

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

Theo Chousinho Khouri Silva

**MonRaT: Um novo código de transferência
radiativa e as Estrelas OH/IR**

2010



Theo Chousinho Khouri Silva

MonRaT: Um novo código de transferência radiativa e as Estrelas OH/IR

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.

Orientadora: Prof. Dra. Silvia Lorenz Martins.

Rio de Janeiro
Maio de 2010

Chousinho Khouri Silva, Theo

MonRaT: um novo código de transferência
radiativa e as Estrelas OH/IR

Theo Chousinho Khouri Silva- Rio de Janeiro: UFRJ/OV, 2010

xiii, 89f.:il; 30 cm

Orientadora: Silvi Lorenz Martins.

Dissertação (mestrado) - UFRJ/ OV/ Programa de Pós-graduação
em Astronomia, 2010.

Referências Bibliográficas: f: 87-89.

1. Apresentação. 2. Introdução. 3. O código de transferência
radiativa. 4. Estudo do maser de 1612 MHz de OH/IR. 5. Modelagem
de Observações ISO com o MonRaT. I. Lorenz-Martins, Silvia.
II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, Observatório do Valongo,
Programa de Pós-graduação em Astronomia, 2010.
III. MonRaT: um novo código de transferência
radiativa e as Estrelas OH/IR

Agradecimentos

Aos meus pais e à minha família, por sustentar os meus sonhos e incetivar o meu desenvolvimento.

À professora Silvia Lorenz-Martins, por toda a paciência e carinho dedicados em mais de cinco anos de parceria.

Aos meus amigos, por estarem sempre presentes.

À pós-graduação do Observatório do Valongo, por proporcionar todos os meios para que eu pudesse concluir esta dissertação.

À FAPERJ, pelo financiamento a este trabalho.

Resumo

Estrelas OH/IR são objetos evoluídos e ricos em Oxigênio, que se encontram no Ramo Assintótico das Gigantes. As estrelas OH/IR apresentam altas taxas de perda de massa, 10^{-8} a $10^{-4} M_{\odot}/ano$ e baixas temperaturas efetivas. O ambiente formado nos ventos densos e lentos destes objetos é ideal para a formação de grãos, principalmente silicatos, que re-processam a radiação emitida pela estrela central, absorvendo fótons do visível e de comprimentos de onda menores e re-emitindo no infravermelho. Desta forma, para compreender a distribuição espectral de energia destes objetos, é necessário tratar o problema da transferência radiativa da energia emitida pela estrela central através do envoltório de poeira.

Neste trabalho, apresentamos um código desenvolvido na linguagem C que resolve o problema da transferência radiativa por meio de uma simulação Monte Carlo. O código foi denominado MonRaT e foi escrito com base em dois códigos anteriores: Radumodi (Lorenz-Martins & de Araújo 1997) e DGST (Lorenz-Martins & Lefèvre 1993). As principais inovações do código MonRaT em relação aos seus predecessores são: possibilidade de considerar envoltórios com diversos tipos de grãos e com lei de distribuição de grãos do tipo: $n(r) = n_0/r^m$.

Apresentamos também um estudo da influência do expoente m da lei de distribuição de grãos nos envoltórios de estrelas OH/IR, realizado com o código Radumodi. E analisamos os possíveis impactos deste parâmetro para a formação do maser de 1612 MHz produzido pela molécula de OH.

O código MonRaT foi aplicado na modelagem de estrelas OH/IR observadas pelo satélite ISO. Consideramos envoltórios constituídos por silicatos amorfos, silicatos cristalinos (forsterita), ferro e $Mg_{0,6}Fe_{0,4}O$. Nós discutimos o impacto para o ajuste do modelo e para a fração numérica de cada grão.

Abstract

OH/IR stars are evolved and oxygen-rich objects located at the tip of the Asymptotic Giant Branch. They experience high mass loss rates 10^{-8} a $10^{-4} M_{\odot}/year$ during this later evolutionary phase. The conditions of the slow, dense and cold wind are excellent for the grain, mainly silicates, formation and growth processes to take place. Those grains absorb visible radiation emitted by the star and radiate it on the infrared. Then, in order to understand the spectral energy distribution of those objects, one has to solve the radiative transfer through the dust envelope.

In this work, we present a code written in the C language that addresses the radiative transfer problem through a Monte Carlo simulation. The code is called MonRaT and is based on two previous codes: Radumodi (Lorenz-Martins & de Araújo 1997) and DGST (Lorenz-Martins & Lefèvre 1993). The main implementations of this new code are: the possibility of considering envelopes constituted by several types of grains and envelopes with grain distribution laws given by: $n(r) = n_0/r^m$, where m is a free parameter.

Parallely, we carried out a study, with the code Radumodi, of the influence of the parameter m on the structure of the envelopes of a set of ten OH/IR stars. We analyzed the possible impacts of the differences on the existence of the OH 1612 MHz maser.

Finally, we used the code MonRaT to model a set of six OH/IR stars observed by ISO. We considered envelopes constituted by amorphous silicates, crystalline silicates (forsterite), iron and $Mg_{0,6}Fe_{0,4}O$. We discuss the impact on the modeling and the results for the number fraction of each specie.

Sumário

1	Apresentação	1
2	Introdução	5
2.1	Evolução estelar e estrutura interna	5
2.1.1	Sequência Principal	6
2.1.2	Saindo da SP	11
2.1.3	O Ramo das Gigantes Vermelhas	12
2.1.4	O Ramo Horizontal	13
2.1.5	O Ramo Assintótico das Gigantes	14
2.1.6	Evolução pós-RAG	19
2.2	Nucleossíntese e enriquecimento superficial	19
2.2.1	Dragagens	21
2.2.2	$C \times O$	22
2.3	Formação e crescimento dos grãos	23
3	O código de transferência radiativa	25
3.1	Introdução	25
3.1.1	Método Monte Carlo:	25
3.1.2	Teoria de Mie	26
3.1.3	Modelagem de envoltórios de poeira	29
3.2	Algoritmo de Transferência Radiativa:	30
3.2.1	Caracterização do Envoltório	30
3.2.2	Propagação dos pacotes de energia	31
3.2.3	Equilíbrio radiativo e temperatura dos grãos:	32
3.2.4	A opacidade gerada pelo gás deve ser considerada?	34

3.3	O código anterior:	34
3.4	MonRaT, o novo código:	36
3.4.1	Integrais da Função de Planck	38
3.4.2	Distribuições de temperatura	41
3.4.3	Desenvolvimento do novo código:	44
3.4.4	Testes:	44
4	Estudo do maser de 1612Mhz de OH/IR	49
4.1	Introdução	49
4.2	Exposição do problema	52
4.3	Resultados	55
4.3.1	Estudo da variação do expoente m	55
4.3.2	Cálculo de novos modelos	57
4.4	Conclusões	70
5	Modelagem de observações ISO com o MonRaT	72
5.1	Introdução	72
5.2	Resultados	77
6	Conclusões e Perspectivas	84

Lista de Tabelas

3.1	Valores das integrais da função de Planck calculados pelo método do código MonRaT (S1) e dos códigos anteriores (S2) em função da temperatura da planckiana	40
4.1	Valores dos raios internos para cada valor de m , para os modelos com $\tau = 8$ e $R_{ext} = 5000$	57
4.2	Parâmetros dos melhores modelos encontrados por Lorenz-Martins & de Araújo (1997) utilizando $m = 2, 5$. A primeira coluna contém o nome do objeto; a segunda, o valor do raio interno do envoltório; a terceira, o valor do raio externo; a quarta, a temperatura; a quinta a profundidade óptica medida em $\lambda = 9,7 \mu m$; e a sexta, o valor de m	58
4.3	Parâmetros dos melhores modelos encontrados por nós (com $m = 2$) para as fontes modeladas anteriormente por Lorenz-Martins & de Araújo (1997). As colunas representam as mesmas grandezas que as da tabela anterior.	59
4.4	Valores das razões entre as densidades de coluna nos dois modelos, para $R_{mas} = 0,9 R_{ext}, N_1$, e $R_{mas} = 0,8 R_{ext}, N_2$	63
4.5	Valores para a razão entre as densidade de massa na forma de grãos na região de formação do maser ($r = 0,85 R_{ext}$).	65
4.6	Valores para a razão entre as quantidades totais de massa no envoltório na forma de grãos.	68
5.1	Parâmetros para os melhores modelos de cada fonte. A primeira coluna contém o nome do objeto; a segunda, o raio interno do envoltório; a terceira, o raio externo; a quarta, a temperatura; a quinta, a profundidade óptica medida em $9,7 \mu m$; a quinta, o raio dos grãos; e a sexta, o valor de m	78

5.2	Composição dos melhores modelos de cada fonte. Os valores são dados em $\frac{n_g}{n_T}$, onde n_g é o número total de um dado tipo de grão e n_T é a quantidade total de grãos.	79
-----	---	----

Lista de Figuras

1.1	Evolução esquemática de estrelas de $1 M_{\odot}$ (esquerda) e $5 M_{\odot}$ (direita), adaptado de Maercker (2009).	4
2.1	$\log(\epsilon/\rho X^2)$ dado em função da temperatura, onde: ϵ é a energia produzida, ρ é a densidade na região de queima, e X é a abundância de Hidrogênio por massa, Hans & Kawaler (1999), p 242	7
2.2	$N_A < \sigma v >$ dado em função da temperatura, onde N_A é a constante de Avogrado e $< \sigma v >$ é a média do produto da seção de choque pela velocidade das partículas, Hans & Kawaler (1999), p 237.	9
2.3	Esquema da evolução dos pulsos térmicos e da terceira série de dragagens, adaptado de Busso et al. 1999	17
2.4	Esquema da formação dos envoltórios de poeira das estrelas do RAG, adaptado de Habing & Olofsson (2003)	24
3.1	Eficiências de extinção para grãos de $0,1 \mu m$ de silicato amorfo, silicato cristalino, ferro e $Mg_{0,6}Fe_{0,4}O$	42
3.2	Perfis de temperatura calculados em uma modelagem para grãos de $0,1 \mu m$ de silicato amorfo, silicato cristalino, ferro e $Mg_{0,6}Fe_{0,4}O$	43
3.3	Comparação entre as DEE geradas pelos códigos MonRaT (linha tracejada) e DGST (linha contínua), utilizando os mesmo parâmetros	45
3.4	Comparação entre os perfis de temperatura calculados para os dois grãos pelos códigos MonRaT e DGST, utilizando os mesmos parâmetros	46
3.5	Comparação entre as DEE geradas pelos códigos MonRaT (linha tracejada) e Radumodi (linha contínua), utilizando os mesmos parâmetros	47

3.6	Comparação entre os perfis de temperatura calculados pelos códigos MonRaT (linha tracejada) e Radumodi (linha contínua), utilizando os mesmos parâmetros	47
3.7	Comparação entre as DEE geradas pelos códigos MonRaT (linha tracejada) e Radumodi (linha contínua), utilizando os mesmos parâmetros	48
3.8	Comparação entre as DEE geradas pelos códigos MonRaT (linha tracejada) e Radumodi (linha contínua), utilizando os mesmo parâmetros e ajustando as observações IRAS da fonte AFGL 230	48
4.1	Emissão maser em 1612 MHz da fonte IRAS 17253-2824, adaptado de te Lintel Hekkert et al., 1991	52
4.2	DEE geradas com diferentes valores de m	56
4.3	Perfis de temperatura gerados com diferentes valores de m	56
4.4	Os dois modelos ($m = 2$ e $m = 2,5$) para a fonte AFGL 230 ajustados às observações IRAS.	59
4.5	Os dois modelos ($m = 2$ e $m = 2,5$) para a fonte OH 138.0+7.2 ajustados às observações IRAS.	60
4.6	Os dois modelos ($m = 2$ e $m = 2,5$) para a fonte AFGL 1822 ajustados às observações IRAS.	61
4.7	Os dois modelos ($m = 2$ e $m = 2,5$) para a fonte OH 338.1 + 6.0 ajustados às observações IRAS.	62
4.8	Os dois modelos ($m = 2$ e $m = 2,5$) para a fonte OH 344.9+0.01 ajustados às observações IRAS.	63
4.9	Os dois modelos ($m = 2$ e $m = 2,5$) para a fonte AFGL 5356 ajustados às observações IRAS.	64
4.10	Os dois modelos ($m = 2$ e $m = 2,5$) para a fonte AFGL 5379 ajustados às observações IRAS.	65
4.11	Os dois modelos ($m = 2$ e $m = 2,5$) para a fonte AFGL 2205 ajustados às observações IRAS.	66
4.12	Os dois modelos ($m = 2$ e $m = 2,5$) para a fonte AFGL 5535 ajustados às observações IRAS.	67
4.13	Os dois modelos ($m = 2$ e $m = 2,5$) para a fonte AFGL 2885 ajustados às observações IRAS.	68

4.14	Quantidade total de massa na forma de grãos relacionada com o parâmetro raio interno dos modelos. Foram considerados todos os modelos com $m = 2$.	69
4.15	Quantidade total de massa na forma de grãos relacionada com o parâmetro profundidade óptica dos modelos. Foram considerados todos os modelos com $m = 2$.	70
5.1	Exemplo de diferença entre a estrutura dos grãos amorfos e cristalinos e dos espectros associados a cada tipo de grão. Os tetraedros representam quatro átomos de Oxigênio dispostos em torno de um átomo de Silício e os círculos amarelos, metais que compõem o grão. Adaptado de Molster & Kemper (2005).	74
5.2	Modelo calculado por Suh et al. (2002) para a estrela OH 26.5 +0.6.	76
5.3	Modelo calculado por Kemper et al. (2002) para a estrela OH 127.8+0.0.	76
5.4	Modelo calculado por Maldoni et al. (2005) para a estrela OH 344.9+0.01.	77
5.5	Melhor modelo para a fonte IRAS 22177+5936 ajustado à observação ISO.	80
5.6	Melhor modelo para a fonte GLMP 920 ajustado à observação ISO.	81
5.7	Melhor modelo para a fonte AFGL 230 ajustado à observação ISO.	82
5.8	Melhor modelo para a fonte AFGL 2205 ajustado à observação ISO.	82
5.9	Melhor modelo para a fonte AFGL 5379 ajustado à observação ISO.	83
5.10	Melhor modelo para a fonte AFGL 5535 ajustado à observação ISO.	83

Capítulo 1

Apresentação

O Ramo Assintótico das Gigantes (RAG) é uma região do diagrama Hertzsprung-Russell (diagrama HR) povoada por estrelas evoluídas, cujas massas na Sequência Principal (SP) de Idade Zero variam entre 0,8 e 8 M_{\odot} . O RAG é caracterizado por alta luminosidade, baixa temperatura efetiva, raios extensos e altas taxas de perda de massa das estrelas que o compõem. Na SP estes objetos, dependendo da massa em questão, possuem:

- temperatura efetiva compreendida entre 5000 e 20000K
- luminosidade entre $3 \times 10^{-3}L_{\odot}$ e 10^3L_{\odot} .
- raio no intervalo de 0,85 a 4,5 R_{\odot}
- e taxa de perda de massa insignificante, salvo casos específicos.

Na fase do RAG estes objetos apresentam uma estrutura completamente diferente daquela observada na SP. A temperatura efetiva cai para $\approx 3000K$; a estrela se expande, atingindo raios de $5 \times 10^2R_{\odot}$; a luminosidade aumenta substancialmente, chegando a valores da ordem de 10^4L_{\odot} e altas taxas de perda de massa são observadas, 10^{-8} a $10^{-4} M_{\odot}/ano$. As condições físicas destes objetos levam a formação de um envoltório circunstelar, composto de gás e poeira, que reprocessa a radiação estelar, podendo chegar a obscurecer a estrela no visível, em casos extremos. Esta fase da vida destas estrelas representa um papel importante no enriquecimento químico das galáxias, pois, através destes ventos densos e frios, o material processado no interior estelar é ejetado no Meio Interestelar (MI). Suas altas luminosidades fazem com que estes

objetos sejam usados, também, como importantes fontes de informação da dinâmica e da história evolutiva de galáxias.

Devido ao amplo leque de parâmetros físicos das estrelas nesta faixa de massa na SP, os processos evolutivos responsáveis por conduzi-las à posição observada no RAG variam muito. Atualmente, possuímos um bom entendimento qualitativo da evolução e cálculos de modelos se aproximam cada vez mais dos observáveis, apesar de algumas dificuldades importantes ainda existirem (Herwig 2005).

O estudo da evolução das estrelas de baixa massa e de massa intermediária avançou muito nos últimos 50 anos, em função do trabalho de diversos pesquisadores. Alguns autores, entretanto, são sempre apontados como importantes pivôs e referências de todo este trabalho, destacando-se figuras históricas como Icko Iben Junior, Schandrasekar e Schwarzschild. Os trabalhos destes autores foram fundamentais para o desenvolvimento do campo, principalmente nas décadas entre 50 e 80, e são até hoje amplamente citados. Vários artigos de revisão de temas diretamente ligados ou correlatos à evolução destas estrelas já foram apresentados, mas, dentre eles, vale destacar três artigos que discutiram o conhecimento, as dificuldades e as perspectivas - em épocas diferentes - deste estudo: Iben (1967), Iben & Renzini (1983) e Herwig (2005).

Nos ventos densos e enriquecidos expelidos por estes objetos, ocorre a formação de grãos. As partículas de poeira têm um papel importante na dinâmica do envoltório e acredita-se que a pressão de radiação atuando sobre elas seja a mais importante fonte de momento do vento. Os grãos absorvem a radiação em comprimentos de onda na faixa do visível e infravermelho próximo e emitem na faixa do infravermelho médio e distante. Em alguns casos, a quantidade de grãos no envoltório é tão grande que a estrela fica completamente obscurecida para comprimentos de onda menores, só sendo observável no infravermelho.

Os objetos estudados neste trabalho são estrelas muito obscurecidas e ricas em Oxigênio, denominadas OH/IR. Realizamos o estudo destes objetos através de modelagens dos envoltórios de poeira. Para reproduzir a Distribuição Espectral de Energia (DEE), é necessário resolver o problema da transferência radiativa, partindo da emissão da estrela e da composição dos grãos do envoltório.

O objetivo desta dissertação é apresentar um novo código de transferência radiativa que trata o problema da transferência radiativa em envoltórios de poeira através de

uma simulação do tipo Monte Carlo. O código foi desenvolvido com base em um código anterior e as melhorias implementadas permitem: a consideração de um número ilimitado de espécies de grãos e, futuramente, o cálculo da DEE para envoltórios com simetria azimutal (presença de disco).

Apresentamos também duas aplicações de códigos deste tipo na análise de problemas relacionados a estrelas do RAG ricas em oxigênio:

- utilizando o código antigo, investigamos a influência do expoente da distribuição de grãos, m ($n(r) = n_0/r^m$), na temperatura da poeira e conseqüentemente na excitação do maser de 1612 MHz de OH. Esta emissão maser, muito luminosa, é frequentemente observada nas OH/IR, entretanto, muitas fontes ($\approx 40\%$) localizadas na região mais propícia do diagrama cor-cor não a apresentam. Abordamos este problema calculando modelos com diferentes leis de distribuição dos grãos no envoltório e analisando a possível influência para a ocorrência do maser.
- o novo código foi empregado na modelagem de observações do satélite ISO (Infrared Space Observatory) de envoltórios de estrelas OH/IR considerando a presença de silicatos cristalinos. A missão ISO foi responsável por revolucionar o conhecimento da região do infravermelho (IV) médio e distante, revelando diversas informações até então desconhecidas. Uma das importantes contribuições deste satélite foi a constatação de que os silicatos presentes nas estrelas do RAG não apresentam apenas estrutura amorfa e, sim, há uma importante fração deste que possui estrutura cristalina. O entendimento dos processos responsáveis por formar estas estruturas cristalinas, assim como a real parcela deste tipo de grãos, não é, ainda, bem compreendida. Calculamos modelos para estes objetos considerando a presença de silicatos cristalinos.

A figura 1.1 apresenta esquematicamente a evolução de estrelas de $1 M_{\odot}$ e de $5 M_{\odot}$ no diagrama HR. A evolução destes objetos é marcada por diferenças importantes como, por exemplo, o processo de início da queima de Hélio e os eventos de enriquecimento superficial. A seguir, apresentamos uma introdução ao conhecimento atual sobre os processos físicos responsáveis por transformar estrelas de SP, com as características apresentadas, nas estrelas do RAG, com ênfase dada aos pontos mais relevantes para a caracterização do RAG.

São apresentados; em seguida, no capítulo 3, o algoritmo do cálculo de transferência radiativa e o novo código; posteriormente, nos capítulos 4 e 5, os problemas do expoente da distribuição dos grãos e dos silicatos cristalinos são respectivamente discutidos; e, finalmente, no capítulo 6, as conclusões são apresentadas.

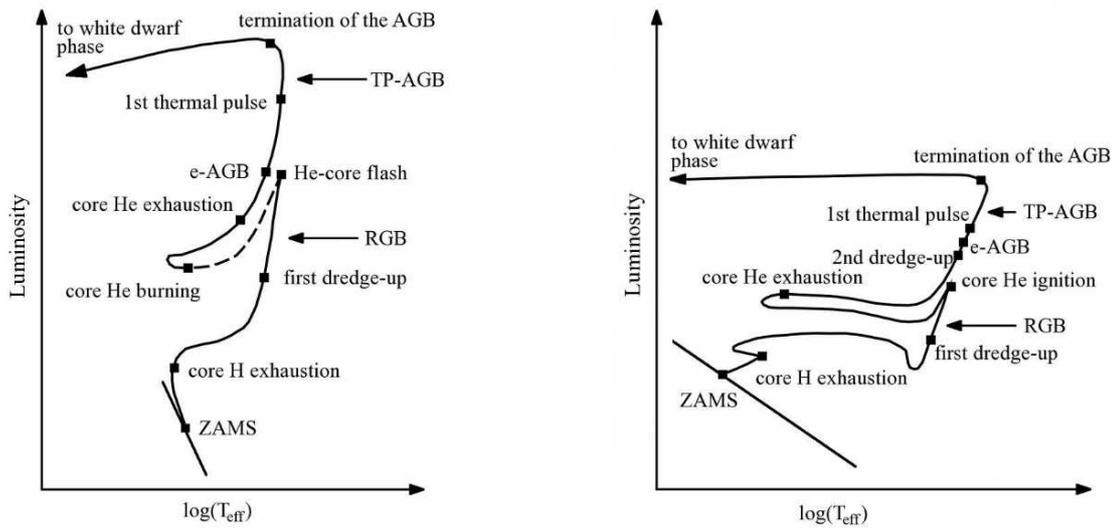


Figura 1.1: Evolução esquemática de estrelas de $1 M_{\odot}$ (esquerda) e $5 M_{\odot}$ (direita), adaptado de Maercker (2009).

Capítulo 2

Introdução

2.1 Evolução estelar e estrutura interna

As estrelas se formam a partir do gás frio e denso que constitui as nuvens moleculares. Devido à atuação conjunta de turbulências no meio e auto-gravitação as extensas associações destas nuvens se fragmentam continuamente em estruturas cada vez menores. Finalmente, uma quantidade de material capaz de se sustentar pelo equilíbrio hidrostático colapsa, aumentando a temperatura do gás através da liberação da energia gravitacional. Metade da energia gravitacional é transformada em energia térmica, $2E_T = E_G$, segundo o teorema virial. O presente conhecimento do processo de formação estelar foi extensivamente revisto por Mckee & Ostriker (2007).

Nesta fase, a principal fonte de energia da proto-estrela é a liberação de energia gravitacional em função do colapso. Entretanto, durante sua vida a energia será gerada principalmente a partir de queimas termonucleares. Os processos de queima são resultado de fusão de átomos, formando núcleos mais complexos, sendo necessário para que a reação aconteça que a velocidade dos átomos seja grande o suficiente para vencer a barreira coulombiana. A grandeza que mede a eficácia de uma reação, entre duas partículas α e β é uma média da seção de choque ponderada pela distribuição de velocidade das partículas (em geral Maxwelliana) $\langle \sigma v \rangle_{\alpha\beta}$.

A medida que o processo de colapso da proto-estrela continua, esta se torna cada vez mais densa e quente. As energias características das partículas, átomos e elétrons, aumentam proporcionalmente, o que faz com que a probabilidade de ocorrerem pro-

cessos de fusão seja cada vez maior. As reações termonucleares começam a ocorrer de maneira significativa quando as condições de temperatura e densidade necessárias são atingidas. A primeira delas é a queima do Deutério, que ocorre quando a temperatura atinge $\approx 6 \times 10^5 K$.

2.1.1 Sequência Principal

O início da vida do objeto como estrela, porém, só se dá com ignição da queima de Hidrogênio no núcleo. Esta fase é denominada Sequência Principal (SP) e é a mais longa de toda a evolução estelar, tipicamente 10^{12} anos para estrelas de $0,8 M_{\odot}$ e 3×10^7 anos para $8 M_{\odot}$.

A queima de H pode ocorrer de diferentes formas, dependendo da temperatura do núcleo e da composição química inicial do objeto. Independentemente da sequência de queima, porém, o resultado final do processo é a fusão de quatro núcleos de H para formar um núcleo de He. É necessário, portanto, que dois prótons se transformem em dois nêutrons e, para que isto ocorra, decaimentos beta e/ou capturas de elétrons precisam acontecer em algum momento. Para que cada um destes processos de transformação de prótons em nêutrons ocorra, um neutrino deve ser emitido (conservação do número leptônico), e energia é perdida. A diferença entre energia de ligação do He e do H é de cerca de 26,731 MeV e a energia perdida por neutrinos corresponde de 2 a 30 % deste valor, dependendo da sequência de reações.

As duas formas de queima de H encontradas nesta fase são a cadeia próton - próton (pp) e o Ciclo CNO, sendo cada um dos dois processos dividido em diferentes ramificações, que geram variações significativas na energia produzida e nos elementos utilizados. No caso do ciclo CNO, mudanças importantes nas abundâncias dos elementos utilizados - Carbono, Nitrogênio e Oxigênio - são esperadas.

O ciclo CNO opera em temperaturas mais altas, e é responsável pela maior parte da energia gerada pela queima de H para temperaturas acima de aproximadamente $1,5 \times 10^7$, como podemos ver na Figura 2.1.

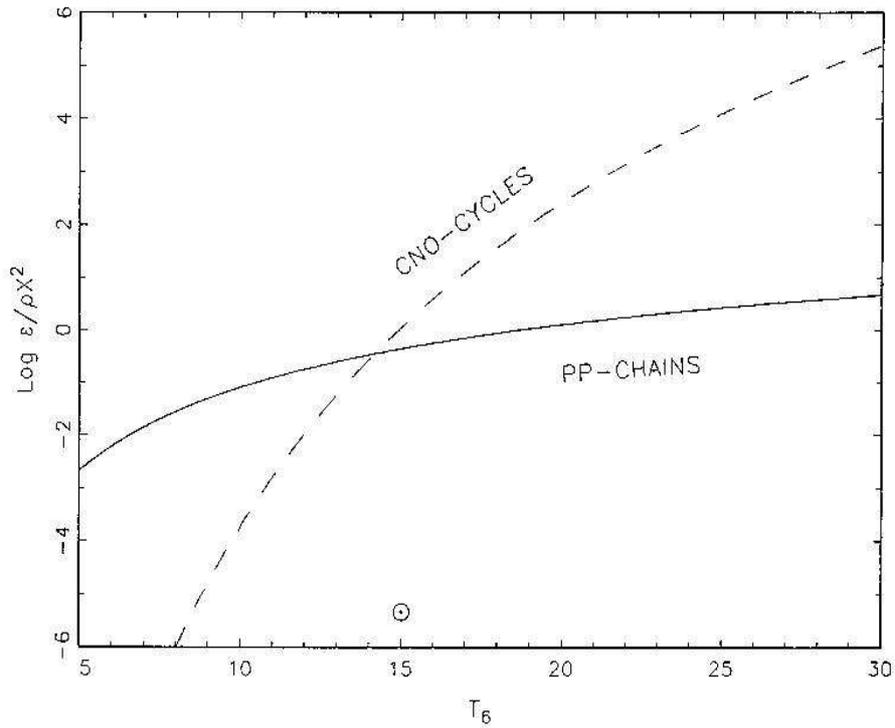
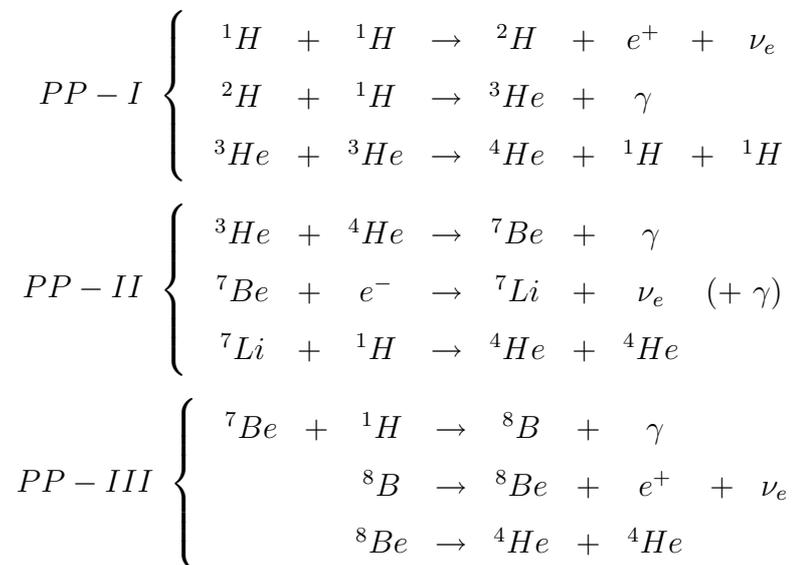


Figura 2.1: $\log(\epsilon/\rho X^2)$ dado em função da temperatura, onde: ϵ é a energia produzida, ρ é a densidade na região de queima, e X é a abundância de Hidrogênio por massa, Hans & Kawaler (1999), p 242

- **Cadeia pp** - A cadeia pp tem três principais sequências de queima, cujas importâncias e contribuição variam de acordo com a temperatura, a densidade e a abundância da região de queima. As sequências são:



As duas primeiras reações são comuns a todos os caminhos, e devem ocorrer duas vezes no caso do ramo PP I para que o núcleo de ${}^4\text{He}$ seja formado. A primeira reação, fusão de dois prótons, é a que dá o nome a toda a cadeia e é também a que tem a menor probabilidade de ocorrer. Para que o núcleo de Deutério, ${}^2\text{H}$, seja formado, é necessário que um dos prótons sofra um decaimento β^+ no momento do encontro. A probabilidade de ocorrência desta configuração é muito baixa e, portanto, a taxa de formação de ${}^2\text{H}$ é muito pequena em relação às outras envolvidas na cadeia. A taxa desta reação é, então, aquela que dita a taxa da cadeia pp, sendo essa proporcional a $\langle \sigma v \rangle_{pp}$, que é a média do produto da seção de choque pela distribuição de velocidade dos prótons. A segunda reação, por sua vez, tem uma seção de choque muito grande, fato que faz com que a abundância de ${}^2\text{H}$ seja mantida muito baixa.

A partir da formação do núcleo de ${}^3\text{He}$, entretanto, ocorre a primeira ramificação da cadeia pp, pois duas situações são possíveis: fusão de dois núcleos de ${}^3\text{He}$ ou a fusão de um núcleo de ${}^3\text{He}$ com um de ${}^4\text{He}$. A segunda ramificação surge com a formação do núcleo de ${}^7\text{Be}$, que pode capturar um elétron para formar ${}^7\text{Li}$ ou um próton para formar ${}^8\text{B}$. As taxas das reações, e, logo, a importância de cada um dos ramos da cadeia, variam de acordo com a temperatura, conforme mostrado na Figura 2.2.

As reações que envolvem decaimento β^+ ou captura de elétrons são responsáveis pela emissão de neutrinos e, portanto, por perda de energia. Estas reações são: fusão de dois prótons para formação de Deutério; captura de elétron pelo ${}^7\text{Be}$ e consequente formação de ${}^7\text{Li}$; e decaimento β^+ do ${}^8\text{B}$, gerando ${}^8\text{Be}$. As perdas são de: 2% para o ramo PP I, 4% para o ramo PP II e 28,3% para o ramo PP III.

