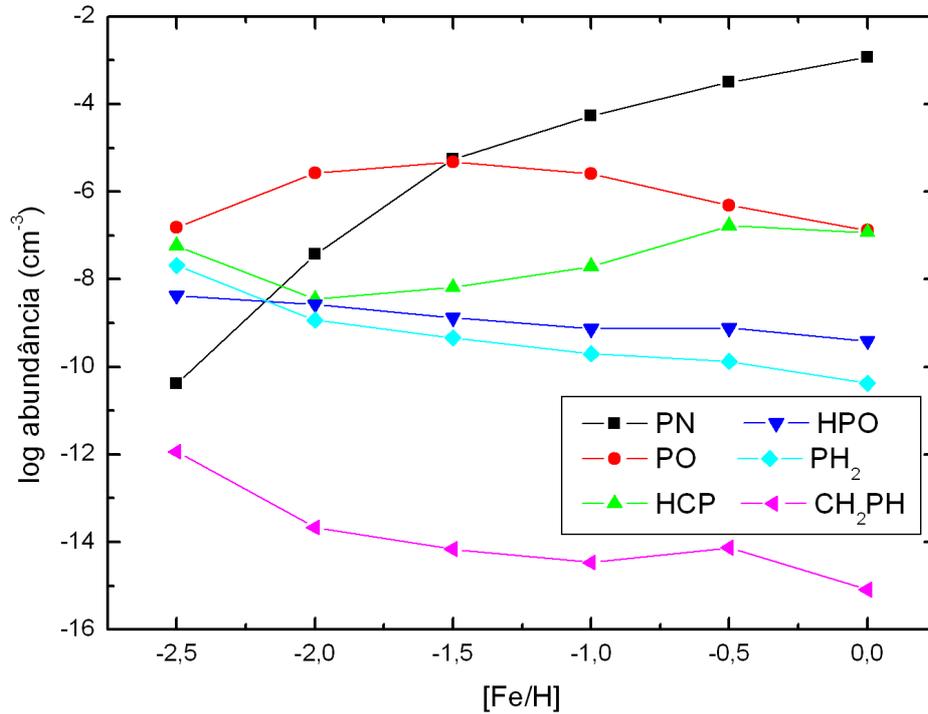


Figura 4.11: Comparação entre as abundâncias finais de diversas moléculas fosforadas calculadas ao final de 10^6 anos para diversas composições químicas iniciais, representadas por $[Fe/H]$.

Agora vamos analisar o que acontece com as moléculas fosforadas. Uma vez que o fósforo é um importante elemento para a bioquímica dos seres vivos, estando envolvido, por exemplo, no armazenamento e transferência de informação através dos ácido nucleicos, transferência de energia e estrutura da membrana celular, a detecção e determinação das abundâncias das espécies que contêm fósforo é de grande interesse.

Pela Fig. 4.10 podemos perceber que o comportamento das abundâncias dessas espécies é um tanto tumultada numa nuvem de baixa metalicidade, como mostra os painéis (a) e (b), comportamento que vai se modificando conforme aumentamos a metalicidade. Numa nuvem de metalicidade mais alta, como nos painéis (e) e (f), podemos ver que essas moléculas possuem um comportamento mais suave. De uma forma geral, no início da evolução química da nuvem, até 10^4 anos, as abundâncias dessas moléculas são pouco estáveis, fazendo com que elas alternem inúmeras vezes as posições de mais e menos abundantes, estabilizando no final do tempo de vida da nuvem.

Uma inspeção na Fig. 4.11 mostra que essas moléculas possuem comportamentos diversos quando comparamos suas abundâncias finais para nuvens de diferentes metalicidades. As moléculas PN e HCP possuem aumento de abundância, enquanto que todas

as outras possuem um comportamento de queda, com exceção do PO que possui um comportamento um pouco mais peculiar, apresentando crescimento em sua abundância final para nuvens com metalicidades entre $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.5$ e $[\text{Fe}/\text{H}] = -1.5$ mas, por outro lado, queda no intervalo seguinte de metalicidade. Essas moléculas são as mais exóticas, do ponto de vista de composição química. Entretanto, são mais abundantes do que as moléculas orgânicas mostradas na Fig. 4.8.

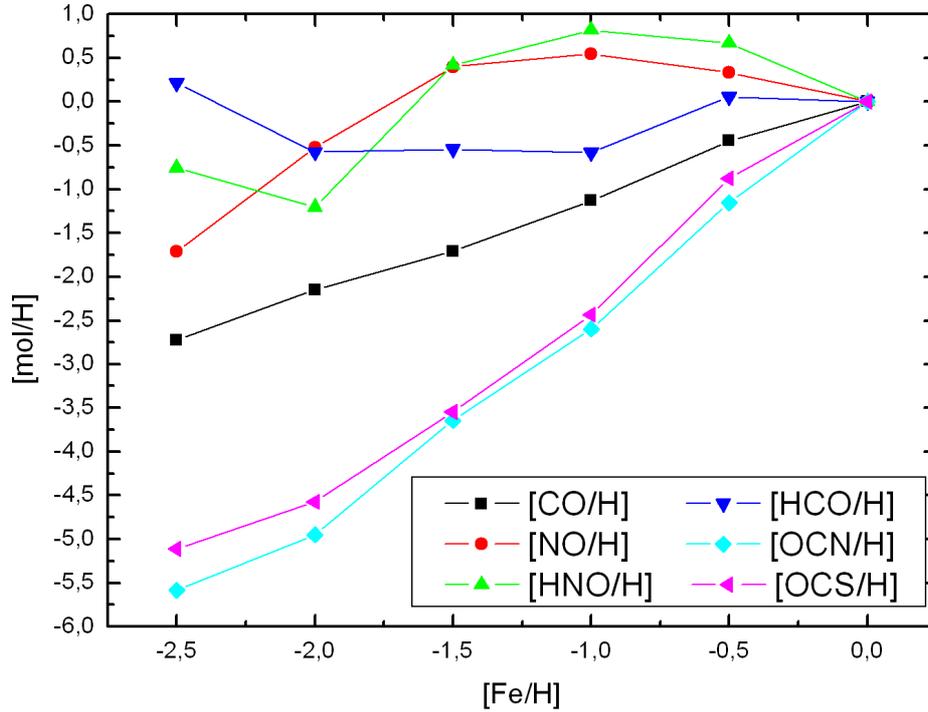


Figura 4.12: Comparação entre as abundâncias finais das moléculas oxigenadas.

Por fim, vamos analisar o grupo das moléculas oxigenadas. A Fig. 4.12 mostra a evolução da abundância [mol/H], de diversas moléculas oxigenadas, tal que o símbolo “mol” refere-se a uma determinada molécula deste grupo. Para melhor compreender esta figura e a próxima, vamos estabelecer uma nova nomenclatura: chamaremos de *Nuvem Molecular Colapsante Padrão* — NMCP — a nuvem com composição química solar, cuja metalicidade é [Fe/H]=0.0, no momento de pré-colapso, momento em que calculamos as abundâncias finais das moléculas, após 10^6 anos. Isso quer dizer que o ponto NMCP corresponde a um estado físico da nuvem molecular, e será a nossa base de comparação entre as abundâncias moleculares.

Olhando a Fig. 4.12, podemos comparar as abundâncias finais das diversas moléculas deste grupo de uma forma diferente como vínhamos fazendo até então. O ponto onde [Fe/H]=0.0 corresponde à NMCP. Tomando como exemplo a molécula CO, vemos que para uma nuvem de [Fe/H]= -2.5, a sua abundância final corresponde a $10^{-2.75}$ da sua abundância na NMCP. Podemos dizer isso da seguinte forma:

$$\epsilon(\text{CO})_{-2.5} \approx 10^{-2.75} \epsilon(\text{CO})_{\text{NMCP}}, \quad (4.1)$$

o que equivale a quase dois milésimos da composição final na NMCP. As moléculas CO, OCS e OCN são sempre menos abundantes nas nuvens de metalicidades mais baixas que a NMCP. As outras moléculas possuem comportamentos um pouco diferentes. A molécula HCO, por exemplo, é mais abundante no pré-colapso duma nuvem de $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.5$ do que na NMCP, de forma que

$$\epsilon(\text{HCO})_{-2.5} \approx 10^{0.25} \epsilon(\text{HCO})_{\text{NMCP}}, \quad (4.2)$$

correspondendo a quase duas vezes a abundância final na NMCP. A sua abundância final também é um pouco mais alta ao final de uma nuvem de $[\text{Fe}/\text{H}] = -0.5$. Entretanto, para as metalicidades intermediárias, a abundância final é sempre menor. Considerando as moléculas NO e HNO, vemos que suas abundâncias finais para nuvens de metalicidades $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.5$ e -2.0 , são consideravelmente menores que na NMCP, mas mais altas para as demais metalicidades. As moléculas menos abundantes deste grupo, OCN e OCS, possuem forte crescimento de suas metalicidades finais conforme aumentamos a metalicidade da nuvem, passando de cerca de três milhões de vezes menos abundantes em nuvens de $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.5$ a cerca de trezentas vezes menos abundantes do que na NMCP.

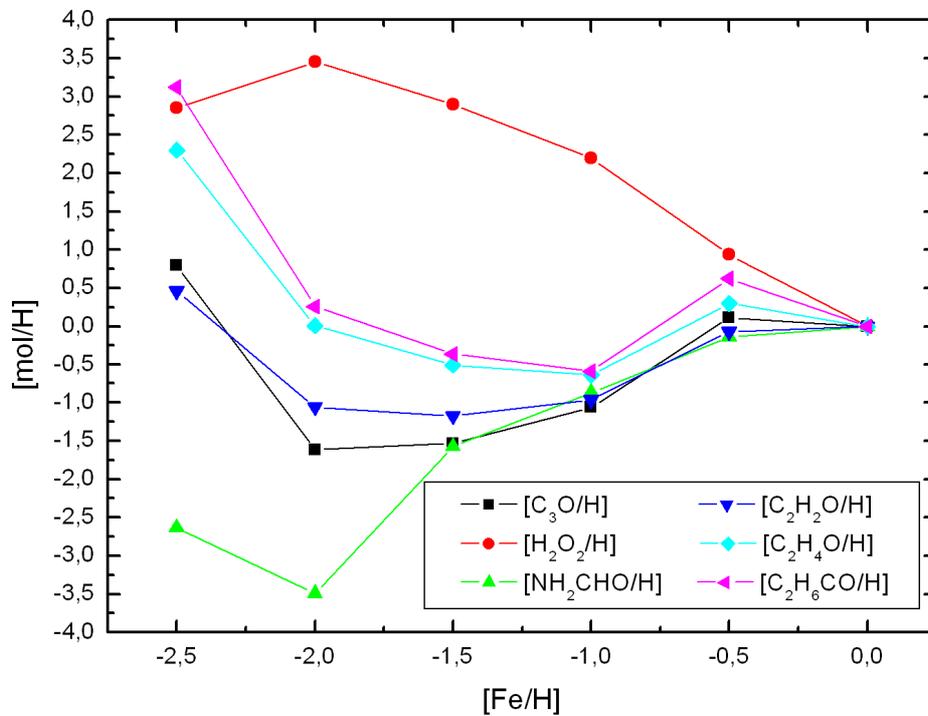


Figura 4.13: Comparação entre as abundâncias finais das moléculas oxigenadas.

