

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

**Andrés Felipe Pérez Sánchez**

**Evolução entre estrelas carbonadas extremas e pós AGB**  
*21 $\mu$ m*

2010



**Andrés Felipe Pérez Sánchez**

**Evolução entre estrelas carbonadas extremas e pós AGB**  
*21 $\mu$ m*

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

Orientador: Prof. Dr. Silvia Lorenz Martins.

Rio de Janeiro  
Maio de 2010

Pérez Sánchez, Andrés Felipe

Evolução entre estrelas carbonadas extremas  
e pós-AGB  $21\mu m$

Andrés Felipe Pérez Sánchez

- Rio de Janeiro: UFRJ/OV, 2010

xii, 85f.:il; 30 cm

Orientador: Silvia Lorenz Martins.

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

Referências Bibliográficas: f: 70-73.

1.Estrelas 2.AGB 3.pós-AGBs

4. Envoltório circumstelar 5. Transferência radiativa

6. Característica em  $21\mu m$ I. Lorenz-Martins, Silvia.

II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, Observatório do Valongo,  
Programa de Pós-graduação em Astronomia, 2010 III. Título.

*A mi sangre y su historia,  
a mi historia,  
a mis dos Anas.*

# Agradecimentos

**À minha orientadora Silvia Lorenz Martins**, pelo apoio sempre que precisei, pela paciência durante estes dois anos, pela ajuda no desenvolvimento deste projeto, que já abriu a seguinte porta no meu futuro. Infinitas gracias profe!!!!

**Aos meus vizinhos**, porque temos a melhor comarca do mundo, acho bem difícil, impossível, encontrar de novo um lugar com tão boa companhia para morar. En la buenas y en las malas!

**Aos meus colegas da pós-graduação**, pela amizade e pela acolhida no instituto. Vocês todos fizeram me sentir como em casa sempre. Obrigado Theo, você foi o meu co-orientador e o meu grande suporte sempre.

**Aos meus amigos**, de todas as nacionalidades, a tese ficaria bem maior se colocou o nome de todos vocês. Gracias a toda esa gente linda que me mostrou un mundo amable, sincero, divertido durante estos dos años. Essa experiência não seria a mesma sem ter conhecido vocês todos!

**Al JuanK**, por ter me emprestado o laptop para trabalhar desde casa, meu irmão, eu tenho certeza que você ainda não tem noção do enorme favor que me fez.

**Ao senhor Milton Flores**, pelo auxílio durante o primeiro ano, com certeza sem essa ajuda que o senhor me deu eu não estivesse escrevendo as últimas linhas da minha tese de mestrado agora.

**À todos os funcionários do Valongo**, pela acolhida e pela amizade durante o período deste mestrado.

**Ao programa de pós-graduação e a diretoria do Observatório do Valongo**, pelo esforço em sempre fornecer aos alunos as melhores condições de trabalho no instituto.

**Aos meus professores da pós-graduação**, por ministrarem excelentes cursos.

**Ao programa de financiamento da CAPES**, pela bolsa de mestrado que recebi durante 1 ano.

# Resumo

Neste trabalho apresentamos os resultados da modelagem dos envoltórios circunstelares de seis estrelas carbonadas extremas, e de três estrelas pós-AGB  $21\mu m$ , com o intuito de estabelecer uma conexão evolutiva entre esses dois estágios de evolução estelar. Para isso, calculamos modelos utilizando o novo código de transferência radiativa MonRaT. Os modelos calculados consideram simultaneamente quatro espécies de grãos, a fim de ajustar as principais características espectrais observadas no infravermelho médio, tanto para as carbonadas extremas, quanto para as pós-AGB  $21\mu m$ . Esse tipo de modelagem é inédita no estudo de estrelas de baixas massas e massas intermediárias evoluídas ricas em carbono. Como parte deste trabalho, foi desenvolvido o módulo MonRaT\_Mie, o qual é implementado pelo código MonRaT, para a solução numérica das equações fornecidas pela teoria de Mie, para o problema da interação entre a luz e partículas esféricas de raio arbitrário. A análise da variação dos parâmetros físicos dos envoltórios circunstelares, tais como opacidade, temperatura do envoltório, quantidade total de grãos, obtidos a partir dos nossos modelos de transferência radiativa, pode fornecer uma primeira aproximação para o entendimento da sequência evolutiva carbonadas extremas  $\rightarrow$  pós-AGB ricas em carbono. As espécies de grãos consideradas para ajustar as principais bandas de emissão no infravermelho médio, foram escolhidas baseados nas melhores sugestões encontradas na literatura, considerando as restrições impostas tanto pela natureza química, quanto pela fase evolutiva das fontes.

**Palavras-chave:** estrelas: AGB e pós-AGB – estrelas: envoltório circunstellar – estrelas: Evolução – métodos: Transferência radiativa.

# Abstract

In this work we present the results of modelling the circumstellar envelope of six extreme carbon star as well as of three  $21\mu m$  post-AGB stars, in order to set up an evolutionary link among these two phases. With this aim, we calculated models using a new radiative transfer code, so called MonRaT. This model consider, simultaneously, four different kind of grains, enabling us to fit the main spectral features in the mid-infrared spectra for both the extreme carbon and C-rich post-AGB stars. Our models are unprecedented in the study of evolved low and intermediate initial mass stars. As part of this work, was developed the module MonRaT\_Mie, which is incorporated by the MonRaT code to solve numerically the Mie theory's equations, for the interaction between light and particles with arbitrary radius. The variation of the physical parameters of the circumstellar envelopes, may provide a good approximation to the extreme carbon stars to C-rich post-AGB stars evolution sequence. Different grain species were chosen based on the best suggestions found in the literature, which are consistent with the restrictions imposed by both the chemical nature and the evolutionary phase of the sources considered for this work.

**Keywords:** stars: AGB and post-AGB – stars: circumstellar envelope – stars: evolution – methods: radiative transfer.



# Sumário

<b>Sumário</b>	<b>9</b>
<b>Lista de Figuras</b>	<b>11</b>
<b>Lista de Tabelas</b>	<b>12</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
1.1 Evolução Estelar: Saída da Sequência principal. . . . .	2
1.1.1 Saída da Sequência Principal: Estrelas de baixa massa . . . . .	3
1.1.2 Saída da Sequência Principal: Estrelas de massa intermediária . . . . .	6
1.2 O Ramo Assintótico das Gigantes Vermelhas - AGB. . . . .	8
1.2.1 Evolução no AGB. . . . .	11
1.3 Envoltório Circunstelar . . . . .	19
1.3.1 Perda de Massa . . . . .	19
1.3.2 Formação do Envoltório . . . . .	22
1.3.3 Formação de Grãos no CSE . . . . .	25
<b>2 Transferência Radiativa</b>	<b>30</b>
2.1 Teoria de Mie . . . . .	30
2.1.1 Módulo MonRaT_Mie . . . . .	34
2.2 Simulação de envoltórios circunstelares . . . . .	38
2.2.1 Método Monte Carlo . . . . .	38
2.2.2 Algoritmo MonRaT. . . . .	39
<b>3 Estrelas Carbonadas Extremas</b>	<b>44</b>
3.1 Introdução . . . . .	44

3.2	Resultados . . . . .	49
<b>4</b>	<b>Estrelas Pós AGB</b>	<b>56</b>
4.1	Introdução . . . . .	56
4.1.1	A emissão $21\mu\text{m}$ . . . . .	56
4.2	Modelos para pós-AGBs $21\mu\text{m}$ utilizando MonRaT . . . . .	62
<b>5</b>	<b>Conclusões e perspectivas</b>	<b>66</b>
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>71</b>
<b>A</b>	<b>Módulo Monrat_Mie</b>	<b>74</b>
A.1	Monrat_Mie_New . . . . .	74
A.2	Monrat_Mie_RicattiBessel . . . . .	75
A.3	Monrat_Mie_AnBnFunction . . . . .	76
A.4	Monrat_Mie_PFPParameters . . . . .	77
A.5	Monrat_Mie_EffCreation . . . . .	81
A.6	Monrat_Mie_PFCreation . . . . .	84

# Lista de Figuras

1.1	Evolução no diagrama HR. . . . .	3
1.2	Diagrama cor-cor. . . . .	9
1.3	Estrutura interna de estrelas AGB . . . . .	12
1.4	Variação das propriedades da estrela na fase dos pulsos térmicos . . . . .	15
1.5	Variação da razão C/O durante a evolução no AGB . . . . .	19
2.1	Coeficientes de refração e absorção . . . . .	31
2.2	Comparação entre o DGST100 e o MonRaT_Mie . . . . .	37
2.3	Eficiência de extinção . . . . .	38
3.1	Estrelas carbonadas extremas . . . . .	45
3.2	Ajustes . . . . .	51
3.3	A emissão em $30\mu m$ . . . . .	52
3.4	Variação da proporção MgS/AC . . . . .	52
4.1	Estrelas pós-AGB $21\mu m$ . . . . .	57
4.2	Modelos para as pós-AGB $21\mu m$ . . . . .	63
5.1	Possível evolução . . . . .	68

# Lista de Tabelas

3.1	Características das fontes ISO. . . . .	50
3.2	Parâmetros dos ajustes . . . . .	53
3.3	Temperatura média de cada espécie de grãos . . . . .	55
4.1	Parâmetros dos ajustes para as pós-AGB . . . . .	64
4.2	Temperatura média obtidas dos modelos para as pós-AGB . . . . .	65

# Capítulo 1

## Introdução

Os envoltórios circumstelares de estrelas de baixas massas e massas intermediárias, que estão nos estágios finais da sua evolução na fase AGB (AGB - Acrônimo em inglês de *Asymptotic Giant Branch*), contêm informação valiosa das mudanças na estrutura interna ao longo da sua evolução. Essas mudanças na estrutura interna estão fortemente ligadas às instabilidades térmicas no núcleo da estrela, o que faz com que a atmosfera estelar torne-se convectiva. A aparição da convecção facilita as condições para que fenômenos como os pulsos térmicos e as dragagens, junto aos diferentes processos de nucleossíntese, terminem por mudar significativamente as abundâncias dos elementos na superfície estelar. Durante as fases finais da evolução no AGB, a atmosfera estelar é ejetada, formando um envoltório circumstelar que se afasta da estrela central e se esfria. Esse material passa a ser a contribuição de estrelas AGB à evolução química da galáxia. O estudo dos envoltórios circumstelares de estrelas evoluídas fornece a oportunidade de melhorar o conhecimento das condições de formação de moléculas poliatômicas e grãos sólidos nesses ambientes, que passam a ser parte do meio interestelar. Os resultados dos modelos sintéticos de evolução química e física do interior das AGB, podem ser comparados e restringidos, considerando os resultados de modelos de transferência radiativa. Tais modelos são aplicados no intuito de conhecer os principais elementos que são formados nos envoltórios circumstelares. Com esse tipo de modelos podem ser calculados parâmetros físicos como densidade e temperatura do envoltório circumstelar, assim como as condições físicas no envoltório para a formação e distribuição de grãos, mecanismos de expansão do envoltório, entre outros, que poderiam ser usados, em primeira aproximação, para restringir parâmetros livres, como por exemplo, eficiência das diferentes dragagens, e os mecanis-

mos de perda de massa da estrela durante a evolução no AGB. Neste trabalho é feita a modelagem de envoltórios circunstelares, particularmente de fontes ricas em carbono, usando um novo código de transferência radiativa, considerando simulação numérica pelo método Monte Carlo. Com o novo código, são geradas distribuições espectrais de energia, que são ajustados às observações feitas na região do infravermelho médio, tanto para Estrelas Carbonadas Extremas quanto para estrelas pós-AGB ricas em carbono. Daremos ênfase especial às diferentes espécies de grãos sugeridas na literatura, para cada uma das principais características espectrais observadas nesse tipo de fontes. Dos resultados dessas modelagens, podemos inferir como são as variações dos parâmetros físicos dos envoltórios circunstelares nestas diferentes fases da evolução estelar, no intuito de estabelecer uma conexão evolutiva entre os estágios considerados, objetivo central deste trabalho.

Neste capítulo discutiremos a evolução estelar para estrelas de baixas massas e massas intermediárias, as quais dão origem as pós-AGBs. Também apresentamos rapidamente o processo de perda de massa e a formação dos envoltórios circunstelares, bem como a formação de grãos nestes meios. No Capítulo 2 é feita a apresentação do novo código de transferência radiativa MonRaT, e em particular do módulo MonRaT\_Mie, o qual resolve numericamente as equações da teoria de Mie, para o problema da interação radiação-matéria no envoltório circunstellar. No Capítulo 3 apresentamos o problema das Carbonadas Extremas e nossos resultados para a modelagem das mesmas. O Capítulo 4 descreve o problema da emissão em  $21\mu m$  encontrada em algumas estrelas pós-AGBs. Nesse capítulo modelamos 3 objetos com 4 espécies de grãos, a fim de reproduzir essa emissão. Finalmente o Capítulo 5 apresenta as conclusões e perspectivas para a continuidade do trabalho.

## 1.1 Evolução Estelar: Saída da Sequência principal.

Estrelas de baixas massas são aquelas que começam a fusão de Hélio (He) em um cenário que apresenta degenerescência eletrônica. O limite superior para a massa inicial (massa na sequência principal) desse tipo de estrelas, está entre  $2,0 - 2,3M_{\odot}$ , enquanto que o limite inferior está entre  $0,8 - 1,0M_{\odot}$ , os valores exatos são função da composição química inicial da estrela. Estrelas de massas intermediárias são aquelas que iniciam a queima de He no núcleo estelar sem degenerescência eletrônica, mas, que desenvolvem

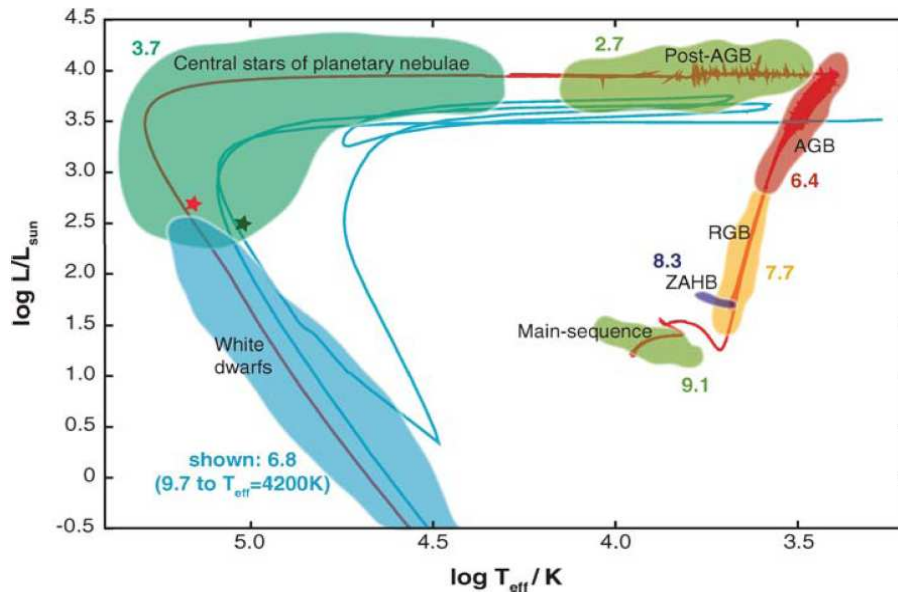


Figura 1.1: Modelo de evolução em um diagrama Hertzsprung-Russell detalhado, desde a sequência principal até a fase de Anã Branca, para uma estrela de  $2M_{\odot}$  e metalicidade solar. Os números do lado de cada fase são o log da sua duração aproximada. Imagem adaptada de Herwig, 2005.

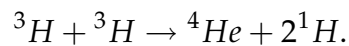
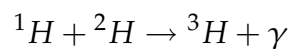
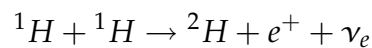
um núcleo de carbono e oxigênio (C-O) com estados eletrônicos degenerados uma vez esgotado o He no núcleo. A massa inicial tem como limite superior  $8 - 9M_{\odot}$ , onde o valor exato também é função da composição química inicial da estrela (Iben & Renzini, 1983).

Quando esgotado o hidrogênio (H) no núcleo estelar, as estrelas deixam a sequência principal (SP) no diagrama Hertzsprung-Russel (HR). A evolução subsequente é estritamente relacionada com a massa da estrela. A figura 1.1 mostra um modelo de evolução no diagrama HR para uma estrela de  $M = 2M_{\odot}$ .

### 1.1.1 Saída da Sequência Principal: Estrelas de baixa massa

Durante a sequência principal, a produção de energia no núcleo das estrelas de baixas massas é dominada pela cadeia próton-próton (cadeia p-p), que garante o equilíbrio hidrostático e térmico no interior da estrela, evitando o colapso gravitacional. A cadeia p-p é um processo de fusão do H, que gera um átomo de He após a fusão de vários átomos de H. A temperatura mínima necessária para iniciar a reação é  $\sim 10^7 K$ . Com essa

temperatura os prótons começam a se deslocar rápido o suficiente para vencer a repulsão eletrostática entre eles, interagindo a distâncias onde a força nuclear forte domina. Assim, dois prótons se unem para formar um átomo de Deutério, o qual é o isótopo mais pesado do H. Ao interagir com o terceiro próton, o átomo de deutério torna-se um átomo de  ${}^3\text{He}$ , um dos mais leves isótopos do He, liberando um fóton de raio gamma ( $\gamma$ ). Finalmente, dois átomos de  ${}^3\text{He}$  se unem, formando um átomo de  ${}^4\text{He}$  e liberando dois átomos de H. Esquemáticamente, a cadeia p-p é:



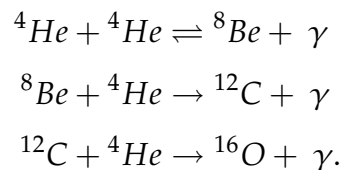
Embora para as estrelas de baixas massas a cadeia p-p seja o principal mecanismo de fusão do H, o ciclo CNO também pode ter importância, principalmente para estrelas já enriquecidas em metais (Estrelas de população I). O Sol, por exemplo, tem sua produção de energia fornecida por 75% vindo das reações da cadeia p-p e 5% do ciclo CNO. O ciclo CNO será discutido com algum detalhe na subseção 1.1.2.

Para uma estrela de baixa massa, a abundância de H no núcleo estelar diminui drasticamente até se esgotar, nesse momento a estrela sai da sequência principal, com o núcleo inerte de He que começa a apresentar degenerescência eletrônica. A temperatura no núcleo ainda não é alta o suficiente para começar a fusão de hélio. É por isto que a estrela passa por uma fase de contração global, enquanto que o núcleo é sustentado pela pressão de degenerescência eletrônica que aumenta cada vez mais. Quando a temperatura no núcleo é insuficiente para iniciar a fusão de He, forma-se uma fina camada de queima de H que circunda o núcleo da estrela. A fusão na camada de queima de H, torna-se a principal fonte de produção de energia, que garante o equilíbrio térmico e hidrostático da atmosfera estelar. O excesso de energia liberada pela contração do núcleo estelar, somado à energia do campo de radiação, fazem com que o raio da estrela aumente, o que se traduz como um aumento da luminosidade da estrela. Esse aumento de luminosidade marca o início da evolução da estrela no Ramo das Gigantes Vermelhas (RGB, acrônimo em inglês de *Red Giant Branch*). A expansão das camadas superiores da superfície estelar, juntamente com o aumento da temperatura no centro, fazem com que as regiões superiores da atmosfera



se tornem convectivas. Essa convecção atinge regiões profundas, próximas às zonas de fusão do H, levando material rico em  ${}^4\text{He}$  e produtos do ciclo  $\text{CNO}_I$  (que será discutido na subseção 1.1.2), como  ${}^{14}\text{N}$  e  ${}^{13}\text{C}$ , para as regiões exteriores da estrela, e levando H não processado do envelope ao centro da estrela. Tal fenômeno é conhecido como a primeira dragagem, responsável pelas mudanças das abundâncias na atmosfera estelar, e que acontece para todas as estrelas que iniciam a fase de gigantes vermelhas. Algumas das mudanças de abundância na atmosfera estelar são, por exemplo, o aumento da abundância superficial de  ${}^{14}\text{N}$ , que praticamente dobra; a diminuição da razão  ${}^{12}\text{C}/{}^{13}\text{C}$ , que passa de 90 para 30-20, e a diminuição em várias ordens de magnitude da abundância superficial de Li e Be (Becker & Iben. 1980).

Enquanto a estrela evolui no RGB, o seu núcleo continua se contraindo. A temperatura interna aumenta o suficiente para iniciar de forma violenta a fusão de He no núcleo da estrela. Esse início violento da nucleossíntese é conhecido como o *flash de hélio*, o qual remove a alta degenerescência eletrônica do núcleo da estrela, iniciando a fusão de hélio, através do processo de nucleossíntese conhecido como reação triplo  $\alpha$  (Lattanzio & Wood. 2003). No processo, dois átomos de He colidem, liberando um raio  $\gamma$ , e formando um átomo de  ${}^8\text{Be}$ . Embora muito instável, a densidade de partículas  $\alpha$ , e a temperatura do local de fusão de He, fazem com que a probabilidade de interagir com uma terceira partícula  $\alpha$  seja alta o suficiente, para formar  ${}^{12}\text{C}$ , no núcleo da estrela. Uma reação secundária acontece se o átomo de  ${}^{12}\text{C}$  interage com mais uma partícula  $\alpha$ . A fusão de um átomo de  ${}^{12}\text{C}$  com uma partícula  $\alpha$ , libera mais um raio  $\gamma$ , e forma um átomo de  ${}^{16}\text{O}$ . A seguir, o esquema da reação triplo  $\alpha$ .



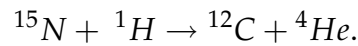
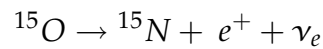
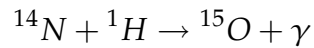
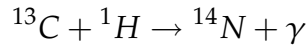
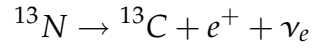
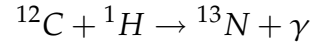
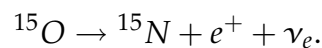
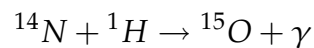
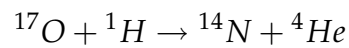
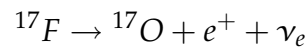
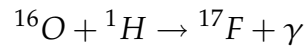
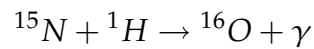
Quando iniciada a queima de He no núcleo da estrela, ela ingressa no Ramo Horizontal (HB - *Horizontal Branch*). Uma estrela de baixa metalicidade, com massa  $M_\star = 1M_\odot$  localiza-se na região azul do HB, enquanto as de metalicidade solar no *Red Clump*. Nesta fase, o raio da estrela diminui, e a luminosidade diminui levemente. A fusão de He au-

menta a fração de massa de  $^{12}\text{C}$  e  $^{16}\text{O}$  no núcleo da estrela, assim como também a degenerescência eletrônica. Assim que He começa a se esgotar no núcleo estelar, o raio da estrela aumenta novamente, a luminosidade aumenta como consequência, e a estrela evolui, agora pelo AGB, no diagrama HR. O núcleo de carbono e oxigênio (C-O) é sustentado pela crescente quantidade de elétrons degenerados, ao mesmo tempo em que forma-se uma camada de queima de He, entre o núcleo e a camada de queima de H. Essa é a estrutura de uma estrela no AGB. Essa fase é apresentada com mais detalhes na seção 1.2

### 1.1.2 Saída da Sequência Principal: Estrelas de massa intermediária

A principal diferença entre uma estrela de massa intermediária e uma de baixa massa na SP, é a temperatura no núcleo (Lattanzio & Wood. 2003). O núcleo de uma estrela de massa intermediária, por exemplo com massa  $M_{\star} \sim 5M_{\odot}$ , possui uma grande porcentagem da massa total da estrela e é muito sensível à temperatura, o que facilita que este apresente convecção. A temperatura no núcleo de estrelas deste tipo é alta o suficiente para que seja o Ciclo CNO, o processo de nucleossíntese que domina a produção de energia no núcleo estelar. A temperatura mínima para ativar o ciclo CNO é  $\sim 1,6 \times 10^7$ . Esse processo de nucleossíntese é a principal fonte de energia de estrelas massivas e massa intermediária na sequência principal. Como mencionado anteriormente, três partículas  $\alpha$  se combinam para formar um átomo de  $^{12}\text{C}$ . A captura de prótons no  $^{12}\text{C}$  forma nitrogênio ( $N$ ), que juntando-se com um átomo de  $H$  forma  $O$ . O isótopo do oxigênio formado decai e forma mais  $N$ , que captura outro átomo de  $H$  e forma um átomo de  $C$  e outro de  $He$ . Para o caso de estrelas de massas intermediárias, o ciclo CNO pode ser dividido em duas fases. A primeira, como descrita anteriormente, é conhecida como o ciclo CN ou  $\text{CNO}_I$ , enquanto a segunda fase, que acontece somente 0,04% das vezes, é conhecida como o ciclo  $\text{CNO}_{II}$ , e não produz  $^{12}\text{C}$  e  $^4\text{He}$ , senão um átomo de  $^{16}\text{O}$  e um fóton de raio  $\gamma$ ,

A seguir, o esquema das duas fases do ciclo CNO.