- **Ciclo CNO** - Nas condições normais de queima de Hidrogênio encontradas em estrelas de baixa massa e de massa intermediária, as principais reações do ciclo CNO são:

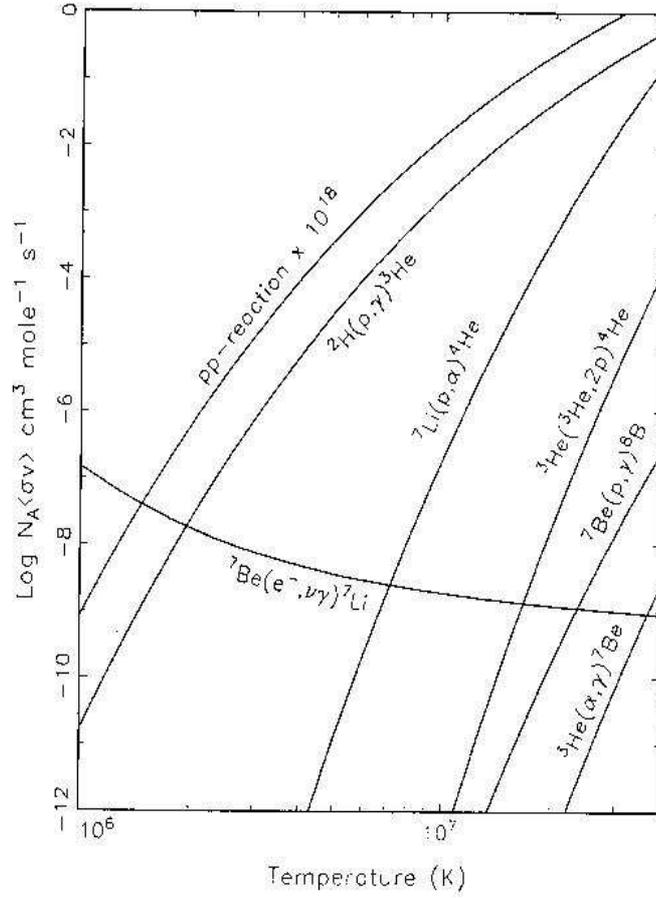
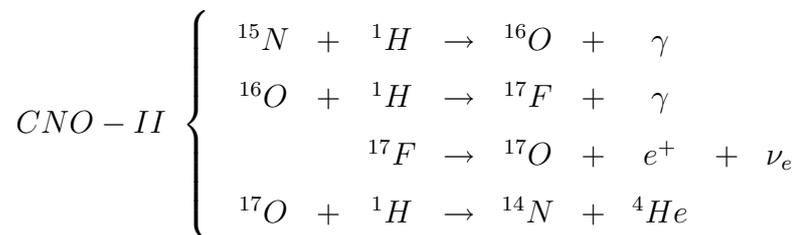
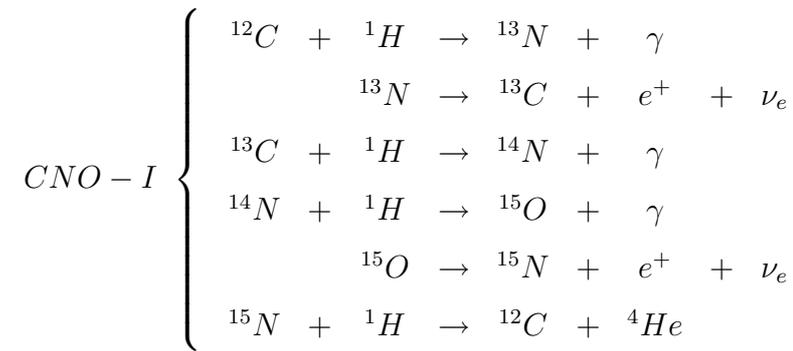


Figura 2.2: $N_A \langle \sigma v \rangle$ dado em função da temperatura, onde N_A é a constante de Avogrado e $\langle \sigma v \rangle$ é a média do produto da seção de choque pela velocidade das partículas, Hans & Kawaler (1999), p 237.



O ciclo CNO não possui uma sequência definida, já que qualquer reação de captura de Hidrogênio pelo Carbono, Nitrogênio ou Oxigênio pode ocorrer independentemente de outras reações, desde que a abundância do elemento em questão seja diferente de 0. A primeira parte do ciclo, CNO I, é chamada de ciclo CN e o ciclo inteiro, CNO I + CNO II, é o ciclo CNO completo.

Apesar de o ciclo ser constituído de reações que destroem e constroem os mesmos isótopos continuamente, as abundâncias são modificadas, pois as taxas das reações são bastante diferentes. Uma consequência importante do funcionamento do ciclo CNO é, inclusive, a conversão da grande maioria dos átomos de Carbono, Nitrogênio e Oxigênio em ^{14}N , dado que o tempo de queima é suficientemente alto para que a situação de equilíbrio se estabeleça. Isto acontece por dois motivos: a reação $^{14}\text{N}(p, \gamma)^{15}\text{O}$ é muito lenta em comparação com as demais; e o ^{14}N não só é formado por $^{13}\text{C}(p, \gamma)^{14}\text{N}$, como também é o produto final da segunda parte do ciclo.

A determinação precisa da quantidade de energia gerada pelo ciclo CNO é controlada pela abundância de ^{14}N , já que a reação mais lenta é $^{14}\text{N}(p, \gamma)^{15}\text{O}$. Entretanto, determinar precisamente a abundância deste elemento pode ser uma tarefa difícil se o tempo de queima ainda não é grande o suficiente para podermos assumir o equilíbrio das abundâncias dos elementos do ciclo.

A produção de energia pelo ciclo CNO depende mais fortemente da temperatura da região de queima do que no caso da cadeia pp e, portanto, o gradiente de produção de energia é muito maior no primeiro caso. Este fato faz com que haja uma grande diferença de energia gerada em camadas muito próximas de modo que não é possível transportar a energia radiativamente. A convecção se estabelece, então, como forma de transporte de energia neste caso.

Durante a evolução na SP, o Hidrogênio vai sendo consumido no centro da estrela e um núcleo rico em Hélio vai sendo formado. A medida em que a quantidade de He aumenta, o núcleo se torna mais denso (peso molecular médio aumenta) e quente. No caso das estrelas mais massivas, para as quais a queima ocorre através do ciclo CNO, a abundância de Hidrogênio em toda a região convectiva central decresce homoganeamente, por causa da mistura de matéria causada pela convecção, e um núcleo

de abundância homogênea se estabelece em toda a região onde ocorre a queima. Conforme a quantidade de Hidrogênio neste núcleo convectivo diminui, e, conseqüentemente, diminui também a taxa de produção de energia, o núcleo sofre um processo de contração e se torna mais quente. Neste caso, a medida que a temperatura aumenta na camada que circunda o núcleo, uma camada circum-nuclear de queima de Hidrogênio se estabelece. Por outro lado, nas estrelas menos massivas, que queimam H através da cadeia pp, não há mistura do material do núcleo e o caroço de Hélio cresce gradualmente. Já que o Hidrogênio é mais rapidamente consumido nas regiões mais centrais, onde a temperatura é maior, a camada de queima de H é formada em regiões bem internas e vai se deslocando para fora, enquanto o núcleo rico em He cresce.

2.1.2 Saindo da SP

O Hidrogênio do núcleo é, eventualmente, consumido e atinge níveis baixos o suficiente para que as reações que ali ocorrem não sejam capazes de produzir a energia necessária para a estrela. A fonte de energia principal passa a ser proveniente da queima deste elemento em uma camada que envolve a região central. O aumento do peso molecular médio do núcleo faz com que a configuração de equilíbrio hidrostático possível seja para valores de pressão e de temperatura muito mais altos do que para um núcleo de Hidrogênio. A energia necessária para alcançar este equilíbrio vem, obviamente, da contração gravitacional. O caroço de Hélio é praticamente isotérmico, já que não há produção de energia, mas um pequeno gradiente de temperatura tem que existir para que a energia proveniente da contração seja transportada para fora.

A temperatura e a pressão na região de queima de Hidrogênio se tornam maiores do que a necessária para suportar o peso das camadas superiores e estas, então, sofrem uma expansão. A medida que mais Hélio é produzido, e o caroço central cresce, a camada de queima avança na direção radial e faz com que as camadas superiores se expandam mais. Neste processo, a luminosidade da estrela não aumenta muito, já que não há grande variação na produção de energia. Em contrapartida ao aumento do raio, e já que a luminosidade não varia, a temperatura superficial decresce. A diminuição da temperatura superficial faz com que uma zona convectiva cada vez maior apareça nas regiões mais externas da estrela. Este processo acontece de forma paulatina até

que o núcleo atinja aproximadamente 10% da massa total da estrela. Este é o limite de Schönberg-Chandrasekhar (Schönberg & Chandrasekhar, 1942), que representa o tamanho máximo que um núcleo isotérmico pode ser mantido pela pressão do gás.

2.1.3 O Ramo das Gigantes Vermelhas

O núcleo de Hélio sofre um colapso dado pela escala de tempo de Kelvin-Helmholtz e libera grande quantidade de energia gravitacional. A camada de queima de Hidrogênio é aquecida e mais energia é gerada. O envoltório sofre uma expansão mais violenta do que a anterior e a zona convectiva se aprofunda. A maior geração de energia e o transporte convectivo eficiente fazem com que a luminosidade da estrela cresça rapidamente, sendo a temperatura mantida aproximadamente constante.

Esta fase é chamada Ramo das Gigantes Vermelhas (RGV) e o raio do envoltório e a luminosidade da estrela vão continuar a aumentar até que o colapso do caroço pare. Quando a temperatura do núcleo atinge aproximadamente $10^8 K$, a fusão de He em C começa a ocorrer. A energia liberada pela queima do He para a contração do núcleo e, conseqüentemente, a expansão do envoltório.

O processo triplo- α

A queima de Hélio acontece em duas etapas: primeiro, dois átomos de ${}^4\text{He}$ se fundem, formando um átomo de ${}^8\text{Be}$ (${}^4\text{He} + {}^4\text{He} \rightarrow {}^8\text{Be}$); em seguida, um terceiro átomo de ${}^4\text{He}$ reage com o átomo recém-formado, gerando ${}^{12}\text{C}$. O tempo de meia vida do Berílio é muito pequeno ($2,6 \times 10^{-16}$ s), sendo necessário que os três átomos de Hélio interajam quase que ao mesmo tempo. Este processo começa a ser possível quando as temperaturas centrais atingem aproximadamente $10^8 K$.

A energia produzida pela queima de He tem uma dependência muito maior com a Temperatura do que a produzida pelo ciclo CNO, fato que faz com que a energia seja transportada convectivamente na região onde ocorre a reação triplo- α .

Observamos uma importante diferença nesta fase evolutiva entre estrelas de baixa massa, $M < 2.25M_{\odot}$ e estrelas de massa intermediária, $2.25M_{\odot} < M < 8M_{\odot}$. Durante a evolução no RAG, as estrelas de baixa massa desenvolvem núcleos de Hélio com degenerescência parcial dos elétrons. Neste caso, a pressão que se opõe à gravidade é em

grande parte gerada por esta degenerescência e possui uma dependência muito pequena com a temperatura do meio. Deste modo, quando a temperatura do núcleo atinge um valor suficientemente alto para que a queima de Hélio comece, a temperatura aumenta rapidamente, já que energia está sendo produzida, mas a pressão não acompanha a mudança. Porém, a taxa de produção de energia continua intimamente ligada à temperatura, já que os núcleos não estão em estado degenerado. Conseqüentemente, um processo auto-alimentado ocorre, provocando um aumento desenfreado da temperatura. Conforme a temperatura aumenta a degenerescência dos elétrons vai sendo removida, sendo o fim do processo marcado pelo término desta remoção. Quando isto ocorre, o equilíbrio hidrostático é novamente estabelecido entre a pressão térmica do gás e a gravidade. Este processo é conhecido como Flash do Hélio e a maior parte da grande quantidade de energia gerada através dele é utilizada na remoção da degenerescência dos elétrons.

As estrelas de massa intermediária atingem as condições que possibilitam a queima de Hélio no núcleo antes que a degenerescência eletrônica se estabeleça e, portanto, o processo triplo- α é iniciado de forma não-explosiva.

2.1.4 O Ramo Horizontal

Após a ignição do Hélio, o processo de contração do núcleo pára e a estrela entra em uma fase bastante estável com energia sendo produzida no núcleo e na camada de queima de Hidrogênio. A reação das camadas superiores é uma contração inicial e aumento da temperatura superficial. Isto ocorre, pois a fonte principal de energia no começo da fase de queima de He no núcleo ainda é proveniente da queima de H em camada. Com o avanço do processo triplo- α , o núcleo passa por um processo de expansão e empurra as camadas superiores para regiões mais frias, diminuindo a taxa de queima de H e, conseqüentemente, a produção de energia.

Quando o núcleo atinge uma configuração de equilíbrio, para qual a taxa produção de energia tanto no próprio núcleo como na camada de queima de H estão estáveis, a estrela se encontra em uma fase duradoura de produção quiescente de energia. As cinzas da queima de H são depositadas continuamente no núcleo, mas a abundância de Hélio desta região diminui com o tempo, já que a taxa de consumo é maior do

que a de produção. O tempo de duração desta fase é muito menor do que o da SP, $\approx 20\%$, segundo Kippenhahn & Weigert (1990). Apesar de a energia produzida através da queima de He por quantidade de massa consumida é da ordem de 10 vezes menor do que a produzida a partir do Hidrogênio, o tempo de vida é desta ordem, já que grande parte da energia gerada pela estrela nesta fase é proveniente da queima de H em camada. Uma decorrência deste fato é que o Hélio está sendo consumido mais rapidamente no núcleo do que produzido na camada de Hidrogênio.

Os processos de queima que ocorrem no núcleo não se resumem à reação triplo- α supra-citada. A medida em que a abundância de Carbono aumenta outras reações passam a ser também importantes para a produção de energia, como: a captura de partículas- α pelos núcleos de Carbono, $^{12}\text{C}(\alpha, \gamma)^{16}\text{O}$; e a captura de partículas- α pelos núcleos de Oxigênio, posteriormente, conforme a abundância de ^{16}O aumenta, $^{16}\text{O}(\alpha, \gamma)^{20}\text{Ne}$ (Kippenhahn & Weigert 1990).

A queima de Hélio procede, sua abundância no núcleo convectivo diminui continuamente e um caroço composto basicamente de Carbono e Oxigênio vai sendo constituído. Estrelas neste intervalo de massa ($< 8 - 9 M_{\odot}$) nunca chegarão a atingir temperaturas altas o suficiente para ignição de C e O. O núcleo experimenta um processo de contração, em resposta ao aumento do peso molecular médio, com o avanço da queima do He, e à diminuição da geração de energia no mesmo, devido à rarefação do combustível.

2.1.5 O Ramo Assintótico das Gigantes

Um processo similar àquele que levou a estrela ao RGV ocorre para esta configuração. O núcleo experimenta um outro processo de contração, já que a sustentação gerada pela pressão do gás aquecido pelas reações termonucleares no núcleo é cada vez menor. A queima de Hélio passa a ocorrer principalmente em uma camada que circunda a região central. A temperatura desta região aumenta a medida em que a energia gravitacional é liberada pela contração do núcleo. A pressão gerada pela alta temperatura desta camada é maior do que a necessária para balancear a gravidade e o envoltório experimenta uma nova expansão. A expansão avança a medida que mais Hélio é consumido na camada de queima, aumentando a massa do núcleo. Esta fase é chamada

Ramo Assintótico das Gigantes (RAG). Durante esta fase evolutiva a estrela passa a ser instável contra pulsações, com um período característico da ordem de centenas de dias.

A opacidade das camadas superiores aumenta com a queda de temperatura provocada pela expansão das camadas superiores. Conseqüentemente, o transporte radiativo de energia é dificultado e a convecção é estabelecida. As correntes de convecção atingem regiões cada vez mais profundas, a medida em que a expansão avança. Para estrelas mais massivas do que aproximadamente $4 M_{\odot}$, as correntes se aprofundam o suficiente para dragar material processado pela estrela para a superfície. A expansão experimentada pelas estrelas RAG mais massivas pode ser suficiente para que a camada de queima de Hidrogênio seja empurrada para regiões muito frias e seja momentaneamente desativada. Porém, com a penetração das correntes de convecção, a descontinuidade da queima de Hidrogênio é deslocada para regiões quente o suficiente para que a queima volte a ocorrer.

O processo de contração do núcleo é interrompido quando a densidade atinge valores que provocam o estabelecimento de degenerescência eletrônica. Porém a medida que o Hélio é consumido, e mais Carbono e Oxigênio são depositados no núcleo, a região central se torna mais densa. Um processo importante para a estrutura da estrela que ocorre nesta fase é a perda de energia por emissão de neutrinos gerados no núcleo. A perda de energia por neutrinos impossibilita que o núcleo atinja temperaturas para queima de Carbono e faz com que o perfil de temperatura da estrela tenha uma estrutura bem peculiar, com o máximo deslocado do centro em direção à camada de queima de Hélio.

A fase inicial do RAG é marcada, então, pela queima de Hidrogênio e Hélio em camadas e pelo núcleo de Carbono e Oxigênio com degenerescência eletrônica. Esta fase estável de queima persiste até que, devido ao estreitamento da camada de queima de Hélio, um processo conhecido como pulso térmico começa a ocorrer. Os pulsos térmicos foram sugeridos por Schwarzschild & Härm (1965) e podem ser descritos da forma a seguir.

Pulsos Térmicos

Em geral, as estrelas são estáveis contra perturbações térmicas e reajustam a sua estrutura rapidamente para corrigir qualquer flutuação. Isso ocorre, pois quando a temperatura aumenta em alguma camada, esta sofre uma expansão e afasta as camadas superiores, reduzindo a pressão causada por elas e, conseqüentemente, de acordo com a equação de estado de um gás ideal, a própria temperatura diminui e o equilíbrio é restabelecido. Entretanto, como discutido por Schwarzschild & Härm (1965), perturbações locais podem ser amplificadas em algumas condições especiais. Um destes casos ocorre na camada de queima de Hélio no fim do RAG.

A evolução da estrela no RAG prossegue e, eventualmente, a camada de queima de Hélio se torna instável para variações positivas de temperatura. Isto acontece pois, para uma camada suficientemente fina, um aumento da temperatura gera expansão das camadas superiores, diminuição da densidade e aumento na produção de energia. A expansão das camadas superiores provoca uma diminuição da pressão, que acarreta diminuição da temperatura da camada, mas a diminuição da densidade tende a provocar um aumento da temperatura. Portanto, se a camada for suficientemente fina para que o efeito da diminuição da densidade seja maior do que o do aumento da pressão, a temperatura aumentará, ao invés de diminuir, e um processo desenfreado vai se estabelecer. Um aumento na produção de energia provoca aumento de temperatura que, por sua vez, implica em outro aumento de temperatura que acarreta elevação da taxa de produção de energia e assim por diante. O processo pára quando a camada de queima de Hélio consegue expandir o suficiente para diminuir a pressão e, conseqüentemente, a temperatura na região de queima.

Quando ocorre esta expansão, a camada de queima de Hidrogênio é empurrada para regiões mais frias e é desativada. À medida que o processo explosivo na camada de He pára e esta volta a se contrair, a camada de queima de H é novamente ativada, depositando as cinzas na camada de He abaixo. Quando as condições para ignição do Hélio são novamente atingidas, o processo começa novamente. A escala de tempo entre os pulsos depende da massa da estrela, sendo aproximadamente 10^4 anos para estrelas de $4 M_{\odot}$ e 10^5 para estrelas de $1 M_{\odot}$ (Wagenhuber & Groenewegen 1998).

Após cada evento de ignição do He, uma zona convectiva é formada e material

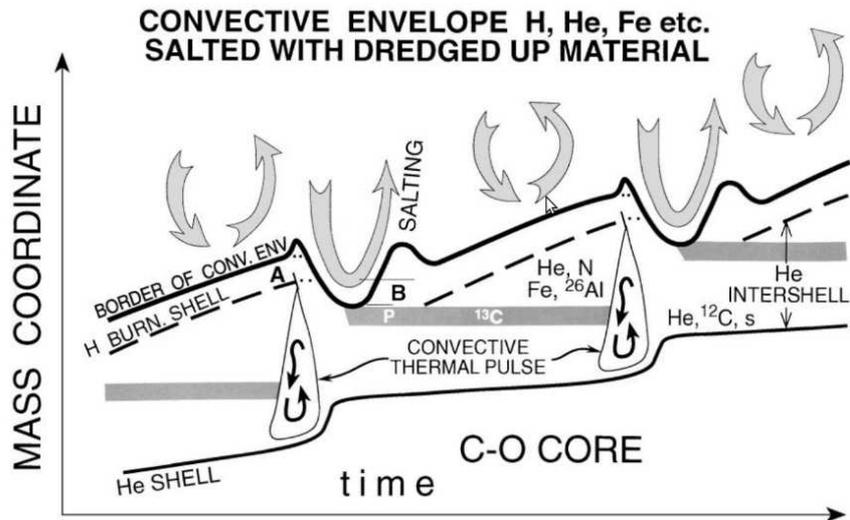


Figura 2.3: Esquema da evolução dos pulsos térmicos e da terceira série de dragagens, adaptado de Busso et al. 1999

processado pelo núcleo é dragado para a superfície estelar, como podemos observar na figura 2.3. Também é atribuído aos pulsos térmicos um papel importante na perda de massa de estrelas do RAG, que podem variar de 10^{-7} a $10^{-4} M_{\odot}/ano$.

Perda de massa

As estrelas do RAG apresentam taxas de perda de massa tão altas que o conhecimento deste processo passa a ser mais importante para determinar a evolução da estrela nesta fase, ao invés da produção de energia nuclear. Entretanto, a descrição quantitativa da taxa de perda de massa em função do tempo e dos parâmetros da estrela a partir de primeiros princípios ainda não foi alcançada.

O cenário mais aceito é que o mecanismo responsável por ceder momento ao vento é a pressão de radiação atuando nos grãos. Estes, por sua vez, arrastam o gás através de colisões com as moléculas. Para que isso possa acontecer, é necessário que uma quantidade suficientemente alta de grãos seja formada. No entanto, os perfis de temperatura e densidade obtidos a partir de modelos hidrostáticos de atmosferas indicam que a região não possibilita a formação esperada de grãos. Portanto, o cenário de formação dos ventos é entendido em duas partes: em primeiro lugar, é necessário que um mecanismo aumente a densidade de regiões de temperatura baixa para que ocorra a formação de grãos; posteriormente, a pressão de radiação transfere momento do campo

de radiação para o vento, que é acelerado até velocidade tipicamente da ordem de 10 km/s.

Acredita-se que as pulsações e a grande quantidade de energia liberada pelos pulsos térmicos, que é empregada principalmente na expansão das camadas superiores, tenham um papel muito importante, ainda que um tanto nebuloso, na criação do vento. Há bastante indefinição nesse ponto, um artigo de revisão que trata este tópico de forma bastante interessantes, discutindo os diferentes problemas e perspectivas que o cercam é Willson (2000). Outros trabalhos mais recentes discutem o problema da eficácia da pressão de radiação na aceleração dos ventos de estrelas oxigenadas, como: Woitke (2006), que apresenta cálculos que indicam que a pressão de radiação nos grãos não seria suficiente para explicar as taxas de perda de massa observadas; e Höfner (2008), que propõem que a consideração de grãos com raios da ordem de $1 \mu m$ poderia resolver o problema.

Os grãos absorvem radiação do visível, do Infravermelho próximo e de comprimentos de onda menores e emitem, de acordo com a sua temperatura ($\approx 1000 - 100 K$), no infravermelho médio e distante. Os envoltórios de poeira são observados, portanto, como excesso de emissão nestes comprimentos de onda e podem chegar até a obscurecer a fonte completamente no visível (estrelas OH/IR e carbonadas extremas).

O tipo de grão formado no envoltório depende principalmente da composição química do envoltório e do seu perfil de temperatura. Os cálculos das sequências de condensação são feitos a partir da consideração dos diversos processos químicos que podem ocorrer no vento. Entretanto, uma divisão bem clara pode ser traçada a partir da razão entre a densidade de átomos de Carbono e a de Oxigênio: C/O. Estrelas que apresentam $C/O > 1$ possuem química baseada em compostos de Carbono, enquanto aquelas que exibem $C/O < 1$ possuem química rica em compostos oxigenados. Isto ocorre pois o monóxido de carbono (CO) é uma molécula muito estável e é, portanto, a primeira a ser formada no lento vento que se afasta da estrela. De forma que, caso haja mais Carbono disponível do que Oxigênio, todo o O estará aprisionado no CO e vice-versa.

A perda de massa prossegue até que toda a camada convectiva que envolve a região central seja perdida. As taxas de perda de massa decrescem abruptamente e a estrela entra na fase de pós-RAG.

2.1.6 Evolução pós-RAG

O material despejado pelas estrelas do RAG é a principal fonte de grãos e de elementos do processo s do Meio Interestelar (MI). A medida em que este material se dispersa, o envoltório torna-se cada vez mais transparente e revela aos poucos a estrela central. Este objeto é constituído pelo caroço responsável pela produção de energia da estrela no RAG cercado por uma camada não muito espessa de H. A estrela central possui temperatura efetiva da ordem de 5000 K . Dependendo da massa da estrela central, esta configuração pode ou não levar à formação de uma Nebulosa Planetária (Kwok, 1994), com a temperatura da estrela central atingindo valores da ordem de até 50000 K nesta fase. Após o fim da queima, o destino final do remanescente é esfriar continuamente como uma anã-branca. Winckel (2003) apresenta uma revisão recente que abarca o presente conhecimento e as dificuldades encontradas no entendimento da fase pós-RAG.

2.2 Nucleossíntese e enriquecimento superficial

O entendimento dos processos nucleossintéticos das estrelas do RAG é importante pois estes objetos são capazes de sintetizar uma vasta gama de elementos a partir somente de Hidrogênio e Hélio. Os elementos sintetizados são trazidos para a superfície da estrela em diferentes episódios de dragagem e são posteriormente lançados no meio interestelar pelos densos ventos. As estrelas do RAG são responsáveis por produzir elementos importantes como Carbono e Nitrogênio; ricos em neutrons, como ^{22}Ne ; e elementos pesados produzidos pela captura lenta de nêutrons, conhecido como processo-s.

Os elementos produzidos e suas abundâncias dependem basicamente da massa e da composição química inicial da estrela. O cálculo destas abundâncias através de modelos, entretanto, depende de um profundo conhecimento da evolução da estrutura da estrela, discutidas anteriormente, assim como de parâmetros físicos aos quais muitas vezes grandes incertezas estão associadas, tais como: comprimento de mistura, taxas de reações, opacidades, taxas de perda de massa etc.

Os processos mais simples são o de queima de Hidrogênio através da cadeia pp e do ciclo CNO. A importância de cada um destes tipos de queima é bem diferente, pois, no caso da queima através da cadeia pp, o principal resultado é apenas a produção de Hélio,

enquanto que, quando o ciclo CNO está ativo, mudanças importantes nas abundâncias de Carbono, Oxigênio e Nitrogênio são observadas. Como explicado anteriormente, a reação $^{14}\text{N} + ^1\text{H} \rightarrow ^{15}\text{O} + \gamma$ é a mais lenta do ciclo e, portanto, a consequência é que após estabelecido o equilíbrio na operação do ciclo CNO, praticamente todo o Carbono e o Oxigênio são transformados em ^{14}N .

Nas regiões onde ocorre queima de Hélio, este é transformado em principalmente em Carbono, Oxigênio, Neônio e em elementos mais pesados por sucessivas capturas de partículas α . Quanto maior a temperatura da região de queima, maiores são as probabilidades de captura de partículas α por núcleos mais pesados. Entretanto, as taxas das reações dependem também das abundâncias dos diferentes elementos envolvidos, devendo as abundâncias de equilíbrio serem calculadas especificamente para cada situação.

Elementos pesados ($90 < A < 240$, onde A é o número de massa) são produzidos nas estrelas do RAG através de captura lenta de neutrons. O adjetivo lenta ou rápida é concedido em função do fluxo de neutros. Se o fluxo é suficientemente alto para que um átomo capture mais de um neutron antes de sofrer um decaimento β , o processo é dito rápido (processo r). Caso o tempo característico do decaimento β seja menor do que o de captura de um neutron em uma dada região, o processo é dito lento (processo s). Os átomos do pico do ferro existentes primordialmente na estrela atuam como sementes, pois ao interagir os neutrons formam os elementos mais pesados.

A meia-vida dos neutrons livres é muito curta, ≈ 10 min, e, portanto, é necessário que haja uma fonte ativa de neutrons para que o processo de captura possa ocorrer. No caso das estrelas do RAG há duas reações que são fontes importantes de neutrons: $^{13}\text{C}(\alpha, n)^{16}\text{O}$ e $^{22}\text{Ne}(\alpha, n)^{25}\text{Mg}$.

A primeira reação é a mais importante e ocorre em regiões onde haja ^{13}C e partículas α e temperaturas de aproximadamente 9×10^7 K. O ^{13}C é produzido a partir da reação $^{12}\text{C}(p, \gamma)^{13}\text{N}(\beta^+)^{13}\text{C}$, quando o envoltório rico em Hidrogênio penetra nas regiões onde há ^{12}C produzido pela queima de He. Já a segunda reação ocorre para temperaturas mais altas ($\approx 2,5 \times 10^8$) e representa um papel menos importante na geração de neutrons livres.

2.2.1 Dragagens

O enriquecimento provocado pela produção de elementos nas estrelas do RAG só é perceptível observacionalmente se estes elementos são levados das regiões profundas onde são criados para a superfície. O enriquecimento da atmosfera tem grande influência na formação dos grãos e moléculas que são expelidos nos densos ventos destes objetos. Os eventos responsáveis por levar os elementos pesados à superfície são chamados dragagens e acontecem quando as correntes convectivas do envoltório de Hidrogênio penetram fundo o suficiente na estrela e atingem material processado. Isto ocorre em três momentos distintos de evolução de estrelas neste intervalo de massa.

Primeira e segunda dragagens

A primeira e a segunda dragagens ocorrem quando a estrela está prestes a ascender o RGV e o RAG, respectivamente. À medida que as camadas superiores sofrem a expansão e esfriam, as correntes convectivas se aprofundam cada vez mais e atingem regiões onde ocorreu a queima de Hidrogênio. Portanto, estes dois episódios de dragagem tem basicamente o mesmo efeito: aumento das abundâncias superficiais de ^{13}C , ^{14}N e ^4He ; e diminuição das abundâncias de ^{12}C , ^{16}O e ^{18}O (Herwig 2005).

Duas diferenças importantes podem ser observadas entre os dois episódios, entretanto. No primeiro processo, o material dragado foi apenas parcialmente queimado, já no caso do segundo, a abundância de Hidrogênio do material dragado é praticamente zero. O efeito da segunda dragagem na alteração das abundâncias superficiais é, portanto, maior. Nem todas as estrelas do intervalo de massa em questão experimentam, porém, a segunda dragagem, ela ocorre apenas para objetos mais massivos que $\approx 4 M_{\odot}$ (Herwig 2005).

Terceira dragagem

A terceira dragagem é constituída, na verdade, por um conjunto de eventos que ocorrem imediatamente após a ignição explosiva na camada de Hélio (pulso térmico). Este processo é o mais importante para estrelas do RAG, pois uma grande quantidade de elementos é trazida para a superfície. O material dragado é constituído em sua maioria de Hélio ($\approx 75\%$) e Carbono ($\approx 22\%$). As abundâncias dos elementos formados a

partir do processo s também apresentam aumento importante com a atuação da terceira dragagem.

Este processo é muito importante para a formação de estrelas com atmosferas ricas em carbono (carbonadas), uma vez que o material dragado é rico em Carbono. Este processo é eficiente para estrelas de massa maior do que $1,5 M_{\odot}$, de acordo com modelos (Karakas & Lattanzio, 2007), mas as observações indicam que o limite pode ser ainda menor (Frogel, 1990).

Para as estrelas intermediárias mais massivas, a temperatura na base do envoltório convectivo é suficientemente alta para que ocorra a queima de Hidrogênio através do ciclo CNO, o que faz com que o Carbono seja convertido quase que totalmente em Nitrogênio. Este processo, chamado “Hot Bottom Burning”, seria responsável por impedir a formação de estrelas carbonadas a partir de um certo limite de massa. O valor exato do limite inferior para o funcionamento do “Hot Bottom Burning” é difícil de ser determinado, pois depende da composição química inicial e de parâmetros ainda mal conhecidos de taxa de perda de massa e de convecção. Alguns cálculos indicam que: $M_{HBB} > 5M_{\odot}$ para $Z = 0,02$ (Forestini & Charbonnel, 1997) e $M_{HBB} > 3M_{\odot}$ para $Z = 0$ (Siess, Livio & Lattanzio, 2002).