A Fig. 4.13 mostra o comportamento da evolução do segundo grupo de moléculas orgânicas oxigenadas. Essas moléculas são mais complexas que as do primeiro grupo, e todas são orgânicas. Seguindo a nossa nomenclatura, vamos analisar a Fig 4.13 baseando-nos na NMCP. Deste grupo, apenas a molécula NH_2 possui abundância final menor para nuvens de metalicidades baixas quando comparadas à NMCP, tal que o menor valor ocorre para $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.0$. Já a molécula H_2O_2 é sempre mais abundantes nas nuvens mais pobres, tendo um pico de abundância para nuvens de $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.0$. Numa nuvem deste tipo pré-colapsante, esta molécula é mais de três mil vezes mais abundante do que na NMCP. Vejamos:

$$\epsilon(\text{H}_2\text{O}_2)_{-2.0} \approx 10^{3.5} \epsilon(\text{H}_2\text{O}_2)_{\text{NMCP}}. \quad (4.3)$$

As demais moléculas são mais abundantes em nuvens mais pobres e menos abundantes em nuvens de metalicidades intermediárias.

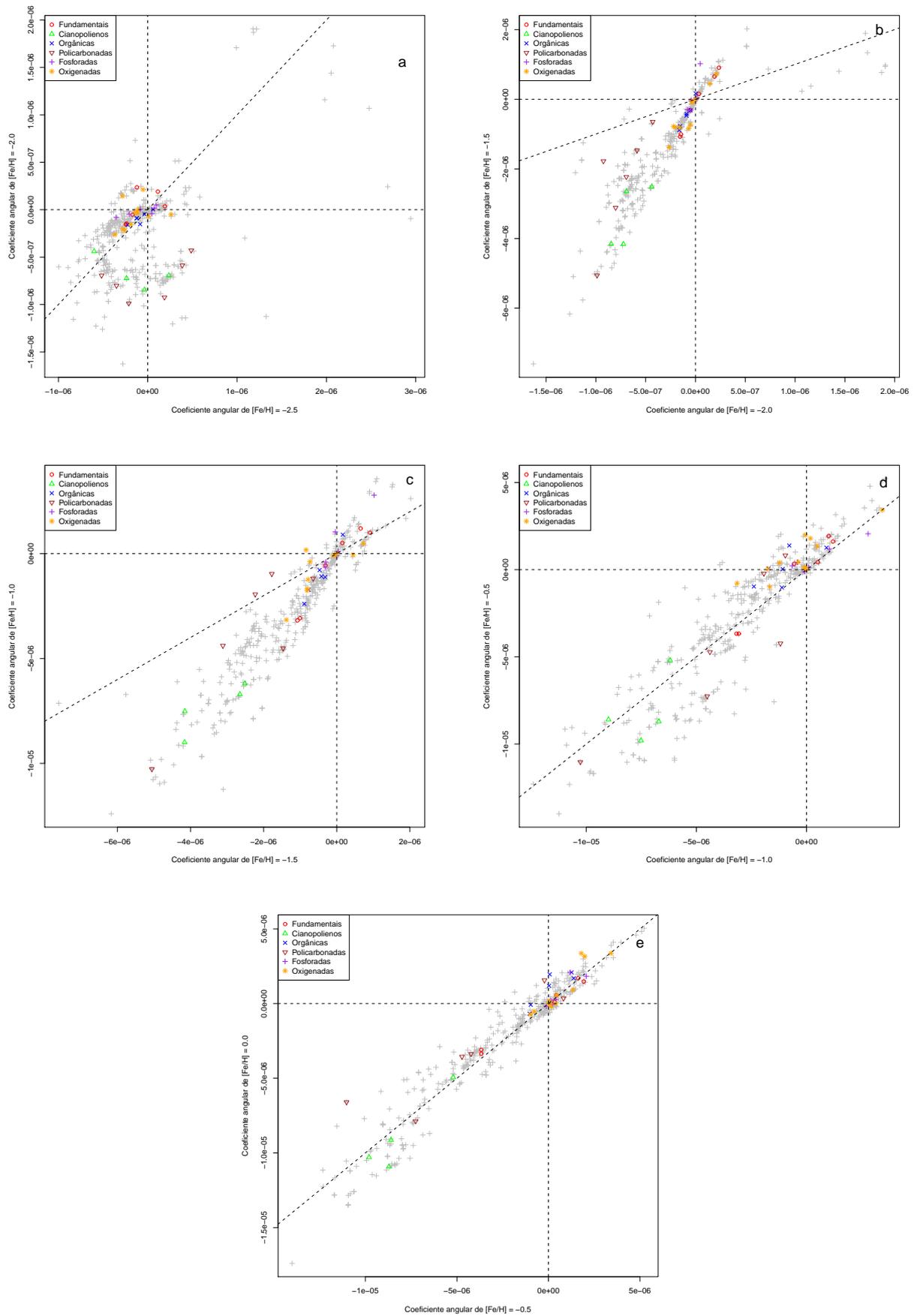


Figura 4.14: Comparação entre os coeficientes angulares para as nuvens de diferentes metalicidades.

A Fig 4.14 mostra estudos estatísticos de toda a amostra de moléculas. São apresentados cinco diagramas mostrando a comparação entre os coeficientes angulares da variação das abundâncias das moléculas para duas diferentes composições químicas iniciais em cada um dos painéis passados 10% do tempo de vida esperado para nuvem, ou seja, após 10^5 anos. A amostra total de moléculas é mostrada em cinza, com o símbolo “+” e as moléculas estudadas separadamente são apresentadas em diversas cores e símbolos.

Começando com o painel (a), temos a comparação feita para nuvens de $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.0$ e $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.5$. A maior parte das moléculas está concentrada na região próxima ao centro do diagrama, ou seja, nas coordenadas $x = 0$ e $y = 0$, mas ainda na parte negativa nos dois eixos. Isso mostra que a maior parte das moléculas é destruída tanto em nuvens de metalicidade $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.0$ como de $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.5$ passados 10% do tempo de vida da nuvem. Todas as moléculas policarbonadas, orgânicas e os cianopolienos são preferencialmente destruídas nessas nuvens, bem como a maior parte das oxigenadas. Apenas algumas das moléculas fundamentais e fosforadas continuam sendo formadas nessas nuvens pobres passados 10^5 anos, mostrando que o pico de abundância molecular para nuvens pobres é atingido muito rapidamente e, depois, elas começam a ser preferencialmente destruídas.

O segundo painel, (b), mostra o mesmo tipo de comparação, mas agora para nuvens de $[\text{Fe}/\text{H}] = -1.5$ e $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.0$. O diagrama mostra que a maior parte das moléculas continua sendo mais destruídas do que produzidas na fase final dos dois tipos de nuvens, de forma que as moléculas policarbonadas e os cianopolienos são as que possuem maior taxa de destruição. Algumas das moléculas fundamentais e oxigenadas ainda continuam sendo produzidas, como no caso anterior.

Agora, considerando o painel (c), vemos que a situação não se altera significativamente, de forma que a maior parte das moléculas continua sendo destruída nas nuvens de $[\text{Fe}/\text{H}] = -1.5$ e $[\text{Fe}/\text{H}] = -1.0$. Apenas uma pequena parcela das moléculas é produzida nas nuvens com essas duas metalicidades, sendo as fundamentais a maioria.

O painel (d), apresenta alguma diferença com relação ao anterior. Aqui, podemos ver que um maior número de moléculas continua sendo produzida em nuvens de $[\text{Fe}/\text{H}] = -0.5$ enquanto que ainda continuam a ser destruídas em nuvens de $[\text{Fe}/\text{H}] = -1.0$. De qualquer forma, os cianopolienos e as policarbonadas ainda continuam a ser destruídas, nos dois tipos de nuvens. Isso indica que essas moléculas atingem a abundância de equilíbrio muito tempo antes da nuvem colapsar, diferentemente das moléculas fundamentais que, possivelmente, não atingem este equilíbrio, ou atingem pouco tempo antes do colapso, continuando a ser formadas até este momento.

O último painel mostra que aumentou a quantidade de moléculas produzidas nos dois tipos de nuvens consideradas, que agora são de $[\text{Fe}/\text{H}] = 0.0$ e $[\text{Fe}/\text{H}] = -0.5$, de forma que mesmo algumas moléculas antes sempre preferencialmente destruídas, como algumas oxigenadas, agora são preferencialmente formadas.

O comportamento geral destes diagramas mostra que a maior parte das moléculas são

destruídas após 10% do tempo de vida da nuvem, independentemente da metalicidade e composição química da nuvem. No entanto, percebemos que elas se aproximam da “linha identidade” conforme aumentamos a metalicidade, no sentido da direita para a esquerda, ou seja, as moléculas começam a ser menos destruídas em nuvens cada vez mais ricas quando comparadas às nuvens mais pobres, após 10% do tempo de vida da nuvem. Entretanto, independentemente da metalicidade, os grupos dos cianopolíenios e das moléculas policarbonadas são sempre os que apresentam maior taxa de destruição, diferentemente do grupo das fundamentais, que normalmente possuem as maiores taxas de produção.

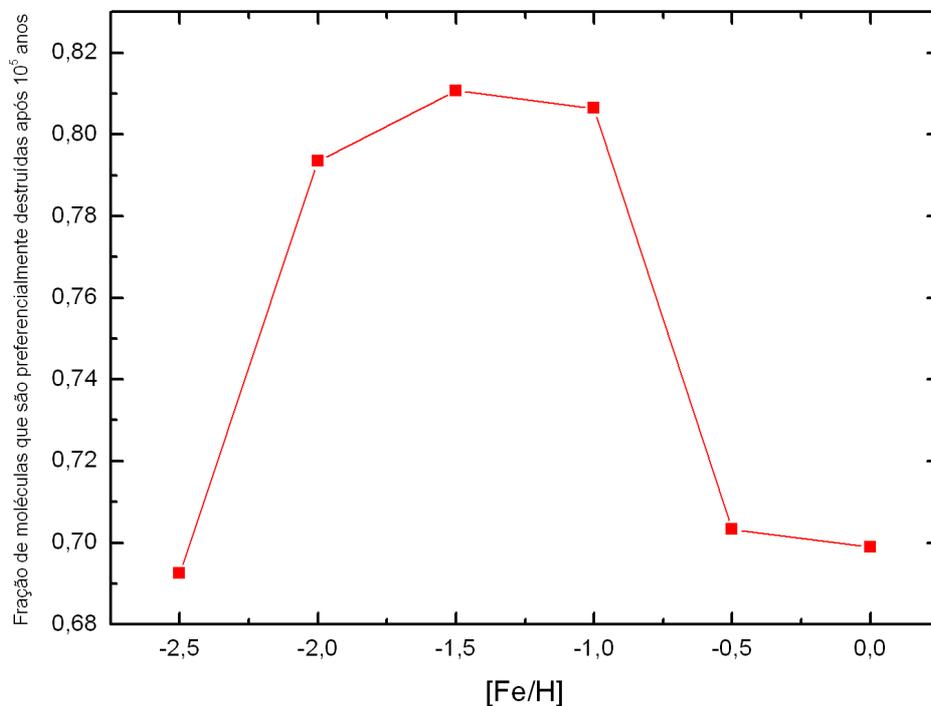


Figura 4.15: Fração de moléculas que são preferencialmente destruídas após 10% do tempo de vida da nuvem.