$CNO_I$  $CNO_{II}$ 

Quando esgotado o  $H$  no núcleo da estrela, ela sai da sequência principal, com a queima de hidrogênio em uma camada fina ao redor do núcleo. A alta temperatura do centro da estrela gera convecção no envelope, na região próxima ao núcleo estelar. Essa convecção leva hidrogênio, não processado, das camadas superiores da atmosfera para o centro da estrela, enquanto leva e mistura  $^4\text{He}$ ,  $^{13}\text{C}$  e  $^{14}\text{N}$ , produtos gerados no ciclo  $CNO$ , para regiões superiores da atmosfera estelar. Esse processo é conhecido como a primeira dragagem. Tal fenômeno acontece em todas as estrelas que iniciam a fase no RGB, e muda substancialmente as abundâncias superficiais da estrela. Diferente das estrelas de baixas massas, a fusão de hélio no núcleo de estrelas de massas intermediárias

inicia-se em um cenário sem degenerescência de elétrons. Durante a fase no HB, a estrela consome o He no núcleo estelar. Após isso, a estrutura da estrela sofre um novo reajuste. O núcleo estelar, sendo um núcleo de C-O inerte, se contrai, liberando energia potencial gravitacional, que vai contribuir com o aumento do fluxo de energia do campo de radiação emergente, enquanto que o raio da estrela aumenta. A combinação desses dois processos produz um aumento na luminosidade da estrela. Em volta do núcleo, a camada de queima de hidrogênio é levada para regiões onde, tanto a temperatura quanto a densidade da estrela são menores, o que faz com que a camada de queima de H termine por se extinguir. Enquanto isso, ao redor do núcleo se estabelece a camada de queima de He, que gera a energia necessária para evitar o colapso da estrela. A camada de H se extingue, e devido ao reajuste e à formação da camada de queima de He, o envelope convectivo da estrela consegue atingir regiões com altas quantidades de produtos do ciclo CNO, como  ${}^4\text{He}$ ,  ${}^{12}\text{C}$ ,  ${}^{14}\text{N}$ , misturando-os na atmosfera da estrela, mudando novamente as abundâncias superficiais. Esse fenômeno é conhecido como a *segunda dragagem*, o qual acompanha a formação de um núcleo com degenerescência eletrônica de C-O, e a formação da camada de queima de He ao redor do núcleo. A quantidade de massa dragada do interior estelar pode ser de até  $\sim 1M_{\odot}$ , para as estrelas mais massivas, dentro da faixa de massa considerada para as estrelas de massas intermediárias. Durante a segunda dragagem, a temperatura no núcleo aumenta, em resposta à liberação de energia potencial gravitacional por conta da contração do núcleo. Mas, nesse ponto, a perda de energia do núcleo por conta da emissão de neutrinos torna-se importante. Essa emissão de neutrinos é gerada pela alta degenerescência eletrônica no núcleo de C-O, que produz diminuição da temperatura. O resultado é que o núcleo estelar não atinge a temperatura necessária para iniciar a nucleossíntese de C e O (Iben & Renzini 1983). Existe uma massa limite para que aconteça a segunda dragagem em uma estrela. Dependendo da composição, em uma estrela de  $M_{\star} < 4M_{\odot}$ , o envelope convectivo não consegue penetrar até a camada de queima de He (Lattanzio & Wood. 2003).

## 1.2 O Ramo Assintótico das Gigantes Vermelhas - AGB.

A primeira vez que o termo *Assintótico* foi usado para se referir a uma fase da evolução estelar, foi no levantamento feito em 1965 por Sandage e Walker do aglomerado globular

M92, no intuito de corroborar a anomalia do excesso ultravioleta  $\delta(U - B)$  em estrelas desse aglomerado. A anomalia do excesso ultravioleta já tinha sido estudada para outros aglomerados globulares, NGC 4147 (Sandage & Walker, 1955) e M3 (Johnson & Sandage, 1956). Para o aglomerado M92, os autores encontraram uma clara separação no diagrama cor-cor ( $B - V$ ,  $U - B$ ) (Figura 1.2) entre estrelas pertencentes à sequência das sub gigantes (ramo B), e o ramo que eles chamaram de *asymptotic branch* (ramo C).

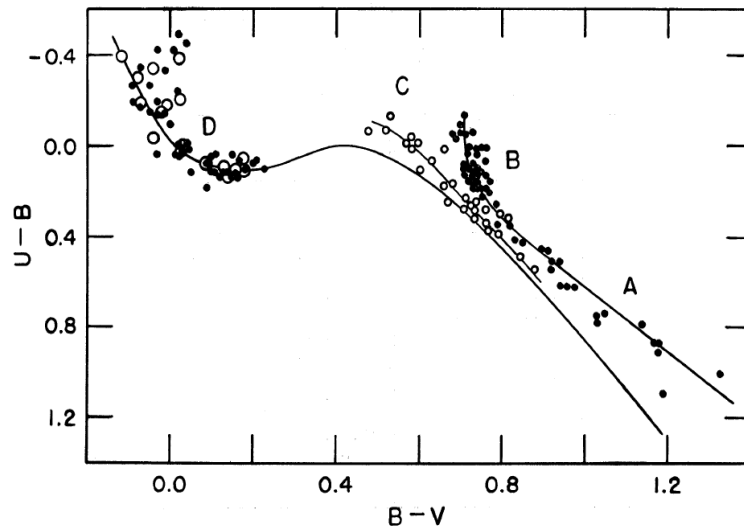


Figura 1.2: Diagrama cor-cor do aglomerado M92. Estrelas do ramo das gigantes (A), sub gigantes (B), do ramo horizontal (D). Os círculos brancos menores representam o ramo assintótico (C). Imagem adaptada de Sandage & Walker (1965).

Nota-se que a separação dos ditos ramos aumenta para o azul, fato que tirou várias dúvidas em torno a validade das observações, já que, por exemplo, para o aglomerado globular M3, Johnson e Sandage já tinham visto essa separação, mas por causa da baixa precisão dos dados não tinha sido mencionada. Com o estudo dos diferentes aglomerados, eles esperavam encontrar diferenças no diagrama cor-magnitude entre os aglomerados, devido ao conteúdo de metais das estrelas de cada um deles. Porém uma separação tão marcada entre estrelas que acreditava-se eram do mesmo ramo, convertia-se em um novo resultado que precisava de maior conhecimento de modelos de nucleossíntese e evolução do núcleo estelar. Como uma primeira aproximação à explicação da separação entre o ramo B e C, Sandage e Walker apresentaram estimativas do efeito da gravidade superficial no fluxo do campo de radiação emergente de estrelas dos ramos B e C. O  $\Delta \log g$  entre estrelas do ramo B e C é dado por:

$$\log \frac{g_B}{g_C} = \log \frac{L_B}{L_C} + 4 \log \frac{T_B}{T_C} + \log \frac{M_B}{M_C}.$$

Considerando um intervalo pequeno no eixo  $B - V$  ( $0,77 > B - V > 0,68$ ), as temperaturas das estrelas nos dois ramos é aproximadamente a mesma; a diferença nas massas das estrelas nos dois ramos é pequena também, e supondo que a correção bolométrica é a mesma para valores iguais de  $B - V$ , eles chegaram à relação

$$\Delta \log g = 0,4(V_B - V_C),$$

sendo  $V_i$  a magnitude aparente no visível para o ramo  $i$ . Com essa estimativa e considerando a relação  $\delta(U - B)/\Delta \log g = 0.12$  (ver Eggen & Sandage 1964, e Sandage & Walker 1965, para maior detalhe destes cálculos), os autores obtiveram:

$$\frac{\delta(U - B)}{\Delta V} = 0,048 \text{ mag},$$

enquanto que a relação entre o excesso ultravioleta e a magnitude aparente no visível medida para M92 é  $\approx 0.24 \text{ mag}$ , e para M3 é  $\approx 0.17 \text{ mag}$ , valores quase quatro vezes maiores que o obtido, considerando somente efeitos de diferença de gravidade superficial no fluxo emergente das estrelas nos dois ramos. Embora não tivessem explicação para a separação dos dois ramos, os autores concluíram que tal efeito poderia ser explicado partindo da hipótese de que a separação era o resultado do enriquecimento no conteúdo de metais das estrelas de ramo C. Esse aumento do conteúdo de metais poderia ser explicado se as estrelas do ramo C tivessem evoluído além da fase de gigantes vermelhas, e por processos de convecção, tivessem misturado produtos dos processos de nucleossíntese no núcleo da estrela na superfície da mesma. <sup>1</sup> Tal hipótese não estava nada longe do que hoje

---

<sup>1</sup>Differences in chemical composition along a given branch seems unreasonable in light of our present knowledge, and we have no explanation for the effect at this time. Nevertheless it is interesting to speculate that, if branch B stars are normal and if only a simple discontinuity had existed between branches B and C, each satisfying the gravity line, this result might have arisen from an enrichment in the metal content of the group C stars. This enrichment might be brought about if these objects represent stars which have passed through the extreme red-giant phase, at which time very deep convection extending nearly to the center of the star occurs that might bring up material from the core, where the metal content is higher because of nuclear processes (Sandage and Walker, 1965).

conhecemos da evolução química das estrelas no AGB. O termo *assintótico* faz referência ao fato que, para estrelas de baixa massa que já passaram pela fase de gigantes vermelhas, a relação  $T_{\star} - L_{\star}$  no diagrama cor-magnitude sobrepõe-se à relação  $T_{\star} - L_{\star}$  de estrelas no RGB, mas a posição das estrelas AGB é levemente deslocada para o azul. Para estrelas de massa intermediária, esse termo não faz referência à sua posição no diagrama cor-magnitude, embora a fase AGB seja uma fase comum tanto para estrelas de baixa massa como para estrelas de massas intermediárias.

### 1.2.1 Evolução no AGB.

Desconsiderando a massa, a estrutura interna das estrelas no início da fase AGB é similar. Todas elas possuem um núcleo de C-O com degenerescência eletrônica, circundado por duas camadas de queima, uma de He e a outra mais externa de H. A massa do núcleo e das duas camadas de queima são aproximadamente a metade da massa total da estrela, e ocupam um pequeno volume no seu interior, similar ao volume de uma anã branca; enquanto que a massa restante está no envelope convectivo da estrela (Figura 1.3). Como mencionado anteriormente, a alta produção de neutrinos pela interação dos elétrons no núcleo drenam uma grande quantidade de energia do núcleo da estrela, o que impede o aumento da temperatura e o início da nucleossíntese de C ou O. A principal fonte de energia da estrela começa ser a nucleossíntese nas camadas de He e H que circundam o núcleo estelar (Lattanzio & Wood, 2003). A formação e o início da produção de energia na camada de He marca o início da evolução da estrela no AGB.

A evolução no AGB é dividida em duas fases. A primeira é conhecida como fase inicial do AGB (*Early AGB phase*, E-AGB), e é a fase em que estão as estrelas que não desenvolveram os pulsos térmicos ainda. A segunda é conhecida como TP-AGB (*Thermally pulsing AGB*), na qual a estrela apresenta pulsos térmicos.

#### Fase E-AGB

A fase E-AGB, é uma fase na qual a estrela mantém o equilíbrio térmico e dinâmico do seu envelope principalmente pela queima de He que circunda o núcleo estelar. A duração da fase E-AGB depende da massa inicial da estrela, enquanto a luminosidade  $L$  e a temperatura efetiva ( $T_{ef}$ ) são funções monotônicas do tempo. Durante esta fase, a

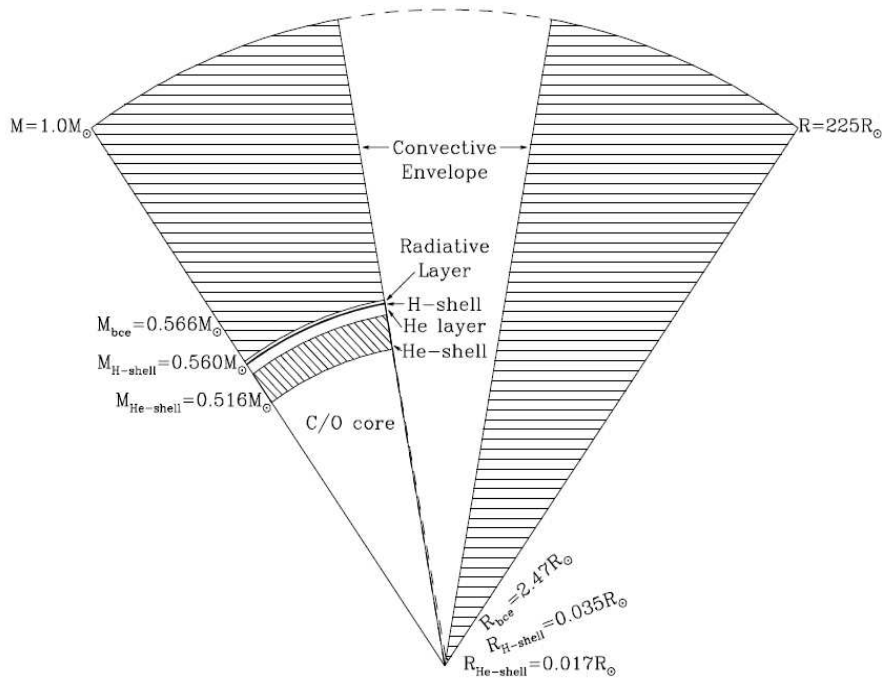


Figura 1.3: Esquema da estrutura interna de uma estrela AGB de  $1M_{\odot}$ . A esquerda, as posições de várias regiões em função da fração de massa. A direita, a posição das mesmas regiões em função do raio da estrela. Imagem adaptada de Lattanzio & Wood (2003).

camada de queima de H permanece inativa, enquanto que o processo tipo  $\alpha$  é o processo de nucleossíntese que domina a fusão na camada de He. Uma vez que o He começa se esgotar, a camada de He contrai-se, tal qual o envelope da estrela, que sofre uma contração global, permitindo que a camada de H chegue em regiões de temperatura e densidade necessárias para iniciar a fusão de H, enquanto que a fusão de He cessa. Entre as camadas de He e H, forma-se uma outra camada, onde acumulam-se os produtos da nucleossíntese de H. A reativação da camada de queima de H marca o término da fase E-AGB.

### Estrelas TP-AGB

Em um estudo numérico da fusão de He e H nas camadas de queima, para estrelas com  $M \sim 1M_{\odot}$ , Schwarzschild e Härm (1965), encontraram uma inesperada instabilidade térmica. Até esse momento, a única instabilidade térmica conhecida nos estudos de evolução estelar era a degenerescência de elétrons no núcleo da estrela, responsável pelo *flash* de Hélio no topo do RGB para estrelas de baixa massa. Além disso, modelos de instabilidade térmica em cenários sem degenerescência não tinham sido desenvolvidos o sufici-



ente. O levantamento de Schwarzschild e Härm estava focado em fases de nucleossíntese posteriores ao *flash* de hélio. Os modelos numéricos começaram a apresentar algumas flutuações na contribuição para a luminosidade total tanto da camada de H quanto na de He. Inicialmente, essas flutuações foram tratadas como instabilidades próprias do código utilizado para os modelos, porém, quando aumentaram a resolução temporal, encontraram que as flutuações eram mais evidentes, fato que os confrontou com um fenômeno físico não conhecido na época, tanto para a evolução quanto para as condições internas da estrela. Uma das condições iniciais dos modelos era que, em geral, em condições sem degenerescência, as estrelas são estáveis sob perturbações térmicas homólogas. Mas a estabilidade da estrela sob perturbações locais, em um ambiente com degenerescência, não tinha sido estudada o suficiente. A instabilidade na luminosidade da estrela foi tratada por Schwarzschild e Härm como uma perturbação térmica na camada de He, devida ao excesso de produção de energia termonuclear. Assim, devido ao excesso de energia na camada de He, esta se expande, empurrando as camadas superiores radialmente para fora. O aumento da distância das camadas superiores ao centro da estrela produz uma diminuição da pressão que a atmosfera estelar exerce na camada de He. Utilizando a lei do gás ideal, e considerando uma expansão homóloga do interior estelar, desde a camada de He, a temperatura nessa camada diminui proporcionalmente à pressão. Mas se a camada de He é fina o suficiente para que a sua expansão desloque as camadas superiores em uma fração só da sua distância ao centro da estrela, a expansão da camada de He pode ser considerada como um processo a pressão constante. Portanto, um aumento de energia na camada considerada (adição de calor a pressão constante), garante o aumento da temperatura na camada de He (para um gás ideal  $dQ = \frac{5}{2} \frac{P}{\rho} d \ln T$ ). Embora a camada de He deva ser fina o suficiente para garantir o aumento de temperatura (instabilidade térmica), esta deve ser espessa o suficiente para que o ganho de energia, devido ao aumento de temperatura, seja maior que a perda de energia por divergências de fluxos.

Um pulso térmico é caracterizado por um aumento rápido da taxa de produção de energia, devido a um fenômeno explosivo de queima de He similar ao *flash* de hélio no topo do RGB. Durante um pulso térmico, o processo que domina a produção de energia é a reação triplo  $\alpha$ , que acontece na camada de He, em um cenário sem degenerescência de elétrons. A energia liberada pelos processos termonucleares na camada de hélio aumenta a pressão local contra a ação da gravidade, deslocando radialmente as camadas superiores,

ou seja, provocando uma expansão da atmosfera da estrela. A camada de queima de hidrogênio é levada para locais sem condições para a fusão do H. A luminosidade da camada de He atinge valores máximos,  $\sim 10^8 L_{\odot}$ , e passa ser a principal contribuição à luminosidade total da estrela, ie,  $L \sim L_{He}$ . Esse aumento rápido da luminosidade da camada de He, é conhecido na literatura como o *flash* na camada de He (*He-shell flash*) ou, pulso térmico.

O He se esgota rapidamente, o que faz com que  $L_{He}$  diminua, enquanto que a matéria deslocada pela expansão da camada de hélio cai de novo para o centro, reajustando-se, e iniciando os processos de nucleossíntese na camada de H. A taxa de produção de energia na camada de He continua diminuindo, enquanto a taxa de queima do H aumenta (Figura 1.4). Desse modo, a luminosidade total da estrela volta ter maior contribuição da luminosidade da camada de H,  $L \sim L_H$ , entanto que  $L_H \gg L_{He}$ . Quando iniciada a fusão de H na camada de queima, a estrela, que já desenvolveu o seu primeiro pulso térmico, entra em uma fase onde a taxa de produção de energia na camada de H torna-se constante. Tal fase, onde a produção de energia na camada de H é gerada sob estabilidade térmica no centro da estrela, é conhecida como fase interpulsos (*Interpulses phase*). A escala de tempo da fase interpulsos depende tanto da massa da estrela quanto da sua metalicidade. Para estrelas com  $M = 4M_{\odot}$  a escala de tempo dessa fase é  $\approx 10^4 yr$ , enquanto que para estrelas de baixas massas  $M = 1M_{\odot}$  é  $\approx 10^5 yr$  (Wagenhuber & Groenewegen. 1998). Passados da ordem de milhares de anos, o He produzido na camada de queima de H abastece tanto a região entre as camadas de queima (*intershell region*) quanto a própria camada de He. A temperatura aumenta de novo, o que leva a uma nova instabilidade térmica na camada de He, gerando mais um pulso térmico. A medida que a estrela evolui na fase TP-AGB, a frequência dos pulsos aumenta.

Depois do início dos pulsos térmicos, a luminosidade máxima que atinge cada pulso aumenta segundo o número de pulsos gerados na camada de He. A cada *flash* na camada de He, a energia liberada ultrapassa a capacidade de transporte radiativo de energia da região próxima do núcleo da estrela. Esse fato faz com que tanto a camada de He quanto a camada logo acima dela tornem-se convectivas. Essa região central, que começa apresentar convecção, é conhecida como zona convectiva entre as camadas de queima (*intershell convective zone* - ISCZ), e vai desde a interface entre o núcleo de C – O inerte até regiões próximas à camada de queima de H, que permanece inativa por causa da expansão do en-

velope. A temperatura máxima na ISCZ depende da massa do núcleo e da quantidade de pulsos sofridos pela estrela, anteriores ao pulso considerado (Iben & Renzini, 1983).

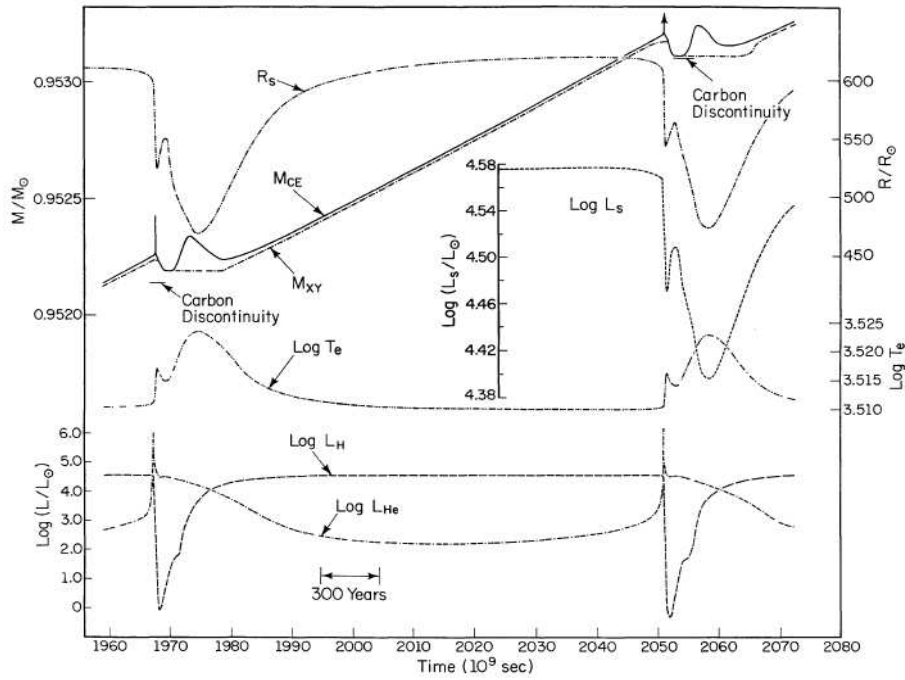


Figura 1.4: Variação temporal da luminosidade total, temperatura efetiva, massa do núcleo, raio estelar e luminosidades de cada uma das camadas de queima de He e H. Esse é um modelo para uma estrela de massa intermediária ( $7M_{\odot}$ ) no sétimo e oitavo pulso térmico. Adaptado de Iben & Renzini (1983).

A convecção na ISCZ garante que o  $^{12}\text{C}$ , principal produto da reação triplo  $\alpha$  na camada de queima de He, seja misturado pela ISCZ, da mesma forma que o  $^4\text{He}$  e  $^{14}\text{N}$ , produtos do ciclo CNO na camada de H. Assim, os principais componentes da ISCZ, formada a cada pulso térmico, são  $^4\text{He}$  (70 – 75%),  $^{12}\text{C}$  (20 – 25%), e tanto  $^{16}\text{O}$  (da reação  $^{12}\text{C}(\alpha, \gamma)^{16}\text{O}$ , que eventualmente acontece), quanto  $^{14}\text{N}$ , em pequenas porcentagens. A captura de partículas  $\alpha$  por parte do  $^{14}\text{N}$  ativa a produção de  $^{22}\text{Ne}$  na ISCZ, através da reação  $^{14}\text{N}(\alpha, \gamma)^{18}\text{F}(\beta^+ \nu)^{18}\text{O}(\alpha, \gamma)^{22}\text{Ne}$ , que aumenta a abundância de  $^{22}\text{Ne}$  na região convectiva entre as camadas de queima.

Durante os pulsos térmicos, a formação de isótopos ricos em nêutrons (principalmente do grupo do Fe) ganha importância. A formação desses isótopos se dá através da captura lenta de nêutrons (lenta comparada com o decaimento  $\beta$ ), no processo de nucleossíntese não térmico conhecido como o *processo s* (s-process; slow-process). Para que os ele-

mentos do *processo s* sejam formados, é necessária a existência de uma fonte não muito intensa de nêutrons dentro da ISCZ. Na literatura, é de comum acordo que essas fontes de nêutrons são as reações  $^{22}\text{Ne}(\alpha, n)^{25}\text{Mg}$  e  $^{13}\text{C}(\alpha, n)^{16}\text{O}$ , embora não há acordo geral de como é produzida a quantidade suficiente de  $^{13}\text{C}$  na ISCZ. Para estrelas de massas intermediárias, a temperatura na ISCZ, durante um determinado pulso térmico pode alcançar valores altos o suficiente ( $\sim 3 \times 10^8\text{K}$ ) para ativar a reação  $^{22}\text{Ne}(\alpha, n)^{25}\text{Mg}$ . Assim que iniciada, a captura de partículas  $\alpha$  por parte do  $^{22}\text{Ne}$  gera um fluxo de nêutrons não muito intenso, que possibilita a formação de isótopos ricos em nêutrons, pelo *processo s*. Mas, a temperatura na ISCZ, para estrelas de baixas massas, não atinge valores tão altos, sendo a reação  $^{13}\text{C}(\alpha, n)^{16}\text{O}$ , que precisa de temperaturas menores para se ativar ( $\sim 1 \times 10^8\text{K}$ ), a principal fonte de nêutrons na ISCZ durante um determinado pulso térmico. Mas o problema consiste na produção da quantidade suficiente de  $^{13}\text{C}$  para gerar a abundância observada de elementos do *processo s* na atmosfera estelar, já que a produção de  $^{13}\text{C}$  presente na ISCZ considerando somente o ciclo CNO é insuficiente. Uma das explicações para a produção da quantidade suficiente de  $^{13}\text{C}$  na região entre as camadas de queima de He e H, mais aceita, é a seguinte: Durante um pulso térmico muito intenso, por causa da liberação de uma alta quantidade de energia, a região externa da ISCZ atinge regiões onde a temperatura é baixa o suficiente para que os átomos de carbono comecem a se recombinar. Esse fato produz uma mudança na opacidade dessa região. Tal alteração na opacidade acelera a expansão das camadas superiores, o que leva a um rápido esfriamento da região próxima à base da camada de H, que produz uma pequena zona semiconvectiva que mistura prótons da camada de H com  $^{12}\text{C}$  da ISCZ. A captura de prótons pelo  $^{12}\text{C}$  produz  $^{13}\text{N}$ , que sofre decaimento  $\beta^+$  e forma  $^{13}\text{C}$ . Assim é formada uma região rica em  $^{13}\text{C}$  entre as camadas de queima de He e H, que, ao alcançar a temperatura necessária, ativa a reação  $^{13}\text{C}(\alpha, n)^{16}\text{O}$  durante a fase interpulsos. Esse processo libera nêutrons para formar elementos do *processo s* durante o seguinte pulso térmico.

Quando a energia liberada na camada de He escapa da região central da estrela, a luminosidade estelar aumenta, atingindo o seu valor máximo ( $\sim 10^8 L_{\odot}$ , dependendo da massa do núcleo e da amplitude do pulso). Enquanto a luminosidade da estrela aumenta, a temperatura nas regiões próximas ao núcleo diminui. Tal diminuição permite o reajuste da camada de H, que volta para regiões com a temperatura e densidade necessárias para reiniciar a nucleossíntese de H. Porém, durante o reajuste, a base da atmosfera convectiva

da estrela atinge regiões antes ocupadas pela ISCZ, levando material rico em  $^{12}\text{C}$  e isótopos do *processo s* e misturando-os na superfície da estrela, mudando significativamente a abundância superficial desses elementos. A profundidade que atinge a base da atmosfera convectiva estelar é função tanto da amplitude do pulso considerado, quanto da massa do núcleo ( $M_N$ ) e a massa total da estrela ( $M$ ) (Iben & Renzini 1983). A alteração da abundância superficial de  $^{12}\text{C}$  e isótopos ricos em nêutrons, como *Ba* e *Zr*, é conhecida na literatura como a *Terceira dragagem*. Dependendo do número de pulsos gerados no interior de uma estrela, a repetição do processo de dragagem, principalmente de  $^{12}\text{C}$  durante a fase TP-AGB, eventualmente consegue inverter a razão superficial de  $\text{C}/\text{O}$ . Para toda estrela que inicia a fase AGB, a razão  $\text{C}/\text{O} < 1$ , ie, toda estrela inicia a fase AGB sendo uma estrela oxigenada. Mas, a repetição da terceira dragagem eventualmente aumenta a abundância superficial de  $^{12}\text{C}$ , deixando a razão  $\text{C}/\text{O} > 1$ , ou seja, formando uma estrela carbonada.