2.2.2 C × O

Como exposto anteriormente, uma diferenciação importante ocorre nas estrelas do RAG devido à estabilidade da molécula de CO, objetos que possuem $C/O > 1$ apresentam química rica em Carbono e aqueles que possuem $C/O < 1$ apresentam compostos oxigenados. Como o Meio Interestelar possui mais Oxigênio do que Carbono as estrelas, ao nascer, também apresentam esta característica. A medida que evoluem, entretanto, podem sofrer um enriquecimento de Carbono suficiente para fazer com que a razão C/O se torne maior do que 1. Este enriquecimento ocorre principalmente durante a terceira série de dragagens e pode ser impedido pelo “Hot Bottom Burning”.

Temos então um intervalo de massa para o qual a formação de estrelas carbonadas ocorre e, apesar de os modelos não serem capazes de reproduzir as observações de forma satisfatória, acredita-se que as estrelas carbonadas tenham massas iniciais entre $1,5 M_{\odot}$ e $4 M_{\odot}$ aproximadamente (Herwig, 2005).

As estrelas ricas em Carbono apresentam na fotosfera moléculas baseadas neste elemento, além do CO , são observadas várias espécies moléculares: Hidrocarbonetos diversos, CN , C_2 , HC_mN , SiC_2 , SiS , CS , C_2S etc. Já no caso das oxigenadas, observamos moléculas ricas em Oxigênio, além da molécula de CO , podemos identificar: água, SO_2 , SiO_2 , TiO , VO , Al_2O_3 , $MgAl_2O_4$ etc. os grãos são formados a partir da condensação destas moléculas nas regiões de temperaturas mais baixas da atmosfera superior.

2.3 Formação e crescimento dos grãos

A formação de grãos em estrelas do RAG é um processo complexo que está longe de ser bem compreendido. O crescimento das partículas sólidas é regulado pela ação de mecanismos de destruição e de crescimento das partículas sólidas. A consideração de todos mecanismos envolvidos nos dá as probabilidades totais de acreção e de desorção de partículas no grão. Grãos muito pequenos são instáveis e têm uma maior probabilidade de serem destruídos. A medida que crescem, entretanto, a continuação do crescimento se torna mais provável (Draine 1990).

Os cálculos precisos envolvem reações químicas complexas e provavelmente ainda mal entendidas ocorrendo em um ambiente que não pode ser considerado em ETL. Desta forma, pesquisadores nesta área têm sido obrigados a fazer suposições simplificadoras irreais, recorrendo muitas vezes à teoria conhecida como “teoria da nucleação homogênea”. O problema é tratado basicamente em duas partes: formação das sementes, que seriam as primeiras partículas sólidas a serem formadas; e a consequente condensação de outras moléculas na superfície sólida previamente constituída.

A química complexa dos envoltórios circunstelares é, na verdade, apenas um dos problemas no que se refere à previsão da condensação dos grãos. As taxas de perda de massa, um parâmetro determinante para esta compreensão, ainda são muito mal compreendidas e, a medida que os novos dados indicam que os envoltórios apresentam taxas de perda de massa não-constante, a importância do entendimento desta evolução se mostra ainda maior.

No caso específico das estrelas oxigenadas, sabe-se que os grãos são principalmente formados por silicato amorfo. Entretanto, o funcionamento detalhado dos mecanismos

de condensação de grãos complexos está longe de ser alcançado. Gail & Sedlmayr (1999) tratam parcialmente o problema e apresentam cálculos para a condensação de sólidos a partir de sementes já formadas, com base em várias aproximações e suposições.

Outras complicações que também não podem ser computadas atualmente são os processos que ocorrem quando os grãos acelerados pela pressão de radiação colidem com as moléculas de gás transferindo momento e sofrendo fragmentação; a importância de diferenças de densidade nos envoltórios, levando a aglomerados de grãos; o papel das reações envolvendo íons para a química do envoltório; etc.

A Figura 2.4 ilustra a estrutura de uma estrela do RAG já na fase de alta taxa de perda de massa, resumindo, os processos importantes que ocorrem para a formação do envoltório na fase do RAG. A figura demonstra ainda a diferenciação entre estrelas ricas em Carbono e Oxigênio, apresentando as principais moléculas e grãos formados para cada tipo de química.

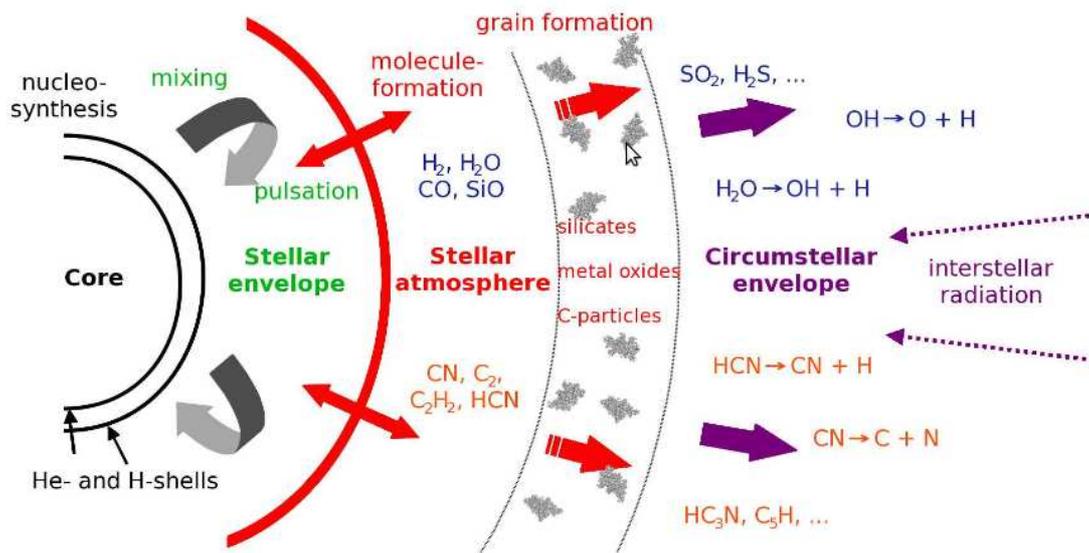


Figura 2.4: Esquema da formação dos envoltórios de poeira das estrelas do RAG, adaptado de Habing & Olofsson (2003)

Capítulo 3

O código de transferência radiativa

3.1 Introdução

3.1.1 Método Monte Carlo:

O método Monte Carlo é amplamente usado para tratar problemas cujas variáveis apresentam um comportamento probabilístico. Novas aplicações são constantemente descobertas, dadas a simplicidade da idéia e a sua grande capacidade de resolver problemas complexos. Campos tão diversos como: física, economia, biologia, inteligência artificial e indústria de entretenimento são apenas alguns exemplos do vasto leque de implementações de Monte Carlo.

Objetivamente, o método consiste em tratar um problema através de sorteio de números aleatórios, mesmo que, em princípio, não se trate de um problema de caráter probabilístico. No caso de simulações em computadores, porém, o uso do termo aleatório não é apropriado, já que os algoritmos de geração de números randômicos são, na verdade, séries de período muito longo, cujos elementos não possuem relação aparente. O termo números pseudo-aleatórios é o mais apropriado.

O nome dado ao método Monte Carlo é uma alusão à cidade do principado de Mônaco, famosa por, entre outras coisas, seus luxuosos cassinos. O emprego sistemático deste tipo de algoritmo como ferramenta científica começou durante a segunda guerra mundial, com o problema da difusão de neutrons em material físsil, nas pesquisas para desenvolvimento da bomba atômica (Metropolis, N. 1987).

Muitas aplicações anteriores são conhecidas, entretanto. Um exemplo interessante é

o experimento proposto por Georges de Buffon no século XVIII para determinar o valor de π . A idéia proposta por Buffon era que, ao atirar uma agulha de forma aleatória sobre um chão de tábuas, a probabilidade de que a agulha caísse sobre uma das divisões do assoalho era proporcional a π . Portanto, conhecidos o tamanho da agulha e a distância entre as tábuas, o valor de π poderia ser experimentalmente determinado. No começo do século XIX, Mário Lazzarini realizou o experimento e, após jogar 3408 vezes uma agulha sobre um chão de tábuas, obteve uma impressionante aproximação de π com um erro da ordem de 10^{-7} (Badger 1994).

A aplicação do método de Monte Carlo no problema da transferência radiativa em envoltórios de poeira consiste em simular os processos de natureza estocástica, como a absorção de energia pelos grãos e direção de propagação de um dado pacote de energia, através de sorteios de números pseudo-aleatórios. Para cada evento a ser simulado, as probabilidades dos resultados possíveis são determinadas, um número pseudo-aleatório é escolhido, através de um algoritmo gerador, e uma das possibilidades é, então, definida como sendo a consequência da interação. Espera-se que, após uma quantidade suficientemente grande de eventos, o resultado da modelagem se aproxime daquele do observável sendo simulado.

A vantagem de utilizarmos esse método é que o problema da transferência radiativa em envoltórios de poeira se torna muito complexo para ser tratado analiticamente. A partir de uma simulação Monte Carlo, podemos incluir detalhes complexos do problema, como: espalhamento não-isotrópico e simetria não-esférica, e ainda assim conseguir abordar o problema.

3.1.2 Teoria de Mie

Para o cálculo das probabilidades relacionadas a interações da radiação com os grãos utilizamos a teoria de Mie. Gustav Mie (1908) tratou o problema de espalhamento e absorção de radiação por partículas de raios e propriedades ópticas arbitrárias. O termo mais apropriado para descrever este tratamento seria: Solução de Mie, já que não consiste em uma nova teoria e, sim, em uma aplicação das equações de Maxwell.

Também no começo do século XX, Peter Debye considerou o problema da pressão exercida pela radiação em partículas esféricas no espaço. Este trabalho, que foi reali-

zado durante o seu doutorado, foi a primeira aplicação deste tratamento a um problema astrofísico. É, porém, difícil determinar precisamente quem foi o primeiro a fornecer uma solução ao problema da interação de radiação com uma esfera homogênea. Ludwig Lorenz aparece como um forte candidato a ter apresentado esta primeira solução.

Por causa da rica história do desenvolvimento desta solução, apresentada concisamente em Kerker (1969, p 54 -59) a teoria de Mie é conhecida por diversos nomes, como: teoria Lorenz-Mie ou teoria Lorenz-Mie-Debye. Entretanto, nesta dissertação, utilizo a mesma denominação amplamente usada na literatura, Teoria de Mie.

Cálculo das Eficiências

Na teoria de Mie, o cálculo das eficiências de absorção e espalhamento é feito a partir das equações de Maxwell, com uso de uma matemática um tanto trabalhosa porém simples. Um tratamento bem completo deste cálculo pode ser encontrado em Bohren & Huffman (1998). Nesta dissertação apresentarei somente uma breve descrição desta solução.

Para construir a teoria de Mie, partimos de uma simples pergunta: qual o resultado do encontro de uma onda plana monocromática e polarizada com uma partícula esférica homogênea de raio a . O resultado é alcançado a partir da resolução das equações de Maxwell:

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (3.1)$$

$$\nabla \times \vec{H} = \vec{J} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \quad (3.2)$$

$$\nabla \cdot \vec{D} = \rho \quad (3.3)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0, \quad (3.4)$$

considerando as condições de contorno: as componentes normais de \vec{D} e \vec{B} e as componentes tangenciais de \vec{E} e \vec{H} são contínuas na ausência de cargas e correntes.

Pode-se simplificar a resolução deste sistema de equações em coordenadas esféricas com a introdução de potenciais vetores derivados de um potencial escalar (potenciais de Hertz ou potenciais de Debye). E obtemos, então, três equações diferenciais.

As soluções da equação em coordenadas esféricas são, então, obtidas para cada uma das coordenadas: para θ chegamos aos polinômios de Lagrange e as soluções em ϕ são

$\text{sen}(m\phi)$ e $\text{cos}(m\phi)$. As soluções em r , por sua vez, são as funções de Ricatti-Bessel:

$$\psi_n(kr) = \left(\frac{\pi kr}{2}\right)^{1/2} J_{n+\frac{1}{2}}(kr) \quad (3.5)$$

$$\chi_n(kr) = -\left(\frac{\pi kr}{2}\right)^{1/2} N_{n+\frac{1}{2}}(kr) \quad (3.6)$$

$$\zeta_n(kr) = \psi_n(kr) + i \chi_n(kr) = \left(\frac{\pi kr}{2}\right)^{1/2} H_{n+\frac{1}{2}}^{(2)}(kr), \quad (3.7)$$

onde J, N e H são as funções de Bessel, de Neumann e a função de segunda ordem de Hankel, respectivamente.

No caso de tratarmos a interação de uma onda incidente não polarizada, o cálculo é feito separadamente, da mesma forma descrita acima, para as duas componentes ortogonais.

As eficiências são dadas, então pelas expressões:

$$\left. \begin{aligned} Q_{ext} &= \frac{2}{x^2} \sum_{n+1}^{\infty} (2n+1) \text{Re}(a_n + b_n) \\ Q_{sca} &= \frac{2}{x^2} \sum_{n+1}^{\infty} (2n+1) (|a_n|^2 + |b_n|^2) \\ Q_{abs} &= Q_{ext} - Q_{sca}, \end{aligned} \right\} \quad (3.8)$$

com:

$$a_n = \frac{\psi'_n(mx)\psi_n(x) - m\psi_n(mx)\psi'_n(x)}{\psi'_n(mx)\zeta_n(x) - m\psi_n(mx)\zeta'_n(x)} \quad (3.9)$$

$$b_n = \frac{m\psi'_n(mx)\psi_n(x) - \psi_n(mx)\psi'_n(x)}{m\psi'_n(mx)\zeta_n(x) - \psi_n(mx)\zeta'_n(x)}, \quad (3.10)$$

e onde $x = 2\pi a/\lambda$.

Indicatriz de Difusão ou Função de Espalhamento

A indicatriz de difusão é uma função que dá a probabilidade de espalhamento em função da direção. $S(\theta)$ é obtida para luz não-polarizada, a partir da soma das duas funções relativas aos estados de polarização normal, $S_1(\theta)$, e ortogonal, $S_2(\theta)$:

$$S(\theta) = \frac{1}{2k^2} (|S_1^2(\theta)| + |S_2^2(\theta)|), \quad (3.11)$$

com:

$$S_1(\theta) = \sum_{n+1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} (a_n \pi_n(\cos\theta) + b_n \tau_n(\cos\theta)) \quad (3.12)$$

$$S_2(\theta) = \sum_{n+1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} (b_n \pi_n(\cos\theta) + a_n \tau_n(\cos\theta)), \quad (3.13)$$

sendo:

$$\pi_n(\cos\theta) = \frac{1}{\sin\theta} P_n^1(\cos\theta) \quad (3.14)$$

$$\tau_n(\cos\theta) = \frac{d}{d\theta} P_n^1(\cos\theta), \quad (3.15)$$

onde o termo $P_n^1(\cos\theta)$ é o polinômio de Legendre de n-ésimo grau.

3.1.3 Modelagem de envoltórios de poeira

O método de simulação numérica utilizado pelo código foi apresentado por Lefèvre, Bergeat & Daniel (1982) e consiste em seguir pacotes de energia através do envoltório de poeira, computando as absorções no decorrer da trajetória e a energia que escapa do mesmo. O cenário da simulação consiste em uma estrela central de raio unitário circundada por um envoltório esférico de poeira, delimitado pelos raios interno e externo.

Para modelar os envoltórios, aproximamos a DEE da estrela pela de um corpo negro com uma temperatura, T_{ef} . No envoltório, só a opacidade devida aos grãos é considerada, uma vez que o esperado é que estes dominem completamente a transferência radiativa na faixa de comprimentos de onda relevante (Infravermelho). O envoltório é dividido em células isotérmicas, sendo a energia proveniente de cada absorção que ocorre no interior de uma dada célula dividida por todos os grãos que a compõem. Para calcular as probabilidades de interação dos pacotes de energia com os grãos e as direções de espalhamento, utilizamos as probabilidades de absorção, espalhamento e extinção, dadas pelas fórmulas (3.8) e a distribuição de probabilidade das direções de espalhamento dada por (3.11), respectivamente.

A emissão de radiação pela estrela é a única fonte de energia da simulação. Primeiramente, a temperatura do envoltório é considerada nula e, a partir da energia absorvida por cada célula e da quantidade de grãos da mesma, uma nova temperatura é calculada após cada iteração.

A emissão das células é também computada e é dividida entre as demais similarmente ao que ocorre com a radiação estelar. O processo se repete até que uma condição de equilíbrio seja alcançada. Um exemplo de condição de equilíbrio é que a variação de temperatura das células em uma iteração seja menor do que 1% da temperatura encontrada na iteração anterior. Espera-se que, independentemente do critério de parada, a configuração final da simulação reflita o cenário de equilíbrio radiativo procurado para o envoltório, onde cada célula isotérmica recebe aproximadamente a mesma quantidade de energia que emite em uma dada iteração.

O resultado da simulação a ser comparado com as observações é o espectro de pacotes de energia que escapam do envoltório.

3.2 Algoritmo de Transferência Radiativa:

3.2.1 Caracterização do Envoltório

O envoltório é definido a partir de sete parâmetros de entrada, a partir dos quais todos os outros valores de interesse podem ser calculados. Os dados de entrada do envoltório são: raio interno (R_{int}); raio externo (R_{ext}); profundidade óptica (τ) em um dado λ ; o número de camadas isotérmicas; e os raios (a), o expoente da distribuição (m) e as constantes ópticas dos grãos que o constituem. Toda a escala de distâncias do envoltório é medida em relação ao raio da estrela central, que é considerado como unitário.

A profundidade óptica na direção radial e em um dado λ é definida a partir da expressão abaixo:

$$\tau_\lambda = \int_{R_{int}}^{R_{ext}} \pi a^2 Q_{ext,\lambda} \frac{N_0}{r^m} dr. \quad (3.16)$$

Todos valores na expressão acima são informados no arquivo de entrada, com exceção de N_0 , que é a constante da lei de distribuição dos grãos, e $Q_{ext,\lambda}$, que é calculado a partir da teoria de Mie com base nas constantes ópticas. A constante N_0 é o único valor a ser determinado a partir da Equação (3.16). Entretanto, esta quantidade seria dada por uma mistura de unidades do código (R_{est}) com unidades física (área dos grãos) e já que nos cálculos efetuados esta quantidade nunca aparece isolada e, sim, multiplicada pela seção de choque geométrica dos grãos: $N_0 \pi a^2$, este será a grandeza de interesse.

Utilizamos então a expressão (3.16) para determinar esta quantidade:

$$N_0\pi a^2 = \frac{\tau_\lambda}{Q_{ext,\lambda} \int_{R_{int}}^{R_{ext}} \frac{1}{r^m} dr} \implies$$

$$N_0\pi a^2 = \frac{\tau_\lambda}{Q_{ext,\lambda} \left[\frac{1}{(m-1)} \left(\frac{1}{R_{int}^{m-1}} - \frac{1}{R_{ext}^{m-1}} \right) \right]}. \quad (3.17)$$

O envoltório é, então, dividido em camadas, preferencialmente de forma que nenhuma camada contenha uma quantidade muito pequena de grãos em relação às outras, e o processo de propagação dos pacotes é iniciado.

3.2.2 Propagação dos pacotes de energia

Primeiramente, a emissão da estrela é dividida em pacotes de energia de acordo com os comprimentos de onda escolhidos e a quantidade de pacotes definida. Cada um dos pacotes é emitido individualmente com uma direção e de um ponto aleatórios da superfície da estrela. A profundidade óptica na direção de propagação é computada:

$$\tau_{ext} = \int_{r_i}^{r_f} \pi a^2 N(r) Q_{ext} dr, \quad (3.18)$$

onde $N(r) = N_0/r^m$ e r_i e r_f são respectivamente os pontos de início e fim da trajetória do pacote.

A probabilidade de um pacote atravessar o percurso sem ser absorvido é dada por $p_{esc} = e^{-\tau_{ext}}$ e a probabilidade de ocorrer interação é, portanto: $p_{int} = 1 - e^{-\tau_{ext}}$. A partir do sorteio de um número aleatório, $rand$, decide-se se o pacote sofre ou não um encontro com um grão. Caso $rand > p_{int}$, o pacote escapa e sua energia é computada na Distribuição Espectral de Energia do modelo. De outro modo, caso $rand < p_{int}$, o pacote interage com os grãos, sendo uma parte da energia absorvida, dada por $\frac{Q_{abs}}{Q_{ext}}$ e a outra espalhada, $\frac{Q_{esp}}{Q_{ext}}$. A posição da interação é definida a partir do mesmo número aleatório, $rand$, utilizado anteriormente. Calcula-se primeiro a profundidade óptica do ponto da interação com $\tau = -\log(1 - rand)$ e, posteriormente, é calculada a distância correspondente a esta profundidade óptica através da expressão:

$$D = \int_{r_i}^{r_f} \frac{d\tau}{N(\tau) Q_{ext}(\lambda)}. \quad (3.19)$$

A energia da célula que contém o ponto onde ocorreu a interação é, então acrescida de $\frac{Q_{abs}}{Q_{ext}}$ e a fração restante do pacote é espalhada segundo a indicatriz de difusão.

Este processo se repete até que todos os pacotes estelares tenham sido enviados. Para cada célula do envoltório, temos a energia que foi absorvida pelos grãos contidos nela e podemos calcular sua temperatura.

3.2.3 Equilíbrio radiativo e temperatura dos grãos:

A distribuição espectral da emissão térmica de um grão é dada pela expressão: $I_\lambda = Q_{abs}(\lambda)B_\lambda(T_g)$. Se considerarmos um único grão a uma distância r da estrela central, o aquecimento é causado pela absorção de radiação direta e o resfriamento pela emissão. Considerando que a emissão da estrela pode ser aproximada pela de um corpo negro, temos que a condição de equilíbrio radiativo neste caso é expressa por:

$$\int_0^{\lambda_{max}} \pi a^2 Q_{abs}(\lambda) B_\lambda(T_*) (R_*/r)^2 d\lambda = \int_0^{\lambda_{max}} 4\pi a^2 Q_{abs}(\lambda) B_\lambda(T_g) d\lambda, \quad (3.20)$$

onde R_* é o raio estelar, T_* é a temperatura da estrela central, T_g é a temperatura do grão, $B_\lambda(T)$ é o valor da função de Planck em um dado λ e para uma temperatura T , $Q_{abs}(\lambda)$ é o coeficiente de absorção do grão em um dado comprimento de onda e a é o raio do grão.

Podemos simplificar a resolução desta equação com a introdução do coeficiente de absorção médio de Planck:

$$\bar{Q}_p(T) = \frac{\int_0^{\lambda_{max}} Q_{abs}(\lambda) B_\lambda(T) d\lambda}{\int_0^{\lambda_{max}} B_\lambda(T) d\lambda} \quad (3.21)$$

$$\bar{Q}_p(T) = \frac{\int_0^{\lambda_{max}} Q_{abs}(\lambda) B_\lambda(T) d\lambda}{\sigma T^4}, \quad (3.22)$$

onde σ é a constante de Stefan-Boltzmann.

O coeficiente de absorção médio de Planck é calculado numericamente para vários intervalos de temperatura e de modo que todos os valores possíveis para as temperaturas dos grãos sejam cobertos. Para efetuar os cálculos numéricos, assumimos que o coeficiente pode ser descrito por uma expressão do tipo:

$$\bar{Q}_p(T) = \frac{1}{\sigma T^4} AT^\alpha, \quad (3.23)$$

onde A e α são parâmetros livres. Valores diferentes de A e de α são calculados para cada um dos intervalos e , desta forma, conseguimos determinar $\bar{Q}_p(T)$ para qualquer valor de T compreendido entre os limites mínimo e máximo do cálculo. Os valores de T_{min} e T_{max} são normalmente definidos como 0 e a temperatura de condensação dos grãos, respectivamente.

A Equação (3.20) pode ser reescrita de uma maneira mais geral, assumindo que o grão pode receber energia de uma fonte qualquer, e não unicamente da estrela como considerado na equação supra-citada. Ficamos, então, com:

$$e = 4\sigma\bar{Q}_p(T_g)T_g^4, \quad (3.24)$$

onde e é a energia absorvida por um grão.

Entretanto, a energia absorvida não é computada pelo código para cada grão individualmente e, sim, para uma célula isotérmica do envoltório, cujo número de grãos é conhecido. A energia é, então dividida igualmente por todos os grãos constituintes da célula em questão. Desta forma, para uma dada célula, constituída de N_i grãos:

$$e = \frac{E}{N_i} = 4\sigma\bar{Q}_p(T_g)T_g^4. \quad (3.25)$$

Utilizando as Equações (3.23) e (3.25), chegamos a:

$$\frac{E}{N_i} = 4AT_g^\alpha \quad (3.26)$$

Finalmente, chegamos a expressão que nos dá a temperatura dos grãos de uma dada célula isotérmica em função da energia absorvida:

$$T_g = \sqrt[\alpha]{\frac{E}{N_i 4A}} \quad (3.27)$$

No caso específico de um envoltório com simetria esférica, cujos grãos estão distribuídos segundo uma lei do tipo $N(r) = N_0/r^m$ e cujas células são cascas concêntricas, temos que o número de grãos, N_i , de uma dada célula i , delimitada por um raio interno r_{int} e um raio externo r_{ext} , é dado por:

$$N_i = \int_{r_{int}}^{r_{ext}} 4\pi r^2 \frac{N_0}{r^m} dr = 4\pi N_0 \int_{r_{int}}^{r_{ext}} r^{2-m} dr = \frac{4\pi N_0}{3-m} (r_{ext}^{3-m} - r_{int}^{3-m}) \quad (3.28)$$

Desta forma, após todos os pacotes estelares serem emitidos, calculamos a distribuição de temperatura do envoltório. Na iteração seguinte, não só a emissão da estrela será considerada, como também a dos grãos. e o processo se repetirá até que o equilíbrio seja atingido.

3.2.4 A opacidade gerada pelo gás deve ser considerada?

Para os objetos que pretendemos modelar, estrelas evoluídas frias, o gás não oferece uma contribuição significativa para a opacidade. A curva de emissão destas estrelas se aproxima daquela de um corpo negro com temperatura entre 2000 e 3500 K. Portanto, os fótons capazes de ionizar o gás correspondem a uma fração muito pequena da energia total emitida.

No entanto, em comprimentos de onda específicos, podemos ter uma contribuição significativa de transições moleculares para a opacidade total. Ainda assim, o erro cometido ao desprezar a opacidade do gás é muito pequeno se comparado a energia total distribuída no envoltório.

Aquecimento ou resfriamento por colisões entre grãos de poeira também não são processos importantes para o cálculo da distribuição de energia. A temperatura dos grãos resulta, portanto, somente do equilíbrio radiativo e como estes representam a maior fonte de opacidade total, a transferência radiativa é totalmente controlada pelas interações radiação-grãos.

3.3 O código anterior:

O código anterior, apresentado por Lefèvre, Bergeat & Daniel (1982), é constituído por um arquivo FORTRAN de cerca de 1500 linhas. O algoritmo de cálculo do código é exatamente igual ao apresentado na seção anterior. Na implementação do mesmo, entretanto, notamos algumas dificuldades na clareza do código, como o uso excessivo da estrutura de programação “go to”, por exemplo. Esta estrutura, por vezes necessária, dificulta muito o entendimento da sequência lógica do programa quando usado em demasia.

Na sua primeira versão, uma simulação considerava o envoltório composto por ape-

nas um tipo de grão e lei de distribuição dos grãos do tipo: $n(r) = N_0/r^{-2}$. Uma característica importante é que a profundidade óptica no caminho dos pacotes de energia é calculada de forma analítica e não a partir de um método numérico de integração. Isto é feito considerando todas as situações possíveis encontradas ao propagar um pacote em um envoltório esférico, como por exemplo:

- o pacote está dentro do envoltório e se propaga na direção radial;
- o pacote está dentro do envoltório e se propaga em uma direção que faz um ângulo θ com a direção radial;
- a trajetória do pacote intercepta a estrela central;
- o pacote atravessa o espaço vazio no centro do envoltório...

Para cada situação identificada, uma expressão analítica para a profundidade óptica é calculada, de forma que o custo computacional deste cálculo é dramaticamente reduzido. Porém, no caso de considerarmos envoltórios com configurações mais complexas, a identificação das situações possíveis pode se tornar um trabalho muito dispendioso ou até impossível.

Versões posteriores deste mesmo código foram desenvolvidas com diversas modificações. Dentre estas, as que são relevantes para este trabalho são duas versões: DGST e Radumodi. Os dois códigos consideram implementações diferentes e importantes que foram incluídas no novo código:

- DGST - considera dois tipos de grãos, que podem ser colocados a diferentes distâncias da estrela central. Esta versão foi desenvolvida por Lorenz-Martins durante seu doutorado e apresentada em Lorenz-Martins & Lefèvre (1993). ;
- Radumodi - diferentes leis de distribuição de grãos, $n(r) = N_0/r^{-m}$, mas apenas para um tipo de grão. Esta versão foi apresentada por Lorenz-Martins & de Araújo (1997).

Uma outra característica importante de todas as versões do código é que as integrais dos intervalos da função de Planck são sempre aproximadas, aparentemente a fim de evitar o custo computacional das integrações numéricas. Esta questão, a primeira vista

pouco importante, é cada vez mais perceptível para opacidades mais altas, provocando diferenças no fluxo calculado e na temperatura dos grãos. No novo código, tratamos este problema de forma mais robusta. Esta modificação é discutida na próxima seção.

3.4 MonRaT, o novo código:

O código MonRaT foi desenvolvido por Theo Khouri, Andrés Felipe Pérez Sánchez e Alain-Jacques de Burlet. A estrutura é completamente diferente das versões anteriores, apesar de o algoritmo ser praticamente idêntico. Mesmo a linguagem na qual o programa está escrito foi modificada, sendo a versão apresentada aqui escrita em C. Decidimos também escrever o programa em módulos, de forma a facilitar alterações posteriores e permitir um acesso mais fácil de usuários não familiarizados com o código. A fim de tornar o código mais claro, decidimos também não utilizar a estrutura “go to”. Os módulos são relativamente independentes, sendo conectados e gerenciados pelo arquivo principal.

No novo código, mantivemos a limitação da simetria esférica, mas iniciamos a implementação de simetria axial (presença de disco), e o escrevemos de forma a facilitar mudanças em um futuro próximo. As duas principais implementações são a possibilidade de considerar: diferentes leis de distribuição, $n(r) = N_0/r^{-m}$; e vários tipos de grãos, distribuídos de qualquer maneira no envoltório, desde que respeitando a simetria esférica. É importante ressaltar que, no decorrer da simulação, pacotes de energia emitidos por qualquer tipo de grão ou pela estrela interagem com todos os tipos de grãos presentes no envoltório.

O programa consiste de 7 módulos, mais o arquivo principal, sendo cada um deles associado a um objeto que transita pelas diversas partes do cálculo. Os módulos são: Estrela, Espaço, Envoltório, Mie, Espectro, Pacote e Random. As suas funções são descritas a seguir.

- Estrela - Neste módulo são calculados a distribuição numérica, em comprimento de onda, dos pacotes que serão emitidos pela estrela, a partir da temperatura e dos comprimentos de onda fornecidos como entrada; assim como a energia de cada um dos pacotes gerados.

- Espaço - Uma estrutura deste tipo é criada para cada tipo grão ocupando uma região diferente do envoltório. Neste módulo são efetuados os cálculos referentes especificamente a um tipo de grão, como: absorções, temperatura e emissão.
- Envoltório - Este módulo é responsável por efetuar os cálculos que estão ligados a todo o envoltório e/ou que envolvem todos os grãos de uma mesma região, como: encontrar o próximo ponto de interseção de uma dada trajetória com os limites do envoltório; calcular a profundidade óptica desta trajetória; calcular a distância percorrida por um pacote, dada a profundidade óptica do caminho; sortear qual o tipo de grão absorve um dado pacote de energia.
- Mie - Responsável por calcular todas as grandezas associadas a teoria de Mie: as eficiências de absorção, espalhamento e extinção e a indicatriz de difusão.
- Espectro - Responsável por armazenar a energia que escapa do envoltório. item Pacote - Método que calcula e armazena as informações relativas ao pacotes específico que está sendo acompanhado. Também sorteia novas direções baseado na indicatriz de difusão.
- Random - Este método é responsável por simular números aleatórios. Consiste basicamente no gerador de números pseudo-aleatórios TT800, que não foi escrito por nós, apenas incorporado ao programa.
- Arquivo Central - Estrutura lógica do programa responsável pela organização dos módulos e da ordem dos cálculos.