O comportamento das moléculas descrito anteriormente pode ser melhor apreciado na Fig. 4.15. Esta figura apresenta a fração de moléculas que são preferencialmente destruídas passados os 10% do tempo de vida da nuvem. Para uma nuvem de $[Fe/H] = -2.5$, quase 70% das moléculas atingiram a sua abundância máxima após 10^5 anos, enquanto que para metalicidades maiores a porcentagem é maior, de forma que vai aumentando até $[Fe/H] = -1.5$, quando mais de 80% das moléculas já atingiram a sua abundância máxima, restando-lhes, somente, ser destruídas até a nuvem colapsar. A partir daí, o comportamento se inverte, e começa a decrescer a porcentagem de moléculas que atingem

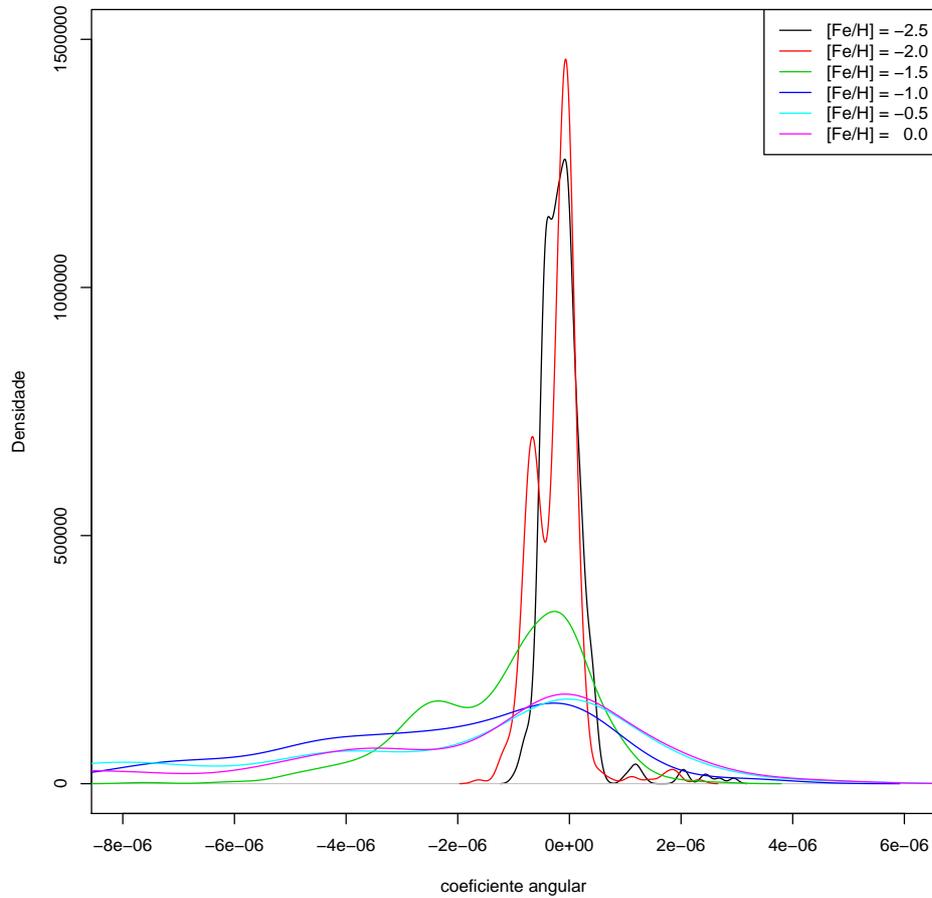


Figura 4.16: Função probabilidade de destruição das moléculas após 10% do tempo de vida da nuvem analisada a partir do coeficiente angular da variação da abundância das moléculas de toda a amostra.

a sua abundância máxima após 10% do tempo de vida da nuvem, sendo de 70% para uma nuvem de $[\text{Fe}/\text{H}]=0.0$. Este comportamento sugere que as moléculas atingem a sua abundância máxima antes que a nuvem colapse.

A Fig. 4.16 mostra uma função de probabilidade do coeficiente angular da variação da abundância de espécies moleculares passados 10% da vida da nuvem. Para nuvens de metalicidade baixas, $[\text{Fe}/\text{H}]= -2.5$ e -2.0 há uma alta concentração de moléculas com coeficiente angular perto de zero, mas negativos. Isso mostra que a imensa maioria das moléculas são destruídas após 10^5 anos de uma nuvem com essas metalicidades, mas com taxas de destruição baixas. Conforme aumentamos a metalicidade, o coeficiente angular médio vai diminuindo e as curvas vão se espalhando, mostrando que, para nuvens de baixa metalicidade, mais moléculas continuam a ser produzidas. Entretanto, a quantidade de moléculas destruídas ainda é maior do que as produzidas, o que vai de encontro com os resultados mostrados anteriormente, mostrando que o equilíbrio químico

da nuvem, chamado de estado estacionário, é atingido, para a maior parte das moléculas aqui consideradas, e principalmente as mais complexas, num momento anterior ao colapso gravitacional que dá origem às estrelas e seus sistemas planetários.

Vamos agora fazer algumas comparações com as abundâncias observadas de duas nuvens moleculares, TMC-1 e L134N. A nuvem molecular TMC-1 é um objeto bastante conhecido e bem estudado há muitos anos. Muitos modelos já foram propostos para explicar a formação de moléculas nela especificamente (Freeman & Millar 1983) e os resultados vem sendo melhorados gradativamente. Ambas as nuvens são escuras e frias, e muitas moléculas nelas já foram detectadas, como o C_3N (Friberg *et al.* 1980) e o metilcianoacetileno, CH_3C_3N (Brotten *et al.* 1984), por exemplo.

Todos os dados são referentes a abundância de H, de $2 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$.

	[Fe/H]			Observações	
	-2.5	-2.0	-1.5	TMC-1	L134N
CO	4.6×10^{-8}	1.7×10^{-7}	4.75×10^{-7}	1.6×10^{-4}	1.8×10^{-4}
OH	1.15×10^{-9}	2.2×10^{-9}	1.2×10^{-9}	6.0×10^{-7}	1.6×10^{-7}
CN	1.8×10^{-13}	2.45×10^{-14}	1.65×10^{-13}	6.0×10^{-8}	1.0×10^{-9b}
NO	4.55×10^{-13}	7×10^{-12}	5.5×10^{-11}	6.0×10^{-8}	1.2×10^{-7}
C_2H	3.95×10^{-11}	4.15×10^{-14}	8.5×10^{-14}	1.0×10^{-7}	1.0×10^{-8b}
HCN	7×10^{-14}	9×10^{-15}	2.05×10^{-13}	4.0×10^{-8}	1.4×10^{-8b}
C_2S	8.5×10^{-12}	1.1×10^{-14}	1.15×10^{-14}	1.6×10^{-8}	1.2×10^{-9}
H_2S	2.9×10^{-12}	1.1×10^{-11}	1.7×10^{-11}	1.0×10^{-9}	1.6×10^{-9}
OCS	2.25×10^{-12}	7.5×10^{-12}	8×10^{-11}	4.0×10^{-9}	4.0×10^{-9}
SO_2	3.5×10^{-12}	1.15×10^{-9}	5.0×10^{-9}	2.0×10^{-9}	6.0×10^{-9b}
HC_3N	8.5×10^{-17}	7.5×10^{-20}	1.55×10^{-18}	1.2×10^{-7a}	8.0×10^{-10b}
C_4H	4.95×10^{-13}	2.2×10^{-18}	3.0×10^{-19}	8.0×10^{-7b}	2.0×10^{-9}
C_3H_2	2.9×10^{-12}	5.0×10^{-16}	1.5×10^{-16}	8.0×10^{-9a}	4.0×10^{-9}
HCO^+	3.15×10^{-13}	2.55×10^{-13}	2.35×10^{-13}	1.6×10^{-8}	1.6×10^{-8}
N_2H^+	9.5×10^{-18}	9.0×10^{-17}	2.6×10^{-14}	1.0×10^{-9}	1.2×10^{-9b}
HCS^+	6.0×10^{-15}	1.75×10^{-15}	2.5×10^{-15}	6.0×10^{-10a}	1.2×10^{-10}

Tabela 4.1: Comparação entre as abundâncias calculadas de algumas moléculas e observações de duas nuvens moleculares, TMC-1 e L134N, para metalicidades baixas. Os dados observacionais são de (Ohishi *et al.* 1992) a menos dos indicados por “a”, (Ohishi & Kaifu 1998) ou “b”, (Dickens *et al.* 2000).

Uma vez que simulamos a evolução química das nuvens moleculares, a comparação com as observações realizadas de algumas nuvens se torna necessário. As observações mostram que as abundâncias encontradas nessas nuvens são maiores do que as por nós calculadas. Isso se deve, principalmente, a duas razões: a ausência de grãos em nosso modelo que, como já discutido, é um fator importante para a produção de moléculas mais complexas e ao fato dessas nuvens serem quimicamente ricas, tal que não se espera, de

fato, que possuem abundâncias semelhantes a uma nuvem pobre simulada. Percebemos que as moléculas contendo dois e três carbonos são as que possuem maior disparidade entre as observações e as simulações, tal que suas abundâncias foram subestimadas pelo nosso modelo, reforçando a tese de que os grãos exercem papel fundamental na produção dessas moléculas.

	[Fe/H]			Observações	
	-1.0	-0.5	0.0	TMC-1	L134N
CO	1.8×10^{-6}	8.5×10^{-6}	2.4×10^{-5}	1.6×10^{-4}	1.8×10^{-4}
OH	6.0×10^{-10}	1.6×10^{-10}	5.0×10^{-11}	6.0×10^{-7}	1.6×10^{-7}
CN	1.55×10^{-13}	1.3×10^{-12}	1.65×10^{-12}	6.0×10^{-8}	1.0×10^{-9b}
NO	8.0×10^{-11}	5.0×10^{-11}	2.35×10^{-11}	6.0×10^{-8}	1.2×10^{-7}
C ₂ H	1.1×10^{-15}	2.25×10^{-15}	3.55×10^{-16}	1.0×10^{-7}	1.0×10^{-8b}
HCN	8.0×10^{-13}	2.1×10^{-11}	7.5×10^{-11}	4.0×10^{-8}	1.4×10^{-8b}
C ₂ S	9.0×10^{-15}	1.45×10^{-13}	1.15×10^{-13}	1.6×10^{-8}	1.2×10^{-9}
H ₂ S	2.5×10^{-11}	4.15×10^{-11}	3.6×10^{-11}	1.0×10^{-9}	1.6×10^{-9}
OCS	1.05×10^{-9}	3.9×10^{-8}	2.9×10^{-7}	4.0×10^{-9}	4.0×10^{-9}
SO ₂	3.95×10^{-8}	6.0×10^{-8}	4.45×10^{-7}	2.0×10^{-9}	6.0×10^{-9b}
HC ₃ N	5.0×10^{-18}	6.5×10^{-16}	1.0×10^{-15}	1.2×10^{-7a}	8.0×10^{-10b}
C ₄ H	1.4×10^{-19}	2.9×10^{-19}	1.25×10^{-20}	8.0×10^{-7b}	2.0×10^{-9}
C ₃ H ₂	1.6×10^{-16}	4.75×10^{-16}	9.5×10^{-17}	8.0×10^{-9a}	4.0×10^{-9}
HCO ⁺	2.95×10^{-13}	4.3×10^{-13}	3.0×10^{-13}	1.6×10^{-8}	1.6×10^{-8}
N ₂ H ⁺	1.85×10^{-13}	2.3×10^{-13}	1.05×10^{-13}	1.0×10^{-9}	1.2×10^{-9b}
HCS ⁺	2.6×10^{-15}	1.2×10^{-14}	1.9×10^{-14}	6.0×10^{-11a}	1.2×10^{-11}

Tabela 4.2: Comparação entre as abundâncias calculadas de algumas moléculas e observações de duas nuvens moleculares, TMC-1 e L134N, para metalicidades intermediárias e alta. Os dados observacionais são de (Ohishi *et al.* 1992) a menos dos indicados por “a”, (Ohishi & Kaifu 1998) ou “b”, (Dickens *et al.* 2000).