### Processos de nucleossíntese na base do envelope

Embora a terceira dragagem seja necessária para a formação de estrelas carbonadas, não é uma condição suficiente para que a razão superficial de  $\text{C}/\text{O}$  seja invertida. Para estrelas de massas intermediárias, o surgimento de processos de nucleossíntese na base do envelope convectivo durante a fase interpulsos podem adiar, ou inclusive impedir, o aumento da abundância superficial de  $^{12}\text{C}$ . A ativação de processos de nucleossíntese, como o ciclo CNO, na base do envelope convectivo, é conhecido na literatura como *Queima no envelope convectivo* ou, *Hot Bottom Burning* (HBB). A massa mínima para ativar o HBB depende da composição inicial da estrela. Assim, estrelas com  $M = 5M_{\odot}$  e metalicidade solar geram o HBB, enquanto que para  $Z = 0$  a massa mínima para que as estrelas consigam desenvolver o HBB é de  $M = 2M_{\odot}$  (Siess, Livio & Lattanzio, 2002). Quando a atmosfera convectiva da estrela penetra até a zona entre as camadas de queima de H e He, a temperatura da sua base pode alcançar  $\sim 1 \times 10^8 \text{K}$  (Lattanzio & Wood, 2003), temperatura na qual o ciclo CNO pode ser ativado. Considerando uma velocidade típica para a convecção de  $10^5 \text{cm s}^{-1}$ , para atravessar a região de queima do envelope (a sua base), o material leva um tempo da ordem de  $\approx 10^{-3} \text{yr}$ . Assim, o tempo de exposição do material no envelope convectivo à temperatura da sua base pode ser de alguns anos, escala de tempo na qual o ciclo CNO atinge o equilíbrio. Enquanto a terceira dragagem

aumenta a quantidade de  $^{12}\text{C}$ , o HBB através do ciclo  $\text{CNO}_I$  converte-o em  $^{13}\text{C}$ , diminuindo a razão de  $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$  no envelope convectivo. O HBB processa o  $^{13}\text{C}$ , formando  $^{14}\text{N}$ , que torna-se o metal mais abundante na superfície estelar (Lattanzio & Wood 2003). Mas, a importância do HBB vai além do enriquecimento de  $^{14}\text{N}$  da superfície estelar. O HBB consome o  $^{22}\text{Ne}$  e forma  $^{23}\text{Na}$ ;  $^{25}\text{Mg}$  e  $^{26}\text{Mg}$  e forma  $^{26}\text{Al}$  e  $^{27}\text{Al}$  respectivamente (Siess, Livio & Lattanzio, 2002). Mas, o descobrimento de estrelas AGB ricas em  $\text{Li}$  nas Nuvens de Magalhães (Smith & Lambert, 1989, 1990) elevou a importância do HBB nos modelos sintéticos de evolução no AGB. A produção de  $^7\text{Li}$  em AGBs foi sugerida por Cameron & Fowler (1971), pelo processo de nucleossíntese agora conhecido como *O mecanismo Cameron-Fowler*. O mecanismo C-F precisa de um cenário contendo uma região com alta temperatura e que apresente convecção, que é uma característica de estrelas que desenvolvem o HBB. Um átomo de  $^3\text{He}$  (produto da nucleossíntese em fases anteriores da evolução da estrela) na base da atmosfera convectiva, captura uma partícula  $\alpha$  e forma um átomo de  $^7\text{Be}$ . Nesse ponto, surgem duas possibilidades. A primeira é, se o átomo de  $^7\text{Be}$  é exposto à alta temperatura da base do envelope, a captura de um próton faz com que aconteça a seguinte reação:  $^7\text{Be}(p, \gamma)^8\text{B}(\beta^+ \nu)^8\text{Be}(\alpha)^4\text{He}$ , onde não é formado nenhum átomo de  $\text{Li}$ . Mas, se o átomo de  $^7\text{Be}$  é levado pela convecção para regiões frias o suficiente para que este capture um elétron, um átomo de  $^7\text{Li}$  será formado. Esquemáticamente,  $^3\text{He}(\alpha, \gamma)^7\text{Be}(e^-, \nu)^7\text{Li}$ . Esse argumento consegue explicar a abundância observada de  $\text{Li}$  das AGBs nas Nuvens de Magalhães (Smith & Lambert, 1989, 1990).

Frost et al. (1998) estimaram as variações da razão superficial de  $\text{C}/\text{O}$  usando modelos para estrelas com  $M = 4, 5$  e  $6M_{\odot}$ , e metalicidades  $Z = 0,004$  (próxima à composição na Pequena Nuvem de Magalhães),  $Z = 0,008$  (similar à composição na Grande Nuvem de Magalhães) e  $Z = 0,02$  (composição solar); (Figura 1.5). Os modelos para  $4M_{\odot}$  não desenvolvem HBB, enquanto a efetividade da terceira dragagem aumenta com a diminuição da metalicidade, formando uma estrela carbonada, como pode notar-se da primeira coluna da Figura 1.5

Os modelos para  $M = 5M_{\odot}$ , com metalicidades baixas, mostram que no início da fase TP-AGB, a terceira dragagem começa aumentar a quantidade de  $\text{C}$  na atmosfera, mas, quando ativado o HBB, a razão  $\text{C}/\text{O}$  diminui drasticamente. Entanto para metalicidade solar, o início do HBB é truncado uma vez que a massa do envelope convectivo

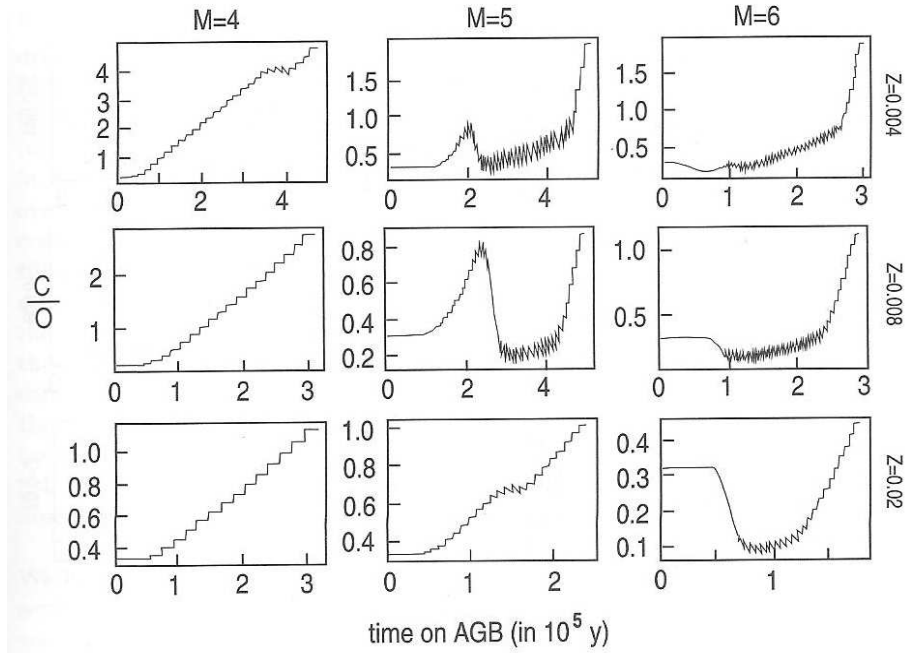


Figura 1.5: A razão  $C/O$  durante a evolução no AGB, para modelos de evolução que consideram  $M = 4, 5$  e  $6M_{\odot}$ , para diferentes metalicidades  $Z = 0.004, 0.008$  e  $Z_{\odot}$ . Adaptado de Lattanzio & Wood, 2003.

diminui. Para os modelos de  $M = 6M_{\odot}$  a razão  $C/O$  diminui desde o início da fase TP-AGB. Devido à dependência do HBB com a massa do envelope convectivo, o aumento da taxa de perda de massa faz com que, para os últimos pulsos térmicos (o final da fase AGB), o HBB cesse, enquanto a terceira dragagem mantém-se ativa, fato que aumenta a razão superficial de  $C/O$ , mas, somente os modelos para baixas metalicidades conseguem formar estrelas carbonadas no final da fase AGB (Figura 1.5), com exceção do modelo para  $M = 5M_{\odot}, Z = 0,008$ . Portanto, estrelas de massas intermediárias poderiam formar gigantes ricas em  $^{14}N$  devido à ação do HBB e não muitas estrelas C. Estrelas de baixas massas, nas quais não acontece o HBB formariam em maior quantidade estrelas carbonadas.

## 1.3 Envoltório Circunstelar

### 1.3.1 Perda de Massa

O final da fase AGB é determinado pela ejeção total da massa da atmosfera estelar. O mecanismo que resulta na alta quantidade de matéria ejetada da atmosfera estelar ainda não é bem estabelecido na literatura. Mas, a formação de partículas sólidas (grãos de poeira) nas camadas ejetadas e a sua interação com o campo de radiação que emerge da estrela, é apontado como o principal mecanismo para acelerar a matéria circundante, o que possibilita a formação do vento estelar. O problema para o entendimento do processo de perda de massa surge da dificuldade de descrever-o desde princípios físicos básicos.

A formação do vento estelar precisa de um mecanismo de ejeção de massa das regiões mais externas da estrela, e um outro mecanismo para que essa matéria seja acelerada e se afaste da fotosfera estelar. O cenário mais aceito na literatura para a formação do vento na fase AGB é o seguinte: Os pulsos térmicos na região central da estrela produzem ondas que se propagam através do gradiente de densidade da atmosfera estelar. Conforme se propaga para fora da estrela, a densidade de matéria diminui, fato que permite que a velocidade de propagação alcance valores supersônicos. Assim que a onda passa, a matéria é comprimida, aquecida e empurrada radialmente para fora da estrela. Esse processo de compressão e aquecimento gera uma frente intensa de radiação, que drena boa parte da energia de propagação da frente de onda de matéria. As camadas mais externas da atmosfera são ejetadas quando interagem com essa frente onda. Quando as condições de temperatura e densidade das camadas ejetadas não são suficientes para a formação de partículas sólidas, essa matéria ejetada começa cair lentamente para a sua posição inicial na fotosfera, como resultado da fraca ação gravitacional da estrela. Mas, a interação com novas frentes de onda emergentes da atmosfera, possibilita que essas camadas ejetadas levitem além da fotosfera. Para acelerar essas camadas de matéria, é necessária uma fonte de momentum ou força direcionada contra a ação gravitacional da estrela. Devido ao fato de que grãos de poeira possuem coeficientes de absorção maiores do que o gás do qual são formados, a eficiência da pressão de radiação é maior quando age em grãos de poeira do que quando age no gás. A aceleração das camadas ejetadas é restrita, então, à formação de pequenas partículas sólidas nessa região. Para esses grãos serem formados, são necessários locais com temperatura baixa o suficiente para que o material condensado alcance



o equilíbrio antes de ser evaporado. Mas, a densidade do material condensável tem que ser alta para garantir que o tempo de condensação e crescimento seja rápido o suficiente para o grão não ser destruído pelo campo de radiação. Tais condições não são satisfeitas por uma atmosfera estelar estática, onde, em regiões fora da fotosfera, a densidade de matéria diminui exponencialmente. Mas, devido às variações radiais que apresenta uma estrela durante a fase AGB, a ejeção de matéria provocada pelas pulsações da atmosfera, e a interação das camadas superiores com as ondas de matéria emergentes, formam um reservatório de matéria de alta densidade que levita ao redor da fotosfera. A temperatura nesse local, após a passagem e o desaparecimento da onda de matéria, diminui drasticamente, possibilitando a formação dos grãos de poeira. Para estrelas AGB, os grãos de poeira representam 1% ou menos da massa total ejetada, mas ao mesmo tempo, têm o papel principal na dinâmica da matéria ejetada. Junto com a ação da pressão de radiação nos grãos, tanto a pressão de radiação em moléculas quanto a pressão térmica e a ação das frentes de onda de matéria no gás, contribuem também, mas não são determinantes, para a aceleração da matéria ejetada contra a gravidade da estrela. Portanto, a pressão de radiação acelera os grãos de poeira até eles alcançarem uma velocidade maior do que a velocidade de escape. A interação dos grãos com o gás possibilita a transferência de momentum através de colisões, o que resulta em uma força de arrastre, que faz com que o gás ultrapasse a barreira de potencial gravitacional.

O gás e os grãos que escapam da ação gravitacional estelar formam um envoltório circunstellar de matéria em expansão. A perda de massa e a eficiência do mecanismo de aceleração dependem das propriedades da estrela (luminosidade, raio, massa, razão  $C/O$ ), assim como as características do envoltório circunstellar (CSE) variam em opacidade, cinemática, química e geometria, de estrela para estrela. Estrelas AGB caracterizam-se por apresentar os valores mais altos de perda de massa. No início da fase AGB, a taxa de perda de massa é  $\sim 10^{-8} M_{\odot} yr^{-1}$ , enquanto que observacionalmente tem-se determinado taxas de perda de massa de  $10^{-4} M_{\odot} yr^{-1}$ , para estrelas no final da fase AGB (Olofsson 2003). Mas, ao mesmo tempo, essas estrelas apresentam os valores mais baixos de velocidade final dos ventos, que tipicamente estão entre  $5 - 15 km s^{-1}$ , alcançando como máximo, valores acima de  $30 km s^{-1}$  no final da fase AGB. Como comparação, a velocidade do vento solar é  $\approx 500 km s^{-1}$ , com uma taxa de perda de massa de  $10^{-14} M_{\odot} yr^{-1}$ .

O mecanismo de perda de massa, como descrito anteriormente, é mais eficiente para

estrelas carbonadas (Estrelas tipo C), nas quais a formação de grãos baseados em carbono, e em particular, a formação de carbono amorfo (que possui altos coeficientes de absorção), garante as altas taxas de perda de massa e a formação dos ventos com as velocidades observadas para estrelas na fase AGB, fato que foi demonstrado por Winters et al. (2000) usando modelos hidrodinâmicos. No entanto, para estrelas oxigenadas (estrelas tipo M), os grãos formados são principalmente silicatos, cujos coeficientes de absorção não são eficientes nos comprimentos de onda nos quais a distribuição espectral de energia da estrela tem o seu máximo de emissão. Mas, a consideração de grãos de silicato poluídos com *Fe* surge como uma possível solução para aumentar a eficiência da pressão de radiação nesse tipo de grãos, garantindo que os ventos possam ser formados pelo mecanismo de perda de massa discutido anteriormente (Hofner 2008).

### Final da fase AGB

A alta taxa de perda de massa ( $10^{-5} - 10^{-4} M_{\odot} yr^{-1}$ ) determina a duração da fase AGB. Assim que a massa da atmosfera atinge um valor crítico ( $\sim 10^{-3} M_{\odot}$ ), a estrela termina a fase AGB, e começa a evoluir na rápida fase conhecida como pós-AGB (também conhecida na literatura como Proto, ou Pré-Nebulosa Planetária - PPN). Durante essa fase, a perda de massa devido aos ventos cessa, o envoltório circunstelar se afasta da estrela, enquanto que a temperatura efetiva da estrela aumenta, mantendo a sua luminosidade aproximadamente constante (a fase pós-AGB será descrita com maior detalhe no capítulo ??). A fase pós-AGB termina uma vez que a temperatura da estrela é alta o suficiente ( $\sim 30.000K$ ) para gerar fótons de alta energia que ionizam o envoltório circunstelar, fato que resulta na formação de uma Nebulosa Planetária (PN). Eventualmente os processos de nucleossíntese cessam na estrela, que agora é basicamente o núcleo de C-O formado durante a evolução na fase AGB. A estrela se esfria, enquanto a sua luminosidade diminui, tornando-se uma Anã Branca.

### 1.3.2 Formação do Envoltório

O aumento da taxa de perda de massa  $\dot{M}$ , durante a evolução na fase AGB tem como principal consequência a formação do Envoltório Circunstelar (Circumstellar Envelope - CSE). O aumento da opacidade, devido ao aumento de  $\dot{M}$ , faz com que toda a radiação

estelar emitida nos comprimentos de onda  $\lambda \leq 1\mu m$  seja absorvida pelo CSE, para ser reemitida, principalmente como emissão térmica dos grãos, em comprimentos de onda maiores. Esse fato resulta no desaparecimento da estrela no óptico, mas torna-se uma fonte muito brilhante no infravermelho.

Em primeira aproximação, a química do envoltório circumstelar reflete a química da atmosfera estelar no momento que o material foi ejetado. Assim, a química da formação da grande variedade de moléculas e grãos presentes nos CSEs é governada pela razão  $C/O$ . Devido a sua estabilidade e a sua alta energia de ligação, a molécula de  $CO$  determina a evolução química do CSE. Em um envoltório com  $C/O < 1$ , praticamente todo o carbono disponível no CSE fica ligado na molécula de  $CO$ . Assim, o envoltório circumstelar apresenta excesso de oxigênio, fato que resulta na formação de moléculas e grãos ricos em  $O$ , por exemplo:  $SiO, OH, H_2O, CO_2$  entre outras. No entanto, com  $C/O > 1$ , uma grande quantidade de  $O$  fica ligado na molécula de  $CO$ , e o CSE apresenta excesso de carbono, o que possibilita a formação principalmente de moléculas carbonadas, por exemplo: Carbono Amorfo (AC), fulereno,  $SiC, HCN, CN, CS$ , entre outros. A fração de abundância das diferentes espécies moleculares no CSE pode ser estimada comparando a abundância de uma determinada espécie com a abundância da molécula  $H_2$ , molécula mais abundante nos CSE, usando a seguinte relação (Olofsson 2003):

$$f_A(r) = \frac{n_A(r)}{n_{H_2}(r)}. \quad (1.1)$$

A abundância de uma determinada molécula depende do raio de formação e do raio no qual é destruída por radiação ou processos químicos. O raio onde a molécula é destruída pela radiação UV do meio interestelar (Raio de Fotodissociação) depende da densidade de coluna do exterior do CSE (que age como escudo contra a radiação interestelar) e da taxa de perda de massa. Por exemplo, para a molécula de  $CO$ , o raio de fotodissociação pode ser estimado usando (Olofsson, 2003; Mamon et al, 1988; Doty & Leung, 1998):

$$R_{ph,CO} = 10^{16} \left( 0,8 \left[ \frac{v_\infty}{15} \right] + 6 \left[ \frac{\dot{M}}{10^{-6}} \right]^{0.7} \left[ \frac{15}{v_\infty} \right]^{0.6} \left[ \frac{f_{CO}}{10^{-3}} \right]^{0.6} \right) cm. \quad (1.2)$$

Enquanto que a massa contida dentro desse raio pode ser obtida aproximadamente usando:

$$M_{ph,CO} = 2 \times 10^{-3} \left[ \frac{\dot{M}}{10^{-6}} \right]^{1.7} \left[ \frac{15}{v_{\infty}} \right]^{1.6} \left[ \frac{f_{CO}}{10^{-3}} \right]^{0.6} M_{\odot}. \quad (1.3)$$

A evolução das condições físicas e químicas do envoltório circumstelar está fortemente ligada aos diferentes campos de radiação com os quais o gás e os grãos de poeira presentes no CSE interagem. O mais importante dos campos de radiação é aquele devido à estrela central. Esse campo de radiação, que varia enquanto a estrela evolui desde a fase AGB até a formação da PN, determina tanto a região de formação das moléculas mais complexas, quanto a região de condensação do gás e formação dos grãos de poeira. A presença dos grãos no envoltório contribui ao espalhamento do campo de radiação estelar. O aquecimento consequente dos grãos, devida à interação com os fótons estelares, produz um campo de radiação térmico, o qual basicamente determina a distribuição de temperatura no CSE. Adicionalmente, o campo de radiação interestelar determina a distribuição radial das varias espécies de moléculas presentes no CSE.

Como mencionado anteriormente, a temperatura da poeira do envoltório circumstelar é determinada pelo balanço entre a energia do campo de radiação estelar absorvida, principalmente nos comprimentos curtos de onda, e a reemissão térmica subsequente, nos comprimentos longos de onda. Tal balanço pode expressar-se, desprezando aquecimento por colisões ou processos químicos, da seguinte forma (Olofsson, 2003):

$$\left( \frac{R_{\star}}{r} \right)^2 \int \pi a^2 F_{\nu} Q_{abs,\nu} d\nu = \int 4\pi a^2 \pi B_{\nu}(T_g(r)) Q_{abs,\nu} d\nu; \quad (1.4)$$

onde  $R_{\star}$  é o raio da estrela,  $F_{\nu}$  é o fluxo de energia da estrela central,  $B_{\nu}$  é a função de Planck, e  $Q_{abs}$  e  $T_g$  são a eficiência de absorção e a temperatura da espécie de grão considerada, respectivamente, e  $a$  é o raio do grão considerado esférico.

A eficiência de absorção da média de Planck é definida da seguinte forma (Gilman 1974):

$$\bar{Q}(T) = \frac{\int_0^{\infty} Q_{abs,\nu} B_{\nu}(T_g) d\nu}{\sigma T_g^4}. \quad (1.5)$$

Devido à variação da função de Planck com a temperatura dos grãos, é necessário utilizar uma representação paramétrica para a média de Planck, do tipo  $\bar{Q} = AT^s$  (Lefèvre.

1979). Assim, substituindo primeiro na equação (1.5) e depois em (1.4), podemos escrever uma expressão para a distribuição da temperatura dos grãos no envoltório circunstellar, como função do raio e do fluxo estelar:

$$T_g = \left( \frac{1}{4\pi\sigma A} \right)^{\frac{1}{4+s}} \left( \frac{R_\star}{r} \right)^{\frac{2}{4+s}} \left( \int_0^\infty Q_{a,\nu} F_\nu d\nu \right)^{\frac{1}{4+s}}. \quad (1.6)$$

A absorção dos grãos da radiação em curtos comprimentos de onda, e a reemissão subsequente em longos comprimentos de onda, tem grande importância para a estrutura térmica e espectral do CSE. Essa termalização leva ao desacoplamento térmico dos grãos e o gás no CSE. Assim, a temperatura dos grãos desvia-se da temperatura do gás no mesmo ambiente, fato que é conhecido como o efeito estufa (Beck et al. 1992).

### 1.3.3 Formação de Grãos no CSE

Em um trabalho teórico detalhado, Gail & Sedlmayr (1984, 1985, 1986, 1987, 1988, 1992) derivaram várias grandezas importantes para o tratamento do problema de formação e crescimento de grãos em condições sem equilíbrio termodinâmico local, e portanto, aplicáveis para inferir em primeira aproximação, os processos físicos e químicos, e as condições necessárias para a formação da grande variedade de grãos nos envoltórios circunstelares de estrelas evoluídas. Esse trabalho considera como base a teoria clássica de nucleação, mas a restringe às condições presentes nos envoltórios de estrelas que apresentam altas taxas de perda de massa.

A formação de poeira em um gás depende da razão de supersaturação de uma espécie de molécula condensável nesse gás. Esse tipo de moléculas combinam-se formando pequenos aglomerados por adição. Existe um tamanho crítico  $N^*$  para o qual o crescimento do aglomerado torna-se mais provável do que a sua evaporação. Esse tamanho crítico é definido como o tamanho para o qual a energia livre de formação  $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$  tem o seu valor máximo, para uma dada densidade e temperatura. A dependência da energia livre com o número de átomos no aglomerado define o número de constituintes  $N$  para o qual o aglomerado está no regime de nucleação ( $N < N^*$ ) ou no regime de crescimento ( $N > N^*$ ). Sob condições de supersaturação, o vapor está em um estado metaestável. Por isso com um pequeno desequilíbrio pode ativar-se a formação dos aglomerados. A razão de supersaturação é definida como:

$$S = \frac{P_p}{P_{sat}}, \quad (1.7)$$

sendo  $P_p$  a pressão parcial do vapor e  $P_{sat}$  a pressão de saturação do sólido à temperatura  $T$ . Assim, segundo a teoria clássica da nucleação, com  $S = 1$ , a quantidade de moléculas incidentes é a mesma quantidade de moléculas que se desprendem de um aglomerado. Por outro lado, com  $S < 1$ , a quantidade de moléculas que incidem na superfície do aglomerado é muito menor, o que resulta na evaporação do aglomerado. Mas, com  $S > 1$ , a quantidade de moléculas que incidem no aglomerado excede o número de moléculas que se desprendem dele, o que permite a formação e o crescimento do aglomerado. A temperatura de condensação, definida como a temperatura acima da qual a transição gás  $\rightarrow$  sólido não acontece, varia de um material para outro, e está entre  $\approx 500K$  para  $Fe_3O_4$  (magnetita), até  $1800K$  para  $Al_2O_3$  (corundum).

A teoria clássica de nucleação descreve a formação de aglomerados de um tamanho crítico em um vapor saturado, utilizando, entre outros, os parâmetros mencionados anteriormente. Essa teoria divide-se em: **Nucleação Homogênea** e **Nucleação Heterogênea**. A nucleação homogênea descreve a formação de aglomerados quimicamente homogêneos pela adição de monômeros (moléculas de um só tipo). A formação dos grãos sólidos ocorre se o processo aleatório de combinação das moléculas consegue formar aglomerados com tamanho maior do que o tamanho crítico, a partir do qual o aglomerado continua a crescer até o seu tamanho final. Com a nucleação de moléculas de um só tipo (Nucleação Homogênea Homomolecular) pode-se explicar a formação de AC em envoltórios de estrelas carbonadas e de silicatos,  $MgO$ ,  $Fe-$  e  $MgS$  em envoltório de estrelas oxigenadas. Nucleação Homogênea Heteromolecular explica a formação de AC a partir da combinação de vários tipos de moléculas, como  $C_1$ ,  $C_2$ ,  $C_1H$ ,  $C_2H_1$ , *etc*, e a formação de silicatos a partir de diferentes moléculas, por exemplo:  $SiO$ ,  $MgO$ , que formam  $MgSiO_3$ .