A implementação da simetria axial requer a substituição do módulo *Espaço* por um outro módulo denominado *Espaço_Disco*. Este módulo já foi escrito, mas ainda não foi testado através de comparações com outros códigos já estabelecidos. Desta forma, acreditamos que ainda sejam necessárias apenas algumas pequenas mudanças para que a simetria axial possa ser implementada no código MonRaT.

O arquivo central e os módulos: Estrela, Espaço, Envoltório, Espectro e Pacote foram escritos por mim. O módulo Mie foi escrito por Andrés Felipe Pérez Sánchez e o módulo Random é constituído pelo algoritmo TT800 criado por Matsumoto & Nishimura (1998) e incorporado no código.

Uma modificação importante de carácter computacional foi feita no cálculo da profundidade óptica em um dado caminho. Decidimos implementar este cálculo através de uma integração numérica, diferentemente dos códigos anteriores, a fim de permitir que simetrias diferentes sejam implementadas no futuro com base na estrutura já criada. Esta diferença faz, entretanto, com que o código seja um pouco mais pesado. Também fizemos todos os cálculos de integrais através de algoritmos de integração numérica que, embora simples, proporcionam uma maior precisão de cálculo.

3.4.1 Integrais da Função de Planck

A mudança no cálculo das integrais dos intervalos da função de Planck provoca uma modificação que pode ser importante para opacidadeprofundidades ópticas altas, tanto no valor do fluxo calculado como na temperatura dos grãos. Os intervalos da função de Planck são definidos no arquivo de entrada e, para cada intervalo, é necessário informar os valores das constantes ópticas no comprimento de onda característico.

Conforme exposto anteriormente, a estrela é a fonte de energia primária de cada simulação. Desta forma, sua energia é dividida pelos intervalos escolhidos e propagada pelo envoltório, produzindo o aquecimento dos grãos. Posteriormente, a emissão dos grãos também é dividida, pelos mesmos intervalos, e também propagada pelo envoltório. O processo se repete até que o equilíbrio seja atingido. A diferença entre os códigos anteriores e o novo reside no cálculo da energia destes intervalos.

Nos códigos anteriores, a energia total do intervalo i (E_{T_i}), delimitado por λ_i e λ_{i+1} , é computada com base na expressão:

$$E_{T_i} = (\lambda_{i+1} - \lambda_i) \times \frac{1}{2}(B(\lambda_{i+1}) - B(\lambda_i)). \quad (3.29)$$

Já no código novo, a energia total de cada intervalo é calculada integrando a função de Planck numericamente em cada um dos intervalos.

Utilizando valores de uma simulação típica para um envoltório composto de silicatos amorfos, com o espectro dividido em 50 intervalos, e uma estrela central com temperatura efetiva, $T_{ef} = 2500 K$, podemos exemplificar a diferença encontrada. A diferença na emissão total da estrela, computando a energia total (soma da área de cada intervalo) pelos dois métodos é da ordem de 0,5 %. Esta diferença é insignificante para o cálculo total e, já que a emissão da estrela é responsável por gerar a primeira

distribuição de temperatura dos grãos (T_1), não observamos diferenças entre os valores de T_1 para os dois códigos.

Entretanto, os perfis de temperatura subsequentes, que são calculados até que o equilíbrio seja atingido, são gerados computando não só a emissão da estrela, mas também a emissão dos grãos. As temperaturas dos grãos em uma simulação típica estão compreendidas entre $\approx 1100 K$ e $\approx 50 K$. Desta forma, calculamos a diferença entre os dois métodos de cálculo da energia das planckianas para valores de temperatura variando entre estes dois limites, os resultados estão apresentados na Tabela 3.1.

Os grãos das primeiras camadas são aquecidos principalmente pela estrela central e, portanto, não apresentam grandes variações nas temperaturas observadas. Já os grãos das camadas intermediárias são aquecidos tanto pela energia proveniente da estrela como pela energia emitida por grãos das camadas mais internas. E os grãos das camadas mais externas e temperaturas mais baixas são aquecidos por todas as camadas de grãos. O processo de obtenção da temperatura final dos grãos é iterativo e, portanto, repetimos o processo de emissão de energia diversas vezes até que a temperatura final seja alcançada. Em uma simulação típica, para envoltórios opticamente finos, são realizadas apenas 2 ou 3 iterações até que o equilíbrio seja atingido. Já em uma simulação de um envoltório intermediariamente espesso, são necessárias 15 iterações e, para um envoltório muito espesso, podem ser necessárias 30 ou mais iterações.

Quanto maior a quantidade de iterações, maior é a influência das diferenças apresentadas na Tabela 3.1 para as temperaturas finais e para o fluxo final calculado, já que a temperatura final dos grãos está diretamente ligada a este resultado da simulação. As camadas que mais sofrem este efeito são aquelas cujas temperaturas são mais influenciadas pela emissão dos grãos, ou seja: as camadas intermediária e exteriores. As camadas intermediárias tendem a apresentar temperaturas maiores e as exteriores menores, já que a diferença passa a ser negativa a partir de um certo valor de temperatura ($\approx 730 K$).

Estas diferenças de temperatura podem ser da ordem de +5 % para camadas intermediárias (correspondendo tipicamente a $30 K$) e de -10 % para as camadas exteriores (tipicamente $10 K$). Estas diferenças de temperatura provocam variações de 20% no fluxo das camadas e são, portanto, significativas.

Desta forma, a implementação do cálculo da área dos intervalos da função de Planck

Tabela 3.1: Valores das integrais da função de Planck calculados pelo método do código MonRaT (S1) e dos códigos anteriores (S2) em função da temperatura da planckiana

Temp (K)	S1	S2	(S1 - S2)/S1
1100	8,306770e+04	8,273829e+04	3,965650e-03
1065	7,298898e+04	7,273094e+04	3,535356e-03
1030	6,385644e+04	6,365798e+04	3,107948e-03
995	5,560894e+04	5,545942e+04	2,688854e-03
960	4,818738e+04	4,807738e+04	2,282842e-03
925	4,153470e+04	4,145604e+04	1,893811e-03
890	3,559587e+04	3,554161e+04	1,524573e-03
855	3,031792e+04	3,028225e+04	1,176662e-03
820	2,564989e+04	2,562809e+04	8,501560e-04
785	2,154290e+04	2,153119e+04	5,435227e-04
750	1,795007e+04	1,794552e+04	2,535060e-04
715	1,482659e+04	1,482696e+04	-2,494645e-05
680	1,212968e+04	1,213330e+04	-2,986989e-04
645	9,818611e+03	9,824270e+03	-5,763768e-04
610	7,854690e+03	7,861510e+03	-8,682423e-04
575	6,201273e+03	6,208628e+03	-1,186009e-03
540	4,823758e+03	4,831200e+03	-1,542646e-03
505	3,689591e+03	3,696794e+03	-1,952315e-03
470	2,768261e+03	2,774990e+03	-2,430671e-03
435	2,031308e+03	2,037393e+03	-2,996009e-03
400	1,452314e+03	1,457647e+03	-3,672021e-03
365	1,006909e+03	1,011434e+03	-4,493583e-03
330	6,727693e+02	6,764818e+02	-5,518196e-03
295	4,296132e+02	4,325551e+02	-6,847796e-03
260	2,592032e+02	2,614502e+02	-8,669032e-03
225	1,453436e+02	1,469897e+02	-1,132594e-02
190	7,387986e+01	7,502173e+01	-1,545575e-02
155	3,269850e+01	3,342732e+01	-2,228904e-02
120	1,172752e+01	1,213202e+01	-3,449217e-02
85	2,937404e+00	3,110062e+00	-5,877917e-02

através de integração numérica se mostra relevante para o resultado final do modelo.

3.4.2 Distribuições de temperatura

Uma importante implementação deste novo código é a possibilidade de considerar envoltórios constituídos por várias espécies de grãos. Quando mais de um tipo de grãos é incluído em uma determinada modelagem, as diferentes espécies possuem temperaturas que sofrem influência da emissão dos outros grãos, mas que são determinadas independentemente. A temperatura dos grãos é calculada a partir da energia absorvida pelos mesmos nos diversos comprimentos de onda. Como os fótons de comprimentos de onda menores são mais energéticos, grãos com maior opacidade nesta região apresentarão, em geral, maiores temperaturas.

No caso, por exemplo, de uma modelagem que considere quatro tipo de grãos: Silicatos amorfos, silicatos cristalinos, ferro e $Mg_{0,6}Fe_{0,4}O$; teremos eficiências de absorção e de extinção bem diferentes para cada tipo de grão, o que ocasionará distribuições de temperatura bem distintas também. Na figura 3.1 estão dispostas as eficiências calculadas para grãos de 0,1 μm de silicato amorfo, silicato cristalino, ferro e $Mg_{0,6}Fe_{0,4}O$.

As eficiências dos grãos são bem diferentes umas das outras, de forma que devemos observar diferenças importantes nos perfis de temperatura. Podemos observar ainda que a eficiência de extinção do ferro não apresenta estruturas, que indicam a presença de características, como a de 9,7 e 18 μm dos silicatos amorfos, a de 19,5 μm do $Mg_{0,6}Fe_{0,4}O$ e as várias pequenas estruturas do silicato cristalino.

Como a eficiência de absorção do ferro é muito maior que a dos outros grãos nos comprimentos de onda mais energéticos, temos, portanto, que esse grão apresenta temperaturas maiores em uma modelagem, como podemos observar na figura 3.2. Desta forma, os grãos de ferro também serão responsáveis por emitir uma parte importante da energia que escapa do envoltório.

As outras três espécies de grãos apresentam perfis de temperatura bastante parecidos apesar das diferenças importantes nas eficiências. Desta forma, estas espécies contribuirão de forma similar na energia emitida que escapa do envoltório, mas sua emissão será marcada pelas características que refletem as estruturas observadas nas eficiências.

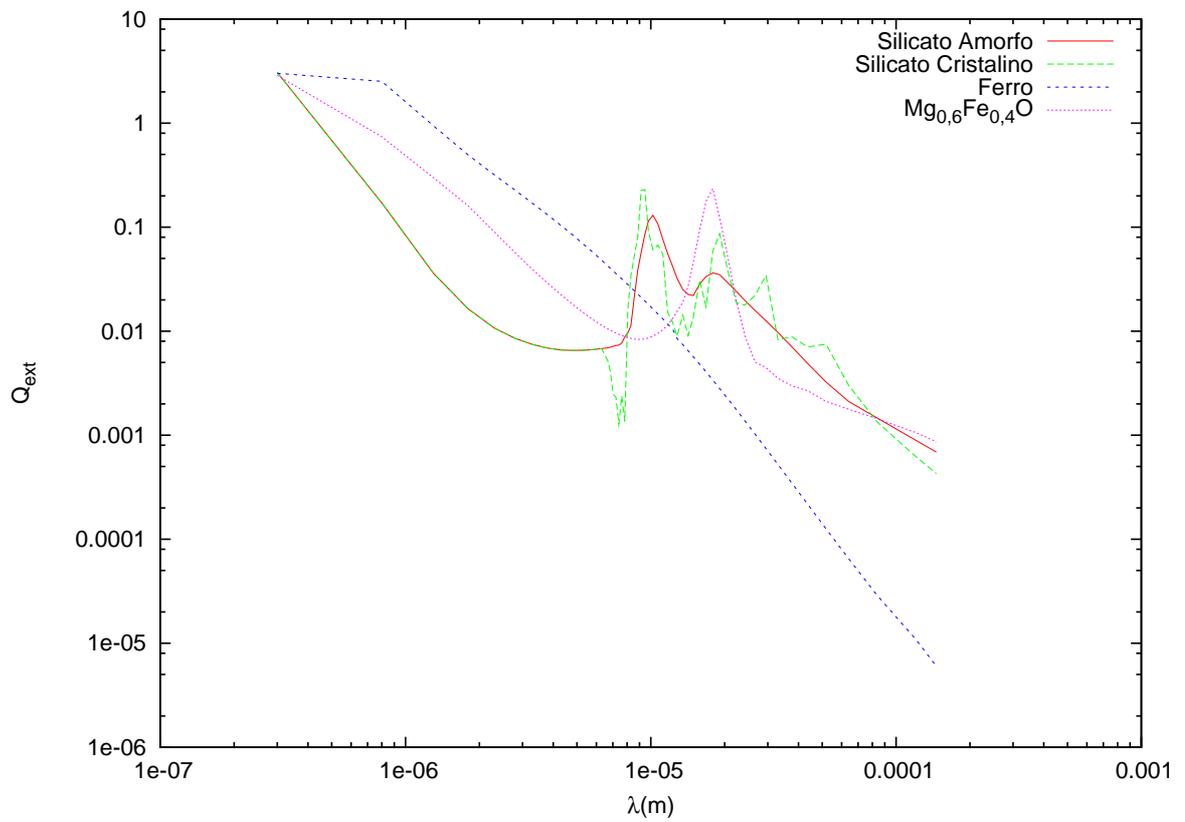


Figura 3.1: Eficiências de extinção para grãos de $0,1 \mu m$ de silicato amorfo, silicato cristalino, ferro e $Mg_{0,6}Fe_{0,4}O$.

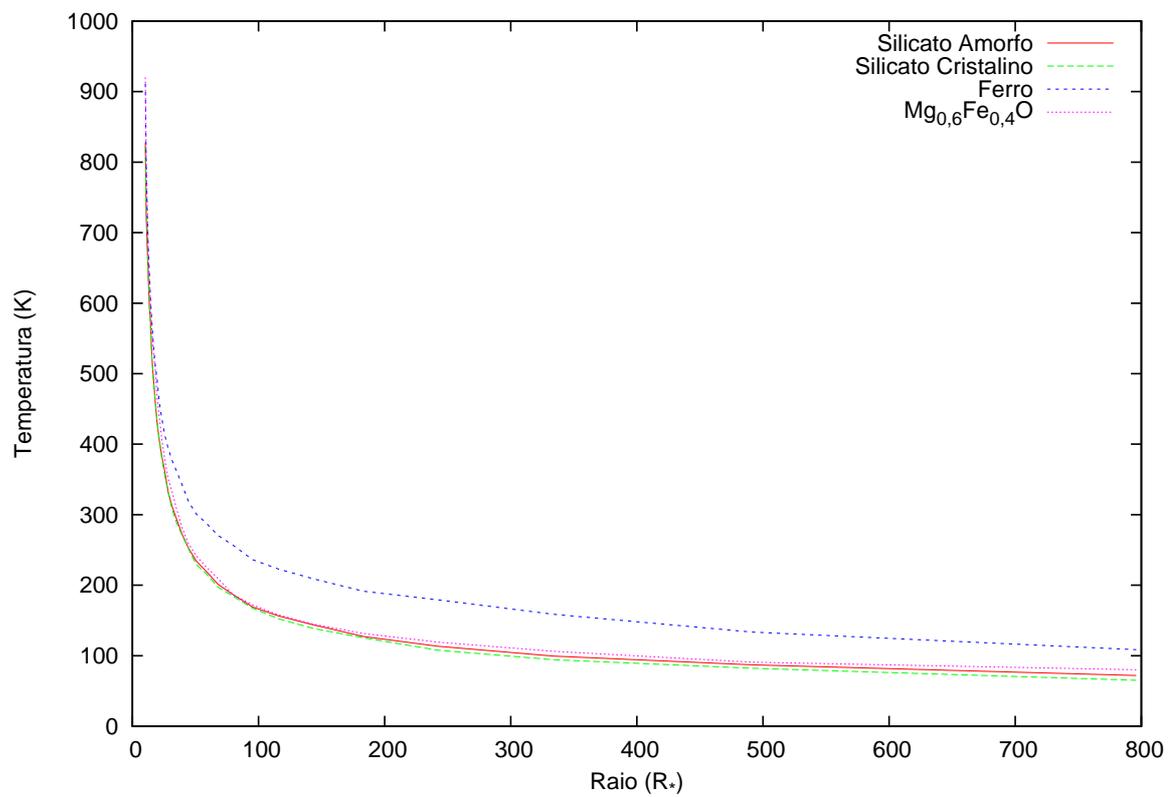


Figura 3.2: Perfis de temperatura calculados em uma modelagem para grãos de $0,1 \mu\text{m}$ de silicato amorfo, silicato cristalino, ferro e $\text{Mg}_{0,6}\text{Fe}_{0,4}\text{O}$.

3.4.3 Desenvolvimento do novo código:

A ideia de escrever um novo código, estruturando todas as modificações das versões que nós possuímos em um único programa escrito de forma mais clara, partiu de Alain-Jacques de Burlet. Alain-Jacques desenvolveu a ideia inicial de como seria este código após adquirir experiência utilizando outros programas de modelagem durante o seu mestrado e perceber as necessidades e possibilidades de uma nova estruturação. Posteriormente, eu e Andrés Felipe Pérez Sánchez entramos no projeto. A linguagem escolhida para implementação foi o C, já que Alain-Jacques possui grande experiência com a mesma e seus recursos nos permitiriam alcançar todos os objetivos propostos.

Como exposto anteriormente, o código foi escrito por mim e por Andrés Felipe Pérez Sánchez, sob a supervisão de Alain-Jacques de Burlet. Nós conduzimos o trabalho sempre fazendo comparações com as versões anteriores, de forma a garantir que nosso código reproduziria as modelagens anteriores. Na próxima seção, apresentamos algumas comparações e testes.

3.4.4 Testes:

Durante o desenvolvimento do código, calculamos modelos utilizando o código em desenvolvimento e os dois códigos usados como base para este trabalho. Comparamos todos os valores relevantes envolvidos no cálculo do programa a medida que íamos progredindo. Quando o código foi terminado, comparamos os resultados finais. Nas figuras a seguir, estão demonstradas comparações entre os resultados finais dos dois códigos. Os resultados são muito similares, o que sustenta que o novo código é capaz de reproduzir os resultados dos códigos anteriores.

Na Figura 3.3 mostramos uma comparação entre as duas DEE, calculadas com os mesmos parâmetros, utilizando o código DGST (dois grãos) e o código MonRaT. Para este cálculo, consideramos um envoltório composto por grãos de $0,1 \mu m$ de dois tipos: Carbono Amorfo e FeO, com raio interno igual a $5 R_*$ e raio externo igual a $1000 R_*$. A razão entre a quantidade de Carbono Amorfo e FeO, N_{CA}/N_{FE} , é: 0,6. A profundidade óptica medida em $\lambda = 1 \mu m$ é igual a 2 e a temperatura da estrela central foi escolhida como $2500 K$. Na Figura 3.4 estão apresentado os perfis de temperatura para os dois grãos do envoltório, obtidas com os parâmetros acima para os dois códigos.

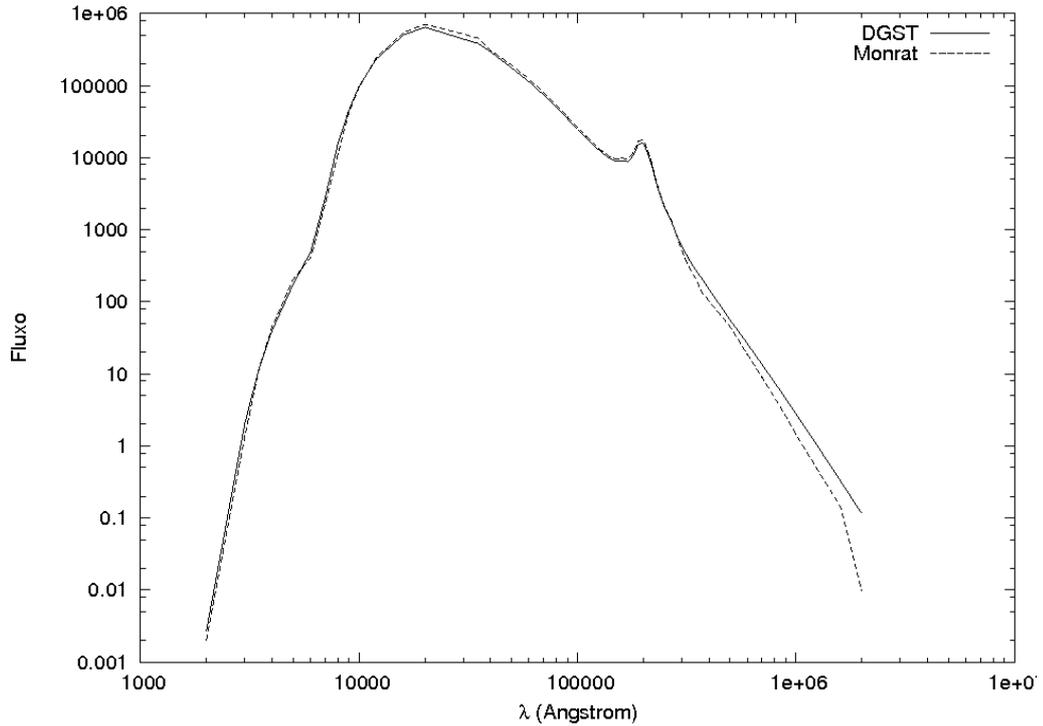


Figura 3.3: Comparação entre as DEE geradas pelos códigos MonRaT (linha tracejada) e DGST (linha continua), utilizando os mesmos parâmetros

As Figuras 3.5 e 3.6 apresentam, respectivamente, as DEE e os perfis de temperatura calculados com o código Radumodi e com o código MonRaT. O código Radumodi permite considerar apenas um tipo de grãos, mas distribuídos no envoltório de acordo com uma lei de potência dada por: $n(r) = n_0/r^m$, com m sendo um parâmetro livre que pode variar entre 1 e 3. Para esta comparação, utilizamos silicatos amorfos de $0,1 \mu m$, com expoente de distribuição m igual a 2,3 e contidos em um envoltório limitado por $R_{int} = 5 R_*$ e $R_{ext} = 1000 R_*$. A profundidade óptica foi escolhida como 5 em $\lambda = 9,7 \mu m$.

A Figura 3.7 é uma comparação entre duas DEE, cujos cálculos foram realizados com o código Radumodi e MonRaT. Nesta comparação o envoltório tem $R_{int} = 8 R_*$ e $R_{ext} = 1000 R_*$ e é composto por grão de silicato amorfo com raios de $0,07 \mu m$. A temperatura da estrela central foi escolhida como $2300 K$ e a profundidade óptica como $0,5 \mu m$ medida em $1,0 \mu m$. O valor do expoente m para estes dois modelos é 2.

Na Figura 3.8 calculamos um modelo para observações do satélite IRAS da fonte AFGL 230. Utilizamos os mesmos parâmetros empregados por Lorenz-Martins e de

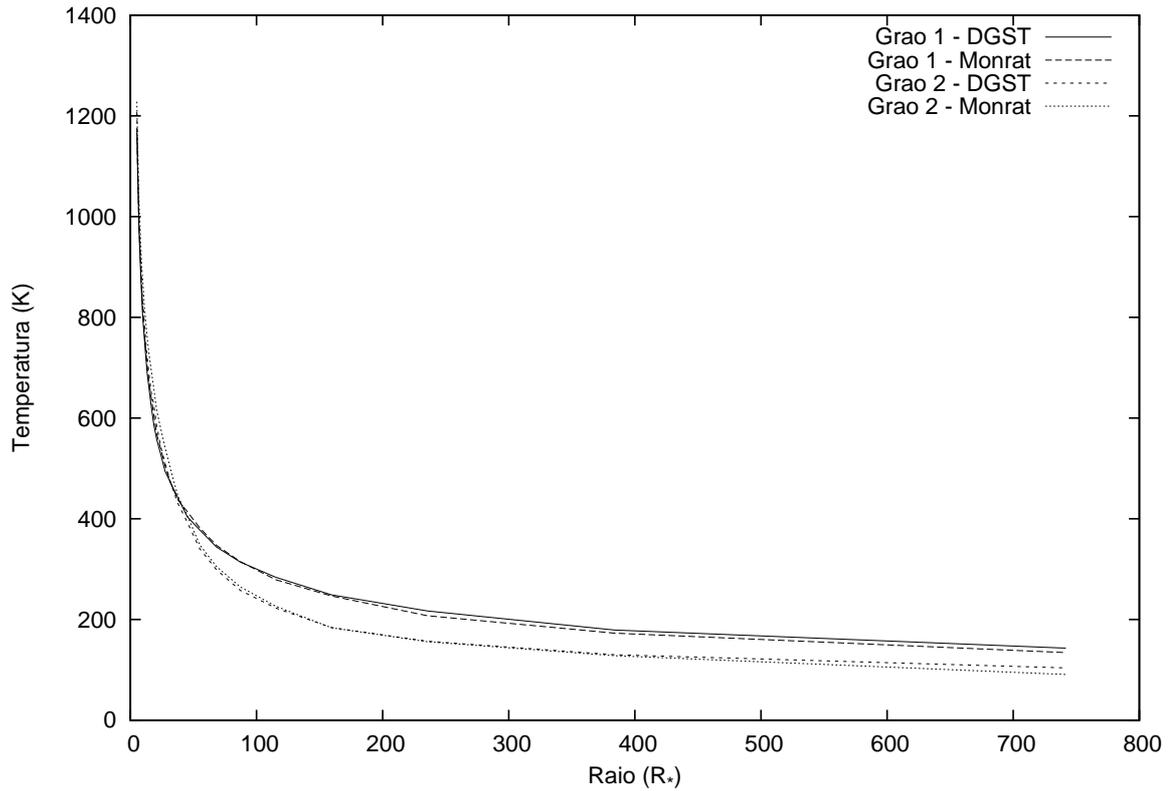


Figura 3.4: Comparação entre os perfis de temperatura calculados para os dois grãos pelos códigos MonRaT e DGST, utilizando os mesmos parâmetros

Araújo (1997) e fomos capazes de reproduzir a modelagem. Os parâmetros são: Raio interno = $4 R_*$, Raio externo = $1000 R_*$, Temperatura = 2300 K, τ medido em $9,7 \mu m = 9,5$, Raio dos grãos = 4500 \AA , e $m = 2,5$.

As comparações realizadas nesta seção demonstram que o código MonRaT é capaz de reproduzir os resultados das duas versões anteriores utilizadas como base para o seu desenvolvimento: DGST e Radumodi. Desta forma, o código MonRaT se mostra eficiente para ser empregado no cálculo de modelos para observações de envoltórios de poeira.

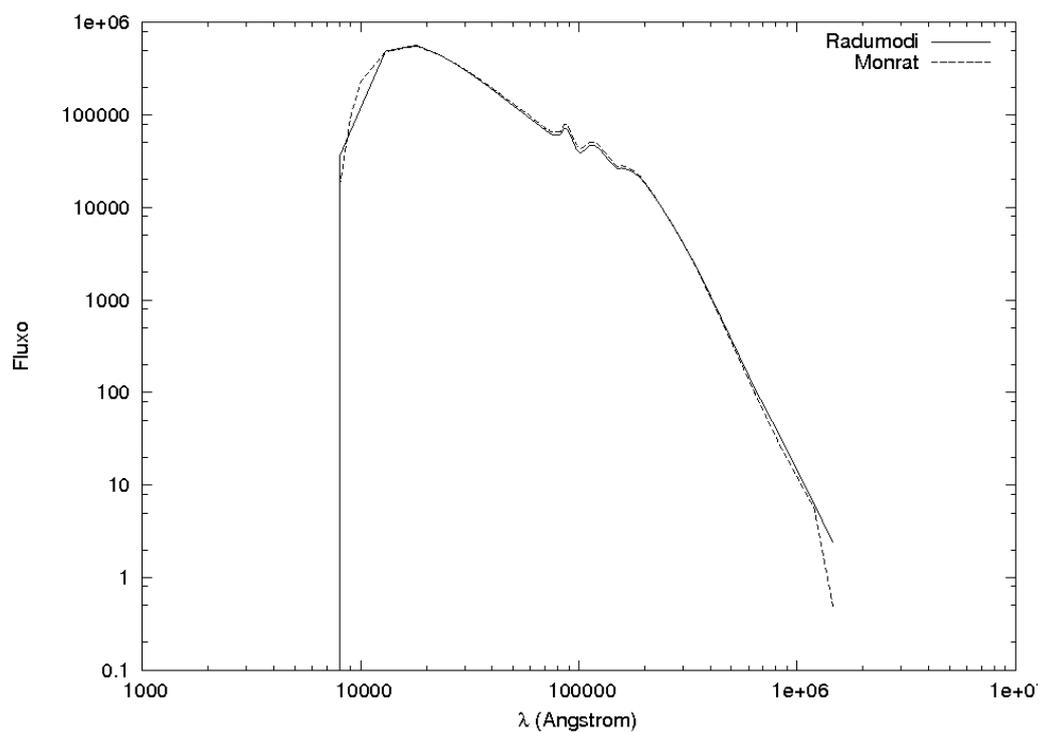


Figura 3.5: Comparação entre as DEE geradas pelos códigos MonRaT (linha tracejada) e Radumodi (linha contínua), utilizando os mesmos parâmetros

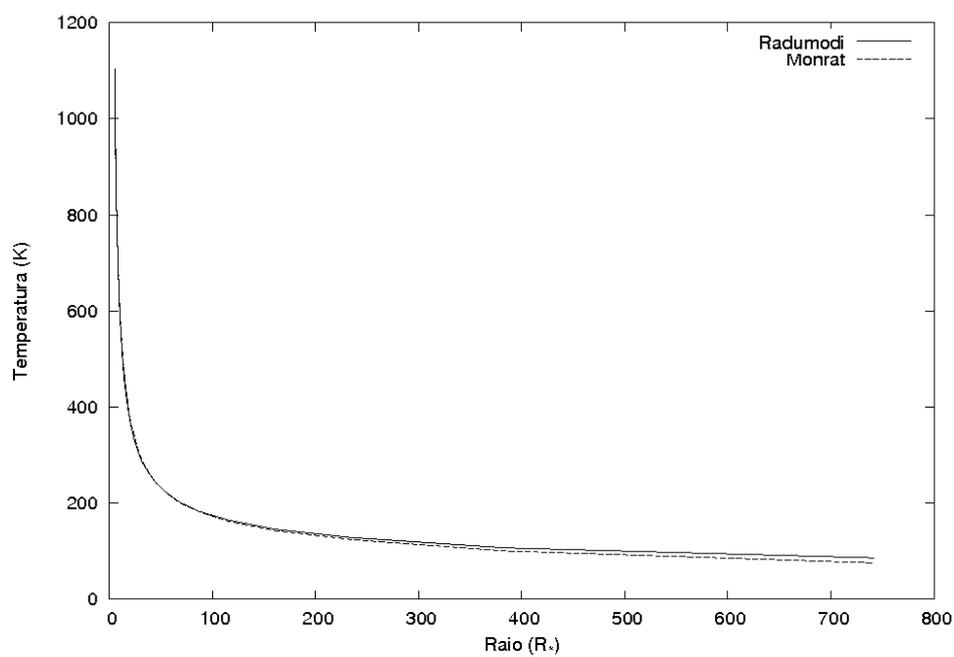


Figura 3.6: Comparação entre os perfis de temperatura calculados pelos códigos MonRaT (linha tracejada) e Radumodi (linha contínua), utilizando os mesmos parâmetros

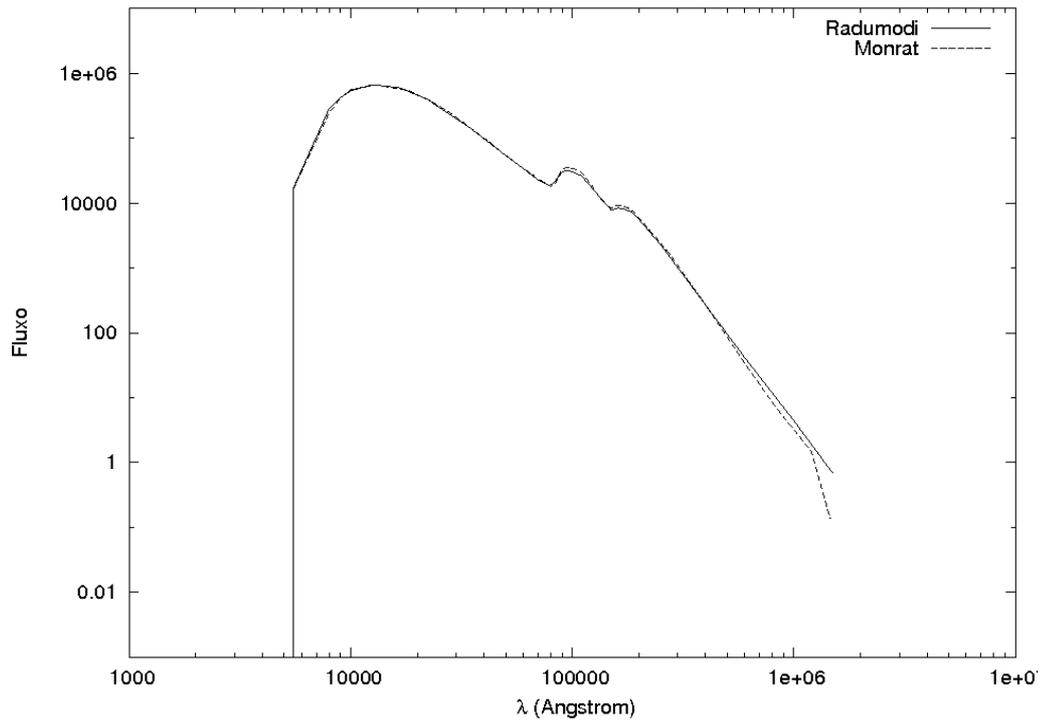


Figura 3.7: Comparação entre as DEE geradas pelos códigos MonRaT (linha tracejada) e Radumodi (linha continua), utilizando os mesmos parâmetros

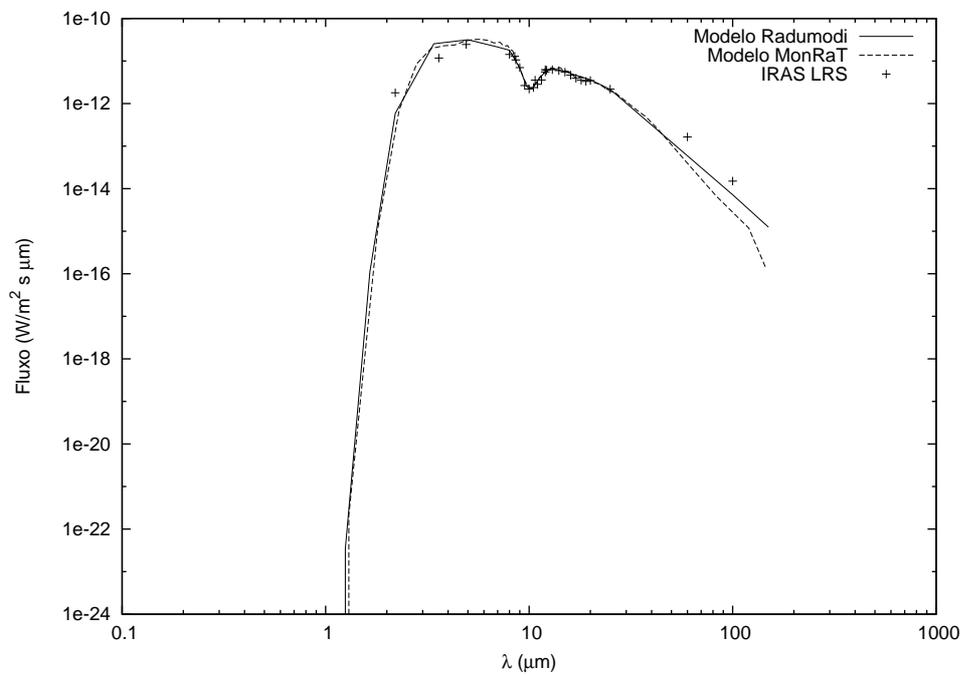


Figura 3.8: Comparação entre as DEE geradas pelos códigos MonRaT (linha tracejada) e Radumodi (linha continua), utilizando os mesmo parâmetros e ajustando as observações IRAS da fonte AFGL 230

Capítulo 4

Estudo do maser de 1612Mhz de OH/IR

4.1 Introdução

As estrelas OH/IR são objetos ricos em Oxigênio ($C/O > 1$) localizados no topo do RAG e possuem altas taxas de perda de massa. Os grãos, basicamente silicatos, que se formam nos densos ventos expelidos por estes objetos reprocessam a radiação estelar, absorvendo fótons de comprimento de onda menores e emitindo no IV. Muitas vezes, a absorção dos grãos é intensa o suficiente para obscurecer a estrela completamente no visível e até no IV próximo.