Agora, considerando simulações de nuvens mais ricas, vemos que os valores obtidos pelas simulações variam muito pouco, mas, de forma geral, as abundâncias calculadas tendem a ser maiores. Entretanto, as abundâncias calculadas para as moléculas policarbonadas continuam sendo bastante baixas. Resultados semelhantes foram obtidos por Shalabiea (2001), cujo trabalho analisa a importância da razão entre as abundâncias dos elementos C e O, mostrando que essa razão é um parâmetro mais importante para se tentar simular a evolução química de uma nuvem molecular do que as abundâncias propriamente. Outros trabalhos sugerem que a razão entre as abundâncias de C e O que melhor reproduzem as observações está entre 0.6 e 0.8 (Terzieva & Herbst 1998). Nós não trabalhamos com estes valores, de modo que as razões C/O por nós utilizadas encontram-se entre aproximadamente 0.19 e 0.55, enquanto que a abundância de O, com relação ao C utilizada por Shalabiea (2001) e Terzieva & Herbst (1998) são superestimadas quando

comparadas às nossas condições iniciais.

4.2 Conclusões

O estudo das moléculas no meio interestelar é bastante interessante e complexo e pode ser tratado de diversas maneiras. Hoje sabemos que o surgimento da Vida na Terra pode estar ligado com os acontecimentos ocorridos na nuvem molecular que deu origem ao sistema solar, onde moléculas formadas antes da nuvem se colapsar pode ter semeado o planeta, trazendo condições químicas necessárias para que a Vida aqui se formasse. Talvez, o mesmo possa ter acontecido em outros locais do Universo.

Constantemente, diversos tipos de moléculas estão sendo formadas e também destruídas nas nuvens moleculares. Essas nuvens são os berçários estelares, e junto com as estrelas, novos planetas são formados. Ao surgir, essas moléculas já formadas podem ser agregadas aos jovens planetas. Tendo esse fato em mente, procuramos estudar a evolução das abundâncias de diversas moléculas interessantes do ponto de vista biológico. A maior parte dessas moléculas são orgânicas, ou seja, feitas de carbono e hidrogênio. No entanto, muitas outras são formadas, além desses dois elementos, por nitrogênio e oxigênio, em sua maioria.

As simulações por nós realizadas da evolução química das nuvens moleculares leva em conta diferentes metalicidades e composições químicas iniciais. Trabalhamos com seis diferentes tipos de nuvem, cada qual com uma composição química inicial diferente da outra. Seguimos um modelo de evolução química da galáxia que prevê as abundâncias de diversos elementos e traduzimos essas informações a ponto de poder escolher as condições químicas iniciais para as nossas simulações.

A primeira conclusão que obtemos é que as moléculas fundamentais, sejam elas orgânicas ou não, para a Vida na Terra, como a água, o dióxido de carbono, o cianeto de hidrogênio e o metano, são abundantemente produzidas nas diferentes nuvens consideradas, possuindo as maiores abundâncias finais entre todos os grupos de moléculas considerados. Outra conclusão é que os cianopolíenios possuem comportamento bastante peculiar, possuindo queda brusca em suas abundâncias finais para metalicidades intermediárias e cada vez menores conforme aumenta-se o número de átomos de carbono em sua estrutura. Comportamento semelhante é apresentado pelas moléculas policarbonadas, mostrando que, possivelmente, a produção de moléculas complexas é prejudicada pela disponibilidade de elementos químicos nas nuvens mais ricas, mostrando que a competição por esses elementos se torna bastante feroz entre as moléculas já formadas. No entanto, essas moléculas podem se beneficiar dos grãos presentes nas nuvens. Já foi demonstrado que moléculas complexas conseguem sobreviver mais tempo nas superfícies dos grãos, a salvo das radiações de fontes próximas, do que se estivessem dispersas no gás.

Pela Tabela 3.5, vemos que a razão C/O aumenta junto com a metalicidade, de forma que quanto mais rica for a nuvem, mais oxidante ela se torna, uma vez que a abundância do elemento O cresce mais rapidamente que a de C. Segundo este modelo, num ambiente

cada vez mais oxidante, moléculas mais complexas possuem dificuldade em continuar sendo produzidas após um certo tempo, de forma que atingem o seu ponto de máxima abundância muito rapidamente e, então, começar a ter forte queda. Por outro lado, a variedade de moléculas formadas é maior, já que a disponibilidade de metais aumenta.

Através dos estudos estatísticos, concluímos que a maior parte das moléculas é destruída após 10% do tempo de vida na nuvem, sugerindo que o o pico de produção das moléculas é atingido antes que ela colapse, mas essa situação logo se inverte, tal que as moléculas começam a ser destruídas rapidamente. O mais interessante é o fato das moléculas policarbonadas e os cianopolíenios serem sempre destruídas passados 10^5 anos, refletindo o comportamento peculiar apresentados por essas moléculas nos gráficos anteriores.

A alta porcentagem de moléculas destruídas após 10% do tempo de vida da nuvem é comprovada pelos gráficos seguintes, mostrando a densidade de moléculas destruídas de acordo com o coeficiente angular da curva de variação das abundâncias. Este coeficiente angular, quando negativo, reflete a destruição das moléculas e, quando positivo, reflete a produção.

De uma maneira geral, as moléculas orgânicas, mais ou menos complexas, contendo os principais elementos formadores da Vida, bem como outras moléculas inorgânicas também interessantes, são formadas no meio interestelar. Suas abundâncias variam, comparando umas com as outras, e também de acordo com a variação da composição química inicial. Tendo em vista que o Sol nasceu de uma nuvem de composição química $[Fe/H]=0.0$, é de se esperar que esta seja uma metalicidade bastante satisfatória para a produção de moléculas importantes, mesmo que a quantidade não seja tão grande como as de outras.

Tendo o Sol se formado a partir de uma NMCP, vemos que, provavelmente, a produção de uma alta quantidade de moléculas orgânicas complexas, ao menos na fase gasosa, não é uma necessidade considerando a possibilidade da origem da Vida ter sido influenciada pela presença inicial dessas moléculas na superfície planetária. A NMCP é um estado físico da nuvem molecular onde cerca de 70% das moléculas são preferencialmente destruídas antes que a nuvem entre colapse, de forma que a quantidade de moléculas complexas é pequena se comparada à de outras moléculas mais simples, mas não é necessariamente pequena quando disponibilizadas na superfície de um pequeno planeta como a Terra, onde mesmo uma pequena quantidade dessas moléculas pode ser suficiente para semear o planeta. Além disso, a detecção de moléculas complexas nos cometas mostra que essas moléculas complexas conseguem sobreviver muito bem nas superfícies dos grãos, favorecendo as chances delas sobreviverem até o colapso gravitacional.

Muitos estudos ainda precisam ser realizados, principalmente tratando-se do fato de não termos considerado a presença dos grãos neste estudo. Ainda, mais informações sobre as abundâncias observadas de diversas nuvens podem nos mostrar quais nuvens são mais interessantes do ponto de vista astrobiológico, uma vez que possamos definir as

abundâncias moleculares dessas nuvens e consigamos modelar sua evolução química.

A origem da Vida na Terra e a possibilidade da existência de Vida em outros lugares sempre encantou o Homem e também nos assombra até os dias de hoje. O fato de que a nossa existência aqui na Terra possa ser devido aos acontecimentos ocorridos, primeiramente, nas nuvens moleculares é, ao mesmo tempo, assustador e fantástico. No entanto, é algo real, e precisa ser estudado com muito mais detalhes. A Vida é um campo de estudo bastante multidisciplinar e, agora, a Astronomia tem condições de dar a sua contribuição, o que torna este tipo de trabalho o mais interessante possível.

Estamos certos que o futuro nos trará um entendimento maior de como a Vida e o Universo estão interligados.

Referências Bibliográficas

- ADAMS, N. G.; SMITH, D. On the synthesis of $c\text{-C}_3\text{H}_2$ in interstellar clouds, **Astrophysical Journal**, v. 317, p. L25-L27, 1987.
- ASPLUND, M.; GREVESSE, N.; SAUVAL, A. J. The Solar Chemical Composition, **ASP Conference Series**, v. XXX, 2005.
- AUGÚNDEZ, M.; CERNICHARO, J.; PARDO, J. R.; GUÉLIN, M.; PHILLIPS, T. G. Tentative detection of phosphine in IRC +10216, **Astronomy and Astrophysics Letter**, v. 485, L33-L36, 2008.
- BECKER, L.; GLAVIN, D. P.; BADA, J. L. Polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) in Antarctic Martian meteorites, carbonaceous chondrites, and polar ice, **Geochimica et Cosmochimica Acta**, v. 61, p. 475-481, 1997.
- BELLOCHE, A.; MENTEN, K. M.; COMITO, C.; MULLER, H. S. P.; SHCILKE, P.; OTT, J.; THORWIRTH, S.; HIERET, C. Detection of amino acetonitrile in Sgr B2(N), **Astronomy and Astrophysics**, v. 492, p. 769-773, 2008.
- BENNETT, C. J.; KAISER, R. I. On the Formation of Glycolaldehyde (HCOCH_2OH) and Methyl Formate (HCOOCH_3) in Interstellar Ice Analogs, **Astrophysical Journal**, v. 661, p. 899-909, 2007.
- BETZ, A. L. Ethylene in IRC +10216, **Astrophysical Journal**, v. 244, p. L103-L105, 1981.
- BLAGOJEVIC, V.; PETRIE, S.; BOHME, D. K. Gas-phase syntheses for interstellar carboxylic and amino acids, **MNRAS**, v. 339, L7-L11, 2003.
- BLITZ, L.; SHU, F. H. The origin and lifetime of giant molecular cloud complexes, **Astrophysical Journal**, v. 238, p. 148-157, 1980.
- BOHME, D. K.; WLODEK, S.; RAKSIT, A. B. Growing interstellar cyanopolyacetylenes with ion/molecule reactions, **Can. J. Chem.**, v. 65, 2057-2061, 1987.
- BOTTA, O.; BADA, J. L. Extraterrestrial Organic Compounds in Meteorites, **Surveys in Geophysics**, v. 23, p. 411-467, 2002.
- BROCK, T. D. Life at high temperatures, **Science**, v. 158, p. 1012-1019, 1967.

- BROTEN, N. W.; MACLEOD, J. M.; AVERY, L. W.; IRVINE, W. M.; HOGLUND, B.; FRIBERG, P.; HJALMARSON, A. The detection of interstellar methylcyanoacetylene, **Astrophysical Journal**, v. 276, L25-L29, 1984.
- BRUNKEN, S.; GOTTLIEB, C. A.; McCARTHY, M. C.; THADDEUS, P. Laboratory detection of HOCN and tentative identification in Sgr B2, **Astrophysical Journal**, v. 687, p. 880-885, 2009.
- BURROWS, A. Extrasolar Planet Theory: Formation, Evolution, and Direct Detection, **American Physical Society, APS**, 2005.
- CERNICARO, J.; HERAS, A. M.; TIELENS, A. G. G. M.; PARDO, J. R.; HERPIN, F.; GUÉLIN, M.; WATERS, L. B. F. M. Infrared Space Observatory's Discovery of C₄H₂, C₆H₂, and Benzene in CRL 618, **Astrophysical Journal**, v. 546, p. L123-L126, 2001.
- CHYBA, C. F.; THOMAS, P. J.; BROOKSHAW, L.; SAGAN, C. Cometary Delivery of Organic Molecules to the Early Earth, **Science**, v. 249, p. 366, 1990.
- CLEAVES, H. J.; CHALMERS, J. H.; LAZCANO, A.; MILLER, S. L.; BADA, J. L. A Reassessment of Prebiotic Organic Synthesis in Neutral Planetary Atmospheres, **Origins of Life and Evolution of Biospheres**, v. 38, p. 105-115, 2008.
- COCKELL, C. S.; LÉGER, A.; FRIDLUND, M.; HERBST, T. M.; KALTENEGGER, L.; ABSIL, e outros, Darwin-A Mission to Detect and Search for Life on Extrasolar Planets, **Astrobiology**, v. 9, p. 1-22, 2009.
- COMBES, F.; GERIN, M.; WOOTEN, A.; WLODARCZAK, G.; CLAUSSET, F.; ENCRENAZ, P. J. Acetone in interstellar space, **Astronomy and Astrophysics**, v. 180, p. L13-L16, 1987.
- COULSON, S. G.; WICKRAMASINGHE, N. C. Frictional and radiation heating of micron-sized meteoroids in the Earth's upper atmosphere, **MNRAS**, v. 343, p. 1123-1130, 2003.
- CUNNINGHAM, M. R.; JONES, P. A.; GODFREY, P. D.; CRAGG, D. M.; BAINS, I.; BURTON, M. G.; CALISSE, P.; CRIGHTON, N. H. M.; CURRAN, . J.; DAVIS, T. M.; DEMPSEY, J. T.; FULTON, B.; HIDAS, M. G.; HILL, T.; KEDZIORA-CHUDCZER, L.; MINIER, V.; PRACY, M. B.; PURCELL, C.; SHOBBROCK, J.; TRAVOUILLON, T. A search for propylene oxide and glycine in Sagittarius B2 (LMH) and Orion, **MNRAS**, v. 376, p. 1201-1210, 2007.
- DEMETS, R.; SCHULTE, W.; BAGLIONI, P. The past, present and future of BIOPAN, **Advances in Space Research**, v. 36, p. 311-316, 2005.
- DICKENS, J. E.; IRVINE, W. M.; SNELL, R. L.; BERGIN, E. A.; SCHLOERB, F. P.; PRATAP, P.; MIRALLES, M. P. A Study of the Physics and Chemistry of L134N, **Astrophysical Journal**, v. 542, p. 870-889, 2000.