A nucleação Heterogênea descreve a formação de aglomerados a partir de reações químicas com núcleos (sementes) já formados no meio, seja por nucleação homogênea Homomolecular ou Heteromolecular. Assim, devido à adição de moléculas de vários tipos, é formado um aglomerado com uma nova composição química (Gail & Sedlmayr, 1986). Esse pode ser o mecanismo de formação de aglomerados em cenários com alta contribuição de fótons UV, onde, devido à presença de íons alcalinos, os aglomerados formados não seriam neutros. Esse fato resulta na formação de aglomerados com carga,

que ao interagir com diferentes tipos de moléculas, forma aglomerados poluídos com tamanho crítico.

Nos envoltórios circunstelares, as escalas de tempo que governam a o mecanismo de nucleação, como a escala de tempo em que acontecem as reações químicas ( $\tau_{ch}$ ) e a escala de tempo de crescimento do aglomerado até o tamanho crítico ( $\tau_{gr}$ ), são muito menores que a escala de tempo que governa a evolução hidrodinâmica dos ventos estelares. Portanto, o processo de nucleação é considerado como um processo estacionário.

O crescimento dos grãos de tamanhos maiores que o tamanho crítico pode ser descrito utilizando a função de distribuição de aglomerados de tamanho  $N > N^*$  no instante de tempo  $t$ ,  $f(N, t)$ . A evolução temporal de  $f(N, t)$  é determinada pela soma das taxas dos processos envolvidos na variação de tamanho  $N$  dos aglomerados. Devido a que as escalas de tempo de crescimento dos grãos são comparáveis à escala de tempo que governa a evolução hidrodinâmica do sistema, o mecanismo de crescimento dos grãos tem que considerar-se dependente do tempo. A função de distribuição  $f(N, t)$  permite definir os momentos da função de distribuição como:

$$K_j = \sum_{N=N^*}^{N_u} N^j f(N, t), \quad (1.8)$$

onde  $N^*$  e  $N_u$  denotam o tamanho mínimo e máximo dos grãos considerados pela função de distribuição, enquanto  $d$  é a estrutura espacial do grão, sendo  $d = 3$  para estruturas esféricas e  $d = 2$  para estruturas planas. Assim, o primeiro momento  $K_0$  representa o número total de grãos com tamanho entre  $N^*$  e  $N_u$ , enquanto que o momento  $K_d$  é o número total de monômeros condensados em grãos (Gail & Sedlmayr, 1988). Derivando (1.8) com relação ao tempo, podem se obter grandezas como a taxa de nucleação  $J^*$ , definida como a variação temporal do número total de grãos,  $K_0$ . Os momentos  $K_j$  têm unidades de  $[cm^j cm^{-3}]$  e portanto, referem-se a potencias do valor médio do raio do grão com relação à função de distribuição de tamanho, por exemplo:

Raio médio dos grãos

$$\langle a \rangle = A \frac{K_1}{K_0}, \quad (1.9)$$

Área superficial média dos grãos

$$\langle A \rangle = B \frac{K_2}{K_0}, \quad (1.10)$$

Volume médio dos grãos

$$\langle V \rangle = \frac{K_3}{K_0}, \quad (1.11)$$

com  $A$  e  $B$  sendo constante numéricas (Dominik et al, 1993).

Considerando grãos de tamanhos tais que a sua absorção na região espectral do óptico começa ser relevante, sendo que  $N_{opt} \geq N^*$ , é necessário calcular a variação temporal dos momentos maiores, com os quais podem se determinar as propriedades de absorção dos grãos, e então estimar taxas de aceleração dos grãos e as suas propriedades de radiação no infravermelho (Gail & Sedlmayr, 1988).

A adição de moléculas e monômeros determina o crescimento dos grãos. O tipo de estrutura formada (monocristalino, policristalino ou amorfo) depende da taxa de adição desses monômeros à superfície do grão. Se a captura é lenta, cada monômero capturado terá tempo de encontrar a posição energeticamente mais favorável, dentro da estrutura cristalina do grão, antes da captura de um outro monômero. Assim, se o tempo entre uma captura e a seguinte é maior que o tempo de reajuste da estrutura cristalina, o crescimento do grão torna-se um processo que passa através de uma sequência de configurações em equilíbrio termodinâmico. Portanto, espera-se a formação de estruturas monocristalinas. Por outro lado, se a captura de monômeros é rápida, comparada com o tempo de reajuste dos monômeros capturados na estrutura cristalina, o processo de crescimento resulta na formação de uma estrutura amorfa. O caso intermediário, no qual pode acontecer um reajuste local da estrutura, resulta na formação de grãos com estrutura policristalina.

Nos ventos estelares de estrelas frias, a escala de tempo de crescimento é comparável como a escala de tempo de evolução hidrodinâmica do sistema. Assim, os grãos em regime de crescimento estão expostos a variações de temperatura e condições químicas, como variações das abundâncias das espécies condensantes, resultando na formação de grãos com manto e grãos com estruturas heterogêneas (grãos poluídos).

O aumento de luminosidade causa o aumento de temperatura nas primeiras camadas do CSE, principal região de condensação dos grãos. Nessas condições, o gás torna-se subsaturado,  $S < 1$ . Assim, os termos referidos aos processos de evaporação dos grãos tornam-se mais importantes que os termos referidos aos mecanismos de crescimento na função  $f(N, t)$ , e a direção da fase de transição é invertida. Portanto, em estrelas no ramo AGB haverá camadas onde, segundo a fase de luminosidade da estrela, os grãos serão nucleados ou evaporados.



Como estrelas AGB são os principais contribuintes ao enriquecimento do meio interestelar, muitos trabalhos, tanto teóricos quanto experimentais, têm sido desenvolvidos no intuito de aprimorar o conhecimento dos mecanismos de formação dos grãos presentes nos CSEs. A opacidade dos envoltórios circumstelares depende das espécies de grãos formados, e da quantidade desses grãos. Utilizando modelos de transferência radiativa, as principais características espectrais no infravermelho próximo e médio, região espectral na qual a emissão de radiação é devido aos grãos presentes nos CSEs, podem ser ajustadas. Os resultados desses ajustes fornecem valores para a opacidade que podem ser utilizados, como primeira aproximação, para inferir a quantidade de grãos necessária para gerar as intensidades das características espectrais observadas. Portanto, devido à influência da opacidade dos grãos na dinâmica e termodinâmica dos CSEs, os resultados fornecidos pelos modelos de transferência radiativa, podem ser utilizados para o estudo da evolução dinâmica dos envoltórios circumstelares de estrelas AGB.

# Capítulo 2

## Transferência Radiativa

Como parte deste trabalho, em parceria com o meu colega de Mestrado Theo Chousinho Khouri Silva, com a colaboração de Alain-Jacques Lucien de Burlet, e a supervisão da professora Silvia Lorenz Martins, foi desenvolvido um novo código de transferência radiativa, o qual chamamos *Projeto MonRaT* (Monte Carlo Radiative Transfer model). O novo código está escrito na linguagem C, e foi baseado no código de transferência radiativa desenvolvido em Fortran por Celniker & Lefèvre (1974), que foi modificado por Lefèvre (1982) e por Lorenz-Martins (1995). A minha principal contribuição ao projeto foi a construção do módulo *MonRaT\_Mie*, encarregado do cálculo numérico das equações fornecidas pela teoria de Mie, para a interação entre a luz e partículas esféricas de raio arbitrário  $a$ , com  $a \gg \lambda$ .

A seguir é feita a descrição da física do problema da interação luz e matéria, e do algoritmo utilizado para a simulação de envoltórios circunstelares com o novo código.

### 2.1 Teoria de Mie

A teoria de Mie, desenvolvida de forma independente por Mie (1908) e Debye (1909), é a solução formal para as equações de Maxwell para o problema de espalhamento de luz polarizada, devido à interação com partículas esféricas de raio arbitrário. As propriedades de espalhamento de uma partícula esférica de raio  $a$ , na qual incide uma onda plano-polarizada de comprimento de onda  $\lambda$ , podem ser determinadas como função do parâmetro adimensional  $x$ , e do índice de refração complexo  $m$ , definidos da seguinte forma:

$$x = \frac{2\pi a}{\lambda}, \quad (2.1)$$

$$m = n - ik, \quad (2.2)$$

onde  $n$  e  $k$  são os índices de refração e absorção, respectivamente. Na literatura  $n$  e  $k$  são conhecidos como as constantes ópticas de um determinado material, e em geral  $n$  e  $k$  são função do comprimento de onda (Figura 2.1). Para materiais dielétricos  $k = 0$ , portanto  $m$  torna-se real, sendo  $m = n$ . Para materiais que apresentem alta absorção,  $k$  é da mesma ordem que  $n$ , e ambos variam significativamente com o comprimento de onda  $\lambda$

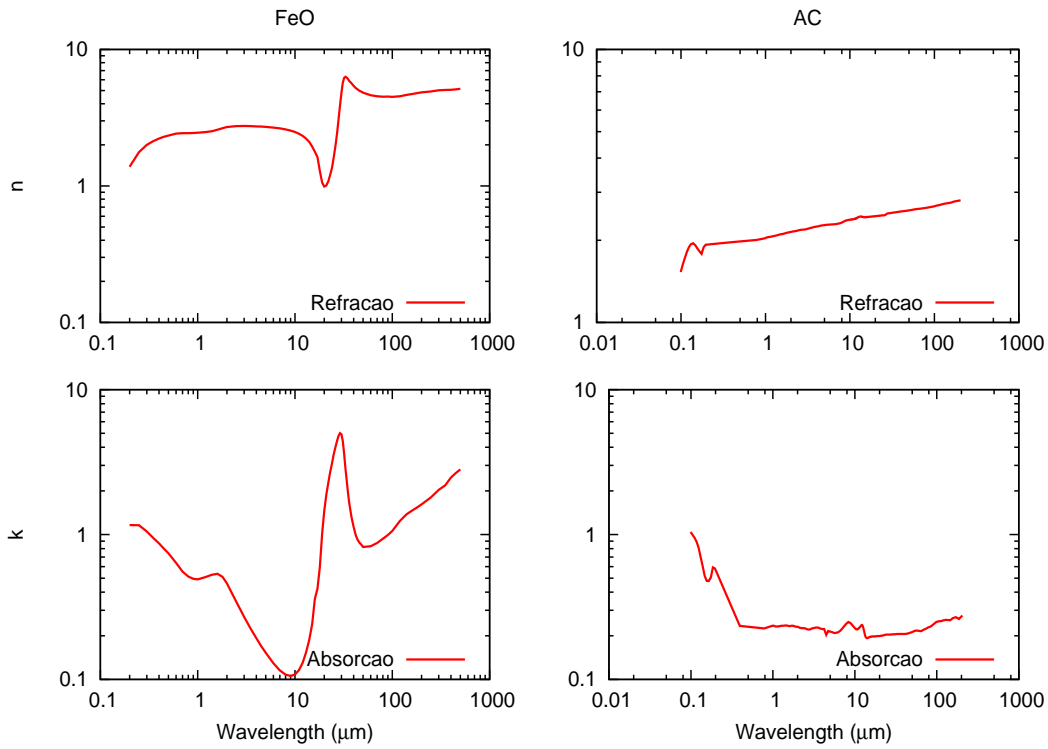


Figura 2.1: Coeficientes de refração (painel superior) e absorção (painel inferior) para FeO e Carbono amorfo

Utilizando a teoria de Mie podemos calcular as seções de choque de espalhamento ( $C_{sca}$ ), de absorção ( $C_{abs}$ ), e a função de fase  $S(\theta)$ . Com a relação entre a seções de choque e a seção de choque geométrica  $\pi a^2$ , podem definir-se as eficiências de extinção  $Q_{ext}$ , de espalhamento  $Q_{sca}$ , de absorção  $Q_{abs}$  assim como também o albedo  $\gamma$ , da seguinte forma:

$$Q_{abs} = \frac{C_{abs}}{\pi a^2}, \quad (2.3)$$

$$Q_{sca} = \frac{C_{sca}}{\pi a^2}, \quad (2.4)$$

$$Q_{ext} = Q_{sca} + Q_{abs}, \quad (2.5)$$

$$\gamma = \frac{Q_{sca}}{Q_{ext}}. \quad (2.6)$$

De forma geral, o cálculo das eficiências de espalhamento e absorção pode ser feito utilizando as formulas de Mie dadas por:

$$Q_{ext} = \frac{2}{x^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \Re(a_n + b_n), \quad (2.7)$$

$$Q_{sca} = \frac{2}{x^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) [|a_n|^2 + |b_n|^2], \quad Q_{abs} = Q_{ext} - Q_{sca} \quad (2.8)$$

onde  $a_n$  e  $b_n$  são definidos por

$$a_n = \frac{x\psi'_n(y)\psi_n(x) - y\psi'_n(x)\psi_n(y)}{x\psi'_n(y)\zeta_n(x) - y\zeta'_n(x)\psi_n(y)} \quad (2.9)$$

$$b_n = \frac{y\psi'_n(y)\psi_n(x) - x\psi'_n(x)\psi_n(y)}{y\psi'_n(y)\zeta_n(x) - x\zeta'_n(x)\psi_n(y)}, \quad (2.10)$$

sendo

$$y = mx. \quad (2.11)$$

As funções  $\psi_n(z)$ ,  $\zeta_n(z)$  são conhecidas como as funções de *Ricatti-Bessel*, que estão definidas em função das funções de *Bessel*  $J_n$ :

$$\psi_n(z) = \left(\frac{\pi z}{2}\right)^{1/2} J_{n+1/2}(z), \quad (2.12)$$

$$\zeta_n(z) = \left(\frac{\pi z}{2}\right)^{1/2} \left[ J_{n+1/2}(z) + i(-1)^n J_{-n-1/2}(z) \right] \quad (2.13)$$

Para valores pequenos de  $x$  ( $\lambda \gg a$ ) é utilizada a aproximação de Rayleigh para o cálculo das eficiências de extinção:

$$Q_{sca} \simeq \frac{8}{3} x^4 \left| \frac{m^2 - 1}{m^2 + 1} \right|^2, \quad (2.14)$$

$$Q_{ext} \simeq 4x^3 \left[ \frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \right]. \quad (2.15)$$

Para esferas dielétricas,  $m$  é real, e portanto  $Q_{abs} = 0$ ,  $Q_{ext} = Q_{abs} \propto x^4 \propto \lambda^{-4}$  para o espalhamento Rayleigh.

As medidas observacionais do albedo  $\gamma$  podem ser usadas para fazer restrições na componente imaginária (coeficiente de absorção) do índice de refração complexo. Portanto, como definido na equação (2.6), para  $Q_{ext} \geq Q_{sca} \geq 0$ ,  $0 \leq \gamma \leq 1$ . Para dielétricos puros ( $k = 0$ ),  $Q_{ext} = Q_{sca}$  e portanto  $\gamma = 1$ . Enquanto que para materiais muito absorventes,  $Q_{sca} \simeq 0$ , o que resulta em  $\gamma \simeq 0$ .

Utilizando a teoria de Mie também pode-se calcular a função de fase  $S(\theta)$ . Essa função representa a fração de energia incidente em uma partícula esférica, que é espalhada dentro de um ângulo sólido, definido por uma direção arbitrária, que faz um ângulo  $\theta$  com relação à direção de propagação da onda incidente. Para o cálculo da função de fase a teoria de Mie fornece duas amplitudes complexas, dadas por:

$$S_1(\theta) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} [a_n \pi_n(\cos\theta) + b_n \tau_n(\cos\theta)], \quad (2.16)$$

$$S_2(\theta) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} [b_n \pi_n(\cos\theta) + a_n \tau_n(\cos\theta)]. \quad (2.17)$$

onde  $\pi(\cos\theta)$  e  $\tau(\cos\theta)$  são definidos como:

$$\pi_n(\cos\theta) = P'_n(\cos\theta), \quad (2.18)$$

$$\tau_n(\cos\theta) = \cos\theta \pi_n(\cos\theta) - \sin^2\theta \frac{d}{d\cos\theta} \pi_n(\cos\theta), \quad (2.19)$$

sendo  $P_n(\cos\theta)$  os polinômios de Legendre. Assim, a função de fase total pode obter-se da seguinte forma:

$$S(\theta) = \frac{1}{2} \left( \frac{\lambda}{2\pi} \right)^2 [|S_1(\theta)|^2 + |S_2(\theta)|^2]. \quad (2.20)$$

A função de fase permite definir o parâmetro de assimetria  $g$ , como sendo a média da função  $\cos\theta$ , ponderada pela função de fase  $S(\theta)$ :

$$g(\theta) = \langle \cos\theta \rangle \quad (2.21)$$

$$= \frac{\int_0^\pi S(\theta) \sin\theta \cos\theta d\theta}{\int_0^\pi S(\theta) \sin\theta d\theta}. \quad (2.22)$$

Para  $x \ll 1$ ,  $g(\theta) \simeq 0$ , o que se traduz como espalhamento esfericamente simétrico, enquanto que  $0 < g(\theta) < 1$  para partículas maiores ( $a \sim \lambda$ ), indicando espalhamento assimétrico. Portanto, a função  $g(\theta)$  depende do tamanho da partícula, sendo que para partículas maiores, a energia é espalhada majoritariamente na direção da onda incidente (forward-directed scattering).

### 2.1.1 Módulo MonRaT\_Mie

O módulo **Monrat\_Mie** foi construído com o objetivo de computar numericamente as equações fornecidas pela teoria de Mie para a interação entre radiação e matéria. Esse módulo faz o cálculo das eficiências de absorção  $Q_{abs}$ , de espalhamento  $Q_{sca}$ , de extinção  $Q_{ext}$  e da função de fase  $S(\theta)$ . O cálculo computacional dessas grandezas foi baseado nas fórmulas de recorrência dadas por Wickramasinghe (1973). O módulo **Monrat\_Mie** é composto pelo arquivo de cabeçalho *Monrat\_Mie.h*, no qual são definidas as variáveis globais e rotinas a serem utilizadas; e o arquivo *Monrat\_Mie.c*, no qual estão escritas as diferentes rotinas que são usadas para o cálculo das grandezas antes mencionadas. O módulo **Monrat\_Mie** faz uso das rotinas do *GSL* para o cômputo de equações com variáveis complexas. O código completo do módulo **Monrat\_Mie** é apresentado no apêndice **A**.

No arquivo *Monrat\_Mie.c* estão definidas as seguintes rotinas:

- **Monrat\_Mie\_New**: Essa rotina é encarregada de definir o espaço em memória para cada uma das variáveis utilizadas.

- **Monrat\_Mie\_RicattiBessel:** Essa rotina calcula numericamente as funções de Ricatti-Bessel, fornecendo os valores da função  $\zeta_n(x)$  e da função  $A_n(y) = \frac{\psi'(y)}{\psi(y)}$ , para cada valor de  $x$  e  $y$ , dados pela equação (2.1) e (2.11) respectivamente.
- **Monrat\_Mie\_AnBnFunction:** Essa rotina faz o cálculo numérico das funções  $a_n$  e  $b_n$  definidas nas equações (2.9) e (2.10).
- **Monrat\_Mie\_PFPParameters:** Essa função calcula as funções  $\pi_n(\cos\theta)$  e  $\tau_n(\cos\theta)$  definidas nas equações (2.18) e (2.19).
- **Monrat\_Mie\_EffCreation:** Essa rotina calcula as eficiências de espalhamento, extinção e absorção.
- **Monrat\_Mie\_PFCreation:** Essa função é encarregada de calcular a função de fase  $S(\theta)$ .

O problema básico para o cálculo computacional das equações da teoria de Mie é computar os valores para  $a_n$  e  $b_n$  para valores dados de  $m$  e  $x$ . Os valores de  $a_n$  e  $b_n$  são calculados usando as seguintes relações de recorrência

$$a_n = \frac{\left(\frac{A_n(y)}{m} + \frac{n}{x}\right) \Re(\zeta_n(x)) - \Re(\zeta_{n-1}(x))}{\left(\frac{A_n(y)}{m} + \frac{n}{x}\right) \zeta_n(x) - \zeta_{n-1}(x)}. \quad (2.23)$$

$$b_n = \frac{(mA_n(y) + \frac{n}{x}) \Re(\zeta_n(x)) - \Re(\zeta_{n-1}(x))}{(mA_n(y) + \frac{n}{x}) \zeta_n(x) - \zeta_{n-1}(x)}. \quad (2.24)$$

Para gerar os valores para  $\zeta_n(x)$  é usada a relação de recorrência:

$$\zeta_n(x) = \frac{2n-1}{x} \zeta_{n-1} - \zeta_{n-2},$$

$$\zeta_0(x) = \sin(x) + i \cos(x), \quad (2.25)$$

$$\zeta_{-1}(x) = \cos(x) - i \sin(x). \quad (2.26)$$

Enquanto que para a função  $A_n(y)$ :

$$A_n(y) = -\frac{n}{y} + \left( \frac{n}{y} - A_{n-1}(y) \right)^{-1}, \quad (2.27)$$

$$A_0(y) = \frac{\cos(y)}{\sin(y)}, \quad (2.28)$$

onde  $n$  varia até  $n = 15$ . Uma vez calculados os valores para  $a_n$  e  $b_n$ , são calculadas as eficiências da seguinte forma:

$$Q_{ext} = \frac{2}{x^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \Re(a_n + b_n), \quad (2.29)$$

$$Q_{sca} = \frac{2}{x^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) [|a_n|^2 + |b_n|^2], \quad Q_{abs} = Q_{ext} - Q_{sca}, \quad (2.30)$$

onde o limite superior das somatórias é dado pela relação entre os últimos valores a serem somados. Assim, uma vez que a razão entre o valor  $n$  e  $n-1$  seja menor que  $10^{-4}$ , a soma de termos é encerrada e computado o valor total para  $Q_{ext}$  e  $Q_{sca}$ . Para valores de  $x$  menores que  $5 \times 10^{-2}$  é usada a aproximação de Rayleigh para o cálculo das eficiências, como definidas nas equações (2.14) e (2.15).

Os parâmetros  $\pi(\cos \theta)$  e  $\tau(\sin \theta)$  são computados usando as fórmulas:

$$\pi(\cos \theta) = \left( \frac{2n-1}{n-1} \cos \theta \right) \pi_{n-1}(\cos \theta) - \frac{n}{n-1} \pi_{n-2}(\cos \theta), \quad (2.31)$$

$$\begin{aligned} \tau_n(\cos \theta) = \cos \theta [\pi_n(\cos \theta) - \pi_{n-2}(\cos \theta)] - (2n-1) (\sin^2 \theta) (\pi_{n-1}(\cos \theta)) \\ + \tau_{n-2}(\cos \theta), \end{aligned} \quad (2.32)$$

onde

$$\pi_0(\cos \theta) = 0,$$

$$\tau_0(\cos \theta) = 0,$$

$$\pi_1(\cos \theta) = 1,$$

$$\tau_1(\cos \theta) = \cos \theta,$$

$$\pi_2(\cos \theta) = 3 \cos \theta,$$

$$\tau_2(\cos \theta) = 3 \cos 2\theta.$$



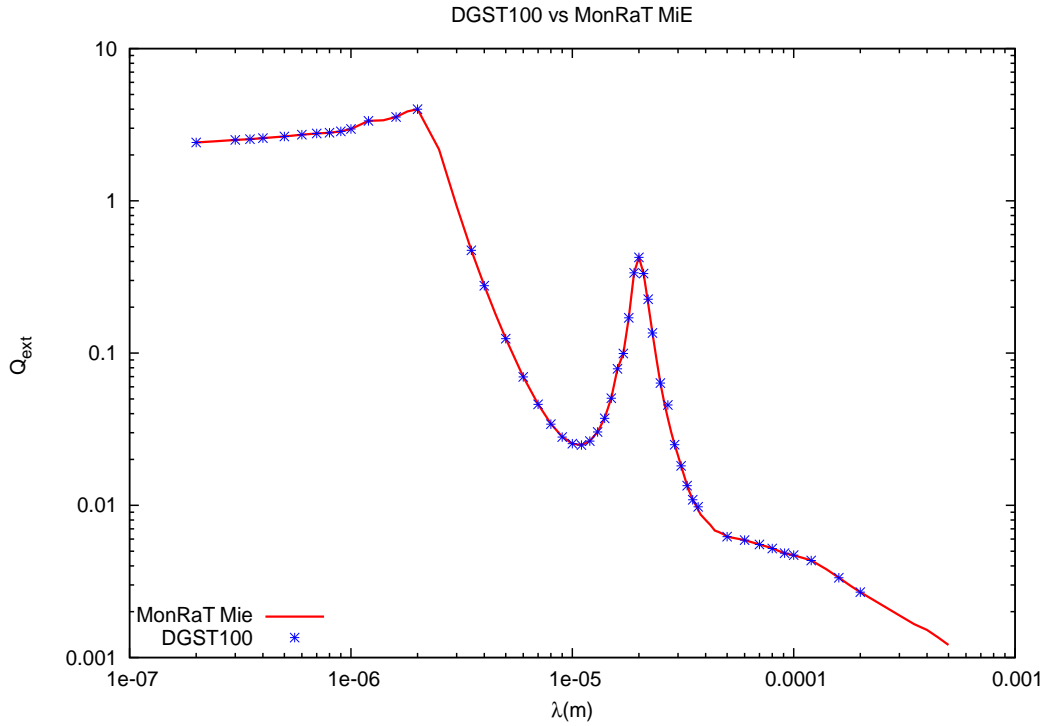


Figura 2.2: Comparação dos resultados optidos usando o código DGST100 e o módulo MonRaT\_Mie para grãos de FeO com  $a = 0.35\mu m$ .

Uma vez calculados esses parâmetros, são computadas as amplitudes  $S_1(\theta)$  e  $S_2(\theta)$  usando as equações (2.16) e (2.17). Os somatórios para as equações (2.16) e (2.17) são computados enquanto a adição do último fator aumente o resultado do somatório em uma quantidade maior que  $1 \times 10^{-3}$ . Portanto,  $S(\theta)$  é computada para  $0 \leq \theta \leq \pi$ , usando a equação:

$$S(\theta) = \sin(\theta)[|S_1(\theta)|^2 + |S_2(\theta)|^2]. \quad (2.33)$$

A Figura 2.2 apresenta a comparação da eficiência de extinção ( $Q_{ext}$ ) calculada com o código de transferência radiativa DGST100 (Lorenz-Martins, 1995) e o resultado do módulo MonRaT\_Mie, para grãos de FeO. Podemos notar a perfeita concordância entre os resultados. A Figura 2.3 apresenta as eficiências de extinção para as espécies de grãos utilizadas nesse trabalho: SiC, MgS, carbono amorfo e FeO. Esses gráficos mostram os comprimentos de onda onde os grãos são mais atuantes.