Várias espécies moleculares também estão presentes na fase gás no envoltório das OH/IR. As populações de excitação e de ionização não podem ser calculadas, na grande maioria dos casos, com base em argumentos de equilíbrio termodinâmico local (ETL), fato que dificulta o entendimento dos processos químicos que ocorrem nestes meios. Nas partes mais externas destes envoltórios, uma forte emissão maser, causada por transições rotacionais da molécula de OH, é produzida. O paradigma aceito hoje para estrutura do envoltório e mecanismo de formação de maser nas estrelas OH/IR foi sugerido por Goldreich & Scoville (1976) e Elitzur, Goldreich & Scoville (1976) e é apresentado a seguir.

As observações da emissão maser são uma importante fonte de informações físicas destes objetos. O princípio do maser já era conhecido desde o começo da década de 50,

mas não havia sugestões de que este processo pudesse ocorrer em objetos astrofísicos. Weaver et al. (1965) observaram uma linha muito intensa que não podia ser explicada por emissão espontânea não-coerente. Em 1966, Litvak e colaboradores e Perkins e colaboradores concluíram independentemente que se tratava de emissão induzida em uma linha da molécula de OH. Uma explicação sucinta deste efeito de emissão estimulada é dada a seguir.

- Efeito Maser: É uma consequência da emissão estimulada atuando de forma a amplificar a radiação em uma dada frequência. Em densidades baixas o suficiente, as taxas de colisões entre as moléculas são pequenas e os átomos podem ocupar diversos níveis de excitação até decair radiativamente. As populações neste caso não são governadas pelas equações que pressupõem equilíbrio termodinâmico e as configurações das populações dos níveis energéticos variam de acordo, principalmente, com o campo de radiação. Para algumas transições, pode ocorrer de o nível mais excitado estar mais povoado do que o de menor energia. Dizemos que a transição está invertida neste caso e que o processo responsável pela inversão é o mecanismo de bombeamento.

Para um sistema no qual o nível excitado é mais povoado do que o nível inferior, é mais provável que um fóton provoque uma emissão estimulada do que seja absorvido. A consequência é, então, uma amplificação da emissão. No caso dos processos astronômicos considerados, esta emissão ocorre em microondas ou em rádio e, portanto, o nome dado: **M**icrowave **A**mplification by **S**timulated **E**mission of **R**adiation (maser).

Segundo o modelo proposto por Elitzur, Goldreich & Scoville (1976) o bombeamento do maser de 1612 MHz é realizado por radiação do infravermelho emitida pela própria poeira do envoltório da estrela. Sua região de formação é determinada pela abundância de OH, que é máxima, e relevante, para uma casca de espessura de aproximadamente 10% do raio do envoltório e localizada nas partes mais externas do mesmo, $r \approx 90\% R_{env}$ (Herman & Habing, 1985). A molécula de OH é produzida a partir da dissociação da molécula de água por radiação UV proveniente do MI e é dissociada por radiação um pouco mais energética também oriunda do MI. Devido a anisotropias

no fluxo UV do MI, podemos observar variações no perfil de abundância de OH para diferentes fontes e até para diferentes regiões de um mesmo objeto (Szymczak, 1987).

Para que o maser de 1612 MHz ocorra, é necessária uma grande coerência na velocidade das moléculas de OH, pois, caso contrário, o efeito Doppler impossibilita o processo de emissão estimulada. Em um envoltório em expansão radial, as moléculas que possuem velocidades relativas nulas são somente as que estão se movendo na mesma direção. O maser de OH é, portanto, formado em colunas radiais de moléculas que emitem radiação coerente na mesma direção. Uma dada linha de visada que intercepta o envoltório é paralela a duas destas colunas, uma localizada na parte do envoltório que se move na mesma direção da linha de visada e outra na parte do envoltório que se move na direção oposta. Para um observador este maser é percebido, portanto, como uma emissão com um perfil de duplo pico, sendo um desviado para o vermelho e o outro para o azul, conforme mostrado na Figura 4.1.

Emissões maser de SiO e H_2O também podem ser observados em diversas frequências nas estrelas OH/IR. O maser de SiO é formado nas regiões mais próximas da estrela central e é, portanto, uma ferramenta importante para a determinação das condições físicas da região de aceleração do vento. O maser de H_2O , por sua vez, é formado em uma região intermediária, entre o de SiO e o de OH , e também é uma importante ferramenta de investigação destes objetos. Além do maser de 1612 MHz, a molécula de OH também produz este tipo de emissão em três outras frequências: 1665 MHz, 1667 MHz e 1720 MHz. A formação do maser em 1612 MHz requer, entretanto, uma coluna coerente em velocidade mais extensa. E esta configuração só pode ser atingida para envoltórios opticamente espessos.

Em consequência do forte brilho do maser de 1612 MHz, as estrelas OH/IR são comumente encontradas em buscas realizadas nesta frequência, sendo a confirmação conseguida com identificação da fonte também no infravermelho. Entretanto, com o advento de grandes surveys nesta região do espectro eletromagnético, uma nova maneira de procurar objetos OH/IR surgiu. As fontes passaram a ser primeiramente identificadas em diagramas cor-cor, construídos com cores do IV, e posteriormente confirmadas com observações rádio. Entretanto, neste tipo de busca, aproximadamente 40 % das fontes examinadas não apresentam maser, apesar de estarem localizadas em regiões muito propícias do diagrama cor-cor e de apresentarem envoltórios oxigenados,

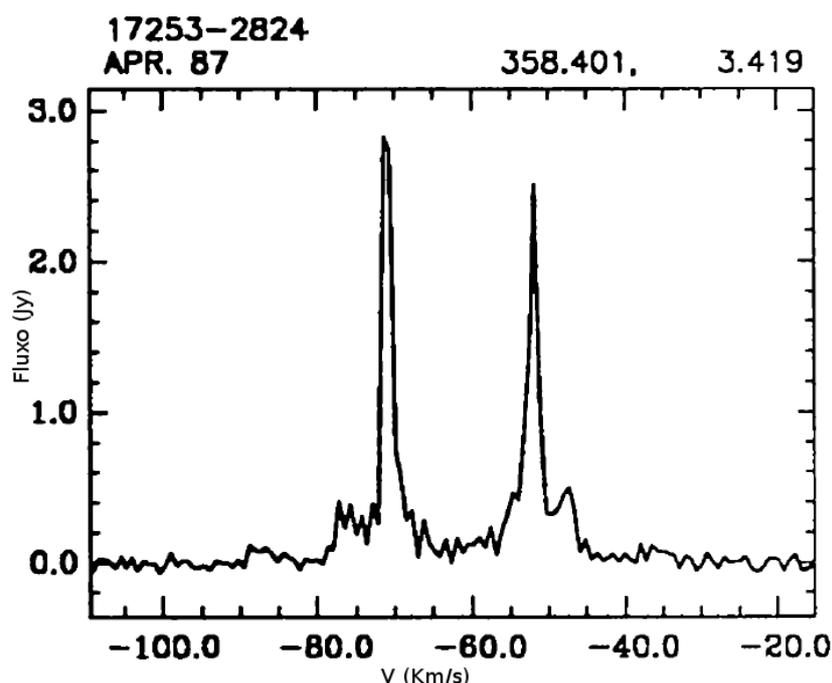


Figura 4.1: Emissão maser em 1612 MHz da fonte IRAS 17253-2824, adaptado de te Lintel Hekkert et al., 1991

como comprovado por observação espectroscópicas no infravermelho (Lewis, 1992 e Lewis, Eder & Terzian, 1987). Segundo os autores, este efeito não é causado por limites de detecção e, sim, por características intrínsecas das fontes.

Nesta seção, apresentaremos um estudo do que podemos inferir da estrutura dos envoltórios de poeira a partir das observações no IV. Calculamos modelos com diferentes leis de distribuição dos grãos (do tipo $n(r) = n_0/r^m$) e analisamos as possíveis consequências da variação do expoente m para a ocorrência do maser.

4.2 Exposição do problema

Muitas sugestões foram dadas para justificar a ausência do maser em 40% das fontes observadas no IV, como por exemplo: a atividade do maser seria periódica, sendo modulada pela própria variabilidade da estrela central; a presença de uma companheira degenerada com emissão importante de fótons UV, poderia ser responsável por dissociar a molécula de OH; ou a presença de uma companheira poderia perturbar o envoltório e destruir a coerência necessária na velocidade das moléculas. É ainda possível que

estas fontes que não apresentam o maser não sejam estrelas AGB, mas Lewis (2002) argumenta que poucas fontes pertencem a esta categoria ($\approx 1\%$).

Gaylard et al. (1989) apontaram que a possibilidade de explicar as fontes sem maser pela perturbação causada no envoltório por uma companheira não deve dar conta de todas as fontes sem detecção. Outros estudos apontaram que a presença de uma companheira degenerada pode, de fato, impossibilitar a formação do maser em 1612 MHz (Howe & Rawlings, 1994 e Seaquist & Ivison, 1994). Porém, a confirmação observacional da presença da companheira não foi obtida. Este o efeito também não deve ser importante o suficiente para responder por todas as fontes sem maser. Lewis (1996) sugere que o tamanho e o tipo dos grãos presentes nos envoltórios possa influenciar a formação dos diferentes masers, mas os resultados apresentados pelo autor não são conclusivos, apenas apontam a possibilidade.

Posteriormente, Lewis (2002) reporta o desaparecimento da emissão maser em 4 fontes e o enfraquecimento substancial de uma quinta em um período de 12 anos, de uma amostra de 328 objetos. Todas as fontes observadas por Lewis ocupavam uma região do diagrama cor-cor característica de objetos menos obscurecidos. Estas estrelas identificadas ainda possuíam características do RAG, e não foram identificadas como pós-RAG, fato que levou Lewis a sugerir que a emissão maser de 1612 MHz fosse um fenômeno cíclico, possivelmente modulado pelos pulsos térmicos. Posteriormente, Engels & Jiménez-Esteban (2007) realizaram uma busca semelhante àquela executada por Lewis, observando 114 fontes 28 anos após a observação anterior. Os autores, porém não encontraram nenhuma fonte cujo maser havia desaparecido.

Apesar dos vários trabalhos nesta área, ainda não é há nenhuma conclusão definitiva sobre a causa da ausência do maser de 1612 MHz em 40% das fontes escolhidas a partir do diagrama cor-cor. Provavelmente algumas das possíveis causas citadas aqui são em parte responsáveis por este fenômeno, mas ainda não há uma indicação clara de qual o peso de cada uma delas e ainda se há outros processos importantes que ainda não foram considerados.

Uma vez que o maser de 1612 MHz só é observado em objetos com altas taxas de perda de massa, espera-se que o fenômeno dependa de densidades maiores na região de formação do maser para ocorrer (Elitzur 1992). As taxas de perda de massa são calculadas a partir de modelos que se ajustam às observações destes objetos no IV e

em rádio. Os dados a serem modelados podem ser: a própria emissão maser, a emissão térmica da poeira e/ou emissões de moléculas do envoltório (principalmente CO).

Uma compreensão profunda da distribuição de matéria do envoltório pode ser alcançada com auxílio destas diferentes abordagens. E, a medida que dados mais precisos são obtidos, principalmente com o uso de observações feitas do espaço, mais complexa se revela a estrutura destes envoltórios. As taxas de perda de massa derivadas da modelagem de transições da molécula de CO, por exemplo, são, em geral, bem inferiores àquelas obtidas a partir da emissão dos grãos (Heske et al., 1990). Há ainda autores que argumentam que as observações das transições do CO indicam também uma evolução temporal, não monotônica, da taxa de perda de massa (Kemper et al., 2003). E, por outro lado, há aqueles que consideram possível modelar estas observações considerando taxas de perda de massa constante no tempo (Ramstedt et al. 2008).

As observações das transições rotacionais do CO utilizadas para derivar a taxa de perda de massa incluem transições rotacionais desde $J = 1 \rightarrow 0$ até $J = 7 \rightarrow 6$. Estas transições ocorrem nas partes intermediárias e mais externas do envoltório, onde $T < 155 K$ e, portanto, não contém informação sobre a taxa de perda de massa atual.

A modelagem dos envoltórios de poeira é comumente feita assumindo-se perda de massa constante e, portanto, uma lei de distribuição dos grãos dada por: $n(r) = n_0/r^2$. Entretanto, Lorenz-Martins & de Araújo (1997) modelaram com sucesso os envoltórios de algumas fontes OH/IR observadas pelo satélite IRAS considerando a distribuição de grãos no envoltório dada por uma lei do tipo $n(r) = n_0/r^m$, onde m é um parâmetro livre do código. Este procedimento se baseou, como apontado pelos autores, em trabalhos anteriores, como: Volk, Kwok & Langill (1992) que modelaram estrelas carbonadas extremas e Güttler et al. (1996) que estudaram estrelas pós-RAG.

O expoente da lei de distribuição dos grãos está intimamente ligado a variações na taxa de perda de massa e na velocidade do vento. Para um objeto com taxa de perda de massa e velocidade do vento constante, temos $m = 2$; para uma configuração com grãos mais concentrados perto da estrela, $m > 2$; e para grãos menos concentrados perto da estrela, ficamos com $m < 2$.

Neste trabalho, nós investigamos a influência de variações do expoente de distribuição dos grãos na estrutura do envoltório de poeira dos objetos OH/IR e as possíveis consequências para a formação ou não do maser de 1612 MHz. O problema

foi tratado de duas formas: em um primeiro momento, calculamos uma série de modelos com diferentes valores deste parâmetro e, posteriormente, calculamos modelos com expoente m fixado em 2 (equivalente a perda de massa constante) para as OH/IR consideradas por Lorenz-Martins & de Araújo (1997) e comparamos estes novos modelos com os obtidos pelos autores.

4.3 Resultados

4.3.1 Estudo da variação do expoente m

Com o objetivo de avaliar a importância do expoente m para o resultado final da modelagem, calculamos diversos modelos para diferentes valores do expoente m , para três valores de profundidade óptica do envoltório: 5, 8 e 11, medida em $\lambda = 9,7\mu m$; e 5 valores do raio externo 100, 500, 1000, 5000, e 10000. Ao expoente m designamos sete valores distintos entre 1,4 e 2,6, com passo de 0,2. Consideramos grãos de silicatos com raio de $0,1\mu m$, com constantes ópticas extraídas de David & Pégourié (1995). O raio interno do envoltório foi modificado de forma a manter a temperatura na primeira camada próxima a $1080 K$, com um intervalo de $\pm 10 K$, já que esta é aproximadamente a temperatura de condensação dos silicatos.

Comparamos os resultados das DEE e dos perfis de temperatura do envoltório, para averiguar o impacto dos parâmetros analisados nestes dois resultados da modelagem. Nas figuras a seguir estão apresentados os resultados:

Tomando o caso de $\tau = 8$ e $R_{ext} = 5000$ como exemplo para analisar a variação de m , temos os resultados das DEE apresentados na Figura 4.2 e os dos perfis de temperatura na Figura 4.3. A medida que m aumenta, o raio interno do envoltório tem que ser diminuído para que a temperatura na região de condensação dos grãos possa ser mantida em $1080 K$. Tanto o aumento do expoente da distribuição dos grãos, como a diminuição do R_{int} atuam de forma a concentrar os grãos próximos da estrela central. Os grãos criam uma barreira que impede que a radiação da estrela atinja diretamente as regiões mais distantes. Desta forma, conforme aumentamos m , observamos que a temperatura do envoltório cai mais rapidamente a medida que nos afastamos da estrela central. Por outro lado, o aumento de m e a diminuição do raio interno fazem com

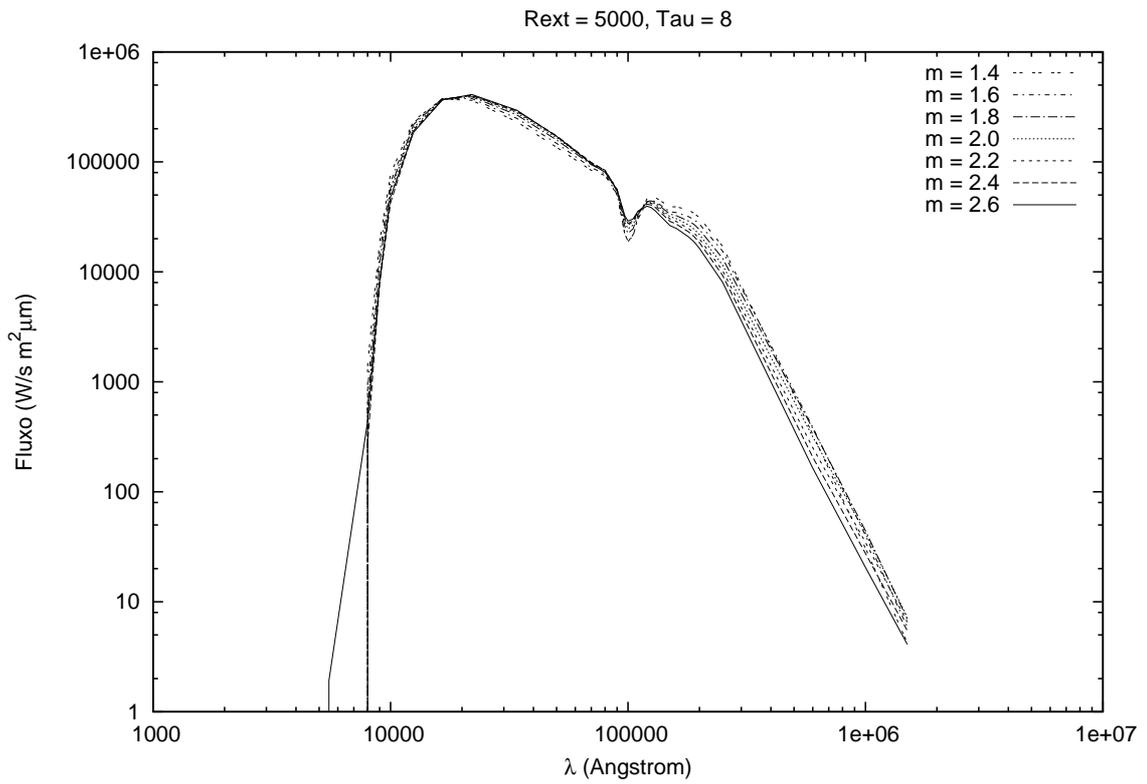


Figura 4.2: DEE geradas com diferentes valores de m .

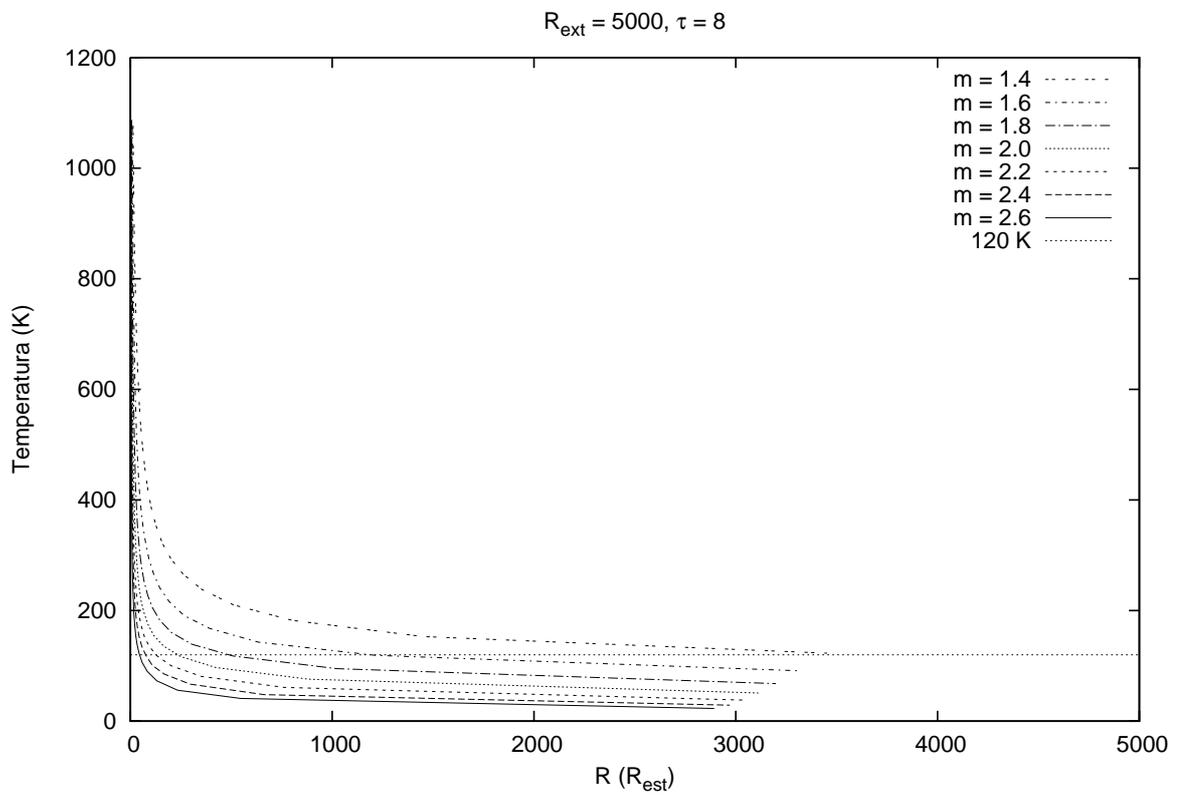


Figura 4.3: Perfis de temperatura gerados com diferentes valores de m .

que tenhamos uma maior quantidade de grãos mais aquecidos próximos à estrela. Os grãos mais quentes contribuem para a emissão no IV próximo e médio.

Concluimos, então, que o aumento do expoente m e a diminuição do raio interno provocam um aumento da emissão do envoltório no IV próximo e uma diminuição da emissão no IV distante, já que a quantidade de grãos nas regiões mais externas do envoltório diminui.

Tabela 4.1: Valores dos raios internos para cada valor de m , para os modelos com $\tau = 8$ e $R_{ext} = 5000$.

m	R_{int}
1,4	13
1,6	9
1,8	6,5
2	5
2,2	4
2,4	3,15
2,6	2,4

4.3.2 Cálculo de novos modelos

Os modelos encontrados na literatura para observações de envoltórios de poeira consideram, em sua grande maioria, taxas de perda de massa constante (o que é equivalente a $m = 2$, para os nossos códigos). Entretanto, Lorenz-Martins & de Araújo (1997) modelaram com sucesso 10 objetos OH/IR considerando envoltórios com $m = 2, 5$, o que seria equivalente a perda de massa crescente.

A fim de investigar o impacto da variação do parâmetro m para a estrutura do envoltório, com ênfase dada à região onde se espera que o maser de 1612 MHz seja formado, utilizamos a amostra analisada por Lorenz-Martins & de Araújo (1997) e calculamos novos modelos utilizando o código Radumodi considerando o expoente m como invariável, fixado em 2. Obtivemos bons ajustes para todas as estrelas da amostra, o que nos leva a concluir que a modelagem do envoltório de poeira não é suficiente para determinar univocamente a estrutura do envoltório.

Tabela 4.2: Parâmetros dos melhores modelos encontrados por Lorenz-Martins & de Araújo (1997) utilizando $m = 2, 5$. A primeira coluna contém o nome do objeto; a segunda, o valor do raio interno do envoltório; a terceira, o valor do raio externo; a quarta, a temperatura; a quinta a profundidade óptica medida em $\lambda = 9,7 \mu\text{m}$; e a sexta, o valor de m .

Nome	$R_{int} (R_{est})$	$R_{ext} (R_{est})$	Temp (K)	τ	a (\AA)	m
AFGL 230	4	1000	2300	9,5	4500	2,5
AFGL 1822	3	1000	2400	7	5500	2,5
AFGL 2205	3	1000	2000	15,5	4000	2,5
AFGL 2885	4,5	1000	2300	10,5	3500	2,5
AFGL 5356	7	1000	2200	16	2500	2,5
AFGL 5379	3	1000	2200	12	6500	2,5
AFGL 5535	4	1000	1800	17	6000	2,5
OH 138.0+7.2	3,5	1000	2500	7	3500	2,5
OH 338.1+6.	4,5	1000	2500	7	3500	2,5
OH 344.9+.01	3	1000	2000	17	7000	2,5

Nas Tabelas 4.2 e 4.3 apresentamos os parâmetros dos modelos conforme calculados por Lorenz-Martins & de Araújo (1997) e por nós neste trabalho, respectivamente. Ao variar o valor de m , somos forçados a também variar de forma expressiva outros parâmetros para conseguir um bom ajuste. Desta forma, os resultados dos modelos com $m = 2, 5$ e $m = 2$ são bem diferentes para cada uma das fontes modeladas.

É possível destacar duas tendências nestas variações: os modelos apresentam sistematicamente raios internos maiores e profundidades ópticas menores quando utilizamos $m = 2$. A única exceção é o objeto AFGL 5356, que apresenta uma profundidade óptica maior no modelo com $m = 2$.

Aumentar o expoente m é equivalente a considerar envoltórios com os grãos mais concentrados próximos à estrela central, com um decaimento radial mais rápido da densidade dos grãos, do que no caso de uma distribuição com $m = 2$. Entretanto, para comparar os efeitos dos diferentes modelos na região de formação do maser, temos que considerar também as variações dos outros parâmetros.

Os maser de 1612 MHz em estrelas do RAG estão sempre associados a fontes com

Tabela 4.3: Parâmetros dos melhores modelos encontrados por nós (com $m = 2$) para as fontes modeladas anteriormente por Lorenz-Martins & de Araújo (1997). As colunas representam as mesmas grandezas que as da tabela anterior.

Nome	$R_{int} (R_{est})$	$R_{ext} (R_{est})$	Temp (K)	τ	a Å	m
AFGL 230	7,5	1000	2250	7,8	5000	2
AFGL 1822	6,5	1000	2350	4,8	5500	2
AFGL 2205	6,5	1000	2000	10	4000	2
AFGL 2885	7,7	1000	2250	9	3500	2
AFGL 5356	10	1000	2200	21	2500	2
AFGL 5379	6	1000	2200	9	6500	2
AFGL 5535	8	1000	2300	13	6000	2
OH 138.0+7.2	7	1000	2300	6	3500	2
OH 338.1+6.	8,5	1000	2300	5,5	4500	2
OH 344.9+.01	6,3	1000	2000	11	3700	2

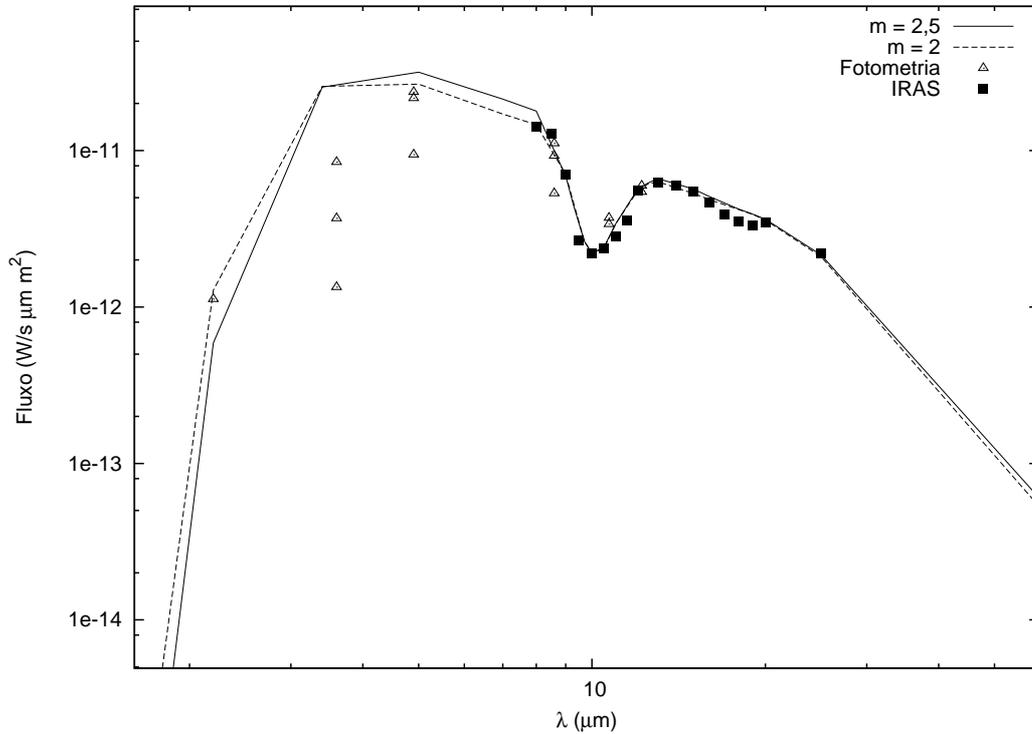


Figura 4.4: Os dois modelos ($m = 2$ e $m = 2,5$) para a fonte AFGL 230 ajustados às observações IRAS.