- DOUGLAS, A. E.; HERZBERG, G. Note on CH^+ in Interstellar Space and in the Laboratory, **Astrophysical Journal**, v. 94, p. 381, 1941.
- ELSILA, J. E.; DWORKIN, J. P.; BERNSTEIN, M. P.; MARTIN, M. P.; SANDFORD, S. A. Mechanisms of Amino Acid Formation in Interstellar Ice Analogs, **Astrophysical Journal**, v. 660, p. 911-918, 2007.
- FREEMAN, A.; MILLAR, T. J. Formation of complex molecules in TMC-1, **Nature**, v. 301, p. 402-404, 1983.
- FRIBERG, P.; HJALMARSON, A.; GUELIN, M.; IRVINE, W. M. Interstellar C_3N^- Detection in Taurus dark clouds, **Astrophysical Journal**, v. 241, p. L99-L103, 1980.
- GIOUMOUSIS, G.; STEVENSON, D. P. Reactions of Gaseous Molecule Ions with Gaseous Molecules. V. Theory, **Journal of Chemical Physics**, v. 29, p. 294, 1958.
- GLASER, R.; HODGEN, B.; FARRELLY, D.; McKEE, E. Adenine Synthesis in Interstellar Space: Mechanisms of Prebiotic Pyrimidine-Ring Formation of Monocyclic HCN-Pentamers, **Astrobiology**, v. 7, p. 455-470, 2007.
- GONZALEZ, G. The stellar metallicity-giant planet connection, **MNRAS**, v. 285, p. 403-412 1997.
- GUELIN, M.; GREEN, S.; THADDEUS, P. Detection of the C_4H radical toward IRC plus 10216, **Astrophysical Journal**, v. 224, p. L27-L30, 1978.
- HAYWOOD, M. On the Correlation Between Metallicity and the Presence of Giant Planets, **Astrophysical Journal**, v. 698, p. L1-L5, 2009.
- HEILES, C. Physical Conditions and Chemical Constitution of Dark Clouds, **Annual Review of Astronomy and Astrophysics**, v. 9, p. 293-322, 1971.
- HENNING, K. Molecule formation in interstellar clouds by gas phase reactions, **Astronomy and Astrophysics**, v. 44, p. 405-435, 1981.
- HERBST, E.; BATES, D. R. Radiative association via excited electronic states - Model calculations, **Astrophysical Journal**, v. 329, p. 410-417, 1988.
- HERBST, E.; LEUNG C. M. Gas-phase production of complex hydrocarbons, cyanopolyynes, and related compounds in dense interstellar clouds, **Astrophysical Journal**, v. 69, p. 271-300, 1989.
- HERBST, E.; LEUNG C. M. The gas phase production of CH_2CN and other organonitrogen species in dense interstellar clouds, **Astronomy and Astrophysics**, v. 233, p. 177-180, 1990.
- HERBST, E.; KLEMPERER W. The Formation and Depletion of Molecules in Dense Interstellar Clouds, **Astronomical Journal**, v. 185, p. 505-534, 1973.

- HINZ, P. Seeing another Earth: Detecting and Characterizing Rocky Planets with Extremely Large Telescopes, **Astro2010: The Astronomy and Astrophysics Decadal Survey, Science White Papers**, v. 126, 2009.
- HORNECK, G. Survival of microorganisms in space: a review, **Life sciences and space research XIX**, v. 1, p. 39-48, 1981.
- HOYLE, F.; BURBIDGE, E. M.; BURBIDGE, G R.; FOWLER, W. A. Synthesis of the Elements in Stars, **Reviews of Modern Physics**, v. 29, p. 547-650, 1957.
- JAGER, C.; HUISKEN, F.; MUTSCHKE, H.; JANSKA, I. L.; HENNING, Th. Formation of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons and Carbonaceous Solids in Gas-Phase Condensation Experiments, **Astrophysical Journal**, v. 696, p. 706-712, 2009.
- JOHNSON, D. R.; LOVAS, F. J.; GOTTLIEB, E. W.; LITVAK, M. M.; THADDEUS, P.; GUELIN, M. Detection of interstellar ethyl cyanide, **Astrophysical Journal**, v. 218, p. 370-376, 1977.
- JONES, P. A.; CUNNINGHAM, M. R.; GODFREY, P. D.; CRAGG, D. M. A Search for biomolecules in Sagittarius B2 (LMH) with the Australia Telescope Compact Array, **MNRAS**, v. 374, p. 579-589, 2007.
- KAIFU, N.; MORIMOTO, M.; NAGANE, K.; IGUCHI, T.; TAKACHI, T. Detection of Interstellar Methylamine, **Astrophysical Journal**, v. 191, p. L135, 1974.
- KASTING, J. F. Earth's early atmosphere, **Science**, v. 259, p. 920-926, 1993.
- LACY, J. H.; CARR, J. S.; EVANS, J. II.; BAAS, F.; ACHTERMANN, J. M.; ARENS, J. F. Discovery of interstellar methane — Observations of gaseous and solid CH₄ absorption toward young stars in molecular clouds, **Astrophysical Journal**, v. 376, p. 556-560, 1991.
- LAZCANO, A. Towards a Definition of Life: The Impossible Quest?, **Space Science Reviews**, v. 135, p. 5-10, 2008.
- LEUNG, C. M.; HERBST, E.; HUEBNER, W. F. Synthesis of complex molecules in dense interstellar clouds via gas-phase chemistry - A pseudo time-dependent calculation, **Astrophysical Journal**, v. 56, p. 231-256, 1984.
- LINEWEAVER, C.; GREYER D. Correlations Between Stellar Metallicity and the Frequency of Planetary and Stellar Companions, **Bulletin of the American Astronomical Society**, v. 38, p. 1174, 2006.
- MARTINS, Z.; BOTTA, O.; FOGEL, M. L.; SEPHTON, M. A.; GLAVIN, D. P.; WATSON, J. S.; DWORKIN, J. P.; SCHWARTZ, A. W.; EHRENFREUND, P. Extraterrestrial nucleobases in the Murchison meteorite, **Earth and Planetary Science Letters**, v. 270, p. 130-136, 2008.

- MAYOR, M.; QUELOZ D. A Jupiter-Mass Companion to a Solar-Type Star, **Nature**, v. 378, p. 355, 1995.
- McKAY, D. S.; GIBSON, E. K.; THOMAS-KEPRTA, K. L.; VALI, H.; ROMANEK, C. S.; CLEMETT, S. J.; CHILLER, C. R.; ZARE, R. N. Search for past life on Mars: Possible relic biogenic activity in martian meteorite ALH84001, **Science**, v. 273, p. 924-930, 1996.
- McKAY, C. P.; BORUCKI, W. J. Organic synthesis in experimental impact shocks, **Science**, v. 276, p. 390-392, 1997.
- McKELLAR, A. Evidence for the Molecular Origin of Some Hitherto Unidentified Interstellar Lines, **Publications of the Astronomical Society of the Pacific**, v. 52, n. 307, p. 187, 1940.
- MEHRINGER, D. M.; SNYDER, L. E.; MIAO, Y.; LOVAS, F. J. Detection and Confirmation of Interstellar Acetic Acid, **Astrophysical Journal**, v. 480, p. L71, 1997.
- MICHEL, E.; THE COROT TEAM First asteroseismic results from CoRoT, **Communications in Asteroseismology**, v. 157, p. 69, 2008.
- MILLER, S. L. A production of amino acids under possible primitive Earth condition, **Science**, v. 117, p. 528-529, 1953.
- MORBIDELLI, A.; CHAMBERS, J.; LUNINE, J. I.; PETIT, J. M.; ROBERT, F.; VALSECCHI, G. B.; CYR, K. E. Source regions and time scales for the delivery of water to Earth, **Meteoritics & Planetary Science**, v. 35, p. 1309-1320, 2000.
- NEJAD, L. A. M. A Comparison of Stiff ODE Solvers for Astrochemical Kinetics Problems, **Astrophysics and Space Science**, v. 299, p. 1-29, 2005.
- NICHOLSON, W. L.; MUNAKATA, N.; HORNECK, G.; MELOSH, H. J.; SETLOW, P. Resistance of *Bacillus* Endospores to Extreme Terrestrial and Extraterrestrial Environments, **Microbiology and Molecular Biology Reviews**, v. 64, p. 548-572, 2000.
- OHISHI, M.; IRVINE, W. M.; KAIFU, N. Molecular Abundance Variations among and Within Cold, Dark Molecular Clouds(rp), **Astrochemistry of Cosmic Phenomena**, ed. P. D. Singh (Dordrecht: Kluwer), 171 v. 64, p. 548-572, 2000.
- OHISHI, M.; KAIFU, N. Chemical and physical evolution of dark clouds. Molecular spectral line survey toward TMC-1, **Chemistry and Physics of Molecules and Grains in Space**, Faraday Discussions No. 109. The Faraday Division of the Royal Society of Chemistry, London, p.205, 1998.
- OHISHI, M. Molecular spectral line surveys and the organic molecules in the interstellar molecular clouds, **Organic Matter in Space, Proceedings of the International Astronomical Union, IAU Symposium**, v. 251, p. 17-26, 2008.
- OPARIN, A. I. The Origin of Life, **Dover Pub.; Nova York**, 1938.