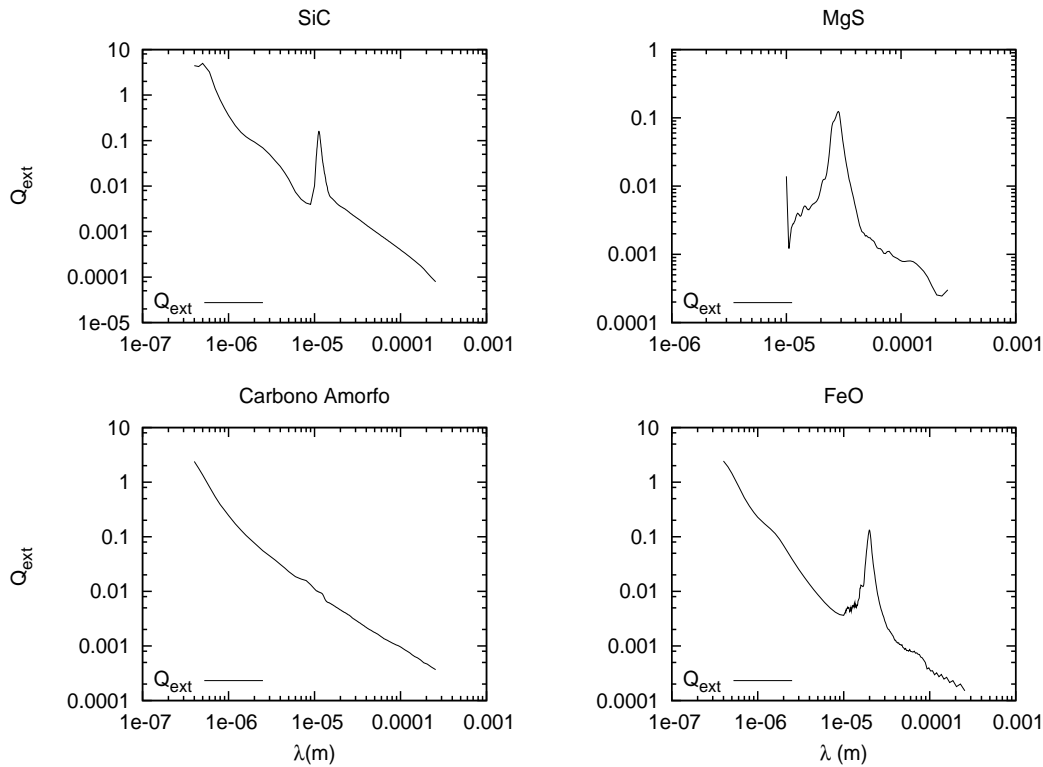


Figura 2.3: Eficiência de extinção calculada para quatro compostos diferentes usando o módulo MonRaT\_Mie.

## 2.2 Simulação de envoltórios circumstelares

### 2.2.1 Método Monte Carlo

O método Monte Carlo é aplicado a problemas físicos e matemáticos que possuem um grande grupo de parâmetros para a descrição de um determinado problema. A variação conjunta desses parâmetros é determinada estatisticamente. Assim, a densidade de probabilidade  $F(x)$ , que descreve o comportamento estatístico da variável  $x$  no intervalo  $[a, b]$ , pode ser determinada resolvendo a integral:

$$A \int_a^b F(x) dx = 1, \quad (2.34)$$

onde  $A$  é o fator de normalização da função de densidade de probabilidade. Portanto, uma vez gerado um número aleatório  $C$  entre  $[0, 1]$ , esse número pode ser relacionado à função de densidade da seguinte forma:

$$A \int_a^{x'} F(x) dx = C. \quad (2.35)$$

A solução do problema utilizando o método Monte Carlo é dada por um grande número de iterações. Assim, quanto maior seja o número de iterações de cada variável, a convergência do modelo torna-se maior. O erro intrínseco deste tipo de modelos é proporcional a  $\frac{1}{\sqrt{N}}$ , sendo N o número de iterações. Na nossa simulação de envoltórios circunstelares, o número de iterações é grande o suficiente para que o erro do modelo seja menor que 1%.

### 2.2.2 Algoritmo MonRaT.

#### Parâmetros de entrada

Os parâmetros de entrada, os quais são definidos pelo usuário, necessários para iniciar o cálculo dos modelos para os envoltórios circunstelares são:

- Temperatura efetiva da estrela  $T_{ef}$ .
- Propriedades dos grãos:
  - Quantidade de espécies para ser consideradas no modelo.
  - Tamanho dos grãos.
  - Valores das constantes ópticas  $n$  e  $k$ , para cada espécie de grão, para a faixa de comprimentos de onda que será considerada.
- Raio interno,  $R_{in}$ , e raio externo,  $R_{out}$ , do envoltório circunstellar. O valor do  $R_{in}$  pode ser definido para cada espécie de grão diferente.
- Número de camadas isotérmicas em que o envoltório circunstellar será dividido.
- Opacidade do envoltório para um comprimento de onda.

Uma vez definida a temperatura efetiva da estrela  $T_{ef}$ , é computada a função de distribuição de Planck em função do comprimento de onda  $\lambda$ . A função de distribuição de energia é dividida em um número arbitrário de intervalos  $\Delta\lambda$ . Por tal motivo, o programa não simula a propagação de fótons individuais com energia  $h\nu$ , mas a propagação

de pacotes de energia associados a cada intervalo  $\lambda$  e  $\lambda + \Delta\lambda$ . A quantidade de pacotes emitidos em cada um dos intervalos é definida pela relação entre a área de cada intervalo e a área total da função de Planck. A energia de cada pacote emitido em um determinado intervalo é definida pela relação entre a área do intervalo e a quantidade de pacotes associados ao intervalo considerado.

Após a definição da quantidade de pacotes a serem emitidos com energia  $E$ , sorteia-se a posição na superfície da estrela e a direção de emissão para cada pacote separadamente. A direção de emissão é sorteada entre  $0 \leq \theta \leq \pi$  e  $0 \leq \phi \leq 2\pi$ .

Uma vez escolhida a direção de propagação do pacote, é computada a opacidade total entre o raio interno ( $R_{in}$ ) e o raio externo ( $R_{out}$ ) do envoltório circunstellar, para essa trajetória. A opacidade total entre os limites do envoltório é dada por:

$$\tau_{L,\lambda} = \int_{R_{in}}^{R_{out}} N(r) \pi a^2 Q_{ext} dr, \quad (2.36)$$

onde  $N(r)$  é a função de distribuição de densidade de grãos de poeira no envoltório, dada por:

$$N(r) = \frac{N_0}{r^m}, \quad (2.37)$$

onde  $N_0 = N(r = 0)$ . Substituindo 2.37 a equação 2.36 fica:

$$\tau_{L,\lambda} = N_0 \pi a^2 Q_{ext} \int \frac{dr}{r^m}, \quad (2.38)$$

equação que relaciona analiticamente a opacidade do envoltório e a distância radial  $r$  de cada ponto da trajetória. O caso para  $m = 2$  representa uma variação radial da densidade de grãos no envoltório circunstellar, assumindo taxa de perda de massa constante.

Com a opacidade total da trajetória escolhida, é computada a probabilidade de interação de cada pacote com os grãos do envoltório, da seguinte forma:

$$P_{int} = 1 - e^{-\tau_{L,\lambda}} \quad (2.39)$$

O pacote emitido pela estrela pode não interagir e sair do envoltório circunstellar com a mesma energia que foi emitido, nesse caso, a energia do pacote é contabilizada no

espectro obtido no resultado final, como energia direta da estrela. Para saber se o pacote emitido interage ou não com os grãos do envoltório, é gerado um número aleatório tal que, se for maior que a probabilidade de interação dada pela equação (2.39), o pacote sai sem interagir, mas se for menor que  $P_{int}$ , é simulada a interação do pacote com um grão do envoltório.

Dentro da trajetória inicial de cada pacote é sorteado um ponto  $x$ , tal que  $R_{in} < x < R_{out}$ . A probabilidade de interação com um grão do envoltório no ponto  $x$  é uma fração da probabilidade dada pela equação 2.39. Assim, para escolher o ponto  $x$ , é gerado um número aleatório  $A$  entre 0 e  $P_{int}$ , e portanto, a probabilidade de interação no ponto  $x$  é dada por:

$$1 - e^{\tau_{x,\lambda}} = A. \quad (2.40)$$

$$(2.41)$$

Resolvendo para  $\tau_{x,\lambda}$ :

$$\tau_{x,\lambda} = -\ln(1 - A). \quad (2.42)$$

Uma vez conhecida a opacidade no ponto  $x$ , pode-se calcular a distância radial até esse ponto resolvendo numericamente a integral:

$$\int_0^x \frac{dr}{r^m} = \frac{1}{N_0 \pi a^2 Q_{ext}} \int_0^x d\tau. \quad (2.43)$$

Quando o pacote considerado interage com um grão do envoltório, parte da energia do pacote será absorvida pelo grão, e parte será espalhada numa nova direção de propagação. Essas frações de energia são calculadas pelo programa da seguinte forma:

$$E_{abs} = E_{ini} \frac{Q_{abs}}{Q_{ext}}, \quad (2.44)$$

$$E_{sca} = E_{ini} \frac{Q_{sca}}{Q_{ext}}, \quad (2.45)$$

onde  $E_{ini}$  é a energia do pacote antes de interagir. A energia absorvida pelos grãos em cada uma das camadas é somada. A energia total absorvida permite calcular o perfil

de temperatura inicial do envoltório, o qual considera só aquecimento por radiação da estrela, e não aquecimento por radiação térmica dos outros grãos do envoltório. Portanto, tendo computado a energia total absorvida em cada uma das camadas, é usada a equação de equilíbrio radiativo

$$W_{abs,i} = \int_0^\infty 4\pi a^2 Q_{abs}(\lambda) B_\lambda(T_g) d\lambda, \quad (2.46)$$

onde  $W_{abs,i}$  é a quantidade de energia absorvida na camada  $i$ . Para resolver a integral do lado direito pode ser usado o coeficiente médio de absorção de Planck, que como foi mencionado no Capítulo anterior, é definido por

$$\bar{Q}(T) = \frac{\int_0^\infty Q_{abs}(\lambda) B_\lambda(T) d\lambda}{\int B_\lambda(T) d\lambda}. \quad (2.47)$$

Assim, usando a representação paramétrica  $\bar{Q}(T) = AT^\alpha$ , a temperatura da camada  $i$  do envoltório circunestelar é computada da seguinte forma:

$$T_{1,i} = \left( \frac{W_{abs,i}}{4\pi a^2 A} \right)^{\frac{2}{4+\alpha}}. \quad (2.48)$$

A energia espalhada é considerada como um novo pacote de energia. Segundo a função de fase, a qual define a distribuição de probabilidade para as direções de propagação possíveis após cada interação, é sorteada uma nova direção de propagação para o pacote. De novo é computada a opacidade total da trajetória escolhida e a probabilidade de escapar sem interagir com os grãos do envoltório, da mesma forma que foi descrita anteriormente. Se o pacote sofre uma nova interação, de novo parte da energia do pacote é absorvida e a outra parte é espalhada. Assim, a parcela de energia absorvida na nova interação  $W'_{abs}$ , é somada à energia absorvida em cada camada  $W_{abs}$ , o que produz um novo perfil de temperatura no envoltório circunestelar, calculado da seguinte forma:

$$T_{2,i} = \left( \frac{W_{abs,i} + W'_{abs,i}}{4\pi a^2 A} \right)^{\frac{2}{4+\alpha}}. \quad (2.49)$$

O percurso de cada pacote no envoltório é simulado até o pacote escapar do envoltório, ou até a sua energia ser menor que um valor crítico de energia  $E_C$ .

Uma vez que o envoltório circumstelar atinja o equilíbrio térmico entre as diferentes camadas, é simulada a emissão térmica dos grãos. A emissão dos grãos é simulada segundo a distribuição espectral  $Q_{abs}(\lambda)B_{\lambda}(T_2)$ . Assim, para cada camada, a distribuição espectral, ponderada pela eficiência de absorção, é dividida em função do comprimento de onda, e da mesma forma que foi feito para a estrela, é definida a energia e a quantidade de pacotes a serem emitidos em cada um dos intervalos.

O resultado final da simulação é a distribuição das energias direta, espalhada, emitida pelos grãos e total, em função do comprimento de onda, e a distribuição de temperatura dos grãos  $T_g$  no envoltório em função do raio. Os parâmetros: Tamanho dos grãos ( $a$ ), opacidade do envoltório ( $\tau_{\lambda}$ ), fração de grãos de cada espécie, temperatura do objeto central ( $T_{ef}$ ), raio interno ( $R_{in}$ ) e externo ( $R_{ext}$ ) do envoltório, também são fixados pela modelagem.

# Capítulo 3

## Estrelas Carbonadas Extremas

### 3.1 Introdução

Segundo as propriedades espectrais no infravermelho médio ( $\sim 10\mu m$ ) das estrelas carbonadas na fase AGB, elas podem ser divididas em dois grupos: As menos evoluídas, conhecidas como estrelas carbonadas visíveis (*Visual carbon stars*), as quais apresentam maior contribuição de energia fotosférica na sua distribuição espectral de energia; e as estrelas carbonadas infravermelhas (*Infrared carbon stars*), cuja distribuição espectral é dominada pela emissão térmica dos grãos presentes no envoltório circumstelar (Volk et al. 1992), e que, portanto, são mais evoluídas.

Uma das principais características espectrais das carbonadas infravermelhas é a emissão em  $\sim 11\mu m$  devido ao SiC. De fato, a presença da banda de emissão do SiC garante a natureza carbonada da fonte observada. No entanto, Volk et al (1992), utilizando espectros de baixa resolução (LRS) do satélite IRAS, estudaram um subgrupo de 30 estrelas carbonadas com temperatura de cor muito baixa no diagrama cor-cor do IRAS, e invisíveis no óptico. Eles notaram que a banda de emissão de SiC para as estrelas desse subgrupo varia em intensidade. Várias dessas fontes apresentam emissão fraca de SiC (ex. IRC+10216), outras não apresentam emissão nem absorção na faixa compreendida entre  $10\mu m - 13\mu m$  e, no caso de AFGL 3068, essa banda aparece em absorção. A natureza carbonada dessas fontes foi determinada usando linhas de emissão rádio de CO e HCN (Omont et al. 1993).

A diminuição da intensidade da banda de emissão de SiC foi interpretada como um



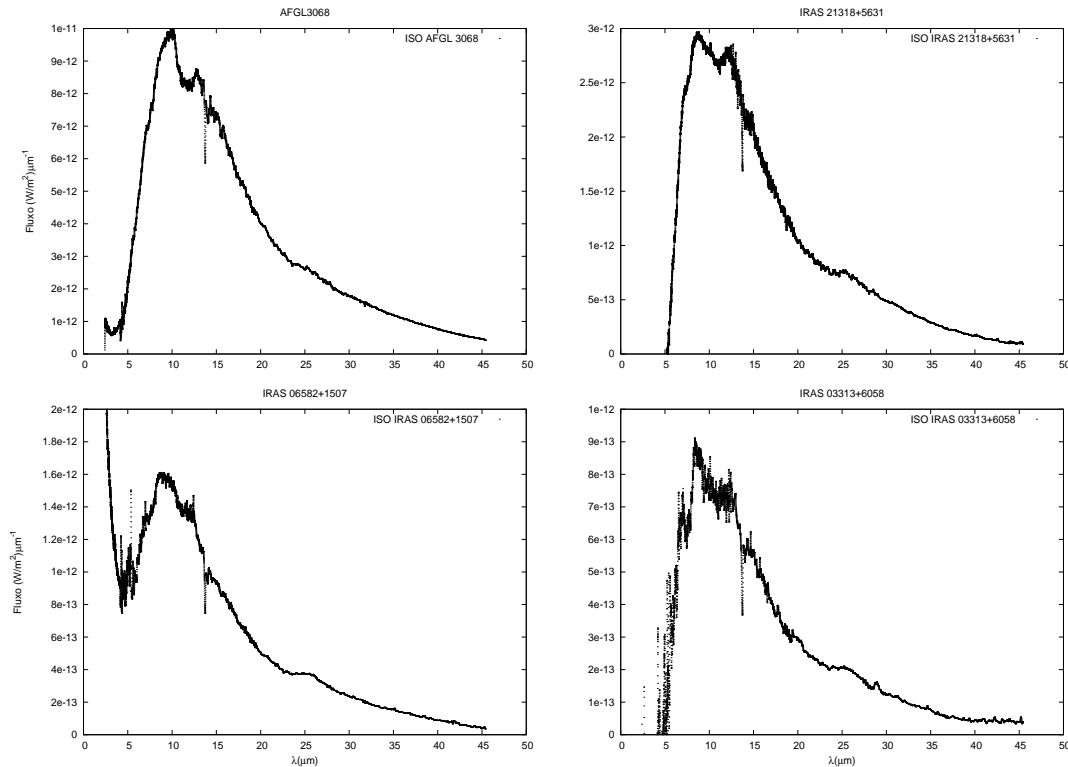


Figura 3.1: Espectros ISO SWS de estrelas carbonadas extremas.

efeito da alta extinção circunstelar dessas fontes. No final da fase AGB, a taxa de perda de massa aumenta, atingindo valores máximos ( $\sim 10^{-5} - 10^{-4} M_{\odot} \text{yr}^{-1}$ ), e como consequência a opacidade do envoltório aumenta também. Esse aumento faz com que a estrela fique invisível para comprimentos de onda menores do que  $1 \mu\text{m}$ . Devido ao aumento da opacidade do envoltório circunstelar, no final da fase AGB, começa a ocorrer um processo conhecido como autoabsorção. Assim, a radiação emitida pelos grãos das camadas mais internas do envoltório circunstelar é absorvida pelo mesmo envoltório. Portanto, se a emissão de SiC no espectro de uma fonte é fraca, isto é equivalente a dizer que a opacidade do envoltório é alta o suficiente para absorver parcialmente a radiação emitida pelos grãos de SiC presentes no envoltório. Por outro lado, para envoltórios com opacidade maior, essa banda pode desaparecer ou eventualmente ser observada como uma banda de absorção, como é o caso para AFGL 3068 (Speck et al. 1997). Volk et al. (1992) chamaram as estrelas desse subgrupo de *Estrelas carbonadas extremas*, as quais estão no último estágio da evolução da fase AGB, baseados nos espectros LRS IRAS, definiram como estrela carbonada extrema aquelas fontes que apresentassem as seguintes características:

- A razão entre a densidade do fluxo nos curtos comprimentos de onda e nos longos comprimentos de onda deve ser menor que 4, ie, o contínuo no infravermelho é mais plano, quando comparado com o contínuo de outras estrelas carbonadas.
- O espectro LRS IRAS não apresenta características espectrais conhecidas na faixa compreendida entre  $8 - 23\mu m$ , desconsiderando a presença ou não da emissão  $\sim 11\mu m$ .
- Queda pronunciada na região do espectro próxima a  $\sim 8\mu m$ .
- A fonte não possui uma análoga brilhante no óptico.

As observações do satélite ISO têm fornecido uma excelente base de dados observacionais, tanto na região do infravermelho médio quanto na do infravermelho distante, para o estudo das principais características espectrais das estrelas carbonadas extremas. As observações feitas nos comprimentos de onda curtos dessa região do espectro, utilizando o SWS (*Short Wavelength Spectrometer*) do ISO, permitiram obter espectros de alta resolução na faixa de comprimentos de onda  $2,3\mu m < \lambda < 45,2\mu m$ . A Figura 3.1 apresenta espectros ISO SWS de quatro estrelas carbonadas extremas modeladas neste trabalho. Os espectros no infravermelho médio das estrelas carbonadas extremas são caracterizados por não apresentarem muitas características espectrais. Por isso, o fluxo do contínuo dos espectros nessa região é atribuído aos grãos de carbono amorfo presentes nos envoltórios circumstelares.

As duas características mais relevantes que aparecem nos espectros SWS do ISO para as carbonadas extremas são: fraca banda de emissão ou de absorção na faixa  $\lambda \sim 10 - 12,5\mu m$ , atribuída ao processo de auto-absorção dos grãos de SiC no envoltório circumstelar (Lorenz-Martins & Lefèvre, 1994; Speck et al, 1997, 2009); e uma banda de emissão muito larga, que no caso de estrelas carbonadas extremas apresenta o seu máximo de emissão em  $\lambda \sim 25,3\mu m$ , mas, é conhecida na literatura como a característica "30 $\mu m$ ". Essa banda de emissão foi observada pela primeira vez no espectro infravermelho de IRC+10216 (Low et al. 1973), o qual apresenta emissão fraca de SiC em  $11,3\mu m$ . Goebel & Moseley (1985), usando o *NASA Kuiper Airborne Observatory*, confirmaram a presença da banda em  $30\mu m$  no espectro de IRC+10216 e observaram-na também no espectro de AFGL 3068. Essas duas fontes são consideradas como protótipos de estrelas carbonadas extremas.

Com as observações do satélite ISO, a emissão em  $30\mu m$  foi detectada nos espectros de AFGL 4106 (Molster et al. 1997), e IRAS 03313+6058 (Jian et al. 1999), entre outras fontes candidatas a estrelas carbonadas extremas. Esta emissão também foi detectada nos espectros de estrelas carbonadas infravermelhas (Hony et al. 2004), pós-AGBs carbonadas (Omont et al. 1995; Hrivnak et al. 2000; Volk et al. 2002), e nebulosas planetárias jovens ricas em carbono (Forrest et al. 1981; Moseley et al. 1982). A banda de emissão  $30\mu m$  começa em  $\sim 22,8\mu m$  e vai além do limite superior do espectrógrafo (SWS) do ISO.

Vários compostos têm sido sugeridos como os responsáveis pela emissão da característica em  $30\mu m$ . O fato de que essa característica não aparece nos espectros de estrelas evoluídas ricas em oxigênio, restringe o grupo de compostos candidatos. Portanto, têm sido consideradas espécies de grãos que possam formar-se em meios com pouca quantidade de óxidos. Omont et al. (1995) sugeriram que a emissão em  $30\mu m$  era gerada por átomos de Fe ligados a moléculas de PAH. Papoular (2000) sugeriu grãos baseados em moléculas de carbono com estrutura poluída por oxigênio. Grishko et al. (2001) sugeriram HAC (carbono amorfo hidrogenado) como possível composto gerador.

Goebel & Moseley (1985) propuseram grãos de MgS como responsáveis pela emissão em  $30\mu m$ . Essa sugestão foi baseada em dois fatos: *i*) os espectros no infravermelho obtidos no laboratório de amostras de MgS por Nuth et al. (1985), mostraram que esse composto apresenta só uma banda de emissão, a qual se ajusta bem com a característica observada nos espectros das fontes astronômicas. *ii*) os resultados dos cálculos da sequência química de condensação em meios ricos em carbono mostraram que MgS faz parte dos compostos que são condensados nesses ambientes, para baixos valores de temperatura (Lattimer 1982), o que é consistente com o fato de ter observado a característica em  $30\mu m$  em fontes com envoltórios circunstelares frios. Jian et al. (1999) modelaram o espectro ISO obtido para a estrela carbonada extrema IRAS 03313+6058, enquanto que Szczerba et al. (1999) usaram o mesmo código de transferência radiativa para modelar o espectro da pós-AGB rica em carbono IRAS 04296+3429. Nesses dois levantamentos foram usadas as propriedades ópticas para o MgS, fornecidas pelas medidas de laboratório feitas por Begemann et al. (1994), para uma composição de 90% de Mg e 10% de Fe do composto MgFeS. A partir da análise da intensidade da banda em  $30\mu m$  para essas fontes, e dos resultados dos modelos, os autores concluíram que a abundância tanto de Mg como

de S, necessária para a emissão da banda em  $30\mu m$ , é menor que a abundância medida a partir de espectros fotosféricos de estrelas carbonadas. Portanto, a quantidade de grãos que podem ser formados a partir da quantidade de MgS no envoltório não representa um problema para atribuir tal emissão aos grãos desta espécie (Szczerba et al. 1999).

Hony et al. (2002) compararam os espectros ISO-SWS de 63 fontes carbonadas, incluindo estrelas carbonadas infravermelhas, extremas, pós-AGBs e PNe ricas em carbono, todas com a banda de emissão em  $30\mu m$  presente no espectro. Supondo MgS como o composto gerador da banda em  $30\mu m$  para todas as fontes, eles determinaram as variações dessa característica espectral para os diferentes estágios de evolução das estrelas consideradas. A variação mais evidente da banda em  $30\mu m$  é o deslocamento do comprimento de onda central  $\lambda_c$  de menores para maiores comprimentos de onda como função da medida de cor [25] – [60]. O comprimento de onda  $\lambda_c$  é definido como o  $\lambda$  que divide a banda de  $30\mu m$  em duas parcelas com a mesma área. A medida de cor [25] – [60] equivale a medir a temperatura dos grãos nos envoltórios, a qual depende da distância à estrela, das propriedades de absorção nos comprimentos de onda onde a estrela e os grãos emitem, e do tamanho dos grãos no envoltório. Portanto, o deslocamento de  $\lambda_c$  para comprimentos de onda maiores pode estar ligado à variação de temperatura nos envoltórios circunstelares ao longo da sequência de evolução entre estrelas C no final da fase AGB e PNe, passando pelas fases de carbonada extrema e pós-AGB. A quantidade de energia emitida na banda  $30\mu m$  também varia consideravelmente. Para estrelas carbonadas infravermelhas com envoltórios circunstelares opticamente fino, a baixa intensidade da banda de emissão é proporcional à quantidade de grãos de MgS presentes no envoltório. Com o aumento da taxa de perda de massa, a quantidade de MgS no envoltório aumenta, e portanto, a quantidade de energia emitida através da banda de emissão em  $30\mu m$  aumenta também. Estrelas pós-AGB e PNe emitem  $\sim 25\%$  da energia total no infravermelho através da banda  $30\mu m$ . Assim então, a intensidade da banda também varia ao longo da evolução de estrelas carbonadas para pós-AGB e PNe.

As variações do perfil da característica de emissão em  $30\mu m$  podem ser consequência da geometria dos grãos de MgS presentes no envoltório circunstelar. A secção de choque do MgS, para os comprimentos de onda  $\sim 30\mu m$ , é muito sensível à geometria do grão. Begemann et al. (1994) consideraram uma distribuição de grãos elípticos para ajustar o perfil da característica em  $30\mu m$  observada na estrela CW Leo. O mesmo tipo de grãos

foi considerado por Jian et al. (1999) e Szczerba et al. (1999), para ajustar as emissões em  $30\mu m$  de IRAS 03313+6058 e IRAS 04296+3429 respectivamente. Hony et al. (2002) compararam a emissão gerada usando grãos esféricos e grãos elípticos, mostrando que para esses últimos, a banda gerada é mais larga e deslocada para comprimentos de onda maiores. Considerando uma distribuição de grãos elípticos, pode ser feita uma boa aproximação à interação da radiação com uma distribuição de grãos irregulares. A emissão obtida usando grãos esféricos é mais estreita, e ajusta-se melhor na parte azul da banda em  $30\mu m$ , enquanto que grãos elípticos produzem uma banda de emissão mais larga, a qual se ajusta melhor para os comprimentos de onda maiores da característica em  $30\mu m$  (Hony et al. 2002).