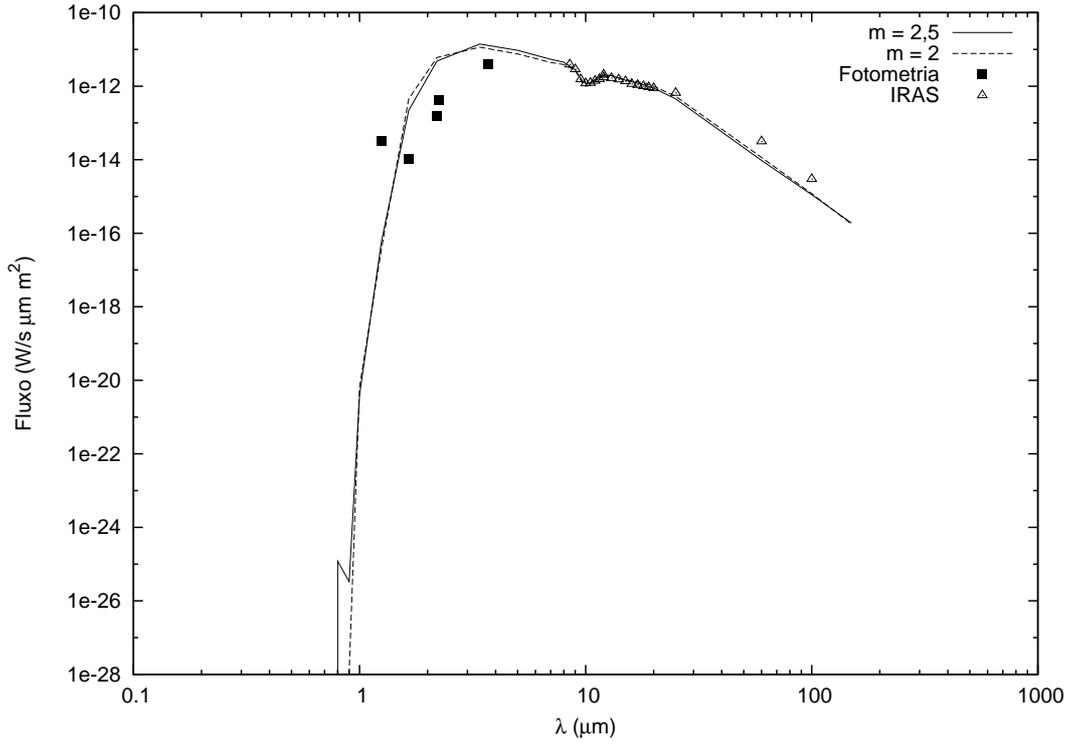


Figura 4.5: Os dois modelos ($m = 2$ e $m = 2,5$) para a fonte OH 138.0+7.2 ajustados às observações IRAS.

envoltórios muito opacos. Desta forma, espera-se que os objetos OH/IR ofereçam as condições ideais para a ocorrência do maser devido às altas densidades encontradas nestes objetos. Um envoltório espesso é importante tanto por oferecer proteção às moléculas de OH contra radiação UV do MI, como por apresentar uma maior densidade destas moléculas.

A fim de mensurar a diferença entre a proteção oferecida pelos grãos nos dois modelos para cada fonte, calculamos a área de superfície dos grãos, N , percebida por um feixe de fótons proveniente do MI e que penetra o envoltório apresentando uma trajetória na direção radial compreendida entre a borda externa do envoltório (R_{ext}) e a região esperada de formação do maser (R_{mas}).

O resultado numérico deste cálculo não tem sentido físico já que todas grandezas estão dadas em função de R_* , pois o envoltório é medido com relação ao raio da estrela central, a menos que escolhamos um valor para este raio. Entretanto, ao comparar dois modelos de uma mesma fonte, podemos efetuar a razão entre as grandezas de cada modelo. Podemos proceder desta forma já que o valor do R_* será o mesmo para os dois modelos de cada fonte.

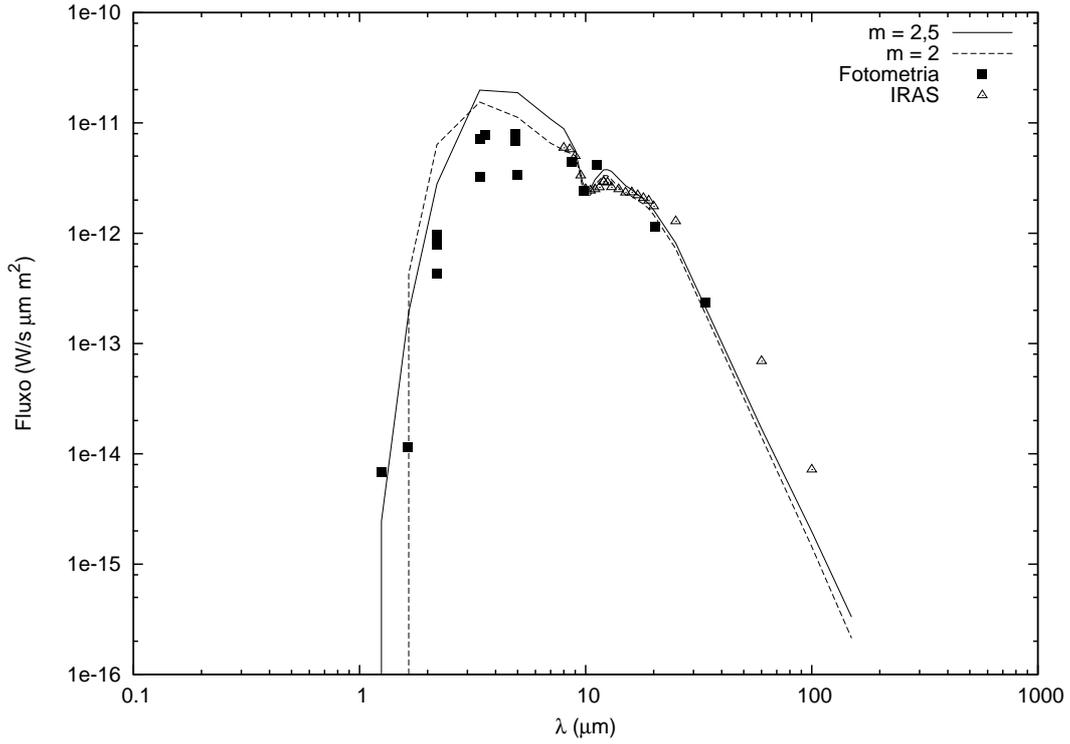


Figura 4.6: Os dois modelos ($m = 2$ e $m = 2,5$) para a fonte AFGL 1822 ajustados às observações IRAS.

Para o cálculo de N , temos que a profundidade óptica na direção radial e em um dado comprimento de onda é um parâmetro de entrada do código. Este parâmetro é usado para calcular a constante da lei de distribuição de grãos, N_0 , e esta é, então, empregada para calcular N .

Conforme exposto na Equação (3.17), temos que:

$$N_0 \pi a^2 = \frac{\tau_\lambda}{Q_{ext,\lambda} \left[\frac{1}{(m-1)} \left(\frac{1}{R_{int}^{m-1}} - \frac{1}{R_{ext}^{m-1}} \right) \right]} . \quad (4.1)$$

A quantidade de interesse é o N , já que a área A é arbitrária, e podemos calculá-lo a partir de:

$$N = \int_{R_{mas}}^{R_{ext}} \frac{N_0 \pi a^2}{r^m} dr = \frac{\tau_\lambda}{Q_{ext,\lambda} \left[\frac{1}{(m-1)} \left(\frac{1}{R_{int}^{m-1}} - \frac{1}{R_{ext}^{m-1}} \right) \right]} \frac{1}{m-1} \left(\frac{1}{R_{mas}^{m-1}} - \frac{1}{R_{ext}^{m-1}} \right)$$

$$N = \frac{\tau_\lambda \left(\frac{1}{R_{mas}^{m-1}} - \frac{1}{R_{ext}^{m-1}} \right)}{Q_{ext,\lambda} \left[\left(\frac{1}{R_{int}^{m-1}} - \frac{1}{R_{ext}^{m-1}} \right) \right]} . \quad (4.2)$$

Com base na expressão (4.2), acima, podemos calcular os valores de N para os dois modelos de cada uma das fontes e comparar os resultados obtidos. A Tabela 4.4 contém

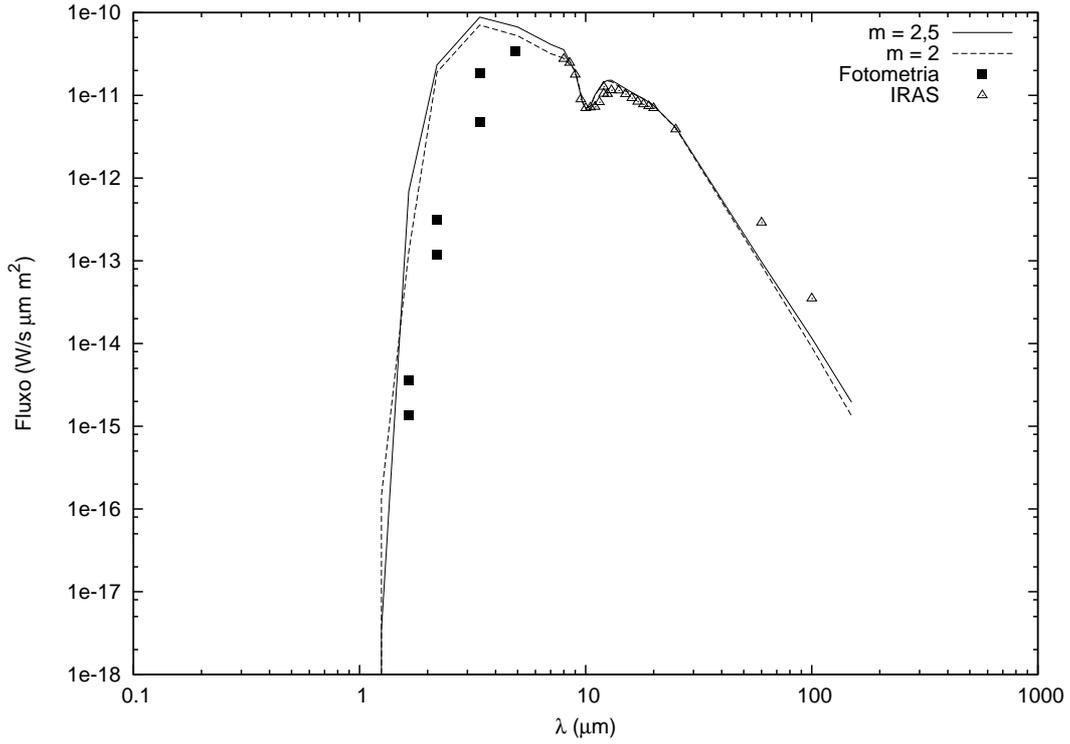


Figura 4.7: Os dois modelos ($m = 2$ e $m = 2,5$) para a fonte OH 338.1 + 6.0 ajustados às observações IRAS.

as razões entre os valores de N encontrados para os modelos com $m = 2$ e $m = 2,5$, $N(2)/N(2,5)$. Os valores N_1 e N_2 se referem à grandeza N medida respectivamente em relação a dois valores para R_{mas} : $0,9 R_{ext}$ e $0,8 R_{ext}$.

Os resultados apresentados mostram que os modelos com $m = 2$ apresentam maior proteção dos grãos contra fótons provenientes do MI. Apesar destes modelos possuírem profundidades ópticas sistematicamente menores, os valores, também sistematicamente, maiores do raio interno e o fato de os grãos estarem mais diluídos pelo envoltório sobrepõem a contribuição da profundidade óptica para o valor de N .

Outra quantidade de interesse é a densidade de matéria na forma de grãos na região onde se espera que o maser seja formado ($\approx 0,85 R_{ext}$). Podemos calcular este valor a partir das equações expostas acima. Para isso, calculamos primeiramente a densidade numérica de grãos em $r = 0,85 R_{ext}$, isolando N_0 na Equação (3.17) e substituindo esta expressão em:

$$n(r) = \frac{N_0}{r^m}. \quad (4.3)$$

Portanto, temos que, para uma dada fonte, podemos calcular a razão, q , entre as

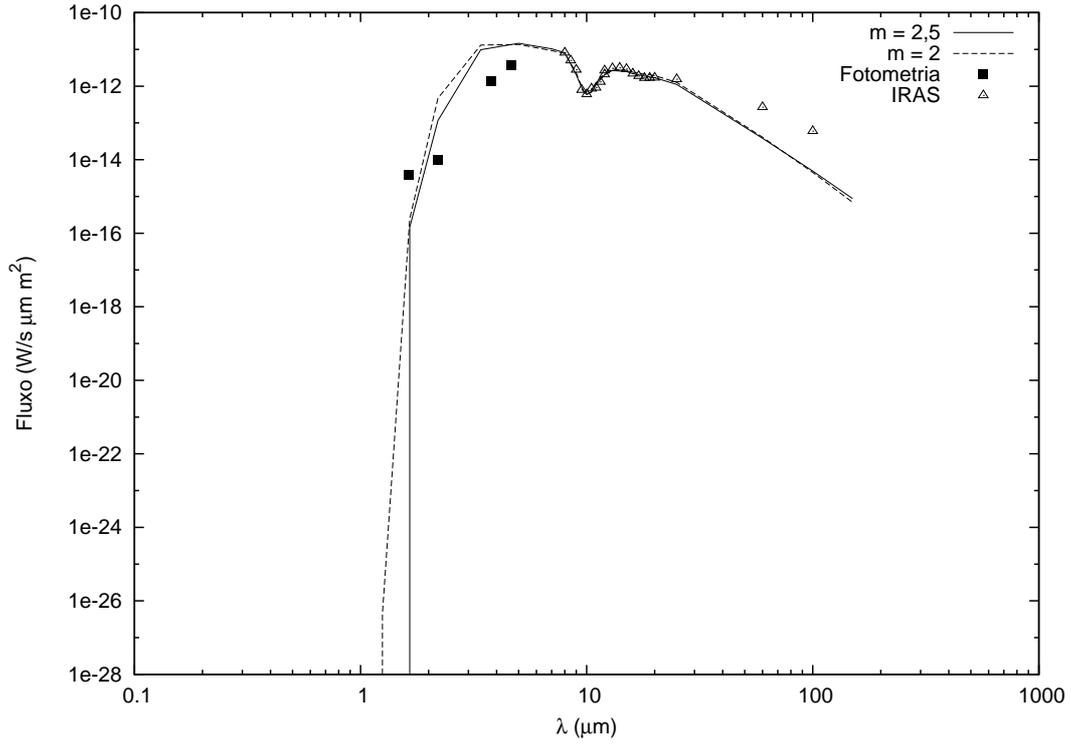


Figura 4.8: Os dois modelos ($m = 2$ e $m = 2,5$) para a fonte OH 344.9+0.01 ajustados às observações IRAS.

Tabela 4.4: Valores das razões entre as densidades de coluna nos dois modelos, para $R_{mas} = 0,9 R_{ext}$, N_1 , e $R_{mas} = 0,8 R_{ext}$, N_2 .

Nome	$N_1(2)/N_1(2,5)$	$N_2(2)/N_2(2,5)$
AFGL 230	14,34	13,90
AFGL 1822	17,71	17,16
AFGL 2205	16,67	16,15
AFGL 2885	14,29	13,85
AFGL 5356	14,68	14,23
AFGL 5379	17,87	17,32
AFGL 5535	15,81	15,33
OH 138.0+7.2	18,93	18,35
OH 338.1+6.	11,28	10,93
OH 344.9+.01	30,77	29,81

densidades de grãos dos dois modelos em $r = 0,85 R_{ext}$:

$$q = \frac{n(r = 0,85 R_{ext}, m = 2)}{n(r = 0,85 R_{ext}, m = 2,5)} = \frac{N_0(m = 2) (0,85 R_{ext})^{2,5}}{(0,85 R_{ext})^2 N_0(m = 2,5)}. \quad (4.4)$$

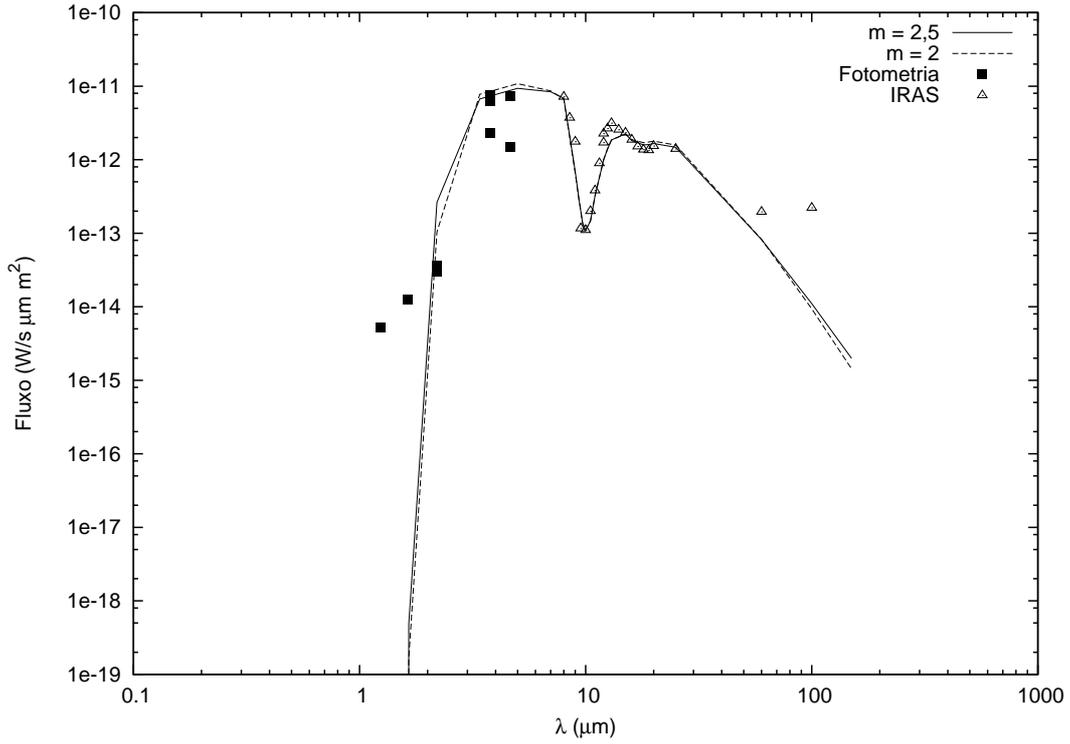


Figura 4.9: Os dois modelos ($m = 2$ e $m = 2,5$) para a fonte AFGL 5356 ajustados às observações IRAS.

Ficamos, então, com:

$$q = 0,92 \frac{N_0(m=2)}{N_0(m=2,5)} R_{ext}^{0,5} = 0,62 \frac{\tau_2}{\tau_{2,5}} \frac{a_{2,5}^2 Q_{ext2,5} \left[\frac{1}{R_{int}^{1,5}} - \frac{1}{R_{ext}^{1,5}} \right]}{a_2^2 Q_{ext2} \left[\frac{1}{R_{int}} - \frac{1}{R_{ext}} \right]} R_{ext}^{0,5}. \quad (4.5)$$

Para chegarmos à razão entre as quantidades de matéria na forma de grãos para os dois modelos, temos que assumir que a densidade dos grãos é igual para os dois modelos, de forma que:

$$\frac{m_a}{m_{a'}} = \frac{\rho}{\rho'} \frac{\frac{4\pi a^3}{3}}{\frac{4\pi a'^3}{3}} = \frac{a^3}{a'^3}, \quad (4.6)$$

onde m_a é a massa de 1 grão.

A partir das Equações (4.5) e (4.6) chegamos à expressão para a razão entre as densidades de matéria na forma de grãos dos dois modelos de uma dada fonte, q_m :

$$q_m = \frac{m_a}{m_{a'}} q = \frac{a^3}{a'^3} q, \quad (4.7)$$

e o resultado obtido está apresentado na Tabela 4.5.

É interessante avaliar a razão das densidades de massa na forma de grãos na região de formação do maser para os dois modelos, q_m , pois este valor está intimamente ligado

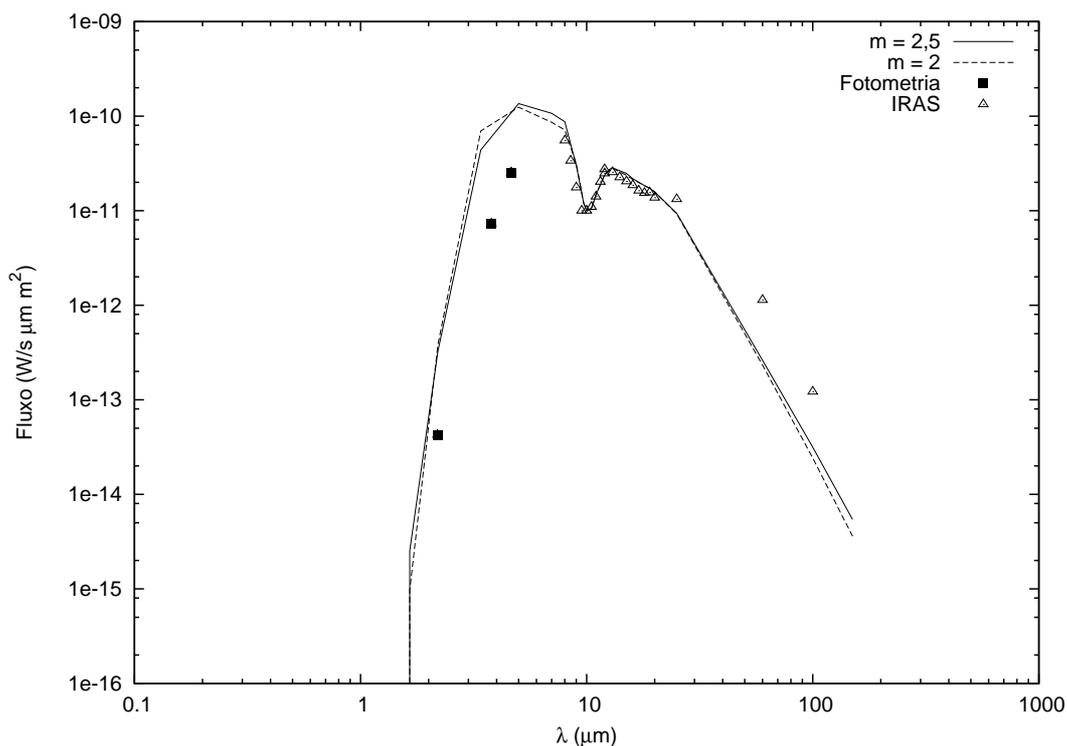


Figura 4.10: Os dois modelos ($m = 2$ e $m = 2,5$) para a fonte AFGL 5379 ajustados às observações IRAS.

Tabela 4.5: Valores para a razão entre as densidade de massa na forma de grãos na região de formação do maser ($r = 0,85 R_{ext}$).

Nome	q_m
AFGL 230	15,06
AFGL 1822	16,78
AFGL 2205	15,78
AFGL 2885	13,53
AFGL 5356	13,90
AFGL 5379	16,93
AFGL 5535	14,98
OH 138.0+7.2	17,93
OH 338.1+6.	13,70
OH 344.9+.01	18,13

à densidade da molécula de OH na mesma região. Assumindo que a fração de matéria condensada na forma de grãos, f , é independente da densidade do meio no momento da

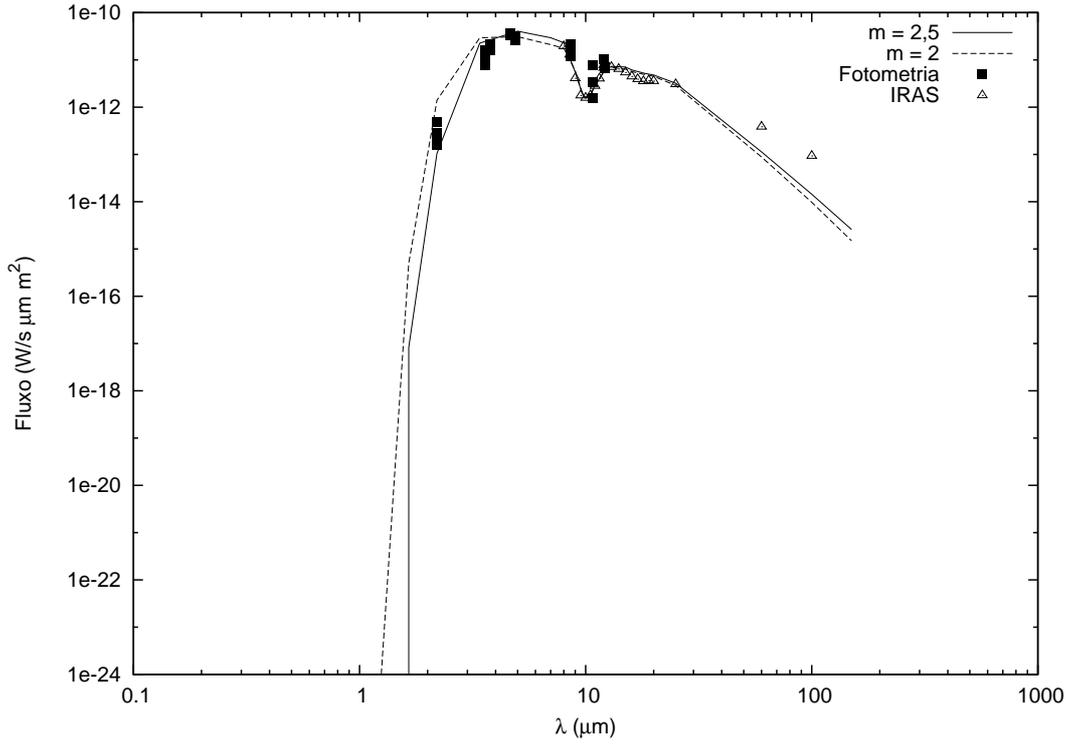


Figura 4.11: Os dois modelos ($m = 2$ e $m = 2,5$) para a fonte AFGL 2205 ajustados às observações IRAS.

formação dos mesmos, temos que a densidade de matéria na fase gás também apresenta a mesma variação expressa por q_m .

Na verdade, é esperado que f dependa da taxa de perda de massa no momento da condensação. Portanto, apesar de nossos resultados indicarem que a densidade de moléculas de OH também seria substancialmente diferente para os dois modelos de cada fonte, só é possível quantificar esta diferença com base em modelos que considerem os problemas da condensação dos grãos e da evolução da abundância de OH.

Podemos calcular ainda a razão entre as quantidades totais de matéria do envoltório na forma de grãos, q_G , para os dois modelos de cada uma das fontes. Partindo da expressão para N_0 , calculamos a quantidade total de grãos, G , integrando a densidade dos mesmos em todo o envoltório, desta forma:

$$G = \int_{R_{int}}^{R_{ext}} 4\pi r^2 \frac{N_0}{r^m} dr = 4\pi N_0 \frac{1}{3-m} [R_{ext}^{3-m} - R_{int}^{3-m}]. \quad (4.8)$$

Para calcular a massa total contida no envoltório na forma de grãos, M_G , multiplicamos a quantidade G pela massa de cada grãos, desta forma:

$$M_G = \frac{4}{3}\pi a^3 \rho G = \frac{16}{3}\pi^2 a^3 \rho N_0 \frac{1}{3-m} [R_{ext}^{3-m} - R_{int}^{3-m}] \quad (4.9)$$

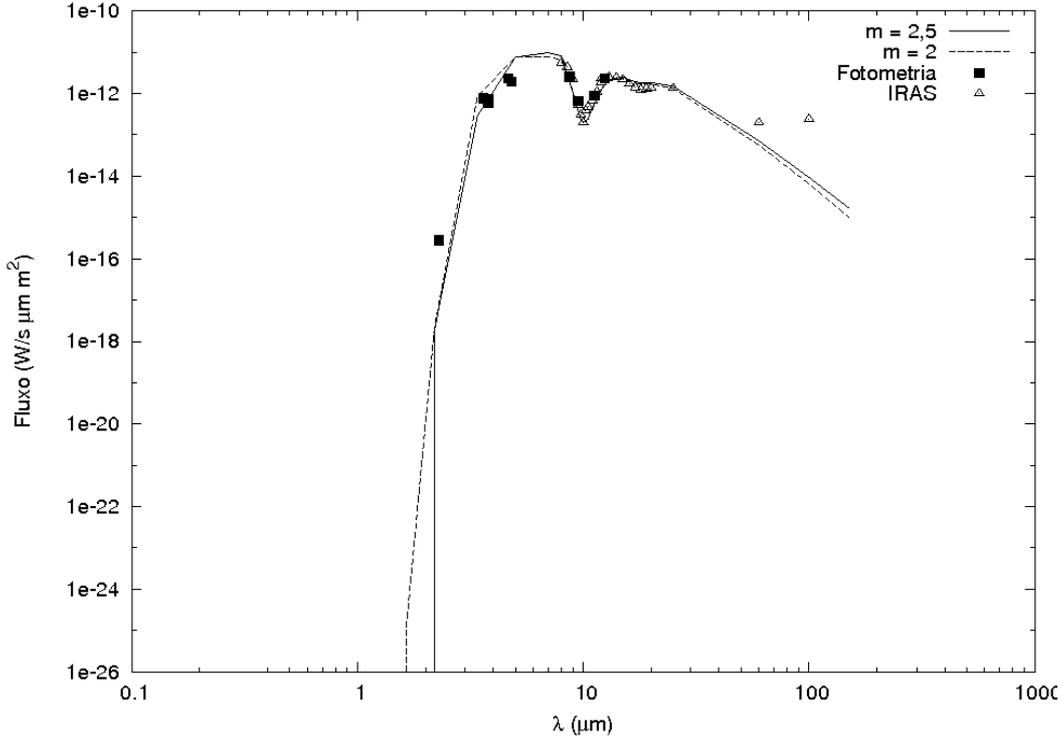


Figura 4.12: Os dois modelos ($m = 2$ e $m = 2,5$) para a fonte AFGL 5535 ajustados às observações IRAS.

Podemos calcular, então, a razão q_G , dada por: $q_G = M_G(m = 2)/M_G(m = 2,5)$.

Ficamos, então, com:

$$q_G = \frac{M_G(m = 2)}{M_G(m = 2,5)} = \frac{1}{2} \frac{a_2^3 \rho_2}{a_{2,5}^3 \rho_{2,5}} \frac{N_0(m = 2) [R_{ext} - R_{int}]}{N_0(m = 2,5) [R_{ext}^{0,5} - R_{int}^{0,5}]} \quad (4.10)$$

$$q_G = 0,75 \frac{R_{ext2} - R_{int2}}{R_{ext2,5}^{0,5} - R_{int2,5}^{0,5}} \frac{\tau_2 a_2 \rho_2}{\tau_{2,5} a_{2,5} \rho_{2,5}} \frac{Q_{ext2,5}}{Q_{ext2}} \frac{\left[\frac{1}{R_{int2,5}^{1,5}} - \frac{1}{R_{ext2,5}^{1,5}} \right]}{\left[\frac{1}{R_{int2}} - \frac{1}{R_{ext2}} \right]}. \quad (4.11)$$

Considerando que a densidade dos grãos não depende do tamanho dos mesmos, chegamos à expressão que nos dá q_G em função dos parâmetros de entrada:

$$q_G = 0,75 \frac{R_{ext2} - R_{int2}}{R_{ext2,5}^{0,5} - R_{int2,5}^{0,5}} \frac{\tau_2 a_2}{\tau_{2,5} a_{2,5}} \frac{Q_{ext2,5}}{Q_{ext2}} \frac{\left[\frac{1}{R_{int2,5}^{1,5}} - \frac{1}{R_{ext2,5}^{1,5}} \right]}{\left[\frac{1}{R_{int2}} - \frac{1}{R_{ext2}} \right]}. \quad (4.12)$$

Os resultados dos cálculos de q_G são apresentados na Tabela 4.6.