- PENZIAS, A. A.; SOLOMON, P. M.; JEFFERTS, K. B.; WILSON, R. W. Carbon Monoxide Observations of Dense Interstellar Clouds, **Astrophysical Journal**, v. 174, pL43, 1972.
- PRASAD, S. S.; HUNTRESS W. T., Jr. A model for gas phase chemistry in interstellar clouds. I - The basic model, library of chemical reactions, and chemistry among C, N, and O compounds, **Astrophysical Journal**, v. 43, p. 1-35, 1980.
- PRESS, W. H; TEUKOLSKY, S. A.; VETTERLING, W. T.; FLANNERY, B. P. Numerical recipes in FORTRAN. The art of scientific computing, **Cambridge: University Press**, 2nd ed, 1992.
- QUAND, D; HERBST, E. Possible gas-phase syntheses for seven neutral molecules studied recently with the Green Bank Telescope, **Astronomy and Astrophysics**, v. 474, p. 521-527, 2007.
- RABOW, E.; RETTBERG, P.; PANITZ, C.; DRESCHER, J.; HORNECK, G.; REITZ, G. SSIUX Space simulation for investigating organics, evolution and exobiology, **Advances in Space Research**, v. 36, p. 297-302, 2005.
- REMIJAN, A.; SHIAO, Y. -S.; FRIEDEL, D. N.; MEIER, D. S.; SNYDER, L. E.; A Survey of Large Molecules of Biological Interest toward Selected High-Mass Star-forming Regions, **Astrophysical Journal**, v. 617, p. 384-398, 2004.
- SANDAGE, A. Star formation rates, galaxy morphology, and the Hubble sequence, **Astronomy and Astrophysics**, v. 161, p. 89-101, 1986.
- SHALABIEA, O. M. The effect of the initial elemental abundance on gas-grain chemical models, **Astronomy and Astrophysics**, v. 370, p. 1044-1055, 2001.
- SNYDER, L. E.; BUHL, W. D. Radio astronomy-Interstellar methylacetylene and isocyanic acid, **Nature Physical Science**, v. 243, p. 45, 1973.
- SOLOMON, P. M.; KLEMPERER W. The Formation of Diatomic Molecules in Interstellar Clouds, **Astronomical Journal**, v. 178, p. 389-422, 1972.
- SWINGS, P.; ROSENFELD L. Considerations Regarding Interstellar Molecules, **Astronomical Journal**, v. 86, p. 483-486, 1937.
- TERZIEVA, R.; HERBST E. The Sensitivity of Gas-Phase Chemical Models of Interstellar Clouds to C and O Elemental Abundances and to a New Formation Mechanism for Ammonia, **Astrophysical Journal**, v. 501, p. p207, 1998.
- THADDEUS, P.; GUELIN, M.; LINKE, R. A. Three new “nonterrestrial” molecules, **Astrophysical Journal**, v. 246, p. L41-L45, 1981.
- TIMMES, F. X.; WOOSLEY, S. E.; WEAVER, T. Q. Galactic chemical evolution: Hydrogen through zinc, **Astrophysical Journal Supplement Series**, v. 98, no. 2, p. 617-658, 1995.

- UCHIDA, K. I.; SELLGREN, K.; WERNER, M. W.; HOUDASHELT, M. L. Infrared Space Observatory Mid-Infrared Spectra of Reflection Nebulae, **Astrophysical Journal**, v. 530, p. 817-833, 2000.
- VERSTRAETE, L.; PECH, C.; MOUTOU, C.; SELLGREN, K.; WRIGHT, C. M.; GIARD, M.; LÉGER, A.; TIMMERMANN, R.; DRAPATZ, S. The Aromatic Infrared Bands as seen by ISO-SWS: Probing the PAH model, **Astronomy and Astrophysics**, v. 372, p. 981-997, 2001.
- von BLOH, W.; BOUNAMA, X.C.; CUNTZ, M.; FRANCK, S. The habitability of super-Earths in Gliese 581, **Astronomy and Astrophysics**, v. 476, p. 1365-1371, 2007.
- von XIANG, L.; LISZT, H. S.; BURTON, W. B. The mean lifetime of interstellar molecular clouds, **Chinese Astronomy and Astrophysics**, v. 8, p. 105-112, 1984.
- WALKER, J. C. G. Evolution of the atmosphere, **Macmillan, New York**, 1977.
- WAKELAN, V.; SELSIS, F.; CASELLI, P. Estimation and reduction of the uncertainties in chemical models: application to hot core chemistry, **Astronomy and Astrophysics**, v. 444, p. 883-891, 2005.
- WEINREB, S.; BARRET, A. H.; MEEKS, M. L.; HENRY, J. C. Radio Observations of OH in the Interstellar Medium, **Nature**, v. 200, pp. 829, 1963.
- WIRSTROM, E. S.; BERGMAN, P.; HJALMARSON, A.; NUMMELIN, A. A search for pre-biotic molecules in hot cores, **Astronomy and Astrophysics**, v. 473, pP. 177-180, 2007.
- ZOLLINGER, R.; ARMSTRONG, J. C. Additional planets in the habitable zone of Gliese 581?, **Astronomy and Astrophysics**, V. 497, P. 583-587, 2009.
- ZOLOTOV, M. Yu.; SHOCK, E. L. Abiotic Origin for PAHs and Aliphatic Hydrocarbons in ALH84001 and Nakhla Martian Meteorites: Synthesis in Trapped Magmatic and/or Impact Gases, **30th Annual Lunar and Planetary Science Conference**, abstract n. 1879, 1999.
- ZUCKERMAN, B.; TURNER, B. E.; JOHNSON, D. R.; LOVAS, F. J.; FOURIKIS, N.; PALMER, P.; MORRIS, M.; LILLEY, A. E.; BALL, J. A.; CLARK, F. O. Detection of interstellar trans-ethyl alcohol, **Astrophysical Journal**, v. 196, p. L99-L102, 1975.

Apêndice A

Cálculo das abundâncias

Apresentamos os cálculos feitos para se encontrar as abundâncias cósmicas dos diversos elementos considerados para as diferentes metalicidades escolhidas. São apresentados grupos de equações para os diferentes elementos.

Lembrando que para uma nuvem onde todo o carbono encontra-se na forma de CO, temos que subtrair a abundância de C da abundância de O, tal que o resultado será a abundância de CO, e o restante será a abundância de O, denotado por $\epsilon(O)''$. Feito isso, a abundância de C será nula.

Normalmente, a abundância cósmica de H é dada por $\log \epsilon(H)=12$, de forma que precisamos normalizar o resultado da abundância cósmica, $\epsilon(X)$, encontrada para os diferentes elementos de forma a estarem referentes à abundância de H. Assim, a abundância final dos elementos, normalizados pela abundância de H, será dado por $\epsilon(X)'$, ou seja:

$$\epsilon(X)' = \frac{\epsilon(X)}{\epsilon(H)} = \frac{\epsilon(X)}{10^{12}} \quad (\text{chapter.1})$$

Para todos os casos, as abundâncias de He e grão são constantes, 1.4×10^{-1} e 1.32×10^{-12} , respectivamente.

Grupo de equações para o carbono

Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.5$	Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.0$
--	--

$$\begin{aligned}
 [\text{C}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{C})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{C})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{C})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{C})_{\odot} + [\text{C}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{C})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{C})_{\odot} + [\text{C}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{C})_{\text{nm}} &= 10^{5.76} \\
 \epsilon(\text{C})'_{\text{nm}} &= 5.88 \times 10^{-7}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [\text{C}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{C})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{C})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{C})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{C})_{\odot} + [\text{C}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{C})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{C})_{\odot} + [\text{C}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{C})_{\text{nm}} &= 10^{6.23} \\
 \epsilon(\text{C})'_{\text{nm}} &= 1.73 \times 10^{-6}
 \end{aligned}$$

Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -1.5$	Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -1.0$
--	--

$$\begin{aligned}
 [\text{C}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{C})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{C})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{C})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{C})_{\odot} + [\text{C}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{C})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{C})_{\odot} + [\text{C}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{C})_{\text{nm}} &= 10^{6.67} \\
 \epsilon(\text{C})'_{\text{nm}} &= 4.78 \times 10^{-6}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [\text{C}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{C})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{C})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{C})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{C})_{\odot} + [\text{C}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{C})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{C})_{\odot} + [\text{C}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{C})_{\text{nm}} &= 10^{7.25} \\
 \epsilon(\text{C})'_{\text{nm}} &= 1.81 \times 10^{-5}
 \end{aligned}$$

Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -0.5$	Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = 0.0$
--	---

$$\begin{aligned}
 [\text{C}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{C})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{C})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{C})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{C})_{\odot} + [\text{C}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{C})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{C})_{\odot} + [\text{C}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{C})_{\text{nm}} &= 10^{7.94} \\
 \epsilon(\text{C})'_{\text{nm}} &= 8.80 \times 10^{-5}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [\text{C}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{C})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{C})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{C})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{C})_{\odot} + [\text{C}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{C})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{C})_{\odot} + [\text{C}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{C})_{\text{nm}} &= 10^{8.39} \\
 \epsilon(\text{C})'_{\text{nm}} &= 2.48 \times 10^{-4}
 \end{aligned}$$

Grupo de equações para o nitrogênio

Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.5$	Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.0$
--	--

$$\begin{aligned}
 [\text{N}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{N})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{N})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{N})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{N})_{\odot} + [\text{N}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{N})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{N})_{\odot} + [\text{N}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{N})_{\text{nm}} &= 10^{7.78} \\
 \epsilon(\text{N})'_{\text{nm}} &= 6.02 \times 10^{-5}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [\text{N}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{N})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{N})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{N})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{N})_{\odot} + [\text{N}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{N})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{N})_{\odot} + [\text{N}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{N})_{\text{nm}} &= 10^{7.78} \\
 \epsilon(\text{N})'_{\text{nm}} &= 6.02 \times 10^{-5}
 \end{aligned}$$

Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -1.5$	Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -1.0$
--	--

$$\begin{aligned}
 [\text{N}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{N})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{N})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{N})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{N})_{\odot} + [\text{N}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{N})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{N})_{\odot} + [\text{N}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{N})_{\text{nm}} &= 10^{5.41} \\
 \epsilon(\text{N})'_{\text{nm}} &= 2.61 \times 10^{-7}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [\text{N}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{N})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{N})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{N})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{N})_{\odot} + [\text{N}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{N})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{N})_{\odot} + [\text{N}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{N})_{\text{nm}} &= 10^{6.68} \\
 \epsilon(\text{N})'_{\text{nm}} &= 4.88 \times 10^{-6}
 \end{aligned}$$

Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -0.5$	Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = 0.0$
--	---

$$\begin{aligned}
 [\text{N}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{N})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{N})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{N})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{N})_{\odot} + [\text{N}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{N})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{N})_{\odot} + [\text{N}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{N})_{\text{nm}} &= 10^{7.45} \\
 \epsilon(\text{N})'_{\text{nm}} &= 2.87 \times 10^{-5}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [\text{N}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{N})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{N})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{N})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{N})_{\odot} + [\text{N}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{N})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{N})_{\odot} + [\text{N}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{N})_{\text{nm}} &= 10^{7.94} \\
 \epsilon(\text{N})'_{\text{nm}} &= 8.75 \times 10^{-5}
 \end{aligned}$$

Grupo de equações para o oxigênio

Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.5$	Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.0$
--	--

$$\begin{aligned}
 [\text{O}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{O})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{O})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{O})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{O})_{\odot} + [\text{O}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{O})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{O})_{\odot} + [\text{O}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{O})_{\text{nm}} &= 10^{6.49} \\
 \epsilon(\text{O})'_{\text{nm}} &= 3.13 \times 10^{-6}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [\text{O}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{O})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{O})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{O})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{O})_{\odot} + [\text{O}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{O})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{O})_{\odot} + [\text{O}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{O})_{\text{nm}} &= 10^{6.93} \\
 \epsilon(\text{O})'_{\text{nm}} &= 8.65 \times 10^{-6}
 \end{aligned}$$

Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -1.5$	Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -1.0$
--	--

$$\begin{aligned}
 [\text{O}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{O})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{O})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{O})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{O})_{\odot} + [\text{O}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{O})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{O})_{\odot} + [\text{O}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{O})_{\text{nm}} &= 10^{3.31} \\
 \epsilon(\text{O})'_{\text{nm}} &= 2.06 \times 10^{-5}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [\text{O}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{O})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{O})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{O})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{O})_{\odot} + [\text{O}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{O})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{O})_{\odot} + [\text{O}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{O})_{\text{nm}} &= 10^{7.76} \\
 \epsilon(\text{O})'_{\text{nm}} &= 5.76 \times 10^{-5}
 \end{aligned}$$

Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -0.5$	Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = 0.0$
--	---

$$\begin{aligned}
 [\text{O}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{O})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{O})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{O})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{O})_{\odot} + [\text{O}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{O})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{O})_{\odot} + [\text{O}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{O})_{\text{nm}} &= 10^{8.24} \\
 \epsilon(\text{O})'_{\text{nm}} &= 1.76 \times 10^{-4}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [\text{O}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{O})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{O})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{O})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{O})_{\odot} + [\text{O}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{O})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{O})_{\odot} + [\text{O}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{O})_{\text{nm}} &= 10^{8.65} \\
 \epsilon(\text{O})'_{\text{nm}} &= 4.49 \times 10^{-4}
 \end{aligned}$$

Grupo de equações para o flúor

Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.5$	Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.0$
--	--

$$\begin{aligned}
 [\text{F}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{F})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{F})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{F})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{F})_{\odot} + [\text{F}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{F})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{F})_{\odot} + [\text{F}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{F})_{\text{nm}} &= 10^{1.87} \\
 \epsilon(\text{F})'_{\text{nm}} &= 7.51 \times 10^{-11}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [\text{F}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{F})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{F})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{F})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{F})_{\odot} + [\text{F}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{F})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{F})_{\odot} + [\text{F}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{F})_{\text{nm}} &= 10^{2.23} \\
 \epsilon(\text{F})'_{\text{nm}} &= 1.72 \times 10^{-10}
 \end{aligned}$$

Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -1.5$	Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -1.0$
--	--

$$\begin{aligned}
 [\text{F}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{F})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{F})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{F})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{F})_{\odot} + [\text{F}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{F})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{F})_{\odot} + [\text{F}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{F})_{\text{nm}} &= 10^{2.61} \\
 \epsilon(\text{F})'_{\text{nm}} &= 4.10 \times 10^{-10}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [\text{F}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{F})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{F})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{F})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{F})_{\odot} + [\text{F}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{F})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{F})_{\odot} + [\text{F}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{F})_{\text{nm}} &= 10^{3.24} \\
 \epsilon(\text{F})'_{\text{nm}} &= 1.75 \times 10^{-9}
 \end{aligned}$$

Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -0.5$	Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = 0.0$
--	---

$$\begin{aligned}
 [\text{F}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{F})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{F})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{F})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{F})_{\odot} + [\text{F}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{F})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{F})_{\odot} + [\text{F}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{F})_{\text{nm}} &= 10^{3.89} \\
 \epsilon(\text{F})'_{\text{nm}} &= 7.79 \times 10^{-9}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [\text{F}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{F})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{F})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{F})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{F})_{\odot} + [\text{F}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{F})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{F})_{\odot} + [\text{F}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{F})_{\text{nm}} &= 10^{4.45} \\
 \epsilon(\text{F})'_{\text{nm}} &= 2.82 \times 10^{-8}
 \end{aligned}$$

Grupo de equações para o sódio

Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.5$	Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.0$
--	--

$$\begin{aligned}
 [\text{Na}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{Na})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{Na})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{Na})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{Na})_{\odot} + [\text{Na}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{Na})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{Na})_{\odot} + [\text{Na}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{Na})_{\text{nm}} &= 10^{3.21} \\
 \epsilon(\text{Na})'_{\text{nm}} &= 1.65 \times 10^{-9}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [\text{Na}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{Na})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{Na})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{Na})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{Na})_{\odot} + [\text{Na}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{Na})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{Na})_{\odot} + [\text{Na}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{Na})_{\text{nm}} &= 10^{3.58} \\
 \epsilon(\text{Na})'_{\text{nm}} &= 3.82 \times 10^{-9}
 \end{aligned}$$

Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -1.5$	Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -1.0$
--	--

$$\begin{aligned}
 [\text{Na}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{Na})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{Na})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{Na})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{Na})_{\odot} + [\text{Na}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{Na})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{Na})_{\odot} + [\text{Na}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{Na})_{\text{nm}} &= 10^{3.96} \\
 \epsilon(\text{Na})'_{\text{nm}} &= 9.17 \times 10^{-9}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [\text{Na}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{Na})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{Na})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{Na})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{Na})_{\odot} + [\text{Na}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{Na})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{Na})_{\odot} + [\text{Na}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{Na})_{\text{nm}} &= 10^{4.52} \\
 \epsilon(\text{Na})'_{\text{nm}} &= 3.32 \times 10^{-8}
 \end{aligned}$$

Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -0.5$	Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = 0.0$
--	---

$$\begin{aligned}
 [\text{Na}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{Na})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{Na})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{Na})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{Na})_{\odot} + [\text{Na}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{Na})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{Na})_{\odot} + [\text{Na}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{Na})_{\text{nm}} &= 10^{5.31} \\
 \epsilon(\text{Na})'_{\text{nm}} &= 2.05 \times 10^{-7}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [\text{Na}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{Na})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{Na})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{Na})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{Na})_{\odot} + [\text{Na}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{Na})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{Na})_{\odot} + [\text{Na}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{Na})_{\text{nm}} &= 10^{6.06} \\
 \epsilon(\text{Na})'_{\text{nm}} &= 1.14 \times 10^{-6}
 \end{aligned}$$

Grupo de equações para o magnésio

Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.5$

Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.0$

$$\begin{aligned} [\text{Mg}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{Mg})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{Mg})_{\odot} \\ \log \epsilon(\text{Mg})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{Mg})_{\odot} + [\text{Mg}/\text{H}] \\ \epsilon(\text{Mg})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{Mg})_{\odot} + [\text{Mg}/\text{H}]) \\ \epsilon(\text{Mg})_{\text{nm}} &= 10^{5.21} \\ \epsilon(\text{Mg})'_{\text{nm}} &= 1.63 \times 10^{-7} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [\text{Mg}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{Mg})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{Mg})_{\odot} \\ \log \epsilon(\text{Mg})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{Mg})_{\odot} + [\text{Mg}/\text{H}] \\ \epsilon(\text{Mg})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{Mg})_{\odot} + [\text{Mg}/\text{H}]) \\ \epsilon(\text{Mg})_{\text{nm}} &= 10^{5.63} \\ \epsilon(\text{Mg})'_{\text{nm}} &= 4.28 \times 10^{-7} \end{aligned}$$

Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -1.5$

Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -1.0$

$$\begin{aligned} [\text{Mg}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{Mg})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{Mg})_{\odot} \\ \log \epsilon(\text{Mg})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{Mg})_{\odot} + [\text{Mg}/\text{H}] \\ \epsilon(\text{Mg})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{Mg})_{\odot} + [\text{Mg}/\text{H}]) \\ \epsilon(\text{Mg})_{\text{nm}} &= 10^{5.99} \\ \epsilon(\text{Mg})'_{\text{nm}} &= 9.78 \times 10^{-7} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [\text{Mg}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{Mg})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{Mg})_{\odot} \\ \log \epsilon(\text{Mg})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{Mg})_{\odot} + [\text{Mg}/\text{H}] \\ \epsilon(\text{Mg})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{Mg})_{\odot} + [\text{Mg}/\text{H}]) \\ \epsilon(\text{Mg})_{\text{nm}} &= 10^{6.44} \\ \epsilon(\text{Mg})'_{\text{nm}} &= 2.76 \times 10^{-6} \end{aligned}$$

Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -0.5$

Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = 0.0$

$$\begin{aligned} [\text{Mg}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{Mg})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{Mg})_{\odot} \\ \log \epsilon(\text{Mg})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{Mg})_{\odot} + [\text{Mg}/\text{H}] \\ \epsilon(\text{Mg})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{Mg})_{\odot} + [\text{Mg}/\text{H}]) \\ \epsilon(\text{Mg})_{\text{nm}} &= 10^{6.94} \\ \epsilon(\text{Mg})'_{\text{nm}} &= 8.87 \times 10^{-6} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [\text{Mg}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{Mg})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{Mg})_{\odot} \\ \log \epsilon(\text{Mg})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{Mg})_{\odot} + [\text{Mg}/\text{H}] \\ \epsilon(\text{Mg})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{Mg})_{\odot} + [\text{Mg}/\text{H}]) \\ \epsilon(\text{Mg})_{\text{nm}} &= 10^{7.38} \\ \epsilon(\text{Mg})'_{\text{nm}} &= 2.45 \times 10^{-5} \end{aligned}$$

Grupo de equações para o silício

Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.5$	Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.0$
--	--

$$\begin{aligned}
 [\text{Si}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{Si})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{Si})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{Si})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{Si})_{\odot} + [\text{Si}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{Si})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{Si})_{\odot} + [\text{Si}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{Si})_{\text{nm}} &= 10^{5.31} \\
 \epsilon(\text{Si})'_{\text{nm}} &= 2.04 \times 10^{-7}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [\text{Si}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{Si})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{Si})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{Si})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{Si})_{\odot} + [\text{Si}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{Si})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{Si})_{\odot} + [\text{Si}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{Si})_{\text{nm}} &= 10^{5.85} \\
 \epsilon(\text{Si})'_{\text{nm}} &= 7.20 \times 10^{-7}
 \end{aligned}$$

Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -1.5$	Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -1.0$
--	--

$$\begin{aligned}
 [\text{Si}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{Si})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{Si})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{Si})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{Si})_{\odot} + [\text{Si}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{Si})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{Si})_{\odot} + [\text{Si}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{Si})_{\text{nm}} &= 10^{6.26} \\
 \epsilon(\text{Si})'_{\text{nm}} &= 1.82 \times 10^{-6}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [\text{Si}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{Si})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{Si})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{Si})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{Si})_{\odot} + [\text{Si}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{Si})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{Si})_{\odot} + [\text{Si}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{Si})_{\text{nm}} &= 10^{6.68} \\
 \epsilon(\text{Si})'_{\text{nm}} &= 4.89 \times 10^{-6}
 \end{aligned}$$

Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -0.5$	Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = 0.0$
--	---

$$\begin{aligned}
 [\text{Si}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{Si})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{Si})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{Si})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{Si})_{\odot} + [\text{Si}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{Si})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{Si})_{\odot} + [\text{Si}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{Si})_{\text{nm}} &= 10^{7.18} \\
 \epsilon(\text{Si})'_{\text{nm}} &= 1.52 \times 10^{-5}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [\text{Si}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{Si})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{Si})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{Si})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{Si})_{\odot} + [\text{Si}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{Si})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{Si})_{\odot} + [\text{Si}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{Si})_{\text{nm}} &= 10^{7.65} \\
 \epsilon(\text{Si})'_{\text{nm}} &= 4.49 \times 10^{-5}
 \end{aligned}$$

Grupo de equações para o fósforo

Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.5$	Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.0$
--	--

$$\begin{aligned}
 [\text{P}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{P})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{P})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{P})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{P})_{\odot} + [\text{P}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{P})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{P})_{\odot} + [\text{P}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{P})_{\text{nm}} &= 10^{2.54} \\
 \epsilon(\text{P})'_{\text{nm}} &= 3.48 \times 10^{-10}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [\text{P}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{P})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{P})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{P})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{P})_{\odot} + [\text{P}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{P})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{P})_{\odot} + [\text{P}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{P})_{\text{nm}} &= 10^{3.11} \\
 \epsilon(\text{P})'_{\text{nm}} &= 1.30 \times 10^{-9}
 \end{aligned}$$

Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -1.5$	Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -1.0$
--	--

$$\begin{aligned}
 [\text{P}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{P})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{P})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{P})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{P})_{\odot} + [\text{P}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{P})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{P})_{\odot} + [\text{P}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{P})_{\text{nm}} &= 10^{3.55} \\
 \epsilon(\text{P})'_{\text{nm}} &= 3.59 \times 10^{-9}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [\text{P}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{P})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{P})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{P})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{P})_{\odot} + [\text{P}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{P})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{P})_{\odot} + [\text{P}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{P})_{\text{nm}} &= 10^{4.06} \\
 \epsilon(\text{P})'_{\text{nm}} &= 1.17 \times 10^{-8}
 \end{aligned}$$

Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -0.5$	Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = 0.0$
--	---

$$\begin{aligned}
 [\text{P}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{P})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{P})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{P})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{P})_{\odot} + [\text{P}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{P})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{P})_{\odot} + [\text{P}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{P})_{\text{nm}} &= 10^{4.78} \\
 \epsilon(\text{P})'_{\text{nm}} &= 6.02 \times 10^{-8}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [\text{P}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{P})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{P})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{P})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{P})_{\odot} + [\text{P}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{P})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{P})_{\odot} + [\text{P}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{P})_{\text{nm}} &= 10^{5.22} \\
 \epsilon(\text{P})'_{\text{nm}} &= 1.67 \times 10^{-7}
 \end{aligned}$$

Grupo de equações para o enxofre

Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.5$	Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.0$
--	--

$$\begin{aligned}
 [\text{S}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{S})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{S})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{S})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{S})_{\odot} + [\text{S}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{S})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{S})_{\odot} + [\text{S}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{S})_{\text{nm}} &= 10^{4.80} \\
 \epsilon(\text{S})'_{\text{nm}} &= 6.38 \times 10^{-8}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [\text{S}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{S})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{S})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{S})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{S})_{\odot} + [\text{S}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{S})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{S})_{\odot} + [\text{S}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{S})_{\text{nm}} &= 10^{5.39} \\
 \epsilon(\text{S})'_{\text{nm}} &= 2.45 \times 10^{-7}
 \end{aligned}$$

Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -1.5$	Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -1.0$
--	--

$$\begin{aligned}
 [\text{S}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{S})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{S})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{S})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{S})_{\odot} + [\text{S}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{S})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{S})_{\odot} + [\text{S}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{S})_{\text{nm}} &= 10^{5.80} \\
 \epsilon(\text{S})'_{\text{nm}} &= 6.33 \times 10^{-7}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [\text{S}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{S})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{S})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{S})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{S})_{\odot} + [\text{S}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{S})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{S})_{\odot} + [\text{S}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{S})_{\text{nm}} &= 10^{6.23} \\
 \epsilon(\text{S})'_{\text{nm}} &= 1.69 \times 10^{-6}
 \end{aligned}$$

Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -0.5$	Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = 0.0$
--	---

$$\begin{aligned}
 [\text{S}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{S})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{S})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{S})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{S})_{\odot} + [\text{S}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{S})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{S})_{\odot} + [\text{S}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{S})_{\text{nm}} &= 10^{6.71} \\
 \epsilon(\text{S})'_{\text{nm}} &= 5.15 \times 10^{-6}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [\text{S}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{S})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{S})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{S})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{S})_{\odot} + [\text{S}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{S})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{S})_{\odot} + [\text{S}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{S})_{\text{nm}} &= 10^{7.19} \\
 \epsilon(\text{S})'_{\text{nm}} &= 1.57 \times 10^{-5}
 \end{aligned}$$

Grupo de equações para o cloro

Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.5$	Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.0$
--	--

$$\begin{aligned}
 [\text{Cl}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{Cl})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{Cl})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{Cl})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{Cl})_{\odot} + [\text{Cl}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{Cl})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{Cl})_{\odot} + [\text{Cl}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{Cl})_{\text{nm}} &= 10^{2.72} \\
 \epsilon(\text{Cl})'_{\text{nm}} &= 5.30 \times 10^{-10}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [\text{Cl}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{Cl})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{Cl})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{Cl})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{Cl})_{\odot} + [\text{Cl}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{Cl})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{Cl})_{\odot} + [\text{Cl}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{Cl})_{\text{nm}} &= 10^{3.39} \\
 \epsilon(\text{Cl})'_{\text{nm}} &= 2.49 \times 10^{-9}
 \end{aligned}$$

Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -1.5$	Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -1.0$
--	--

$$\begin{aligned}
 [\text{Cl}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{Cl})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{Cl})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{Cl})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{Cl})_{\odot} + [\text{Cl}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{Cl})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{Cl})_{\odot} + [\text{Cl}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{Cl})_{\text{nm}} &= 10^{3.86} \\
 \epsilon(\text{Cl})'_{\text{nm}} &= 7.30 \times 10^{-9}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [\text{Cl}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{Cl})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{Cl})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{Cl})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{Cl})_{\odot} + [\text{Cl}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{Cl})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{Cl})_{\odot} + [\text{Cl}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{Cl})_{\text{nm}} &= 10^{4.36} \\
 \epsilon(\text{Cl})'_{\text{nm}} &= 2.33 \times 10^{-8}
 \end{aligned}$$

Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -0.5$	Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = 0.0$
--	---

$$\begin{aligned}
 [\text{Cl}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{Cl})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{Cl})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{Cl})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{Cl})_{\odot} + [\text{Cl}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{Cl})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{Cl})_{\odot} + [\text{Cl}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{Cl})_{\text{nm}} &= 10^{5.00} \\
 \epsilon(\text{Cl})'_{\text{nm}} &= 1.01 \times 10^{-7}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [\text{Cl}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{Cl})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{Cl})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{Cl})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{Cl})_{\odot} + [\text{Cl}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{Cl})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{Cl})_{\odot} + [\text{Cl}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{Cl})_{\text{nm}} &= 10^{5.67} \\
 \epsilon(\text{Cl})'_{\text{nm}} &= 4.70 \times 10^{-7}
 \end{aligned}$$

Grupo de equações para o ferro

Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.5$	Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.0$
--	--

$$\begin{aligned}
 [\text{Fe}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{Fe})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{Fe})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{Fe})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{Fe})_{\odot} + [\text{Fe}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{Fe})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{Fe})_{\odot} + [\text{Fe}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{Fe})_{\text{nm}} &= 10^{4.95} \\
 \epsilon(\text{Fe})'_{\text{nm}} &= 8.91 \times 10^{-8}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [\text{Fe}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{Fe})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{Fe})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{Fe})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{Fe})_{\odot} + [\text{Fe}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{Fe})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{Fe})_{\odot} + [\text{Fe}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{Fe})_{\text{nm}} &= 10^{5.45} \\
 \epsilon(\text{Fe})'_{\text{nm}} &= 2.81 \times 10^{-7}
 \end{aligned}$$

Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -1.5$	Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -1.0$
--	--

$$\begin{aligned}
 [\text{Fe}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{Fe})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{Fe})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{Fe})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{Fe})_{\odot} + [\text{Fe}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{Fe})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{Fe})_{\odot} + [\text{Fe}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{Fe})_{\text{nm}} &= 10^{5.95} \\
 \epsilon(\text{Fe})'_{\text{nm}} &= 8.91 \times 10^{-7}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [\text{Fe}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{Fe})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{Fe})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{Fe})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{Fe})_{\odot} + [\text{Fe}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{Fe})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{Fe})_{\odot} + [\text{Fe}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{Fe})_{\text{nm}} &= 10^{6.45} \\
 \epsilon(\text{Fe})'_{\text{nm}} &= 2.81 \times 10^{-6}
 \end{aligned}$$

Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -0.5$	Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = 0.0$
--	---

$$\begin{aligned}
 [\text{Fe}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{Fe})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{Fe})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{Fe})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{Fe})_{\odot} + [\text{Fe}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{Fe})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{Fe})_{\odot} + [\text{Fe}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{Fe})_{\text{nm}} &= 10^{6.95} \\
 \epsilon(\text{Fe})'_{\text{nm}} &= 8.91 \times 10^{-6}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [\text{Fe}/\text{H}] &= \log \epsilon(\text{Fe})_{\text{nm}} - \log \epsilon(\text{Fe})_{\odot} \\
 \log \epsilon(\text{Fe})_{\text{nm}} &= \log \epsilon(\text{Fe})_{\odot} + [\text{Fe}/\text{H}] \\
 \epsilon(\text{Fe})_{\text{nm}} &= \log^{-1}(\log \epsilon(\text{Fe})_{\odot} + [\text{Fe}/\text{H}]) \\
 \epsilon(\text{Fe})_{\text{nm}} &= 10^{7.45} \\
 \epsilon(\text{Fe})'_{\text{nm}} &= 2.81 \times 10^{-5}
 \end{aligned}$$

Grupo de equações para CO e O final

Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.5$	Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -2.0$
--	--

$\epsilon(\text{C})'_{\text{nm}} = 5.88 \times 10^{-7}$	$\epsilon(\text{C})'_{\text{nm}} = 1.73 \times 10^{-6}$
$\epsilon(\text{O})'_{\text{nm}} = 3.13 \times 10^{-6}$	$\epsilon(\text{O})'_{\text{nm}} = 8.65 \times 10^{-6}$
$\epsilon(\text{CO})_{\text{nm}} = \epsilon(\text{C}') = 5.88 \times 10^{-7}$	$\epsilon(\text{CO})_{\text{nm}} = \epsilon(\text{C}') = 1.73 \times 10^{-6}$
$\epsilon(\text{O})''_{\text{nm}} = \epsilon(\text{O})'_{\text{nm}} - \epsilon(\text{CO})$	$\epsilon(\text{O})''_{\text{nm}} = \epsilon(\text{O})'_{\text{nm}} - \epsilon(\text{CO})$
$\epsilon(\text{O})''_{\text{nm}} = 2.54 \times 10^{-7}$	$\epsilon(\text{O})''_{\text{nm}} = 6.91 \times 10^{-6}$

Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -1.5$	Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -1.0$
--	--

$\epsilon(\text{C})'_{\text{nm}} = 4.78 \times 10^{-6}$	$\epsilon(\text{C})'_{\text{nm}} = 1.81 \times 10^{-5}$
$\epsilon(\text{O})'_{\text{nm}} = 2.06 \times 10^{-5}$	$\epsilon(\text{O})'_{\text{nm}} = 5.76 \times 10^{-5}$
$\epsilon(\text{CO})_{\text{nm}} = \epsilon(\text{C}') = 4.78 \times 10^{-6}$	$\epsilon(\text{CO})_{\text{nm}} = \epsilon(\text{C}') = 1.81 \times 10^{-5}$
$\epsilon(\text{O})''_{\text{nm}} = \epsilon(\text{O})'_{\text{nm}} - \epsilon(\text{CO})$	$\epsilon(\text{O})''_{\text{nm}} = \epsilon(\text{O})'_{\text{nm}} - \epsilon(\text{CO})$
$\epsilon(\text{O})''_{\text{nm}} = 1.58 \times 10^{-5}$	$\epsilon(\text{O})''_{\text{nm}} = 3.95 \times 10^{-5}$

Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = -0.5$	Cálculo para $[\text{Fe}/\text{H}] = 0.0$
--	---

$\epsilon(\text{C})'_{\text{nm}} = 8.80 \times 10^{-5}$	$\epsilon(\text{C})'_{\text{nm}} = 2.48 \times 10^{-4}$
$\epsilon(\text{O})'_{\text{nm}} = 1.76 \times 10^{-4}$	$\epsilon(\text{O})'_{\text{nm}} = 4.49 \times 10^{-4}$
$\epsilon(\text{CO})_{\text{nm}} = \epsilon(\text{C}') = 8.80 \times 10^{-5}$	$\epsilon(\text{CO})_{\text{nm}} = \epsilon(\text{C}') = 2.48 \times 10^{-4}$
$\epsilon(\text{O})''_{\text{nm}} = \epsilon(\text{O})'_{\text{nm}} - \epsilon(\text{CO})$	$\epsilon(\text{O})''_{\text{nm}} = \epsilon(\text{O})'_{\text{nm}} - \epsilon(\text{CO})$
$\epsilon(\text{O})''_{\text{nm}} = 8.87 \times 10^{-5}$	$\epsilon(\text{O})''_{\text{nm}} = 2.00 \times 10^{-4}$