Embora muito já tenha sido feito com as estrelas carbonadas extremas com relação à banda em  $30\mu m$ , ainda existem algumas dúvidas sobre a geometria dos grãos e mesmo sobre a composição química dos mesmos.

## 3.2 Resultados

Nesta sessão apresentamos nossa contribuição para o estudo das estrelas carbonadas extremas e a emissão em  $30\mu m$ . Para isso calculamos novos modelos para os envoltórios de seis estrelas carbonadas extremas, utilizando o código MonRaT, descrito no Capítulo 2, considerando envoltórios com simetria esférica. Nossos modelos consideraram quatro espécies de grãos simultaneamente, a fim de ajustar as principais características espectrais das carbonadas extremas. As espécies consideradas foram :Carbono Amorfo (AC), Carbetto de Silício ( $SiC$ ),  $FeO$  e  $MgS$ . Usamos carbono amorfo como a principal componente dos envoltórios que foram modelados. Tal espécie não apresenta características espectrais importantes no infravermelho médio, e portanto, espera-se que seja o composto responsável pela emissão do contínuo. Para o AC utilizamos as constantes ópticas  $(n, k)$  publicadas por Roleau & Martin, (1991). O carbetto de silício foi usado para ajustar a característica em  $\sim 11,3\mu m$  das estrelas carbonadas extremas, já que é o composto mais aceito na literatura como o responsável por gerar essa característica. Para essa espécie usamos as constantes ópticas calculadas por Pégourié (1988). Para a característica espectral em  $30\mu m$  seguimos a sugestão de Goebel & Moseley (1985), e usamos  $MgS$  para ajustar essa banda de emissão. Nesse caso usamos as constantes publicadas por Be-

gemann et al. (1994) para uma composição de  $Mg_xFe_{1-x}S$  com  $x = 0,9$ . Também consideramos grãos de FeO para os modelos de carbonadas extremas com o intuito de avaliar quais efeitos seriam causados pela presença desse composto nos espectros simulados para as carbonadas extremas. Para o FeO utilizamos as constantes ópticas publicadas por Henning et al. (1997), para  $T = 100K$  e para a faixa de comprimentos de onda compreendida entre  $10\mu m < \lambda < 500\mu m$ . Para a região compreendida entre  $0.4\mu m < \lambda < 10\mu m$  usamos as constantes publicadas por Henning et al. (1995). Os modelos foram ajustados aos espectros ISO SWS das seis fontes consideradas, obtidos do atlas publicado por Sloan et al, (2002). Esse tipo de modelagem, considerando quatro espécies de grãos simultaneamente, é inédita no estudo de carbonadas extremas.

Na Tabela 3.1 apresentamos a nossa amostra de estrelas carbonadas extremas juntamente com a velocidade de expansão dos ventos e taxas de perda de massa calculadas por Groenewegen et al. (1999, 2002). Pode-se ver que nessa fase evolutiva as taxas de perda de massa são bastante altas.

Tabela 3.1: Velocidades de expansão e taxas de perda de massa calculadas por Groenewegen et al. (1999, 2002) usando medidas das transições rádio de CO

Fonte	$v_{exp}$ km/s	$\dot{M}_{gs}$ $M_{\odot} yr^{-1}$	$\dot{M}_{poeira}$ $M_{\odot} yr^{-1}$
IRAS 02408+5458	11	$1.60 \times 10^{-5}$	$3.5 \times 10^{-7}$
IRAS 03313+6058	13.9	$2.37 \times 10^{-5}$	$1.14 \times 10^{-7}$
IRAS 06582+1507	13.7	$1.43 \times 10^{-5}$	$1.07 \times 10^{-7}$
IRAS 21318+5631	19.6	$7.69 \times 10^{-6}$	$1.18 \times 10^{-7}$
AFGL 3068	15.1	$1.44 \times 10^{-5}$	$8.27 \times 10^{-8}$
AFGL 5625	-	-	-

Na Figura 3.2 apresentamos os melhores ajustes obtidos por nós para essas fontes. A Tabela 3.2 apresenta os valores dos parâmetros obtidos para esses ajustes. Esses parâmetros são: Temperatura efetiva da estrela  $T_{ef}$  (K), opacidade do envoltório em  $11,3\mu m$   $\tau_{11,3\mu m}$ , raio interno e externo do envoltório  $R_{in}$  ( $R_{\star}$ ) e  $R_{ext}$  ( $R_{\star}$ ), raio dos grãos  $a$  ( $\mu m$ ), e porcentagem de grãos de cada espécie AC, SiC, FeO, MgS.

Na Figura 3.2 pode ver-se que os modelos ajustam bastante bem ao contínuo de ener-

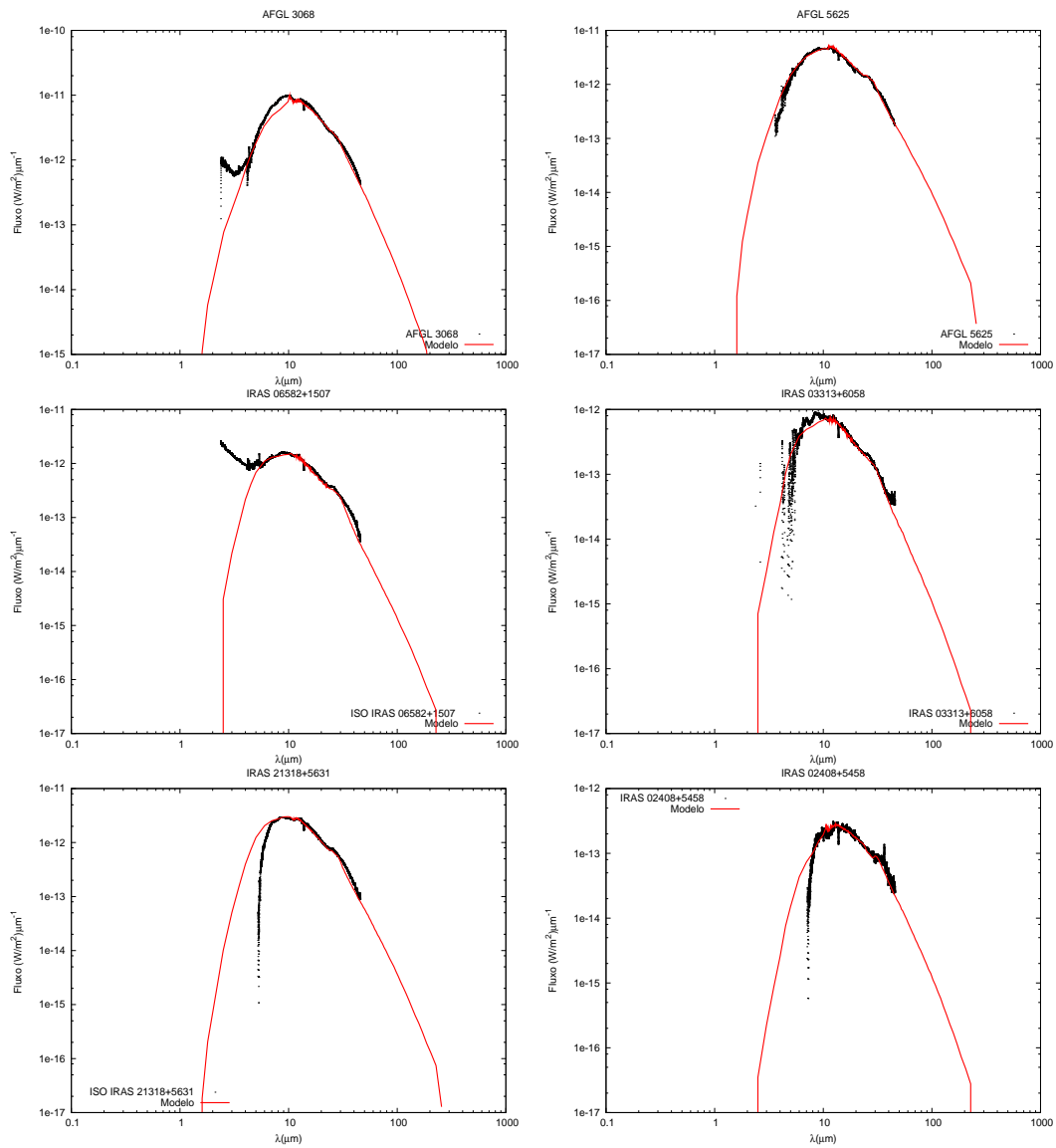


Figura 3.2: Melhores ajustes obtidos para a amostra de carbonadas extremas considerada.

gia das fontes consideradas. Para comprimentos de onda menores que  $10\mu m$ , na maioria dos casos, não obtivemos um bom ajuste ao contínuo. Para o MgS, não são conhecidos os valores das constantes ópticas para  $\lambda < 10\mu m$ . Por tal motivo, já que o AC não apresenta características espectrais no infravermelho médio, completamos a faixa de comprimentos de onda compreendida entre  $0,4\mu m < \lambda < 10\mu m$  para o MgS, com as constantes ópticas do AC. Esse poderia ser um dos motivos pelo qual o ajuste não é perfeito nessa região espectral.

Na Figura 3.3 apresentamos o ajuste à característica em  $30\mu m$ . As quatro primeiras fi-

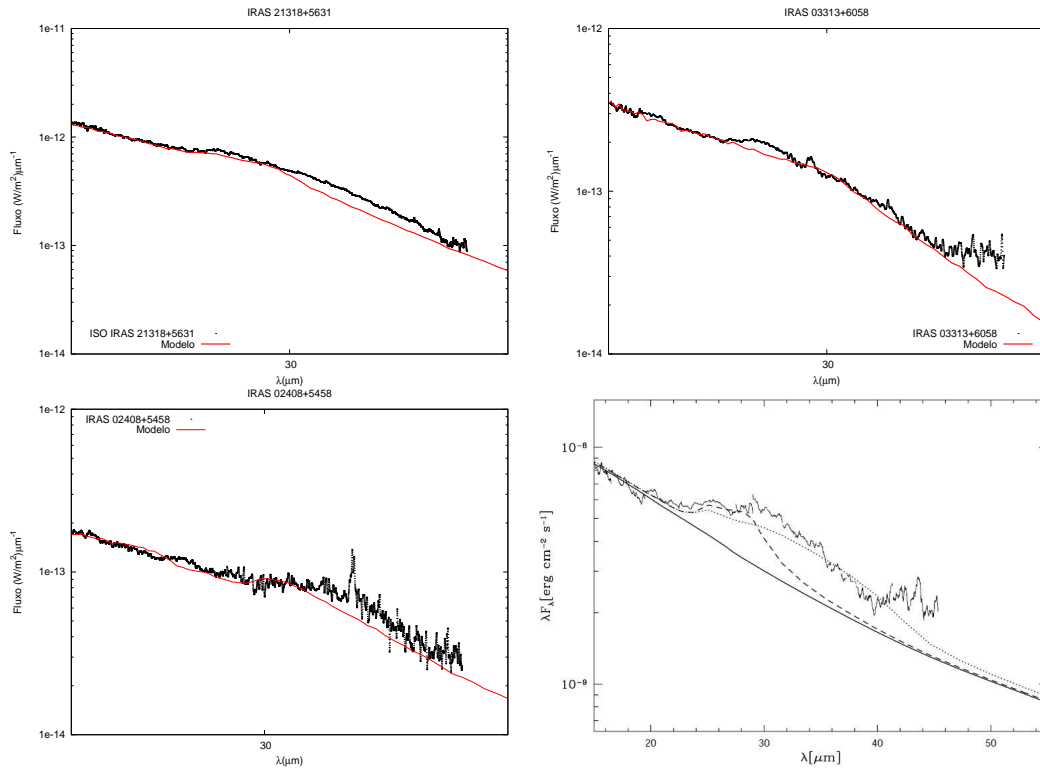


Figura 3.3: Detalhe do ajuste para a característica em  $30\mu m$ . Os painéis superiores mostram nossos ajustes nessa região espectral (linha vermelha). No painel inferior apresentamos o ajuste feito por Jiang et al. (1999) para IRAS 03313+6058, usando uma função de opacidade empírica, considerando grãos esféricos de MgS (linha tracejada), e distribuição de grãos elípticos (linha pontilhada).

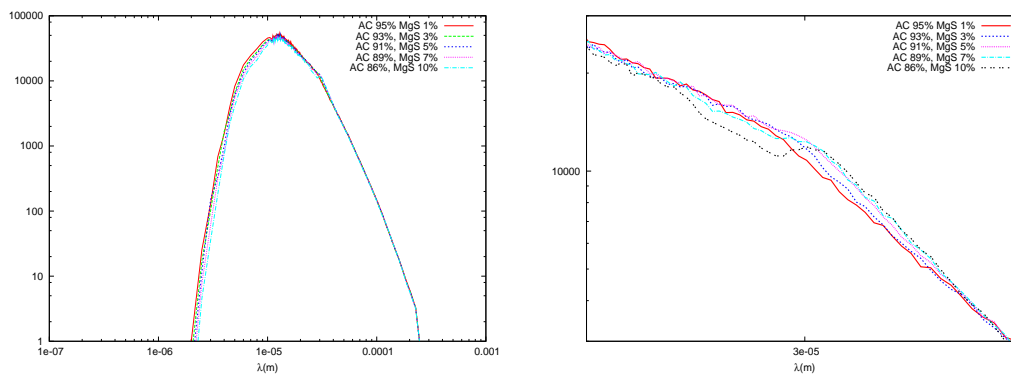


Figura 3.4: Modelos para diferentes proporções MgS/AC, mantendo todos os parâmetros restantes constantes.

guras são ampliações da região desta emissão obtidas através de nossos modelos enquanto que a quinta figura foi retirada de Jian et al. (1999) para fins de comparação. Neste tra-



Tabela 3.2: Parâmetros com os quais obtivemos os melhores ajustes.  $R_{in,1}$  é o raio interno do envoltório para o AC, SiC e MgS, enquanto que  $R_{in,2}$  é o raio interno para o FeO. AC, SiC, MgS e FeO são as porcentagens obtidas para cada espécie no modelo.

IRAS	02408+5458	03313+6058	06582+1507	21318+5631	AFGL 3068	AFGL 5625
$T_{ef}(K)$	2300	2500	2800	2500	2500	2000
$\tau_{11.3\mu m}$	2.2	2.55	2.2	2.1	1.6	1.5
$R_{in,1}(R_{\star})$	40	10	10	20	45	20
$R_{in,2}(R_{\star})$	150	100	100	100	200	100
$R_{ext}(R_{\star})$	1000	1000	1000	1000	1000	500
$a_{AC}(\mu m)$	0.09	0.1	0.07	0.09	0.08	0.09
$a_{SiC}(\mu m)$	0.1	0.1	0.07	0.09	0.08	0.1
$a_{MgS}(\mu m)$	0.12	0.12	0.09	0.11	0.07	0.12
$a_{FeO}(\mu m)$	0.06	0.06	0.06	0.06	0.03	0.06
AC	0.88	0.86	0.83	0.90	0.87	0.92
SiC	0.02	0.02	0.02	0.05	0.03	0.02
MgS	0.08	0.1	0.1	0.03	0.05	0.04
FeO	0.02	0.02	0.05	0.02	0.05	0.02

balho eles utilizaram uma função de opacidade empírica considerando grãos esféricos de MgS (linha tracejada) para ajustar os comprimentos de onda mais curtos da emissão. Para o ajuste dos comprimentos de onda mais longos, consideraram uma distribuição de grãos elípticos (linha pontilhada). Mesmo assim, o ajuste não é completo. Os nossos modelos ajustam bem o início da banda de emissão, mas não conseguimos ajustá-la totalmente. A medida em que aumentamos a opacidade do envoltório a característica em  $30\mu m$  começa a apresentar auto-absorção, enquanto que variações na quantidade de grãos produzem aumento (ou diminuição) da intensidade da emissão da banda. Por outro lado, variações da temperatura efetiva da estrela produzem deslocamento global do espectro simulado. Uma sugestão seria que os modelos considerassem, simultaneamente, grãos esféricos e grãos elípticos, além de diversas espécies.

Na Figura 3.4 apresentamos modelos com  $T_{ef} = 2000K$ ,  $\tau_{11,3\mu m} = 2,2$  e tamanho

fixo para grãos de:  $a_{AC} = 0,09\mu m$ ,  $a_{SiC} = 0,1\mu m$ ,  $a_{FeO} = 0,06\mu m$ ,  $a_{MgS} = 0,12\mu m$ , considerando diferentes proporções da quantidade de grãos de MgS com respeito à quantidade total de grãos no envoltório. Variamos a proporção total de grãos de MgS entre 1% e 10%. Observamos que, para menores valores desta proporção, a característica em  $30\mu m$  não é gerada, enquanto que para 10% a auto-absorção começa a ser produzida nos curtos comprimentos de onda da banda de emissão. Segundo Hony & Bouwman (2004), a quantidade de massa contida em átomos de Mg e S, em um gás de composição solar, é de no máximo 20% com relação aos átomos de carbono, mas não necessariamente todos os átomos disponíveis são condensados em grãos de MgS. De acordo com nossos modelos, uma estrela com baixa temperatura efetiva e alta opacidade no envoltório circunstelar, precisa ter entre 3% e 7% de grãos de MgS no envoltório, com relação à quantidade total de grãos, para gerar a característica espectral em  $30\mu m$ . E assim a quantidade de MgS que os nossos modelos sugerem é menor que a máxima quantidade sugerida por Hony & Bouwman (2004).

Embora a modelagem forneça a distribuição radial das temperaturas de cada espécie de grão, a Tabela 3.3, apresenta a temperatura média para todas as espécies de grãos. Vemos que a temperatura média do carbono amorfo é, em geral, maior que as temperaturas médias dos outros compostos considerados, e portanto, a emissão do contínuo (gerada por estes grãos) domina o fluxo de energia no infravermelho médio. Para grãos de FeO, os modelos fornecem temperaturas muito baixas em relação à temperatura média do AC mas a probabilidade de oxidação do Fe é maior para baixas temperaturas ( $100K < T < 150K$ , Duley, 1980; Posch et al, 2004). Portanto, se o FeO for formado nos envoltórios de estrelas carbonadas extremas por oxidação de grãos de Fe, ou pela redução de  $Fe_2O_3$  ou de  $Fe_3O_4$ , devemos considerar o cenário mais real possível para favorecer tais reações. Por tal motivo, nos nossos modelos consideramos que a primeira camada dos grãos de FeO é mais afastada da estrela central que a primeira camada do envoltório circunstelar. Os resultados apresentados na Tabela serão analisados no Capítulo 5.

Como conclusão podemos dizer que nossos modelos de transferência radiativa, incorporando quatro espécies de grãos simultaneamente, ajustam bastante bem tanto o contínuo quanto as principais características espectrais de estrelas carbonadas extremas. Reconhecemos, no entanto, que os modelos ainda podem melhorar se (1) dispusermos de um conjunto completo de constantes ópticas para o MgS, em um grande intervalo espectral e

Tabela 3.3: Temperatura média calculada para cada espécie de grão considerada.

	$T_{med,AC}(K)$	$T_{med,SiC}(K)$	$T_{med,FeO}(K)$	$T_{med,MgS}(K)$
IRAS 02408+5458	200.13	203.41	107.07	187.13
IRAS 03313+6058	358.82	355.7	104.21	345.06
IRAS 06582+1507	406.91	403.18	114.56	406.88
IRAS 21318+5631	295.32	288.12	122.03	273.93
AFGL 3068	214.28	211.10	107.35	187.11
AFGL 5625	237.71	232.78	104.88	216.34

(2) utilizarmos, além de grãos esféricos, grãos com simetria elíptica, simultaneamente.

# Capítulo 4

## Estrelas Pós AGB

### 4.1 Introdução

Estrelas pós-AGB representam uma rápida fase da evolução estelar entre estrelas AGB e PNe. Estes objetos podem ser conhecidos também como nebulosas proto-planetárias ou pré-planetárias. Nesta dissertação, usaremos o termo pós-AGB. Nesta fase evolutiva, as altas taxas de perda de massa da estrela cessam e o envoltório circunstelar, formado na fase AGB, está suficientemente afastado da estrela. Assim, a radiação da estrela central atravessa o envoltório opticamente fino, dando origem a uma distribuição de energia de duplo-pico, com quantidade de energia comparável tanto na componente fotosférica quanto na componente circunstelar. Nas pós-AGBs, a temperatura efetiva da estrela começa a aumentar e pode variar entre  $5000K - 10000K$ , gerando radiação cada vez mais energética mas, mantendo a luminosidade aproximadamente constante. A fase pós-AGB termina quando a radiação gerada pela pré-anã branca central fotoioniza o envoltório circunstelar, tornando-se uma PNe (Kwok, 2000).

#### 4.1.1 A emissão $21\mu m$

Um pequeno subgrupo de pós-AGBs é caracterizado por uma banda em emissão no infravermelho médio do espectro, centrada em  $20,1\mu m$ , mais conhecida na literatura como a banda  $21\mu m$ . Essa classe foi primeiramente descoberta por Kwok et al.(1989) que investigaram o espectro LRS de quatro fontes IRAS na fase pós-AGB. Até hoje, conhece-se

somente dezesseis fontes que apresentam essa característica espectral. Tais fontes possuem uma razão  $C/O > 1$  em seus envoltórios circumstelares, o que pode indicar que a distribuição espectral de energia no infravermelho seja produzida por moléculas e grãos ricos em carbono. A Figura 4.1 apresenta espectros obtidos com o telescópio espacial Spitzer para duas das fontes modeladas neste trabalho. A emissão no infravermelho médio e distante é devido à radiação térmica dos grãos presentes no envoltório circumstelar e, neste tipo de fontes, a principal contribuição ao contínuo de energia é atribuída à presença de grãos de carbono amorfo. Esses grãos espalham e absorvem a radiação da estrela e a reemitem térmicamente. Devido a essa interação radiação-matéria, várias bandas de emissão e absorção são geradas e aparecem nos espectros deste tipo de fontes. Citamos como exemplo as absorções e emissões do  $C_2H_2$  (Acetileno), em  $13,7\mu m$ , e uma possível absorção devido ao  $SiC$  (Carbeto de Silício), em  $11,3\mu m$ .

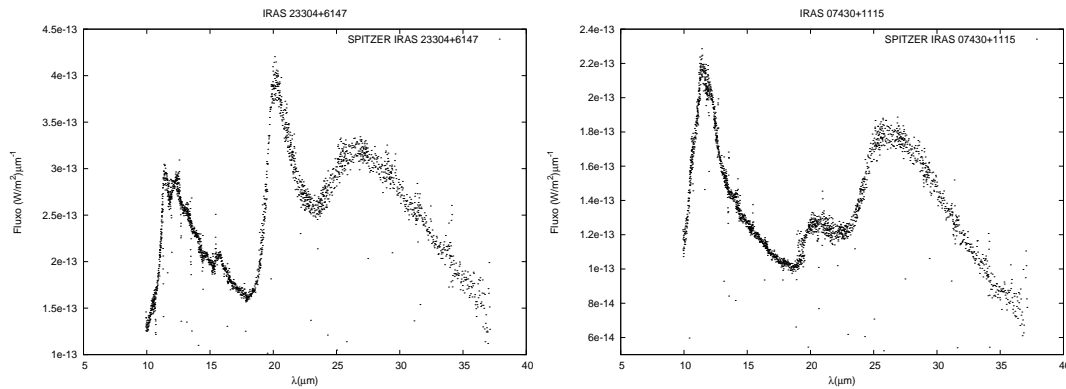


Figura 4.1: Espectros Spitzer para *IRAS* 23304 + 6147 e *IRAS* 07430 + 1115.

Um estudo rigoroso desses espectros pode levar a identificar os componentes geradores das características principais tanto em emissão quanto em absorção, restringindo cada vez mais as margens de erro para os estudos dos processos físicos que aconteceram nas fases evolutivas anteriores a esta. Por exemplo, a identificação de certos componentes pode indicar a eficiência dos processos de segunda e terceira dragagens, importantes no momento em que a estrela torna-se carbonada. A produção de elementos mais pesados do que o carbono e o oxigênio por processos não térmicos como o processo-s, também pode ser melhor compreendida. O mesmo acontece com as taxas de perda de massa e velocidades de expansão do envoltório circumstelar, entre outros fenômenos que acontecem durante a evolução no AGB, e que ainda não são totalmente compreendidos.

A natureza carbonada de algumas das fontes  $21\mu m$  foi confirmada pela detecção, no

óptico, de bandas de  $C_2$ ,  $C_3$  e  $CN$  (Hrivnak 1995) e também pela presença de linhas de emissão no infravermelho próximo e médio de  $HCN$  e  $PAH$ . Devido a esse excesso de carbono, as pesquisas pelos geradores da característica espectral em  $21\mu m$  são direcionadas para sólidos ricos em carbono. Desde que foi descoberta, e com a idéia de que transições atômicas não poderiam gerar o perfil e a intensidade da banda observados em  $21\mu m$ , começou-se a procura por moléculas com transições vibracionais nesse comprimento de onda. Foi sugerido, por exemplo, o  $HCN$ , que apresenta transições em  $18\mu m$ ,  $19\mu m$  e  $21\mu m$ , mas nos espectros das fontes observadas não foram confirmadas as características espectrais em  $18$  e  $19\mu m$  (Kwok et al. 1989, Buss et al. 1990), razão suficiente para descartar o  $HCN$  como gerador da banda em  $21\mu m$ . Assim muitos compostos, tanto orgânicos quanto inorgânicos (e não necessariamente ricos em carbono), têm sido sugeridos como os geradores da característica em  $21\mu m$ . São eles: Fulrenos acoplados a átomos de Ti (Kimura, Nuth & Ferguson 2005), hidrocarbonos policíclicos aromáticos (PAH) e carbono amorfo hidrogenado (HAC, Buss et al. 1993, Justtanont et al. 1996), grãos de  $SiS_2$  (Goebel et al. 1993), grãos de  $\beta - SiC$  (Speck & Hofmeister 2004), grãos não-homogêneos compostos com núcleo de  $SiC$  e manto de  $SiO_2$  (Posch et al. 2004), grãos de  $FeO$  (Posch et al. 2004),  $Fe_3O_4$  e  $Fe_2O_3$  (Cox et al. 2004), misturas de silicatos com carbono (Kimura et al. 2005) e Urea e Thiourea (Sourisseau, Coddens & Papoular 1992). No entanto, as restrições impostas por condições físicas e químicas da nuvem circunestelar (temperatura, densidade, energia da radiação da estrela central, etc...), as quais mudam significativamente ao longo da evolução da estrela de AGB para PN, somadas às condições da formação desses compostos nos envoltórios circunstelares e às restrições impostas pela evolução da estrela e pela abundância dos átomos que formariam tais moléculas, impedem o desfecho do debate de duas décadas em torno do composto gerador da característica em  $21\mu m$ .