Este resultado demonstra que todos os modelos que possuem $m = 2,5$ apresentam menor quantidade de massa na forma de grãos no envoltório. Se considerarmos que a fração da massa total do envoltório que se condensa, f , independe da densidade no momento da condensação, os valores de q_G representam também a razão na

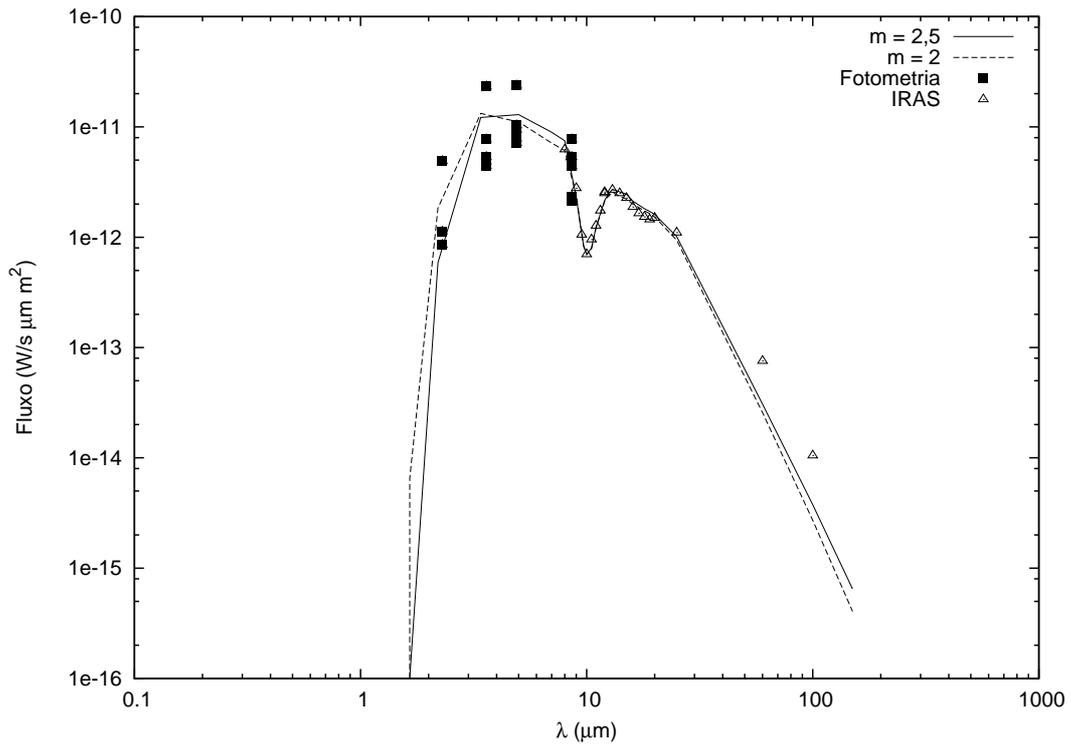


Figura 4.13: Os dois modelos ($m = 2$ e $m = 2,5$) para a fonte AFGL 2885 ajustados às observações IRAS.

Tabela 4.6: Valores para a razão entre as quantidades totais de massa no envoltório na forma de grãos.

Nome	q_G
AFGL 230	13,00
AFGL 1822	14,34
AFGL 2205	13,50
AFGL 2885	11,71
AFGL 5356	12,22
AFGL 5379	14,49
AFGL 5535	12,90
OH 138.0+7.2	15,39
OH 338.1+6.	11,86
OH 344.9+.01	13,17

quantidade total de massa para os cenários representados para cada fonte pelos dois modelos. Entretanto, não é esperado que isso ocorra de fato. Neste caso, conforme

senalizado anteriormente, é necessário utilizar um modelo que trate, além do problema da transferência radiativa, a condensação dos grãos e dinâmica do envoltório.

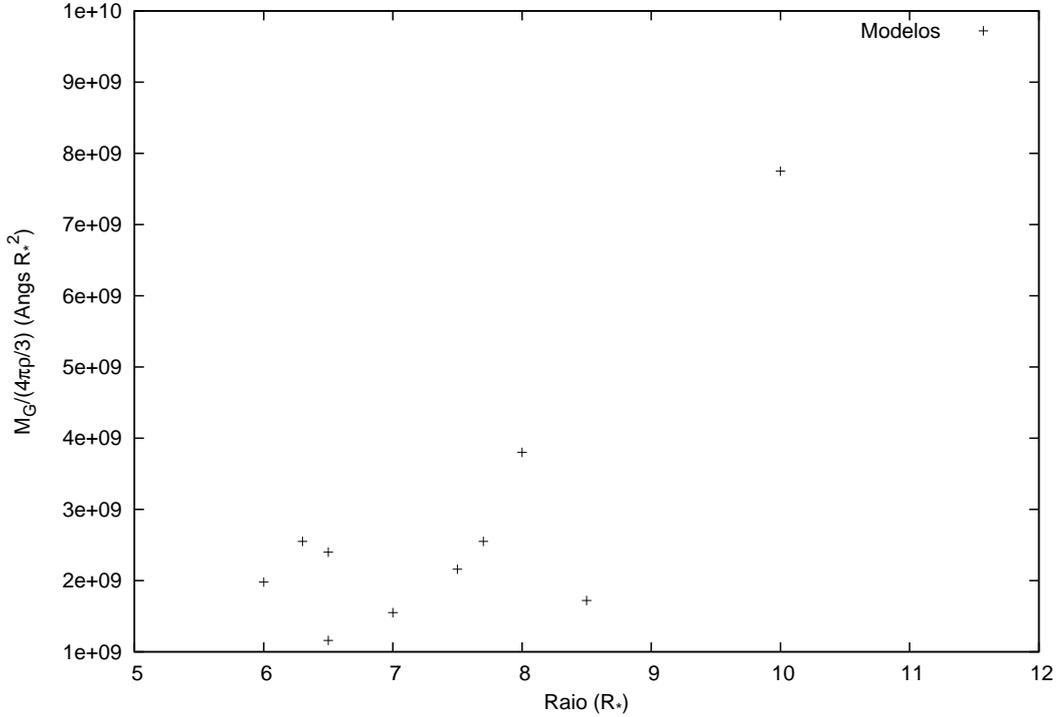


Figura 4.14: Quantidade total de massa na forma de grãos relacionada com o parâmetro raio interno dos modelos. Foram considerados todos os modelos com $m = 2$.

A quantidade de massa na forma de grãos também depende de outros parâmetros de forma importante, principalmente da profundidade óptica (Figura 4.15) do envoltório. Podemos observar, como esperado, que a quantidade total de massa na forma de grãos aumenta proporcionalmente à com a profundidade óptica. No caso do parâmetro R_{int} (Figura 4.14), essa dependência não apresenta uma clara tendência, como no caso anterior. Desta forma, devemos observar que o expoente m é apenas um dos fatores que determina o valor de M_G e das outras grandezas calculadas aqui. E, apesar de demonstrarmos a importância do índice m para a caracterização da estrutura das fontes analisadas, é fundamental lembrar que nenhuma conclusão pode ser obtida com base apenas neste parâmetro.

As diferenças na massa total contida na forma de grãos nos envoltórios dos dois modelos para cada objeto também tem um importante impacto na massa total que é ejetada no MI pelas estrelas do RAG. A determinação precisa deste expoente é, portanto, extremamente necessária para os estudos deste objetos e não pode ser conseguida

apenas através da modelagem da transferência radiativa nos envoltórios de poeira.

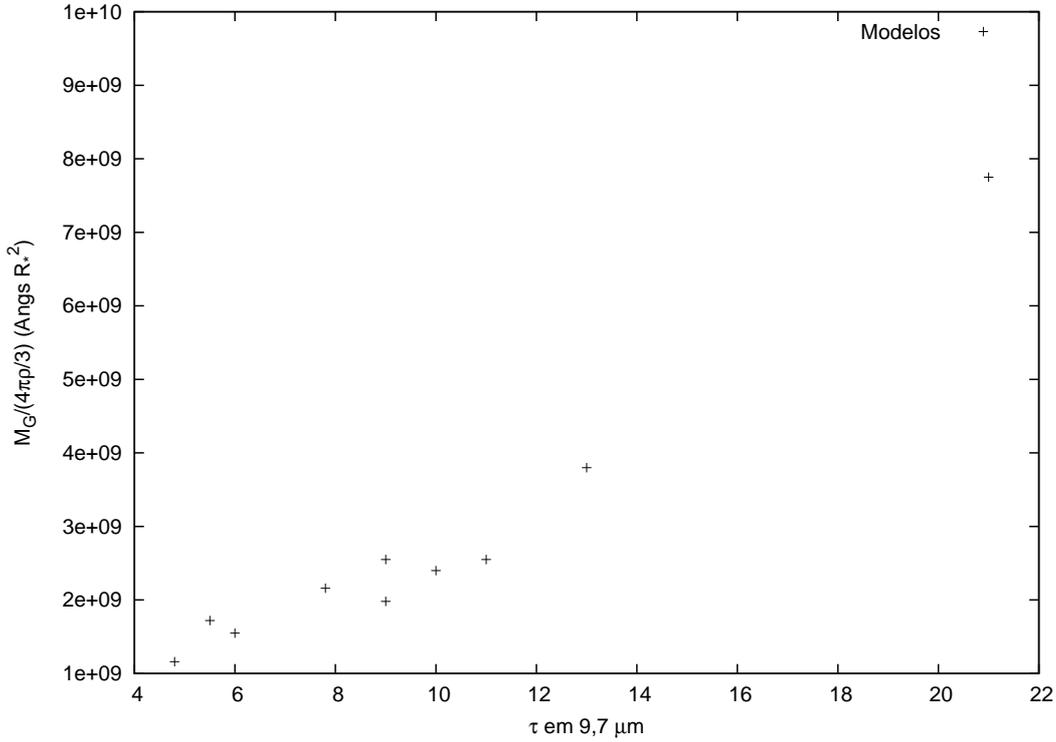


Figura 4.15: Quantidade total de massa na forma de grãos relacionada com o parâmetro profundidade óptica dos modelos. Foram considerados todos os modelos com $m = 2$.

4.4 Conclusões

Todos os objetos OH/IR modelados anteriormente por Lorenz-Martins & Araújo (1997) com $m = 2, 5$ foram re-modelados com sucesso considerando $m = 2$. Os novos modelos apresentam profundidades ópticas maiores, com exceção de um caso, e raios internos maiores. Calculamos diversas razões entre quantidades dos dois modelos de cada fonte a fim de compreender a diferença entre as duas estruturas encontradas. Podemos apontar que:

- A comparação entre as densidades de coluna percebidas por um fóton do MI que penetra o envoltório indicam que os modelos com $m = 2, 5$ apresentariam uma proteção menor dos grãos contra fótons UV do MI.
- As densidades de matéria na forma de grãos na região de formação do maser são bem maiores para os modelos com $m = 2$, o que nos leva a concluir que a

densidade de moléculas de OH também seria substancialmente diferente.

- A massa total do envoltório na forma de grãos é maior para os modelos com $m = 2$. Este fato, associado ao ponto anterior, sugere que taxas de perda de massa derivadas a partir de modelos com $m > 2$ seriam mais condizentes àqueles encontrados a partir da modelagem de emissões moleculares.

É importante ressaltar, contudo, que os resultados obtidos aqui não permitem tirar conclusões sobre a atividade do maser nos objetos modelados. O que podemos afirmar é que não é possível determinar a estrutura de um envoltório de forma única exclusivamente a partir da modelagem da transferência radiativa através dos grãos. Com os modelos apresentados aqui, podemos concluir que distribuições de matéria produzidas por taxas de perda de massa que aumentam com o tempo poderiam explicar igualmente bem as DEE destes objetos, mas apresentariam uma diferença muito importante na proteção oferecida pelos grãos nas partes mais externas dos envoltórios. Este último fato poderia dificultar a formação do maser de 1612 MHz, que sabidamente só ocorre em fontes com envoltórios muito densos.

Para tirar conclusões sobre a existência ou não do maser de 1612 MHz nas fontes em questão, seria necessária uma modelagem detalhada de um envoltório com taxa de perda de massa aumentando com o tempo considerando: o problema da formação de grãos; a evolução da abundância da molécula de OH a medida que o envoltório se expande; e transferência radiativa no envoltório, com a consequente eficiência de bombeamento do maser.

A quantidade total de massa ejetada no MI na forma de grãos pelos objetos do RAG também sofre uma mudança de aproximadamente uma ordem de grandeza entre os diferentes modelos. Desta forma, a consideração de envoltórios com perda de massa aumentando com o tempo pode ter implicações importantes também para a dinâmica e evolução do MI.

Capítulo 5

Modelagem de observações ISO com o MonRaT

5.1 Introdução

No final da década de 60, as primeiras observações no IV ($\lambda > 5 \mu m$) revelaram excesso de emissão de estrelas do tipo M5 e mais tardias. Esta luminosidade excedente foi atribuída à presença de grãos circumstelares nestes objetos. Em 1968 e 1969, Gillet e colaboradores e Woolf & Ney, respectivamente, identificaram uma banda de emissão em torno de $10 \mu m$, nos espectros destes objetos, sendo produzida por grãos de silicatos. As características observadas correspondiam àquelas de grãos amorfos, mas a existência de silicatos cristalinos foi prevista por Gilman (1969). Enquanto os silicatos amorfos apresentam bandas alargadas, os silicatos cristalinos apresentam bandas estreitas, mas similarmente ao silicato amorfo, tais características podem estar em emissão ou absorção.

Desde os primórdios do estudo dos envoltórios circumstelares, a presença dos grãos de silicatos já era, então, conhecida. As observações espectroscópicas destes objetos não permitiam, entretanto, identificar a presença de silicatos cristalinos, devido à baixa resolução e ao intervalo espectral reduzido das mesmas. Este fato mudou, porém, com as observações realizadas pelo satélite ISO, conforme discutido por Waters et al. (1996).

Os silicatos são compostos formados por Silício e Oxigênio combinados com diversos metais, como: Magnésio, Ferro, Cálcio, Alumínio etc. A temperatura no momento de

condensação dos grãos determina se estes serão amorfos ou cristalinos. Os cristalinos possuem estrutura organizada e precisam de maior quantidade de energia para que esta configuração possa ser atingida (Molster & Kemper 2005). Os amorfos, por sua vez, não possuem uma estrutura definida e as moléculas se posicionam de forma aleatória. Os silicatos amorfos podem ser transformados em cristalinos se forem aquecidos acima da temperatura de cristalinização (T_{crist}) e os cristalinos podem ser amorfizados por colisões com outros grãos ou com raios cósmicos.

Os silicatos cristalinos podem ser identificados pois apresentam diversas características, em $\lambda > 25 \mu m$, além das características proeminentes em 9,7 e 18 μm , também produzida pelos silcatos amorfos. As ressonâncias observadas em 9,7 e 18 μm são produzidas pelo modo de alongamento da ligação Si-O e pelo de flexão da ligação O-Si-O, respectivamente. Os silicatos amorfos apresentam estas duas características mais alargadas, enquanto nos cristalinos elas se apresentam mais estreitas. Já as ressonâncias observadas exclusivamente nos silicatos cristalinos são criadas por modos produzidos devido às estruturas ordenadas, como pode ser observado na Figura 5.1. Estes modos são diferentes para cada tipo de grão cristalino e permitem a identificação da composição do sólido responsável pela característica (Waters et al. 1996).

Os silicatos cristalinos encontrados nas observações ISO dos objetos do RAG são piroxênios e olivinas constituídos por uma mistura de Ferro e Magnésio. Os piroxênios possuem fórmula geral do tipo: $Fe_{2-a}Mg_aSi_2O_6$; e as olivinas, por sua vez:

$Fe_{2-a}Mg_aSiO_4$. O parâmetro a , das fórmulas químicas anteriores, pode variar entre 0 (composição sem Mg, piroxênios: ferrosilita, e olivinas: faialita) e 2 (composição sem Ferro, piroxênios: enstatita, e olivinas: forsterita). O valor de a determina a razão Mg/Fe da constituição dos silicatos. Este valor pode variar de um objeto para outro e a determinação do mesmo também é uma importante informação para a compreensão dos processos que envolvem os grãos nas estrelas do RAG.

Os espectros ISO de objetos OH/IR foram analisados por Sylvester et al. (1999), e as características espectrais aparecem em absorção, tal como as caraterísticas espectrais devido ao silicato amorfo. Os autores consideraram dois cenários para a geometria dos envoltórios: esfericamente simétrica e axi-simétrica. As observações indicam ainda que os silicatos cristalinos das estrelas do RAG, são compostos principalmente por Magnésio e que possuem uma quantidade de Ferro menor do que o esperado. A presença de Ferro

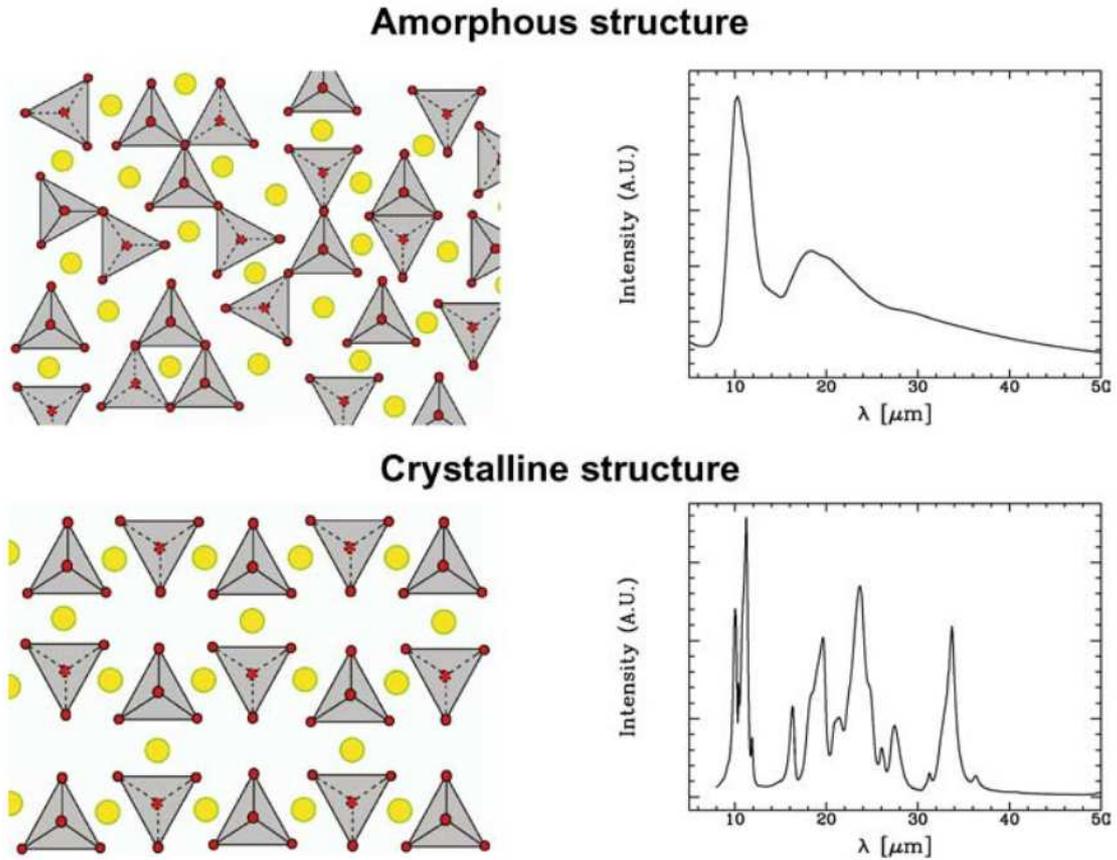


Figura 5.1: Exemplo de diferença entre a estrutura dos grãos amorfos e cristalinos e dos espectros associados a cada tipo de grão. Os tetraedros representam quatro átomos de Oxigênio dispostos em torno de um átomo de Silício e os círculos amarelos, metais que compõem o grão. Adaptado de Molster & Kemper (2005).

nos silicatos aumenta a seção de choque dos mesmos na região do visível e do IV próximo e, portanto, aumenta a quantidade de energia absorvida pelos grãos.

Os silicatos cristalinos foram descobertos apenas naquelas estrelas que possuem altas taxas de perda de massa. Kemper et al. (2001) argumentam que a ausência das características dos silicatos cristalinos em fontes com envoltórios menos espessos pode ser explicada pela fraqueza dessas características quando comparadas às dos silicatos amorfos. Os autores concluíram que é possível incluir grandes quantidades de silicatos cristalinos nos modelos, sem que estes sejam percebidos no espectro.

A fração de silicatos com estrutura cristalina nos envoltórios de estrelas do RAG ainda é alvo de debate. Esta quantidade certamente varia de uma fonte para outra, mas é em geral da ordem de 10% (Molster & Kemper, 2005). Kemper et al. (2001)

obtiveram a fração de silicatos cristalinos em diversas fontes comparando as características observadas em espectros ISO com modelos calculados. Os resultados dos autores indicam que os silicatos representam 5% da massa de grãos. Por sua vez, Suh & Kim (2002) calcularam modelos para duas estrelas OH/IR e sugerem que a presença de silicatos cristalinos deve ser da ordem de 20% para explicar as características observadas. Mais recentemente, de Vries et al. (2010) fizeram uma análise similar àquela realizada por Kemper et al. (2001) e encontram que os silicatos cristalinos podem responder por mais de 12% da composição dos grãos de seis estrelas do RAG.

Há, porém, evidência de que a presença de silicatos cristalinos esteja associada a existência de disco circunstelar nas fontes (Molster et al. 1999). Este fato pode dificultar a modelagem destes objetos, já que o programa utilizado por nós considera simetria esférica do envoltório.

As estrelas OH/IR são frequentemente modeladas a partir de cálculos de envoltórios compostos exclusivamente de silicatos, amorfos e/ou cristalinos. Entretanto, os cálculos das depleções dos átomos que formam os grãos indicam que estes modelos requerem uma quantidade de Silício até duas vezes maior do que deve estar disponível para compor os mesmos (Snow & Witt 1996). Trabalhos recentes indicam há uma quantidade importante de grãos oxigenados no MI constituídos de Óxidos de Ferro e Magnésio, sem Silício (e.g. Voshchinnikov & Henning 2010).

Em geral, a modelagem dos envoltórios de estrelas do RAG oxigenadas tem como principal objetivo ajustar a característica em $9,7 \mu m$, provocada pelos silicatos. Apesar de estes grãos serem sempre a espécie dominante nos modelos de envoltórios oxigenados, também espera-se encontrar outros tipos de grãos, que são por vezes incluídos em modelagens, como grãos de: Ferro (Kemper et al., 2002), Al_2O_3 (Maldoni et al., 2005), $MgFeO$ (Posch et al., 2002).

Uma das principais dificuldades da modelagem dos envoltórios dos objetos OH/IR é reproduzir simultaneamente a característica de $9,7 \mu m$ e a região entre 12 e $25 \mu m$, como podemos constatar nas Figuras 5.2, 5.3 e 5.4. Este fato levou alguns autores a postular mudanças bruscas na taxa de perda de massa (Justtanont et al., 1996). Entretanto, por observarmos esta mesma dificuldade em todos os objetos, não acreditamos que esta suposição seja adequada para resolvê-la.

Nesta seção apresentamos modelagens de seis objetos OH/IR observados pelo satélite

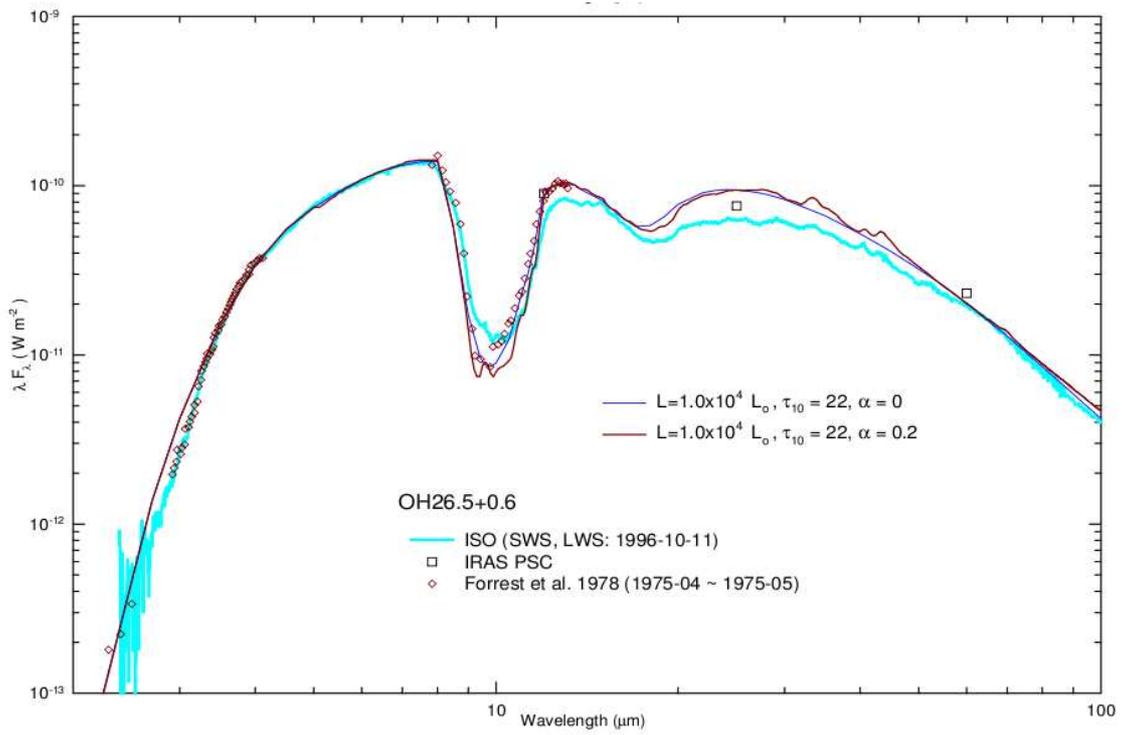


Figura 5.2: Modelo calculado por Suh et al. (2002) para a estrela OH 26.5 +0.6.

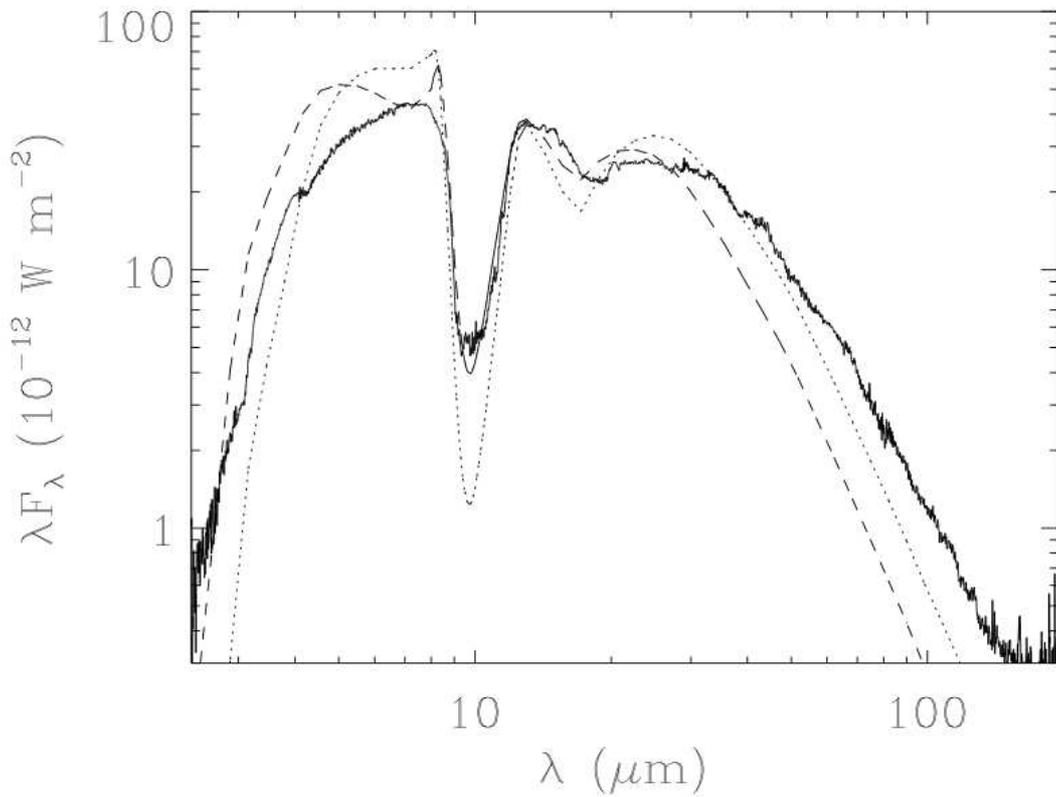


Figura 5.3: Modelo calculado por Kemper et al. (2002) para a estrela OH 127.8+0.0.

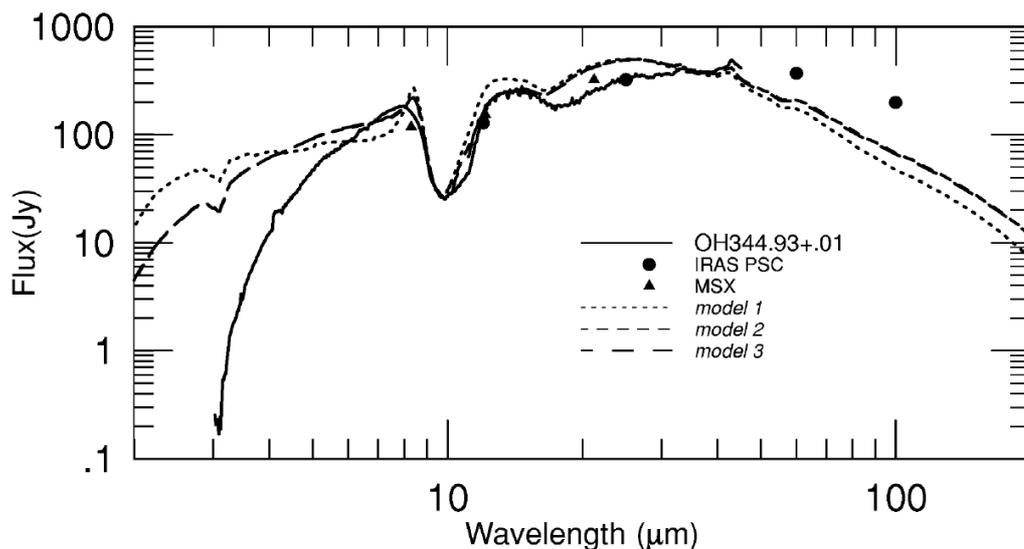


Figura 5.4: Modelo calculado por Maldoni et al. (2005) para a estrela OH 344.9+0.01.

ISO. Utilizamos o código MonRaT e consideramos envoltórios compostos por grãos de silicato amorfo, silicato cristalino (forsterita, Mg_2SiO_4), ferro e $Mg_{0,6}Fe_{0,4}O$. Utilizamos as constantes ópticas dadas por: David & Pegourié (1995), para silicatos amorfos; Jäger et al. 1998, para forsterita; Ordal et al. (1988), para ferro; e Henning et al. (1995), para $Mg_{0,6}Fe_{0,4}O$.

5.2 Resultados

Nós realizamos as modelagens com os compostos identificados acima com três objetivos principais: (i) verificar se os grãos de Ferro podem ser constituintes do envoltório das estrelas OH/IR; (ii) encontrar a fração de forsterita do envoltório; e (iii) investigar se modelos com grãos de $Mg_{0,6}Fe_{0,4}O$ podem ajustar a região entre 12 e 25 μm dos espectros.

Cada um destes três tipos de grãos tem maior influência em partes distintas do espectro, como descrevemos a seguir:

- Ferro - Possuem grande opacidade em comprimentos de onda menores (visível e IV próximo), contribuindo para extinguir a radiação estelar nesta região. Este papel também pode ser efetuado por grãos grandes ($\approx 0,5 \mu m$) de silicato, de forma que é difícil determinar estes dois parâmetros (raio dos grãos de silicato e

quantidade de grãos de Ferro) simultaneamente a partir apenas da modelagem de envoltórios de poeira.

- Forsterita - Nos preocupamos principalmente com a influência destes grãos para o ajuste da característica de $9,7 \mu m$.
- $Mg_{0,6}Fe_{0,4}O$ - Esta espécie apresenta uma característica importante em $19,5 \mu m$, que é muito sensível à quantidade de grãos e à temperatura da estrela central, principalmente. Nosso objetivo foi usar este grão para ajustar esta região do espectro.

Os parâmetros para os melhores modelos estão apresentados nas Tabelas 5.1 e 5.2. Na Tabela 5.1 estão listados os valores dos raios interno e externo dos envoltórios, das temperaturas das estrelas centrais, das profundidades ópticas, dos raios dos grãos e do expoente da lei de distribuição dos grãos, m . Os valores do raio externo, do raio dos grãos e do índice m não foram variados. Variações do raio externo influenciam pouco o resultado do modelo e o papel que caberia ao raio dos grãos na modelagem foi realizado pela quantidade de grãos de Ferro. Já o expoente m foi mantido fixo em 2 para evitar a adição de mais um parâmetro livre. A Tabela 5.2 apresenta as frações numéricas de cada espécie de grãos nos melhores modelos de cada objeto.

Tabela 5.1: Parâmetros para os melhores modelos de cada fonte. A primeira coluna contém o nome do objeto; a segunda, o raio interno do envoltório; a terceira, o raio externo; a quarta, a temperatura; a quinta, a profundidade óptica medida em $9,7 \mu m$; a quinta, o raio dos grãos; e a sexta, o valor de m .

Nome	R_{int} (R_{est})	R_{ext} (R_{est})	Temp (K)	τ	a (\AA)	m
IRAS 22177+5936	16	1000	2700	7	1000	2
GLMP 920	10	1000	2600	10,5	1000	2
AFGL 230	10	1000	2500	13	1000	2
AFGL 2205	14	1000	2800	16	1000	2
AFGL 5379	14	1000	2600	7,5	1000	2
AFGL 5535	10	1000	2300	9	1000	2

Tabela 5.2: Composição dos melhores modelos de cada fonte. Os valores são dados em $\frac{n_g}{n_T}$, onde n_g é o número total de um dado tipo de grão e n_T é a quantidade total de grãos.

Nome	Silicato Am.	Silicato Crist.	Ferro	$Mg_{0,6}Fe_{0,4}O$
IRAS 22177+5936	0,57	0,15	0,08	0,20
GLMP 920	0,60	0,10	0,20	0,10
AFGL 230	0,65	0,15	0,05	0,15
AFGL 2205	0,70	0,12	0,10	0,08
AFGL 5379	0,52	0,15	0,25	0,08
AFGL 5535	0,45	0,15	0,25	0,15

As Figuras de 5.5 a 5.9 expõem os melhores modelos encontrados para cada objeto, juntamente com as observações ISO ajustadas. Podemos observar que de uma forma geral, os modelos ajustam bem a característica em $9,7 \mu m$ e a região de comprimentos de onda menores. Entretanto, assim como outros modelos calculados para estrelas OH/IR, a região entre $\lambda = 12 \mu m$ e $\lambda = 25 \mu m$ não é bem reproduzida, com excessão dos modelos para AFGL 5379 e AFGL 5535.

Desta forma, concluímos que os grãos de $Mg_{0,6}Fe_{0,4}O$ não parecem apresentar as características necessárias para explicarem sozinhos a absorção observada na região em torno de $\lambda = 20 \mu m$. Uma alternativa para a testar mais profundamente a presença desta espécie, seria calcular modelos incluindo-a em grãos compostos, associados a silicatos, por exemplo. Entretanto, a partir dos modelos calculados, entendemos que é possível que os envoltórios destes objetos contenham uma quantidade importante desta espécie de grãos.

Os grãos de ferro, por outro lado, se mostraram extremamente eficientes no ajuste nos comprimentos de onda mais curtos (de $\lambda = 2 \mu m$ a $\lambda = 9 \mu m$). Alguns modelos possuem quantidades muito expressivas desta espécie (até 25 %) de forma que esta espécie pode representar uma quantidade importante dos grãos destes objetos. Não é possível, porém, determinar precisamente esta fração a partir deste tipo de modelo, já que também podemos reproduzir o perfil na região de comprimentos de onda mais curtos com o uso de grãos maiores de silicatos.

Para os grãos de forsterita, fomos capazes de determinar valores superiores para

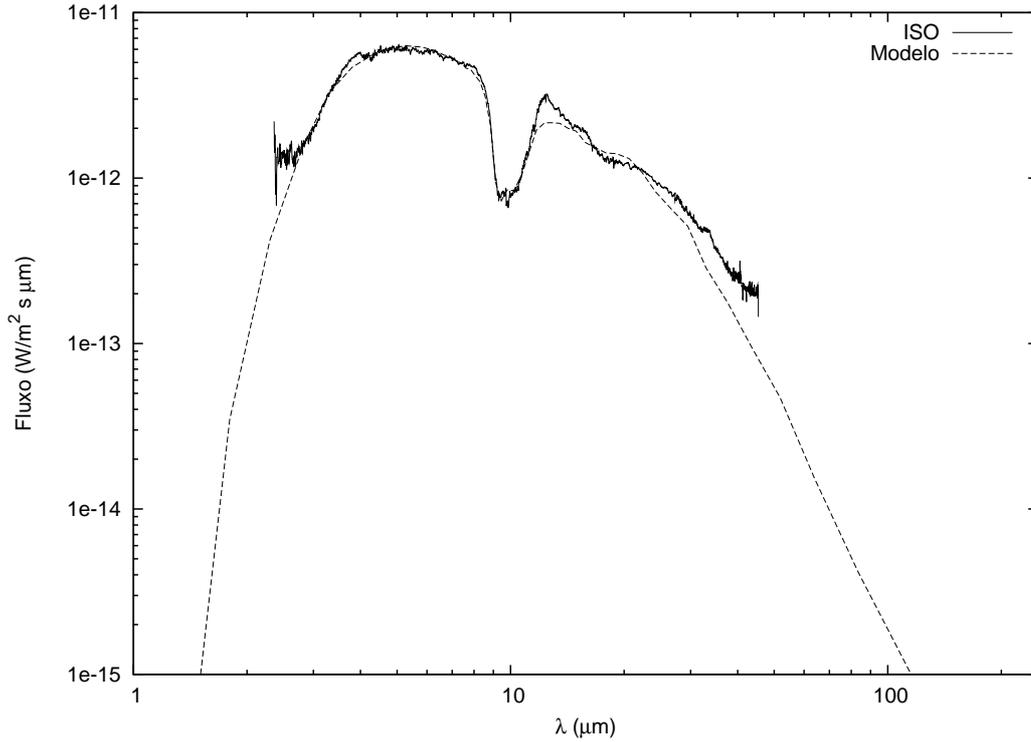


Figura 5.5: Melhor modelo para a fonte IRAS 22177+5936 ajustado à observação ISO.

cada modelo, já que para quantidades de grãos de forsterita maiores do que as apresentadas na Tabela 5.2, o ajuste da característica de $9,7 \mu m$ foi prejudicado. Isto ocorre, pois as características dos silicatos cristalinos são mais finas e conforme aumentamos a quantidade deste tipo de grão, observamos mudanças no perfil da DEE. Um ajuste das características exclusivas dos silicatos cristalinos, que são encontradas em $\lambda > 25 \mu m$, proporcionaria uma estimativa melhor da cristalinidade dos silicatos. Entretanto, esta região dos espectros não é bem reproduzida pelos nossos modelos e um ajuste destas características não foi conseguido. É possível que a inclusão de outras espécies de silicatos cristalinos contribua para a melhora do ajuste nesta região. A provável associação dos silicatos cristalinos com discos circunstelares sugere, ainda, que modelos que consideram simetria esférica do envoltório não devem ser apropriados para descrever estes objetos. Desta forma, pretendemos aplicar o código MonRaT com simetria axial na resolução deste problema quando o mesmo estiver operante. Apesar destas dificuldades, os valores encontrados na literatura, e citados na introdução deste capítulo, estão de acordo com os limites superiores encontrados por nós.

Um outro resultado importante destas modelagens é que fomos capazes de reproduzir a característica de $9,7 \mu m$ dos silicatos mesmo em modelos com quantidade total

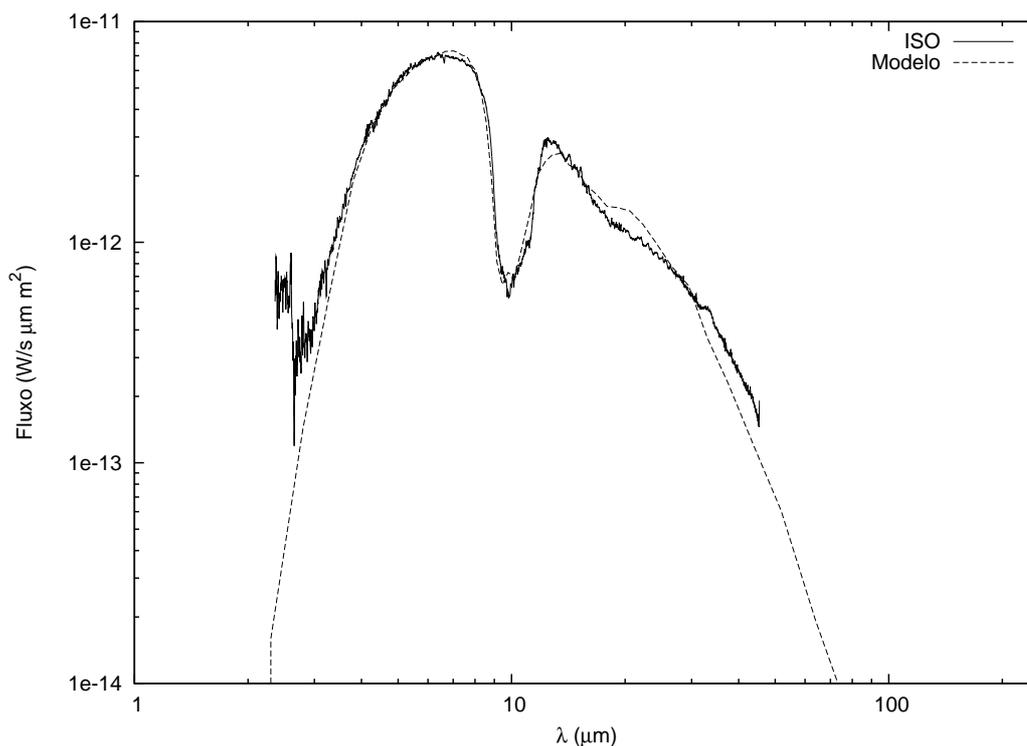


Figura 5.6: Melhor modelo para a fonte GLMP 920 ajustado à observação ISO.

de silicatos (amorfo + cristalino) igual a apenas 60% da quantidade total de grãos. A inclusão de outras espécies de grãos, como Al_2O_3 , por exemplo, pode contribuir para diminuir ainda mais a representatividade dos silicatos. Este fato é interessante, pois, conforme apontado por Snow & Witt (1996), a quantidade de Silício necessária para reproduzir os modelos calculados para estrelas oxigenadas em geral é até duas vezes maior do que deve estar disponível para compor os grãos.

Assim, nossos modelos calculados considerando outras espécies de grãos, além dos silicatos, aproximam-se mais de descrever o complexo cenário encontrados nos envoltórios das estrelas do RAG. Nesse sentido, o novo código apresenta um passo importante no desenvolvimento de modelos para envoltórios circunstelares de poeira.

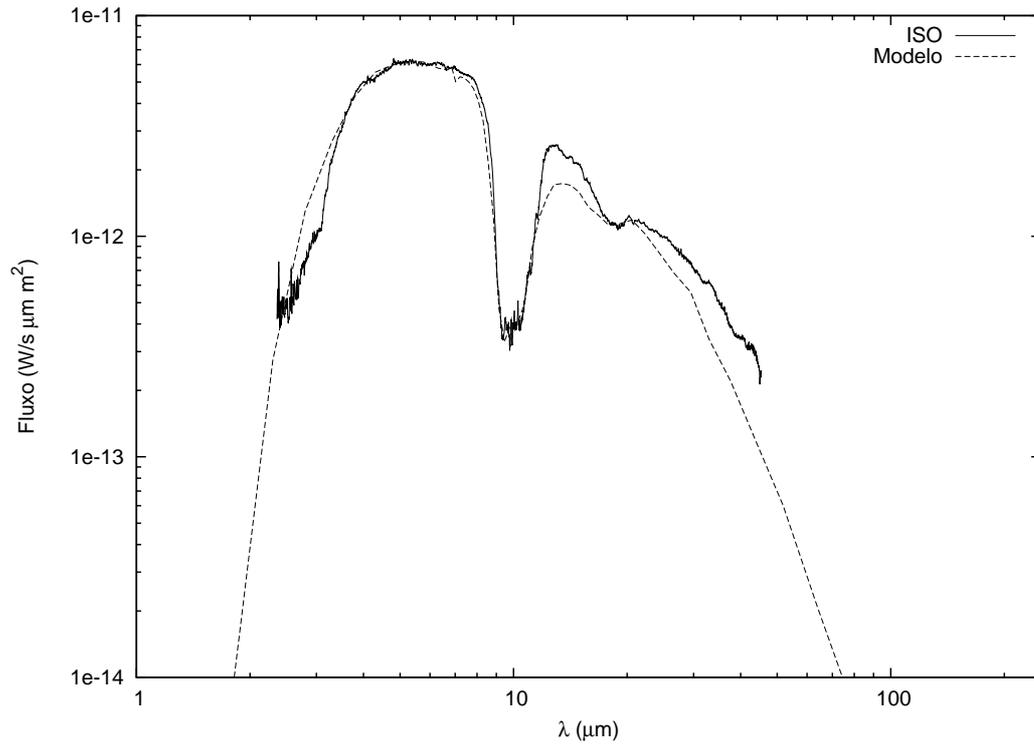


Figura 5.7: Melhor modelo para a fonte AFGL 230 ajustado à observação ISO.

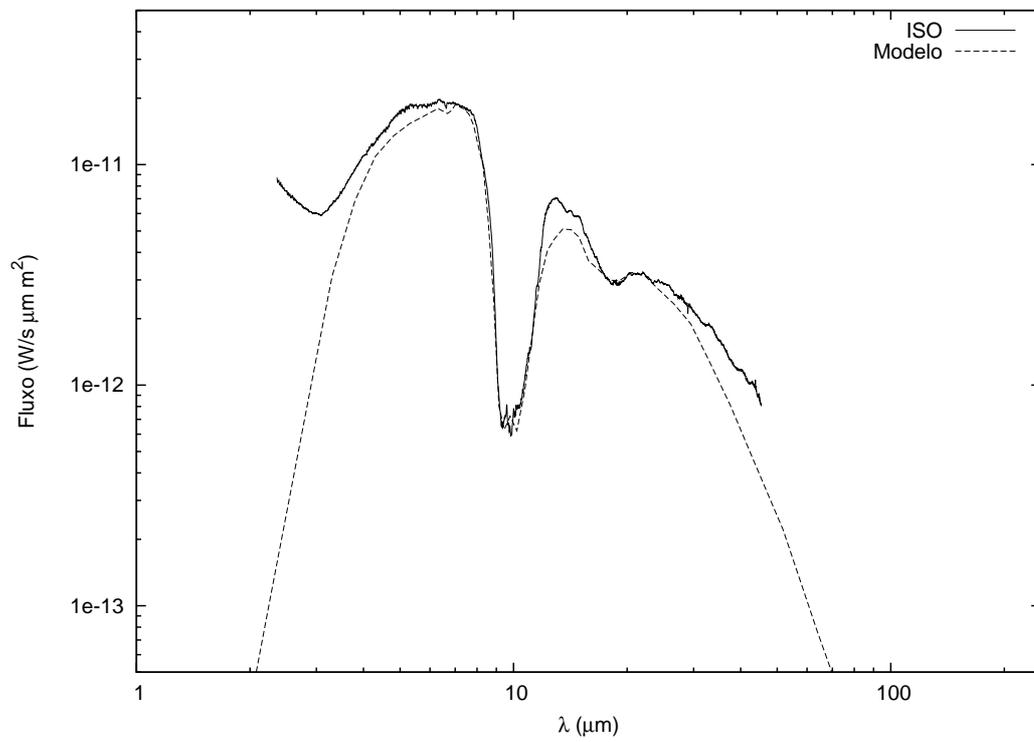


Figura 5.8: Melhor modelo para a fonte AFGL 2205 ajustado à observação ISO.

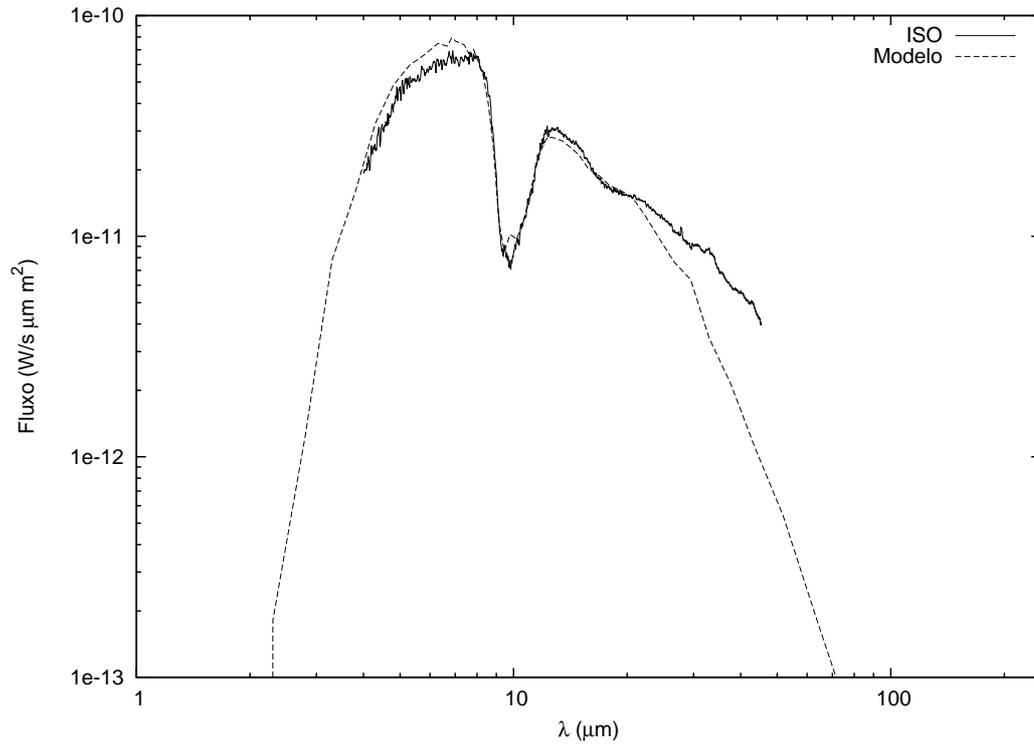


Figura 5.9: Melhor modelo para a fonte AFGL 5379 ajustado à observação ISO.

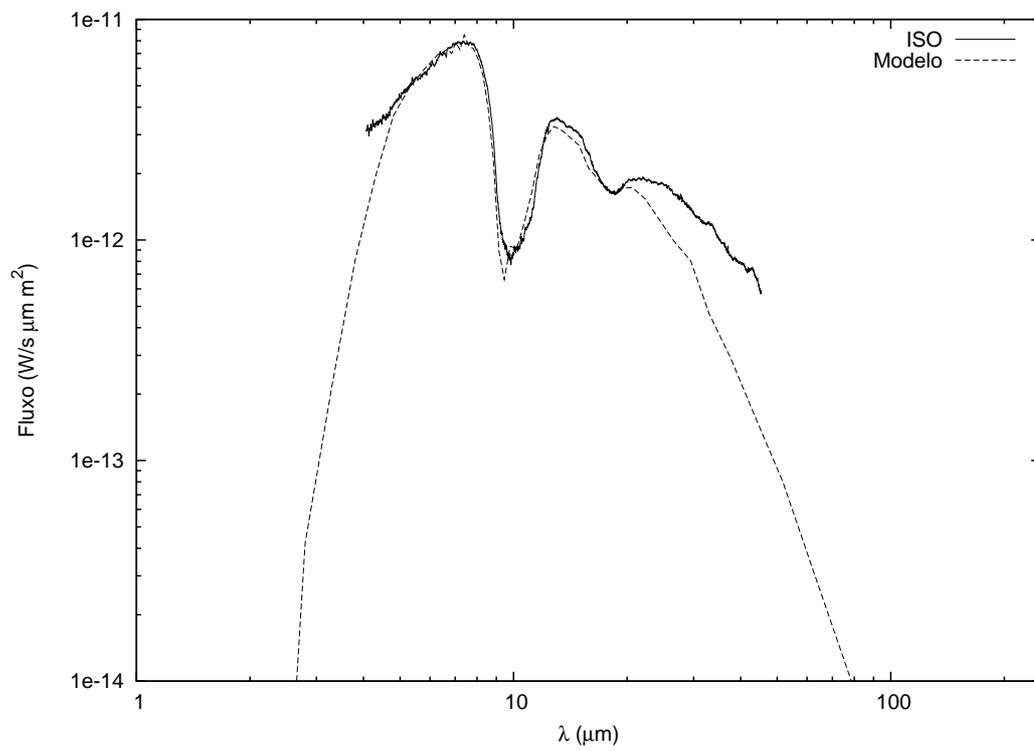


Figura 5.10: Melhor modelo para a fonte AFGL 5535 ajustado à observação ISO.

Capítulo 6

Conclusões e Perspectivas

Apresentamos neste trabalho o código MonRaT, desenvolvido em linguagem C com o objetivo de resolver o problema da transferência radiativa em envoltórios circunstelares de poeira. O código foi escrito por Theo Khouri, em parceria com Andrés Felipe Pérez Sánchez e Alain-Jacques de Burlet e foi baseado em dois códigos anteriores: Radumodi (Lorenz-Martins & de Araújo 1997) e DGST (Lorenz-Martins & Lefèvre 1993). As principais implementações do MonRaT são a possibilidade de considerar simultaneamente diversos tipos de grãos e envoltórios com lei de distribuição de grãos do tipo: $n(r) = n_0/r^m$. O código foi escrito em módulos a fim de facilitar modificações e implementações futuras.

O código foi testado através de comparações com os códigos anteriores, tanto dos resultados finais como dos cálculos intermediários do programa. Os resultados demonstram que o MonRaT é capaz de reproduzir as modelagens realizadas tanto pelo Radumodi como pelo DGST. Primeiramente, implementamos o código considerando apenas simetria esférica do envoltório, mas o módulo necessário para considerar envoltórios com simetria axial já foi escrito. Entretanto, ainda é necessário testar o funcionamento deste módulo comparando os resultados do mesmo com aqueles de códigos que considerem este tipo de simetria e que já estejam estabelecidos na literatura, como o DUSTY, por exemplo.

Utilizando o código Radumodi, realizamos também um estudo da influência do expoente m da lei de distribuição de grãos nos envoltórios de estrelas OH/IR. Para analisarmos os possíveis impactos deste parâmetro para a formação do maser de 1612

MHz, produzido pela molécula de OH, comparamos modelagens realizadas para uma amostra de 10 objetos considerando $m = 2$ e $m = 2,5$. Os nossos resultados indicam que os modelos calculados com $m = 2$ apresentam condições mais favoráveis à formação do maser, tanto devido a uma maior proteção oferecida pelos grãos às moléculas de OH, como por um aumento da densidade na região esperada de formação do maser. Também calculamos a massa total do envoltório na forma de grãos para os dois modelos e concluímos que os modelos com $m = 2,5$ requerem uma menor quantidade de matéria perdida e parecem estar mais de acordo com as observações das transições moleculares. Acredita-se que a taxa de perda de massa seja episódica em objetos no topo do RAG (e.g. Olofsson et al. 1996). Assim, uma explicação para a existência de fontes sem maser de 1612 MHz pode vir justamente deste fato.

O código MonRaT foi aplicado na modelagem de estrelas OH/IR observadas pelo satélite ISO. Consideramos envoltórios constituídos por silicatos amorfos, silicatos cristalinos (forsterita), ferro e $Mg_{0,6}Fe_{0,4}O$. Cada um dos grãos utilizados têm uma influência maior em partes diferentes do espectro, e, portanto, pudemos analisar de forma quase independente a influência de cada grão no espectro final dos objetos. De uma forma geral, os modelos ajustaram bem a característica de $9,7 \mu m$ dos silicatos e a região de comprimentos de onda menores e não ajustaram a região de comprimentos de onda maiores, assim como os modelos encontrados na literatura. Esta dificuldade pode ser explicada pela estrutura dos envoltórios modelados, já que os silicatos cristalinos devem estar associados à presença de discos circunstelares, ou mesmo pelo conjunto de constantes ópticas adotado.

Os grãos de ferro incluídos nos modelos responderam por até 25 % da quantidade total de grãos do envoltório, em alguns modelos, e foram capazes de ajustar de forma satisfatória a região de comprimentos de onda mais curtos, onde têm maior influência. Já os grãos de $Mg_{0,6}Fe_{0,4}O$, que possuem uma forte característica em $19,5 \mu m$, não foram capazes de ajustar esta região do espectro, que é a mais difícil de ser modelada, como podemos constatar a partir dos modelos disponíveis na literatura. É possível que as estrelas OH/IR contenham quantidades importantes deste tipo de grão, conforme observamos nos modelos. Não fomos capazes de encontrar valores exatos para a fração de silicatos cristalinos dos objetos modelados, pois o ajuste nos comprimentos de onda $\lambda > 30 \mu m$ não foi satisfatório. No entanto, determinamos limites superiores para

estes valores, a partir dos quais os modelos não reproduzem bem a característica de $9,7 \mu m$. Os limites superiores encontrados estão de acordo com os valores encontrados na literatura a partir de diferentes métodos para esta fração.

O código MonRaT se mostrou adequado a modelagem de envoltórios de poeira, uma vez que nestes meios é esperado que ocorra a nucleação de diversas espécies de grãos. Além disso, a possibilidade de variar o índice que descreve a distribuição de grãos no envoltório permite tratar de forma mais completa a complexa estrutura destes envoltórios.

Nosso objetivo é continuar a desenvolver e aprimorar o código MonRaT através de novas implementações, como a possibilidade de cálculos considerando simetria axial, e de melhorias, principalmente com o objetivo de diminuir o tempo de execução do programa.

Referências

- Badger, L.; 1994, *Mathematics Magazine*, 67, 83
- Bohren, C. & Huffman, D.; 1998, “Absorption and Scattering of light by small particles.”, Wiley-Interscience
- Busso, M., Gallino, R., & Wasserburg, G. J. 1999, *ARA&A*, 37, 239
- David, P.; Pegourie, B.; 1995, *A&A*, 293, 833
- Draine, B. T.; 1990, *ASPC*, 12, 193
- Engels, D.; & Jiménez-Esteban, F.; 2007, *A&A*, 475, 941
- Elitzur, M.; 1992, “Astronomical Masers”, Kluwer Academic Publishers
- Forestini, M.; Charbonnel, C.; 1997, *A&AS*, 123, 241
- Frogel, J. A., Mould, J., & Blanco, V. M.; 1990, *ApJ*, 352, 96
- Gail, H.-P. & Sedlmayr, E.; 1999, *A&A*, 347, 594
- Gillet, F. C.; Low, F. J.; & Stein, W. A.; 1968, *ApJ*, 154, 677
- Gilman, R.; 1969, *ApJ*, 155L, 185
- Habing, H. & Olofsson, H.; 2003, “Asymptotic Giant Branch Stars”, Springer
- Henning Th., Begemann B., Mutschke H., Dorschner J.; 1995, *A&AS*, 112, 143
- Herman, J.; Habing, H. J.; 1985, *A&AS*, 59, 523
- Herwig, F.; 2005, *ARA&A*, 43, 435
- Heske, A.; Forveille, T.; Omont, A.; van der Veen, W. E. C. J.; Habing, H. J.; 1990, *A&A*, 239, 173
- Höfner, S.; 2008, *A&A*, 491L, 1
- Howe, D. A.; Rawlings, J. M. C.; 1994, *MNRAS*, 271, 1017
- Iben, I. Jr.; 1967, *ARA&A*, 5, 571
- Iben, I., Jr.; Renzini, A.; 1983, *ARA&A*, 21, 271

Justtanont, K.; Skinner, C. J.; Tielens, A. G. G. M.; Meixner, M.; Baas, F.; 1996, ApJ, 456, 337
 Karakas, A. & Lattanzio, J.; 2007, PASA, 24, 103
 Kemper, F.; Waters, L. B. F. M.; de Koter, A.; & Tielens, A. G. G. M.; 2001, A&A, 369, 132
 Kemper, F.; de Koter, A.; Waters, L. B. F. M.; Bouwman, J.; Tielens, A. G. G. M.; 2002, A&A, 384, 585
 Kemper, F.; Stark, R.; Justtanont, K.; de Koter, A.; Tielens, A. G. G. M.; Waters, L. B. F. M.; Cami, J.; Dijkstra, C.; 2003, A&A, 407, 609
 Kippenhahn, R. & Weigert, A.; 1990, “Stellar Structure and Evolution”, Springer-Verlag
 Kwok, S.; 1994, PASP, 106, 344
 Lefèvre, J.; Bergeat, J.; Daniel, J.-Y.; 1982, A&A, 114, 341
 Lewis, B. M.; Eder, J.; Terzian, Y.; 1987, AJ, 94, 1025
 Lewis, B. M., 1992, ApJ, 396, 251
 Lewis, B. M.; 2002, ApJ, 576, 445
 te Lintel Hekkert, P.; Caswell, J. L.; Habing, H. J.; Haynes, R. F.; Norris, R. P.; 1991, A&AS, 90, 327
 Litvak, M. M.; McWhorter, A. L.; Meeks, M. L. & Zeiger, H. J.; 1966, Phys. Rev. Lett., 17, 821
 Lorenz-Martins, S. & Lefèvre, J.; 1993, A&A, 280, 567
 Lorenz-Martins, S.; de Araujo, F. X.; 1997, MNRAS, 291, 296
 Maercker, M.; 2009, “Asymptotic Giant Branch stars viewed up-close and far-off”, Tese de Doutorado, Department of Astronomy, Stockholm University
 Makoto M. & Takuji N.; 1998, ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation (TOMACS), 8, 3
 Maldoni M. M.; Ireland, T. R.; Smith, R. G.; Robinson, G.; 2005, MNRAS, 362, 872
 McKee, C. F.; Ostriker, E. C.; 2007, ARA&A, 45, 565
 Mie, G.; 1908, AnP, 330, 377
 Molster, F. J.; Yamamura, I.; Waters, L. B. F. M.; Tielens, A. G. G. M.; de Graauw, Th.; de Jong, T.; de Koter, A.; Malfait, K.; van den Ancker, M. E.; van Winckel, H.; Voors, R. H. M.; Waelkens, C.; 1999, Nature, 401, 563

Molster, F.; Kemper, C.; 2005, SSRv, 119, 3

Moshe E.; Peter G.; Nick S.; 1976, ApJ,205, 384

Nicholas, M.; 1987, “The beginning of the Monte Carlo method”, Los Alamos Science, 125

Olofsson, H.; Bergman, P.; Eriksson, K.; Gustafsson, B.; 1996, A&A, 311, 587

Ordal, M. A.; Bell, R. J.; Alexander, R. W., Jr.; Newquist, L. A.; Querry, M. R.; 1988, ApOpt, 27, 1203

Perkins, F.; Gold, T.; Saltpeter, E. E.; 1966, Ap.J., 145, 361

Peter G. & Nick S.; 1976, ApJ,205, 144

Posch, Th.; Kerschbaum, F.; Mutschke, H.; Dorschner, J.; Jäger, C.; 2002, A&A, 393, 7

Ramstedt, S.; Schöier, F. L.; Olofsson, H.; Lundgren, A. A.; 2008, A&A, 487, 645

Schönberg, M.; Chandrasekhar, S.; 1942, ApJ, 96, 161

Seaquist, E. R.; Ivison, R. J.; 1994, MNRAS, 269, 512

Siess, L.; Livio, M.; & Lattanzio, J.; 2002, ApJ, 570, 329

Snow, T. P.; Witt, A. N.; 1996, ApJ, 468, L65

Suh, Kyung-Won; Kim, H.-Y.; 2002, A&A, 391, 665

Sylvester, R. J.; Kemper, F.; Barlow, M. J.; de Jong, T.; Waters, L. B. F. M.; Tielens, A. G. G. M.; Omont, A.; 1999, A&A, 352, 587

Szymczak, M.; 1987, AP&SS, 139, 63

Voshchinnikov, N. V.; Henning, Th.; 2010, arXiv1004.0967

de Vries, B.L.; Min, M.; Waters, L.B.F.M.; Blommaert, J.A.D.L.; Kemper, F.; 2010, arXiv:1003.3100v1 [astro-ph.SR]

Wagenhuber, J.; Groenewegen, M. A. T.; 1998, A&A, 340, 183

Waters, L. B. F. M.; Molster, F. J.; de Jong, T.; Beintema, D. A.; Waelkens, C.; Boogert, A. C. A.; Boxhoorn, D. R.; de Graauw, T.; Drapatz, S.; Feuchtgruber, H.; e 27 co-autores; 1996, A&A, 315L, 361

Weaver, H.; Williams, D. R. W.; Dieter, N. H. & Lum, W. T.; 1965, Nature, 208, 29

Willson, L. A.; 2000, ARA+A, 38, 573

van Winckel, H.; 2003, ARA+A, 41, 391

Woitke, P.; 2006, A&A, 460L, 9

Wolf, N. J. & Ney, E. P.; 1969, ApJ, 155, 181