Com a hipótese de uma correlação entre a banda em  $21\mu m$  e as bandas no infravermelho médio não identificadas (UIR, Unidentified Infrared Bands), Kwok (2000) sugeriu que pequenos grãos de PAH seriam os geradores da emissão em  $21\mu m$  com o argumento seguinte: Como disse anteriormente, a molécula  $C_2H_2$  foi detectada nas atmosferas de estrelas AGB carbonadas. Essa molécula é considerada base para a formação de PAH, o que abre a possibilidade para que moléculas de PAH sejam sintetizadas em estrelas AGB, mas a baixa temperatura da estrela central não é capaz de excitar a molécula, portanto

não gera a característica em  $21\mu m$  na fase AGB. De fato, Cherchneff & Barker. (1992) calcularam a formação de PAH em estrelas AGB ricas em carbono.

Por outro lado, grãos de HAC também podem ser formados nas fases finais do AGB, se acoplados aos polímeros ou aos policíclicos aromáticos (Duley & Williams, 1986). Se considerarmos que a principal contribuição ao contínuo no infravermelho é dada por esses tipos de grãos, os espectros das estrelas carbonadas extremas, que não apresentam características espectrais relevantes no infravermelho médio (Volk et al, 1992), poderiam ser modelados facilmente.

Durante a transição de AGBs para PNe, há um aumento na intensidade do campo de radiação da estrela pois a estrela já perdeu muita massa expondo regiões atmosféricas mais internas. Assim, grãos de HAC perderiam seus mantos tornando-se menores, sendo convertidos em pequenos grãos de PAH. A radiação UV proveniente da estrela excitaria essas moléculas e a banda em  $21\mu m$  apareceria nesta fase pós-AGB. A ação contínua da radiação evaporaria completamente estes grãos e a emissão desapareceria. Isso justificaria a baixa frequência desta emissão em PNe. No entanto, segundo Speck & Hofmeister (2004), é difícil isolar a característica em  $21\mu m$  nos espectros de HAC. Por outro lado, para Kwok (2000), é improvável que, considerando a natureza carbonada dos envoltórios circunstelares, o composto gerador da característica em  $21\mu m$  seja devido a compostos inorgânicos como são  $Fe_2O_3$  e  $SiS_2$ . Além disso, esse último gera características espectrais em  $16,5$  e  $17\mu m$  (Hrivnak et al. 2000), não observadas nos espectros das pós-AGBs  $21\mu m$ .

Von Helden et al. (2000) propuseram que o composto que produz a banda em  $21\mu m$  seria grãos de nano-cristais de carbeto de Titânio (nano-TiC), baseando-se nos fatos a seguir: *i*) Embora não sejam conhecidos os valores das constantes ópticas do nano-TiC no infravermelho médio, formações de pequenos aglomerados ou núcleos de TiC foram bem estudados nessa região do espectro a partir de vários levantamentos em diferentes laboratórios (Hony et al. 2003, e referências ali citadas). Estudando a contribuição à opacidade total dos elétrons da estrutura não condutores, e desconsiderando a contribuição dos elétrons livres, pode-se calcular qualitativamente as variações das propriedades ópticas dos nano-cristais de TiC a partir das variações ópticas dos pequenos aglomerados de TiC (Bulk-TiC), as quais foram bem estudadas na região espectral de interesse. Após calcular as propriedades ópticas, nota-se o bom ajuste que uma ressonância em

$21\mu m$  do nano-TiC tem com essa característica. *ii*) O perfil da ressonância dos nano-TiC independe do tamanho do cristal, fato que poderia explicar porque o perfil em  $21\mu m$  permanece aproximadamente constante para todas as fontes, só apresentando mudanças na intensidade (Volk et al. 1999). *iii*) Finalmente, outra evidência que favorece este tipo de grãos é que encontra-se nano-TiC em grãos pré-solares, onde as razões entre os isótopos indicam que a formação desses grãos ocorreu em um ambiente rico em carbono. No entanto, esses bons argumentos não conseguem fechar o debate e surgem outros argumentos contrários, incrementando a dúvida sobre o composto. Titânio é um elemento raro no Sistema Solar e, segundo Grevesse et al. (1989) os valores são  $([Ti/H]_{\odot} \approx 9,77 \times 10^{-8})$ . Além disso, a abundância de Ti em estrelas pobres em metais é menor ainda, cerca de  $([Ti/H] \approx 1,3 \times 10^{-8})$ . Embora tanto fulerenos acoplados a átomos de Ti, quanto nano-TiC possuam uma ressonância em  $21\mu m$ , a deficiência de Ti nos envoltórios circunstelares representa o primeiro grande problema para que grãos de nano-TiC sejam os geradores da característica em  $21\mu m$  (Zhang et al. 2009). Assim, teríamos que considerar grandes concentrações de grãos de nano-TiC, só explicadas em cenários de perda de massa muito altas, não observados em nenhuma das fontes (Kwok et al 2002). Considerando as abundâncias nas fontes  $21\mu m$  não há Ti em quantidade suficiente para formar altas concentrações de grãos de TiC e conseguir irradiar com a intensidade da característica observada nos espectros das fontes astronômicas.

Outro composto foi sugerido por Speck & Hofmeister (2004) que consideraram as mudanças nas condições físicas do envoltório circunstelar durante a evolução da pós-AGB para PN. Elas propuseram pequenos grãos de  $\beta - SiC$  poluído com carbono (C-doped  $SiC$ ), e ricos em elementos do processo-s, como sendo o composto gerador da característica espectral em  $21\mu m$ . O  $SiC$  foi encontrado em grãos pré-solares e é bastante abundante. Da análise de isótopos nestes grãos, há uma forte evidência de que eles foram produzidos em envoltórios circunstelares ricos em carbono. Acredita-se que o  $SiC$  é um dos componentes mais abundantes dos envoltórios circunstelares de estrelas AGB. Devido à sua simetria, os grãos de  $\beta - SiC$  geram só uma banda de emissão intensa em  $10,7\mu m$ , que poderia ser deslocada para comprimentos de onda maiores variando a geometria do grão (esférico  $\rightarrow$  elipsoide). A quebra dessa simetria faz com que emissões secundárias apareçam no espectro do  $\beta - SiC$ , e essa quebra da simetria é possível com a inclusão de impurezas na estrutura cristalina do  $\beta - SiC$ . Segundo Speck & Hofmeister (2004), o



estudo de SiC com impurezas é sustentado pelo trabalho feito por Suttrop et al. (1992), no qual os autores usaram  $\beta$  – SiC poluído com nitrogênio (*N-doped SiC*), e encontraram uma emissão em  $21\mu m$  no espectro da amostra. O *N-doped SiC* atinge o seu máximo de emissão em  $21\mu m$  a baixas temperaturas ( $\sim 80K$ ), perdendo intensidade para temperaturas tanto maiores quanto menores. Considerando uma temperatura ambiente, a série completa das emissões secundárias do *N-doped SiC* é  $\approx 1000$  vezes mais fraca do que a emissão principal do SiC em  $10,7\mu m$  (Posch et al. 2004). No entanto essa relação pode ser invertida a temperaturas muito baixas ( $\leq 80K$ ), fato que favoreceria que o  $\beta$  – SiC, poluído com nitrogênio presente nos envoltórios, atingisse a temperatura necessária para gerar a característica em  $21\mu m$ . Mas, a temperatura da primeira camada nos envoltórios circustelares das pós-AGB está entre 165 K e 220 K segundo Hrivnak et al. (2000). Além disso, considerando pequena a diferença entre o raio externo e o raio interno do envoltório, é muito improvável que a temperatura média das camadas seja menor do que 80K. Somado a isso, Suttrop et al. (1992) observaram duas emissões intensas em  $15\mu m$  e  $17,3\mu m$ , além da emissão em  $21\mu m$ , as quais não são observadas nos espectros das fontes. Posch et al. (2004) descartam esse modelo de grãos pois segundo os autores não há informação suficiente sobre as emissões secundárias do *C-doped SiC*. Sem estudos de amostras de *C-doped SiC* bem caracterizadas não fica evidente como pode extrapolar-se as propriedades do *N-doped SiC* para estudar o comportamento de  $\beta$  – SiC com inclusões de carbono.

Finalmente Posch et al. (2004) propuseram monóxido de ferro (FeO) como composto gerador da emissão em  $21\mu m$ . A análise das propriedades ópticas obtidas em laboratório mostram que o FeO possui uma única banda de emissão, que passa de  $19,9\mu m$  para  $20,1\mu m$  quando a temperatura da emissão varia de  $T_g \sim 300K$  para  $T_g \sim 100K$ . Para baixas temperaturas ( $100K < T_g < 300K$ ), os grãos de FeO podem ser formados pela oxidação da superfície de grãos de Fe, ou pela redução de  $Fe_2O_3$  ou  $Fe_3O_4$ . A estabilidade do FeO precisa de condições físicas e químicas muito particulares, e talvez por esse motivo a banda em  $21\mu m$  seja observada somente para um pequeno grupo de estrelas pós-AGB. Os grãos de FeO podem ser reduzidos a grãos de Fe pela interação com fótons UV. Esse fato explicaria porque a banda em  $21\mu m$  é pouco observada nos espectros de PNe. A fim de verificar essa proposta, Zhang et al. (2009) calcularam a quantidade de átomos de O disponível no envoltório da pós-AGB rica em carbono HD56126, a qual apresenta

a mais intensa banda de emissão em  $21\mu m$ . Supondo que o contínuo no infravermelho médio é devido a grãos de carbono amorfo e  $HAC$ , e que o C restante é usado para formar moléculas de  $CO$ , a quantidade de oxigênio disponível no envoltório dessa fonte, para formar outros compostos com oxigênio, segundo os autores, é:  $[O/H] \sim 154ppm$ . Supondo que todo o Fe no envoltório de  $HD56126$  foi usado para formar  $FeO$ , seriam necessários  $[O/H] \sim 3,24ppm$  átomos de  $O$  para produzir a quantidade suficiente de grãos, e gerar a intensidade da emissão em  $21\mu m$  dessa fonte. Esses fatos fazem com que grãos de  $FeO$  tornem-se os melhores candidatos para gerar a banda em  $21\mu m$  observada em pós-AGB ricas em carbono. É importante mencionar que a característica em  $19,5\mu m$ , que aparece nos espectros ISO de estrelas AGB jovens ricas em oxigênio, com baixa taxa de perda de massa, e temperatura alta ( $T_{ef} \sim 3000$ ), já tinha sido associada por Posch et al. (2002) a grãos de  $FeO$  presentes nos envoltórios dessas fontes. Portanto, considerando as baixas temperaturas nos envoltórios de estrelas pós-AGB ( $160K < T < 220K$ ), os processos de oxidação e redução de  $Fe$  e  $Fe_2O_3$  podem atingir o equilíbrio necessário para formar grãos de  $FeO$ . Esse seria o principal mecanismo para formar  $FeO$  em envoltórios circunstelares ricos em carbono, já que ainda não está claro como os grãos de  $FeO$  poderiam sobreviver durante a formação e evolução de uma estrela carbonada a partir de uma AGB rica em oxigênio que apresentasse a banda em  $19,5\mu m$ .

Como descrito acima, vários trabalhos foram realizados com a finalidade de propor um composto para explicar a emissão em  $21\mu m$ , a qual aparece somente durante um curto intervalo evolutivo. Esses trabalhos consideram códigos de transferência radiativa para um só tipo de grão para gerar a emissão do contínuo, e funções empíricas da opacidade, sobrepostas ao contínuo para ajustar a banda de emissão em  $21\mu m$  em fontes ricas em carbono. Neste trabalho, modelamos 3 fontes considerando grãos de  $AC$ ,  $SiC$ ,  $FeO$  e  $MgS$  simultaneamente. Na seção a seguir, apresentamos nossos resultados.

## 4.2 Modelos para pós-AGBs $21\mu m$ utilizando MonRaT

Nesta seção apresentamos uma aproximação à modelagem das características em  $21\mu m$  e  $30\mu m$  presentes nos espectros de estrelas pós-AGB  $21\mu m$ . As fontes modeladas foram:  $IRAS23304 + 6147$ ,  $IRAS07430 + 1115$  e  $HD56126$ . Os espectros para as duas primeiras fontes foram obtidos do catálogo público do Spitzer. O espectro de  $HD56126$  foi

obtido do atlas elaborado por Sloan et al. (2002). Os modelos foram calculados usando o código de transferência radiativa MonRaT, considerando simetria esférica para os envoltórios. Como mencionado anteriormente, simulamos envoltórios com quatro espécies diferentes de grãos simultaneamente, no intuito de ajustar tanto o contínuo de energia, quanto as principais características de emissão no infravermelho médio. No entanto a ênfase foi o ajuste da emissão em 21 $\mu$ m.

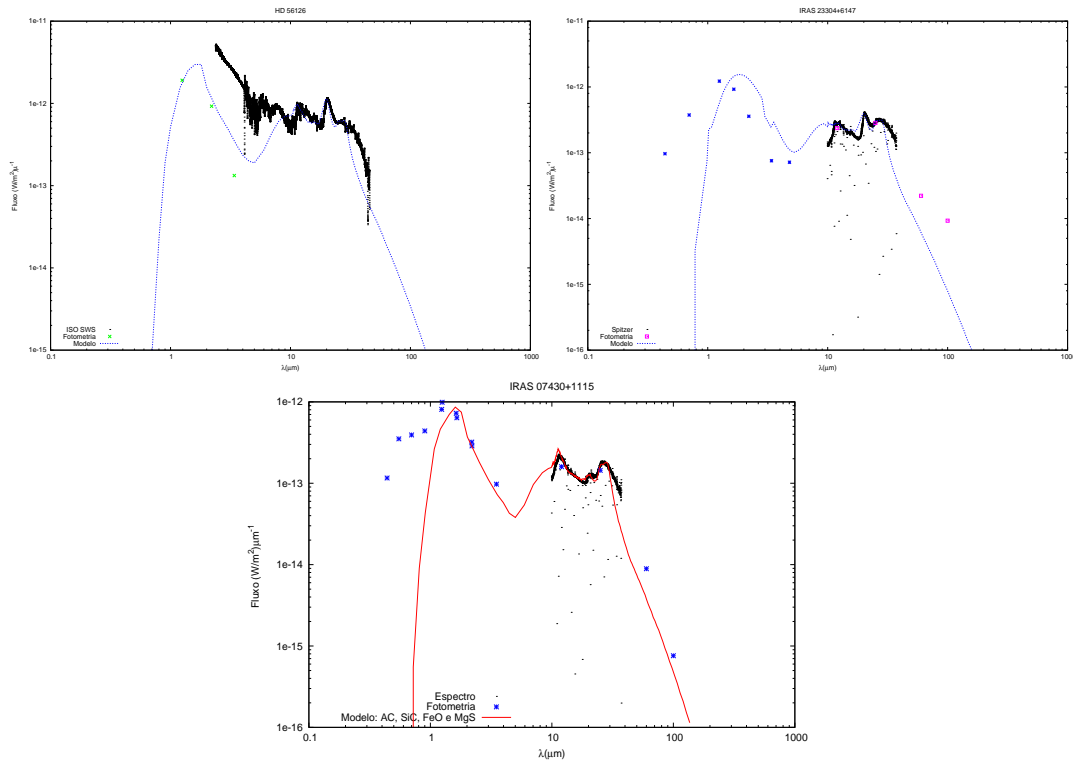


Figura 4.2: Modelos para HD56126, IRAS23304+6147 e IRAS 07430+1115.

Na Figura 4.2 apresentamos os nossos melhores ajustes, e na Tabela 4.1 apresentamos os parâmetros obtidos da modelagem para cada fonte. Os parâmetros apresentados são: Temperatura efetiva da estrela  $T_{ef}$  (K), opacidade do envoltório em  $1,0\mu\text{m}$  ( $\tau_{1,0\mu\text{m}}$ ), Raios internos  $R_{in}$  ( $R_{\star}$ ) e Raios externos  $R_{ext}$  ( $R_{\star}$ ) do envoltório para cada espécie de grão considerada, raio dos grãos  $a$  ( $\mu\text{m}$ ) e porcentagem de grãos de cada espécie AC, SiC, FeO, MgS.

Os modelos ajustam parcialmente o contínuo dos espectros, e não acompanham a fotometria para nenhuma das fontes. O ajuste da fotometria não é tão determinante neste caso, uma vez que são observações feitas em diferentes épocas, e devido à natureza va-

Tabela 4.1: Parâmetros com os quais obtiveram-se os melhores ajustes.

	IRAS 07430+1115	IRAS 23304+6147	HD 56126
$T_{ef}(K)$	5500	5500	5500
$\tau_{1.0\mu m}$	4.0	6.0	5.0
$R_{in,AC}(R_{\star})$	2300	2200	2200
$R_{in,SiC}(R_{\star})$	2300	2500	2200
$R_{in,FeO}(R_{\star})$	3000	2300	2300
$R_{in,MgS}(R_{\star})$	2300	2200	2300
$R_{ext,AC}(R_{\star})$	10000	4000	10000
$R_{ext,SiC}(R_{\star})$	10000	4000	10000
$R_{ext,FeO}(R_{\star})$	10000	3000	4000
$R_{ext,MgS}(R_{\star})$	10000	2400	2550
$a_{AC}(\mu m)$	0.08	0.1	0.1
$a_{SiC}(\mu m)$	0.07	0.07	0.1
$a_{MgS}(\mu m)$	0.09	0.15	0.1
$a_{FeO}(\mu m)$	0.11	0.2	0.13
AC	0.5	0.89	0.88
SiC	0.2	0.07	0.06
MgS	0.2	0.02	0.03
FeO	0.1	0.02	0.03

riável das fontes, são observações que muito provavelmente foram feitas em diferentes períodos de luminosidade de cada fonte. Os modelos conseguem gerar emissões intensas o suficiente para atingir o máximo de emissão para a características em  $21\mu m$  e  $30\mu m$ . Tanto a característica em  $21\mu m$  quanto a característica em  $30\mu m$  são parcialmente ajustadas com o nosso modelo. Estrelas pós-AGB possuem envoltórios circumstelares extensos, os quais apresentam uma grande variedade de morfologias (Van Winckel. 2003). Até hoje não é conhecido totalmente o mecanismo físico que deriva na perda da simetria do envoltório, já que durante a fase AGB, a perda de massa é considerada simetricamente esférica. O nosso modelo considera envoltórios com simetria esférica, o que restringe os resultados dos modelos. Um melhor ajuste ao contínuo de energia poderia ser obtido

considerando envoltórios com discos circunstelares juntamente com envoltórios esféricos. Esta aproximação, entretanto, pode aumentar consideravelmente a precisão dos ajustes, porém o número de parâmetros livres do problema aumenta também, dificultando a obtenção do equilíbrio térmico entre um envoltório esférico opticamente fino, e um disco circunstellar opticamente espesso. Embora os nossos modelos não ajustem perfeitamente a característica em  $21\mu\text{m}$ , a proporção de grãos de FeO com respeito ao total de grãos no envoltório, necessária para gerar a intensidade observada nos espectros das fontes astronômicas, é relativamente baixa para os ajustes das duas fontes que apresentam maior quantidade de radiação nessa banda. Segundo os resultados dos nossos modelos, a região onde são geradas as principais características de emissão é bastante estreita, o que permite que a temperatura média dos grãos de MgS e FeO fique maior do que a temperatura de emissão do contínuo. A temperatura média para as diferentes espécies de grãos são apresentadas na Tabela 4.2 e estes resultados serão discutidos no Capítulo 5.

Tabela 4.2: Temperatura média das diferentes espécies de grãos obtidas dos modelos para as pós-AGB.

	$T_{med,AC}(K)$	$T_{med,SiC}(K)$	$T_{med,FeO}$	$T_{med,MgS}$
HD 56126	113.78	115.74	120.74	138.41
IRAS 23304+6147	126.59	114.89	125.24	166.46
IRAS 07430+1115	113.68	114.93	83.08	89.52

Neste Capítulo, modelamos estrelas pós-AGBs utilizando 4 espécies de grãos, ajustando emissões e contínuo simultaneamente. Este tipo de trabalho é inédito. Embora a nossa amostra seja pequena, ajustamos duas das fontes que apresentam a maior intensidade da característica em  $21\mu\text{m}$ , considerando grãos de FeO, MgS além de AC e SiC. Nossos ajustes para essa emissão geram uma banda deslocada para a região azul da banda observada. Sugerimos que grãos não homogêneos, compostos de FeO em seus núcleos possam reproduzir a banda com maior perfeição.

# Capítulo 5

## Conclusões e perspectivas

Neste trabalho apresentamos novos modelos para estrelas carbonadas extremas e pós-AGBs  $21\mu m$  considerando simultaneamente quatro espécies de grãos: AC, SiC, FeO e MgS. Ajustamos as características espectrais e contínuo, simultaneamente. Para o ajuste das carbonadas extremas consideramos espectros ISO SWS e para as pós-AGBs  $21\mu m$  utilizamos espectros Spitzer para duas delas. Usamos as mesmas espécies para ambas as classes, com o intuito de estabelecer uma conexão entre esses dois estágios evolutivos, segundo a variação dos parâmetros físicos obtidos após o ajuste das principais características espectrais que aparecem em ambas classes de fontes. Além disso, pela primeira vez ajustamos a característica em  $21\mu m$  para estrelas pós-AGB ricas em carbono, utilizando um código de transferência radiativa com diferentes espécies de grãos. Segundo nossos resultados, são necessárias baixas quantidades de grãos de FeO, em relação à quantidade total de grãos no envoltório, para ajustar a banda em  $21\mu m$  para as duas fontes onde essa banda é mais intensa. Para a pós-AGB HD 56126, a qual apresenta a banda de emissão em  $21\mu m$  mais intensa dentre as 16 estrelas pós-AGB  $21\mu m$  conhecidas até hoje, nós conseguimos gerar a mesma intensidade da banda com 3% dos grãos no envoltório sendo grãos de FeO. Assim, mesmo com pequena fração desta espécie, ela parece adequada para representar a emissão em  $21\mu m$ .

Os modelos apresentados no Capítulo 3, que descreve o problema das Carbonadas Extremas, foram calculados considerando FeO no envoltório, em uma região afastada da estrela central. Assim considerada, a presença do FeO nos envoltórios das carbonadas extremas não gera nenhuma característica nos espectros simulados. Existem duas possibilidades para sustentar a presença de FeO nos envoltórios de estrelas carbonadas extre-

mas e pós-AGB ricas em carbono. Como mencionado no capítulo 4, Posch et al. (2002) atribuíram a característica espectral em  $19.5\mu m$ , presente em estrelas AGB oxigenadas jovens, a grãos de FeO. Tal espécie pode ter sobrevivido nos núcleos de outros compostos que se nuclearam depois que a estrela tornou-se uma estrela AGB carbonada. Assim, já que os ventos de estrelas no fase AGB são lentos ( $\sim 20km/s$ ) e as temperaturas das estrelas centrais baixas (aproximadamente 3500K), não provocando evaporação completa dos grãos, esses grãos podem sobreviver até o início da fase pós-AGB. Quando a estrela inicia a fase pós-AGB, camadas mais profundas da atmosfera da estrela ficam mais expostas; as temperaturas são mais elevadas e a pressão de radiação aumenta, evaporando os mantos dos grãos e expondo as camadas mais internas dos mesmos. Assim, a emissão em  $21\mu m$  pode surgir e ser observada somente em algumas pós-AGBs. Outra possibilidade é que a redução de moléculas oxigenadas como  $Fe_2O_3$  e  $Fe_3O_4$ , e a oxidação de grãos de Fe metálico, atinja o equilíbrio, produzindo grãos de FeO que gerariam a emissão em  $21\mu m$ . Mas, devido ao aumento de temperatura da estrela central, os grãos de FeO seriam reduzidos a grãos de Fe metálico, o que pode explicar a baixa detecção da característica em  $21\mu m$  nos espectros de PNe. Segundo os nossos resultados, o afastamento do envoltório faz com que a temperatura média do AC fique menor que a temperatura média do FeO e MgS, o que resulta em um aumento significativo da energia emitida através dessas bandas em emissão, na fase pós-AGB.

Na Figura 5.1 apresentamos vários modelos calculados usando o código MonRaT. Esses modelos foram calculados considerando a mesma porcentagem de grãos para cada modelo:  $AC = 0,88, SiC = 0,04, FeO = 0,04, MgS = 0,04$ . O modelo inicial considera  $a_{FeO} = a_{MgS} = 0,1\mu m$ ,  $\tau_{11,3} = 2,2$ ,  $T_{eff} = 2500K$ ,  $R_{in} = 20R_*$ ,  $R_{ext} = 5000R_*$ . Todos parâmetros compatíveis com parâmetros para modelos de estrelas carbonadas extremas. O primeiro painel, chamado Modelo 6, apresenta todos os modelos juntos e percebe-se o aumento na energia total. Enquanto que modelo de carbonada extrema (Modelo1) possui um máximo em  $\lambda = 10\mu m$ , a fase final de uma pós-AGB (Modelo 5) apresenta a distribuição de duplo pico, com o primeiro máximo em  $\lambda = 1\mu m$ , representando a emissão estelar e um segundo pico em  $\lambda = 10\mu m$ , representando o envoltório de poeira. A seguir, vemos no segundo painel, no espectro simulado só aparece a característica em  $30\mu m$ , com máximo de emissão em  $\lambda \sim 28\mu m$  (Modelo 1). Diminuindo a opacidade para  $\tau_{11,3} = 1,2$  e aumentando a temperatura e o raio interno para

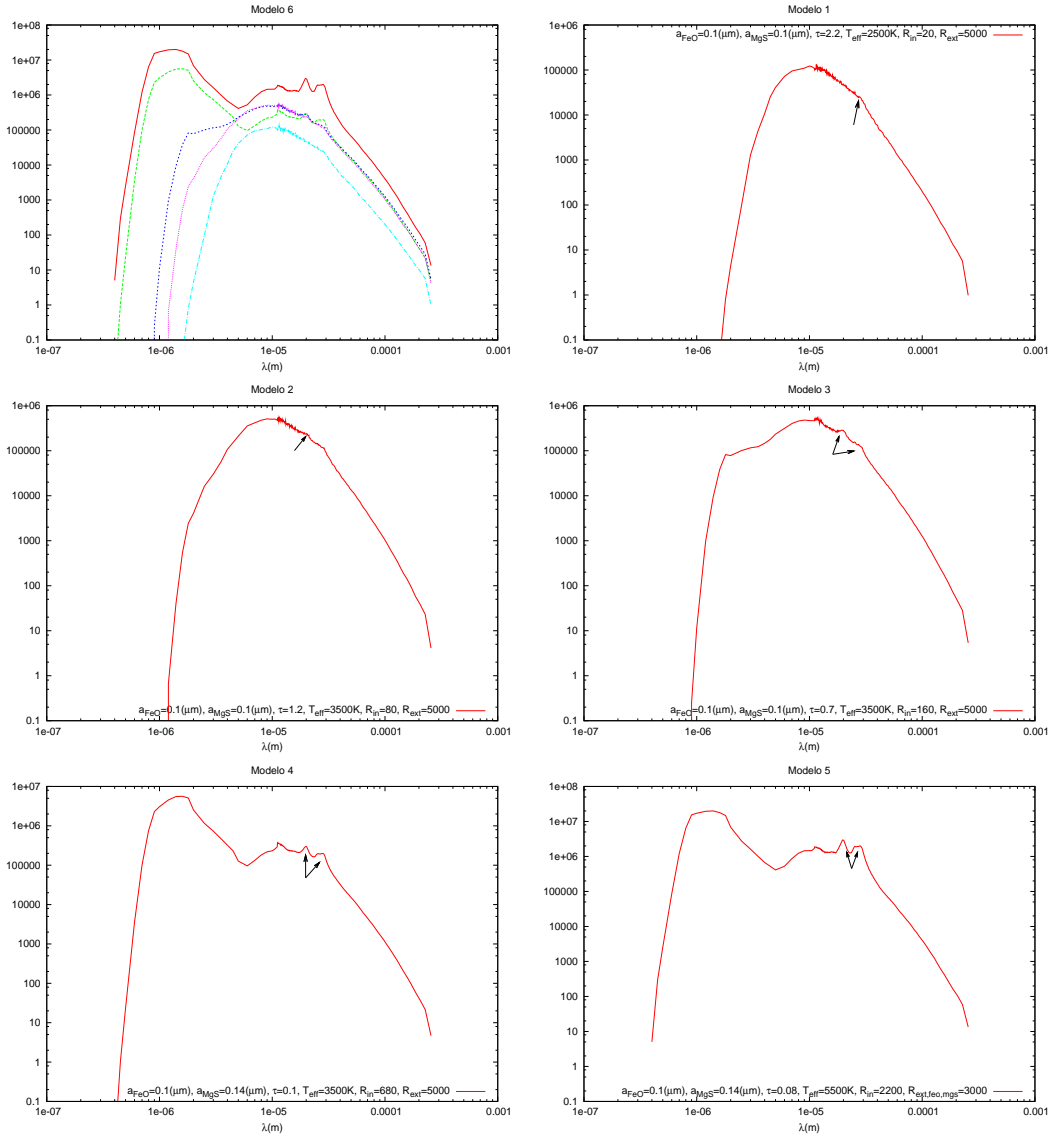


Figura 5.1: Modelos considerando diferentes parâmetros, começando com valores dos parâmetros típicos para estrelas carbonadas extremas (Modelo 1), e finalizando com valores dos parâmetros obtidos para as pós-AGB. O eixo  $y$  é apresentado em unidades arbitrárias.

$T_{ef} = 3500K$  e  $R_{in} = 80$  respectivamente, aparece a característica em  $21\mu m$ , como podemos ver no Modelo 2. Um novo aumento do raio interno do envoltório ( $R_{in} = 160$ ), mantendo a temperatura efetiva da estrela constante, e diminuindo a opacidade do envoltório para  $\tau_{11,3} = 0,7$ , produz um aumento da intensidade da emissão nos curtos comprimentos de onda, assim como também um aumento da intensidade das características de emissão em  $21\mu m$  e  $30\mu m$  (Modelo 3). Se aumentamos o tamanho do grão de MgS,  $a_{MgS} = 0,14\mu m$ , diminuímos a opacidade para  $\tau_{11,3} = 0,1$ , aumentamos o raio



interno do envoltório para  $R_{in} = 680$ , sem variar a temperatura, a contribuição da estrela central à distribuição espectral de energia, aumenta nos comprimentos de onda curtos, e portanto a distribuição de energia começa a apresentar o duplo pico, característico de estrelas pós-AGB, como podemos ver no Modelo 4. Por último, a diminuição da opacidade para  $\tau_{11,3\mu m} = 0,08$ , o aumento da temperatura para  $T_{ef} = 5500K$ , o aumento do raio interno para todos os tipos de grãos no envoltório, fixando-o em  $R_{in} = 2200$ , e considerando que as camadas que contêm os grãos de FeO e MgS são reduzidas, fixando o raio externo em  $R_{ext,FeO,MgS} = 3000R_*$ , mas com  $R_{ext,AC,SiC} = 5000R_*$ , obtemos uma distribuição espectral com duplo pico, com as características espectrais em  $21\mu m$  e  $30\mu m$  bem definidas (Modelo 5).

Assim então, embora nossa amostra seja pequena, e os modelos apresentados na Figura 5.1 sejam modelos empíricos, mostramos que, considerando grãos de FeO, com uma variação simples dos parâmetros físicos do sistema, estrelas carbonadas extremas podem dar origem às pós-AGB  $21\mu m$ .

Na Tabela 3.3 podemos ver que, segundo os resultados dos nossos modelos para estrelas carbonadas extremas, a temperatura média do carbono amorfo é, em geral, maior que a temperatura média das outras espécies de grãos considerados. Na Tabela 4.2 mostramos que, para estrelas pós-AGB essa situação muda, já que segundo os resultados dos modelos, para *HD56126*, a temperatura média do MgS e do FeO são maiores que a temperatura média do carbono amorfo, enquanto que para *IRAS 23304+6147*, embora a temperatura média do FeO seja levemente menor, a temperatura média do MgS continua sendo maior que a temperatura média do carbono amorfo. Considerando que para estrelas pós-AGB o envoltório circumstelar torna-se opticamente fino no infravermelho médio, e tendo determinado a temperatura dos grãos que geram as principais características de emissão, a intensidade das bandas em  $21\mu m$  e  $30\mu m$  poderia estar associada à quantidade de grãos que geram essas características. Portanto, se considerarmos que a composição química do envoltório circumstelar não muda durante a expansão e evolução, poderia se restringir, ainda mais, as espécies de compostos que são nucleados nos envoltórios circumstelares de estrelas na fase AGB. Essa informação seria útil para aprimorar o nosso conhecimento de vários dos parâmetros livres que dominam a evolução das estrelas na fase AGB, tais como a eficiência da terceira dragagem e do Hot Bottom Burning, muito importantes para a formação de estrelas AGB carbonadas. Para isso, devem ser feitos melhores ajustes para as

estrelas pós-AGB  $21\mu m$ , considerando diferentes geometrias do envoltório circumstelar, assim como também grãos com diferentes geometrias.

# Referências Bibliográficas

Becker, S., Iben, I.Jr. 1979, ApJ 232, 831

Becker, S., Iben, I.Jr. 1980, ApJ 237, 111

Begemann, B., Mutschke, H., Dorschner, J., Henning, Th., 1994, AIPC 312, 781B

Buss, R. H., Jr., Tielens, A. G. G. M., Snow, T. P. 1990 Bulletin of the American Astronomical Society, 22, 750

Buss, R. H., Jr., Tielens, A. G. G. M., Cohen, M., Werner, M. W., Bregman, J. D., Witteborn, F. C. 1993, ApJ 415, 250

Duley, W.W. 1980, ApJ 240, 950

Cherchneff, I., Barker, J. R. 1992, ApJ 394, 703

Celnikier, L.M., Lefèvre, J., 1974, A&A 36, 429

Duley, W. W., Williams, D. A. 1986, Royal Astronomical Society, 219, 859

Forrest, W. J., Houck, J. R., McCarthy, J. F. 1981, ApJ 248, 195

Gail, H.P., Sedlmayr, E. 1984, A&A 132, 163

Gail, H.P., Sedlmayr, E. 1986, A&A 166, 225

Gail, H.P., Sedlmayr, E. 1999, A&A 347, 594

Goebel, J. H., Moseley, S. H. 1985, ApJ 290, L35

Goebel, J. H. 1993, A&A 278, 226

Grevesse, N., Blackwell, D. E., Petford, A. D. 1989, A&A 208, 157

- Habing, H., Olofsson H., *Asymptotic Giant Branch Stars*, 2004, Springer-Verlag
- Henning, Th., Begemann, B., Mutschke, H., Dorschner, J. 1995, *A&A* 112, 143
- Herwig, F. 2005, *Annual Review of A&A* 43, 435
- Hony, S., Waters, L.B.F., Tielens, A.G.G.M 2004, *A&A*, 390, 533
- Hony, S., Tielens, A. G. G. M., Waters, L. B. F. M., de Koter, A. 2003, *A&A*, 402, 211
- Hony, S. & Bouwman, J., 2004, *A&A* 413, 981
- Hrivnak, Bruce J., 1995, *ApJ* 438, 341
- Hrivnak, Bruce J., Kwok, S. 1999, *ApJ* 513, 869
- Hrivnak, Bruce J., Volk, Kevin, Kwok, Sun. 2000, *ApJ*, 535, 275
- Hrivnak, Bruce J., Volk, K, Kwok, S. 2009, *ApJ*, 694, I 2, 1147
- Iben, I.Jr. 1982, *ApJ* 260, 821
- Iben, I.Jr., Renzini, A. 1983, *Ann. Rev. Astron. Astrophys* 21, 271
- Jiang, B.W., Szczerba, R., Deguchi, S. 1999, *A&A* 344, 918
- Justtanont, K., Barlow, M. J., Skinner, C. J., Roche, P. F., Aitken, D. K., Smith, C. H., 1996, *A&A*, 309, 612
- Kimura, Yuki, Nuth, Joseph A., III, Ferguson, Frank T., 2005, *ApJ* 632, L159
- Kwok, S., *Encyclopedia of Astronomy and Astrophysics*, Edited by Paul Murdin, article 5200.  
Bristol: Institute of Physics Publishing, 2001. <http://eaa.iop.org/abstract/0333750888/5200>
- Kwok, S., Volk, K.M. and Hrivnak, B.J. 1989, *ApJ* 345, L51
- Lattanzio, J, Wood, P., *Asymptotic Giant Branch Stars* 2004, Springer-Verlag, NY.
- Lorenz-Martins, S., Lefevre, J. 1994, *A&A* 291, 831
- Molster, F. J., Waters, L. B. F. M., van Loon, J. Th.,  
de Jong, T., Bouwman, J., Yamamura, I., de Jong, T., Trams, N., Van Winckel, H., Waelkens, C., Henning, T. 1997, *Astrophysics and Space Science*, 255, 469.

- Omont, A., Loup, C., Forveille, T., te Lintel Hekkert, P., Habing, H., Sivagnanam, P. 1993, *A&A* 267, 515
- Omont, A., Moseley, S. H., Cox, P., Glaccum, W., Casey, S., Forveille, T., Chan, Kin-Wing, Szczerba, R., Loewenstein, R. F., Harvey, P. M., Kwok, S. 1995, *ApJ* 454, 819
- Pégourié, B. 1988, *A&A* 194, 335
- Posch, Th., Kerschbaum, F., Mutschke, H., Dorschner, J., Jager, C. 2002, *A&A*, 393, L7
- Posch, Th., Mutschke, H., Andersen, A. 2004, *ApJ* 616, 1167
- Rouleau, F., Martin, P.G. 1991, *ApJ* 377, 526
- Sandage, A., Schwarzschild, M. 1952, *ApJ* 116, 463
- Sandage, A., Walker, M.F. 1965, *ApJ* 143, 313
- Speck, A. K., Barlow, M. J., Skinner, C. J. 1997, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 288, 431
- Speck, A. K., Hofmeister, Anne M. 2004, *ApJ*, 600, 986
- Speck, Angela K., Speck, Angela K., Corman, Adrian B., Wakeman, Kristina, Wheeler, Caleb H., Thompson, Grant. 2009, *ApJ* 691, 1202
- Sourisseau, C., Coddens, G., Papoular, R. 1992, *A&A* 254, L1
- Szczerba, R., Omont, A., Volk, K., Cox, P., Kwok, S. 1997, *A&A* 317, 859
- Szczerba, R., Henning, Th., Volk, K., Kwok, S., Cox, P. 1999, *A&A* 345, L39
- Van Winckel, H. 2003. *Annu.Rev.Astron.Astrophys* 41, 309
- Volk, Kevin, Kwok, Sun, Langill, Philip P. 1992, *ApJ* 391, 285
- von Helden, G., Tielens, A. G. G. M., van Heijnsbergen, D., Duncan, M. A., Hony, S., Waters, L. B. F. M., Meijer, G. 2000, *Science*, 288, 313
- Wicramasinghe, N.C., 1973, *Light scattering function for small particles*, Adam Hilger Ltd, London.
- Zhang, K., Jiang, B.W., Li, A. 2009, *Mon.Not.R.Astron.Soc.* 396,1247

# Apêndice A

## Módulo Monrat\_Mie

### A.1 Monrat\_Mie\_New

```
Monrat_Mie Monrat_Mie_New(double *IntCenter, double **ct, int IntNum,
double SizeGrains, double *Theta, int ntheta)
{
    Monrat_Mie mie;
    int i;
    mie = (Monrat_Mie) malloc(sizeof(struct Monrat_Mie_struct));
    mie->Effic = (double **) malloc(sizeof(double *)*3);
    for(i=0;i<3;i++) mie->Effic[i] =
        (double *) malloc(sizeof(double)*IntNum);

    mie->Indic = (double **) malloc(sizeof(double *)*IntNum);
    for(i=0;i<IntNum;i++) mie->Indic[i] =
        (double *) malloc(sizeof(double)*ntheta);

    Monrat_Mie_EffCreation(mie, IntCenter, ct, IntNum, SizeGrains);
    Monrat_Mie_PFCreation(mie, IntCenter, ct, IntNum,
        SizeGrains, Theta, ntheta);

    return mie;
}
```

## A.2 Monrat\_Mie\_RicattiBessel

```

void Monrat_Mie_RicattiBessel(Monrat_Mie mie, gsl_complex M,
double X, int cont)
{
    int j=cont;
    double r;
    gsl_complex y;
    gsl_complex sigmaminus;
    gsl_complex sigmavariavel;
    gsl_complex aaint, bbint;
    if(j==0){
        sigmaminus = gsl_complex_rect(cos(X), -sin(X));
        mie->Sigmaminus = sigmaminus;
        mie->Sigma[0] = gsl_complex_rect(sin(X), cos(X));
        y = gsl_complex_mul_real(M, X);
        mie->A[0] = gsl_complex_div(gsl_complex_cos(y), gsl_complex_sin(y));
    } else {
        r = (2.0*j - 1.0)/X;
        y = gsl_complex_mul_real(M, X);
        sigmavariavel = gsl_complex_mul_real(mie->Sigma[j-1], r);
        if(j==1){
            mie->Sigma[j] = gsl_complex_sub(sigmavariavel, sigmaminus);
        } else {
            mie->Sigma[j] = gsl_complex_sub(sigmavariavel, mie->Sigma[j-2]);
        } if(j!=0){
            aaint = gsl_complex_mul_real(gsl_complex_inverse(y), j);
            bbint = gsl_complex_sub(aaint, mie->A[j-1]);
            mie->A[j] = gsl_complex_sub(gsl_complex_inverse(bbint), aaint);
        }
    }
}

```

### A.3 Monrat\_Mie\_AnBnFunction

```

void Monrat_Mie_AnBnFunction(Monrat_Mie mie, gsl_complex M,
double X, int cont)
{
    int j=cont;
    gsl_complex jint;
    gsl_complex cint, dint, eint;
    gsl_complex fint, gint, hint;
    gsl_complex kint, lint, mint;

    cint = gsl_complex_add_real(gsl_complex_div(mie->A[j],M),(j/X));
    dint = gsl_complex_add_real(gsl_complex_mul(mie->A[j],M),(j/X));

    eint = gsl_complex_mul_real(cint,GSL_REAL(mie->Sigma[j]));
    fint = gsl_complex_mul(cint,mie->Sigma[j]);

    gint=gsl_complex_sub_real(eint,GSL_REAL(mie->Sigma[j-1]));
    hint=gsl_complex_sub(fint,mie->Sigma[j-1]);

    jint = gsl_complex_mul_real(dint,GSL_REAL(mie->Sigma[j]));
    kint = gsl_complex_mul(dint,mie->Sigma[j]);
    lint = gsl_complex_sub_real(jint,GSL_REAL(mie->Sigma[j-1]));
    mint = gsl_complex_sub(kint,mie->Sigma[j-1]);

    mie->An[j] = gsl_complex_div(gint,hint);
    mie->Bn[j] = gsl_complex_div(lint,mint);
}

```



## A.4 Monrat\_Mie\_PFPParameters

```

void Monrat_Mie_EffCreation(Monrat_Mie mie, double *IntCenter,
double **ct, int IntNum, double SizeGrains)
{
    int n=0, p, i;
    double abs2an,abs2bn;
    double qscat=0.0,qscatold=0.0;
    gsl_complex ansumbn;
    double qext=0.0;
    gsl_complex andifbn;
    double sign=0.0,s=0.0;
    double product;
    gsl_complex qbk,qbkold;
    double abs2qbk=0.0;

    gsl_complex m2,complexdiv;
    gsl_complex m2m1,complexpw;
    gsl_complex m2m2;

    for(i=0;i<IntNum;i++) mie->Effic[0][i]=mie->Effic[1][i]
    =mie->Effic[2][i]=0;

    for(i=0;i<IntNum;i++){
        qext=0.0;
        qscat=0.0;
        qscatold=0.0;
        sign=0.0;
        s=0.0;
        abs2qbk=0.0;
        n=0;

```

```

mie->X = (2.0*M_PI*SizeGrains)/(IntCenter[i]*1E10);

mie->M = gsl_complex_rect(ct[0][i],ct[1][i]);

if(mie->X<0.05){

    m2 = gsl_complex_pow_real(mie->M,2.0);
    m2m1 = gsl_complex_sub_real(m2,1.0);
    m2m2 = gsl_complex_add_real(m2,2.0);

    complexdiv = gsl_complex_div(m2m1,m2m2);
    complexpw = gsl_complex_pow_real(complexdiv,2.0);

    /*
    2 - Scattering , 1 - Absorption , 0 - Extinction .
    */

    mie->Effic[2][i] = (8.0/3.0)*pow((mie->X),4)*GSL_REAL(complexpw);
    mie->Effic[0][i] = -4.0*mie->X*GSL_IMAG(complexdiv);
    mie->Effic[1][i] = mie->Effic[0][i]-mie->Effic[2][i];
    fprintf(stderr,"\nQext[%d] = %lf , Qabs[%d] = %lf ,
    Qsca[%d] = %lf ",

    i ,mie->Effic[0][i],i ,mie->Effic[1][i],i ,mie->Effic[2][i]);
} else {

    Monrat_Mie_RicattiBessel(mie ,mie->M, mie->X,0);

    p=1;
    do{
        Monrat_Mie_RicattiBessel(mie ,mie->M, mie->X,p);
    }

```

```

    Monrat_Mie_AnBnFunction ( mie , mie->M, mie->X, p );
    p=p+1;
} while (p<=15);

n=1;
do{

    abs2an = gsl_complex_abs2 ( mie->An[ n ] );
    abs2bn = gsl_complex_abs2 ( mie->Bn[ n ] );
    ansumbn = gsl_complex_add ( mie->An[ n ] , mie->Bn[ n ] );
    andifbn = gsl_complex_sub ( mie->An[ n ] , mie->Bn[ n ] );

    sign = pow( -1.0, n );
    product = ( n+0.5 ) * sign ;
    qbkold = gsl_complex_mul_real ( andifbn , product );

    qscatold = ( 2.0 * n + 1.0 ) * ( abs2an + abs2bn );

    if ( n == 1 ) {
        qscat = qscat + qscatold ;

        qext = qext + ( 2.0 * n + 1.0 ) * GSL_REAL ( ansumbn );

        qbk = gsl_complex_add ( qbk , qbkold );
        n = n + 1 ;
    } else {
        s = qscatold / qscat ;

        if ( s > 0.0001 ) {
            qscat = qscat + qscatold ;
            qext = qext + ( 2.0 * n + 1.0 ) * GSL_REAL ( ansumbn );
            qbk = gsl_complex_add ( qbk , qbkold );
        }
    }
} while ( n <= 15 );

```

```

        n = n+1;
    }else n = 15;
}

}while(n<15);

abs2qbk = gsl_complex_abs2(qbk);

/*
  2 - Scattering , 1 - Absorption , 0 - Extinction .
*/

mie->Effic [2][ i ] = 2.0* qscat / (mie->X*mie->X);
mie->Effic [0][ i ] = 2.0* qext / (mie->X*mie->X);
mie->Effic [1][ i ] = mie->Effic [0][ i ]-mie->Effic [2][ i ];

fprintf (stderr , "\nQext[%d] = %lf , Qabs[%d] = %lf ,
Qsca[%d] = %lf " , i ,mie->Effic [0][ i ] , i ,mie->Effic [1][ i ] ,
i ,mie->Effic [2][ i ] );
}
}
}

```

## A.5 Monrat\_Mie\_EffCreation

```

void Monrat_Mie_PFCreation(Monrat_Mie mie, double *IntCenter,
double **ct, int IntNum, double SizeGrains, double *Theta, int ntheta)
{

    int j,i,k;
    double q=0.0,h=0.0,absu=0;
    double sume,soneabs2,stwoabs2;
    gsl_complex aint,bint,cint;
    gsl_complex dint,eint,fint;
    gsl_complex Sone,Stwo,Soold,Stold;

    for(i=0;i<IntNum;i++){

        mie->X = (2.0*M_PI*SizeGrains)/(IntCenter[i]*1E10);
        mie->M = gsl_complex_rect(ct[0][i],ct[1][i]);

        for(k=0;k<ntheta;k++){
            Sone=Stwo=Soold=Stold=gsl_complex_rect(0,0);
            mie->S=0.0;
            h=(IntCenter[i]/(2.0*M_PI));

            if(mie->X<0.2){
                Sone=gsl_complex_rect(1.0,0.0);
                Stwo=gsl_complex_rect(cos(Theta[k]),0.0);
                mie->S=sin(Theta[k])*(gsl_complex_abs2(Sone)+
                gsl_complex_abs2(Stwo));

                mie->Indic[i][k] = mie->S;
            }
        }
    }
}

```

```

} else {
    Monrat_Mie_PFPParameters (mie , Theta [k] , 0);
    Monrat_Mie_RicattiBessel (mie , mie->M, mie->X, 0);

    j=1;

    do{
        Monrat_Mie_PFPParameters (mie , Theta [k] , j);
        Monrat_Mie_RicattiBessel (mie , mie->M, mie->X, j);
        Monrat_Mie_AnBnFunction (mie , mie->M, mie->X, j);

        q=(2.0*j + 1.0)/(j *(j + 1.0));

        aint=gsl_complex_mul_real (mie->An[j] , mie->Piu [j]);
        bint=gsl_complex_mul_real (mie->Bn[j] , mie->Tau [j]);
        cint=gsl_complex_add (aint , bint);

        Soold=gsl_complex_mul_real (cint , q);

        dint=gsl_complex_mul_real (mie->Bn[j] , mie->Piu [j]);
        eint=gsl_complex_mul_real (mie->An[j] , mie->Tau [j]);
        fint=gsl_complex_add (dint , eint);

        Stold=gsl_complex_mul_real (fint , q);

        Sone=gsl_complex_add (Sone , Soold);
        Stwo=gsl_complex_add (Stwo , Stold);

        soneabs2=gsl_complex_abs2 (Sone);
        stwoabs2=gsl_complex_abs2 (Stwo);
        sume=soneabs2+stwoabs2;
    }
}

```

```
        if (j==1) mie->S=sume ;
        if (j>1){
            absu=abs (mie->S-sume) / sume ;
            if (absu <=0.001) j=10;
        }
        mie->S=sume ;
        j=j+1;

    } while (j <10);

    mie->S=0.0;
    mie->S=sin (Theta [k]) * ( gsl_complex_abs2 (Sone)+
    gsl_complex_abs2 (Stwo));
    mie->Indic [ i ][ k ] = mie->S;
    }
}
}
}
```

## A.6 Monrat\_Mie\_PFCreation

```

void Monrat_Mie_PFPParameters(Monrat_Mie mie, double theta, int cont)
{
    int j;

    j=cont;

    if(j==0){
        mie->Piu[0]=0.0;
        mie->Tau[0]=0.0;
        if(mie->Tau[0]<1.0E-5 && mie->Tau[0]>-1.0E-5) mie->Tau[j]=0.0;
        if(mie->Piu[0]<1.0E-5 && mie->Piu[0]>-1.0E-5) mie->Piu[j]=0.0;

    } else if(j==1){
        mie->Piu[1]=1.0;
        mie->Tau[1]=cos(theta);
        if(mie->Tau[1]<1.0E-5 && mie->Tau[1]>-1.0E-5) mie->Tau[j]=0.0;
        if(mie->Piu[1]<1.0E-5 && mie->Piu[1]>-1.0E-5) mie->Piu[j]=0.0;

    } else if(j==2){
        mie->Piu[2]=3.0*cos(theta);
        mie->Tau[2]=3.0*cos(2.0*theta);
        if(mie->Tau[2]<1.0E-5 && mie->Tau[2]>-1.0E-5) mie->Tau[j]=0.0;
        if(mie->Piu[2]<1.0E-5 && mie->Piu[2]>-1.0E-5) mie->Piu[j]=0.0;

    } else {
        mie->Piu[j]=cos(theta)*((2.0*j-1.0)/(j-1.0))*mie->Piu[j-1]-
        (j/(j-1.0))*mie->Piu[j-2];

        mie->Tau[j]=cos(theta)*(mie->Piu[j]-mie->Piu[j-2])-
        (2.0*j-1.0)*(1.0-cos(theta))*cos(theta)*mie->Piu[j-1]+

```



```
mie->Tau[j - 2];

if (mie->Tau[j] < 1.0E-5 && mie->Tau[j] > -1.0E-5) mie->Tau[j] = 0.0;
if (mie->Piu[j] < 1.0E-5 && mie->Piu[j] > -1.0E-5) mie->Piu[j] = 0.0;
}
}
```